



# news



Spitzenleistung 15,6 TeraFlop/s

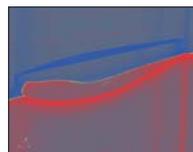
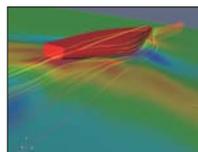
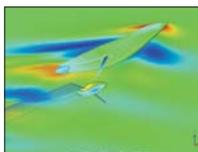
## Neuer Landeshöchstleistungsrechner am Universitätsrechenzentrum

### Virens Scanner jetzt auch auf zentralem Fileserver

### Neuer Zeitserver in Betrieb

xc-workshop

abaqus



# INHALT

<b>Neuer Landeshöchstleistungsrechner am Universitätsrechenzentrum</b>	
Spitzenleistung 15,6 TeraFlop/s . . . . .	3
<b>Neuer Zeitserver in Betrieb</b>	
. . . . .	4
<b>Virenschanner jetzt auch auf zentralem Fileserver</b>	
. . . . .	5
<b>Workshop zum neuen Landeshöchst- leistungsrechner</b>	
. . . . .	5
Finite Elemente <b>Einführung in ABAQUS 6.6</b>	
. . . . .	6
<b>Personalia</b>	
Neue Mitarbeiter . . . . .	7
<b>Erste Ansprechpartner auf einen Blick</b>	
. . . . .	8

# IMPRESSUM

**Herausgeber:** Prof. Dr. Wilfried Juling  
Redaktion: Ursula Scheller  
Tel.: 0721/608-4865  
E-Mail: [scheller@rz.uni-karlsruhe.de](mailto:scheller@rz.uni-karlsruhe.de)  
[http://www.rz.uni-karlsruhe.de/publikationen/  
rz-news.php](http://www.rz.uni-karlsruhe.de/publikationen/rz-news.php)

Universität Karlsruhe (TH)  
Rechenzentrum  
D-76128 Karlsruhe  
Nummer 11, 12 / 2006  
ISSN 1432-7015

## Neuer Landeshöchstleistungsrechner am Universitätsrechenzentrum

(red)

### Spitzenleistung 15,6 TeraFlop/s

**Am Universitätsrechenzentrum wurde die zweite Ausbaustufe des Landeshöchstleistungsrechners installiert. Dabei handelt es sich um ein Parallelrechnersystem der Firma Hewlett Packard mit mehr als 3.000 Prozessoren und einer Spitzenleistung von über 15 TeraFlop pro Sekunde. Zusammen mit dem bereits installierten nationalen Höchstleistungsrechner in Stuttgart realisiert das Land Baden-Württemberg damit eine einzigartige, herausragende Infrastruktur für Wissenschaft und Forschung im Land.**

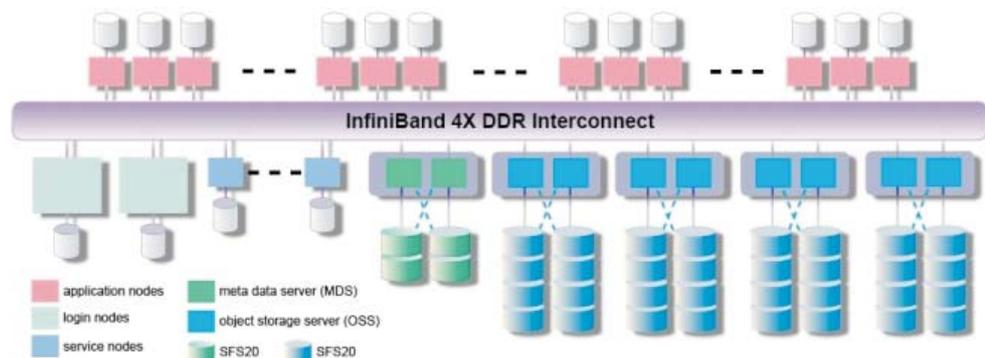
Nach dem jetzt erfolgten Abschluss der Hardwareinstallation wird der neue Supercomputer derzeit ausgiebig getestet. Neben den Mitarbeitern des Rechenzentrums sind bereits erste Anwender an den Tests beteiligt. Nach Abschluss der Testphase soll zum Jahreswechsel der reguläre Produktionsbetrieb aufgenommen werden. Das System steht dann im Rahmen des Höchstleistungsrechner-Kompetenzzentrums Baden-Württemberg (hkz-bw) sowohl Anwendern aus den Universitäten des Landes als auch Nutzern aus der Wirtschaft zur Verfügung, während der bisherige Landeshochleistungsrechner HP XC6000 für die Universität Karlsruhe betrieben wird.

