



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 67 • September 1998

Geschwindigkeitsrekord auf Gigabit-Leitung

Die Kapazität der im Rahmen des BMBF-Projektes „Gigabit Testbed West“ geschalteten Datenleitung zwischen dem Forschungszentrum Jülich und der GMD St. Augustin wurde im August von 622 Mbit/s auf 2,4 Gbit/s erweitert. Bereits am 5. August wurde bei im ZAM durchgeführten Tests mit einer neuen Generation von ATM-Switches der Firma FORE Systems auf dieser Strecke eine Datenrate von annähernd 2,4 Gbit/s gemessen und somit erstmals die „Gigabit-Schallmauer“ durchbrochen.

Die Gigabit-Datenleitung verknüpft die Supercomputer CRAY T3E und CRAY T90 in Jülich mit den Rechnern IBM SP2 und dem Hochleistungs-Visualisierungsserver ONYX 2 in der GMD. Durch diese Kopplung entsteht ein sogenannter Metacomputer mit hoher Gesamtleistung, die nahezu der Summe der Einzelleistungen der Systeme entspricht. Im Projekt „Gigabit Testbed West“ werden Vorhaben zum heterogenen Metacomputing und zur hochauflösenden Visualisierung durchgeführt, die durch die erweiterte Datenverbindung einen großen Aufschwung erfahren (s. auch <http://www.kfa-juelich.de/zam/news/gigabit.html>).

Zusammen mit dem soeben eröffneten „Gigabit Testbed Süd“ sind damit wesentliche Elemente für das vom DFN-Verein geplante allgemeine Gigabit-Wissenschaftsnetz geschaffen.

Absenderadressen bei E-Mail

Nach der Neuordnung des E-Mail-Zugangs zum Forschungszentrum (s. „ZAM aktuell“ Nr. 64) kam es zu gelegentlichen Problemen durch nun ungültig gewordene Absenderadressen (Reply-To- oder From-Zeile in der E-Mail), so daß E-Mail-Antworten ihr Ziel im Forschungszentrum nicht mehr erreichten. Solche Probleme treten im allgemeinen nicht auf, wenn - wie empfohlen - in die Reply-To-Zeile die offizielle Mail-Adresse eingetragen wird.

Leider gibt es Mail-Programme und Listserver-Systeme, die die Reply-To-Information nicht korrekt setzen bzw. auswerten, so daß in diesen Fällen die automatisch generierte From-Zeile zum Tragen kommt. Was das eigene Mail-Programm in die From-Zeile setzt, kann man z.B. durch eine Mail an sich selbst überprüfen. Ob ein Listserver-System die offizielle Mail-Adresse benutzt, läßt sich über entsprechende Listserver-Kommandos herausfinden.

In der überarbeiteten Kurzinformation TKI-0203 wird beschrieben, wie man bei den verschiedenen Mail-Programmen erreicht, daß die offizielle Mail-Adresse in die From-Zeile eingesetzt wird. (Ansprechpartner: Martin Sczimarowsky, Tel. 6411)

TURBOMOLE auf CRAY T3E

Das weitverbreitete Programmpaket TURBOMOLE für quantenchemische Ab-initio-Rechnungen steht auf dem Rechner CRAY T3E zur Verfügung. TURBOMOLE wurde in der Arbeitsgruppe von Prof. Ahlrichs an der Universität Karlsruhe entwickelt und dort schon frühzeitig auf unterschiedlichen parallelen Rechnerarchitekturen erfolgreich eingesetzt. In der aktuellen Programmversion 4 wird für die Parallelisierung das Programmiermodell des Message-Passing und als Kommunikationsbibliothek MPI verwendet. Die Portierung auf CRAY T3E konnte daher ohne große Probleme im ZAM durchgeführt werden. Die Lizenzvereinbarung mit der Universität Karlsruhe erlaubt keine kommerzielle Nutzung der Software. Interessenten, die TURBOMOLE nutzen möchten, wenden sich bitte an die Beratung für Supercomputing-Benutzer (sc.zam@fz-juelich.de). Dokumentation finden Sie unter <http://www.kfa-juelich.de/zam/news/turbomole.ps>.

Gimp - Gnu Image Manipulation Program

Gimp ist ein frei verfügbares Bildbearbeitungsprogramm für Unix, das man mit dem kommerziellen PC-Tool Adobe

Photoshop vergleichen kann. Gimp kann neben der klassischen Bildbearbeitung auch als Programm für Freihandzeichnungen eingesetzt werden, da es Werkzeuge wie Malstift, Sprühdose, Farbeimer und zahlreiche Pinsel enthält. Diese Werkzeuge sowie Filter, Paletten und Muster ermöglichen in Zusammenarbeit mit der Layer-Technik die komfortable Bearbeitung von Bildern.

Die Basisfunktionen von Gimp sind für den Anwender durch Scripts und Plug-ins erweiterbar, ohne daß eine Neuinstallation erforderlich ist.

