



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 116 • Juni/Juli 2003

Auf dem Weg zum neuen IBM-Supercomputer: Nachfolge für zentrales AIX

Wie bereits angekündigt, wird Ende Juli ein Teilsystem des neuen IBM-Supercomputers „Jump“ (Jülich multi-processors) in Produktion gehen. Das System wird 6 Knoten mit jeweils 32 Prozessoren und 64 GB Hauptspeicher und eine Peak-Leistung von 1,3 TFLOPS haben.

Das neue System wird vorwiegend für NIC- und VSR-Benutzer zur Verfügung stehen. Zusätzlich ist vorgesehen, dass auch die Funktionalität des zentralen AIX auf den neuen IBM-Supercomputer übertragen wird. Damit werden die deutlichen Performance-Vorteile des neuen Systems auch den Benutzern des zentralen AIX zugute kommen. Das zentrale AIX wird auf dem jetzigen Softwarestand eingefroren. Zu einem geeigneten Zeitpunkt, voraussichtlich im Frühjahr 2004, wird das System dann abgeschaltet werden.

Die meisten Software-Produkte und fast alle Tools (interaktiv und via Batch), die bisher auf dem zentralen AIX angeboten waren, stehen auch auf dem neuen System (z.B. interaktiv auf der sogenannten Login-Partition) zur Verfügung. Ausgenommen davon sind allerdings Funktionen, die reine Desktop-Funktionalität haben, wie vor allem

- Unterstützung von X-Terminals (xdm)
- jegliche Mail-Clients (inkl. zmail, zpop)
- Web-Browser wie z.B. Netscape, mosaic oder lynx
- weitere Desktop-Tools, z.B. plan, xkeycaps, xpaint etc.

Wenn Sie noch oben genannte Produkte auf dem zentralen AIX nutzen, bitten wir Sie, diese Funktionen in Zukunft auf Ihrem lokalen System auszuführen oder sich einer unserer bewährten Workstation-Gruppen anzuschließen.

Ebenfalls ausgenommen von der Übertragung auf das neue System ist veraltete Software, für die es bereits Ersatz durch modernere Produkte gibt oder die aus anderen, meist lizenzrechtlichen Gründen auf dem neuen System nicht mehr laufen kann. Wir bitten Sie zu überprüfen, ob die Software, die Sie in Zukunft noch benötigen, auf Jump installiert ist

und anderenfalls mit uns Kontakt aufzunehmen. Eine vorläufige Liste der bereits migrierten Software finden Sie unter <http://jumpdoc.fz-juelich.de> unter dem Stichwort „Software“. Bei Bedarf kann das Software-Angebot erweitert werden. (Ansprechpartner: Klaus Wolkersdorfer, Tel. 6579)

Nutzer des zentralen AIX müssen den Zugang zum Jump-System gesondert beantragen. Die Login-Partition des neuen Systems wird über ssh <userid>@jump.fz-juelich.de erreichbar sein. Die Dokumentation für das neue System wird zur Zeit erstellt unter <http://jumpdoc.fz-juelich.de>.

Außerbetriebnahme von CRAY T3E-600

Der im Herbst 1996 installierte Rechner CRAY T3E-600 wird am 1. Juli 2003 um 9.00 Uhr außer Betrieb genommen. Damit kann ab diesem Zeitpunkt nicht mehr auf die lokalen Daten (\$WORK) zugegriffen werden. Alle Anwendungen können unverändert auf CRAY T3E-1200 ausgeführt werden. Nicht abgeschlossene Jobs müssen auf CRAY T3E-1200 neu submittiert werden. (Ansprechpartner: CRAY-Beratung, Tel. 4380)

Web-basierte Beantragung von Rechner-Accounts

Für alle FZJ-Mitarbeiter und Mitarbeiter in VSR- und NIC-Projekten steht ab sofort ein Web-basiertes Interface zur Verfügung, um den Rechnerzugang für die zentralen Compute-Server (Jump-System, Cray-Rechner, zentrales AIX) und die Workstation-Gruppen zu beantragen. Das Verfahren ähnelt der Beantragung einer offiziellen E-Mail-Adresse, d.h. die mit dem Web-Interface übermittelten elektronischen Daten müssen vom Antragsteller und vom Institutsleiter bzw. Projektleiter mit einer Unterschrift bestätigt werden. Der Zugang zum Interface ist über „ZAMonline“ auf den Web-Seiten des ZAM erreichbar. Anträge über Papierformulare werden ab 1.7.2003 nicht mehr entgegengenommen. (Ansprechpartner: Dispatch, Tel. 5642)

Status der JuNet-Erneuerung

Im Jahr 2000 hat das ZAM in Zusammenarbeit mit ZEL und B-EK mit der flächendeckenden Erneuerung der JuNet-Infrastruktur begonnen. Ziel ist, das alte 10MBit/s-Ethernet durch ein modernes, auf einer strukturierten Glasfaserverkabelung aufsetzendes, Switch-basiertes Ethernet zu ersetzen. Mit ca. 2700 über Fast- und Gigabit-Ethernet angeschlossenen Endgeräten ist mehr als die Hälfte dieses Weges zurückgelegt; die neue Infrastruktur trägt inzwischen die Hauptlast der Kommunikation im Forschungszentrum.