Der Parallelrechner HP XC4000 besteht aus 750 einzelnen Rechenknoten mit je zwei Doppelkernprozessoren des Typs AMD Opteron und einem Hauptspeicher von je 16 GigaByte. Der gesamte Hauptspeicher umfasst 12 TeraByte. Prof. Dr. Wilfried Juling, Leiter des Universitätsrechenzentrums, erläutert: "Der große

Hauptspeicher des Landeshöchstleistungsrechners wird es den Wissenschaftlern ermöglichen, die numerische Simulation natürlicher Vorgänge mit einer deutlich höheren Auflösung als bisher durchzuführen und damit in Bereiche vorzustoßen, die uns mit bisherigen Rechnergenerationen nicht zugänglich waren."

Das Herzstück des neuen Supercomputers bildet das schnelle Kommunikationsnetz (InfiniBand DDR). Allein hierfür wurden 1550 Kabel mit einer Gesamtlänge von mehr als 10 Kilometern verlegt. Über dieses Netzwerk können Daten mit einer Geschwindigkeit von 2 GigaByte pro Sekunde zwischen den einzelnen Rechenknoten übertragen werden. "Dies entspricht der Leistung von ca. 16.000 DSL-Anschlüssen und ist die Voraussetzung dafür, dass Hunderte von Rechenknoten gemeinsam an der Lösung eines Problems arbeiten können", erklärt Prof. Juling weiter.

Für das interaktive Arbeiten auf der XC4000 können zwei Login-Knoten mit jeweils vier Doppelkernprozessoren genutzt werden. Auf diesen Knoten werden



Schematische Darstellung der XC4000.

die verschiedenen Aufgaben des Pre- und Postprocessing ausgeführt, die lokalen Dateien auf der XC4000 verwaltet und editiert, Programme übersetzt und interaktiv getestet sowie Batchjobs gestartet.

Von allen Knoten der XC4000 besteht Zugriff auf das parallele Dateisystem HP SFS. Im HP SFS sind derzeit zwei Dateisysteme eingerichtet, die über die Umgebungsvariablen \$HOME und \$WORK angesprochen werden können. Für die Home-Verzeichnisse der

Benutzer stehen 8 TB und für die Work-Verzeichnisse 48 TB Speicherplatz zur Verfügung.

Die Softwareumgebung auf der XC4000, die unter dem Namen `xc2.rz.uni-karlsruhe.de` erreicht werden kann, ist größtenteils identisch mit der auf der XC6000 installierten Software. Auf den einzelnen Knoten läuft eine RedHat-kompatible Linux-Version, die Parallelisierung über Knotengrenzen hinweg erfolgt mittels HP MPI und als Batchsystem wird SLURM zusammen mit dem Job Management System (JMS) des Rechenzentrums eingesetzt. Neben den GNU-Compilern stehen ebenfalls die Compiler von Intel sowie von der Portland Group und die PathScale Compiler Suite zur Verfügung. Die Auswahl der gewünschten Compilerfamilie erfolgt mit Hilfe des Pakets "Modules". Außerdem sind verschiedene Appli-

kationspakete aus dem Gebiet der Strömungs- und Strukturmechanik auf der XC4000 installiert.

Um eine Nutzungsberechtigung für die XC4000 zu erhalten, ist es erforderlich, einen Projektantrag zu stellen.

