



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 105 • Mai 2002

DFN fördert Projekt PAB

Viele Anwendungen, die über das Internet kommunizieren, benötigen Dienstgarantien wie z.B. Bandbreitenreservierung. Hierzu gehören Sprach- und Videoübertragung, aber auch verteilte wissenschaftliche GRID-Anwendungen. Das Projekt PAB – „Pfad-Allokation in Backbone-Netzen“ – hat das Ziel, Strategien für die Auswahl von Kommunikationspfaden zur Unterstützung eines effizienten Transports von priorisierten Datenströmen im DFN-Backbone zu untersuchen und damit „Quality of Service“ gewährleisten zu können. Das ZAM erhielt hierzu vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (DFN) einen Forschungsauftrag. Die Arbeiten werden in Kollaboration mit dem Lehrstuhl für Informatik 4 der RWTH Aachen (Prof. Spaniol) und der Firma Cisco Systems durchgeführt. Cisco stellt die Hardware für ein Testbed zur Verfügung. Das Projekt startete am 1. März 2002 und hat eine Laufzeit von zwei Jahren. (Ansprechpartner: Volker Sander, Tel. 6586)

20. Kolloquium über Parallelverarbeitung

Am 3. Juni 2002 findet im Institut für Informatik der Universität zu Köln das 20. Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen statt. Die Veranstaltung hat das Schwerpunktthema „Meteorologie“. Das detaillierte Programm und weitere Informationen zur Kolloquiumsreihe sind unter <http://www.fz-juelich.de/zam/pkoll> zu finden. (Ansprechpartner: Daniel Mallmann, Tel. 2433)

Jmol - Visualisierung von chemischen Strukturen

Jmol ist ein Programm zur interaktiven 3D-Visualisierung, Analyse und Manipulation von Molekülen. Es ist als Nachfolge und Alternative zu dem früher stark verbreiteten Programm xmol gedacht, dessen Entwicklung seit längerer Zeit eingestellt wurde und das nicht mehr auf allen Unix-Plattformen vorhanden ist. Jmol interpretiert unterschiedli-

che Dateiformate (u.a. GAMESS, Gaussian und XYZ) und neben der Darstellung statischer Strukturen ist auch die Animation molekulardynamischer Berechnungen möglich. Jmol erlaubt die Messung und Ausgabe von Atom-Abständen, Bindungs- und Dihedralwinkeln ebenso wie die Vektordarstellung von Geschwindigkeiten und Dipolen während der Animation. Eine weitere Stärke liegt in der direkten Ansteuerung des POV-Ray-Programms zur hochqualitativen Bilderzeugung mit Beleuchtung und Schatten für Präsentation und Publikation.

Jmol ist plattformübergreifend, da es in Java geschrieben ist und seine graphische Oberfläche auf dem SWING-Toolkit basiert. Es kann auch als Applet auf Web-Seiten eingesetzt werden und ist skriptfähig. Jmol ist verfügbar auf dem zentralen AIX-System, den vom ZAM administrierten Workstation-Gruppen sowie dem Distribution-Server zamsft. (Ansprechpartner: Dietrich Bartel, Tel. 6423)

CPU-Zeit-Schwankungen auf CRAY SV1ex

Mit dem Übergang des Vektorrechnerbetriebes von CRAY T90 auf CRAY SV1ex häuften sich Anfang Februar Meldungen von Benutzern, daß die CPU-Zeiten ihrer Jobs bei sonst gleichen Bedingungen auf SV1ex stark schwanken würden – bis zu einem Faktor 3. Mit einem kurzen Job, der automatisch jede halbe Stunde gestartet wurde und damit als eine Art Sonde fungierte, konnte das ZAM diese Beobachtungen verifizieren und unabhängig von vereinzelt Benutzermeldungen analysieren. Weitere Testprogramme erhärteten den Verdacht, daß die im Gegensatz zu T90 geringe Speicherbandbreite zwischen Hauptspeicher und CPUs dafür verantwortlich sein dürfte, wenn auch das beobachtete Ausmaß erstaunlich war. Gemeinsam mit der Fa. Cray wurden die Systemeinstellungen überprüft und optimiert, der erhoffte Erfolg blieb jedoch aus.

Erst als eine mögliche Korrelation zwischen den im System befindlichen Benutzerjobs und den Schwankungen systematisch untersucht wurde, konnte die Ursache eindeutig lo-

kalisiert und behoben werden. Identifiziert wurde ein einzelnes Benutzerprogramm, welches durch ungünstige Programmierung eine extrem hohe Zahl von Speicherzugriffskonflikten verursachte. Das Programm wurde optimiert, läuft seitdem schneller und verursacht keine meßbaren Laufzeit-schwankungen bei anderen Programmen mehr.