In den Instituten sind bereits 40 Access-Switches im Einsatz, die jeweils über Gigabit-Ethernet zu den zentralen Switches im ZAM sternförmig verbunden sind. Neben der Verkehrsführung in mittlerweile 30 virtuellen LANs dienen insbesondere die zentralen Switches auch der Realisierung von Sicherheit im JuNet, dem Netzwerk-Monitoring sowie der Anbindung des Forschungszentrums an das Deutsche Wissenschaftsnetz (G-WiN) und das Internet.

Aufgrund der aktuell schwierigen Finanzsituation kann der weitere Ausbau in diesem Jahr nur sehr eingeschränkt vorschreiten. Wir hoffen dennoch, die flächendeckende Verfügbarkeit der neuen Netzwerktechnik wie geplant bis 2005 erreichen zu können.

Zur Vorbereitung auf zukünftige Anforderungen, insbesondere im Supercomputer-Umfeld, hat das ZAM bereits erste 10-Gigabit-Ethernet-Komponenten verschiedener Hersteller erfolgreich getestet. (Ansprechpartner: Olaf Mextorf, Tel. 2519)

IMSL nicht auf IBM-Supercomputer verfügbar

Auf dem Jump-System wird die Programmbibliothek IMSL (International Mathematical and Statistical Library) nicht zur Verfügung stehen.

Nutzern der IMSL, die ihre Programme von CRAY-T3E auf den IBM-Supercomputer portieren, wird empfohlen, die IMSL-Programme durch entsprechende Routinen der ESSL (Engineering and Scientific Subroutine Library) bzw. der NAG-Bibliothek (Numerical Algorithms Group) zu ersetzen. Bei der Umstellung sind wir gerne behilflich.

Da der IBM-Supercomputer auch die Funktion des zentralen AIX übernimmt, müssen in Programmen, die vom zentralen AIX nach Jump migriert werden, ebenfalls die Aufrufe der IMSL-Programme ausgetauscht werden. Generell empfehlen wir, auf die NAG-Library umzustellen. In Fällen, wo dies nicht möglich ist, bieten wir IMSL-Lizenzen für Linux-PCs an. (Ansprechpartnerin: Ruth Zimmermann, Tel. 4136)

Neue Accounting-Formel ab Juli 2003

Mit dem Abbau des Rechners CRAY T3E-600 und der Inbetriebnahme der ersten sechs Knoten des neuen IBM-

Supercomputers wird eine Anpassung der Rechenzeitkosten nötig. Die ab dem 1.7.2003 gültigen Berechnungsfaktoren sind in der TKI-0015 beschrieben und bei den ZAM-Publikationen abgelegt. Die Kontingente für die Nutzung der Supercomputer-Ressourcen für NIC- und VSR-Projekte sowie die begutachtungsfreien Kontingente für die Institute berücksichtigen bereits die neuen Rechenzeitkosten.

System	Anzahl Prozessoren	Kosten pro Prozessorstunde [VE/h]
CRAY SV1ex	16	20,00
CRAY T3E-1200	512	1,70
zentrales AIX	4	3,80
Jump	192	14,00

Hierbei entspricht der reale Wert einer Verrechnungseinheit (VE) einem Euro (€). Mit Verfügbarkeit des Jump-Gesamtsystems im Januar 2004 werden die Kosten erneut angepasst. (Ansprechpartnerin: Stefanie Meier, Tel. 4494)

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Mehr Sicherheit im Internet für Windows-Benutzer

Referent: Dr. Jürgen Meißburger, ZAM
Termin: 1. - 2.7.2003, 14.00 - 16.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

IT-Sicherheit im Forschungszentrum: Leitlinie, Grundsatzregeln und Aufgaben

Referent: Dr. Burkhard Mertens, IT-Sicherheitsbeauftragter
1. Termin: Dienstag, 8.7.2003, 14.00 - 15.30 Uhr
2. Termin: Montag, 14.7.2003, 14.00 - 15.30 Uhr
Ort: Auditorium des Forschungszentrums

Tcl/Tk zur Programmierung von graphischen Benutzeroberflächen

Referenten: Willi Homberg, Beate Herrmann, ZAM
Termin: 14. - 17.7.2003, 9.00 - 12.00 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an *W.Homberg@fz-juelich.de*, Tel. 2424

Visualisierung von Molekülen

Referent: Dietrich Bartel, ZAM
Termin: Donnerstag, 24.7.2003, 14.00 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an *D.Bartel@fz-juelich.de*, Tel. 6423

Analytische Gradienten und nichtadiabatische Kopplungen für Multireferenzwellenfunktionen

Referent: Prof. Hans Lischka, Universität Wien
Termin: Montag, 28.7.2003, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Weitere Veranstaltungshinweise:

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