

Zentraler Compute-Service an der HU

Allen Angehörigen der Humboldt-Universität bietet das Rechenzentrum den zentralen Compute-Service an. Die zur Verfügung stehenden Rechner können als Entwicklungsrechner genutzt werden, sie stellen aber auch kommerzielle Software zur Nutzung bereit. Sie sind mit 4 bis 8 CPU ausgerüstet, so dass auch moderat parallele Aufträge bearbeitet werden können. Voraussetzung für die Nutzung ist ein Kennzeichen am RZ mit dem Vermerk, dass Compute-Service-Ressourcen genutzt werden. Alle Rechner werden im Batch-Betrieb genutzt. Bei begründetem Bedarf wird Rechenleistung am ZIB zur Verfügung gestellt.

Die Planung für das IKA in Adlershof sieht, entsprechend den Anforderungen der Benutzer in den Instituten, ein Linux-Cluster vor. Das Batch-System wird für alle Server einheitlich sein.

Zugang zum Compute-Service

Grundsätzlich können alle Angehörigen der HU die Leistungen der zentralen Compute-Server des Rechenzentrums nutzen. In begründeten Fällen stehen diese auch Mitarbeitern anderer Forschungseinrichtungen des Landes Berlin zur Verfügung. Voraussetzung ist, dass ein Benutzerkennzeichen mit dem Vermerk „Nutzung der Ressourcen des Compute-Service“ bei der Benutzerberatung beantragt wurde. Dieses erlaubt dann den Zugang zu den verfügbaren Rechnern. Kontingente für einzelne Nutzer oder Nutzergruppen gibt es bisher nicht. Es gelten nur die Beschränkungen bzgl. CPU-Zeit, Hauptspeicher und Plattenplatz, die in den Warteschlangen für die einzelnen Rechner definiert sind. Angehörige der Humboldt-Universität, die gut skalierende Anwendungen rechnen wollen, d. h. deren Programme auf massiv parallelen Rechnern laufen, werden von uns an das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) weitervermittelt (siehe *Leistungen Dritter*).

Compute-Server

Im Jahr 2000 ist der Compute-Service, bis dahin bestehend aus dem HP-Server N4000 [1], 4 DEC Alpha- und 1–2 SUN-Workstation, durch den AlphaServer ES40 der Firma COMPAQ erweitert worden. Dieser Rechner dient vor allem der Programmentwicklung, d. h. er ist mit den entsprechenden Werkzeugen (Compiler, Debugger, Parallelisierungshilfen) ausgerüstet. Die Architektur entspricht einem 4-Wege-SMP-Rechner (Symmetric Multi Processing). Er ist mit 4 schnellen Alpha-Prozessoren mit einer Taktrate von 667 MHz ausgestattet und verfügt über 4 GB Hauptspeicher. Von seiner Floating-Point-Leistung her steht er an erster Stelle der Compute-Server. So soll der ES40 vorwiegend den Nutzern des Instituts für Physik dienen, da diese in der Regel ihre Programme selbst entwickeln. Auf dem Rechner stehen neben den Entwicklungswerkzeugen auch kommerzielle Software-Pakete (Gaussian98, Turbomole, ADF/BAND) zur Verfügung (siehe Tabelle 1). Damit ist er auch für Nutzer des Instituts für Chemie von Interesse.

Auch in diesem Jahr hat der Compute-Service durch die Installation des IBM Servers 44P/270 (RS/6000) eine Erweiterung erfahren. Dieser Rechner ist ebenfalls mit 4 Prozessoren (Power 3-II) und 4 GB Hauptspeicher ausgerüstet. Er wird vorwiegend Mitarbeitern des Instituts für Chemie zur Nutzung bereitgestellt und ist aus diesem Grund mit entsprechender Software (speziell Software der Firma MSI – heute Accelrys) ausgestattet.

Der Rechner ist wie der COMPAQ-Server ein SMP-Rechner. Auch auf diesem Rechner stehen Compiler und Debugger zur Verfügung, so dass neben der Nutzung der kommerziellen Software die Programmentwicklung möglich ist (siehe Tabelle 1). Die hier genannten Rechner sind allesamt 64-Bit-Rechner, sie können selbstverständlich auch 32-Bit-Anwendungen verarbeiten. Weiterhin kann bei Bedarf Rechenzeit auf Rechnern des SUN-Ausbildungspools oder auf einer SGI-Workstation zur Verfügung gestellt werden. Diese verfügen allerdings nur über eine 32-Bit-Architektur. Damit stehen den Mitarbeitern der HU alle gängigen Plattformen zur Nutzung bereit.