Da im Gegensatz zu CRAY T90 Speicherzugriffskonflikte auf CRAY SV1ex nicht nur verzögernde Auswirkungen auf das verursachende Programm haben, sondern auch auf alle anderen Programme, die zur selben Zeit ausgeführt werden, bittet das ZAM an dieser Stelle um die Beachtung der aus diesem Anlaß verfaßten Benutzerinformation (<http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/zugriffskonflikt.html>).

(Ansprechpartner: Dr. Norbert Attig, Tel. 4416)

Gsharp auch unter Linux und Windows

Gsharp ist eine interaktive Software der Firma AVS/Uniras zur Erstellung von 2D- und 3D-Präsentationsgraphiken mit Hilfe einer Motif-Benutzeroberfläche oder einer Kommando-schnittstelle. Gsharp ist seit langem auf dem zentralen AIX-Rechner, den Workstation-Gruppen und über den Software-Distribution-Server des ZAM für die Plattformen AIX, Irix, Digital Unix, Solaris und HP/UX verfügbar.

Die aktuelle Version 7.2 von Gsharp liegt jetzt auch für Linux vor. Die Software ist auf den Linux-Gruppen installiert und steht auf dem Software-Distribution-Server bereit. Es gibt auch eine Version für Windows-Systeme (9x, NT, 2K). Die CD zur Installation unter Windows kann im ZAM entliehen werden. (Ansprechpartnerin: Marlene Busch, Tel. 4100)

Hot-Standby für das zentrale Firewall-System

Seit dem 6. März 2002 wird das neue zentrale Firewall-System des JuNet in einer sogenannten Failover-Konstellation betrieben. Damit wird ein zentraler Knotenpunkt der Kommunikation gegen einen eventuellen Ausfall gesichert. Dazu tauschen die beiden baugleichen Geräte Zustandsinformationen aus, die eine genaue Fehleranalyse ermöglichen.

Im Fehlerfall erfolgt für den Benutzer unmerkbar ein automatischer Übergang der Firewall-Funktion von der aktiven zur passiven Maschine, der sogenannten Failover-Unit. Das neue aktive Gerät übernimmt die Adressen der ehemals aktiven Einheit, so daß gerade die VPN-Benutzer des Forschungszentrums keine Änderungen in der Adressierung des Tunnelendpunktes erfahren. Allerdings müssen bestehende VPN-Verbindungen im Fehlerfall neu aufgebaut werden. Dies gilt, aufgrund protokoll-spezifischer Eigenheiten, für alle verbindungslosen Dienste (z.B. UDP-Anwendungen). TCP-Verbindungen werden anhand ihrer Zustandsinformationen übernommen, so daß eine nahezu störungsfreie Kommunikation ermöglicht wird.

Durch diese Konfiguration ist ein zuverlässiger IT-Grundschutz in vielen Fehlerszenarien (Stromausfall usw.) gewährleistet. (Ansprechpartner: Egon Grünter, Tel. 5408)

Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2001-14 Proceedings of the Workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing (POOSC'01)
- IB-2001-16 Giant Eigenproblems from Lattice Gauge Theory on CRAY T3E Systems
- IB-2001-17 AIX Compiler Update
- IB-2002-02 How to Realize Data-Parallel Algorithmic Skeletons with C++
- IB-2002-03 GIO: Ein System für parallele Ein-/Ausgabe auf Rechnerverbundsystemen
- IB-2002-04 AIX Tipps und Tricks

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Einführung in das Finite-Element-Programmsystem PERMAS

Referenten: Mitarbeiter der Fa. INTES GmbH, Stuttgart

Termin: 13. - 14.5.2002, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an B.Koerfgen@fz-juelich.de, Tel. 6761

Daten auswerten mit SAS

Referenten: Paul Jansen, Monika Marx, ZAM

Termin: Mittwoch, 15.5.2002, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an statistik.zam@fz-juelich.de, Tel. 6430

Erstellung von Videofilmen

Referent: Maik Boltes, ZAM

Termin: Freitag, 17.5.2002, 13.00 - 15.00 Uhr

Ort: Graphikraum im ZAM

Anmeldung an M.Boltes@fz-juelich.de, Tel. 6557

Solving Very Large Numerically Intensive Problems: Efficiency and Scalability Issues

Referent: Janusz Kowalik, Boeing, Seattle

Termin: Dienstag, 28.5.2002, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Nutzung von Unix

Referenten: Thomas Plaga, Meike Wegmann, ZAM

Termin: 3. - 4.6.2002, 9.00 - 16.30 Uhr,
5.6.2002 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an M.Wegmann@fz-juelich.de, Tel. 6765

Kolloquium über Parallelverarbeitung

Termin: Montag, 3.6.2002, 9.00 - 17.30 Uhr

Ort: Institut für Informatik, Universität zu Köln

Info: <http://www.fz-juelich.de/zam/pkoll/>

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