

## **Zweite Umfrage zur Bedarfsermittlung von Ressourcen zum wissenschaftlichen Rechnen an der TU Dortmund**

Das Wissenschaftlichen Rechnen hat sich in Forschung und Lehre in den letzten Jahren zu einem wichtigen Standbein neben Theorie und Experiment entwickelt. Die Situation an der TU Dortmund in diesem Bereich ist unübersichtlich. Dies betrifft sowohl die Software- als auch die Hardwareseite. Viele Arbeitsgruppen bewegen sich in diesem Feld, ohne voneinander zu wissen. Mathematiker sprechen von der "Numerik partieller Differentialgleichungen", die Ingenieure verwenden den Begriff "FEM-Simulation" und die "Datenanalyse" wird in der Physik und Statistik verwendet. Trotz der unterschiedlichen Begriffe und Methoden stehen sie teilweise vor denselben Problemen. DoWiR hat sich zur Aufgabe gemacht, an dieser Stelle einzugreifen und die Arbeitsgruppen miteinander zu verbinden, um gegenseitig vom Know-How des Anderen zu profitieren. Dies soll zum einen in der Vermittlung von Methodenwissen liegen, zum anderen auch in der Unterstützung bei konkreten technischen Fragen, z.B. wie kann ich meine Anwendung auf dem zentralen Hochleistungsrechner LiDOnG bringen.

Der vorliegende Fragebogen will einerseits die Ist-Situation erfassen, sowohl im Hinblick auf die eingesetzte Software, als auch auf die vor Ort bei den Arbeitsgruppen installierte Serverkapazität für wissenschaftliche Anwendungen. Andererseits soll aber auch der zukünftige Bedarf (in Hinblick auf Kapazität und hardware-technische Möglichkeiten) ermittelt werden, um daraus ein Konzept zu entwickeln, wie zukünftig an der TU Dortmund Ressourcen zum Wissenschaftlichen Rechnen effizienter zur Verfügung gestellt werden können.

Bei Fragen und Anmerkungen zur Umfrage schreiben Sie bitte eine Email an:

*service.dowir@lists.tu-dortmund.de*

Wenn Sie den Fragebogen bereits bei der letzten Umfrage bearbeitet haben und sich von Ihrer Seite keine Änderungen bei der Beantwortung der Fragen ergeben haben, ist eine erneute Bearbeitung dieses Fragebogens nicht notwendig.

Die Bearbeitung des Fragebogens soll bis zum **1. November** erfolgen. Bitte schicken Sie den ausgefüllten Fragebogen per E-Mail an *service.dowir@lists.tu-dortmund.de*.

## 1. Allgemeines

Name AG-Leiter:

Arbeitsgruppe:

Fakultät/Lehrstuhl:

Größe der Arbeitsgruppe:

davon Drittmittel (in %):

Anzahl der Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe, die Software zum Wissenschaftlichen Rechnen nutzen:

Spezifikation der Software:  Numerische Simulation  Datenanalyse

### 1.1 Lehre

Beschreiben Sie bitte Ihr Lehrgebiet:

1.1.1 Welche Bedeutung hat das Wissenschaftliche Rechnen in Ihrer Lehre?

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell  
 unwichtig

1.1.2 Verwenden Sie entsprechende Programme in der Lehre?

- Ja, bitte geben Sie Details in 2.1 an     Nein

1.1.3 Lehren Sie die zugehörigen Grundlagen und Methoden?

- Ja, bitte geben Sie Details in 2.2 an     Nein

1.1.4 Vermitteln Sie Methodenwissen zur Softwareerstellung?

- Ja, bitte geben Sie Details in 2.3 an     Nein

## 1.2 Forschung

Beschreiben Sie bitte Ihr/e Forschungsgebiet/e:

1.2.1 Welche Bedeutung hat das Wissenschaftliche Rechnen in Ihrer Forschung?

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell
- unwichtig

1.2.2 Verwenden Sie entsprechende Software in Ihrer Forschung?

- Ja, bitte geben Sie Details in 3.1 an     Nein

1.2.3 Erweitern Sie vorhandene Software zum Wissenschaftlichen Rechnen um eigene Bausteine?

- Ja, bitte geben Sie Details in 3.2 an     Nein

1.2.4 Entwickeln Sie eigene Software zum Wissenschaftlichen Rechnen?

- Ja, bitte geben Sie Details in 3.3 an     Nein

## 1.3 Hardware-Infrastruktur in der Arbeitsgruppe

1.3.1 Welche Arbeitsplatzrechner verwenden Sie in ihrer Arbeitsgruppe?

Windows Anzahl:     Linux Anzahl:

