



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 123 • April 2004

### Dark-Fiber zu den Aachener Hochschulen

Ende 2003 wurde eine Glasfaser-Verbindung zu den Aachener Hochschulen realisiert. Je vier Faserpaare verbinden das FZJ mit der RWTH Aachen und der FH Aachen / Abteilung Jülich, die durch eigene Fasern auch mit dem Aachener Standort der FH verbunden ist. Die Verbindungen sind als dark-fiber ausgeführt, d.h. alle aktiven Netzwerkkomponenten werden von den beteiligten Einrichtungen selbst betrieben. Kommunikationstechniken und -Protokolle können daher flexibel eingesetzt werden, was z.B. zur Erhöhung der Kapazität genutzt werden kann – bei Bedarf auf mehrere 100 Gigabit pro Sekunde.

Über diese Fasern können nun zwischen Instituten der drei beteiligten Einrichtungen im Rahmen von Kooperationen oder gemeinsamen Projekten anspruchsvolle Kommunikationsverbindungen geschaltet werden, die über die Möglichkeiten des Standard-G-WiN-Anschlusses hinaus gehen, bis hin zur exklusiven Nutzung eines Faserpaares.

Seit dem 2. März wird über eines der Faserpaare der Zugang des FZJ zum G-WiN-Anschlusspunkt in Aachen geleitet, der bisher über eine von der Telekom bereit gestellte Zuleitung erfolgte. Die damit verbundenen Einsparungen werden teilweise genutzt, um die G-WiN-Anbindung des FZJ durch einen direkten 34-Mbps-Backup-Zugang zum G-WiN-Kernnetzknotten in Birlinghoven abzusichern.

Der Trassenverlauf ermöglichte es auch, die Verbindung nach Aachen mit geringem Aufwand durch eine Dark-Fiber-Stichleitung zum Technologiezentrum Jülich zu ergänzen.

### MaTA-Prüfung im Februar 2004

In der letzten Februarwoche haben alle 29 Auszubildenden des Forschungszentrums und zwei 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 Ausbil-

dung 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: ICG (5 Auszubildende), IFF (3), IKP (3), IME, IPP (2), IPV, ISG (2), ISR, PTJ, S, STE, ZAM (3), ZAT, ZB, ZEL (2) und ZFR. Wir gratulieren allen Absolventen und danken den Betreuern und Dozenten!

Insgesamt 10 Auszubildende erreichten die Note „Gut“. Der beste Absolvent, Benjamin Bruns (ISG), hat sogar mit „Sehr gut“ abgeschlossen. Diese Absolventen wurden auf der Abschiedsfeier im ZAM am 4. März von Klaus Reiner Schubert (P-Z) mit einem Buchgeschenk ausgezeichnet.

Die meisten Absolventen werden das ausbildungsbegleitende Studium der Technomathematik an der FH Aachen/Jülich mit dem Hauptstudium fortsetzen und können in weiteren vier Semestern das Diplom erreichen. Einige nutzen die Möglichkeit einer halbjährigen Weiterbeschäftigung zur beruflichen Orientierung, andere haben bereits zum 1. März eine Stelle außerhalb des Forschungszentrums angetreten.

### Job-Scheduling auf Jump

Mit dem neuen IBM-Supercomputer Jump hat das Forschungszentrum Jülich ein Instrument zur Lösung großer, rechenzeit- und speicherintensiver Probleme beschafft. Von einem Job können bis zu 32 Knoten, d.h. 1024 Prozessoren mit 4 TByte Hauptspeicher angefordert werden.

Auf Jump werden die auszuführenden Jobs vom LoadLeveler mit Hilfe des „Backfill-Schedulers“ ausgewählt. Der Scheduler sorgt dafür, dass kein Benutzer das System monopolisiert und dass auch kein Job beliebig lange warten muss.

Wenn der nächste zu bearbeitende Job mehr Knoten als verfügbar anfordert, würden ohne Backfilling so lange keine neuen Jobs gestartet, bis die benötigte Anzahl vorrätig ist – dies kann zu Leerzeiten führen. Der Backfill-Scheduler kann diese „Lücken“ optimal füllen. Jobs, die ein kürzeres *wall\_clock\_limit* anfordern als die zu erwartende Restzeit des letzten noch aktiven Jobs auf den benötigten Knoten, werden sofort ausgeführt und profitieren so vom Backfilling.

Wir empfehlen daher, das *wall\_clock\_limit* der Jobs zu überprüfen, gegebenenfalls nach unten zu korrigieren oder Jobs geeignet in kürzere aufzuteilen. Dadurch erhalten die Jobs eine bessere Turnaround-Zeit und Jump wird optimal genutzt. (Ansprechpartnerin: Jutta Docter, Tel. 6763)

### **Betriebsende des Zentralen AIX-Rechners**

Mit der Inbetriebnahme des Jump-Systems ist der separate Betrieb eines AIX-Compute-Servers nicht mehr sinnvoll, zumal die Hardware des Servers nicht mehr dem Stand der Technik entspricht. Daher wird der Betrieb zum 30.9.2004 eingestellt.

