



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 120 • Dezember 2003

### Ehrenplakette der FH Aachen für Thorsten Dickhaus

Am 21.11.2003 wurde Herrn Thorsten Dickhaus, bis vor kurzem Mitarbeiter des ZAM, im Krönungssaal des Aachener Rathauses die Ehrenplakette der Fachhochschule Aachen verliehen. Diese wird den jeweils drei jahresbesten Absolventen jedes Fachbereichs der Hochschule überreicht. Herr Dickhaus hat nach seiner Ausbildung zum Mathematisch-technischen Assistenten Technomathematik an der Fachhochschule in Jülich studiert. Er hat seine Diplomarbeit mit dem Thema „Statistische Verfahren für das Data Mining in einem Industrieprojekt“ im ZAM unter der Betreuung von Dr. Wolfgang Meyer im Rahmen eines Kooperationsprojektes mit einem Aachener Pharmakonzern geschrieben, für die er nun geehrt wurde. Herr Dickhaus ist der erste Technomathematiker, dem diese Ehre zuteil wird.

### Quantenchemie-Software auf Jump (CPMD, ADF, Gaussian)

Für Anwendungen in der Quantenchemie können auf dem neuen IBM-Supercomputer drei Programmpakete genutzt werden, die sich in Funktionalität und Methodik ergänzen.

Mit dem Programm CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) steht eine leistungsfähige Software zur Verfügung, die die Behandlung großer molekularer Systeme erlaubt. Die Verwendung ebener Wellen als Basisfunktionen ermöglicht den Einsatz der schnellen Fourier-Transformation bei den Integralberechnungen. Das Programm nutzt die Vorteile moderner Höchstleistungs-Parallelrechner und zeichnet sich durch eine gute Skalierung aus. Auf Jump ist die aktuelle Version 3.7.2 der CPMD-Software installiert, die zur Parallelisierung OpenMP und MPI nutzt.

Das Quantenchemiepaket ADF (Amsterdam Density Functional) wird erstmalig im Forschungszentrum angeboten. In ADF kommen numerische Integrationsverfahren zum Einsatz, die eine freie Wahl der Art der Basisfunktionen ge-

statten und die Berechnung einer Vielzahl von Moleküleigenschaften erlauben. Aufgrund der Eigenschaft, atomare Wellenfunktionen besser wiederzugeben, werden in ADF STOs (Slater Type Orbitals) verwendet. Die numerische Integration hat darüber hinaus den Vorteil, dass eine effiziente parallele Programmausführung erreicht wird. Das Programmpaket nutzt für die Parallelisierung MPI. Die Lizenz erlaubt einem einzelnen Programm, maximal 128 Prozessoren zu nutzen.

Gaussian 03 ist nach mehreren Jahren die erste größere Aktualisierung des Gaussian-Programms, welches von Chemikern, Biochemikern, Physikern und anderen Wissenschaftlern zur Forschung in traditionellen und neuen Gebieten mit chemischem Schwerpunkt eingesetzt wird. Gegenüber der bisherigen Version Gaussian 98 wurden viele Verbesserungen eingeführt, darunter eine Beschleunigung von Hartree-Fock- und Dichtefunktionalrechnungen, eine Erweiterung der Möglichkeiten bei QM/MM-Rechnungen mit der ONIOM-Methode, Density-Fitting bei reinen Dichtefunktionalrechnungen sowie viele neue Dichtefunktionale. Dieses Softwarepaket kann auf Jump auf einzelnen Knoten im Shared-Memory-Modus genutzt werden.

Weitere Informationen zu Chemie-Software und deren Nutzung auf Jump finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/mathe/software/chem/> (Ansprechpartner: Dr. Holger Dachsel, Tel. 6569)

### Das ZAM auf der SC 2003

Zum fünften Mal in Folge hat sich das NIC/ZAM an der „Supercomputing“ (Konferenz und Ausstellung) beteiligt, der bedeutendsten und größten Fachveranstaltung dieser Art, die einmal jährlich im November in den USA stattfindet. Die diesjährige Veranstaltung in Phoenix, Arizona, übertraf alle bisherigen Rekorde: In den Tutorials wurden 1000 Teilnehmer gezählt, im technischen Programm 2700 und in der Ausstellung 7500. Das NIC/ZAM war im Programmkomitee

für die Auswahl der wissenschaftlichen Beiträge vertreten, beteiligte sich an der Ausstellung, an SC Global, an einem Workshop und richtete ein Tutorium aus.

