



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 86 • Juni 2000

Offizielle Mail-Adressen zum 1. Juli verbindlich

Ab dem 1. Juli 2000 werden Mitarbeiter des Forschungszentrums E-Mail von externen Rechnern nur noch dann empfangen können, wenn sie an eine offizielle Mail-Adresse in der Form *v.nachname@fz-juelich.de* gerichtet ist.

Betroffen hiervon sind nur noch solche Mitarbeiter, die in der nun endenden zweijährigen Übergangsphase ihre Mail noch direkt über eine Adresse der Form *userid@rechner.institut.kfa-juelich.de* auf einem Mail-Server in ihrem Institut empfangen haben. Offizielle E-Mail-Adressen können beantragt werden unter <http://www.fz-juelich.de/MAIL> (siehe TKI-0343).

Mit dieser Aktion wird die Umstrukturierung der E-Mail-Schnittstelle zwischen externen Netzen und dem Forschungszentrum vervollständigt, die bereits vor zwei Jahren begonnen wurde (vgl. „ZAM aktuell“ Nr. 64, Mai 1998) und unter anderem das Ziel verfolgt, den Einsatz von Maßnahmen zur Abwehr von Viren wie auch von Werbemail zu ermöglichen bzw. zu vereinfachen.

Zur Zeit wird im ZAM Software evaluiert, die bereits am Mail-Eingang zum Forschungszentrum E-Mail-Attachments auf Viren oder ausführbaren Code untersucht und gegebenenfalls aussortiert oder den Empfänger zumindest warnen kann. Der Einsatz solcher Software wird natürlich die Antiviren-Software auf den Endgeräten nur ergänzen, keinesfalls aber ersetzen können. (Ansprechpartner: Martin Sczimarowsky, Tel. 6411)

Zeit ist Geld?

Dieser Spruch ist nur begrenzt richtig, insbesondere wenn es sich um Rechenzeit auf Supercomputern handelt. Zu Beginn einer Bewilligungsperiode erhält ein Institut oder eine Nutzergruppe ein Rechenzeitkontingent als „Guthaben“, doch im Gegensatz zu Geld kann man den Rechenzeitverbrauch nicht bis kurz vor Ende der Bewilligungsperiode aufsparen. Die Rechenzeit steht nur kontinuierlich zur Verfü-

gung und sie muß im Mittel über alle Nutzer auch kontinuierlich abgerufen werden.

Um dies zu gewährleisten, werden schon seit langer Zeit große Kontingente in Form von Monatskontingenten vergeben, wobei ein nicht verbrauchtes Monatskontingent nur in den nächsten Monat übertragbar ist, nicht aber in den übernächsten Monat. Daher: nicht genutzte Rechenzeit altert und verfällt! Kleinere Kontingente, sog. Festkontingente, verfallen erst am Ende der Bewilligungsperiode.

Wegen der sehr hohen Auslastung der Supercomputer muß für NIC- und VSR-Projekte zum 1. Juli 2000 der Schwellwert, ab dem ein bewilligtes Kontingent nur als Monatskontingent zugeteilt wird, nach unten verschoben werden, um Engpässen - insbesondere am Ende der Bewilligungsperiode - entgegenzuwirken. Dieser Wert wird bei CRAY J90 auf 80 CPUh/Monat (entsprechend 19.200 VE/Jahr), bei CRAY T90 auf 50 CPUh/Monat (entsprechend 69.000 VE/Jahr) und bei CRAY T3E auf 3.000 CPUh/Monat (entsprechend 99.000 VE/Jahr) gesetzt. Dabei genügt schon ein Erreichen des Schwellwertes zur Zuteilung von Monatskontingenten. Die bereits bewilligten begutachtungsfreien Kontingente des Forschungszentrums sind erst im nächsten Jahr hiervon betroffen. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

Mit dem Supercomputer neuen magnetischen Grundzuständen auf der Spur

Ein weltweit einzigartiges massiv-paralleles Computerprogramm (s. <http://www.flapw.de>) wurde von Herrn Kurz und Herrn Dr. Bihlmayer aus der Arbeitsgruppe von Herrn Dr. Blügel am Institut für Festkörperforschung (IFF) des Forschungszentrums Jülich entwickelt. Hier stellen sie ihre Motivation und ihre neuen Erkenntnisse vor:

„Durch die fortschreitende Miniaturisierung in der Magnetoelektronik werden komplexe magnetische Strukturen in nanoskaligen Systemen immer wichtiger. In diesen Nanomagneteten stehen die magnetischen Momente der Elektronen von Atom zu Atom nicht mehr nur parallel (kollinear)

zueinander, wie bei einem Ferromagneten, sondern zeigen in alle Himmelsrichtungen. Einsicht in die zugrundeliegende Physik der durch Elektronen hervorgerufenen magnetischen Wechselwirkung gestattet deren quantenmechanische Beschreibung in realen Materialsystemen. Zu diesem Zwecke wird die Dichtefunktionaltheorie (DFT) angewendet, die wohl erfolgreichste quantitative Elektronentheorie.

