

ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 6 • September 1992

Neue Chemie-Software auf der CRAY Y-MP

Das Programmangebot im Bereich Chemie ist auf der HLRZ-CRAY um die Programmsysteme MOLPRO und GROMOS erweitert worden.

MOLPRO ist ein vollständiges System von Ab-Initio-Programmen zur Berechnung der elektronischen Struktur von Molekülen. Das Programmpaket wurde von H.-J. Werner (Univ. Bielefeld) und P.J. Knowles (Univ. Sussex) entwickelt und erlaubt für kleinere Moleküle sehr genaue Rechnungen durch eine extensive Behandlung der Elektronenkorrelation (TKI-0215, BHB-0109).

Mit GROMOS steht nun auch ein Molekül-Simulationsprogramm zur Verfügung. GROMOS wurde an der Universität Groningen von W.F. van Gunsteren (jetzt ETH Zürich) entwickelt und dient zur Simulation biomolekularer Systeme. Es besteht aus 39 Einzelprogrammen, die in vielfältiger Weise miteinander kombiniert werden können. 53 Beispiele demonstrieren die wichtigsten Anwendungsfälle des Programms (TKI-0216).

Beide Programmsysteme können über die dialog- und problemorientierte Software-Umgebung APPLSOFT im VM/CMS auf dem IBM-Zentralrechner von allen HLRZ-Benutzern genutzt werden. APPLSOFT ermöglicht außerdem den Zugriff auf die Quantenchemie-Programmpakete GAUSSIAN und CADPAC und die Quelltextbibliothek QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange). Die Benutzerhandbücher zu den einzelnen Programmpaketen sind im Informationszentrum erhältlich. (Ansprechpartner: J. Grotendorst, Tel. 6585)

X-Window-Terminals im Einsatz

X-Window-Terminals arbeiten auf der Basis des vom MIT entwickelten Standards für eine graphische Benutzeroberfläche X11 unter dem Betriebssystem UNIX. Sie bieten bei teilweise höherer graphischer Performance und niedrigeren Preisen die gleichen Möglichkeiten wie die Konso-

len entsprechender Workstations und können in vielen Fällen als Alternative zu einer Workstation betrachtet werden.

Im ZAM wurden Terminals verschiedener Hersteller getestet (s. TKI-0202) und Arbeitsplätze mit den Geräten der Serie HP700RX ausgerüstet. Weiterhin bietet das ZAM mit dem AIX-Cluster KFA-weit ein System an, das sowohl die Bootserver-Funktion für X-Window-Terminals der Serie HP700RX übernimmt als auch über entsprechende Software u.a. die Benutzung eines Bildschirmausschnittes des X-Window-Terminals als graphisches IBM-3270-Terminal ermöglicht.

Informationen zu den Betriebsmöglichkeiten und zur Konfiguration dieser X-Window-Terminals gibt die TKI-0218. Interessierten Benutzern stehen im öffentlichen Terminalraum des ZAM zwei X-Window-Terminals zur Verfügung.

Anwendungen auf dem Intel iPSC/860

Erste Ergebnisse von Rechnungen auf dem Parallelrechner Intel iPSC/860 der KFA haben Eingang in Veröffentlichungen gefunden. Herausragendes Ergebnis: Gregory Kohring von der Theoretischen Physik in Köln erzielte mit einem Programm zur Simulation neuronaler Netze eine Rechenleistung von 1,4 GFLOPS (32-Bit-Arithmetik, 32 Prozessoren). Auch Berechnungen von zellularen Automaten, von Ising-Modellen und zur Simulation granularer Materialien (mit Videofilm) wurden erfolgreich durchgeführt.

Nach den bisherigen Erfahrungen erreicht der iPSC/860 immer dann hohe Rechenleistungen, wenn spezielle, für die Knotenprozessoren Intel i860 optimierte Software benutzt werden kann. In diesen Fällen ist eine Knotenleistung in der Größenordnung von 20 MFLOPS bei 64-Bit-Arithmetik zu erwarten. In Programmen der Hochenergiephysik werden eigenentwickelte Assembler-Routinen eingesetzt, die bei den Kernalgorithmen eine Knotenleistung von fast 40 MFLOPS erreichen.

Derzeit wird an der Umstellung großer Programme mit bis zu 300000 Fortran-Zeilen auf den Intel-Rechner gearbeitet. Diese stammen aus verschiedenen Forschungsgebieten der KFA und betreffen Themen wie Strukturmechanik, Elektronenstruktur von Festkörpern, Plasma-simulation, Geochemie und Schadstoffausbreitung im Boden.

Der von der KFA im Rahmen einer Kooperation mit Intel beschaffte und derzeit im Pilotbetrieb befindliche Rechner steht allen KFA-Angehörigen sowie dem Kreis der HLRZ-Benutzer nach Absprache mit dem ZAM zur Verfügung. Dies gilt auch für andere interessierte Externe. (Kontakt: Renate Knecht, Tel. 6569).

