

## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

**Nr. 38 • November 1995**

### Umgang mit Paßwörtern

Offene Systeme sind nicht nur hinsichtlich ihrer Funktionen, Schnittstellen, Standards und Konventionen „offen“, sondern auch hinsichtlich ihrer einfachen, unbehinderten Nutzung. Dieser Vorteil gerät zum Nachteil, wenn sich die Nutzer nicht an Regeln halten und aus unprofessionellen oder gar kriminellen Motiven in fremde Rechner, DV-Umgebungen oder Dateien eindringen. Solche Handlungen verstoßen gegen die guten Sitten, gegen betriebliche Regeln und gegen Gesetze. Angesichts der über 30 Millionen Internet-Nutzer weltweit und des ständigen Anwachsens der Nutzerzahlen (schätzungsweise 30.000 pro Woche) muß davon ausgegangen werden, daß auch die Anzahl böswilliger Nutzer ständig steigt. Daher ist es außerordentlich wichtig, seine eigene DV-Umgebung gegen solche unerlaubten Zugriffe zu schützen, wobei der wichtigste Schutz nach wie vor ein gut gewähltes Paßwort ist.

Eine bekannte Hackermethode, in fremde Rechner einzudringen, ist das „Paßwortraten“. Es gibt sogar frei verfügbare Programme und Paßwortlexika dafür. Dieses Paßwortraten führt bei nachlässigem Verhalten der Benutzer erfahrungsgemäß fast immer zum Erfolg. Ist nur ein einziges Paßwort gefunden, sind dem Hacker Möglichkeiten für weitere Attacks auch auf andere Rechner gegeben.

Damit ergibt sich ein wichtiges Kriterium für ein „gutes“ Paßwort: ein gutes Paßwort kann mit diesen Rateprogrammen nicht gefunden werden. Für die Konstruktion eines guten Paßworts gilt folgende Faustregel: Wählen Sie eine Kombination aus 8 Ziffern und Zeichen (Groß- und Kleinbuchstaben) ohne einen für Außenstehende erkennbaren Sinn (s. auch TKI-0177 und TKI-0115).

Darüber hinaus wird das ZAM die Paßwörter auf den vom ZAM verwalteten Rechnern (CRAY, IBM, Workstation-Gruppen) überprüfen und die Nutzer schlecht gewählter Paßwörter hierüber informieren. (Ansprechpartner: Dr. Rudolf Theisen, Tel. 3865)

### Parallelisierung von Fortran-Anwendungen

Seit einiger Zeit steht den Benutzern des Systems Intel Paragon die Version 4.01 des im ZAM entwickelten Software-Tools TOP<sup>2</sup> (Tool Suite for Partial Parallelization) zur Verfügung. Das Hilfsmittel erlaubt die Parallelisierung großer Anwendungen „in kleinen Schritten“ durch Anwendung des Prinzips der partiellen Parallelisierung. Hierbei wird das vorliegende Programm in einen sequentiellen und einen oder mehrere parallele Programmanteile aufgeteilt. Während der Laufzeit wird es als verteilte Anwendung auf einem sequentiellen Rechner (z.Zt. auf einer Sun-Workstation) und einem Parallelrechner (Intel Paragon) ausgeführt. Eingabe- und Ausgabedaten für das parallele Programmsegment werden dabei über eine Netzverbindung zwischen den beteiligten Rechnern ausgetauscht. Die Verteilung der Daten auf dem Parallelrechner erfolgt automatisch, gesteuert durch interaktive Vorgaben des Benutzers.

Ein wesentlicher Vorteil bei der Parallelisierung mit Hilfe von TOP<sup>2</sup> besteht darin, daß Programmteile, die in der Regel wenig zur Laufzeit beitragen, andererseits aber schwer zu portieren sind – wie Ein- und Ausgabe oder Pre- und Postprocessing –, auf dem sequentiellen Rechner verbleiben können. Dies vereinfacht das Rechnen von Testbeispielen während der Programmentwicklungsphase erheblich.

In Zusammenarbeit mit Cray und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin (ZIB) wurde die Sun/Paragon-Version von TOP<sup>2</sup> auf CRAY Y-MP/CRAY T3D portiert und im ZIB bereitgestellt. TOP<sup>2</sup> wird auch für die Nutzung auf der CRAY T3E, die im kommenden Sommer im ZAM installiert wird, zur Verfügung stehen.

Eine detaillierte Beschreibung von TOP<sup>2</sup> findet sich im Internen Bericht IB-9515 sowie als PostScript-Dokument auf dem ftp-Server des ZAM im Verzeichnis /pub/zamdoc/ib/ib-95 und für die Paragon-Nutzer auf dem Vorrechner *zam127* im Verzeichnis /usr/local/top2/doc. (Ansprechpartner: Ulrich Detert, Tel. 6434)

## UniChem-Software auf Cray-Rechnern

Die UniChem-Software von der Firma Cray Research steht auf den Rechnern CRAY Y-MP8 und CRAY M94 zur Verfügung. UniChem ist eine verteilte Anwendung zur quantenchemischen Molekülsimulation und besteht aus drei unterschiedlichen Komponenten:

- dem graphischen Benutzer-Interface auf einer Workstation,
- dem Remote Control Agent (RCAgent), zuständig für die Überwachung und Steuerung von UniChem-Jobs,
- sowie den rechenintensiven Anwendungsprogrammen auf der CRAY.

