

ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 11 • März 1993

Cray schenkt der KFA vierten Prozessor

Die Firma Cray Research hat den vierten Prozessor des neuen Rechners CRAY Y-MP M94, der z. Zt. im ZAM installiert wird, der KFA zur vollen Nutzung übereignet. Nach den ursprünglichen Verträgen war dieser Prozessor Eigentum der Firma Cray und stand der KFA nur für Kooperationsprojekte mit Cray zur Verfügung. Mit dieser Schenkung bietet der neue Rechner neben dem sehr viel größeren Hauptspeicher auch eine deutlich höhere Rechenleistung als die CRAY X-MP/416 (Grenzleistung 1333 MFLOPS anstelle von 940 MFLOPS). Das bedeutet neben der mit der Rechnerbeschaffung im ZAM verbundenen Einsparung von 10 Mio. DM in den Jahren 1993 bis 1995 eine beachtliche zusätzliche Wertschöpfung zugunsten der KFA.

GAMESS auf CRAY-Rechnern, AIX-Cluster und Intel iPSC/860

Die aktuelle Version des Programmsystems GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) von der Iowa State University wurde auf beiden CRAY-Rechnern und auf dem zentralen AIX-Cluster des ZAM bereitgestellt. Die Nutzung der CRAY-Versionen kann über die menügeführte Interface-Software CHEMSOFT im VM/CMS erfolgen. Die AIX-Version von GAMESS enthält zusätzlich ein Graphikpaket zur Visualisierung von Rechenergebnissen (s. TKI-0223).

Eine parallelisierte Version der GAMESS-Software wurde auf dem Intel-Rechner iPSC/860 und auf dem ZAM-internen Workstation-Cluster von RS/6000-Rechnern installiert. Die Intel-Version steht allen Benutzern des iPSC/860 zur Verfügung. Testrechnungen mit der parallelen Version bestätigen, daß grundlegende Berechnungsverfahren der Quantenchemie, wie die Hartree-Fock-Methode oder die für viele Ab-Initio-Verfahren notwendige Zweielektronenintegralberechnung, aufgrund grober Granularität sehr effizient parallelisiert werden können. Massiv-parallele Rechner eröffnen damit die Möglichkeit, Ab-Initio-Rechnungen an we-

sentlich größeren Molekülen durchzuführen, als es bisher mit Skalar- und Vektorrechnern möglich war.

Eine ausführliche Dokumentation zur GAMESS-Software (BHB-0113) ist im Informationszentrum erhältlich.

KFA-Rechenzeitkontingente für 1993

In Absprache mit den beteiligten Organisationseinheiten in der KFA werden die neuen CRAY- und MVS-Rechenzeitkontingente für 1993 erst zum 1. April 1993 eingerichtet. Bis dahin werden die Vorjahreskontingente fortgeschrieben; in Einzelfällen werden notwendige Korrekturen durchgeführt. Der Grund für dieses Vorgehen ist die Anpassung der Accounting-Formel und damit der Rechenkosten (Verrechnungseinheiten VE) für die neue CRAY Y-MP M94. Da mit diesem Rechner pro Jahr etwa 4 Mio. DM an Kosten eingespart werden, wurden die Preise für die CPU-Sekunde von 0,117 VE/sec auf 0,0858 VE/sec gesenkt. Damit steht nominell ein geringeres CRAY-Kontingent als in den Vorjahren zur Verfügung, das aber einen deutlich höheren Gegenwert (Hauptspeicher, Rechenleistung) darstellt (s. auch TKI-0015).

Der Problem/Info-Server KFAZAM

Für Nutzer der vom ZAM betriebenen Netze und Systeme ist eine allgemeine E-Mail-Adresse eingerichtet worden, an die Probleme gemeldet bzw. Anfragen gestellt werden können. Die Mail-Adresse lautet *kfazam@KFA-Juelich.de*. Anhand des Schlüsselwortes im Subject-Feld der Mail leitet der Server KFAZAM die Mail an zuständige Mitarbeiter im ZAM weiter. Derzeit sind folgende Schlüsselwörter vorgesehen:

Schlüsselwort **Thema**

Beratung	alle Fragen zu Rechnernutzung, Betriebssystemen, Programmierung, Anwendungssystemen und mathematischer Software
----------	---

Schlüsselwort	Thema
WIN	externe Kommunikation von/zur KFA über X.25, Datex-P, EARN/BITNET, Internet, AGFnet
KFAnet	KFA-interne Kommunikation über FDDI und Ethernet
Develnet	KFA-interne Kommunikation über Develnet
HLRZ	HLRZ-Projektabwicklung und -Betriebsmittelbedarf
INTEL	iPSC- und Paragon-Benutzung
Security	Sicherheit bei Kommunikationsnetzen und Rechnersystemen
Veranstaltungen	Vorträge und Schulungsveranstaltungen
Literatur	Dokumentation und Publikationen

Bitte verwenden Sie bei Mail an KFAZAM eines dieser Schlüsselwörter. Ihre Anfragen gelangen dann eher ans Ziel und können eher bearbeitet werden. Nennen Sie bitte außerdem Ihren Namen, Ihre Institution und Telefonnummer, damit Sie bei eventuellen Rückfragen schnell erreicht werden können.

