



## ZAM aktuell

*Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik*

*Nr. 89 • Oktober 2000*

### **Kooperation mit der Firma Grünenthal**

Im Rahmen eines dreijährigen Projektes werden von der Grünenthal GmbH in Aachen und der Forschungszentrum Jülich GmbH gemeinsam neue Methoden und Verfahren zur Datenanalyse in der pharmazeutischen Forschung entwickelt. Ein entsprechendes Kooperationsabkommen wurde am 1.7.2000 unterzeichnet.

Ziel des Projektes ist, die Analyse multidimensionaler Zusammenhänge um Korrelationen zwischen chemischen Strukturen und biologischen Eigenschaften zu ermöglichen. Das Forschungszentrum Jülich übernimmt dabei Aufgaben auf den Gebieten Statistik und Wahrscheinlichkeitstheorie. Diese Arbeiten werden von Wissenschaftlern des ZAM und des IFF durchgeführt. Hintergrund dieser Bemühungen ist es, mit den entwickelten Verfahren die enormen Entwicklungszeiten (10 - 15 Jahre) für innovative Arzneimittel signifikant zu verkürzen.

### **Höchste Auszubildendenzahl seit Beginn der MTA-Ausbildung**

Ausbildungsleiter Paul Jansen (ZAM) konnte am 1. September so viele neue Auszubildende zu Mathematisch-technischen Assistenten wie noch nie seit 1963 begrüßen. Die hohe Anzahl wurde dank der Initiative des Vorstandes, die vom BMBF unterstützt wird, ermöglicht.

Die 33 jungen Leute, die diesen attraktiven Beruf ergreifen wollen und gleichzeitig das Studium der Technomathematik an der Fachhochschule Aachen Abteilung Jülich (FH) absolvieren, werden im ZAM zentral in Theorie und Praxis, d.h. in Mathematik, Informatik und Programmierung unterrichtet. Einen wesentlichen Teil der Ausbildung stellt aber auch die praktische Tätigkeit dar. Erstmals seit 1987 beteiligen sich hieran wieder zwei mittelständische Unternehmen der Region und die FH als externe Ausbildungsstellen mit insgesamt vier Auszubildenden. Eine Reihe weiterer Firmen hat Interesse bekundet, konnte sich aber aus verschiedenen Grün-

den in diesem Jahr noch nicht beteiligen. Die 29 Auszubildenden des Forschungszentrums verteilen sich auf die Organisationseinheiten IBT, ICG, IME, IFF, IGV, IKP, IWV, INC, IPP, ISI, ISR, STE, ZEL, ZAT, ZFK und ZAM. Dort werden sie von erfahrenen Datenverarbeitungsspezialisten betreut.

Wegen der erhöhten Zahl der Auszubildenden werden die praktischen Kurse und Übungen jetzt in zwei Gruppen gehalten. Außerdem ist die Ausstattung im ZAM-Ausbildungsraum erweitert worden, so daß jeder Teilnehmer einen eigenen Bildschirmplatz hat.

Besondere Aufmerksamkeit widmet das ZAM der Grundausbildung in den ersten drei Wochen. In dieser Zeit finden sogenannte Vorkurse in Datenverarbeitung und Mathematik statt. Dabei lernen die jungen Leute unter anderem die Grundlagen der Mathematik wie Mengenlehre und Logik und den ersten Umgang mit Rechnern und dem Betriebssystem Linux. In der letzten Septemberwoche haben mit dem regulären Semester an der FH auch die Vorlesungen begonnen. Jetzt gesellen sich noch einige Studenten zusätzlich zu den Auszubildenden.

„ZAM aktuell“ wünscht allen Anfängern eine erfolgreiche und interessante Zeit der Ausbildung und des Studiums im Forschungszentrum in diesem zukunftsweisenden Beruf. Die Einstellungsrunde für 2001 hat schon begonnen. Es werden jetzt schon Bewerbungen für 2001 entgegengenommen. Informationen zu Ausbildung und Studium gibt Paul Jansen, ZAM, Tel. 6430 (s. auch <http://www.fz-juelich.de/zam/mta>).

### **NETBIOS-Protokoll wird nach außen gesperrt**

Das ZAM beobachtet in jüngster Zeit eine dramatisch steigende Zahl externer Zugriffsversuche auf NETBIOS-Dienste (über IP) im Forschungszentrum Jülich. Dies sind die IP-Ports 137 (nbname), 138 (nbdatagram), 139 (nbssession) und 445 (microsoft-ds), über die versucht wird, Informationen über Rechner und Shares zu erhalten und gegebenenfalls zu mißbrauchen.

