



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 139 • November 2005

### Einweihung von IBM Blue Gene/L JUBL

In einer Feierstunde am 8. November wurde das System IBM Blue Gene/L, genannt JUBL, durch Johann Weißen, Vorsitzender der Geschäftsführung IBM Deutschland, seiner Bestimmung in Jülich übergeben. Symbolisch überreichte er dem Vorstandsvorsitzenden des FZJ, Prof. Treusch, die CD mit dem Betriebssystem. Herr Treusch hob hervor, dass der Bedarf an Supercomputerkapazität ständig steige und Jülich sich darauf vorbereite, dieser Herausforderung zu begegnen. Prof. Lippert, ZAM, erklärte, die Installation von JUBL sei der erste Schritt zum Ausbau der Rechenzentrumsleistung, und legte die Planungen für die kommenden Jahre dar. Anschließend stellte Prof. Wagner, Vorstand des FZJ, fest, dass Jülich mit den beiden installierten IBM-Systemen JUMP und JUBL mit einer Gesamtleistung von 15 TFlops das leistungsstärkste Supercomputerzentrum in Deutschland sei. Das FZJ bewerbe sich als Standort für ein europäisches Supercomputerzentrum. Im Wettbewerb mit anderen Rechenzentren sei es gut positioniert. Johann Weißen unterstrich die Absicht einer langfristigen Kooperation von IBM und dem FZJ mit einer Einladung an die Jülicher Experten in das Entwicklungslabor in Böblingen.

### Winterschule „Computational Nanoscience“

Das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) veranstaltet unter der Regie des ZAM vom 14. bis 22. Februar 2006 eine Ferienschule zum Thema „Computational Nanoscience: Do It Yourself!“. Es setzt damit seine erfolgreiche Veranstaltungsreihe zur Ausbildung im wissenschaftlichen Rechnen fort.

Das Programm der Ferienschule richtet sich an Doktoranden und Postdocs auf den Gebieten Computational Physics, Chemistry und Material Science und wurde von Stefan Blügel (IFF), Johannes Grotendorst (ZAM) und Dominik Marx (Ruhr-Universität Bochum) ausgearbeitet. Im Mittelpunkt stehen die vier Programmcodes FLEUR und KKR-GF

(Festkörper- und Oberflächenphysik), CPMD (chemische Reaktionen und Dynamik) und TURBOMOLE (Struktur und Eigenschaften großer Moleküle und Cluster). Vormittags werden die theoretischen Modelle und Methoden, die diesen Programmen zugrunde liegen, von führenden Wissenschaftlern der Computational Science vorgestellt. Am Nachmittag werden Praktika im Simulationslabor unter Nutzung des Jülicher Supercomputers JUMP angeboten.

Interessenten können sich um die Teilnahme mit Lebenslauf und Beschreibung ihres Arbeitsgebietes zusammen mit einem Empfehlungsschreiben ihres Mentors bis 30. November 2005 bewerben. Etwa 40 junge Wissenschaftler können an dieser Veranstaltung teilnehmen.

Weitere Informationen und das ausführliche Programm finden Sie im Web unter <http://www.fz-juelich.de/wscn>. Fragen richten Sie bitte an [wscn@fz-juelich.de](mailto:wscn@fz-juelich.de) oder direkt an Dr. Johannes Grotendorst, Tel. 6585.

### CECAM-Tutorial „Programming Parallel Computers“

Im Rahmen der Mitgliedschaft des Forschungszentrums Jülich beim Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM) veranstaltet das NIC/ZAM vom 23. bis 27. Januar 2006 ein Tutorial zum Thema „Programming Parallel Computers“.

Ziel des Tutorials ist es, die Teilnehmer in die Programmierung wissenschaftlich-technischer Anwendungen auf parallelen Höchstleistungsrechnern einzuführen. Nach einem Überblick über grundlegende Konzepte der parallelen Datenverarbeitung wird der Schwerpunkt des Kurses auf der Nutzung des Message Passing Interface (MPI) liegen, dem Standard-Werkzeug für die Programmierung von Architekturen mit verteiltem Speicher. Es folgt eine Einführung in die Programmierung von Systemen mit gemeinsamem Speicher unter Einsatz von OpenMP. Der Kurs wird im Wechsel von Vorträgen und Übungen im Ausbildungsraum des ZAM durchgeführt.

