



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 93 • März 2001

Kooperation mit dem Structural Engineering Research Centre, Indien

Im Rahmen einer dreijährigen, vom Internationalen Büro des BMBF geförderten Kooperation zwischen dem Structural Engineering Research Centre in Chennai (Madras), Indien, und dem ZAM sowie zwei Industriepartnern (National Institute of Information Technology Ltd., New Delhi, und INTES GmbH, Stuttgart) sollen zwei Finite-Elemente-Programme weiterentwickelt werden. Dabei ist geplant, die Software um Module für automatische Fehlerbestimmung und adaptive Netzverfeinerung zu erweitern; für die auftretenden linearen Gleichungssysteme soll ein neuer iterativer Löser eingesetzt werden. Das ZAM wird diese Module auf dem SMP-Cluster ZAMpano implementieren und parallelisieren; insbesondere wird eine hybride Parallelisierung mit OpenMP (Shared Memory) und MPI (Message Passing) auf dem SMP-Cluster untersucht werden. Es ist beabsichtigt, die neuentwickelten Module anschließend in das kommerzielle Finite-Elemente-Programmpaket PERMAS von INTES GmbH zu integrieren. (Ansprechpartner: Dr. Bernd Körfgen, Tel. 6761)

Vereinheitlichung des ISDN-Zugangs zum JuNet

Zur Vereinheitlichung des externen Zugangs zum JuNet über ISDN und zur Einsparung von Service-Kosten wird der bisher neben den 3COM/USRobotics-Servern betriebene CONWARE-Server am 30. Juni 2001 abgeschaltet. Dieser Server bediente bisher die Rufnummern 02461-61-8010, -8012, -8013, -8015. Die Funktionen ISDN-Einwahl und ISDN-Rückruf werden danach ausschließlich auf den 3COM/USRobotics-Systemen angeboten. Sofern Benutzer des CONWARE-ISDN-Servers nicht schon eine Einwahlberechtigung über die 3COM/USRobotics-Systeme haben, kann diese beim Dispatch (Tel. 5642) im ZAM beantragt werden. Ausführliche Informationen zur Konfiguration der Modem- oder ISDN-Verbindungen enthält das Benutzer-

handbuch BHB-0137. Für Nutzer des analogen Modemzugangs ändert sich nichts. (Ansprechpartner: Werner Anrath, Tel. 2053)

Ausdrucken von PDF-Dateien

Bei der Ausgabe von PDF-Dateien auf Drucker, die älter als ein Jahr sind, treten häufig Probleme auf. Daher geben wir hier einige Hinweise, welche Voraussetzungen zum Druck vorliegen müssen.

Das Programm Acrobat Reader, mit dem die PDF-Datei betrachtet wird, sollte mindestens die Version 4.0 haben. Wenn Sie von einem PC aus drucken wollen, muß im Acrobat Reader im Menü „Datei“ der Unterpunkt „Seiteneinrichtung“ auf A4 und bei „Drucken“ auf PostScriptLevel 2 eingestellt werden. Beim Drucken unter Unix muß im Acrobat Reader im Menü „File“ der Unterpunkt „Page Setup“ auf A4 und bei „Print“ auf Level 2 only eingestellt werden.

Im ZAM liegen gute Erfahrungen vor mit neuen Druckern der Firmen Xerox und HP. (Ansprechpartner: Herbert Schumacher, Tel. 3523)

Wissenschaftsrat koordiniert Höchstleistungsrechnen

Ausgehend von seiner im Mai 2000 verabschiedeten Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern in Deutschland hat der Wissenschaftsrat die Einrichtung eines „Nationalen Koordinierungsausschusses zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ beschlossen. Der Ausschuß soll die Beschaffungen der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Supercomputer stärker aufeinander abstimmen und das Leistungsangebot bundesweit weiter optimieren. Außerdem soll er Empfehlungen an Bund, Länder und Trägerorganisationen von Höchstleistungsrechnern aussprechen, die in Analogie zu den Empfehlungen des Wissenschaftsrates zur Rahmenplanung für den Hochschulbau Grundlage entsprechender Investitionsentscheidungen sein sollen. Der Wissenschaftsrat will damit eine

institutionenübergreifende, bundesweit koordinierte Investitionsstrategie für den Aufbau und Betrieb nationaler Höchstleistungsrechner entwickeln.

