



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 113 • März 2003

### Auf dem Weg zum neuen Supercomputer

Das ZAM beabsichtigt, im Juli 2003 auf einem kleinen Teilsystem des neuen IBM-Supercomputers mit dem Produktionsbetrieb für Nutzer zu beginnen. Das System wird aus sechs Knotenrechnern mit je 32 Prozessoren sowie einer Plattenperipherie mit einer Kapazität von 10 TByte bestehen und eine Grenzleistung von ca. 1 TFLOPS haben. Mit Verfügbarkeit dieses Teilsystems wird das 1996 installierte System CRAY T3E-600 (0,3 TFLOPS) außer Betrieb genommen. Informationsveranstaltungen zur Nutzung des neuen Systems und zur Migration von Cray-Anwendungen werden im Mai angeboten werden.

### Migration der Cray-Daten auf den neuen IBM-Supercomputer

Bereits vor der Installation des neuen IBM-Supercomputers besteht die Möglichkeit, die Migration von Cray-Daten, die auf dem neuen Rechner verwendet werden sollen, vorzubereiten. Dies ist möglich, da die erforderlichen Konvertierungsschritte hauptsächlich auf den Cray-Systemen ablaufen. Da beim Übergang von den Cray-Systemen auf das neue IBM-System sehr große Datenmengen migriert werden müssen, ist ein früher Beginn der Migration empfehlenswert.

Technisch sind grundsätzlich zwei mögliche Ansätze bei der Migration zu unterscheiden:

- die Konvertierung der Cray-internen Datenformate in die entsprechenden IBM-Formate
- die Verwendung maschinenunabhängiger Datenaustausch-Formate wie z.B. NetCDF oder XDR/fxdr

Insbesondere der zweite Ansatz ist in diesem Zusammenhang empfehlenswert, da er erlaubt, bereits heute mit der Konvertierung der Daten zu beginnen und die konvertierten Daten auf den Cray-Systemen weiterzuverwenden. Die Benutzung maschinenunabhängiger Datenaustausch-Formate macht Anwendungen flexibler und portabler.

Die technischen Details zur Datenmigration von Cray zu IBM wurden in einer Online-Dokumentation zusammengestellt, die unter der vorläufigen Adresse <http://www.fz-juelich.de/zam/docs/cray2ibm/DataConversion.html> abgerufen werden können. Wir machen darauf aufmerksam, dass diese Online-Dokumentation noch im Aufbau begriffen ist, und daher zurzeit nur zu einigen ausgewählten Themen Informationen enthält. (Ansprechpartner: Ulrich Detert, Tel. 6434)

### Molekülvisualisierung mit MOLMOL und VMD

MOLMOL (MOleculE analysis and MOleculE display, entwickelt an der ETH Zürich) ist ein Programm zur Darstellung, Analyse und Manipulation der 3D-Struktur biologischer Makromoleküle. Dabei wird die Untersuchung von Protein- und DNA-Strukturen, die beispielsweise durch NMR bestimmt wurden, besonders unterstützt. Die Darstellungsmethoden umfassen neben den konventionellen auch neuartige schematische Darstellungen mit der Möglichkeit unterschiedlicher Darstellungsarten in einer Sicht. Kovalente Molekülstrukturen können durch Einfügen oder Entfernen individueller Atome und Bindungen modifiziert und die 3D-Struktur kann durch Rotation um dihedrale Winkel manipuliert werden.

VMD (Visual Molecular Dynamics, University of Illinois) wurde zur Visualisierung und Analyse von biologischen Systemen wie Proteinen, Nukleinsäuren oder auch zusammengesetzten Lipid-Doppelschichten entworfen. Es interpretiert beliebige Molekülstrukturen, die im PDB-, CHARMM- und X-PLOR-Format abgespeichert sind, sowie viele andere Formate mit Hilfe des Programms Babel. VMD stellt eine breite Palette an Selektions-, Einfärbungs- und Darstellungsmethoden zur Verfügung, u.a. ball&stick, CPK Kugeln und Zylinder, licorice bonds, backbone tubes and ribbons. VMD kann die berechneten Trajektorien einer MD-Simulation animieren und analysieren sowie als graphisches

Frontend einer auf einem anderen Rechner laufenden MD-Simulation dienen.

Beide Programmsysteme basieren auf OpenGL und erlauben damit sowohl schnelle, interaktive 3D-Transformationen als auch Stereodarstellungen. Außer für ihre Schwerpunktbereiche sind beide Systeme für die allgemeine Molekularvisualisierung hervorragend geeignet, da sie neben den üblichen Ausgabeformaten wie PostScript und Rastergraphik den 3D-Export in VRML-Dateien (3D-Modelle für das WWW) und in POV-Ray-Dateien (für hochqualitatives Rendern mit Beleuchtung, Schatten und Texturen für Präsentation und Publikation) ermöglichen.