Weitere Informationen zum Kurs erhalten Sie auf der Homepage des CECAM <http://www.cecarn.fr>. Zum Anmelden folgen Sie bitte dem Pfad „Tutorials“ -> „Programming Parallel Computers“. Anmeldeschluss ist der 30. November 2005. (Ansprechpartner: Dr. Boris Orth, Tel. 2528)

### **Workshop „Computational and Technological Challenges of LOFAR“**

Vom 15. bis 16. Dezember 2005 richtet das FZJ den Workshop „Computational and Technological Challenges of LOFAR“ aus. LOFAR steht für Low Frequency Array und ist ein Prototyp für die nächste Teleskopgeneration in der Radioastronomie. Die neue Technologie wird zurzeit in den Niederlanden entwickelt. Sie basiert auf einer großen Anzahl von einfachen, über einen weiten geographischen Raum verteilten Antennen, deren Signale digital gesammelt und verarbeitet werden. Der Datentransport benötigt hohe Netzwerkbandbreiten und die Verarbeitung eine Leistung von mehreren TFlops. Der Workshop wird gemeinsam organisiert von ASTRON (Niederlande), dem NRW-Forschungsverbund Astro-Interferometrie und dem FZJ. Nähere Informationen sind unter <http://www.fz-juelich.de/nic/lofar> zu finden. (Ansprechpartnerin: Dr. Sabine Höfler-Thierfeldt, Tel. 6765)

### **Kapazitätserhöhung der Glasfaser-Strecke zur RWTH Aachen**

Zwei Jahre nach ihrer Inbetriebnahme werden alle vier Paare der Glasfaser-Verbindung zwischen dem FZJ und der RWTH Aachen genutzt: für den G-WiN-Anschluss des FZJ, die Drittmittelprojekte DEISA und VIOLA sowie für eine Campus-Kopplung von FZJ und RWTH, über die z.B. die wechselseitige Spiegelung der TSM-Archive realisiert ist.

Um Kapazität für neue Anwendungen zu schaffen, setzt das ZAM seit Kurzem CWDM-Technik (Coarse Wavelength Division Multiplexing) ein. Die auch in großen Providernetzen eingesetzte WDM-Technik ermöglicht durch die parallele Übertragung vieler Gigabit-Ethernet-Verbindungen in separierten schmalbandigen Wellenlängenbereichen (Lambdas) eine kostengünstige Vervielfachung der über ein Faserpaar übertragbaren Bandbreiten. Durch den Einsatz dieser Technik konnte u.a. die benötigte zusätzliche Kapazität für die Vorbereitung der bevorstehenden Migration des Wissenschaftsnetzes G-WiN auf das X-WiN bereitgestellt werden. (Ansprechpartner: Dr. Thomas Eickermann, Tel. 6596)

### **ZAM/NIC-Veranstaltungen**

#### **Sicherheit im Internet für Windows-Benutzer**

Referent: Dr. David A. Wesner, ZAM  
Termin: 29.11. und 1.12.2005, 14.00 - 16.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

#### **Das Programmierwerkzeug make**

Referent: Günter Egerer, ZAM  
Termin: Dienstag, 6.12.2005, 13.30 - 16.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

#### **Konzepte von OpenGL**

Referent: Dr. Herwig Zilken, ZAM  
Termin: Mittwoch, 7.12.2005, 13.30 - 16.30 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [H.Zilken@fz-juelich.de](mailto:H.Zilken@fz-juelich.de), Tel. 1498

#### **Daten auswerten mit SAS – eine Einführung**

Referenten: Paul Jansen, Monika Marx, ZAM  
Termin: Donnerstag, 8.12.2005, 9.00 - 15.00 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [P.Jansen@fz-juelich.de](mailto:P.Jansen@fz-juelich.de), Tel. 6430

#### **E-Mail: zentrale Dienste, Clients, Abwehr von SPAM, Signieren und Verschlüsseln**

Referent: Martin Sczimarowsky, ZAM  
Termin: Donnerstag, 8.12.2005, 14.00 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

#### **Large Scale Simulation of Ideal Quantum Computers**

Referent: Dr. Guido Arnold, ZAM  
Termin: Dienstag, 13.12.2005, 14.00 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

#### **Mesoscale simulations of colloids in shear flow**

Referent: Prof. Dr. Roland Winkler, IFF  
Termin: Dienstag, 13.12.2005, 14.45 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

#### **Workshop „Computational and Technological Challenges of LOFAR“**

Termin: 15. - 16.12.2005  
Ort: VR-Rotunde im ZAM  
Info: <http://www.fz-juelich.de/nic/lofar>

### **Jahresabschlusskolloquium am 20.12.2005**

- 09.30 Thomas Lippert: Begrüßung
  - 09.45 Dietmar Erwin: Ein Blick zurück nach vorn
  - 10.45 Felix Wolf: Spurbasierte Leistungsanalyse auf großen Systemen
  - 11.45 Wolfgang Gürich: „Wir sind D-Grid“ – Aufbau und Betrieb einer Grid-Infrastruktur
  - 12.15 Achim Streit: UNICORE – Guckst du hier!
  - 14.00 Ralph Niederberger: VIOLA – fidele Ideen für das Netz
  - 14.30 Ulrich Hansmann: Computergestützte Protein-Biophysik am NIC
  - 15.00 Jutta Docter: Blue Gene/L – JUBL in Jülich
  - 15.30 Thomas Lippert: Deutschland auf dem Weg zu einem europäischen Supercomputer
- Termin: Dienstag, 20.12.2005, 9.30 - 16.00 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

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