



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 154 • Mai 2007

### Informationsveranstaltung des Gauss Centre for Supercomputing

Im Wissenschaftsforum in Berlin veranstaltete das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) am 14. Mai 2007 einen Informationsnachmittag. Dabei präsentierten der Sprecher des GCS, Prof. Achim Bachem, sowie die Direktoren der GCS-Partnereinrichtungen die Entstehung und den Aufbau des Zentrums, seinen strukturbildenden Einfluss auf das Höchstleistungsrechnen in Deutschland, sowie seine besondere Bedeutung beim Aufbau einer europäischen HPC-Infrastruktur. Nach den Vorträgen nutzten die gut 60 Teilnehmer etwa eine Stunde lang die Gelegenheit, die Repräsentanten des GCS direkt zu befragen. Von besonderem Interesse waren dabei die Ausgestaltung und die Auswirkung der zukünftigen Zusammenarbeit zwischen dem GCS und den regionalen Supercomputer-Zentren. Gefragt wurde auch nach der Einbindung der Supercomputerhersteller in die neu gebildete Struktur sowie nach der Nutzung der GCS-Rechnerressourcen durch Projekte aus der Industrie. Ein weiterer Diskussionspunkt waren mögliche zukünftige Nutzungsmodelle. Die Veranstalter bekundeten ihren Willen und ihre Bereitschaft, die aufgeworfenen Detailfragen und Probleme partnerschaftlich mit allen Beteiligten im High-Performance Computing zu diskutieren und tragfähige Lösungen vorzuschlagen. Informationen zum Gauss Centre finden Sie unter <http://www.gauss-centre.eu>.

### Störung im JuNet

Am 25. April kam es über einen Zeitraum von knapp zwei Stunden zu massiven Störungen der Kommunikation im JuNet. Als Ursache konnte ein fehlerhaft konfigurierter „Managed Switch“ identifiziert werden, der ohne Abstimmung mit dem ZAM am JuNet betrieben wurde. Wir möchten dies zum Anlass nehmen, um noch einmal darauf hinzuweisen, dass Netzwerk-Komponenten nur nach vorheriger Abstimmung mit ZAM oder ZEL am JuNet betrieben werden dürfen.

fen. Nur so kann ein störungsfreier und sicherer Betrieb gewährleistet werden. Insbesondere werden Managed Switches und Router sowie WLAN Access Points ausschließlich zentral vom JuNet-Management installiert und betrieben. (Ansprechpartner: Claudia Berr, Tel. 1559, und Olaf Mextorf, Tel. 2519)

### ZAM Parallel Eigensolver freigegeben

Eine erste Version der am ZAM entwickelten Bibliothek PES (Parallel Eigensolver) zur Berechnung von Eigenwerten und -vektoren einer großen, dünnbesetzten Matrix ist verfügbar. Die Bibliothek basiert auf dem Jacobi-Davidson-Unterraumverfahren und enthält parallele Algorithmen für die Bestimmung ausgewählter Eigenwerte. Für die Matrix kann das CRS-Format (compressed row storage), ein Bandformat oder alternativ ein benutzereigenes Format verwendet werden. Im letzteren Fall muss eine Routine für das Matrix-Vektor-Produkt bereitgestellt werden. Für die Lösung der Korrekturgleichung im Jacobi-Davidson-Verfahren werden alternativ zwei konjugierte Gradientenverfahren mit Vorkonditionierung, ein Bandlöser und der direkte Löser MUMPS (MULTifrontal Massively Parallel Solver) angeboten. Das Einbinden eines eigenen Löser ist ebenfalls möglich. Die Software ist auf JUMP bereits installiert. Für Linux-Rechner steht sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/appliedmath/pes> bereit. Zurzeit lassen sich mit PES Eigenwerte und Eigenvektoren einer reellen symmetrischen Matrix berechnen. Die Erweiterung auf komplexe Matrizen und auf verallgemeinerte Eigenwertprobleme ist in Vorbereitung. (Ansprechpartner: Oliver Bücker, Tel. 3176)

### Cell Cluster Meeting 2007 in Jülich

Im Rahmen der Jülicher Initiative Cell-Cluster (JUICE) fand am 10. und 11. Mai 2007 im ZAM das Cell Cluster Meeting 2007 statt. Mehr als 50 Wissenschaftler diskutierten auf diesem Workshop, wie die Fähigkeiten des Cell-Prozessors op-

timal genutzt werden können, und tauschten erste Erfahrungen mit dieser Architektur aus. Hersteller von Cell-basierter Hardware präsentierten ihre Produkte wie IBM QS20-Blade, Mercury CAB und PlayStation3.

Laufzeitmessungen zu Standardanwendungen aus der Linearen Algebra und Kommunikations-Benchmarks zeigten die Möglichkeiten, aber auch die Grenzen von Architektur und Programmiermodellen auf. Ein weiteres Thema waren Aspekte der Cell-spezifischen Prozessor-Arithmetik. Einige Teilnehmer konnten bereits erste Erfahrungen bei der Portierung von Programmen aus der Vielteilchenphysik, der Gitter-QCD und der Biophysik vorstellen.