Im Koordinierungsausschuß sollen zum einen Mitglieder der Wissenschaftlichen Kommission des Wissenschaftsrates vertreten sein, von denen eines auch den Vorsitz übernehmen wird. Zum anderen werden zwei Vertreter der Hochschulen und drei Vertreter der außeruniversitären Wissenschaftsorganisationen Fraunhofer-Gesellschaft, Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren, Max-Planck-Gesellschaft, Union der deutschen Akademien der Wissenschaft und Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz dem Ausschuß angehören. Der Ausschuß wird komplettiert durch einen Repräsentanten der Industrie sowie durch Vertreter von Bund und Ländern. Mit Blick auf seine Funktion werden dem Ausschuß als ständige Gäste zudem Vertreter der Höchstleistungsrechenzentren bzw. ihrer Wissenschaftlichen Beiräte, der Kommission für Rechenanlagen der DFG sowie der Fachkommissionen der Trägerorganisationen angehören. Der Wissenschaftsrat hat dabei empfohlen, nach einer Erprobungsphase von fünf Jahren über Aufgaben und Funktion dieses nationalen Koordinierungsausschusses erneut zu beraten.

Der Koordinierungsausschuß wird derzeit vom Wissenschaftsrat zusammengesetzt; die konstituierende Sitzung soll noch im März stattfinden. Seitens der Helmholtz-Gemeinschaft wurde Prof. Hoßfeld, ZAM, als deren Vertreter im Koordinierungsausschuß benannt.

Hydrodynamische Wechselwirkungen in atomaren Systemen

Anfang dieses Jahres wurden die Arbeiten in einem deutsch-französischen Gemeinschaftsprojekt aufgenommen, an dem Wissenschaftler aus Orléans und dem ZAM beteiligt sind. Ziel der Arbeiten, die im Rahmen des Procope-Programms vom Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD) und dem französischen Außenministerium gefördert werden, ist das Verständnis der sogenannten hydrodynamischen Wechselwirkungen in atomaren Systemen. Diese kollektiven, langreichweitigen schwachen Kräfte, die z.B. für die Langzeitdynamik von gelösten Makromolekülen oder die Diffusion von Ionen eine wichtige Rolle spielen, sollen in Modellsystemen mit der molekulardynamischen Computersimulation untersucht werden. Zunächst werden Reibungsvorgänge bei Brownschen Teilchen betrachtet. Hierzu wird das am ZAM entwickelte parallele Molekulardynamikprogramm DMMD eingesetzt, mit dessen Hilfe große Modellsysteme (mehr als 1 Mio. Teilchen) über lange Zeiten (> 1ns) simuliert werden können. (Ansprechpartner: Dr. Godehard Sutmann, Tel. 6746)

MTA-Prüfung im Februar 2001

In der Woche vor Karneval haben 20 Auszubildende des Einstellungsjahrgangs 1998 vor der IHK zu Köln ihre Prüfung zu Mathematisch-technischen Assistenten erfolgreich abgelegt. Die zentrale Ausbildung fand im ZAM statt. Die Absolventen wurden in folgenden Instituten betreut: ASS, ICG, IFF, IGV, ISI, ISR, IKP, IME, IPP, IWV, NIC, STE, ZAM, ZEL und ZFK. Wir gratulieren allen Absolventen und danken den Betreuern!

Die besten Absolventen wurden Ende Februar bei einer kleinen Abschlusfeier mit einem Buchgeschenk ausgezeichnet. Sorgen um ihre berufliche Zukunft brauchen die neuen MTAs nicht zu haben, gehören sie doch zu den derzeit gefragtesten Spezialisten auf dem Arbeitsmarkt. Einige haben zum 1. März bereits eine Stelle außerhalb des Forschungszentrums angetreten, andere nutzen die Möglichkeit des sogenannten sozialen halben Jahres zur beruflichen Orientierung. Zehn Absolventen aber werden das ausbildungsbegleitende Studium der Technomathematik an der Fachhochschule Aachen/Jülich, welches seit dem Ausbildungsbeginn dieses Jahrgangs angeboten wird, mit dem Hauptstudium fortsetzen und können in weiteren vier Semestern das Diplom erreichen.

Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2000-16 VISIT – a Visualization Interface Toolkit
Version 1.0
- IB-2000-17 Gigabit Testbed West – Abschlußbericht des DFN-Projektes
- Jül-3813 Eine parallele Implementierung der Methode der quasi-minimalen Residuen mit Look-Ahead-Lanczos-Algorithmus
- Jül-3823 Parallelisierung eines Tridiagonalisierungsalgorithmus zur Lösung des symmetrischen Eigenwertproblems bei Bandmatrizen

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

Referent: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS Stuttgart

Termin: 28. - 30.3.2001, 9.00 - 17.15 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Info und Anmeldung s. unter

<http://www.fz-juelich.de/zam/news/kurse/mpl.html>

Numerical simulation of high intensity laser interactions with matter

Referent: Dr. habil. Paul Gibbon, Universität Jena

Termin: Dienstag, 3.4.2001, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM