



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 134 • Mai 2005

Workshop „Fast Algorithms for Long-Range Interactions“

Der weltweit erste multidisziplinäre Workshop über effiziente Algorithmen zur Behandlung langreichweitiger Wechselwirkungen in Vielkörpersystemen fand vom 7. bis 8. April am ZAM statt. Ziel der vom NIC/ZAM und dem Frankfurt Institute of Advanced Studies (FIAS) organisierten Veranstaltung war es, Forscher aus verschiedenen Fachrichtungen zusammenzubringen und den Erfahrungsaustausch über Algorithmen zu fördern.

Vierzig Teilnehmer aus Disziplinen der angewandten Mathematik, physikalischen Chemie, Polymerphysik, Biophysik, Quantenchemie, Festkörperphysik, Plasmaphysik und Astrophysik diskutierten über zwanzig Vorträge und Posterbeiträge. Im Zusammenhang mit periodischen Systemen wurde insbesondere die Frage erörtert, ob die etablierten schnellen Coulomb-Solver wie Particle-Mesh-Ewald- oder P³M-Methoden nicht besser mit leichter parallelisierbaren Algorithmen wie Particle-Multigrid und Multipolmethoden (Tree-Codes und Fast-Multipole-Methode) zu realisieren wären. Offene Systeme wie Sternenhaufen in Galaxien mit hohen Ansprüchen an die numerische Genauigkeit werden zurzeit mit direkten Methoden simuliert. Hier wurde diskutiert, ob bei mehr als 10⁶ Teilchen ein speziell angepasstes Gitter- oder Multipolverfahren effizienter sein könnte. Mehrfach wurde auch auf den Mangel an wohldefinierten Benchmarks hingewiesen, mit denen man neue Verfahren quantitativ vergleichen könnte. Damit ließe sich z.B. der Crossover-Punkt von Algorithmen mit verschiedener Komplexität (N , $N \log N$, $N^{3/2}$ oder N^2) bestimmen oder ihre parallele Skalierbarkeit auf unterschiedlichen Rechnerarchitekturen untersuchen.

Die Ergebnisse des Workshops werden in die Arbeiten des ZAM einfließen, die sich mit der parallelen Fast-Multipole-Methode, mit Tree-Codes und Multigrid-Verfahren befassen. Diese Algorithmen werden später in eine Bibliothek einge-

bracht, die den Benutzergruppen des NIC zur Verfügung gestellt wird.

Weitere Informationen über den Workshop einschließlich der Vortragsfolien findet man unter: <http://www.fz-juelich.de/conference/fcs/>. (Ansprechpartner: Priv.-Doz. Dr. Paul Gibbon, Tel. 1499)

Rückgabe der Zugangsberechtigung zu den zentralen IT-Ressourcen

Die Nutzung der vom ZAM angebotenen IT-Ressourcen ist generell auf die Dauer der Zugehörigkeit der Nutzer zum FZJ oder auf die Dauer von NIC- bzw. VSR-Projekten beschränkt. Alle an FZJ-Mitarbeiter vergebenen zentralen Ressourcen sind mit der offiziellen E-Mail-Adresse des Benutzers verbunden. Da das ZAM oft nicht erfährt, wenn ein Benutzer das Forschungszentrum verlässt, ist die Gültigkeit von offiziellen E-Mail-Adressen auf 2 Jahre beschränkt. In Absprache mit der DV-Kommission wurden neue Richtlinien entwickelt, wie beim Ausscheiden von Benutzern oder beim Ablauf der Gültigkeit einer offiziellen E-Mail-Adresse mit den IT-Ressourcen zu verfahren ist. In der TKI-0403 „Rückgabe von zentralen IT-Ressourcen“ finden Sie dazu nähere Informationen. (Ansprechpartnerin: Christa Dohmen, Tel. 4494)

Leistungsengpässe bei der Oracle-Datenbank

In den letzten zwei Monaten sind zeitweise Leistungsengpässe bei der Nutzung der Oracle-Produktionsdatenbank aufgetreten. Sie wurden durch massive Dateneingabe einer Anwendung verursacht. Hiervon war auch der FZJ-Webserver betroffen. Als Betreiber der zentralen Datenbank hat das ZAM im Allgemeinen keine Kenntnis von den Aktionen der Nutzer. Wir bitten daher, uns rechtzeitig vorher über Planungen von umfangreichen Datenspeicherungen zu informieren, um gemeinsam einen günstigen Zeitraum dafür

zu finden oder nach Alternativen zu suchen. Generell sollten Datenbank- und Webnutzer die zentrale Beratung (Tel. 6400) informieren, wenn Sie Leistungseinbrüche beobachten, damit schnelle Abhilfe geschaffen werden kann.