Weitere Informationen zur HP XC4000 sind im Web unter <http://www.rz.uni-karlsruhe.de/ssck/hpxc4000> abrufbar.

Für den 12. Januar 2007 ist ein erster Einführungskurs für zukünftige Nutzer des HP XC4000-Parallelrechners geplant (s. Seite 5).

Nikolaus Geers, Tel. -3755,  
E-Mail: [geers@rz.uni-karlsruhe.de](mailto:geers@rz.uni-karlsruhe.de)

## Neuer Zeitserver in Betrieb

*Roland Laifer*

---

### Hochgenaue Zeit über GPS-Antenne

---

**Das Standardprotokoll zur Synchronisation der Rechneruhren ist das Network Time Protocol (NTP), über das Arbeitsplatzrechner ihre Zeit mit NTP-Servern synchronisieren können. Die NTP-Server wiederum synchronisieren sich untereinander nach einem hierarchischen Modell, an dessen Spitze NTP-Server stehen, die ihre Zeit von einer externen Zeitquelle erhalten. Da der bisherige Zeitserver der Universität mittlerweile in die Jahre gekommen ist, hat das Rechenzentrum vor kurzem einen neuen derartigen Server beschafft und in Betrieb genommen.**

Seine externe Zeitquelle ist das Global Positioning System (GPS), das normalerweise bei der Navigation zur Positionsbestimmung eingesetzt wird, das heißt der Server hat eine GPS-Antenne, die auf dem Dach des Rechenzentrums montiert wurde, und erhält über sie eine hochgenaue Zeit. Innerhalb der Universität ist der Server unter dem Namen `ntp-s1.rz.uni-karlsruhe.de` bzw. unter der IP-Adresse 129.13.64.17 erreichbar.

Um eine Überlastung zu vermeiden, sollten ihn

möglichst nur andere NTP-Server direkt nutzen, das heißt Arbeitsplatzrechner oder andere Clients sollten in der Hierarchie tiefer stehende Server verwenden, siehe auch <http://www.rz.uni-karlsruhe.de/dienste/ntp>.

Der alte NTP-Server `nz11.rz.uni-karlsruhe.de` mit externer Zeitquelle und der IP-Adresse 129.13.64.7 wird in Kürze abgeschaltet; er hat immerhin mehr als 15 Jahre treue Dienste geleistet. Falls Sie in Konfigurationsdateien den Namen `nz11.rz.uni-karlsruhe.de` oder die IP-Adresse 129.13.64.7 verwenden, müssen Sie diese Adressierungen umstellen.

Des Weiteren hat sich die Policy des Rechenzentrums dahingehend geändert, dass der neue Zeitserver seine Dienste standardmäßig nicht mehr außerhalb der Universität zur Verfügung stellt.

Weitere Informationen erhalten Sie beim Autor.

Roland Laifer, Tel. -4861,  
E-Mail: [laifer@rz.uni-karlsruhe.de](mailto:laifer@rz.uni-karlsruhe.de)

## Virens scanner jetzt auch auf zentralem Fileserver

Ralf Wigand

**Die Bedrohung durch Viren nimmt ja bekanntermaßen stetig zu, aber zum Glück steigt auch die Anzahl entsprechender Programme, die mit immer größerer Trefferquote die Viren erkennen können, bevor allzu großer Schaden entsteht. Ein Beispiel hierfür ist der campusweit kostenlos verfügbare Virens scanner von McAfee, aktuell in der Version 8 (Hinweise zum Download finden Sie unter dem Smartlink "viren", den Sie auf der Startseite des RZ rechts unten eingeben können).**

Erfreulicherweise kann auf Clients eine Zunahme der Virens scanner-Installationen beobachtet werden, allerdings ist dieser Schutz noch nicht flächendeckend. Daher werden seit wenigen Wochen auch Dateien, die auf dem zentralen Fileserver des RZ abgelegt werden, nach Viren gescannt. Der Scan erfolgt nur bei einem Zugriff von Windows-Clients aus, also bei CIFS-Zugriffen, nicht jedoch bei NFS-Zugriffen oder SCP.