Mac-OS Anzahl:     Thin-Clients/Virtual Desktops Anzahl:

1.3.2 Betreiben Sie selbst lokale Server für das Wissenschaftliche Rechnen?

- Ja, bitte geben Sie Details in 4.1 an     Nein

1.3.3 Nutzen Sie externe Server für das Wissenschaftliche Rechnen?

- Ja, bitte geben Sie Details in 4.2 an     Nein

## 1.4 Volumen der Nutzung von WiR-Ressourcen

Schätzen Sie bitte das Gesamt-Volumen an Ressourcen, welches Ihre Rechnungen (auf lokalen und externen Servern) benötigen.

1.4.1 typisches, externes Transfervolumen in GB/Monat (von/nach außerhalb des TU-Netzes), z.B.

Download von Messergebnissen:

1.4.2 durchschnittlicher Hauptspeicherbedarf pro Job in GB (falls Sie weder die Techniken MPI und/oder OpenMP benutzen, lassen Sie die entsprechenden Felder frei):

seriell:

MPI:

OpenMP:

1.4.3 durchschnittlicher Bedarf an permanentem Plattenspeicher in TB:

1.4.4 Falls Sie Parallelisierungstechniken benutzen:

1.4.4.1 typische Anzahl an Prozessen in einem Programmlauf:

MPI:

OpenMP:

1.4.4.2 Ist die Verfügbarkeit des Hochleistungsnetzwerks essentiell:  ja

1.4.4.3 Ist die Reproduzierbarkeit von Zeitmessungen wichtig:  ja

1.4.5 Falls Sie mehr als 32 GB Hauptspeicher und/oder mehr als 64 Prozesse pro Rechenjob benötigen, beschreiben Sie bitte die Anwendung/en, die diese Ressourcen in Anspruch nehmen sollen:

## 1.5 Allgemeine Anregungen und Kritik

## 2. Wissenschaftliches Rechnen in der Lehre

### 2.1. Verwendung von Software in der Lehre

Welche Software verwenden Sie in der Lehre?

Bieten Sie Lehrveranstaltungen an, bei denen die Studierenden selbst am Rechner sitzen?

Ja  Nein

Allgemeine Bemerkungen zur Verwendung von Software in der Lehre:

### 2.2. Lehre von Methoden zum Wissenschaftlichen Rechnen

Beschreiben Sie bitte, wie Sie Rechenverfahren in der Lehre einsetzen:

### 2.3. Lehre von Methodenwissen zur Softwareerstellung

Beschreiben Sie bitte, wie Sie Methodenwissen zur Softwareerstellung vermitteln:

### 2.4 Bedarf an Lehre

Was ist Ihr Bedarf an Lehre in Bezug auf das Wissenschaftliche Rechnen, der zur Zeit nicht abgedeckt ist:

### 3. Wissenschaftliches Rechnen in der Forschung

#### 3.1. Verwendung von Software in der Forschung

Beschreiben Sie bitte, wie Sie Software in der Forschung einsetzen:

#### 3.2. Erweiterung von Software um eigene Programmbausteine

Beschreiben Sie bitte, wie Sie vorhandene Software um eigene Bausteine erweitern:

#### 3.3 Entwicklung eigener Software mit interaktiven Umgebungen

3.3.1 Welche interaktiven Umgebungen verwenden Sie:

Matlab     Maple     Mathematica

andere, und zwar:

3.3.2 Welche Vor- und Nachteile sehen Sie in der Verwendung dieser Software?

### 3.4 Entwicklung eigener Software mit höheren Programmiersprachen

#### 3.4.1 Welche Programmiersprache benutzen Sie:

C  C++  Fortran  Java  andere, und zwar:

#### 3.4.2 Art der Parallelisierung

Welche Art der Parallelisierung nutzen Sie?

- rein seriell  Shared-Memory mit OpenMP  
 Distributed-Memory mit MPI

#### 3.4.3 Spezielle Hardware

Planen Sie die Nutzung folgender Spezial-Hardware oder benutzen Sie diese bereits?

