



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 62 • März 1998

Nachlese zur Tagung „Höchstleistungsrechnen in der Chemie“

Vom 16.-18.2.1998 veranstaltete das ZAM eine Tagung mit ca. 170 Teilnehmern aus Industrie und akademischen Forschungsinstituten über den Einsatz von Höchstleistungsrechnern in der Chemie. Entsprechend dem Ziel, eine Verbindung zwischen methodischen Entwicklungen, die bevorzugt im Hochschulbereich stattfinden, und industrieller Forschung herzustellen, waren etwa 30 namhafte Redner aus dem In- und Ausland aus beiden Bereichen eingeladen worden. Die rege Industriebeteiligung weist auf die auch ökonomisch bedeutende Rolle computergestützter Forschung hin und zeigt den Reifegrad, den die modernen Rechentechniken in der Chemie erreicht haben. Das Programm wurde durch zahlreiche Poster über laufende Projekte dieses Forschungsgebietes und eine interessante Ausstellung mit Hardware- und Softwarefirmen abgerundet.

Den Rednern gelang es, die Vielschichtigkeit des Computereinsatzes in der chemischen Forschung von der genauen Berechnung der Strukturen kleiner Moleküle über Modellierungsmethoden von Polymeren bis zur automatischen Analyse von genetischen Daten und zur Optimierung von Produktionsanlagen zu verdeutlichen. Diese thematische Bandbreite zeigt, wie eng die moderne Chemie mit den Nachbardisziplinen von der Festkörperphysik bis zur Genetik und den Ingenieurwissenschaften verknüpft ist.

Quantitativ genaue Computervorhersagen bleiben derzeit noch auf kleine Moleküle beschränkt. Aber schon heute können wichtige qualitative Fragen zu größeren Systemen zuverlässig beantwortet und oft überraschende Details, z. B. zu Reaktionswegen, geklärt werden, wie auf dieser Tagung demonstriert wurde. Der auch in Anbetracht methodischer und technischer Verbesserungen weiterhin stark wachsende Bedarf nach Supercomputer-Ressourcen wurde wiederholt hervorgehoben. Die Zusammenfassungen der Vorträge und der Poster sind im WWW verfügbar unter <http://www.kfa-juelich.de/compchem/proceedings/>.

Kosten der externen Kommunikation

Das Forschungszentrum ist an das nationale und weltweite Internet über die Netze des Vereins zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN) angeschlossen. Der DFN-Verein ist eine Selbsthilfeorganisation der Wissenschaft in Deutschland und stellt seinen Mitgliedern, mit Unterstützung des BMBF, leistungsfähige, dem Stand der Technik entsprechende Datennetze sowie die notwendigen Übergänge in die europäischen Länder sowie in die USA zur Verfügung. Fast alle wissenschaftlichen Institutionen in Deutschland sowie viele forschungsorientierte Einrichtungen aus Industrie und Wirtschaft sind Teilnehmer am DFN-Wissenschaftsnetz (WiN; B-WiN: Breitband-Wissenschaftsnetz).

Die Leistung des B-WiN-Anschlusses des Forschungszentrums beträgt zur Zeit 34 Mbit/s; durchschnittlich werden pro Monat etwa 330 GByte von und zum Forschungszentrum übertragen, Tendenz: stark steigend. Für 1998 muß dafür eine Gebühr von 850.000 DM an den DFN-Verein entrichtet werden. Ein Anschluß mit der derzeit maximalen Bandbreite von 155 Mbit/s würde 1,3 Millionen DM kosten. Dieses sind vom BMBF subventionierte Preise, die zeigen, daß trotz Deregulierung des Fernmeldemonopols die Kosten für die hier benötigten Kommunikationsleistungen (immer noch) hoch sind. Allerdings ist es dem DFN-Verein durch Verhandlungen mit den Anbietern gelungen, die Kosten für 1999 - nach Wegfall der BMBF-Subventionen - konstant zu halten.

Die Gebühren für das Wissenschaftsnetz sind Pauschalgebühren; sie sind nur von der Anschlußleistung, nicht aber von der tatsächlichen Nutzung abhängig. Dies ist ein besonderes Privileg im Wissenschaftsnetz. Es setzt allerdings die verantwortungsvolle Nutzung der Netze voraus – siehe hierzu TKI-0248 „Datennetze - Ein Leitfaden zur verantwortungsvollen Nutzung von Datennetzen für Mitglieder von Institutionen in Bildung und Wissenschaft“. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

Samba für Workstation-Gruppen

Mit der Software Samba kann von PCs unter Windows auf Unix-Filesysteme zugegriffen werden. Der Autor, Andrew Tridgell, hat aus dem Acronym für das Übertragungsprotokoll SMB (Server Message Block) einen aussprechbaren Namen gemacht.

Samba ist auf allen vom ZAM betreuten Workstation-Gruppen installiert. Jeder in der Gruppe registrierte Benutzer kann von einem PC mit Windows95 auf sein Heimatverzeichnis lesend und schreibend zugreifen und es wie ein PC-Laufwerk ansprechen. Der Zugriff ist durch ein persönliches Paßwort geschützt. Samba ist ohne Installation zusätzlicher Software auf Windows95-Systemen zu nutzen. Weitere Informationen finden Sie in der TKI-0325. (Ansprechpartner: Otto Büchner, Tel. 6433)

MTA-Prüfung Winter 97/98

Vor dem Prüfungsausschuß der IHK zu Köln haben Ende Februar 21 Auszubildende ihre Prüfung zu Mathematisch-technischen Assistenten erfolgreich abgelegt. Die zentrale Ausbildung fand im ZAM statt. Die Absolventen wurden in folgenden Instituten betreut: IBT-2, ICG-2, ICG-3, ICG-4, IFF, IKP, IME, INC, IPC, IPP, ISI, ISR-1, STE, ZAM, ZAT, ZEL und ZFK. Wir gratulieren allen Absolventen! Die Besten werden Mitte März anlässlich der Abschlusfeier mit einem Buchgeschenk belohnt. Leider kann das Forschungszentrum das hervorragende Potential dieser Absolventen wegen der Stellenplansituation nicht hinreichend nutzen. Die Chancen der ehemaligen Azubis auf dem Arbeitsmarkt sind allerdings ausgezeichnet.

ArborText Publisher noch bis Ende März

Wir möchten noch einmal darauf hinweisen, daß das Textverarbeitungsprogramm ArborText Publisher nur noch bis Ende März 1998 verfügbar ist (s. „ZAM aktuell“ Nr. 58, Oktober 1997).

Als Alternative zu ArborText Publisher steht \LaTeX zur Verfügung. Zur Konvertierung der bestehenden Publisher-Dokumente nach \LaTeX wird der Filter `pub2latex` angeboten (s. TKI-0319). Auch die Konvertierungsarbeiten müssen bis Ende März abgeschlossen sein. (Ansprechpartner: Wolfgang Frings, Tel. 2828)

Neue ZAM-Dokumentation

- BHB-0143 Programming in C++, Vorlesungsskript
- BHB-0144 Gsharp - User's Guide, Part 1
- BHB-0145 Gsharp - User's Guide, Part 2
- BHB-0146 Gsharp - Getting Started
- TKI-0325 Samba für Workstation-Gruppen

- MSF-0119 Informationen zur IMSL Fortran 90 MP Library und zu NAG TextWare
- MSF-0120 Informationen zu C++ MathPack, MATLAB und Octave
- IB-9722 The Relation between Galerkin-Type and 1-Norm Quasi-Minimal Residual Iterative Methods
- IB-9723 Schnelle Kopplung von Rechnern in einem ATM-basierten WAN: Erste Erfahrungen und Perspektiven
- IB-9724 Überprüfung der Konsistenz von HTML-Links - Entwicklung von TOPspider
- IB-9725 Evaluation des STK-RAID-Arrays 9137
- IB-9726 Message-Passing-Programmierung mit CMPL - Ein Leistungsvergleich von NX, MPI und Parmacs 6.0
- IB-9801 ServerVision
- Jül-3458 Untersuchung von Strategien zum Job-Scheduling in massiv-parallelen Systemen

Die ZAM-Benutzerdokumente sind im Informationszentrum erhältlich und stehen auf dem Anonymous ftp-Server ([ftp.kfa-juelich.de](ftp:kfa-juelich.de)) im PostScript-Format unter `/pub/zamdoc` zur Verfügung. Dokumentationsübersichten s. URL [<http://www.kfa-juelich.de/zam/docs/>](http://www.kfa-juelich.de/zam/docs/).

Veranstaltungen des ZAM

Darstellung von Meßdaten mit SAS/GRAPH

Referenten: Paul Jansen, Monika Marx, ZAM
Termin: 18. - 19.03.1998, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an M.Marx@fz-juelich.de, Tel. 4136

Erstellung von Videofilmen zur Visualisierung von wissenschaftlichen Daten

Referent: Maik Boltes, ZAM
Termin: 23.03.1998, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Nutzung des Betriebssystems Unix

Referenten: Thomas Plaga, Wolfgang Boenke, ZAM
Termin: 24. - 25.03.1998, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an Th.Plaga@fz-juelich.de, Tel. 2101

Umstrukturierung von Fortran77-Programmen zu Fortran90-Programmen

Referent: Gerd Groten, ZAM
Termin: 24.03.1998, 14.00 - 16.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Wenn Sie regelmäßig per E-Mail über unsere Veranstaltungen informiert werden möchten, schicken Sie eine E-Mail an majordomo@fz-juelich.de mit dem Inhalt: `subscribe kurse_zam`.