Als Scan-Engine wird auch hier der McAfee VirusScan Enterprise 8 verwendet, der hierzu auf mehreren Windows-Servern installiert ist und an den die Anfragen jeweils weitergereicht werden. Durch diesen

Mechanismus ist es möglich, mit der Scan Engine stets auf dem aktuellen Stand zu bleiben, ohne auf Spezial-Updates warten zu müssen.

Wird eine verdächtige Datei gefunden, dann wird versucht, die Datei zu säubern. Gelingt dies nicht, erfolgt eine Umbenennung der Datei durch Anhängen der zusätzlichen Endung ".vir". Hierdurch wird verhindert, dass die Datei durch Anklicken ausgeführt wird (da mit dieser Endung normalerweise keine Applikation verknüpft ist) beziehungsweise in der "Öffnen"-Dialogbox einer Applikation auftaucht, da dort normalerweise ein Filter auf geeignete Dateitypen vorgegeben ist. Solche Dateien sollten unbedingt gelöscht werden und vor allen Dingen sollten Sie nicht versuchen, auf anderen Wegen an die Datei zu gelangen.

Der Virens scanner ist nach einer erfolgreichen Testphase auf einem Teil des Gesamtsystems mittlerweile auf allen Partitionen des zentralen Fileservers aktiv. Bei Problemen wenden Sie sich bitte an das MicroBIT, Tel. -2997, E-Mail: [microbit@lists.uni-karlsruhe.de](mailto:microbit@lists.uni-karlsruhe.de) oder das BIT8000, Tel. -8000, E-Mail: [bit8000@rz.uni-karlsruhe.de](mailto:bit8000@rz.uni-karlsruhe.de).

Ralf Wigand, Tel. -7705,  
E-Mail: [wigand@rz.uni-karlsruhe.de](mailto:wigand@rz.uni-karlsruhe.de).

## Workshop zum neuen Landeshöchstleistungsrechner

Hartmut Häfner

Das Universitätsrechenzentrum wird Ende des Jahres 2006 ein HP XC4000-System als Landeshöchstleistungsrechner für Baden-Württemberg betreiben. Daher findet am 12. Januar 2007 ein Workshop zum neuen AMD Opteron-basierten System statt, das den jetzigen Itanium2-basierten HP XC6000-Höchstleistungsrechner ablöst. Im Zentrum des Workshops steht die effiziente Nutzung des HP XC4000-Parallelrechners.

**Datum:** 12.01.2007

**Zeit:** 10.00 Uhr

**Ort:** Rechenzentrum, Raum 217 (2. OG)  
**Anmeldung:** über <http://www.rz.uni-karlsruhe.de/veranstaltungen/veranstaltungen.php>.

### Agenda

- 10:00 Begrüßung und Vorstellung des Programms (Nikolaus Geers)
- 10:15 Organisation, Infrastruktur und Architektur (Nikolaus Geers)
- 11:00 Projektmanagement auf der HP XC4000 (Hartmut Häfner)
- 11:15 Kaffeepause

11:30	Einführung in die Benutzung des Systems (Hartmut Häfner)	15:30	Kaffeepause
12:15	Interaktive Jobs und Batch System (Slurm) (Horst Gernert)	16:00	Das parallele Dateisystem Lustre (Roland Laifer)
12:45	Mittagessen	16:30	Diskussion
14:00	Architektur des Opteron und Benchmarks (Hartmut Häfner)	17:00	Ende der Veranstaltung.
14:30	MPI, Numerische Bibliotheken und Tools (Hartmut Häfner)		Hartmut Häfner, Tel. -4869, E-Mail: haefner@rz.uni-karlsruhe.de.
15:00	CAE Codes (Dr. Paul Weber)		

## Finite Elemente

# Einführung in ABAQUS 6.6

*Dr. Paul Weber*

**Im Februar 2007 findet wieder ein Einführungskurs in das Finite-Elemente-Programm ABAQUS statt. ABAQUS gehört weltweit zu den am häufigsten eingesetzten Ingenieurprogrammen zur Berechnung strukturmechanischer Probleme wie Stabilität, dynamische Vorgänge, Schwingungsverhalten von Strukturen und Wärmeausbreitung.**

An der Universität wird ABAQUS auf vielen Insti-  
tutsrechnern eingesetzt. Am Rechenzentrum kann  
ABAQUS auf dem HP XC6000- und HP XC4000-Clus-  
ter genutzt werden.