Auf Wunsch einiger Nutzer wird der Termin der Umstellung der Produktionsdatenbank (Migration auf Oracle 10g) auf den 30.6.2005 verschoben. Der genaue Ablauf der Migration wird den Oracle-Anwendern per E-Mail mitgeteilt. (Ansprechpartner: Walter Elmenhorst, Tel. 6762)

DEISA-Symposium

Das von der EU geförderte Projekt DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications) hat zum Ziel, auf der Basis nationaler Höchstleistungssysteme und -zentren einen virtuellen europäischen Supercomputer zu realisieren, auf dem neuartige wissenschaftliche Erkenntnisse durch Simulationsrechnungen erzielt werden können. Am 9. und 10. Mai 2005 fand in Paris das erste DEISA-Symposium mit über 180 Teilnehmern aus Europa und USA statt. Führende Wissenschaftler aus verschiedenen Fachdisziplinen gaben einen Überblick über den Stand der Technik und die künftig benötigten Computing-Ressourcen. Beispielsweise seien folgende Anwendungsgebiete genannt:

Die Klimamodellierung (Prof. André, CERFACS) erfordert die Kopplung der Simulation mehrerer Subsysteme. Für eine quantitativ zuverlässige, langfristige Abschätzung von Temperatur oder Niederschlag muss das Modell für jedes der Subsysteme verfeinert werden. Dazu wird eine Rechenleistung von einigen 10 TeraFlops bis zu einigen 10 PetaFlops benötigt.

Die Nanotechnologie und die Biologie (Prof. Parrinello, ETH Zürich) setzen neue Verfahren in der Molekulardynamik-Simulation ein, mit denen künftig bisher unlösbare Probleme behandelbar werden.

Die Kosmologie (Prof. Frenk, Durham) nutzt Simulationen, um die Entstehung und Entwicklung des Universums und der beobachteten Strukturen zu erklären.

Die Quantenchromodynamik (Prof. Lippert, FZJ) ist eine fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung. Ergebnisse konnten durch den Einsatz von Höchstleistungsrechnern erzielt werden. In den nächsten Jahren benötigt Europa eine Dauerleistung von mindestens 100 TFlops für QCD-Rechnungen, um wissenschaftlich konkurrenzfähig zu bleiben.

Michael Levine, Pittsburgh Supercomputer Center, und Ed Seidel, Louisiana State University, gaben einen Überblick über Trends in High Performance Computing und Grid Computing. Ralph Roskies, Pittsburgh Supercomputer Center, berichtete über Anwendungen im TeraGrid, dem US-Pendant zu DEISA. Victor Alessandrini, IDRIS, der Projekt-Koordinator von DEISA, stellte die im ersten Jahr erreich-

ten Ergebnisse und die von DEISA initiierte „Extreme Computing Initiative“ vor, für die noch Bewerbungen bis zum 30. Mai 2005 möglich sind. Weitere Informationen sind unter <http://www.deisa.org> zu finden.

24. Kolloquium über Parallelverarbeitung

Am 23. Mai 2005 findet in der Universität zu Köln das 24. Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen mit dem Schwerpunktthema „Simulation“ statt. Unter anderem werden Verfahren aus den Bereichen Materialwissenschaft, Quanten-Computing und Fahrplanoptimierung vorgestellt.

Unter <http://www.fz-juelich.de/zam/pkoll> sind das detaillierte Programm und weitere Informationen zur Kolloquiumsreihe zu finden. Alle Interessierten sind herzlich zur Teilnahme eingeladen.

Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0402 Linux Personal Firewall mit iptables
- TKI-0403 Rückgabe von zentralen IT-Ressourcen
- IB-2005-01 Finite-Size Effects in Lattice QCD with Dynamical Wilson Fermions
- IB-2005-03 Performance-Analyse paralleler Löser für dünnbesetzte lineare Gleichungssysteme auf IBM p690
- NIC Series Vol. 25 High Performance Computing in Chemistry
- NIC Series Vol. 26 Zerlegung von Signalen in unabhängige Komponenten: Ein informationstheoretischer Zugang

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

Kolloquium über Parallelverarbeitung in technisch-naturwissenschaftlichen Anwendungen

Termin: Montag, 23.5.2005, 9.30 - 17.00 Uhr

Ort: Hörsaal 301, Institut für Informatik, Universität zu Köln

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

Programmierung in Java

Referent: Dr. Bernd Schuller, ZAM

Termin: 6. - 8.6.2005, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an B.Schuller@fz-juelich.de, Tel. 8736

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: <http://www.fz-juelich.de/zam/neues/termine/>

NIC: <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/>