# Forschungszentrum Jülich



# ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner Datenkommunikation Kooperatives Computing Mathematik

Nr. 142 • März 2006

## Neuer Rechner IBM Blue Gene/L eingeweiht

Am 6. März wurde in Jülich eine neue Ära des Höchstleistungsrechnens eingeläutet: BMBF-Staatssekretär Thomas Rachel gab gemeinsam mit NRW-Innovationsminister Prof. Andreas Pinkwart den Startschuss für Europas schnellsten Supercomputer mit einer Leistung von 45,8 TeraFlop/s. Unter den rein wissenschaftlich orientierten Forschungseinrichtungen steht das Forschungszentrum Jülich damit sogar weltweit auf Platz 1.

Der Supercomputer JUBL (Jülicher Blue Gene /L) wurde von IBM gebaut. Seine neue Technologie gilt als Schlüssel zu grundlegenden Erkenntnissen in Biologie, Chemie, Physik und Klimaforschung. Sie wird Materialwissenschaftlern, Nanotechnologen und Energieforschern Wege zu völlig neuen Anwendungen eröffnen.

"Wir sind begeistert, dass wir in Jülich weltweit zu den ersten Anwendern dieser neuen Technologie gehören dürfen und dass unsere Tests die Fähigkeiten des Rechners eindrucksvoll bestätigen", sagte Prof. Joachim Treusch, Vorstandsvorsitzender des Forschungszentrums Jülich, anlässlich der Einweihung. "In Deutschland und Europa wird der Bedarf an Rechenzeit in den kommenden fünf Jahren mehr als tausendfach ansteigen. Deshalb müssen wir die Supercomputer im Forschungszentrum Jülich weiterhin ganz massiv ausbauen. Davon lebt nicht nur die Jülicher Forschung, sondern vor allem auch die Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren und unsere deutsche und europaweite Nutzergemeinde an Universitäten und Forschungseinrichtungen."

"Mit Blue Gene eröffnen sich bisher nicht gekannte Perspektiven für die wissenschaftliche Forschung", sagte Prof. Herbert Kircher, Leiter der Böblinger IBM Deutschland Entwicklung GmbH. "Die Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Jülich ist für IBM von großer Bedeutung, und wir planen bereits die gemeinsame Entwicklung der nächsten Generation von Supercomputern."

"Das Forschungszentrum hat in den vergangenen 20 Jahren bewiesen, dass es weltweit eine Spitzenadresse im Supercomputing ist. Der heutige Tag ist ein gutes Signal dafür, dass Jülich auch künftig ein unentbehrliches Zentrum für das Höchstleistungsrechnen ist", sagte Thomas Rachel, parlamentarischer Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung und Forschung.



Einweihung von JUBL: Prof. Herbert Kircher, IBM; Minister Prof. Andreas Pinkwart; Staatssekretär Thomas Rachel; FZJ-Vorstand Prof. Joachim Treusch; NIC-Direktor Prof. Thomas Lippert (von links nach rechts).

Enthusiastisch äußerte sich auch Nordrhein-Westfalens Innovationsminister Prof. Andreas Pinkwart: "Der neue Superrechner ist ein Hightech-Werkzeug, das die Forschungsbedingungen in Jülich auf Weltniveau hält. Strategisch ist er ein großer Schritt hin zu dem Ziel, Standort eines europäischen Höchstleistungsrechenzentrums zu werden, was wir von Seiten der Landesregierung nach Kräften unterstützen."

"Blue Gene ist das Paradebeispiel für den gerade stattfindenden Paradigmenwechsel im Höchstleistungsrechnen", erklärte Prof. Thomas Lippert, geschäftsführender Direktor des John von Neumann-Instituts für Computing, in dem der Jülicher Rechner angesiedelt ist. Die neue Architektur erzielt ihre einzigartige Rechenleistung durch den parallelen Betrieb sehr vieler Strom sparender Prozessoren - insgesamt 16384 - und das bedeutet größte Rechnerleistung auf allerkleinstem Raum bei niedrigem Energieverbrauch. Lippert: "Allein diese Strategie wird es uns in den kommenden drei Jahren ermöglichen, die unvorstellbare Zahl von einer Billiarde Rechenoperationen in der Sekunde (1 PetaFlop/s) auf kostengünstige Weise zu erreichen. Dann endlich kann eine Vielzahl von Rechenproblemen in Wissenschaft und Ingenieurwesen, von so genannten Grand Challenges, gelöst werden."