**Datum:** 05.02.2007 - 09.02.2007  
**Zeit:** 9.00 - 13.00 Uhr und 14.00 - 16.00 Uhr  
**Ort:** Raum -101 im RZ  
**Anmeldung:** per E-Mail an paul.weber@rz.uni-  
karlsruhe.de

In diesem Kurs wird ABAQUS und seine grundsätz-  
liche Handhabung vorgestellt. Er wendet sich an Uni-  
versitätsangehörige, die ein FE-Programm kennenler-  
nen möchten oder es für Diplom- bzw. Studienarbeiten  
oder sonstige Projekte benötigen. Der Kurs findet  
ganztägig statt, wobei nachmittags in der Regel kleine  
Probleme praktisch bearbeitet werden.

### 1. Tag

- Aufbau und Struktur von ABAQUS, Dokumentation
- ABAQUS-Kommandos zur Erzeugung eines  
FE-Netzes

### 2. Tag

- Elementebibliothek, Stoffgesetze

### 3. Tag

- Prozeduren (Problemlösungen), Lösungsalgorith-  
men
- Randbedingungen, Lasten
- Restart, ABAQUS-Ausgabe

### 4. Tag

- ABAQUS-Umgebung am Rechenzentrum
- spezielle Problemösungen:
  - Eigenfrequenzen und -moden
  - dynamische Probleme
  - Wärmeausbreitung
  - gekoppelte Temperatur-Spannungsprobleme

### 5. Tag

- Modellierung von Kontaktproblemen.

Dr. Paul Weber, Tel. -4035,  
E-Mail: weber@rz.uni-karlsruhe.de.

## Personalia

(red)

---

### Neue Mitarbeiter

---

Herr **Mathias Krause**, Dipl.-Math. oec., ist seit dem 01. Oktober 2006 in der Abteilung Numerische Verfahren auf Hochleistungsrechnern angestellt.

Als wissenschaftlicher Mitarbeiter und Doktorand befasst er sich im Rahmen des BioTech-Projekts mit der interdisziplinären Verknüpfung von numerischer Simulation, Hochleistungsrechnen und Biotechnologie. Im OpenLB-Projekt arbeitet er an der Weiterentwicklung eines Open-Source-Codes einer Lattice-BGK-Methode, die zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen für schwach-kompressible Strömungen angewendet werden kann..

Der Arbeitsplatz von Herrn Krause befindet sich im Raum 216, Telefon -6350, E-Mail: mathias.krause@rz.uni-karlsruhe.de.

Herr **Hendryk Bockelmann**, Dipl.-Math. techn., ist seit dem 01. September 2006 in der Abteilung Numerische Verfahren auf Hochleistungsrechnern tätig. Im Rahmen einer Doktorandenstelle umfasst seine Arbeit die Optimierung und optimale Kontrolle bei PDEs - hierbei werden neuartige numerische Verfahren zur Lösung von sehr großen Problemen entwickelt.

Der Arbeitsplatz von Herrn Bockelmann befindet sich im Raum 216, Tel. -6350, E-Mail: hendryk.bockelmann@rz.uni-karlsruhe.de.

Herr **Werner Augustin**, Dipl.-Inform., ist seit dem 01. September 2006 in der Abteilung Scientific Supercomputing angestellt. Er ist für die Parallelisierung von Anwendungssoftware im Rahmen des HPTC3 (High Performance Technical Computing Competence Center) zuständig. Neben Anwenderbetreuung und Parallel-Benchmarks liegt der Hauptschwerpunkt seiner Tätigkeit in der Parallelisierung der Wettersimulation METRAS.

