



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 137 • September 2005

### Erste Resultate von Anwendungen auf JUBL

Mit der Beschaffung des Jülicher Blue Gene/L, genannt JUBL, soll u.a. untersucht werden, welche Arten von Anwendungen von der speziellen Architektur dieses Systems profitieren, das auf extrem hohe Prozessorzahlen ausgebaut werden kann. Im Vergleich zu einem General-Purpose-Supercomputer wie JUMP wird dieses hochskalierende System bei vergleichbarer Peakleistung wesentlich preisgünstiger angeboten und beansprucht weniger Kühlung und Stellfläche. Andererseits können auch nur hochskalierende Anwendungen die volle Leistungsfähigkeit ausnutzen. Auf JUBL wurde eine Produktionsumgebung eingerichtet, die es erlaubt, die volle Kapazität des Systems zu nutzen, wobei für Produktionsläufe 128 oder 512 Prozessoren angefordert und sowohl der *coprocessor mode* als auch der *virtual node mode* verwendet werden können. Die ersten ausgewählten Anwendungen, die sehr schnell und ohne größere Probleme von JUMP auf JUBL portiert wurden, stammen aus der Quanten-Chromodynamik (QCD), der Computational Chemistry (VASP), den Materialwissenschaften (DMFT) und der Laser-Plasma-Wechselwirkung (PEPC).

Um einen Eindruck von der Leistungsfähigkeit von Blue Gene/L zu vermitteln, stellen wir hier erste Performance-Vergleiche zwischen den Einzelprozessor-Leistungen bei hochparallelen Anwendungen auf JUBL und auf JUMP vor. Dabei ist zu berücksichtigen, dass der einzelne Blue Gene/L-Prozessor mit einer Peak-Performance von 2,8 GFlops nur etwa 41 % der Leistung eines Power4+-Prozessors von 6,8 GFlops hat. Während beim VASP-Code ein JUBL-Prozessor je nach der berechneten Struktur Leistungswerte zwischen 22 % und 43 % gegenüber einem JUMP-Prozessor erreichte, kamen DMFT und PEPC auf Werte um 33 %. Die besten Resultate erreichte der QCD-Code mit Werten um 50 %.

Diese letzte Messung wird nach einem Blick auf das gute Skalierungsverhalten des Codes noch eindrucksvoller: Bei dem wichtigsten Unterprogramm (Wilson-Operator) ergibt

sich bei der GFlops-Rate bei 512 Prozessoren ein Faktor von fast 4 im Vergleich zu 128 Prozessoren und ein Faktor von fast 16 im Vergleich zu 32 Prozessoren. Diese nahezu 100 %ige Skalierung auf JUBL stimmt die Jülicher QCD-Gruppe sehr optimistisch: Sie erwartet von zusätzlichen bereits in Vorbereitung befindlichen Optimierungen sowohl des QCD-Codes als auch des Betriebssystems von Blue Gene/L weitere Leistungsverbesserungen auf bis zu 25 % der Spitzenleistung. (Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

### Projekt D-Grid hat begonnen

Die Förderung des D-Grid-Projektes im Rahmen der e-Science-Initiative des BMBF hat am 1. September 2005 begonnen und läuft bis zum 29. Februar 2008. Mit D-Grid soll Deutschland den Anschluss an die europäische und internationale Entwicklung von Grid-Infrastrukturen gewinnen, um für Anwendungen aus Wissenschaft und Industrie einen einheitlichen Zugang zu Computer- und Speicher-Ressourcen zu schaffen und, darauf aufbauend, Grid-Dienste größeren Communities anzubieten. D-Grid besteht zurzeit aus den fünf Community-Projekten C3 (Erdsystem- und Klimaforschung), HEP (Hochenergiephysik), GACG (Astronomie), InGrid (ingenieurwissenschaftliche Anwendungen) und MediGrid (Medizin und Lebenswissenschaften) sowie aus dem Grundlagenprojekt DGI (D-Grid-Infrastruktur).

Eine wichtige Aufgabe innerhalb von DGI ist der Aufbau und der Betrieb des Kern-D-Grid, das den Projektpartnern als Testplattform für die Integration von Ressourcen und für die Erprobung von Grid-Anwendungen und Grid-Middleware dient. Das Kern-D-Grid bildet die Keimzelle, die in der Folgezeit zu einer allgemeinen Grid-Infrastruktur in Deutschland ausgebaut werden soll.

Die Arbeiten zum Kern-D-Grid, die federführend vom ZAM koordiniert werden, begannen mit einem Kick-Off-Meeting in Jülich. Die Mitarbeiter der Verbundpartner FZ Karlsruhe/IWR, LRZ München, MPG/RZG Garching, RWTH Aachen/RZ, TU-Dresden/ZIH, Universität Paderborn/PC<sup>2</sup> und

Jülich berichteten über ihre Erfahrungen bei internationalen Projekten. In regen Diskussionen wurde das detaillierte Arbeitsprogramm für das erste Vierteljahr festgelegt.

