



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 72 • März 1999

Professor Dr. Bjørn H. Wiik gestorben

Der Vorsitzende des DESY-Direktoriums starb am 26. Februar 1999 an den Folgen eines Unfalls. Herr Professor Wiik war einer der Gründerväter des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC), einer gemeinsamen Einrichtung von DESY und dem Forschungszentrum Jülich. Mit einer Forschungsgruppe in Jülich und dem Zentrum für Paralleles Rechnen in Zeuthen als Teile des NIC hat er die supercomputerorientierte Forschung insbesondere auf dem Gebiet der Elementarteilchenphysik mit dem Ziel, die Computersimulation als Bindeglied zwischen Experiment und Theorie weiterzuentwickeln, nachhaltig gefördert. Sein Tod bedeutet auch für das NIC einen großen Verlust.

Erweiterung der T3E-Systeme

In der ersten Märzwoche wird zum Ausgleich von Kapazitätseinbußen auf der CRAY T90 das bisher kleinere CRAY T3E-System für eine begrenzte Zeit um 256 Knoten erweitert. Die Prozessoren der zusätzlichen Knoten sind mit 600 MHz getaktet und verfügen jeweils über einen 512 MByte großen Hauptspeicher mit verbesserter Zugriffszeit. Außerdem sind die neuen Knoten über leistungsfähigere Router-Chips mit dem internen Kommunikationsnetz verbunden.

Die „neuen“ Knoten bilden eine eigene logische Partition und können nur im Batch-Betrieb genutzt werden. Sie greifen auf dieselben lokalen Filesysteme WORK und TEMP wie die „alten“ Knoten zu, eine gemeinsame Nutzung „neuer“ und „alter“ Knoten innerhalb einer Anwendung ist jedoch nicht vorgesehen.

Weiterhin gelten die bewilligten T3E-Kontingente für alle T3E-Systeme und -Prozessortypen gemeinsam. Die Kosten werden ebenfalls wie bisher unabhängig vom Prozessortyp berechnet.

Die zusätzliche Parallelrechnerkapazität wird bevorzugt an diejenigen Projekte vergeben, die Anwendungen vom

Vektorrechner CRAY T90 auf die massiv-parallelen T3E-Systeme portieren. Die substantielle Kapazitätserweiterung bietet darüber hinaus die Möglichkeit, im Einzelfall auch bestehende T3E-Kontingente zu erhöhen. Ansprechpartner hierfür ist Dr. Manfred Kremer, Tel. 02461/61-3660 – sowohl für die NIC-Projekte als auch für die FZJ-internen Projekte, die von der VSR-Kommission bewilligt werden.

Weitere Einzelheiten zur Nutzung finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/nutzung.html>. (Ansprechpartner: Beratung Supercomputing, Tel. 4416)

Neufestlegung der Rechenzeitkosten

Die Verminderung der Rechenkapazität auf dem Vektorrechner CRAY T90 (10 statt 16 aktive Prozessoren) sowie die zusätzliche Kapazität auf dem Parallelrechner CRAY T3E-256 (256 zusätzliche Prozessorelemente) machen eine Anpassung der Rechenzeitkosten notwendig. Zum 1. April 1999 werden daher die Kosten für eine Stunde Rechenzeit (bei T3E: Belegungszeit) auf jeweils einem Prozessor wie folgt festgelegt:

System	Anzahl Prozessoren	Kosten pro Prozessorstunde [VE]
CRAY J90	16	20,0
CRAY T90	10	115,0
CRAY T3E	512 + 512	3,5
IBM R50	8	7,5

Zum gleichen Zeitpunkt werden die aktuellen Rechenzeitkontingente in gleichem Maße wie die Rechenkosten angepaßt; die verfügbare Rechenzeit bleibt also gleich. Die nicht-begutachteten Kontingente der Institute (100% des FZJ-Anteils der J90-Kapazität und 25% des FZJ-Anteils der T3E-Kapazität) werden von WTP in Abstimmung mit dem ZAM zum 1. April 1999 für ein Jahr neu festgelegt. Die detaillierten Abrechnungsformeln findet man in der technischen

Kurzinformation TKI-0015. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

MTA-Prüfung Winter 98/99

Vor dem Prüfungsausschuß der IHK zu Köln haben Ende Februar alle 18 Auszubildenden des Einstellungsjahrgangs 1996 ihre Prüfung zu Mathematisch-technischen Assistenten erfolgreich abgelegt. Die zentrale Ausbildung fand im ZAM statt. Die Absolventen wurden in folgenden Instituten betreut: ICG-1, ICG-2, ICG-3, ICG-5, ICG-7, IFF, IEV, IGV, ISI, ISR-1, NIC, STE, ZAM, ZAT, ZEL und ZCH. Wir gratulieren allen Absolventen! Die Besten werden Anfang März anlässlich der Abschlußfeier mit einem Buchgeschenk belohnt. Die Hälfte der Prüflinge hat in diesem Jahr die Gesamtnote gut oder sehr gut erreicht. Dieses Ergebnis zeigt die Qualität der Ausbildung im Forschungszentrum im Vergleich zu anderen ausbildenden Betrieben. Sorgen um ihre Zukunft brauchen die neuen MTAs nicht zu haben, gehören sie doch zu den derzeit gefragtesten Spezialisten auf dem Arbeitsmarkt.