Der Arbeitsplatz von Herrn Augustin befindet sich im Raum 204, Tel. -6990, E-Mail: Werner.Augustin@rz.uni-karlsruhe.de.

Herr **Dr. Jan-Philipp Weiß** ist seit dem 01. Oktober 2006 in der Abteilung Numerische Verfahren auf Hochleistungsrechnern angestellt.

Sein Tätigkeitsfeld umfasst die Analyse und Implementierung von Lattice Boltzmann-Methoden für strömungsdynamische Simulationen. Im Mittelpunkt seiner Arbeit steht dabei die Umsetzung auf Acceleratoren und Multicore Architekturen. Darüberhinaus ist er an der Weiterentwicklung des OpenLB-Projekts beteiligt.

Der Arbeitsplatz von Herrn Weiß befindet sich im Raum 214, Telefon -7406, E-Mail: Jan-Philipp.Weiss@rz.uni-karlsruhe.de.



Mathias Krause  
Foto: Privat



Hendryk Bockelmann  
Foto: Privat



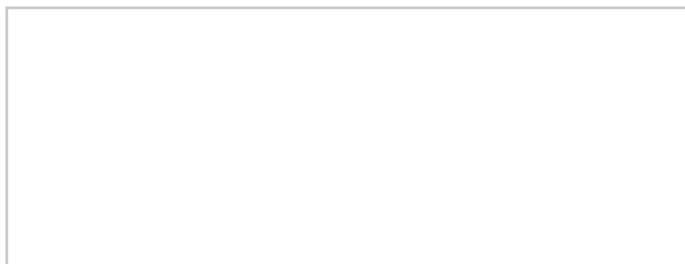
Werner Augustin  
Foto: Privat



Dr. Jan-Philipp Weiß  
Foto: Privat

---

# Erste Ansprechpartner *auf einen Blick*



## So erreichen Sie uns

**Telefonvorwahl:** +49 721/608-  
**Fax:** +49 721/32550  
**E-Mail:** Vorname.Nachname@rz.uni-karlsruhe.de

<b>Help Desk BIT8000</b>	Tel. -8000, E-Mail: bit8000@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Sekretariat</b>	Tel. -3754, E-Mail: rz@uni-karlsruhe.de
<b>Information</b>	Tel. -4865, E-Mail: info@rz.uni-karlsruhe.de
<b>PC-Beratung MicroBIT</b>	Tel. -2997, E-Mail: microbit@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Scientific Supercomputing Center Karlsruhe (SSCK)</b>	Tel. -8011, E-Mail: ssck@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Anwendungen</b>	Tel. -4031/-4035, E-Mail: anwendung@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Netze</b>	Tel. -6356/-7395, E-Mail: netze@rz.uni-karlsruhe.de
<b>UNIX</b>	Tel. -4039/-6341, E-Mail: unix@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Virus-Zentrum</b>	Tel. 0721/9620122, E-Mail: virus@rz.uni-karlsruhe.de
<b>Mailingliste für Internetmissbrauch</b>	abuse@uni-karlsruhe.de
<b>asknet AG (SW-Lizenzen)</b>	Tel. 0721/964580, E-Mail: info@asknet.de
<b>Zertifizierungsstelle (CA)</b>	Tel. -7705, E-Mail: ca@uni-karlsruhe.de
<b>PGP-Fingerprint</b>	pub 1024/A70087D1 1999/01/21 CA Universität Karlsruhe 7A 27 96 52 D9 A8 C4 D4 36 B7 32 32 46 59 F5 BE

## Öffentliche Rechnerzugänge

### World Wide Web:

<http://www.rz.uni-karlsruhe.de/> (Informationssystem des Rechenzentrums der Universität Karlsruhe)

<http://www.rz.uni-karlsruhe.de/ssck/> (Scientific Supercomputing Center Karlsruhe)

### Ftp:

ftp.rz.uni-karlsruhe.de; Benutzernummer: ftp (anonymer Ftp-Server des Rechenzentrums)