Neue Version von GML

Das Textverarbeitungssystem GML steht im VM/CMS ab sofort in der Version 4.0 zur Verfügung (Aufruf: GML4). Erweiterungen gegenüber der alten Version 3.2 sind schattierte Tabellen und Boxen sowie Online-Hilfe und Unterstützung verschiedener Sprachen bei Fehlermeldungen. Im GML-Menü selbst ist ein Drucker-Auswahl-Panel hinzugefügt worden, über das alle verfügbaren Drucker selektiert werden können.

Mit GML 4.0 ist auch die Formatierung eines Textes in das PostScript-Format möglich. Sollen dabei Graphiken in ein GML-Dokument eingebunden werden, müssen auch sie im PostScript-Format bzw. Encapsulated-PostScript-Format (EPSF) vorliegen. Die Ausgabe solcher Dokumente kann vom GML-Menü aus auf alle über TCP/IP erreichbaren PostScript-Drucker erfolgen.

GML 4.0 wird zunächst parallel zur alten Version angeboten. Alle Neuerungen sind in der TKI-0219 beschrieben (Ansprechpartner: W. Frings, Tel. 6585).

Platten als Archivspeicher im VM/CMS

Bis August 1992 wurden im VM/CMS die zu archivierenden Daten in einem sog. STAGE-Bereich beim Server VMARCH abgelegt mit dem Ziel, sie später auf Magnetbandkassetten im ACS zu schreiben. Da die Archiv-Software jedoch das ACS noch nicht effizient nutzen kann, wird diese OFFLINE-Archivierung von Daten vorerst nicht angeboten.

Jeder Benutzer bekommt deshalb zur Archivierung seiner VM/CMS-Daten ein Kontingent von 50 MByte Plattenspeicher (ONLINE) statt bisher 5 MByte Zwischenspeicher (STAGE). Die maximale Größe einer Datei, die archiviert werden kann, beträgt ebenfalls 50 MByte. Für größere Dateien wird eine Archivierung auf eigene Bänder emp-

fohlen. Die Lebensdauer der Daten im Archiv beträgt standardmäßig 5 Jahre ab dem Zeitpunkt der Archivierung und kann vom Benutzer selbst verlängert werden.

Die Archivdaten aus dem Zwischenspeicher (STAGE) wurden Mitte August vom ZAM in den Plattenspeicher übertragen und werden Anfang Oktober im alten Archiv gelöscht. Das entsprechende Kapitel im Benutzerhandbuch „Einführung in VM/CMS, Band 2“ (BHB-0069) wurde überarbeitet.

Änderung der COCOM-Regelungen

Aufgrund neuer Rechtsvorschriften, an die die KFA vertraglich gebunden ist, sind ungarische Staatsbürger nicht länger vom Zugang zu Supercomputern ausgeschlossen. Die Liste der „restricted nationals“, denen kein Zugang gewährt werden darf, umfaßt nunmehr die Staatsbürger folgender Länder: Albanien, Bulgarien, Estland, GUS, Irak, Iran, Kambodscha, Kuba, Laos, Lettland, Libyen, Litauen, Mongolei, Nordkorea, Polen, Rumänien, Syrien, Tschechoslowakei, Vietnam und die Volksrepublik China.

Neue ZAM-Benutzerdokumentation

- BHB-0109 User's Manual for MOLPRO
- BHB-0110 FORTRAN unter AIX auf einer RISC/6000
- TKI-0215 MOLPRO auf der CRAY Y-MP und der RS/6000-550
- TKI-0216 GROMOS auf der CRAY Y-MP
- TKI-0218 Konfiguration der X-Window-Terminals der HP700RX-Serie
- TKI-0219 Neue GML-Version (4.0) und PostScript-Ausgabe unter GML
- MSF-0087 Mathem. Software Info 87: LAPACK
- MSF-0088 Mathem. Software Info 88: SAS, CPC, Xnetlib

Die ZAM-Benutzerdokumente sind im Informationszentrum erhältlich und stehen auf dem Anonymous ftp-Server (ftp.zam.KFA-Juelich.de) als Text-Files und PostScript-Files unter pub/zamdoc zur Verfügung.

Veranstaltungen im ZAM

Programmierung in C

Referent: G. Egerer, ZAM

Termin: 5. - 9.10.92, jeweils 14.00 Uhr, Fr. 13.30 Uhr

Datenkommunikation in der KFA

Referenten: D. Conrads, L. Radermacher,

M. Sczimarowsky, ZAM, H. Stoff, ZEL

Termin: 14. - 15.10.92, jeweils 14.00 Uhr

Redaktion: Frau Dr. S. Höfler-Thierfeldt, Tel. 4416