



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 73 • April 1999

NWChem auf CRAY T3E

Auf den T3E-Rechnern steht das neue Chemie-Programmpaket NWChem vom Pacific Northwest National Laboratory (PNNL) zur Verfügung. NWChem ist eine für massiv-parallele Rechner vollständig neu konzipierte Software mit skalierbaren Rechenverfahren aus der Quantenchemie und Molekulardynamik; sie eignet sich besonders für Simulationsrechnungen an großen Molekülen. Für die Parallelisierung wurden die neu entwickelten mathematischen Werkzeuge Global Arrays und PEIGS sowie die Kommunikationsbibliothek TCGMSG verwendet. Global Arrays ist eine Bibliothek von Fortran-Programmen, die global adressierbare Felder auf Parallelrechnern mit verteiltem Speicher zur Verfügung stellen; PEIGS ist ein Programmpaket mit parallelen Lösern für das verallgemeinerte und das Standard-eigenwertproblem mit symmetrischen Matrizen. Interessenten, die NWChem nutzen möchten, wenden sich bitte an die Beratung Supercomputing (Tel. 4416, sc.zam@fz-juelich.de). Dokumentation finden Sie unter http://www.fz-juelich.de/zam/mathe/chem_soft/nwchem.html.

Neue Bandlaufwerke im STK-Roboter

Seit dem 16. März 1999 sind neue Bandlaufwerke in dem Magnetbandroboter der Firma STK in Betrieb. Die Laufwerke (inoffizielle Bezeichnung „Eagle“) bieten die ca. zwanzigfache Speicherkapazität der bisher verwendeten „Silverton“-Laufwerke (20 GByte pro Band im Vergleich zu bisher 800 MByte). Darüber hinaus erlauben sie deutlich höhere Datenübertragungsraten von bis zu 10 MByte/s. Beide Laufwerktypen unterstützen Datenkompression. Dadurch erhöht sich die Speicherkapazität in der Praxis um bis zu 50 Prozent, und die erreichbare Datenübertragungsrate beträgt über 12 MByte/s.

Da die Speicherkapazität des bisherigen Robotersystems mit ca. 12000 Bändern (ca. 10 TByte) ausgeschöpft war, wurde das System von zwei auf drei Silos erweitert. Jedes

Silo kann bis zu 6000 Bänder aufnehmen. Zur Zeit sind im neuen Silo 500 Eagle-Bänder eingestellt, so daß insgesamt eine Verdoppelung der Speicherkapazität erzielt wurde. Vollbestückt bietet das neu hinzugenommene Silo eine Kapazität von 120 TByte.

Das an die Cray-Systeme angeschlossene Magnetbandrobotersystem wird hauptsächlich für die langfristige Speicherung von Daten (im File-System \$ARCHIVE) der verschiedenen NIC-Projekte bzw. FZJ-Vorhaben eingesetzt. Die Verwaltung der Datenbestände erfolgt unsichtbar für den Benutzer durch die Data Migration Facility (DMF). Wegen der sehr unterschiedlichen Kapazitäten der Bandmedien und der daraus resultierenden Zugriffszeiten wurde die DMF so konfiguriert, daß Dateien, die größer als 100 MByte sind, auf den Eagle-Bändern gespeichert werden, während alle anderen Dateien auf den Silverton-Bändern verbleiben.

Mit der im Laufe der Zeit immer weiter gestiegenen Rechnerleistung hat sich auch das Volumen der zu verarbeitenden Daten deutlich erhöht. Mit der jetzt in Betrieb genommenen Erweiterung des STK-Roboters wurde die Voraussetzung dafür geschaffen, daß auch für zukünftige Anwendungen ausreichend Speicherkapazität zur Verfügung steht.

Zugriffsrechte in ORACLE-Datenbanken

Alle ORACLE-Anwender möchten wir bitten, keine Tabellen in den Zustand „PUBLIC“ zu setzen (`GRANT privilege ON objectname TO PUBLIC`). Bei Einsatz von bestimmten ODBC-Treibern auf PCs werden nämlich diese Tabellen allen Benutzern bekanntgemacht. Die Tabellen können von allen gelesen werden und, wenn noch zusätzlich das Privileg INSERT, UPDATE oder DELETE vergeben wurde, auch verändert werden. Die aktuellen Rechte kann man abfragen mit `„SELECT * FROM all_tab_privs WHERE grantee='PUBLIC' AND grantor='Benutzername'“`. Zurücknehmen können Sie das Public-Privileg mit `„REVOKE privilege ON objectname FROM PUBLIC“`.