Gimp ist auf dem zentralen Unix-Rechner IBM R50 und den Workstation-Gruppen verfügbar und kann über den Software-Distribution-Server des ZAM für die Plattformen AIX, Irix, Digital Unix und Solaris installiert werden. Das Gimp-Handbuch ist gedruckt erhältlich (BHB-0147 bis BHB-0149). Eine Technische Kurzinformation sowie ein halbtägiger Kurs sind in Vorbereitung. (Ansprechpartnerin: Marlene Busch, Tel. 4100)

Außerbetriebnahme des DECNET/INTERNET-Gateway

Beim Aufbau des Internet im Forschungszentrum wurde besonderer Wert auf die Integration bestehender Netze und Dienste gelegt. Vor diesem Hintergrund wurde die Anbindung von Rechnersystemen, die damals zur lokalen Kommunikation DECNET IV nutzten, über ein DECNET/INTERNET-Gateway (*zam049/digate*) im ZAM ermöglicht. Insbesondere in den ersten Jahren wurde diese Möglichkeit der Kommunikation mit der sprunghaft wachsenden Zahl der am Internet angeschlossenen Rechner von vielen DECNET-Anwendern genutzt. Mit der Verfügbarkeit von TCP/IP für VMS-Systeme sank die Nutzung des DECNET/INTERNET-Gateway im KFAnet (jetzt JuNet) stetig. Da seit Mai dieses Jahres das System fast nicht mehr benutzt wird, wird nach acht Betriebsjahren das DECNET/INTERNET-Gateway am 30. September 1998 abgeschaltet. (Ansprechpartner: Werner Anrath, Tel. 2053)

Scientific WorkPlace

Das Forschungszentrum Jülich besitzt eine Campus-Lizenz für das Textverarbeitungsprogramm Scientific WorkPlace. Dieses Tool erlaubt Microsoft Windows-Benutzern, relativ einfach LaTeX-Dokumente zu erstellen und mathematische Rechnungen durchzuführen. Scientific WorkPlace ist besonders für Benutzer gedacht, die bis jetzt andere Textverarbeitungsprogramme benutzt haben und sich vor dem „kryptischen“ LaTeX-Code scheuten, aber z.B. die Möglichkeiten der Formelschreibung von TeX nutzen wollen. Es arbeitet mit einer WYSIWYG-Oberfläche nach bekanntem Windows-Stil. Die Stärke von Scientific WorkPlace liegt in der Dar-

stellung von mathematischen Formeln. Desweiteren ist eine eigene Version von Maple Teil des Programms, so daß man recht einfach mathematische Formeln manipulieren und Graphiken in sein Dokument einfügen kann. Scientific WorkPlace liegt bereit auf dem PC-Software-Server unter `\\pcsrv\public\swp30` und ist demnächst auch auf CD erhältlich. Weitere Informationen finden Sie in der TKI-0336. (Ansprechpartner: Stephan Graf, Tel. 6578)

MiKTeX für Windows 95/98 und NT

MiKTeX ist ein neu entwickeltes TeX-Paket, das das alte EmTeX für Windows 3.x ablöst. Es ist für das Betriebssystem Windows 95/98 und NT konzipiert und richtet sich an den erfahrenen TeX-Benutzer. Eine Installations-CD ist bei der Beratung im ZAM erhältlich, außerdem ist das Paket auf dem PC-Software-Server unter `\\pcsrv\public\miktex` verfügbar. Bei der Installation werden zusätzlich zum MiKTeX noch einige Tools installiert, die dem Benutzer eine komfortable Arbeitsumgebung bieten. Dazu gehören GhostScript und GhostView in der aktuellen Version und die beiden Editoren Emacs und WinEdt32. Der Emacs-Editor ist ein Freeware-Produkt und vielen Benutzern aus der Unix-Welt bekannt. WinEdt32 ist ein lizenzpflichtiges Produkt in typischer Windows-Aufmachung. Die Registrierdaten sind ebenfalls bei der Beratung erhältlich. Hinweise zur Installation und Benutzung stehen in der TKI-0338. (Ansprechpartner: Stephan Graf, Tel. 6578)

Neue ZAM-Dokumentation

- BHB-0147 GUM - The GIMP User Manual, Part 1
- BHB-0148 GUM - The GIMP User Manual, Part 2
- BHB-0149 GUM - The GIMP User Manual, Part 3
- TKI-0334 Nutzung des Netscape Communicator 4.05
- TKI-0336 Scientific WorkPlace
- TKI-0337 Besser als der Zettel im Schreibtisch - eine einfache, PGP-verschlüsselte Paßwortverwaltung für DOS/Windows 95/98/NT
- TKI-0338 MiKTeX

Veranstaltungen des ZAM

Programmierung in C

Referenten: Günter Egerer, Budi Saddak, ZAM
 Termin: 21. - 24. und 27. - 30.9.1998, 9.00 - 16.30 Uhr
 Ort: Ausbildungsraum im ZAM
 Anmeldung an G.Egerer@fz-juelich.de, Tel. 2339

The „Paradyn“ Parallel Performance Tools

Referent: Brian J. N. Wylie, University of Wisconsin-Madison
 Termin: Donnerstag, 24.9.1998, 14.00 Uhr
 Ort: Hörsaal im ZAM