



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 83 • März 2000

NIC-Winterschule „Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry“

Vom 21. bis 25.2. veranstaltete das John von Neumann-Institut für Computing unter der Regie des ZAM eine Winterschule mit dem Titel „Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry“. Das Vorlesungsprogramm dieser einwöchigen Ferienschule wurde zusammen mit Walter Thiel und Hans-Joachim Werner als Vertreter der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie gestaltet und von namhaften nationalen und internationalen Wissenschaftlern durchgeführt. Das Ziel war, Studenten, Doktoranden und Postdocs der Theoretischen Chemie methodische Fortschritte auf diesem Gebiet sowie moderne algorithmische Techniken, insbesondere für Parallelrechner, zu vermitteln. Dieser Ansatz fand große Resonanz und zog über 200 Teilnehmer aus 16 Ländern in das Auditorium des Forschungszentrums. Etwa ein Drittel der Teilnehmer kam aus dem Ausland, wobei einige Ferienschüler auch weite Anreisewege aus Russland, Korea und den USA nicht gescheut haben.

Im einzelnen wurden die folgenden Themen behandelt: Dichtefunktionaltheorie, Ab-Initio-Molekulardynamik, Post-Hartree-Fock-Methoden, Moleküleigenschaften, relativistische Quantenchemie, linear-skalierende Methoden, semiempirische und hybride Methoden, parallele Programmiermodelle, Performance-Analyse, numerische Verfahren, automatische Differentiation und industrielle Anwendungen. Ein wichtiges Thema vieler Vorträge war die Reduktion der Komplexität der Ab-Initio-Rechenverfahren. Gegenwärtig steigt der Rechenaufwand der zuverlässigsten konventionellen Methoden mit der sechsten bis siebten Potenz der Molekülgröße N an. Einen vielversprechenden Ausweg aus dieser Situation bieten neue Methoden, die durch eine lokalisierte Beschreibung der Elektronen den steilen Anstieg der Rechenzeit und des Speicherplatzes vermeiden und eine lineare Skalierung mit der Molekülgröße ermöglichen.

Schriftliche Ausarbeitungen zu den Vorlesungen sowie die Abstracts zu den Posterbeiträgen sind in den ersten beiden

Bänden einer neuen Buchreihe des John von Neumann-Instituts für Computing erschienen. Die Vorlesungsmanuskripte der Winterschule stehen auch im WWW unter <http://www.fz-juelich.de/nic-series/> zur Verfügung.

Antiviren-Software im neuen Gewand

Seit Februar bietet das ZAM die Antiviren-Software Virus-Scan und den Virenwächter VShield von McAfee in Nachfolge der bisher zur Verfügung gestellten Software DSAV von Dr. Solomon an. Die Firma NAI, zu der McAfee gehört, hat bereits 1998 die Firma Dr. Solomon gekauft und deren Virensuchprogramm in ihr Produkt integriert.

VShield kann Ihre E-Mail und Dateien, die Sie sich z.B. aus dem Internet holen, automatisch überprüfen und Sie auch vor einigen bekannten gefährlichen Java-, JavaScript- und ActiveX-Elementen schützen, die auf Surfer im Internet lauern. Die Software wird unter `\\pcsrv\public\nai\viruscan\` bzw. für NT-Server unter `\\pcsrv\public\nai\netshield\` bereitgestellt. Hinweise für die Installation und Nutzung unter Windows 95/98 sind in der TKI-0355 zu finden. Die Aktualisierung der neuen Virendefinitionen (Funktion *AutoUpdate*) und des neuen Virensuchprogramms ist mit Hilfe des Planners einfach zu organisieren. Wir empfehlen, diese Funktionen manuell zu starten, weil anschließend ein Neustart des PC notwendig ist. Bei einem automatischen Start könnten möglicherweise geöffnete Dateien verloren gehen. Im Unterverzeichnis `\\nai\viruscan\zam-info\` finden Sie neben der TKI weitere Dokumentation. (Ansprechpartner: Dr. Rudolf Theissen, Tel. 3865)

Neue Version von Tcl/Tk

Eine neue Version von Tcl/Tk ist im Februar freigegeben worden. Sie kann, gebunden mit dem Paket Expect-5.31 zur Automatisierung von interaktiven Anwendungen, über den Software-Distribution-Server des ZAM unter dem Produktnamen Tcl8.3 installiert werden. Die neue Version enthält

eine Reihe zusätzlicher Features in der graphischen Komponente Tk. Detaillierte Hinweise zum neuen Release findet man unter <http://dev.scripatics.com/software/tcltk/8.3.html>.