Das ZAM ist im DGI an zwei weiteren Projekten beteiligt. Es bringt seine Entwicklungen zur Grid-Software UNICORE ein und wird Untersuchungen zum Einsatz von Hochgeschwindigkeits-Firewalls und von alternativen Transportprotokollen in Grid-Umgebungen durchführen. Wolfgang Gürich vom ZAM wurde in den Steuerungsausschuss berufen, der für die übergreifende Abstimmung aller Projekte im D-Grid verantwortlich ist. Weitere Informationen zu D-Grid finden Sie unter <http://www.d-grid.de>. (Ansprechpartner: Wolfgang Gürich, Tel. 6540)

## JUMP: Geänderte Betriebsregelungen

### Laufzeitbeschränkung bei Kontingentüberschreitung

Die hohe Anforderung an Rechenkapazität auf JUMP führt in Spitzenzeiten zu Engpässen, die mit längeren Wartezeiten der Jobs verbunden sind. Um zu vermeiden, dass langlaufende Jobs von Nutzern, die ihr Rechenzeitkontingent überschritten haben, Ressourcen blockieren, wird für diese Jobs die maximal mögliche Laufzeit auf 4 Stunden herabgesetzt. Damit bleibt Nutzern, die ihr Rechenzeitkontingent überschritten haben, weiterhin die Möglichkeit, Zeiten mit geringerer Anforderung zu nutzen. (Ansprechpartnerin: Ulla Ehrhart, Tel. 3631)

### Quotierung der Anzahl der Dateien

In letzter Zeit ist es wiederholt vorgekommen, dass einzelne Benutzer Millionen von kleineren Dateien in ihren \$HOME- oder \$WORK-Verzeichnissen angelegt haben. Dadurch wird der Betrieb auf JUMP erheblich gestört, da in diesem Fall wichtige Systemkommandos (ls, dsmls, du, dsmdu) nicht mehr oder sehr lange arbeiten und die Filesysteme voll laufen, weil die kleinen Dateien nicht migriert werden.

Um diese Probleme in Zukunft zu vermeiden, wird ab 1. November 2005 die Anzahl der Dateien pro Benutzer mit Hilfe des GPFS-Quota-Systems beschränkt. Jeder Benutzer darf in seinem \$HOME-Filesystem maximal 500.000 Dateien anlegen. Wird die Grenze um mehr als 10 % oder länger als einen Monat überschritten, kann der Benutzer keine neuen Dateien mehr anlegen, bis die Grenze wieder unterschritten ist. Benutzer, die jetzt schon diesen Wert überschreiten, haben bis zum 1. Januar 2006 Zeit, die Anzahl auf 500.000 Dateien zu reduzieren. Mit Beginn der Kontingentierung am 1. November erhält man mit dem Kommando „q\_dataquota“ Informationen zur aktuellen Belegung.

Für das Filesystem \$WORK wird ebenfalls eine Quotierung von 1.000.000 Dateien pro Benutzer eingeführt. Zusätzlich wird der von einem Benutzer belegte Platz auf 2 TB beschränkt. Im Übrigen bleibt die Regelung, dass eine Datei

nicht größer als 500 GB sein kann, bestehen. (Ansprechpartner: Lothar Wollschläger, Tel. 6420)

## Job-Monitoring auf JUMP: LLview

LLview ist ein interaktives graphisches Tool zur Anzeige der aktuellen Batch-Nutzung von JUMP. Aufbauend auf Informationen des LoadLeveler bietet es eine kompakte Übersicht über die laufenden und wartenden Jobs sowie deren Zuordnung zu den Rechenknoten und Prozessoren. Dazu werden in einer graphischen Oberfläche die Prozessoren der Rechenknoten als Boxen dargestellt und mit Farben entsprechend den darauf laufenden Jobs markiert. Die Oberfläche enthält als weitere Elemente die Liste aller vom LoadLeveler aktuell verwalteten Jobs sowie diverse Anzeigen über aktive und in Warteschlangen befindliche Jobs. Alle Elemente sind interaktiv, so dass bei Mauskontakt die verfügbaren Informationen zum zugehörigen Job hervorgehoben werden. Die Anzeige wird in regelmäßigen, kurzen Zeitabständen aktualisiert. LLview kann direkt auf JUMP aufgerufen werden (llview), kann aber auch über einen Client auf einem lokalen Rechner betrieben werden. LLview ist in Perl/TK implementiert. Damit ist der Client auf allen gängigen Plattformen nutzbar. Weitere Informationen zu LLview sind auf der Web-Seite <http://www.fz-juelich.de/zam/llview> zu finden. (Ansprechpartner: Wolfgang Frings, Tel. 2828, [llview.zam@fz-juelich.de](mailto:llview.zam@fz-juelich.de))

## Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2005-05 Parameteridentifikation für Batteriegitwachstum bei Korrosion
- IB-2005-07 Analysis of Support Vector Machine Training Costs for Large and Unbalanced Data from Pharmaceutical Industry

Die ZAM-Benutzerdokumente sind im Informationszentrum erhältlich und stehen auf dem Web-Server zur Verfügung unter <http://www.fz-juelich.de/zam/docs/>.

## ZAM/NIC-Veranstaltungen

### Mathematik mit Maple

Referenten: Dr. Johannes Grotendorst, Oliver Bücken, ZAM  
Termin: Montag, 10. Oktober 2005, 9.00 - 16.30 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [J.Grotendorst@fz-juelich.de](mailto:J.Grotendorst@fz-juelich.de), Tel. 6585

### Programmierung in C

Referent: Günter Egerer, ZAM  
Termin: 17. - 20., 24. - 26. Oktober 2005, 9.00 - 16.30 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [G.Egerer@fz-juelich.de](mailto:G.Egerer@fz-juelich.de), Tel. 2339