



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 75 • Juni/Juli 1999

Domain-Namen des Forschungszentrums

Nach dem Wegfall des Kürzels „KFA“ als Logo des Forschungszentrums gilt der Auftrag des Vorstands, dieses Kürzel auch bei elektronischer Kommunikation mit Außenwirkung zu entfernen. Daraufhin wurde die zusätzliche Internet-Domain *fz-juelich.de* reserviert, die seither für Electronic Mail und für den zentralen WWW-Dienst genutzt wird. In Adressangaben auf Briefen, Visitenkarten usw. kann somit die Verwendung des Kürzels „KFA“ vermieden werden.

Der Vorstand hat in seinem Beschluß vom 29.3.1999 nun festgelegt, daß auch in der Zukunft zwei Domain-Namen genutzt werden, und folgt damit einer Empfehlung des ZAM und dem Votum der DV-Kommission, die den technischen Aufwand für eine vollständige Umstellung auf den neuen Domain-Namen für unverhältnismäßig hoch halten:

1. Für die nach außen stark sichtbaren E-Mail- und WWW-Dienste ist jetzt der neue Domain-Name *fz-juelich.de* verbindlich zu nutzen. Das bedeutet, daß die offiziellen E-Mail-Adressen die Form *V.Nachname@fz-juelich.de* haben sollen. Falls Sie noch keine offizielle E-Mail-Adresse haben, beantragen Sie sie bitte mit dem Online-Formular unter *www.fz-juelich.de/MAIL*.

Die folgenden Rechner werden unter der neuen Domain geführt:

zentraler WWW-Server	<i>www.fz-juelich.de</i>
POP-Server	<i>popsrv.fz-juelich.de</i>
IMAP-Server	<i>imapsrv.fz-juelich.de</i>
Mailrelay-Server	<i>mailrelay.fz-juelich.de</i>

Falls Sie Web-Seiten auf einem dezentralen Web-Server anbieten, die Sie unter der neuen Domain bekannt machen möchten, wenden Sie sich bitte an Dr. Sabine Höfler-Thierfeldt, Tel. 6765.

2. Für **alle anderen Rechner** im Forschungszentrum bleibt der Domain-Name weiterhin ***kfa-juelich.de***.

Neue Version von AIX

Am Montag, dem 17. Mai 1999, wurde das AIX auf dem zentralen Unix-System IBM R50 auf den Stand AIX 4.3.2 gebracht. Dieses Release unterstützt die neue IBM-Hardware „Power 3“ (mit 64 bit) und ist Jahr-2000-fähig. Es ist binär kompatibel mit seinen Vorgängern, so daß alle Programme unverändert laufen sollten. Da allerdings sowohl für Fortran als auch für C und C++ neue Compiler-Versionen zum Einsatz kommen, empfehlen wir, die Programme neu zu übersetzen. Um „Power 3“ effizient ausnutzen zu können, sind Neuübersetzungen mit der Option `-O4` sinnvoll. Einzelheiten dazu sowie weitere Informationen (z.B. über die neue Version von X11 Release 6) und Änderungen lesen Sie im News-Eintrag (Kommando: `news aix`). Beachten Sie bitte insbesondere, daß „Info-Explorer“ nicht mehr unterstützt wird und alle IBM-Dokumentation jetzt über *http://aixdoc.zam* zugänglich ist. Bei Fragen oder Problemen wenden Sie sich bitte an das Informationszentrum (Tel. 6400)

Ab Freitag, den 28. Mai 1999 erfolgt auch auf den Workstation-Gruppen eine Migration auf AIX 4.3.2. Bei selbstverwalteten AIX-Workstations ist bis zum Ende des Jahres ein Betriebssystem-Upgrade notwendig. Zur Terminabsprache bitte Herta Gerlach (Tel. 2057) anrufen.

SSH: Sicherer Rechner-Zugang

In der letzten Zeit häufen sich die Fälle, daß in anderen Institutionen von Hackern erzeugte „Sniffer-Logs“ (Mitschnitt des Verkehrs auf Datenleitungen) gefunden werden, in denen auch Benutzerkennungen und Paßwörter von Nutzern der Jülicher Supercomputer enthalten sind. Durch dieses Ausspähen von Paßwörtern ist den Hackern die Möglichkeit gegeben, ohne Schwierigkeiten in die entsprechenden Benutzerumgebungen einzudringen und dort nach Belieben zu agieren (zu rechnen, Programme oder Daten zu verändern usw.).

Zur Beseitigung dieses Risikos gibt es nur eine Abhilfe: Es muß verhindert werden, daß Paßwörter im Klartext über die Datenleitungen geschickt werden. Ein Verfahren, dieses zu realisieren, ist die Nutzung einer verschlüsselten Kommunikation, z.B. über Secure Shell (ssh). Die Verfügbarkeit von ssh auf den Systemen im ZAM wurde bereits im Oktober 1998 in „ZAM aktuell“ angekündigt und die Benutzung von ssh empfohlen. Das ZAM stellt entsprechende Software zur Verfügung (s. TKI-0330 für Unix-Systeme, TKI-0348 für PCs sowie <http://www.fz-juelich.de/zam/news/ssh.html>).

