



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 143 • April 2006

NIC live auf der CeBIT

Zum ersten Mal war das NIC in diesem Jahr mit eigenen Präsentationen zum Thema „Simulation auf Höchstleistungsrechnern“ auf der CeBIT vertreten. Die Firma IBM hatte das Forschungszentrum eingeladen, auf ihrem Stand die Bedeutung der Schlüsseltechnologie „Wissenschaftliches Rechnen“ zu demonstrieren.

Von Mitarbeitern des ZAM wurden auf großformatigen Monitoren Simulationen vorgeführt, die online auf den Jülicher Rechnern JUMP und JUBL gerechnet, visualisiert und gesteuert wurden. Gezeigt wurden die Ausbreitung von Chemikalien im Boden, die Wechselwirkung eines Lasers mit Materie sowie die Bewegung großer Sternhaufen in einer Galaxie.

Wichtiger „Aktionspunkt“ aus dem Grand-Challenges-Bereich Bio-Geosysteme war die rechenintensive Simulation von chemischen Prozessen in der Atmosphäre. Eine Forschergruppe aus dem ICG-I nutzt die Software CLaMS, um den Weg von Luftpaketen und die chemischen Reaktionen der Spuren- und Treibhausgase zu simulieren. Große Aufmerksamkeit erregten die Simulationsergebnisse zur Ausbreitung des Ozonloches über der Arktis.

Die deutschen Supercomputer-Zentren konnten sich auf der CeBIT am „Tag des Supercomputing“ präsentieren. Unter anderem wurde per Videokonferenz nach Jülich geschaltet, wo live der leistungsstärkste Rechner Europas vorgestellt wurde. Prof. Hansmann, der Leiter der NIC-Forschungsgruppe Computergestützte Biophysik, trug in Hannover über die Proteinfaltung vor, was zu angeregten Diskussionen mit dem Publikum führte.

Die Medienresonanz zum Auftritt des FZJ war beachtlich, wozu auch das Jülicher Zukunftsforum zum Thema Nanoelektronik beitrug. Die CeBIT bot uns eine Vielzahl von Kontakten zu Politikern, Journalisten und Besuchern, denen bei dieser Gelegenheit die Bedeutung der Computer-Simulation und die Jülicher Aktivitäten nahe gebracht werden konnten.

Winterschule „Computational Nanoscience“

Das NIC veranstaltete vom 14. bis 22. Februar 2006 eine Ferienschule zum Thema „Computational Nanoscience: Do It Yourself!“. Das NIC setzte damit seine erfolgreiche Reihe der Winterschulen zur Ausbildung im wissenschaftlichen Rechnen auf hohem Niveau fort.

Das Programm der 9-tägigen Ferienschule richtete sich an Doktoranden und Post-Docs auf den Gebieten der Computational Material Science und Chemistry und wurde von Johannes Grotendorst (ZAM), Stefan Blügel (IFF) und Dominik Marx (Ruhr-Universität Bochum) zusammengestellt. Den 50 Praktikumsplätzen standen ein Vielfaches von empfohlenen Bewerbern aus 22 Ländern gegenüber. Erstmals konnten die Teilnehmer in Tutorials und Praktika hands-on den Supercomputer für Simulationsrechnungen nutzen. Im Mittelpunkt standen die vier Programmcodes FLEUR und KKR-GF (Festkörper- und Oberflächenphysik), CPMD (chemische Reaktionen und Dynamik) und TURBOMOLE (Struktur und Eigenschaften großer Moleküle und Cluster).

Die Lecture Notes der Winterschule sind in der Publikationsreihe des NIC als Band 31 erschienen. Online-Versionen der einzelnen Beiträge stehen im Internet unter der Adresse <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume31>. Die NIC-Winterschule wurde vom Psi-k Network der ESF sowie vom Forschungszentrum Jülich gefördert. (Ansprechpartner: Dr. Johannes Grotendorst, Tel. 6585)

NIC-Workshop „From Computational Biophysics to Systems Biology“

Die NIC-Forschungsgruppe Computergestützte Biologie und Biophysik veranstaltet vom 6. bis 9. Juni den internationalen Workshop „From Computational Biophysics to Systems Biology“ (CBSB06). Der Workshop wird weltweit führende Forscher aus der Biologie, der Informatik und der Physik zusammenbringen, um aktuelle Entwicklungen im Bereich der computergestützten Biophysik und Systembiolo-

gie zu diskutieren. Eine wichtige Frage wird sein, wie man die verschiedenen Größenordnungen, die vom Atom bis zur Zelle reichen, überbrückt. Ein weiterer Schwerpunkt ist der Erfahrungsaustausch über die Neu- und Weiterentwicklung von Algorithmen und deren Implementierung auf Höchstleistungsrechnern.

