



ZAM aktuell

*Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik*

Nr. 95 • Mai 2001

Anschluß ans G-WiN

Anfang April konnte endlich der Anschluß des Forschungszentrums an das Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) des DFN-Vereins in der ersten Ausbaustufe mit einer Bandbreite von 155 Mbit/s in Betrieb genommen werden. Lieferschwierigkeiten der Zulieferfirmen des Leitungsbetreibers hatten zu einer mehrmonatigen Verzögerung der Inbetriebnahme geführt. Aus dem G-WiN gibt es folgende Übergänge ins weltweite Internet: Mit 1 Gbit/s ist das G-WiN an den zentralen Austauschpunkt DE-CIX in Frankfurt angebunden, an den viele kommerzielle Internet-Anbieter innerhalb Deutschlands angeschlossen sind. Die europäischen Forschungsnetze sind mit einer Bandbreite von 622 Mbit/s zu erreichen, für die Kommunikation in die USA und darüber erreichbare Länder stehen zwei Leitungen mit jeweils 622 Mbit/s Bandbreite zur Verfügung. Zur Zeit laufen die Vorbereitungen für die nächste Ausbaustufe des G-WiN-Anschlusses mit einer Geschwindigkeit von 622 Mbit/s für das FZJ. (Ansprechpartnerin: Sabine Werner, Tel. 2742)

Glasfaserverkabelung kommt voran

Die vom Vorstand im Oktober 2000 beschlossene Erneuerung der JuNet-Infrastruktur (siehe „ZAM aktuell“ Nr. 90) macht gute Fortschritte: Derzeit sind 12 Gebäude des Forschungszentrums vollständig und 8 teilweise mit einer modernen sternförmigen Verkabelung versehen; für 16 weitere ist die Verkabelung bereits in die Wege geleitet. In drei Jahren soll die Maßnahme abgeschlossen sein; dann werden alle Gebäude des Forschungszentrums nach der Europäischen Norm EN 50173 mit jeweils zwei Netzanschlüssen pro Arbeitsplatz versehen sein.

Eine wesentliche Eigenschaft der neuen Infrastruktur ist, daß sie für jedes einzelne Endgerät, z.B. Rechner oder Drucker, einen eigenen Netzanschluß bereitstellt. Dieses hat mehrere große Vorteile: Dem Gerät steht exklusiv eine hohe Kommunikationsleistung zur Verfügung. Im Falle von

Störungen werden Problemanalyse und -behebung erheblich beschleunigt. Wirksame Verfahren zur weiteren Erhöhung der IT-Sicherheit, z.B. virtuelle Local Area Networks (VLANs) mit unterschiedlichen Sicherheitsbedürfnissen, lassen sich einsetzen. Damit sind dem Netz- und Sicherheitsmanagement die Werkzeuge in die Hand gegeben, Leistung, Verfügbarkeit und Sicherheit des rapide wachsenden und komplexer werdenden JuNet auch weiterhin zu gewährleisten.

Damit diese Vorteile auch wirklich gegeben sind, wird die neue Infrastruktur so eingerichtet werden, daß an jeder Datensteckdose genau ein Endgerät betrieben werden kann. In fünf Jahren sollen die letzten Reste der alten JuNet-Infrastruktur stillgelegt werden. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

BMBF-Verbundprojekt HPC-Chem

Am 1. März haben die Arbeiten im vom ZAM initiierten Verbundprojekt HPC-Chem (High Performance Computing in der Chemie) begonnen. Ziel des Projektes, das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert wird, ist die Bereitstellung wichtiger Programmsysteme aus der Quantenchemie mit einer für industrielle Anwendungen geeigneten Methodenvielfalt (Korrelations-, Dichtefunktional- und Ab-Initio-Molekulardynamik-Methoden) und hoher Leistungsfähigkeit. In diesem Vorhaben werden die Programmsysteme MOLPRO (Universität Stuttgart), TURBOMOLE (Universität Karlsruhe) und QUICKSTEP (MPI Stuttgart) methodisch weiterentwickelt und gleichzeitig an moderne parallele Rechnerarchitekturen angepaßt. Ein Schlüsselement der algorithmischen Verbesserung der Programme ist die Weiterentwicklung von linear mit der Molekülgröße skalierenden Rechenverfahren und deren parallele Implementierung, so daß die genaue Berechnung von chemischen Eigenschaften großer Moleküle möglich wird.

