



## ZAM aktuell

*Hochleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik*

*Nr. 131 • Januar/Februar 2005*

### **Ernennung zum Professor**

Dr. Dr. Thomas Lippert, seit einem Jahr Leiter des ZAM und Mitglied des NIC-Direktoriums, wurde am 22.12.2004 zum Professor an der Bergischen Universität Wuppertal ernannt. Nach dem „Jülicher Modell“ bekleidet er dort den Lehrstuhl für Computergestützte Theoretische Physik im Fachbereich C – Mathematik und Naturwissenschaften. Er ist auch Mitglied im Interdisziplinären Zentrum 2: Informatik.

Durch die Ernennung werden die langjährigen fächerübergreifenden Forschungsarbeiten anerkannt, die Thomas Lippert im Wissenschaftlichen Rechnen – von der Simulation in der Theoretischen Physik über die Angewandte Mathematik bis zur Informatik – durchgeführt hat.

Die Mitarbeiter des ZAM und der NIC-Forschungsgruppe haben Herrn Lippert bereits in einer kleinen Feier zur Professur beglückwünscht. ZAM aktuell schließt sich dem an und gratuliert ebenfalls sehr herzlich!

### **Wissenschaftsrat empfiehlt die Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner**

Der neue Jülicher Supercomputer Jump belegt Platz 30 auf der aktuellen TOP500-Liste vom November 2004. Wenn Anfang 2006 der dann mit 33 Teraflop/s Spitzenleistung leistungsstärkste deutsche Rechner am Leibniz-Rechenzentrum in Garching installiert ist, wird gleichzeitig in den USA ein Rechner in Betrieb sein, der das Achtzehnfache dieser Leistung aufbringen kann. Unter dem Eindruck solcher Zahlen hat der Wissenschaftsrat im November eine neue Empfehlung zur künftigen Gestaltung des Höchstleistungsrechnens in Deutschland und Europa herausgegeben.

Der Wissenschaftsrat stellt fest, dass die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb ist und in Europa ein fortlaufender qualitativer und quantitativer Ausbau der Rechnerversorgung erfolgen muss, um mit USA, Japan und neuerdings auch China wissenschaftlich weiter konkurrieren zu können.

Insbesondere die Einrichtung von Höchstleistungsrechnern der obersten Leistungsklasse ist dafür erforderlich.

Die Kosten für solche international führenden Systeme belaufen sich auf etwa 200 Mio. Euro und können damit nicht mehr ohne weiteres von einem Land allein finanziert werden. Daher empfiehlt der Wissenschaftsrat, Höchstleistungsrechner der obersten Leistungsklasse in Zukunft durch den Zusammenschluss nationaler Ressourcen auf europäischer Ebene einzurichten. Aufgrund der Standzeit eines Höchstleistungsrechners von fünf bis sechs Jahren wird die Einrichtung von drei europäischen Höchstleistungsrechnern vorgeschlagen. Wenn alle zwei bis drei Jahre an einem Zentrum ein neues System der Spitzenklasse installiert wird, steht infolge dieser Innovationsspirale jeweils ein Rechner der aktuell höchsten Klasse bereit. Die deutschen Supercomputerzentren werden bereits seit einigen Jahren in diesem Rhythmus ausgebaut.

Die neuen europäischen Rechner werden der bisher in Deutschland bestehenden Leistungspyramide eine neue Spitze hinzufügen. Die bestehenden nationalen Supercomputerzentren müssen bestehen bleiben und weiter ausgebaut werden. Um die langjährigen Erfahrungen und die vorhandene Infrastruktur nutzen zu können, sollen die europäischen Zentren an den bisher national agierenden Supercomputer-Zentren entstehen. Da Deutschland über ausgezeichnete Erfahrungen im Bereich des Höchstleistungsrechnens verfügt, sollte es sich als Standort für einen europäischen Höchstleistungsrechner bewerben.

Als Grundlage der Argumentation beschreibt die Empfehlung zudem für ausgewählte Wissenschaftsgebiete, welche Problemstellungen auch künftig nur durch Simulationen auf Rechnern der höchsten Leistungsklasse angegangen und gelöst werden können. Im Einzelnen werden die folgenden Gebiete behandelt: Klima- und Erdsystemforschung, Nanostrukturphysik, Festkörperphysik, Strömungsmechanik, Astrophysik, Quantenchromodynamik, Materialforschung, Chemie, Molekulardynamik, Polymerforschung

und Biophysik. In der Empfehlung wird konstatiert, dass jede Verbesserung der Rechnerleistung neue Fragestellungen ermöglicht und damit neuen Rechenbedarf initiiert, und man folgert daraus, dass der künftige Bedarf an Rechenkapazität unbegrenzt ist.

