



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 151 • Februar 2007

Jülicher Zukunftsforum Supercomputer

Das Forschungszentrum Jülich hatte am 22. Januar 2007 zu einem Zukunftsforum Supercomputer in die Landesvertretung NRW in Berlin eingeladen. Moderiert von WDR-Journalist Frank Plasberg („hartaberfair“) diskutierten vor gut 100 Gästen aus Politik, Wissenschaft und Wirtschaft der NRW-Innovationsminister Prof. Andreas Pinkwart, der Parlamentarische Staatssekretär Thomas Rachel MdB, IBM-Deutschland-Chefentwickler Herbert Kircher und der Direktor des ZAM, Prof. Thomas Lippert. Eingestimmt wurden sie durch den Supercomputing-Experten Prof. Jack Dongarra von der University of Tennessee, der über die weltweite Entwicklung in der Computertechnik und in den rechnergestützten Wissenschaften berichtete.

Die Teilnehmer beantworteten kritische Fragen des Moderators, u.a. zur Kosten/Nutzen-Relation im Supercomputing, zur Förderung durch den Bund und die Länder, zum Beitrag der Industrie sowie zu den Perspektiven des Supercomputing in Deutschland und Europa. Einig war man sich darin, dass Simulationsrechnungen mit Supercomputern zukünftig eine Schlüsselrolle für Innovationen in Wissenschaft und Wirtschaft spielen werden. Umso besorgniserregender sei daher, dass es noch vor vier Jahren in Deutschland 71 Supercomputer in der TOP500-Liste gegeben habe, in diesem Jahr aber nur noch 17.

Prof. Achim Bachem betonte, dass in Jülich die Höchstleistungsrechner in ein einzigartiges wissenschaftliches Umfeld eingebettet seien. „Dadurch erreichen wir einen europaweit einmaligen Mehrwert in der Forschung insgesamt. Diese Spitzenposition müssen wir uns erhalten.“ Durch den weiteren Ausbau der Rechenkapazitäten auf Petaflop-Niveau soll in Jülich 2009 ein europäisches Supercomputer-Zentrum innerhalb des 7. EU-Forschungsrahmenprogramms entstehen. „Damit schaffen wir weltweit einmalige Forschungsbedingungen für die Wissenschaftler in Deutschland und Europa“, ist sich Bachem sicher.

Nach der Abschlussdiskussion mit den Zuhörern gab es für

die Gäste bei einem Empfang noch die Gelegenheit, spezielle Fragen direkt mit den Diskussionsteilnehmern und mit Wissenschaftlern aus dem FZJ zu besprechen.

German Research School for Simulation Sciences

In einem Memorandum of Understanding haben das Forschungszentrum Jülich und die RWTH Aachen ihre Absicht bekräftigt, im Zuge der Eliteförderung gemeinsam die „German Research School for Simulation Sciences“ zu gründen. Sie wird für besonders begabte Studenten und Nachwuchswissenschaftler einen Master-Studiengang und ein Doktoranden-Programm anbieten, in denen die Kompetenz vermittelt wird, komplexe Aufgaben aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften mit Methoden der Computersimulation auf Supercomputern zu lösen. Zum Wintersemester 2007/2008 werden die ersten Doktoranden aufgenommen. Der Studienbetrieb für die Master-Ausbildung startet im Herbst 2008. Die Schule wird zu gleichen Teilen von BMBF, Land Nordrhein-Westfalen, Helmholtz-Gemeinschaft, RWTH Aachen und FZJ finanziert.

In Berlin wurde am 22. Januar von Prof. Achim Bachem und dem Rektor der RWTH, Prof. Burkhard Rauhut, eine entsprechende Absichtserklärung unterzeichnet. Thomas Rachel MdB, Parlamentarischer Staatssekretär bei der Bundesministerin für Bildung und Forschung, NRW-Innovationsminister Prof. Andreas Pinkwart und Helmholtz-Präsident Prof. Jürgen Mlynek kamen zur Unterzeichnung, um ihre Unterstützung für das neue Modell der Zusammenarbeit zwischen Hochschulen und außeruniversitären Forschungsorganisationen zu betonen. (Ansprechpartner: Dr. Rüdiger Esser, Tel. 6588)

ZAM Coulomb-Bibliothek geht online

Eine erste Version der am ZAM entwickelten „Coulomb“-Bibliothek zur effizienten Behandlung langreichweitiger

Wechselwirkungen in Vielteilchensystemen ist jetzt verfügbar. Derzeit beinhaltet die Bibliothek schnelle Algorithmen wie die Fast Multipole Method und den Barnes-Hut-Baumalgorithmus. Bei diesen Algorithmen skaliert das Aufaddieren der Kräfte mit $O(N)$ bzw. $O(N \log N)$ (N = Teilchenzahl) im Gegensatz zu $O(N^2)$ bei einfachen Algorithmen. Die Software liegt vorkompiliert für Linux-Rechner und für JUMP unter <http://www.fz-juelich.de/zam/fcs> bereit. Die Dokumentation kann ebenfalls von dort heruntergeladen werden. Das Einbinden der Bibliothek in die Anwendung sowie der Zugang zu Benchmark-Routinen für die direkte Summation in offenen bzw. periodischen Systemen werden über ein transparentes Interface ermöglicht. In dieser ersten Testphase kann die Bibliothek mit seriellen Anwendungen verknüpft werden; eine parallelisierte Version befindet sich in der Entwicklung. (Ansprechpartnerin: Anke Visser, Tel. 4227)