Aufgrund der sich häufenden Vorfälle bittet das ZAM dringend alle Benutzer, zum Schutz der Rechner und Daten ssh einzusetzen. ssh ersetzt den telnet- und rexec-Zugang; mit scp steht ein Ersatz für ftp zur Verfügung. Es ist geplant, den Einsatz von ssh noch in diesem Jahr verbindlich zu machen. Daher sollte sich jeder Benutzer umgehend mit der neuen Technik vertraut machen. (Ansprechpartner: Klaus Wolkersdorfer, Tel. 6579)

Objektorientierte Software-Entwicklung

Rational Rose, das bekannteste CASE-Werkzeug zur objektorientierten Software-Entwicklung, wurde im ZAM für die MTA-Ausbildung installiert. Die Solaris-Version steht jetzt auch anderen interessierten Anwendern zur Verfügung.

Rational Rose basiert auf der Unified Modeling Language (UML) von Booch, Rumbaugh und Jacobsen, die sich als Standard im Bereich der objektorientierten Software-Modellierung etabliert hat. Das Werkzeug unterstützt sowohl die eigentliche Software-Modellierung mit Hilfe der in UML definierten Diagramme als auch Codegenerierung und Reverse-Engineering für Java, C++ und Oracle. (Ansprechpartner: Dr. Michael Gerndt, Tel. 6569)

512 Prozessoren gegen den Rest der Computerschach-Welt

Vom 14. bis zum 20. Juni findet in Paderborn die 9. World Computer Chess Championship (WCCC) statt. Die Jülicher CRAY T3E-600 wird in Kombination mit dem Programm „Zugzwang“ versuchen, im Spielmodus „Schweizer System“ in sieben Runden insgesamt 29 andere Computer-Programme, darunter das Weltmeister-Programm „Fritz“, mattzusetzen (s. <http://www.uni-paderborn.de/~wccc99/>).

Das Programm „Zugzwang“ wurde an der Universität-Gesamthochschule Paderborn von Dr. Rainer Feldmann, Dr. Peter Mysliwietz, Heiner Matthias (Schachexperte) und Prof. Burkhard Monien entwickelt. Im Juli 1998 nahm es als einziges Computer-Programm bereits an einem Großmeister-Turnier in Lippstadt teil, das sonst ausschließlich mit menschlichen Schachmeistern besetzt war, und errang dort einen beachtlichen 2. Platz. Die dort erreichte ELO-Punktzahl wird auf etwa 2600 (also Großmeisterstärke) geschätzt. In der

Folge wurden weitere Verbesserungen, vor allem im Bereich Schacheröffnung, gemacht.

Das mathematische Vorgehen, das sich hinter Schachprogrammen verbirgt - die „Spielbaumsuche“ - kann auch zur Lösung wissenschaftlicher oder technischer Probleme, beispielsweise in der Logistik, bei der Fertigung elektronischer Schaltkreise oder in der Hochenergiephysik, herangezogen werden. Ein verwandtes Verfahren ist dasjenige, das beim „Traveling Salesman“ verwendet wird: Ein Verkäufer möchte den optimalen Rundweg für den Besuch aller seiner Kunden wissen. Derartige Verfahren spielen in vielen wissenschaftlichen Fragestellungen eine entscheidende Rolle. Die Verbesserungen in der Effizienz des Verfahrens von „Zugzwang“ kommen dadurch auch diesen anderen wissenschaftlichen Projekten zugute.

Wir bitten Sie um Verständnis, wenn die CRAY T3E-600 zwischen dem 14. und 20. Juni zu den Zeitpunkten der einzelnen Runden ausschließlich für diese Aufgabe verwendet wird.

COLUMBUS auf CRAY J90 und T3E

Auf den Cray-Rechnern J90 und T3E wurde das Programmpaket COLUMBUS für Ab-initio-Rechnungen in der Quantenchemie installiert. Es ist auf Multi-Referenz-Rechnungen (MR) spezialisiert. Neben dem MCSCF-Verfahren (Multi Configuration Self Consistent Field) stehen mehrere MR-Verfahren (MR-CISD, MR-ACPF und MR-AQCC) für die Berechnung elektronischer Grundzustände und angeregter Zustände zur Verfügung. Das volle Programmpaket ist auf CRAY J90 installiert. Auf der T3E ist eine unter Verwendung der Global Arrays Software parallelisierte Version des CI-Programmes (Configuration Interaction) verfügbar.

Weitere Informationen, insbesondere zur Nutzung von COLUMBUS und zur Dokumentation, finden Sie unter der URL www.fz-juelich.de/zam/mathe/chem_soft/columbus.html.

Neue ZAM-Dokumentation

IB-9818 CRAY T3E Supercomputer Kommunikation

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

NIC-Seminar: Density Functional, Molecular Dynamics Simulations of the Electrode/Electrolyte Interface

Referent: Dr. Sean Walbran, IWV-3

Termin: Dienstag, 15.6.1999, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

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