Das John von Neumann-Institut verfolgt für die Helmholtz-Gemeinschaft ein duales Rechnerkonzept. Die neuen Blue Gene-Türme in der Jülicher Rechnerhalle werden ergänzt durch den bereits vorhandenen Supercomputer JUMP. Da Anwendungen mit größtem Rechenbedarf in der Zukunft auf JUBL gerechnet werden, haben die Nutzer nun mehr Platz, um mit JUMP ihre datenintensiven Aufgaben zu rechnen. "Für die vom BMBF bzw. der EU geförderten e-Science-Projekte D-Grid und DEISA bauen wir zur Zeit ein Grid-System auf, das den Anwendern in ganz Europa einen komfortablen Zugang zu unserem Rechnerkomplex gestattet und die optimale Einbindung der Helmholtz-Zentren sowie deutscher Universitäten und Forschungsinstitute ermöglicht", freut sich Lippert.

Simulationen mit Supercomputern haben sich zum dritten Standbein der Forschung neben Theorie und Experiment entwickelt und sind unverzichtbar geworden für Forschung und Entwicklung und insbesondere fachübergreifende Fragestellungen. JUBL potenziert diese Schlüsselkompetenz des Forschungszentrums Jülich und eröffnet für Physik, Materialforschung und Nanotechnologie eine neue Dimension des Rechnens. Aber auch die Lebenswissenschaften, speziell Biologie, Medizin und Umweltforschung - etwa Analysen der Schadstoffausbreitung in Erdreich und Atmosphäre - sind Hauptnutzer der Jülicher Rechner. Mehr als 200 europäische Forschergruppen nutzen die Rechenkapazität im Forschungszentrum Jülich. Ob Klima- und Erdsystemforschung oder Biophysik und Bioinformatik: Viele Berechnungen für Wissenschaft und Anwendung sind heute schon "made in Jülich".

Mit JUBL geht das Forschungszentrum Jülich einen weiteren großen Schritt hin zum Standort eines europäischen Höchstleistungsrechenzentrums, wie es im 7. Forschungs-Rahmenprogramm der EU eingerichtet werden soll.

(aus der FZJ-Pressemitteilung vom 6.3.2006)

(Info zum Rechner: http://www.fz-juelich.de/zam/ibm-bgl)

#### NIC-Symposium 2006

Vom 1. bis 3. März fand zum dritten Mal das NIC-Symposium statt. Es trafen sich wieder über 100 Wissenschaftler aus den unterschiedlichsten Fachgebieten, die die Rechner des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) für ihre Forschungen einsetzen.

Zur Einführung stellte Prof. Thomas Lippert die Strategie des NIC auf dem Wege zum PetaFlop/s-Computing im europäischen Kontext dar. In 14 Vorträgen wurden dann an zwei Tagen herausragende Ergebnisse aus den Projekten präsentiert, die auf dem IBM-Computer JUMP in Jülich sowie auf den APE-Rechnern in Zeuthen erzielt wurden. JUMP war das Hauptarbeitspferd in den letzten zwei Jahren und wurde von den Benutzern intensiv eingesetzt. Das Interesse der Nutzer an dem Rechner zeigt sich auch darin, dass im Jahre 2005 das Siebenfache der verfügbaren Rechenzeit beantragt wurde.

Einen umfassenderen Überblick über die Ergebnisse der Projekte geben die Proceedings zum Symposium, die 45 Beiträge aus den am NIC bearbeiteten Projekten enthalten. Sie wurden von den Gutachtern der Rechenzeitkommission des NIC ausgewählt und zeigen die Vielfalt der am NIC bearbeiteten Projekte aus den Gebieten Astrophysik, Chemie, Elementarteilchenphysik, Materialwissenschaft, Kondensierte Materie, Polymere, Erde und Umwelt, Informatik und numerische Mathematik sowie weiteren Fachgebieten Am dritten Tag des Symposiums wurde im Rahmen eines Tutorials eine Einführung in das neue IBM-System Blue Gene/L gegeben. An der Einführung nahmen etwa 70 Personen teil. Mitarbeiter des ZAM, der Firma IBM sowie Pilot-Nutzer gaben einen Überblick über die Architektur des Rechners, die Installation in Jülich und über erste Erfahrungen mit dem Rechner. Es war erkennbar, dass viele Benutzer große Erwartungen an das System Blue Gene/L knüpfen. (Ansprechpartner: Dr. Manfred Kremer, Tel. 3660)

## **Neue ZAM-Dokumentation**

NIC Series Vol. 31: Computational Nanoscience: Do it

yourself!

NIC Series Vol. 32: NIC Symposium 2006

IB-2005-19 Konzept für das zentrale Datamanagement im

Forschungszentrum Jülich

IB-2006-01 Ein flexibler und effizienter Dateitransfer für

UNICORE

IB-2006-02 Ein Web-Service-basierter Autorisierungs-

dienst für Grid-Umgebungen am Beispiel von

UNICORE

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

Veranstaltungshinweise finden Sie unter: http://www.fz-juelich.de/zam/neues/termine/ und http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/

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