Auf der Ausstellung, die von ca. 270 Hardware- und Software-Firmen sowie 200 Forschungseinrichtungen getragen wurde, war das NIC/ZAM wieder mit zwei Ständen vertreten, auf denen zum einen Grid-Aktivitäten (EU-Projekte EUROGRID und GRIP), zum anderen Performance-Werkzeuge, das Steering von Anwendungen mit Hilfe der im ZAM entwickelten Software VISIT sowie Aktivitäten des NIC-Partners Zentrum für paralleles Rechnen DESY Zeuthen auf dem Gebiet der APE-Spezialrechner gezeigt wurden.

Mitarbeiter des ZAM wirkten als Tutoriums-Referenten in einem Tutorium über Performance-Tools sowie als Vortragende in einem sich direkt an die Konferenz anschließenden Workshop des APART-Projektes mit. APART ist eine von der EU geförderte Arbeitsgruppe zum Thema automatische Leistungsanalyse paralleler Programme.

Ein besonderes Highlight war die Jülicher Beteiligung an der „SC Global“. In diesem Jahr wurde zum zweiten Mal ein Teil der SC 2003 als weltweit verteilte, videogestützte Konferenz veranstaltet. Das ZAM trug zusammen mit dem HLRS Stuttgart und der Universität Manchester mit einer Session zum Steering von Anwendungen in kollaborativen Umgebungen zum technischen Programm der SC Global bei. Dabei wurden Simulationen, die auf Höchstleistungsrechnern in den USA und Europa abliefen, in Jülich, Stuttgart, Manchester und Phoenix gemeinsam visualisiert und gesteuert. Die hier erfolgreich erprobte Technik des „Access Grid“ ist von großer Bedeutung für zukünftiges verteiltes wissenschaftliches Arbeiten.

Das NIC/ZAM plant, sich auch in den kommenden Jahren weiter aktiv an der Supercomputing-Konferenzreihe zu beteiligen. (Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

## Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0389    Sichern von Windows- und Linux-Betriebssystemen mit Drivelmage 7
- TKI-0390    Windows-XP - aber sicher! Hinweise zur Einrichtung von Windows-XP
- IB-2003-08    Statistische Verfahren für das Data Mining in einem Industrieprojekt
- IB-2003-09    Proceedings of the Workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing (POOSC '03)
- IB-2003-11    Draft Proceedings of the Workshop on Declarative Programming in the Context of Object-Oriented Languages (DP-COOL '03)

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

### Jahresabschlusskolloquium am 18.12.2003

- 10.15-10.30    Rüdiger Esser  
Begrüßung
- 10.30-11.00    Paul Gibbon  
Eine VISITe beim PEPC: Plasmaphysik auf Knopfdruck
- 11.30-12.00    Thomas Müller  
HPC-Chem: Ein Quantum Chemie und ein Quäntchen Mathematik
- 12.00-12.30    Tatjana Eitrich  
Support-Vektor-Maschinen: Statistik und Künstliche Intelligenz im Bunde
- 14.00-14.30    Volker Sander  
Internet-Dienste für Grid-Anwendungen
- 14.30-15.15    Ulrich Detert, Wolfgang Frings  
Jump: Der Sprung auf 8 TFlops
- 15.15-15.45    Wolfgang Gürich  
Das neue Technikgebäude des ZAM: Bau- und Rechnerarchitektur finden zusammen

Termin: Donnerstag, 18.12.2003, 10.15 - 15.45 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### make und bldmake

Referent: Günter Egerer, ZAM  
Termin: Mittwoch, 3.12.2003, 9.00 - 12.00 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### Konzepte von OpenGL

Referent: Dr. Herwig Zilken, ZAM  
Termin: Donnerstag, 4.12.2003, 13.30 - 16.30 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [H.Zilken@fz-juelich.de](mailto:H.Zilken@fz-juelich.de), Tel. 2482

### 3D mesh-free particle simulations of energetic particle transport in Terawatt laser-solid interactions

Referent: Dr. Paul Gibbon, ZAM  
Termin: Dienstag, 16.12.2003, 13.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### Numerische Modellierung von Chemie und Dynamik in der Stratosphäre mit CLaMS

Referenten: Dr. Gebhard Günther et al., ICG-I  
Termin: Dienstag, 16.12.2003, 14.15 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### Programmierung und Nutzung des neuen IBM-Supercomputersystems in Jülich

Referenten: IBM- und ZAM-Mitarbeiter  
Termin: 14. - 16.1.2004, 9.00 - 16.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM  
Anmeldung für Externe an [A.Reinartz@fz-juelich.de](mailto:A.Reinartz@fz-juelich.de), Tel. 6402

Redaktion: Dr. Sabine Höfler-Thierfeldt, Tel. 6765