



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 132 • März 2005

Cray XD1 installiert

Zum Jahreswechsel wurde im ZAM ein neues Rechner-system der Firma Cray installiert, das zunächst für Forschungsarbeiten im Rahmen des Viola-Projekts (Vertically Integrated Optical Testbed for Large Applications) sowie für Arbeiten zu Field Programmable Gate Arrays (FPGA) eingesetzt wird. Das System Cray XD1 ist ein Linux-Cluster aus 36 SMP-Knoten, die über ein Hochgeschwindigkeits-netzwerk miteinander verbunden sind. Jeder SMP-Knoten enthält zwei AMD-Opteron-Prozessoren, die eine theoretische Grenzleistung von je 4,4 GFLOPS haben. Damit ergibt sich für das Gesamtsystem eine Spitzenleistung von ca. 317 GFLOPS. Das RapidArray-Verbindungsnetzwerk basiert auf der HyperTransport-Technologie von AMD und zeichnet sich durch eine hohe Kommunikationsbandbreite (1 GB/s pro Verbindung und Richtung) sowie eine außerordentlich niedrige Latenz von 1,8 μ s aus. Letzteres begünstigt vor allem Message-Passing-Anwendungen mit kleinen Nachrichtenlängen. Informationen über das System sind unter <http://www.fz-juelich.de/zam/cray-xd1> abrufbar. (Ansprechpartner: Ulrich Detert, Tel. 6434)

Gaststudenten-Programm 2005

Das NIC/ZAM bietet auch im Sommer 2005 ein Gaststudenten-Programm an. Es gibt Studenten der Natur- und Ingenieurwissenschaften, der Informatik und der Mathematik an Universitäten frühzeitig die Möglichkeit, sich mit verschiedenen Aspekten des wissenschaftlichen Rechnens vertraut zu machen. Die Teilnehmer arbeiten zusammen mit Wissenschaftlern, vornehmlich im ZAM, an aktuellen Forschungs- und Entwicklungsthemen. Je nach Vorkenntnissen und Interessen kommen Aufgaben aus vielfältigen Arbeitsbereichen in Frage; dazu gehören Mathematik, Physik, Chemie, Programmierwerkzeuge, Visualisierung, Betriebssysteme und Kommunikation. Einen Schwerpunkt bildet die Nutzung von Höchstleistungsrechnern.

Von den Teilnehmern wird erwartet, dass sie Kenntnisse und Erfahrungen in computerorientierten Teilgebieten ihrer Fächer besitzen. Voraussetzung ist, dass sie das Vordiplom oder den Bachelor haben, das Diplom aber noch nicht abgelegt haben. Zusätzlich ist eine Empfehlung eines Professors erforderlich. Der Aufenthalt in Jülich erstreckt sich über zehn Wochen vom 8. August bis zum 14. Oktober 2005. Es wird um frühzeitige schriftliche Bewerbung gebeten, spätestens bis zum 30. April 2005. Unter <http://www.fz-juelich.de/zam/gaststudenten/> finden Sie ausführliche Informationen. (Ansprechpartner: Dr. Rüdiger Esser, Tel. 6588)

OpenMolGRID erfolgreich abgeschlossen

Das von der EU geförderte und vom ZAM koordinierte Projekt OpenMolGRID (Open Computing Grid for Molecular Science and Engineering) hat ein System zur Automatisierung der Drug-Discovery Pipeline entwickelt und im Rahmen des Abschluss-Reviews erfolgreich demonstriert. Das auf der Basis von UNICORE entwickelte System bietet seinen Benutzern die komfortable Erstellung von komplexen Workflows. Dabei werden Daten automatisch konvertiert, Zielsysteme zur Ausführung ausgewählt und daten-parallele Anwendungen auf die verfügbaren Rechner im Grid verteilt. Dadurch werden Ergebnisse, z.B. bei der Berechnung der Zytotoxizität neuer Stoffe, erheblich schneller erzeugt als bei der bisherigen manuellen Vorgehensweise. Zusätzlich wurde damit die Grundlage für die Standardisierung der Prozessabläufe geschaffen. Weitere Informationen zu den Ergebnissen bietet <http://www.openmolgrid.org>. (Ansprechpartnerin: Mathilde Romberg, Tel. 3703)

Datenbank-Migration auf Oracle 10g

Die derzeitige Produktionsdatenbank des Forschungszentrums, Oracle 8i (FZJA), ist seit April 1999 in Betrieb. Aufgrund von Hardware- und Betriebssystemanforderungen sowie Entwicklungen bei Oracle im Bereich Administration,

Performance und Skalierbarkeit planen wir, auf Oracle 10g zu wechseln. Diese Version ist schon seit einiger Zeit verfügbar.