Interessierte Wissenschaftler sind herzlich eingeladen, sich an dem Workshop zu beteiligen. Weitere Informationen und das Anmeldeformular stehen auf der Workshop-Webseite unter <http://www.fz-juelich.de/cbsb06> zur Verfügung. (Ansprechpartner: Prof. U. Hansmann, nic-cbb@fz-juelich.de)

Gaststudentenprogramm 2006

Das NIC bietet im Sommer 2006 wieder ein Gaststudentenprogramm an. Studenten der Natur- und Ingenieurwissenschaften, der Informatik und der Mathematik an Universitäten erhalten dabei die Möglichkeit, sich mit verschiedenen Aspekten des wissenschaftlichen Rechnens vertraut zu machen. Die Teilnehmer arbeiten zusammen mit Wissenschaftlern an aktuellen Forschungs- und Entwicklungsthemen. Je nach Vorkenntnissen und Interessen kommen Aufgaben aus vielfältigen Arbeitsbereichen in Frage; dazu gehören Mathematik, Physik, Biophysik, Chemie, Programmierwerkzeuge, Visualisierung, Betriebssysteme, Kommunikation und Grid-Computing. Der Schwerpunkt liegt auf der Nutzung von parallelen 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 erworben haben, Diplom bzw. Master aber noch nicht abgelegt haben. Zusätzlich ist die schriftliche Empfehlung eines Hochschullehrers erforderlich. Der Aufenthalt in Jülich erstreckt sich über zehn Wochen vom 7. August bis zum 13. Oktober 2006. Es wird um schriftliche Bewerbung gebeten. Bewerbungsschluss ist der 30. April 2006. Ausführliche Informationen finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/gaststudenten/>. (Ansprechpartner: Dr. Rüdiger Esser, Tel. 6588)

DEISA-Symposium

Die Partner im EU-Projekt DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications), zu denen auch das Forschungszentrum Jülich als Gründungsmitglied zählt, bauen eine innovative europaweite Supercomputing-Infrastruktur auf. Die bisher erzielten Ergebnisse sowie strategische Weiterentwicklungen werden auf dem alljährlich organisierten Symposium präsentiert, das diesmal in Bologna vom 4. - 5. Mai 2006 stattfindet. Im wissenschaftlichen Programmteil werden führende Wissenschaftler einen breiten Überblick über wichtige Themen des Wissenschaftlichen

Rechnens geben und ihre Arbeiten im Rahmen der DEISA Extreme Computing Initiative (DECI) präsentieren; u.a. wird Dr. Karl Jansen (NIC, DESY-Zeuthen) sein Projekt zur Lattice Field Theory vorstellen.

Im strategischen Programmteil werden generelle Themen wie z.B. e-Infrastrukturen in Europa sowie Trends im High Performance Computing und aktuelle Supercomputer-Architekturen adressiert. Hier wird Klaus Wolkersdorfer (ZAM) einen Überblick über das System Blue Gene/L JUBL geben.

Weitere Informationen zum DEISA-Symposium sind unter <http://www.deisa.org/symposium> zu finden. (Ansprechpartner: Dr. Achim Streit, Tel. 6576)

Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2005-13 Beiträge zum Wissenschaftlichen Rechnen: Ergebnisse des Gaststudentenprogramms 2005 des John von Neumann-Instituts für Computing
- IB-2005-18 Eine Entwicklungsumgebung für iterative Eigenwertverfahren in MATLAB
- IB-2006-03 Implementierung einer Software-Bibliothek für schnelle Coulomb-Löser

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

Administration von Linux-Workstations

Referenten: W. Homberg, St. Graf, ZAM; G. Vehres, IFF
Termin: 18. - 21.4.2006, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM-Neubau, Geb. 16.4, R. 204
Anmeldung an W.Homberg@fz-juelich.de, Tel. 2424

Die Programmiersprache Perl

Referenten: W. Homberg, St. Meier, Th. Schmühl, ZAM
Termin: 24. - 26.4.2006, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an St.Meier@fz-juelich.de, Tel. 4494

Visualisierung von Molekülen in VR-Umgebungen

Referent: Dr. Oliver Passon, ZAM
Termin: 4.5.2006, 13.00 - 17.00 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an O.Passon@fz-juelich.de, Tel. 6423

IT-Sicherheit im Forschungszentrum: Leitlinie, Grundschutzregeln und Aufgaben

Referent: Dr. Thomas Eickermann, IT-Sicherheitsbeauftragter
Termin: Donnerstag, 4.5.2006, 14.00 - 15.30 Uhr
Ort: Großer Hörsaal des Forschungszentrums

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