Brandsimulationen auf JUMP

Mit der zunehmenden Komplexität moderner Gebäude und Verkehrsanlagen gewinnen Brandsimulationen als Ingenieurmethode in vielen Gebieten der Sicherheitstechnik und des Brandschutzes an Bedeutung. In Zusammenarbeit mit dem Ingenieurbüro *insa4* aus Wuppertal werden auf JUMP CFD-basierte Simulationen durchgeführt. Zum Einsatz kommt die Open-Source-Software FDS (Fire Dynamics Simulator), die im Rahmen der Kooperation getestet und hinsichtlich der Parallelität verbessert wird. Ziel ist es, die Auswirkungen unterschiedlicher Zündquellen auf den Brandverlauf in Gebäuden und Schienenfahrzeugen zu untersuchen. Darüber hinaus werden Simulationen zur Prognose des Löscheffektes von Sprinkleranlagen durchgeführt. Für die Brandschutzplanung ist die Durchführung von Brandsimulationen auf High-Performance-Computern ein neuer Ansatz. Nur durch die Nutzung von Supercomputern wird es möglich, große Geometrien und komplexe Szenarien wie z.B. den Brand eines Zuges in einem Bahnhof zu simulieren. Die Methode erlaubt die Sicherheit von Gebäuden und Fahrzeugen im Brandfall zu untersuchen und zu optimieren oder kostenintensive Versuche durch Computereperimente zu ersetzen. (Ansprechpartner: Dr. Armin Seyfried, Tel. 3437)

Webseiten-Suche mit Google Mini

Seit Anfang des Jahres basiert die Suchfunktion innerhalb der Webseiten des Forschungszentrums auf „Google Mini“. Hierfür werden zwei „Google Mini“-Server eingesetzt, die sowohl den FZJ-Mitarbeitern als auch externen Webseiten-Besuchern eine Suchmöglichkeit zur Verfügung stellen. Die Suchfunktion wird über die Einstiegsseite des FZJ-Portals unter dem Begriff „Suche“ oder auf den Institutsseiten über das Symbol „Lupe“ angeboten. Bei der Suche wird zwischen internen und externen Nutzern unterschieden. Die interne Sicht ist nur innerhalb der Domain *fz-juelich.de* erreichbar,

die externe Sicht, die lediglich die öffentlich zugänglichen Dokumente enthält, steht allen Internet-Nutzern zur Verfügung. Die Suche kann auf verschiedene Teilbereiche, z.B. Institute, oder auf die Auswahl einzelner Dokumententypen beschränkt werden. Derzeit werden HTML-Seiten, Textdateien und PDF-Dokumente, bei der internen Suche zusätzlich Word- und PowerPoint-Dokumente berücksichtigt. Für die Sortierung der Trefferlisten verwendet „Google Mini“ den von Google Web bekannten PageRank™. Alternativ lassen sich die Treffer nach Datum sortieren. Die Webseiten werden täglich auf Änderungen überprüft, um den Benutzern aktuelle Trefferlisten bereitzustellen.

Die Suche mit „Google Mini“ ersetzt die bisherige, auf Oracle Ultra Search basierende Suchlösung. Für Fragen und Anregungen bezüglich der Webseiten-Suche wurde die Funktionsmailadresse websearch.zam@fz-juelich.de eingerichtet. (Ansprechpartner: Jochen Kreutz, Tel. 1464)

Standard-Notebook für das Forschungszentrum definiert

Seit vielen Jahren werden die meisten Beschaffungen von Rechnern im Desktop-Bereich mit den Formularen für Standard-PCs getätigt – sei es der Office-PC von DELL oder die verschiedenen Varianten leistungsfähiger PCs.

Um für Notebooks dieselben Vorteile zu bieten – günstigere Preise und einen verkürzten Bestellvorgang – wurden von einer Arbeitsgruppe (ZAM, ZEL, IPP, M) verschiedene Notebook-Konfigurationen untersucht und das Ergebnis der DV-Kommission vorgestellt. Diese hat in ihrer Sitzung am 7.12.2006 den vorgelegten Vorschlag als den Standard für Notebooks im Forschungszentrum beschlossen.

Der Standard berücksichtigt drei Nutzungsprofile:

1. Subnotebook: klein, handlich, leicht
2. Standard: Mittelklasse-Notebook
3. High-End: leistungsfähiges Gerät mit großem Display

Für jedes dieser Profile sind je zwei Geräte im Angebot, und zwar eines aus der Latitude-Reihe der Firma DELL und eines aus der ThinkPad-Reihe der Firma Lenovo (ehemals IBM-Notebooks). Es stehen also insgesamt sechs Produkte zur Auswahl. Grund der Entscheidung für diese beiden Firmen ist die langjährige positive Erfahrung mit deren Geräten und dem Support. So waren im letzten Jahr etwa 80% der vom FZJ bestellten Notebooks DELL- oder Lenovo-Geräte. DELL-Notebooks zeichnen sich durch die umfangreichere Ausstattung aus; die Wechselschacht-Einschübe sind außerdem kompatibel zu denen des Office-PCs. Hingegen sind die Lenovo-Geräte besonders für den Einsatz mit Linux zu empfehlen. Weitere Informationen und die Bestellformulare finden Sie auf der Seite <http://www.fz-juelich.de/PC/>. (Ansprechpartner: Stephan Graf, ZAM, Tel. 6578; Helmut Timmermanns, ZEL, Tel. 4446)

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