Als Produktionsversion von Tcl/Tk ist ab sofort 8.0.2 auf allen zentral vom ZAM administrierten Rechnern eingesetzt. Darin enthalten sind die Pakete Expect-5.25 und Oratcl-2.5, also auch eine Unterstützung der Schnittstelle zum Datenbanksystem Oracle. Nur noch bis 30. Juni 2000 wird die bisher eingesetzte Tcl/Tk-Version unter dem Namen Tcl7.6 verfügbar bleiben. (Ansprechpartner: Willi Homberg, Tel. 2424)

Stacheldraht, Tribe Flood Net und Konsorten

Die Hackerszene erregt durch bösartige Angriffe auf das Internet die Aufmerksamkeit der Öffentlichkeit bis hin in die politischen Spitzen; die Medien berichten über Hackerattacken auf die Web-Server großer Unternehmen, was zu erheblichen Ausfällen und damit zu beträchtlichen wirtschaftlichen Schäden führen kann.

Rechner durch Datenmüll zu blockieren, ist nicht neu. Neu ist, daß von den Hackern sehr viele Rechner in aller Welt für solche „Distributed Denial of Service (DDoS)“-Attacken mißbraucht werden. Auf diesen Rechnern werden bekannte Sicherheitslücken der Betriebssysteme (insbesondere Unix, Linux und Windows NT) ausgenutzt, um dort heimlich Client-Software (z.B. Stacheldraht, Tribe Flood Net, Trinoo, Slice3) zu installieren, die dann auf Kommando eines Servers eine bestimmte Internet-Adresse mit einer Flut von Daten zuschüttet (siehe auch <http://www.fz-juelich.de/zam/net/security/infos/DDoS/>). Derart angegriffene Systeme sind wehrlos. Die einzige Gegenmaßnahme ist, im Falle eines DDoS-Angriffes den dann nicht funktionsfähigen Außenzugang ins Internet abzuschalten; das Netz des Forschungszentrums JuNet ist so strukturiert, daß in diesem Fall wenigstens die interne Datenkommunikation noch funktioniert.

Wahrscheinlicher als eine direkte Attacke ist der Mißbrauch von Rechnern im FZJ als Relay-Rechner für solche Angriffe. Hacker nutzen gerne die leistungsfähigen Netze von Universitäten und Forschungseinrichtungen, um ihren kriminellen Aktionen mehr Wirkung zu verschaffen. Damit Rechner des Forschungszentrums diesem Treiben keinen Vorschub leisten, müssen stets die bereitgestellten Sicherheits-Patches für die Betriebssysteme (siehe news://news.kfa-juelich.de/kfa.zam.security) installiert und alle nicht benötigten Netzdienste abgeschaltet werden. Ferner sollte bei ungewöhnlichen Ereignissen auf dem eigenen Rechner die ZAM-Beratung (Tel. 6400) informiert werden. Die neue TKI-0356 „Hackereinbruch? Erste Maßnahmen bei Unix-Systemen“ kann hier weitere Hinweise liefern. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0355 Bedienungshinweise zu McAfee VirusScan mit VShield für Windows95/98
TKI-0356 Hackereinbruch? Erste Maßnahmen bei Unix-Systemen

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Benutzung von Secure Shell (ssh)

Referentin: Ulrike Schmidt, ZAM
Termin: Montag, 13.3.2000, 14.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Dynamischer Lastausgleich in parallelen, gitterbasierten Anwendungen

Referent: Dr. Achim Basermann, NEC Europe Ltd.
Termin: Dienstag, 14.3.2000, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Einsatz von Fast-/Gigabit-Ethernet-Switching im JuNet

Referent: Dr. Dieter Conrads, ZAM
Termin: Mittwoch, 15.3.2000, 14.00 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Ein einfaches Modell für die Dynamik von Proteinen

Referent: Prof. Dr. Gerald Kneller, Universität Orléans
Termin: Dienstag, 21.3.2000, 13.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

Zur Sicherheit von Windows-PCs im Internet

Referent: Dr. Jürgen Meißburger, ZAM
Termin: Mittwoch, 22.3.2000, 14.00 - 16.30 Uhr
Ort: Hörsaal im ZAM

3D im WWW?!

Referent: Dieter Bartel, ZAM
Termin: Montag, 27.3.2000, 14.00 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an D.Bartel@fz-juelich.de, Tel. 6423

MPI-Workshop

Referent: Rolf Rabenseifner, HLRS
Termin: 29. - 31.3.2000
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Info: http://www.hlrs.de/mpi/mpi_Spring2000.html

Erstellung von Videofilmen

Referent: Maik Boltes, ZAM
Termin: Donnerstag, 30.3.2000, 14.30 Uhr
Ort: Graphikraum im ZAM
Anmeldung an M.Boltes@fz-juelich.de, Tel. 6557

Objekt-orientierte Programmierung in C++

Referent: Dr. Bernd Mohr, ZAM
Termin: 3. - 7.4.2000, 8.30 - 16.30 Uhr
Ort: Ausbildungsraum im ZAM
Anmeldung an B.Mohr@fz-juelich.de