Dieses aktuelle Forschungsthema der Theoretischen Chemie war auch ein Schwerpunkt der letztjährigen NIC-

Winterschule mit dem Titel „Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry“ (Proceedings: <http://www.fz-juelich.de/nic-series/Volume3/>). Der industrielle Einsatzbereich der ausgewiesenen Programme soll zudem durch die Einbindung des Lösungsmittelmodells COSMO erweitert werden. Die Arbeitspakete des ZAM beinhalten u. a. die parallele Implementierung der Fast-Multipole-Methode, neuer Verfahren der linearen Algebra sowie die Performance-Analyse und Programmoptimierung der Chemie-Codes.

Die Projektkoordinierung liegt beim ZAM. Neben dem ZAM sind die folgenden Partner beteiligt: Universität Stuttgart (Prof. Werner), Universität Karlsruhe (Prof. Ahlrichs), Max-Planck-Institut für Festkörperforschung Stuttgart (Prof. Parrinello), BASF AG, Bayer AG, Robert Bosch GmbH, Infracor GmbH (Marl, Degussa-Gruppe) und COSMOlogic GmbH & Co. KG (Leverkusen). (Ansprechpartner: Dr. Johannes Grotendorst, Tel. 6585)

Debugging mit TotalView

TotalView von der Firma Etnus ist ein plattformunabhängiger Debugger für serielle und parallele Anwendungen. TotalView unterstützt die Programmiersprachen Fortran77, Fortran90, C, C++, HPF und Assembler sowie die gängigen parallelen Programmiermodelle MPI, OpenMP und PVM. Seine Bedienung erfolgt über eine graphische Benutzeroberfläche, so daß kein Erlernen einer umfangreichen Kommandosprache notwendig ist.

TotalView steht als einheitliches und leicht erlernbares Werkzeug für die Programmentwicklung auf den Linux-Workstations, dem zentralen AIX und dem Linux-SMP-Cluster ZAMpano zur Verfügung. Für CRAY T3E gibt es seit langem eine von Cray speziell angepaßte Version. Hinweise auf Dokumentation zu TotalView findet man unter <http://www.fz-juelich.de/zam/pt/lang/tools/totalview>.

(Ansprechpartner: Willi Erkens, Tel. 4227)

Testbenutzer für ZAMpano gesucht

Im April wurde auf dem SMP-Cluster ZAMpano (<http://www.fz-juelich.de/zam/zampano>) das Batch-Subsystem PBS der Firma Veridian installiert. In Verbindung mit dem graphischen Interface UNICORE besteht nun die Möglichkeit, Batch-Jobs zu submittieren. Damit ist das Cluster auch als Testsystem in das EUROGRID-Projekt (<http://www.eurogrid.org>) integriert.

Das ZAM lädt interessierte Benutzer ein, „kleinere“ Jobs auf einem modernen SMP-System zu rechnen. Das Cluster besteht aus acht Knoten à vier Prozessoren, läuft unter dem Betriebssystem Linux und stellt eine breite Palette an Compilern, Message-Passing-Umgebungen und mathematischer Software zur Verfügung. (Ansprechpartner: Philipp Wieder, Tel. 6763)

Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2001-02 Eine Untersuchung zur Sicherung von PC-Betriebssystemen
- IB-2001-03 Finite Elemente in Scilab: Das Lösen partieller Differentialgleichungen mit Hilfe der FreeFEM-Toolbox

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

Härtetest für die Hitachi SR8000

Referent: Dr. Gerhard Wellein, Regionales Rechenzentrum Erlangen

Termin: Dienstag, 8.5.2001, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Kolloquium über Parallelverarbeitung

Termin: Montag, 14.5.2001, 9.30 - 17.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Information: <http://www.fz-juelich.de/zam/pt/PKoll.html>

Nutzung von Unix

Referenten: Meike Wegmann, Thomas Plaga, ZAM

Termin: 14. - 15.5.2001, 9.00 - 16.30 Uhr

16.5.2001, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

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

Web3D: 3D im WWW?!

Referent: Dieter Bartel, ZAM

Termin: Mittwoch, 16.5.2001, 14.00 - 16.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an D.Bartel@fz-juelich.de, Tel. 6423

Graphisches Editieren mit Gimp

Referentin: Marlene Busch, ZAM

Termin: Donnerstag, 17.5.2001, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an graphik.zam@fz-juelich.de, Tel. 4100

Umstellung von Fortran77- zu Fortran90-Programmen

Referent: Dietmar Koschmieder, ZAM

Termin: Donnerstag, 17.5.2001, 13.30 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an d.koschmieder@fz-juelich.de, Tel. 3439

Strategien zur Beschleunigung von ab-initio Methoden zur Behandlung elektronisch angeregter Zustände

Referent: Dr. Thomas Müller, Universität Wien

Termin: Dienstag, 22.5.2001, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

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