Ressourcen

Auf allen Rechnern, die Bestandteil des Compute-Service sind, stehen große Plattenbereiche (/scratch) zur temporären Nutzung zur Verfügung. Die Größe der Bereiche schwankt auf den einzelnen Rechnern von 1,5 bis 130 GB. Diese Bereiche werden durch das Betriebssystem überwacht. Bei einem Füllstand von 75% werden Daten entsprechend ihrem Alter entfernt.

Des Weiteren besteht die Möglichkeit, mit Hilfe des TSM (Tivoli Storage Manager) auf Dateien zuzugreifen, die sich auf einem hierarchisch strukturierten Speicher (HSM) befinden. Auf die unter HSM gespeicherten Daten kann von allen Compute-Servern aus zugegriffen werden. Das HSM bietet den Vorteil eines einheitlichen Speichers für alle Server, so dass vor der Programmausführung, unabhängig von der gewählten Plattform, auf der gerechnet wird, auf ein und dieselben Eingabedaten zugegriffen werden kann. Es ist nur sicherzustellen, dass das der Plattform entsprechende ausführbare Programm gefunden wird.

Software

Einen genauen Überblick über die auf den Rechnern installierte Software liefert die Tabelle 1. Die breite Verfügbarkeit der kommerziellen Software (auf fast allen Rechnern) ermöglicht die Nutzung aller Plattformen für die spezielle Aufgabe sowie ein Ausweichen auf eine andere Plattform, falls es auf einer einen Engpass gibt. Speziell das Gaussian98 steht auf allen Rechnern zur Verfügung. Für die Software ADF/BAND der Firma SCM gibt es nur eine Arbeitsgruppenlizenz, d. h. sie steht nur einem eingeschränkten Nutzerkreis zur Verfügung. Turbomole steht auf der RS/6000 nicht zur Verfügung, da es für diese Plattform von MSI (heute Accelrys) vertrieben wird und unverhältnismäßig teuer ist.

	ES40	RS/6000	N4000
Fortran-Comp.	ja	ja	ja
Debugger	ja	ja	ja
MPI	ja	nein	ja
wiss. Bibl.	CXML	ESSL	MLIB
NAG Bibl.	ja	ja	ja
Batch	CODINE	CODINE	LSF
Gaussian98	ja	ja	ja
GaussView	ja	ja	nein
Turbomole	ja	nein	ja
DISCOVER	nein	ja	nein
ADF/BAND	ja	ja	nein
MATLAB 6	ja	ja	ja

Tab. 1: Softwareausstattung Compute-Service

Batch-Betrieb

Da ein zentraler Compute-Service eine konkurrierende Nutzung ermöglichen muss, sind alle Compute-Server in ein Batch-System integriert. Derzeit sind es zwei Systeme in die die vorhandenen Rechner eingebunden sind.

Auf der N4000 ist LSF (Load Sharing Facility) installiert und auf den anderen Rechnern wird der Zugang zum Batch durch CODINE (COmputing in DIstributed Network Environment) realisiert. Beides sind Batch-Systeme, die Rechner unterschiedlicher Architekturen integrieren und auch parallele Aufträge unterstützen. Bei LSF handelt es sich um eine lokale Installation auf einer Plattform. Die Aufträge können somit auch nur von der N4000 abgeschickt werden. Von allen anderen Rechnern aus, auch von der N4000, können Aufträge an einen der Übrigen Compute-Server abgeschickt werden. Das liegt nicht an der Funktionalität der Software, sondern einzig daran, dass wir für LSF nur 8 Lizenzen (für die 8 CPU der N4000) haben.

Auf den Compute-Servern sind eine oder mehrere Warteschlangen mit unterschiedlichen Ressourcen definiert, die die abgeschickten Aufträge aufnehmen.