Die Abstracts bzw. Folien zu den Präsentationen wurden unter [http://www.fz-juelich.de/zam/juice/cell\\_cluster\\_meeting](http://www.fz-juelich.de/zam/juice/cell_cluster_meeting) zur Verfügung gestellt.

(Ansprechpartner: Willi Homberg, Tel. 2424)

## 27. Kolloquium über Parallelverarbeitung

Am 4. Juni 2007 findet das 27. Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen in der RWTH Aachen statt. Wir möchten insbesondere auf die beiden eingeladenen Vorträge hinweisen: Prof. Hoßfeld wird über „Wirken und Wirkung John von Neumanns“ anlässlich dessen 50. Todestages sprechen. Prof. Jürgen Schnack von der Universität Bielefeld hält einen Vortrag über „Molekulären Magnetismus“. Das detaillierte Programm und weitere Informationen zur Kolloquiumsreihe finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/pkoll>.

(Ansprechpartner: Daniel Mallmann, Tel. 2433)

## OMII-Europe All-Hands Meeting in ZAM

Am 23. und 24. April fand das vierte All-Hands Meeting des EU-Projekts OMII-Europe (Open Middleware Infrastructure Institute for Europe) in der Rotunde des ZAM statt. Das von der EU mit 5 Mio. Euro geförderte Projekt hat das Ziel, generelle Interoperabilität zwischen den vier Grid-Middleware-Systemen CROWN aus China, Globus aus den USA und gLite sowie UNICORE aus Europa zu entwickeln. Insgesamt 41 Teilnehmer von 8 Projektpartnern aus ganz Europa nahmen an dem zweitägigen Meeting teil. Das Meeting ist als großer Erfolg zu werten, da insbesondere die Demos für das im Juni stattfindende Review erfolgreich geprobt wurden. Alle Teilnehmer lobten die exzellente Infrastruktur des FZJ; insbesondere den problemlosen und zuverlässigen Zugang zum schnellen WLAN im FZJ, welches ein ununterbrochenes, gemeinsames Arbeiten der Software-Entwickler sowie die Durchführung der Demos ermöglichte. Weitere Informationen zum Projekt OMII-Europe sind unter <http://www.omii-europe.org> zu finden.

(Ansprechpartner: Dr. Achim Streit, Tel. 6576)

## UNICORE 6.0 beta veröffentlicht

Seit Ende April ist die auf Web-Services basierende und mit OGSA-konforme Version 6.0 der UNICORE Grid-Middleware in der beta-Version auf <http://www.unicore.eu> verfügbar. UNICORE 6.0 zeichnet sich aus durch die Kompatibilität mit Standards (OASIS WSRF 1.2, OGF JSDL 1.0), durch die Nutzung modernster Softwarekomponenten (XFire SOAP Stack, Jetty 6 Web Server), durch zahlreiche Sicherheitstechniken (X.509, Unterstützung von proxy-Zertifikaten, XACML 1.0, Erweiterungsmöglichkeiten für VO-Management) und durch die Unterstützung von JMX zur Administration. Die finale Version von UNICORE 6.0 ist für den Sommer 2007 geplant, in der dann u.a. Portal-Technologien sowie grundlegende Workflow-Unterstützung integriert sind. Erweiterte Workflow-Funktionalitäten sowie Data-Streaming sind für die Version 6.1 Ende 2007 vorgesehen. Die Umstellung existierender UNICORE 5 Server-Installationen im Produktionseinsatz wird erst mit Erscheinen der finalen Version empfohlen. Middleware-Entwicklern wird jedoch nahegelegt, sich bereits jetzt in die beta-Version einzuarbeiten.

Weitere Informationen zu UNICORE 6.0, Software und Quell-Code, API-Dokumentation sowie FAQs sind unter <http://www.unicore.eu> zu finden.

(Ansprechpartner: Dr. Bernd Schuller, Tel. 8736)

## Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2007-01 Einrichten eines Linux Printservers mit dem Common Unix Printing System
- IB-2007-02 Report on the Jülich Blue Gene/L Scaling Workshop 2006
- IB-2007-03 Dokumentation der GALA-Software zur Datenbereinigung und Datenreduktion
- IB-2007-05 JULI Project – Final Report

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

### Residual Entropy of Ordinary Ice from Multicanonical Simulations

Referent: Prof. Bernd A. Berg, Florida State University, Tallahassee, USA

Termin: Dienstag, 22.5.2007, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

### Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen

Termin: Montag, 4.6.2007, 9.30 - 17.00 Uhr

Ort: RWTH Aachen, Hörsaal AH IV

Info: <http://www.fz-juelich.de/zam/pkoll/2007-06.html>

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