



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 150 • Dezember 2006 / Januar 2007

Blue Gene/L Scaling Workshop in Jülich

In der Woche vom 4. bis zum 8. Dezember 2006 richteten das NIC/ZAM, IBM und das Blue Gene Consortium gemeinsam einen Blue Gene/L Scaling Workshop in Jülich aus. Die Veranstaltung richtete sich an die internationale Blue Gene-Nutzer-Community und hatte das Ziel, Skalierungstests von Anwendungen auf dem BG/L-System JUBL in Jülich durchzuführen.

Die Teilnehmer des Workshops wurden durch ein Bewerbungsverfahren ermittelt, bei dem erwartete wissenschaftliche Ergebnisse der Programmläufe, Skalierungsverhalten und Eignung der Programme für die BG/L-Architektur eine ausschlaggebende Rolle spielten. Insgesamt wurden sieben Teilnehmer aus Deutschland, England, USA und Japan ausgewählt. Sie erhielten neben exzellenten Zugangsmöglichkeiten zum JUBL auch eine kompetente Benutzerunterstützung durch weltweit anerkannte Blue Gene-Experten vom Argonne National Lab (Bill Gropp, MPI-Entwickler), von IBM und vom NIC/ZAM.

Bei den Ergebnissen des Workshops ist besonders hervorzuheben, dass fast alle Teilnehmer ihre Programme bis zu 16.384 Prozessoren skalieren konnten, dass eine handoptimierte QCD-Anwendung eine Leistung von 8,05 TeraFlops auf dem Gesamtsystem zeigte (17% der Peak-Performance), und dass mit im ZAM entwickelten Werkzeugen zur Leistungsanalyse (SCALASCA) Schwachstellen in den einzelnen Programmen identifiziert und behoben werden konnten. Die Veranstaltung ermöglichte es, die heutigen Grenzen des Capability Computing auszuloten und die Anwendungen auf noch höhere Prozessorzahlen vorzubereiten. (Ansprechpartner: Wolfgang Frings, Tel. 2828)

SC06 in Tampa

Als „powerful beyond imagination“ bezeichnete Albert Einstein einmal das komplementäre Zusammenspiel menschlicher Brillanz mit der Leistungsfähigkeit moderner Com-

puter, und dieses Zitat bildete das Motto der diesjährigen Supercomputing-Konferenz SC06, die vom 11. bis 17. November in Tampa, Florida, stattfand. Mit regelmäßig mehreren tausend Teilnehmern im technischen Programm, in den Tutorien und der Ausstellung ist die amerikanische „Supercomputing“ international die mit Abstand bedeutendste Veranstaltung zum Themenkomplex „Höchstleistungsrechnen, Netzwerke und Speicher“. Bereits im achten Jahr in Folge hat sich das NIC/ZAM auch dieses Mal wieder in vielfältiger Weise an der Veranstaltung beteiligt.

Als eingeladener Referent in zwei gut besuchten Tutorien zur Performance-Analyse paralleler Programme trug Dr. Bernd Mohr zum wissenschaftlich-technischen Programm der Konferenz bei. In der Ausstellung, auf der mehr als 150 Hard- und Softwarefirmen und über 100 Forschungseinrichtungen aus aller Welt vertreten waren, präsentierte sich das NIC mit seinem Stand als ein führendes europäisches Höchstleistungsrechenzentrum. Am NIC-Stand wurden die Rechner und ausgewählte darauf laufende Anwendungen vorgestellt. Außerdem wurden die am ZAM entwickelten Werkzeuge zur automatischen Leistungsanalyse von parallelen Programmen vorgeführt und die Grid-Projekte des ZAM, u.a. DEISA und D-Grid, sowie die Grid-Middleware UNICORE live demonstriert. Vorführungen von weiteren ZAM-Entwicklungen wie z.B. Ilview und xnbody ergänzten die Präsentationen am Stand. Ebenfalls gezeigt wurden die Aktivitäten des NIC-Partners DESY auf dem Gebiet der APE-Spezialrechner. (Ansprechpartner: Dr. Boris Orth, Tel. 2528)

NIC-Festkolloquium am 8. Februar 2007

Am 8. Februar 2007 veranstaltet das NIC ein Festkolloquium zur Feier des 20. Jahrestags der Gründung des HLRZ/NIC. Im Jahre 1987 wurde das HLRZ (Höchstleistungsrechenzentrum) gegründet. Es war das erste nationale Supercomputer-Zentrum in Deutschland, an dem Forscher aus dem ganzen Bundesgebiet wissenschaftliche Pro-

jekte auf dem Gebiet der Computersimulation durchführen konnten. Hierfür stand seit 1987 in Jülich zunächst eine Cray X-MP 48 zur Verfügung. 1998 erhielt das HLRZ eine neue organisatorische Struktur und nahm den Namen „John von Neumann-Institut für Computing“ an. Das NIC ist eine gemeinsame Einrichtung von DESY, dem Forschungszentrum Jülich und der GSI. Etwa 130 Gruppen aus Universitäten und Forschungsinstitutionen bearbeiten hier Computersimulations-Projekte auf den verschiedenen Gebieten der Computational Science.