Statistik

Die theoretische Leistung der zur Verfügung stehenden Compute-Server hat sich seit 1999 in etwa verdoppelt. Zurzeit liefern die 3 Compute-Server (ES40, RS/6000 und N4000) eine theoretische Leistung von rund 28 Gflop Peak.

Die Abbildungen 1 und 2 zeigen die Nutzung der Compute-Server durch die Institute der Humboldt-Universität im 2. Halbjahr 2000 und im 1. Halbjahr 2001. Auffallend ist der Löwenanteil, den die Mitarbeiter des Instituts für Chemie am Gesamtanteil haben. Beim genaueren Hinsehen fällt auf, dass sich das Nutzerprofil sowie die Anteile auf der N4000 kaum geändert haben. Einzig die Nutzer der Landwirtschaftlich-Gärtnerischen Fakultät sind weggeblieben, deren Anteil ist an hier ungenannte Nutzergruppen gegangen. Ein bis zwei Workstation des SUN-Ausbildungspools waren in den Compute-Service integriert. Im vergangenen Jahr wurden diese neben Nutzern der Medizinischen Fakultät auch von den Nutzern des Instituts für Chemie gebraucht, in diesem Jahr nur noch von Nutzern der Medizinischen Fakultät. Der Anteil ist aber so gering, dass er in der 2. Abbildung nicht aufgeführt ist.

Nach Installation des ES40 ist der Anteil des Instituts für Physik wieder gestiegen im Vergleich zur Nutzung der DEC-Workstation im vergangenen Jahr. Erwartungsgemäß wird der IBM-Server RS/6000 fast nur von Nutzern des Instituts für Chemie in Anspruch genommen.

Leistungen Dritter

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) stellt allen Universitäten des Landes Berlin Rechenzeit auf den vorhandenen Höchstleistungsrechnern zur Verfügung. Angehörige der HU mit Anwendungen, die Vektorprozessoren oder eine Viel-

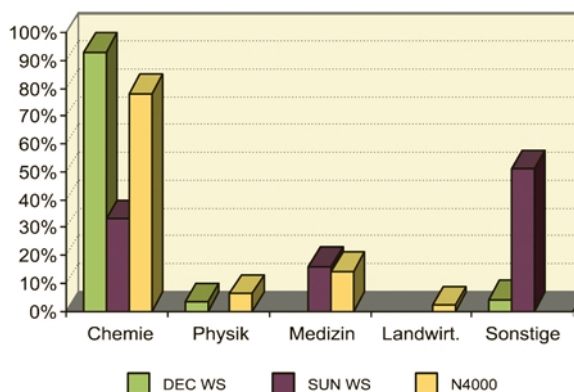


Abb. 1: Anteil der Institute am Compute-Service im II. Halbjahr 2000

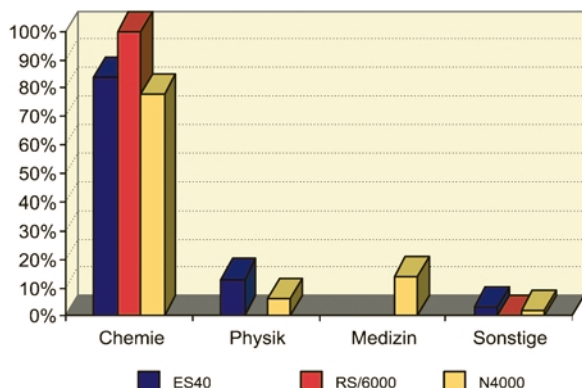


Abb. 2: Anteil der Institute am Compute-Service im I. Halbjahr 2001

zahl von skalaren Prozessoren benötigen, können das Kontingent der HU (10%) für ihre Rechnungen nutzen, solange sie nicht mehr als 200 ZVL (ZIB-Vektorrechner-Leistungseinheit) bzw. mehr als 50 ZPL (ZIB-Parallelrechner-Leistungseinheit) benötigen. Überschreitet der Bedarf an Rechenleistung das genannte Limit, so ist ein Großprojektantrag an den Zulassungsausschuss des ZIB zu stellen. Dieser verteilt nach Prüfung des Antrages quartalsweise Kontingente, für den Vektorrechner CRAY J932/16 und/oder den Parallelrechner CRAY T3E LC 384.