- schnelles latenzarmes Hochleistungsnetzwerk (Infiniband)  
 Einsatz von GPUs

Allgemeine Bemerkungen zur Entwicklung eigener Software:

### 3.5 Lehrangebote für Mitarbeiter

Welche Lehrangebote für Mitarbeiter in Bezug auf das Wissenschaftliche Rechnen benötigen Sie (Programmierkurse etc.):



## 4. Hardware-Infrastruktur

### 4.1 Lokale Server

Beschreiben Sie bitte zusammenfassend die Ausstattung Ihrer lokalen Server:

Anzahl der Server:

Gesamtzahl der CPUs/Cores:  /

Gesamthauptspeicher in GB:

### 4.2 Externe Server

Geben Sie bitte an, auf welchen der nachfolgenden externen Rechnersysteme Sie Software zum Wissenschaftlichen Rechnen ausführen.

- lokaler, zentraler Hochleistungsrechner, z.Z. LiDOng
- externer Hoch-/ Höchstleistungsrechner, z.B. HLRS/LRZ/FZJ
- Grid

## 5. Zugriff auf System-Ressourcen

Hinweis: Der Zugriff auf System-Ressourcen (Betriebssystem, Scheduler, etc.) auf einem gemeinsamen Rechencluster kann nur über Virtualisierung erfolgen.

5.1 Benötigen Sie für Ihre Lehrtätigkeit direkten Zugriff auf Systemressourcen?

- Ja  Nein

Wenn ja, dann bitte die folgenden Fragen beantworten:

5.1.1 Beschreiben Sie die Frequenz der Instantiierung neuer virtueller Maschinen?

- sehr häufig  häufig  gelegentlich  selten  sehr selten

5.1.2 Wie viele virtuelle Maschinen benötigen Sie für Ihre Lehrtätigkeit?

Anzahl:

5.1.3 Welche Zuordnung reale CPU/virtuelle CPU benötigen Sie für Ihre Lehrtätigkeit?

- 1:1  1:2  1:4  1:8  1:16

5.2 Benötigen Sie für Ihre Forschungstätigkeit direkten Zugriff auf Systemressourcen?

- Ja  Nein

Wenn ja, dann bitte die folgenden Fragen beantworten:

5.2.1 Beschreiben Sie die Frequenz der Instantiierung neuer virtueller Maschinen?

- sehr häufig  häufig  gelegentlich  selten  sehr selten

5.2.2 Wieviele virtuelle Maschinen benötigen Sie für Ihre Forschungstätigkeit?

Anzahl:

5.2.3 Welche Zuordnung reale CPU/virtuelle CPU benötigen Sie für Ihre Forschungstätigkeit?

- 1:1  1:2  1:4  1:8  1:16

5.3 Erstellen Sie eigene Images für virtuelle Maschinen oder benötigen Sie vorgefertigte Images?

- Eigene Images  Vorgefertigte Images

## 6. Betriebsmodelle

### 6.1 Anwenden von Verfahren (MapReduce) mit "automatischer" Ressourcenzuordnung

Hier liegt der Schwerpunkt auf einer möglichst effiziente automatische Nutzung der Ressourcen, um zügig an die Ergebnisdaten zu kommen. Die detaillierte Performanceanalyse der verwendeten Verfahren ist von untergeordneter Bedeutung.

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell
- unwichtig

### 6.2 Analyse und Entwicklung von Verfahren (MapReduce) mit "parametrierbarer" Ressourcenzuordnung

Hier liegt der Schwerpunkt auf reproduzierbarer detaillierter Erfassung des Ressourcenaufwandes für CPU, Speicher und Kommunikation in Hinblick auf Latenz und Durchsatz. Ermittlung des Kosten/Nutzenverhältnis der Verteilung bzw. Parallelisierung. Der konkrete "Datendurchsatz" ist von untergeordneter Bedeutung.

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell
- unwichtig

### 6.3 Analyse und Entwicklung von verteilten dienst-orientierten Verfahren

Einzelne Knoten bieten Verfahren als Dienste an, die zu unterschiedlichen Prozessketten (z.B. Streamprocessing) verknüpft werden. Hier liegt der Schwerpunkt auf der reproduzierbaren detaillierten Erfassung des Ressourcenaufwandes für CPU, Speicher und Kommunikation in Hinblick auf Latenz und Durchsatz.

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell
- unwichtig

### 6.4 Anwenden von verteilten Dienst-orientierten Verfahren

Einzelne Knoten bieten Verfahren als Dienste an, die zu unterschiedlichen Prozessketten (z.B. Streamprocessing) verknüpft werden. Die konkrete Verteilung der Dienste über den Cluster ist nicht erheblich, da die Datenverarbeitung zu Ergebnisdaten im Vordergrund steht.

- unverzichtbar     sehr wichtig     wichtig     hilfreich, aber nicht essentiell
- unwichtig