Das Benutzer-Interface dient der Generierung von Molekülstrukturen, dem Erstellen von Eingabedatensätzen und der graphischen Analyse der berechneten Moleküleigenschaften. Mit UniChem 3.0 werden die folgenden Chemieprogramme bereitgestellt, die sich in bezug auf ihre Rechenmethodik ergänzen:

- CADPAC 5.2 (Hartree-Fock-Methode)
- DGauss 3.0 (Dichtefunktionaltheorie)
- MNDO94 (semiempirische Methode)

Über das UniChem-Interface wird außerdem die komfortable Nutzung des Programmsystems Gaussian 92 ermöglicht. Aufgrund einer Sammellizenz des ZAM darf die Interface-Software des UniChem-Systems auf institutseigenen Workstations installiert werden, sofern die Nutzung im Rahmen von KFA- bzw. HLRZ-Projekten erfolgt. UniChem 3.0 ist derzeit verfügbar für SGI- und Sun-Workstations mit IRIX 5.2 bzw. Solaris 2.3 oder höher. Hinweise zur Installation der Interface-Software sind in der technischen Kurzinformation TKI-0279 beschrieben. (Ansprechpartner: Dr. Johannes Grotendorst, Tel. 6585)

## Statustagung über High Performance Scientific Computing

Vom 11. bis 14. September trafen sich 280 Teilnehmer in der KFA bei der HPSC 1995, um über die Umsetzung des technisch-wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens in den Anwendungsbereich zu diskutieren. Vor etwa zwei Jahren startete das BMBF die „Initiative zur Förderung des parallelen Höchstleistungsrechnens in Wissenschaft und Wirtschaft“ (HPSC), an deren Ausarbeitung auch das ZAM beteiligt war und mit der die Parallelverarbeitung auf einen Entwicklungsstand gebracht werden soll, der ihren wirksamen, leicht zu realisierenden Einsatz in Wirtschaft, Wissenschaft und Technik ermöglicht.

Derzeit fördert das BMBF 16 Verbundvorhaben mit insgesamt 50 Partnern aus Wissenschaft und Wirtschaft. Die meisten Projekte gehen von konkreten Anwendungsproblemen

aus, deren Lösung mit herkömmlicher Rechentechnik nicht mehr zu bewältigen ist, und haben die Aufgabe, sequentielle Software zu parallelisieren und - weitgehend hardwareunabhängig - auf Parallelrechner zu portieren. Dies beinhaltet auch algorithmische Verbesserungen und neue Werkzeuge zur Programmentwicklung.

Auf dieser ersten Statustagung wurde sowohl über den Stand dieser Projekte berichtet als auch über Förderaktivitäten der EU, der Bundesländer, der DFG und des DFN. Der Vorsitzende des Wissenschaftsrates, Herr Prof. Hoffmann, erläuterte die Empfehlung dieses Gremiums zur Einrichtung von Zentren für Höchstleistungsrechnen in Deutschland, für die das HLRZ durchaus als erfolgreiches Modell angesehen werden kann.

Damit hatte die HPSC 1995 sowohl den Charakter eines umfassenden Statusseminars der Förderung des parallelen Höchstleistungsrechnens in Deutschland als auch den eines Workshops, auf dem neue Ideen und Entwicklungsrichtungen sowie Förder- und Kooperationsmöglichkeiten diskutiert werden konnten.

## Veranstaltungen des ZAM

### Programmierung in C

Referenten: Günter Egerer, Valentina Huber, ZAM

Termin: 6. – 9.11., 14. – 16.11.1995, 9.00 – 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung bei Günter Egerer, Tel. 2339

### Unix-Anwenderseminar: Graphische Werkzeuge

Referent: Dieter Bartel, ZAM

Termin: 13.11.1995, 14.00 – 17.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung bei Dieter Bartel, Tel. 6423

### Paragon-Workshop für Fortgeschrittene

Referenten: Mitarbeiter des ZAM

Termin: 21. – 22.11.1995, 9.00 – 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung bei Renate Knecht, Tel. 4416

### Parallelisierung von Programmen für CRAY Y-MP Systeme

Referenten: Dr. Norbert Attig, Anke Häming, Dr. Wolfgang Nagel, ZAM

Termin: 23. – 24.11.1995, 9.00 – 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung bei Dr. Norbert Attig, Tel. 4416

### Ersatztermin für den im August ausgefallenen Kurs Praxisbezogene Einführung in IDL

Referenten: Marlene Busch, ZAM; Heinz Heer, Michael Wagener, ZEL

Termin: 27. – 29.11.1995, 9.00 – 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung bei Marlene Busch, Tel. 4100

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