Zurzeit sind 6 Großprojekte für Arbeitsgruppen der HU genehmigt, 1 Projekt vom Institut für Biologie, 3 Projekte des Instituts für Chemie und 2 Projekte des Instituts für Physik.

Die Abbildung 3 zeigt die Nutzung des Kontingents der HU durch die Institute, die Physiker nutzen ausschließlich den Parallelrechner, die Chemiker ausschließlich den Vektorrechner. Eine Zusammenstellung der vorhandenen kommerziellen Software ist auf den Internetseiten des ZIB (URL: <http://www.zib.de/zibdoc/sw/>) zu finden.

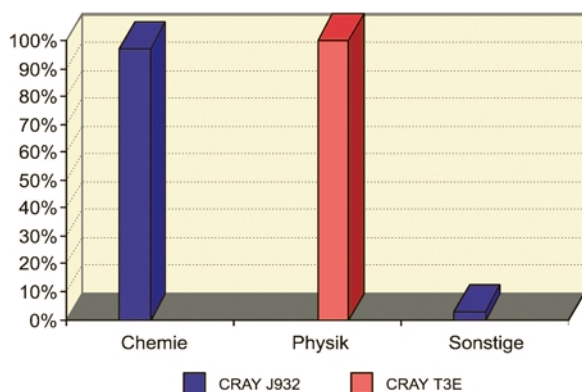


Abb. 3: Anteil der Institute am ZIB-Kontingent 1. Halbjahr 2001

Ausblick

Im Jahr 2002, mit dem Umzug des RZ in das Informations- und Kommunikationszentrum Adlershof (IKA), ist ein weiterer Ausbau des Compute-Service vorgesehen. Um den Bedarf zu ermitteln, wurde Anfang dieses Jahres ein Fragespiegel an die Verantwortlichen in den einzelnen Instituten verschickt und das Ergebnis in einer Planungskonzeption festgehalten, die im Mai zur Diskussion vorgelegt wurde. Der Vorschlag des RZ sah eine gemeinsame Investition in ein SMP-Cluster vor, das z. B. aus 7 Knoten von je 4 CPU bestehen könnte, wobei einzelne Knoten durch die Institute finanziert werden und diesen dann voll zur Nutzung zur Verfügung stünden. Weitere Knoten sollten durch das RZ zur gemeinsamen konkurrierenden Nutzung bereitgestellt werden. Dies hätte den Vorteil eines einheitlichen Systems unter einer zentralen Verwaltung. Es würde Software- und Wartungskosten sparen und die Investition in ein System erlauben, dass die einzelnen Institute und das RZ allein nicht finanzieren könnten. Dieser Entwurf fand aber nicht die Zustimmung der Institutsverantwortlichen, die den Gegenvorschlag brachten, in ein Linux-Cluster zu investieren, da das Preis-/Leistungsverhältnis für Linux-Cluster günstiger ausfällt, d. h. mehr Prozessoren für den gleichen Preis zu bekommen sind. Schwieriger wird es allerdings, kommerzielle Software für diese Plattform zu beschaffen. Da das Betriebssystem Linux den Markt immer mehr erobert – auch an den universitären Einrichtungen, ist zu erwarten, dass Dritthersteller gezwungen sind, Portierungen auf Linux-Systeme durchzuführen. Geplant ist, den Nutzern ab 2002 ein einheitliches Batch-System zur Verfügung zu stellen, so dass das Abschicken von Rechenaufträgen durch ein einheitliches Portal passieren kann. Das könnte eines der bereits genutzten Systeme, LSF oder CODINE, sein.

Literatur

[1] HP N4000 – neuer Compute-Server im RZ, *RZ-Mitteilungen* Nr. 19, 2000

Weitere Informationen sind auf den Internetseiten des RZ zum Compute-Service, URL: <http://www.hu-berlin.de/rz/compsv00.html>, zu finden.

Daniela-Maria Pusinelli
pusinelli@rz.hu-berlin.de

So war es zu lesen in den RZ-Mitteilungen Heft Nr. 2/1992
Die Arbeit an der FX/2800 hat sich durch die Installation von neuer Hard- und Software wesentlich verbessert. Durch die Installation der 4 SCSI-Disks ist der nutzbare Plattenbereich von 1,6 auf 6 GB angewachsen.