Der 8. Februar 2007 wurde gewählt, um gleichzeitig des 50. Todestags John von Neumanns, Namenspatron des NIC, zu gedenken und an die wichtigen Beiträge dieses großen Wissenschaftlers u.a. zur Entwicklung der modernen Computerarchitektur zu erinnern. (Ansprechpartner: Dr. Manfred Kremer, Tel. 02461 - 61 3660).

Spam-Abwehr mit Blacklist

Als weiteres Mittel zur Eindämmung der ständig steigenden Spam-Flut kann nun auf dem zentralen Mail-Eingang des Forschungszentrums individuell für jedes Konto der Einsatz von Blacklists aktiviert werden. Damit wird die Abweisung von Mails anhand der IP-Adresse des sendenden Servers ermöglicht.

In den Blacklists, die von unterschiedlichen Anti-Spam-Projekten gepflegt werden, sind z.B. dynamisch zugewiesene IP-Adressen enthalten. Dies ist ein Kennzeichen, dass die Mail nicht über das Mail-Relay eines Providers geschickt wurde, und kann auf einen Spammer hinweisen. Bei Aktivierung des Blacklist-Verfahrens werden daher solche Mails abgewiesen. Zur Zeit wird die Blacklist des Spam and Open Relay Blocking System (SORBS) eingesetzt; weitere Listen können bei Bedarf und nach Prüfung ihrer Wirksamkeit hinzugenommen werden.

Das Blacklisting ist ein sehr wirksames Verfahren, auch wenn es ein erhöhtes Risiko falsch positiver Spam-Tests mit sich bringt. Es ist allerdings nicht zu befürchten, dass wichtige Mail unbemerkt verschwindet, da für den Fall der Abweisung einer Mail der Absender darüber informiert wird.

Hinweise zum Verfahren, zu den jeweils angewendeten Listen, sowie die Schnittstelle zum Aktivieren dieser Maßnahme finden sich unter dem Link http://www.fz-juelich.de/zam/mail/blacklist_info. (Ansprechpartner: Martin Sczimarowsky, Tel. 6411)

Auszeichnung für MaTAs und Technomathematiker

Am 17. November wurden im Beisein von Ministerpräsident Jürgen Rüttgers die besten Auszubildenden des Landes von den Industrie- und Handelskammern (IHK) Nordrhein-Westfalens ausgezeichnet. Zu den Geehrten gehört auch

Bernd Wolber, der seine Ausbildung zum Mathematisch-Technischen Assistenten im Forschungszentrum in diesem Frühjahr sehr erfolgreich abgeschlossen hatte.

Die Ehrenplakette der Fachhochschule Aachen wurde am 24. November an die Technomathematiker Britta Janssen, René Puttin und Andreas Kleefeld verliehen. Die Ausgezeichneten studierten begleitend zu ihrer Ausbildung zum Mathematisch-Technischen Assistenten Technomathematik an der FH in Jülich. Für ihre hervorragenden Leistungen im Hauptstudium wurden sie nun als Jahrgangsbeste im Rahmen einer Festveranstaltung im Aachener Krönungssaal geehrt. Britta Janssen und René Puttin schrieben ihre Diplomarbeit unter der Betreuung von Prof. Dr. Johannes Groten-dorst und Dr. Bernhard Steffen im ZAM. Andreas Kleefeld fertigte seine Diplomarbeit im IFF unter Anleitung von Dr. Hans Lustfeld an.

Jahresabschlusskolloquium am 20.12.2006

- 09.30 Thomas Lippert: Begrüßung
- 09.50 Morris Riedel, Wolfgang Frings: A Collaborative Online Visualization and Steering Framework for e-Science Applications in UNICORE Grids
- 10.30 Norbert Eicker: Ergebnisse des Projekts JULI
- 11.00 Kaffeepause
- 11.45 Ulrich Hansmann: Proteinsimulationen auf JUMP und JUBL
- 12.15 Tom Schröder: Wechselwirkungen von Wurzel und Boden
- 12.45 Mittagspause
- 14.15 Franz Petri: High-Speed-Transportprotokolle für D-Grid
- 14.45 Stefan Krieg: Blue Gene-Architekturen hautnah: Performance-Optimierung am Beispiel eines Lattice-QCD-Kerns
- 15.15 Thomas Lippert: PetaFlop-Architekturen

Termin: Mittwoch, 20.12.2006, 9.30 - 16.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

ZAM/NIC-Veranstaltungen

3D Fluid Monte Carlo Simulations, for the tokamak TEXTOR and future fusion devices

Referent: Derek Harting, IPP

Termin: Mittwoch, 13.12.2006, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Adsorption of molecular layers on metal surfaces - a density functional study

Referent: Prof. Dr. Kurt Schroeder, IFF

Termin: Mittwoch, 13.12.2006, 14.15 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

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