MTA-Ausbildung in der KFA

Ende Februar schlossen 21 Mathematisch-technische Assistentinnen und Assistenten (MTAs) ihre Ausbildung in der KFA mit der Prüfung vor der IHK zu Köln erfolgreich ab.

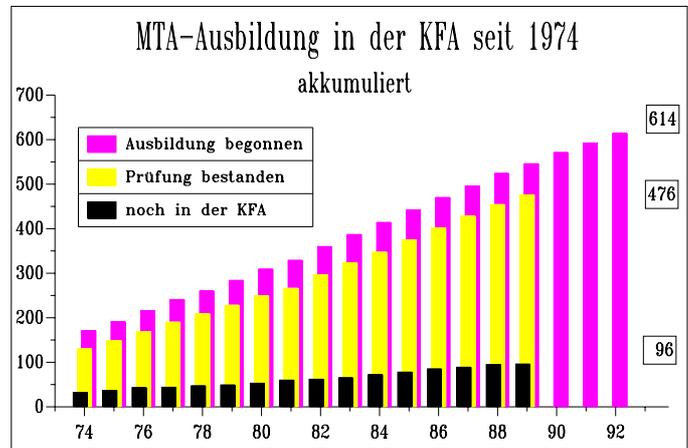
Die MTAs in den Instituten der KFA leisten - oft in enger Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern - einen wesentlichen und unverzichtbaren Beitrag zur ständigen Weiterentwicklung der Systeme und Anwendungen und zur möglichst effizienten Nutzung der DV-Ressourcen der KFA. Die Ausbildung zielt dabei auch auf den qualifizierten Einsatz mathematischer Methoden und Verfahren in der Forschung. Um den eigenen Personalbedarf in diesem Bereich decken zu können, bildet die KFA seit 1963 selbst Mathematisch-technische Assistenten aus.

Es handelt sich dabei um eine Berufsausbildung, die formal dem „dualen System“ zugeordnet ist und mit einer zentralen Prüfung vor der IHK zu Köln abgeschlossen wird. Der inhaltlichen Ausgestaltung und dem Anforderungsprofil nach läßt sie sich aber eher mit einem kurzen und straff organisierten Fachhochschulstudium mit starker praktischer Komponente vergleichen: Die Auszubildenden hören im Verlauf von zwei Jahren im ZAM Vorlesungen in Mathematik (Analysis, Lineare Algebra, Numerik, Statistik) und Datenverarbeitung (Einführung in die DV, Algorithmen und Strukturen, Rechnerorganisation und -kommunikation, Betriebssysteme, Datenbanken) und werden in Kursen mit wichtigen Programmiersprachen (z. Zt. Pascal, Fortran, C,

Assembler) vertraut gemacht. Jeder Auszubildende ist einem KFA-Institut zugeordnet, wo er unter Anleitung eines persönlichen Betreuers von Anfang an in der Praxis der Forschung mitarbeitet.

Die Nachfrage sowohl der Abiturienten als auch der KFA-Institute übersteigt deutlich das Ausbildungsplatzangebot: 1992 standen 34 Anforderungen der Institute nur 22 Einstellungen gegenüber; am Auswahlverfahren nahmen 60 Abiturienten teil bei über 100 in der Verwaltung eingegangenen Bewerbungen. Zum Auswahlverfahren für den Ausbildungsbeginn im September 1993 kamen 87 Abiturienten.

Durch die MTA-Ausbildung bietet die KFA Abiturienten mit guten Ergebnissen im Leistungskurs Mathematik insbesondere aus der Region eine interessante und aussichtsreiche Alternative zum Hochschulstudium.



Neue ZAM-Benutzerdokumentation

- TKI-0015 Abrechnungs- und Kontingentierungsverfahren für die Großrechnersysteme in der KFA
- TKI-0226 KFAnet/INTERNET - Die technische Durchführung von DECcampus für Ultrix und OSF

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

Veranstaltungen im ZAM

Firmenpräsentation Evans & Sutherland und VISTEC: Freedom-AVS

Termin: 11.3.93, 13.30 Uhr

Einbindung von PCs in offene DV-Umgebungen (UNIX)

Referent: R. Grallert, ZAM

Termin: 1.4.93, 14.00 Uhr

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