Die „Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner“ ist veröffentlicht unter <http://www.wissenschaftsrat.de/texte/6308-04.pdf>

## **ZAM/NIC-Workshop über „Fast Algorithms for Long-Range Interactions“**

Zusammen mit dem Frankfurt Institute of Advanced Studies (FIAS) veranstaltet das ZAM vom 7. bis 8. April 2005 einen multidisziplinären Workshop über effiziente Algorithmen zur Behandlung von langreichweitigen Wechselwirkung in Vielkörperproblemen. Schnelle „Coulomb-Solver“ wie Tree-Codes, die Fast-Multipole-Methode und Particle-Mesh-Ewald werden in diversen Bereichen wie Astrophysik, theoretischer Chemie, Plasmaphysik und angewandter Mathematik immer häufiger eingesetzt, um Systeme mit sehr großen Teilchenanzahlen (bis  $10^9$ ) zu untersuchen. Ziel des Workshops ist, Forscher aus verschiedenen Fachrichtungen zusammenzubringen und einen intensiven Erfahrungsaustausch über diese Algorithmen zu ermöglichen. Weitere Information und ein Anmeldeformular für den Workshop werden unter <http://www.fz-juelich.de/fcs> angeboten. (Ansprechpartner: Dr. Paul Gibbon, Tel. 1499)

## **TSM Backup: Sicherung Ihrer Daten**

Das ZAM bietet seit vielen Jahren mit TSM einen Backup-Dienst an, mit dem die Daten von PCs und Workstations im JuNet automatisch oder vom Benutzer initiiert gesichert werden können. Wir haben festgestellt, dass viele der 2000 für den Backup-Dienst registrierten Rechner seit langem keine Sicherung durchgeführt haben. Das kann zwei Gründe haben: Der Rechner existiert nicht mehr oder der Nutzer bzw. Administrator nutzt TSM nicht mehr. Im letzteren Falle empfehlen wir dringend, die Daten regelmäßig zu sichern oder an der automatischen Sicherung teilzunehmen.

An die Administratoren von im TSM registrierten Rechnern, die seit dem 1. Januar 2004 nicht mehr gesichert wurden, werden wir im Februar eine E-Mail senden, die auf diesen Umstand hinweist. Wenn bis Ende März kein erneuter Backup erfolgt ist, gehen wir davon aus, dass der Rechner nicht mehr existiert. Alle Daten des fraglichen Rechners werden dann im April aus dem TSM-System entfernt und die Registrierung des Rechners gelöscht. Die dadurch frei werdenden Lizenzen können ohne zusätzliche Kosten für das Forschungszentrum zur Sicherung weiterer Rechner

genutzt werden. Diese Aktion wird in Zukunft jedes Jahr wiederholt. (Ansprechpartner: Lothar Wollschläger, Tel. 6420)

## **Jetzt 24-Stunden-Jobs auf Jump möglich**

Jump ist seit einem Jahr erfolgreich in Betrieb. Aufgrund der sehr hohen Stabilität ist die bisher bestehende Beschränkung der maximalen Job-Laufzeit auf vier Stunden nicht mehr erforderlich.

Das wall-clock-limit wird für alle Jobs auf 24 Stunden angehoben. Dies gilt sowohl für Jobs, die einen oder mehrere Knoten anfordern, als auch für Jobs, die mit anderen zusammen auf einem Knoten laufen. Es wird jedoch daran erinnert, dass kein automatisches Checkpointing während der Laufzeit stattfindet, so dass im Fall eines Ausfalls von Jump die bis dahin verbrauchte Rechenzeit verloren ist und nicht ersetzt wird. Wir empfehlen bei langlaufenden Jobs eigene Checkpoints an geeigneten Stellen des Programmablaufs zu schreiben.

Jobs, die eine kürzere Verweilzeit angeben, haben die Chance, früher abgearbeitet zu werden. Der Backfill-Scheduler kann damit Lücken füllen, die zur Bereitstellung freier Knoten für Mehrknotenjobs entstehen. Bitte geben Sie die Verweilzeit so genau wie möglich an. (Ansprechpartnerin: Jutta Docter, Tel. 6763)

## **Neuer IT-Sicherheitsbeauftragter**

Nach dem Ausscheiden von Herrn Dr. Jürgen Meißburger hat der Vorstand Herrn Dr. Thomas Eickermann mit Wirkung vom 1. Dezember 2004 zum neuen IT-Sicherheitsbeauftragten des Forschungszentrums ernannt. In dieser Funktion ist er für die übergeordnete Planung und Koordinierung aller IT-sicherheitspezifischen Themen im Forschungszentrum zuständig. Er wird bei diesen Aufgaben durch das IT-Sicherheitsmanagement-Team, das ZAM und nicht zuletzt durch die Ansprechpartner für IT-Sicherheit in den Instituten unterstützt. Informationen zum IT-Sicherheitsmanagement sowie aktuelle Warnungen, Veranstaltungshinweise und technische Dokumentation zu dem Thema finden Sie im Web über die Einstiegsseite <http://www.fz-juelich.de/zam/sicherheit>.

## **ZAM/NIC-Veranstaltungen**

### **Bidiagonale Singulärwertzerlegung mit dem MRRR-Algorithmus**

Referent: Paul Willems, Fachbereich Mathematik, Universität Wuppertal

Termin: Dienstag, 1.2.2005, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

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