Weitergehende Informationen finden Sie über die Web-Seite (<http://www.fz-juelich.de/vislab/software>). Beide Programmpakete stehen auf dem Software-Distribution-Server insbesondere für Linux und AIX zur Verfügung. (Ansprechpartner: Dietrich Bartel, Tel. 6423)

## Seminar zum Grid Computing

Gemeinsam mit dem Lehrstuhl für Hochleistungsrechnen an der RWTH Aachen (Prof. C. Bischof) haben Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen des ZAM ein Seminar zum Thema „Grid Computing“ durchgeführt. Grid Computing bedeutet die koordinierte Nutzung verteilter Ressourcen, wie Rechner, Software und Daten, zur Lösung von Problemen in dynamischen, mehrere Institutionen umfassenden virtuellen Organisationen. Der Benutzer soll dabei über das Internet mittels einer einheitlichen, leicht zu bedienenden Oberfläche transparent mit dem Grid interagieren. Beispielsweise bei datenintensiven Berechnungen, verteiltem Supercomputing, kollaborativer Computerarbeit und Teleimmersion finden Grids ihre Anwendung. Das Seminar behandelte eine Auswahl aktueller Forschungsthemen aus dem Bereich Grid Computing, wie z.B. Sicherheit, Ressourcenverwaltung und Datentransfer. Die elf Vorträge des Seminars wurden am 10. und 11. Februar 2003 am Lehrstuhl für Hochleistungsrechnen gehalten.

## MTA-Prüfung im Februar 2003

In der letzten Februarwoche haben alle 27 Auszubildenden des Forschungszentrums und 3 extern Beschäftigte vor dem Prüfungsausschuss der IHK zu Köln ihre Prüfung erfolgreich abgelegt: Sie sind jetzt Mathematisch-technische Assistenten / Informatik (IHK), also gesuchte IT-Experten mit einer besonderen Qualifikation im wissenschaftlich-technischen Bereich. Während der 2 1/2-jährigen Ausbildung fand der zentrale praktische und theoretische Unterricht in Kooperation mit der FH Aachen/Jülich im ZAM statt; die Absolventen verteilen sich wie folgt auf die Institute: IBT, ICG (5 Auszubildende), IFF (2), ISG (2), ISR, IKP (2), IME (2), INC, IPP,

IWV (2), STE, ZAM (3), ZAT, ZEL (2) und ZFK. Wir gratulieren allen Absolventen und danken den Betreuern und Dozenten!

Insgesamt 11 Auszubildende erreichten die Note „Gut“, die beiden besten Absolventen Christina Jansen (ISR) und Markus Meier (ISG) erreichten sogar in beiden Teilprüfungen jeweils die Note „Sehr gut“. Diese Absolventen werden auf der Abschiedsfeier im ZAM am 6. März von Herrn Müller-Montu  (P) mit einem Buchgeschenk ausgezeichnet.

Trotz der momentan schwierigen Lage auf dem Arbeitsmarkt brauchen sich die MaTAs kaum Sorgen um ihre berufliche Zukunft zu machen, geh ren sie doch zu den derzeit gefragtesten Spezialisten. Einige werden zum 1. M rz bereits das Forschungszentrum verlassen, andere nutzen die M glichkeit einer halbj hrigen Weiterbesch ftigung zur beruflichen Orientierung. Die meisten Absolventen aber werden das ausbildungsbegleitende Studium der Technomathematik an der Fachhochschule Aachen/J lich mit dem Hauptstudium fortsetzen und k nnen in weiteren vier Semestern das Diplom erreichen. Dabei arbeiten sie halbtags weiter in dem erlernten Beruf f r das FZJ. Der eine oder andere wird sicher auch seine Diplomarbeit hier schreiben.

## Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0385 Wissenschaftliche Publikationen 2002 des Zentralinstituts f r Angewandte Mathematik  
 IB-2002-14 An Improved Implementation of the Fast Multipole Method

## ZAM/NIC-Veranstaltungen

### Programmierung in Java

Referenten: Anke H ming, Dirk Breuer, ZAM

Termin: 31.3. - 2.4.2003, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [A.Haeming@fz-juelich.de](mailto:A.Haeming@fz-juelich.de), Tel. 4227

### Die Programmiersprache Perl

Referenten: Dr. Thomas Eickermann, Wolfgang Frings, Willi Homberg, ZAM

Termin: 7. - 9.4.2003, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [W.Frings@fz-juelich.de](mailto:W.Frings@fz-juelich.de), Tel. 2828

### IT-Sicherheit auf Linux-Systemen

Referenten: Otto B chner, Dr. Thomas Eickermann, Dr. J rgen Meißburger, ZAM

Termin: 10.4.2003, 14.00 - 16.30 Uhr

Ort: H rsaal im ZAM

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: <http://www.fz-juelich.de/zam/neues/termine/>

NIC: <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/>