Bitte benutzen Sie den vom ZAM empfohlenen ODBC-Treiber der Firma INTERSOLV, der sich besonders durch seine Schnelligkeit auszeichnet. (Ansprechpartner: Walter Elmenhorst, Tel. 6762)

Working Group EuroTools

Um den Einsatz von Software und Programmierwerkzeugen für das wissenschaftliche Hochleistungsrechnen (HPC) innerhalb und außerhalb Europas zu fördern, wurde vom ZAM zusammen mit 17 europäischen Firmen, Forschungseinrichtungen und Universitäten im April 1998 die ESPRIT Working Group EuroTools gegründet. Deren Arbeit wird von der Europäischen Kommission zunächst für zwei Jahre finanziert. EuroTools organisiert eigene Workshops und solche im Rahmen von wissenschaftlichen Konferenzen, um den Informationsaustausch zwischen Entwicklern, Herstellern und Benutzern europäischer HPC-Software zu fördern. In diesem Rahmen wird vom ZAM ein Workshop bei der ECOOP'99 (13th European Conference on Object-Oriented Programming), 14. - 18. Juni in Lissabon organisiert. Weitere Informationen, insbesondere über die Veranstaltungen und über eine Datenbank europäischer HPC-Werkzeuge, findet man auf dem Web-Server der Arbeitsgruppe unter <http://www.irisa.fr/EuroTools>. (Ansprechpartner: Dr. Bernd Mohr, Tel. 2054)

Neue ZAM-Dokumentation

- BHB-0156 NWChem User Documentation Release 3.2.1
- TKI-0343 Electronic Mail: POP3/IMAP4
- IB-9817 Technik und Einsatzmöglichkeiten von Fast Ethernet im Forschungszentrum Jülich
- IB-9821 Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen: Herausforderungen komplexer Systeme an die Computer-Simulation
- IB-9822 Highly Optimized Code for Lattice Quantum Chromodynamics on the CRAY T3E
- IB-9823 Running a Code for Lattice Quantum Chromodynamics Efficiently on CRAY T3E Systems
- IB-9824 Metacomputing in Gigabit Environments: Networks, Tools, and Applications
- IB-9901 Teraflops Computing: A Challenge to Parallel Numerics
- IB-9902 Thermalization of Large Fluid Systems consisting of Lennard-Jones Mixtures
- Jül-3630 Parallele numerische Algorithmen und mathematische Theorie zur Magnetoenzephalographie

Die ZAM-Benutzerdokumente sind im Informationszentrum erhältlich und stehen auf dem Web-Server zur Verfügung unter www.fz-juelich.de/zam/docs/.

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Programmierung in Java

Referentinnen: Anke Häming, Valentina Huber, ZAM
Termin: 12. - 14.4.1999, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an A.Haeming@fz-juelich.de, Tel. 4227

Die Programmiersprache Perl

Referenten: Dr. Thomas Eickermann, Wolfgang Frings, Willi Homberg, ZAM
Termin: 19. - 21.4.1999, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an W.Frings@fz-juelich.de, Tel. 2828

Datensicherheit in Kommunikationsnetzen

Referenten: Dr. Burkhard Mertens, Dr. Rudolf Theisen, ZAM
Termin: Donnerstag, 22.4.1999, 14.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Objekt-orientierte Programmierung in C++

Referenten: Dr. Bernd Mohr, Günter Egerer, ZAM
Termin: 26. - 30.4.1999, 8.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an B.Mohr@fz-juelich.de, Tel. 2054

ISDN- und Modemverbindungen zum JuNet

Referent: Dr. Leon Radermacher, ZAM
Termin: Dienstag, 27.4.1999, 14.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Nutzung des Betriebssystems Unix

Referent: Herbert Schumacher, ZAM
Termin: 4. - 5.5.1999, 9.00 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an Her.Schumacher@fz-juelich.de, Tel. 3523

NIC-Seminar: Der QCDS-Computer - Quantenchromodynamik auf Digital Signal Prozessoren

Referentin: Dr. Gabriele Siegert, NIC
Termin: Dienstag, 4.5.1999, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Erstellung wissenschaftlicher Texte mit LaTeX (Einführung)

Referenten: Stephan Graf, Beate Herrmann, ZAM
Termin: 10. - 11.5.1999, 9.00 - 12.00 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an St.Graf@fz-juelich.de, Tel. 6578

Einführung in CDE (Common Desktop Environment)

Referentin: Ulrike Schmidt, ZAM
Termin: 10.5.1999, 13.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an U.Schmidt@fz-juelich.de, Tel. 6577

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: www.fz-juelich.de/zam/news/kurse/

NIC: www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/

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