Wegen des hohen Rechenzeitaufwandes war die DFT bis vor kurzem auf die Beschreibung kollinearere Spinstrukturen beschränkt. Das im IFF entwickelte Programm erlaubt nun die Behandlung komplexer, nichtkollinearere Strukturen. Konnte ein kollineares System noch innerhalb von zwei Tagen auf einer Workstation berechnet werden, würde man für das gleiche System mit einer nichtkollinearen Struktur über ein Jahr benötigen. Durch die nichtkollineare Struktur vergrößert sich einerseits das den Rechnungen zugrundeliegende Eigenwertproblem erheblich, andererseits erhöht die geringere Symmetrie des magnetischen Zustands die Anzahl der zu lösenden Eigenwertprobleme drastisch. Verteilt man die Lösung der Eigenwertprobleme auf 128 Prozessoren des Rechners CRAY T3E, reduziert sich die Rechenzeit - bei geringerem Speicherplatzbedarf - auf drei Tage. Erst der Einsatz massiv-paralleler Rechner ermöglicht die Erforschung solcher komplexer Systeme in der Praxis. Erste Rechnungen, die seit Beginn des Jahres 2000 auf CRAY T3E-600 und T3E-1200 durchgeführt wurden, lieferten bereits vollkommen unerwartete und spektakuläre Resultate: neue magnetische Grundzustände, die mit konventionellen Spinmodellen nicht zu erklären sind. Eine experimentelle Methode zur Verifikation solcher magnetischer Strukturen wurde mit Kollegen der Universität Hamburg entwickelt und nachgewiesen [*Science*, 288, 1805 (2000)]. “

Information über Software-Änderungen

Für den vom ZAM betreuten zentralen AIX-Rechner und die Workstation-Gruppen mit AIX, Tru64 und Solaris ist eine Liste der unter `/usr/local` installierten Anwendungen im WWW unter `file:/usr/local/etc/SoftwareChanges.html` verfügbar. Die Liste ist nach dem Zeitpunkt der letzten Software-Änderung geordnet und enthält Produktname, Änderungsdatum und eine Kurzbeschreibung der Software jeweils mit Verweisen auf weiterführende Informationen. Eine Übersicht über alle im ZAM verfügbaren Softwareprodukte erhalten Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/news/software.html>. (Ansprechpartner: Otto Büchner, Tel. 6433)

Liste der DV-Ansprechpartner

Zur Erleichterung des Kontaktes zwischen den Instituten und dem ZAM sowie ZEL gibt es in jeder Organisationseinheit (OE) Ansprechpartner für unterschiedliche Bereiche der Datenverarbeitung. Die Liste aller Ansprechpartner ist

jetzt auch im internen Web zu finden unter <http://www.fz-juelich.de/internes/dv/ansprechpartner.html>. Hier sind die Ansprechpartner der OE für allgemeine Datenverarbeitung, Netzwerkanbindung, PCs und IT-Sicherheit aufgeführt. Alle benannten Ansprechpartner haben von den Leitern der OE auch die entsprechenden Kompetenzen erhalten, im jeweiligen Bereich die Interessen der OE zu vertreten und die entsprechenden Festlegungen für ihre OE machen zu können. Bitte nehmen Sie im Bedarfsfall zunächst mit der in Ihrer OE zuständigen Person Kontakt auf. Vielfach lassen sich Fragen dann schon direkt vor Ort klären.

Linux-Clients für Workstation-Gruppen

Seit 1992 betreut das ZAM mittlerweile über 360 Unix-Arbeitsplätze auf Basis von IBM/AIX-, Compaq/AXP- und Sun/Solaris-Rechnern. Die Arbeitsplätze verteilen sich über 26 Workstation-Gruppen in über 10 Instituten im Forschungszentrum. Zur Zeit wird damit begonnen, auch Linux-Arbeitsplätze mit der Betriebssystemdistribution SuSE in die Gruppen zu integrieren. Installation, Konfiguration sowie Administration der Rechner wird - wie in den Gruppen üblich - vom ZAM übernommen.

Hardware-Plattform ist der FZJ-Standard-PC auf Intel-Basis. Als Benutzeroberfläche wird KDE eingesetzt. Ein Großteil der Anwendungen, die das ZAM für Unix-Plattformen anbietet, ist schon für Linux verfügbar, weitere Software-Pakete werden folgen. Die Performance eines modernen Linux-PC ist bei halb so hohen Kosten vergleichbar mit der Performance von aktuellen Low-End-Modellen anderer Workstation-Anbieter.

Besonders erwähnenswert ist die Doppelfunktion der Systeme als Unix- und Windows-Rechner. Mittels der Emulations-Software VMWARE kann der Benutzer unter Linux einen vorkonfigurierten, virtuellen Windows98-PC booten und damit sofort Standardanwendungen wie Office-Produkte von Microsoft nutzen.

Die Hardwarekosten liegen bei etwa DM 6.000 für einen Arbeitsplatz mit der Standardausstattung von zur Zeit 750 MHz Taktrate, 256 MB Hauptspeicher und einem 21-Zoll-Monitor. An Softwarekosten fällt neben den Lizenzen für Windows und die Office-Suite eine VMWARE-Lizenz (ca. DM 220) an. Weitere Informationen finden Sie unter <http://www.fz-juelich.de/zam/news/linux.html>. (Ansprechpartner: Otto Büchner, Tel. 6433)

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Graphisches Editieren mit Gimp

Referentin: Marlene Busch, ZAM

Termin: 15.6.2000, 13.30 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an graphik.zam@fz-juelich.de, Tel. 4100

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