Da NETBIOS als typisches „Workgroup“-Protokoll eigentlich für den Gebrauch in lokalen Arbeitsgruppen gedacht ist, besteht im allgemeinen keine Notwendigkeit, diese Dienste weltweit im Internet anzubieten. Deshalb werden Anfang Oktober diese Protokolle im zentralen Zugangsrouten zu JuNet gesperrt. Die Telefonzugänge über die Modem-Server des ZAM sind hiervon nicht betroffen. Wenn aus zwingenden Gründen auf das Angebot dieser Dienste außerhalb des JuNet-Adreßbereiches nicht verzichtet werden kann, besteht die Möglichkeit, bestimmte Rechner von dieser Sperrung auszunehmen. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

## Linux gewinnt in Workstation-Gruppen an Bedeutung

Seit der Einführung von Linux-Clients in die vom ZAM administrierten Workstation-Gruppen ist inzwischen ihre Zahl auf 75 angewachsen. Weitere Installationen stehen bevor. Diese preisgünstige Alternative zu den etablierten Unix-Workstations bietet in bezug auf Standard-Software, insbesondere durch die integrierte Windows98-Emulation, einige Optionen, die so bisher in den Rechnergruppen nicht angeboten werden konnten.

Im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens werden Unix-Systeme weiterhin bevorzugt. Insbesondere die Portierung existierender Fortran-Programme von DEC/Compaq- bzw. IBM-Systemen auf Linux war bislang problematisch, zumal wenn Routinen aus mathematischen oder graphischen Programmbibliotheken eingebunden waren. Mit der Installation des PGI Fortran90-Compilers und den jetzt eingespielten neuen Versionen von NAG (Numerical Algorithms Group) und IMSL (International Mathematical and Statistical Library) hat sich die Situation deutlich verbessert. Ergänzt wird das Angebot durch passende Versionen von GR-Software und GLI.

Mitarbeiter des IFF haben jetzt eine Fortran-Anwendung aus dem Bereich der Datenauswertung für Neutronenstreuung (tofsys, ca. 20000 Zeilen Fortran-Code, ca. 150 Subroutines) in Zusammenarbeit mit dem ZAM erfolgreich von Tru64 auf Linux umgestellt. (Ansprechpartner: Willi Homberg, Tel. 2424)

## Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2000-08 Making C++ Ready for Algorithmic Skeletons
- IB-2000-10 Specifying Performance Properties Using Compound Runtime Events – APART Technical Report –
- IB-2000-11 Status und Weiterentwicklung sicherer Dial-In Zugänge zum JuNet

- IB-2000-13 The UNICORE Grid Infrastructure
- IB-2000-14 Comparison of Some Parallel Solvers for the Real Full Symmetric Eigenproblem on CRAY T3E
- Jül-3749 Selektives Monitoring von Fortran90-Programmen für KOJAK

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

### Datenbankentwicklung mit Oracle

Referent: Walter Elmenhorst, ZAM

Termin: 9. - 13.10.2000, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [W.Elmenhorst@fz-juelich.de](mailto:W.Elmenhorst@fz-juelich.de), Tel. 6762

### Programmierung in C

Referenten: Günter Egerer, Stephan Graf, ZAM

Termin: 16. - 19.10. und 23. - 25.10.2000, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [G.Egerer@fz-juelich.de](mailto:G.Egerer@fz-juelich.de), Tel. 2339

### Trojaner und Backdoors – Gefahren und Schutz

Referenten: David Kibilka, Ralph Niederberger, ZAM

Termin: Donnerstag, 26. Oktober 2000, 14.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

### Mathematik mit Maple

Referenten: Dr. Johannes Grotendorst, Monika Marx, ZAM

Termin: 26. Oktober 2000, 9.00 - 16.30 Uhr,

27. Oktober 2000, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [mathsoft.zam@fz-juelich.de](mailto:mathsoft.zam@fz-juelich.de), Tel. 6585

### Scientific WorkPlace

Referent: Stephan Graf, ZAM

Termin: Montag, 30. Oktober 2000, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [text.zam@fz-juelich.de](mailto:text.zam@fz-juelich.de), Tel. 6578

### make und bldmake

Referent: Günter Egerer, ZAM

Termin: Montag, 6. November 2000, 13.30 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [G.Egerer@fz-juelich.de](mailto:G.Egerer@fz-juelich.de), Tel. 2339

### Praxisbezogene Einführung in das System IDL zur wissenschaftlich-technischen Visualisierung

Referenten: Marlene Busch, ZAM;

Heinz Heer, Michael Wagener, ZEL

Termin: 7. - 9. November 2000, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [graphik.zam@fz-juelich.de](mailto:graphik.zam@fz-juelich.de), Tel. 4100

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