NIC-Workshop „Molecular Dynamics on Parallel Computers“

Vom 8.-10.2. veranstaltete das John von Neumann-Institut für Computing einen Workshop mit dem Titel „Molecular Dynamics on Parallel Computers“. Der Begriff „Molecular Dynamics“ wurde bei der Auswahl der Vortragsthemen weit gefaßt und steht hier für Simulationen auf der Basis von Teilchentrajektorien. Ein wesentliches Ziel dieser Veranstaltung war der interdisziplinäre Austausch von algorithmischen Techniken für Parallelrechner. Dieser Ansatz fand große Resonanz und zog über 100 Teilnehmer aus den Disziplinen Festkörperforschung, Polymerphysik, Physikalische Chemie, Biochemie, Astrophysik, Angewandte Mathematik und Elementarteilchenphysik in den Hörsaal des Forschungszentrums.

Ein wichtiges Thema vieler Vorträge und Poster war das Problem der Überbrückung der Längen- und Zeitskalen von der atomistischen Beschreibung zu makroskopischen Dimensionen. Der immense Rechenaufwand macht selbst auf leistungsstarken Parallelrechnern die direkte Verfolgung langsamer Prozesse nur in Ausnahmefällen möglich. Die Analyse derartiger Vorgänge verlangt eine intelligente Vergrößerung des Systems. Atomistische Simulationen steuern wichtige mikroskopische Daten zu solchen hierarchischen Ansätzen bei. Die Umgehung dynamischer Engpässe durch gezielte Einführung stochastischer Elemente war Gegenstand mehrerer Vorträge. Hybrid-Monte-Carlo-Techniken, bei denen die Sampling-Effizienz durch Einführung dynamischer Elemente verbessert wird, wurden im Be-

reich der Gittereichtheorie diskutiert. Ein Beispiel für interdisziplinären Methodenaustausch ist der Einsatz aus der Astrophysik stammender Baumalgorithmen für Coulomb-Wechselwirkungen in molekularen Systemen.

Aufwendige direkte Simulationen wurden für Modellgläser und Bruchpropagation in Quasikristallen gezeigt. Während im ersten Fall lange Zeiten bei relativ kleiner Teilchenzahl angestrebt werden, erfordern Bruchsimulationen extrem hohe Teilchenzahlen. Für die Dynamik granularer Materie wurden spezielle Algorithmen vorgestellt.

Das detaillierte Programm des Workshops ist im WWW unter <http://www.fz-juelich.de/parmd> verfügbar. Ausführliche Artikel zu den Vorträgen und zweiseitige Kurzartikel zu den Themen der Posterbeiträge werden in einem Proceedingsband bei World Scientific erscheinen.

Neue ZAM-Dokumentation

TKI-0323 Wissenschaftliche Publikationen des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik 1998

ZAM/NIC-Veranstaltungen

NIC-Seminar: Auf dem Weg zum Teraflop-Rechner mit APE

Referenten: Dr. W. Friebel, Dr. P. Wegner, DESY-Zeuthen
Termin: Dienstag, 9.3.1999, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

NIC-Workshop „Chaos in Brain?“

Termin: 10. - 12.3.1999
Ort: Bonn, Gustav-Stresemann-Institut
Programm s. <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/CB.html>

make und bldmake

Referent: Günter Egerer, ZAM
Termin: Montag, 15.3.1999, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an G.Egerer@fz-juelich.de, Tel. 2339

Graphisches Editieren mit Gimp

Referentin: Marlene Busch, ZAM
Termin: Montag, 22.3.1999, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an graphik.zam@fz-juelich.de, Tel. 4100

Nutzung von AVS/Express zur wissenschaftlich-technischen Visualisierung

Referent: Dr. Helmut Schumacher, ZAM
Termin: 24. - 25.3.1999, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an Hel.Schumacher@fz-juelich.de, Tel. 2482

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: www.fz-juelich.de/zam/news/kurse/

NIC-Forschungsgruppen: www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/

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