Im Zeitraum vom 21.3. bis zum 21.5.2005 steht eine Testversion mit Originaldaten – Stand 25.2.2005 – zur Verfügung. Wir bitten alle Oracle-Benutzer bzw. Anwendungsbetreuer, ihre Anwendungen auf Lauffähigkeit zu überprüfen. Dies gilt im Besonderen für Oracle-Anwendungen, die von Fremdfirmen bereitgestellt werden. Der Datenbankname lautet in der Testphase FZJG.

Nach Ablauf der Testphase wird die Produktionsdatenbank am 22. Mai mit aktualisierten Daten auf die neue Version umgestellt. Bei Fragen und bei auftretenden Inkompatibilitäten wenden Sie sich bitte an Walter Elmenhorst (Tel. 6762) oder Bernd von Studnitz (Tel. 6567).

Ende des CRAY SV1-Betriebs

Im Rahmen der Fortentwicklung der Rechnersysteme plant das ZAM, den Rechner CRAY SV1 und den angeschlossenen Fileserver CRAY J90 zum 30.6.2005 außer Betrieb zu nehmen. Den Benutzern wird empfohlen, für die am 1.7.2005 beginnende Rechenzeitperiode Ressourcen auf dem IBM-Supercomputer Jump zu beantragen. Bei Bedarf wird Unterstützung bei der Portierung von Anwendungen gegeben.

Vom 1.7.2005 an kann auch auf die Benutzerdaten der Cray-Systeme in HOME, WORK und insbesondere ARCHIVE nicht mehr zugegriffen werden. Wir bitten daher alle Benutzer der CRAY SV1, ihre Daten zu sichten und die noch benötigten Dateien auf der CRAY SV1 gegebenenfalls zu konvertieren und auf ein anderes Rechnersystem, z.B. den IBM-Supercomputer Jump, zu übertragen.

Nach dem Abschalten der Cray-Systeme wird ein Zugriff auf diese Daten definitiv nicht mehr möglich sein. (Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

IBM-Benutzertreffen ScicomP 11

Das diesjährige Benutzertreffen der IBM Scientific System User Group (ScicomP) findet vom 31. Mai bis 3. Juni in Edinburgh, Schottland, statt. Das Treffen ist offen für jeden Nutzer eines IBM-Supercomputers. Dr. Bernd Mohr vom ZAM ist beteiligt an der Organisation und Programmgestaltung. Neben Tutorials präsentieren IBM-Mitarbeiter das Neueste über Hardware- und Software-Roadmaps für große Systeme, Werkzeuge zur Entwicklung von Anwenderprogrammen und Techniken zur Programmierung, Leistungsanalyse und Optimierung. Die Benutzer des Supercomputers Jump sind eingeladen, über ihre Erfahrungen mit der Programmierung, Portierung, Wartung und Ausführung großer wissenschaftlicher Anwendungen auf IBM-Systemen zu berichten. Weitere Einzelheiten findet man auf der ScicomP-

Webseite <http://www.spscicomp.org>. (Ansprechpartner: Dr. Bernd Mohr, Tel. 3218)

MaTA-Prüfung im Februar 2005

In der letzten Februarwoche haben 25 Auszubildende des Forschungszentrums und drei 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 Ausbildung 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 (8 Auszubildende), IBT, IKP (2), IME (2), INC, IPP, IPV, ISG (2), IWV, STE, ZAM (2), ZAT, ZEL und ZFR. Wir gratulieren allen Absolventen und danken den Betreuern und Dozenten!

Insgesamt 6 Auszubildende erreichten die Note „Gut“. Die beste Absolventin, Anne Meckelholt (ZAT) aus Bocholt, hat sogar mit „Sehr gut“ abgeschlossen. Diese Absolventen werden auf der Abschiedsfeier im ZAM am 10. März von dem Leiter der Personalabteilung Herrn Müller-Montuë mit einem Buchgutschein 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 das Forschungszentrum verlassen. (Ansprechpartner: Prof. Paul Jansen, Tel. 6430)

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Challenges From Large-Scale Simulation: The Earth Simulator's Lessons

Referent: Hisashi Nakamura, RIST Tokyo
Termin: Donnerstag, 17.3.2005, 11.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Objekt-orientierte Programmierung in C++ für C-Programmierer

Referenten: Dr. Bernd Mohr, Günter Egerer, ZAM
Termin: 5. - 7.4. und 11. - 13.4. 2005, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an B.Mohr@fz-juelich.de, Tel. 3218

Visualisierung von Molekülen

Referent: Dr. Oliver Passon, ZAM
Termin: Donnerstag, 14.4.2005, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an O.Passon@fz-juelich.de, Tel. 6423

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