Viele Arbeiten, die die umfangreiche Software des zentralen AIX-Angebots nutzen, können ohne große Umstellung auch auf den vom ZAM unterstützten Linux-Workstation-Gruppen durchgeführt werden. Für spezielle Probleme, insbesondere für die Vor- und Nachbereitung von parallelen Programmläufen, wird eine Migration vom zentralen AIX zum Jump-System empfohlen. Dazu müssen sich die Nutzer über die Web-Seite „ZAMonline“ für Jump registrieren. Die Rechenzeit auf Jump ist grundsätzlich kontingentiert. Für den Übergang auf Jump wird den Instituten, wenn nicht schon vorhanden, bei Bedarf ein Startkontingent eingerichtet, das sich am bisherigen Verbrauch auf dem zentralen AIX orientiert und bis zum 1. Juli vorgehalten wird. Für Arbeiten nach dem 1. Juli müssen die Institute bei WTP entsprechenden Rechenzeitbedarf anmelden.

Die Nutzer des zentralen AIX werden gebeten, rechtzeitig die dort vorhandenen Programme und Daten zu sichten und gegebenenfalls auf andere Systeme zu übertragen, da ein Zugriff auf den zentralen AIX-Server nach dem 30.9.2004 definitiv nicht mehr möglich ist. Eine Übersicht über die vorhandene Software auf Jump finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/neues/jump-software>. (Ansprechpartner: Beratung, Tel. 6400)

### **Winterschule über Computational Soft Matter**

Es hat nun schon eine gewisse Tradition, dass das NIC alle zwei Jahre unter der Regie des ZAM eine Winterschule zu einem Thema der Computational Sciences veranstaltet und damit die erfolgreichen Veranstaltungen zur Ausbildung im Wissenschaftlichen Rechnen fortsetzt. Diesmal stand die Ferienschule, die vom 29. Februar bis zum 6. März 2004 im Gustav-Stresemann-Institut (GSI) in Bonn stattfand, unter dem Titel „Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins“.

Das Programm richtete sich an Studenten in höheren Semestern, Doktoranden und PostDocs der Theoretischen Physik, Chemie und Biophysik und wurde von Norbert Attig (ZAM, Jülich), Kurt Binder (Univ. Mainz), Helmut Grubmüller (MPI für biophysikalische Chemie, Göttingen) und Kurt Kremer (MPI für Polymerforschung, Mainz) ausgearbeitet.

Für die Vorträge konnten 15 herausragende Wissenschaftler aus deutschen und internationalen Hochschulen und Forschungseinrichtungen gewonnen werden, die im Bereich der Computational Sciences an der Spitze der Entwicklung arbeiten.

Interessenten mussten eine Bewerbung um Teilnahme mit Lebenslauf und Beschreibung ihres Arbeitsgebietes zusammen mit einem Empfehlungsschreiben Ihres Mentors einreichen. Aus diesen Bewerbungen wurden dann nach wissenschaftlichen Kriterien 80 Teilnehmer ausgewählt.

Das interdisziplinär ausgerichtete Programm erwies sich als überaus attraktiv und die Vorträge waren auf hohem Niveau. Sie wurden ergänzt durch mehr als 40 Posterbeiträge der Teilnehmer, die damit ihren Anspruch unterstrichen, aktiv am wissenschaftlichen Erfahrungsaustausch zu partizipieren. Abgerundet wurde das Programm durch einen Besuchsnachmittag im Forschungszentrum, bei dem im ZAM-Neubau Vorträge zur Soft-Matter-Forschung in Jülich, zum Supercomputing im NIC und zu parallelen Programmiermodellen und Software-Werkzeugen präsentiert wurden.

Die Lecture Notes der Vorträge sowie die Abstracts zu den Posterbeiträgen sind in der Publikationsreihe des NIC erschienen. Online-Versionen der einzelnen Beiträge stehen im Internet unter der Adresse <http://www.fz-juelich.de/nic-series>. (Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

### **Anträge zur Nutzung der Supercomputer**

Die Bewilligungen für Projekte des NIC und des Forschungszentrums (VSR-Projekte) auf den Supercomputern enden am 30. Juni 2004. Neuanträge oder Verlängerungsanträge müssen bis zum 30. April gestellt werden. Details zur Antragstellung finden Sie im WWW auf folgenden Seiten:

für NIC-Projekte: <http://www.fz-juelich.de/nic/Rechenzeit/>  
für VSR-Projekte: <http://www.fz-juelich.de/vsr/>

Bitte füllen Sie die Anträge online aus. Inhaltliche Fragen richten Sie bitte an Dr. Manfred Kremer (NIC, Tel. 3660).

### **ZAM/NIC-Veranstaltungen**

#### **Nutzung von Unix**

Referenten: Meike Wegmann, Thomas Plaga, ZAM

Termin: 19. - 20.4.2004, 9.00 - 16.30 Uhr, und  
21.4.2004, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [M.Wegmann@fz-juelich.de](mailto:M.Wegmann@fz-juelich.de), Tel. 6565

#### **Programmierung in Java**

Referentin: Anke Visser, ZAM

Termin: 26. - 28. April 2004, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

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

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