

ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 18 • November 1993

Erweiterter Hauptspeicher der CRAY Y-MP8 in Betrieb

Am 11. Oktober 1993 wurde - wie bereits in der letzten Ausgabe von *ZAM aktuell* angekündigt - der Hauptspeicher der CRAY Y-MP8 von 32 auf 64 MWorte ausgebaut. Die technische Realisierung dieser Erweiterung klappte reibungslos und schneller als geplant. Mit dem Speicherausbau konnten die bisher gültigen Beschränkungen bei der Anforderung von großem Hauptspeicher gelockert werden; auch das Accounting wurde den neuen Gegebenheiten angepaßt:

- Maximal kann eine Applikation jetzt 32 MWorte Hauptspeicher anfordern (bisher 26 MWorte).
- Die Jobklassenstruktur wurde modifiziert, so daß aus der Menge aller Jobs, die zwischen 8 und 16 MWorte Hauptspeicher anfordern, jetzt mindestens zwei gleichzeitig in Ausführung sein können (bisher nur einer). Jobs, die mehr als 16 MWorte Hauptspeicher anfordern, werden wie bisher nacheinander abgearbeitet.
- Die Änderung des Memory-Faktors in der Accounting-Formel führt dazu, daß Jobs, die mehr als 6 MWorte Hauptspeicher benötigen, zum Teil erheblich preiswerter werden. Für einen durchschnittlichen Bedarf von 8 bzw. 26 MWorte beträgt der Memory-Faktor jetzt 1 bzw. 3,7 statt bisher 1,5 bzw. 6,4 (s. TKI-0015).

Die bisherigen Beobachtungen zeigen, daß mit diesen Anpassungen der Hauptspeicher gut ausgelastet ist und gleichzeitig keine Leerzeiten wegen Speicherblockierung mehr auftreten.

Neues Release MVS 4.3

Seit dem 16. Oktober 1993 läuft MVS auf der IBM ES/9000 in der Version MVS/ESA 4.3.0. Sie enthält verschiedene Weiterentwicklungen des MVS, insbesondere bei System Managed Storage. Dadurch kann der Administrationsaufwand auch bei steigenden Datenmengen konstant gehalten werden. Auf Grund unserer Tests erwarten wir keine Um-

stellungsarbeiten für Benutzerprogramme. Durch die neue Komponente *binder* des Linkage Editors hat sich jedoch das Format seiner Ausgabe völlig verändert, auch wenn er wie bisher benutzt wird. Bei Fragen wenden Sie sich bitte an das Informationszentrum.

Chemie-Software auf CRAY-Rechnern

Das Programmangebot im Bereich Computational Chemistry ist auf den CRAY-Rechnern um das weitverbreitete Programmpaket MOPAC (Molecular Orbital PACKage) ergänzt worden. MOPAC 93 ermöglicht die Untersuchung von Festkörper- und Molekülstrukturen sowie chemischen Reaktionen mittels semi-empirischer Methoden der Quantenchemie. Die ausführliche Dokumentation zur MOPAC-Software ist im Informationszentrum erhältlich. Die aktuelle Version MOPAC 93 ist in Zusammenarbeit zwischen dem Autor James Stewart und Fujitsu Ltd. sowie vielen Forschungsstätten entstanden. Die Portierung auf CRAY-Rechner erfolgte durch das ZAM.

Am 25./26. Oktober 1993 wurde die Version E.2 des Programmsystems Gaussian 92 für Ab-Initio-Rechnungen auf den CRAY-Rechnern in Produktion genommen. Dieses Update bietet neben Fehlerkorrekturen eine deutliche Performance-Verbesserung bei konventionellen SCF-Rechnungen. Mit dieser Maßnahme konnte zugleich ein Scheduling-Problem bei langlaufenden Gaussian-Jobs auf der CRAY Y-MP8/864 beseitigt werden, das den Systemdurchsatz störte. Es wird erwartet, daß sich nun auch die Turnaround-Zeiten für Gaussian-Jobs vermindern. Laut Ankündigung der Firma Gaussian Inc. werden mit dem nächsten Upgrade der Gaussian-Software im Laufe des nächsten Jahres zum ersten Mal DFT-Programme, d.h. Programme auf der Basis der Dichtefunktionaltheorie, für quantenchemische Rechnungen zur Verfügung stehen.

Zugang und Nutzung der Chemieprogramme auf den beiden CRAY-Systemen können über die menügeführte Interface-Software CHEMSOFT im VM/CMS erfolgen (s. TKI-0241 und TKI-0072).

Fortran 90

Der neue Standard erweitert die Programmiersprache Fortran vor allem in Bezug auf dynamische Speicherverwaltung (dazu gehören unter anderem Pointer), Feldausdrücke, kontrollierbare Schnittstellen zu Unterprogrammen, rechnerunabhängig spezifizierbare Genauigkeitsangaben bei Variablen und Konstanten, selbstdefinierte Datentypen (Strukturen) und dazugehörige Operationen, global geltende Deklarationen und Rekursion. Fortran 90 kann daher wesentlich zu einer effizienteren und weniger fehleranfälligen Programmierung beitragen.

Auf dem AIX-Cluster steht als Programmentwicklungswerkzeug der Fortran-90-Compiler *f90* der Firma NAGWare zur Verfügung. Informationen dazu findet man mit *siat* oder *news -a*. Auf den CRAY-Rechnern wird das *CF90 Programming Environment* als Produktionsumgebung am Anfang des Jahres 1994 angeboten werden.

Vom 19. bis 21. Oktober 1993 wurde im ZAM ein Kurs zu Fortran 90 gehalten, dessen Folien als PostScript-File *fortran_90_kompakt.ps* auf dem ftp-Server im Directory *pub/zamdoc/vortragsfolien* erhältlich sind (Ansprechpartner: Gerd Groten, Tel. 6589).

MACS-Softwaretest auf Intel Paragon

Im Rahmen des Kooperationsvertrages mit der Firma Intel führt das ZAM zur Zeit einen Beta-Test für das neue Paragon *Management and Control System* (MACS) durch. Diese Software bietet die Möglichkeit, die von NQS-Batchjobs und interaktiven Anwendungen auf den Rechenknoten des Paragons belegte Zeit abzurechnen und Rechenzeitkontingente einzurichten und zu überwachen. Zweck des Beta-Tests ist es, MACS auf Fehlerfreiheit und Stabilität zu überprüfen und sicherzustellen, daß es die für einen Produktionsbetrieb benötigten Funktionen enthält. Durch die frühzeitige und intensive Auseinandersetzung mit neuen Softwareprodukten kann das ZAM Einfluß auf die Entwicklung der Intel-Systeme nehmen.

Neue Netzwerkanwendungen für PCs

PC/TCP Version 2.2

Zur Einbindung von PCs ins KFAnet/INTERNET wird auf dem Remote Installation Server des ZAM die neue Version PC/TCP V2.2 der Firma FTP Inc. angeboten. Wesentliche Neuerungen: Mount/unmount von nfs-Drives ist nun auch unter MS-Windows 3.x möglich; unter MS-Windows können Nachrichten mit der WMsg-Applikation direkt auf dem Bildschirm eines anderen Hosts eingeblendet werden.

PCs, die bereits PC/TCP V2.1 installiert haben, können direkt über nfs auf die neue Version zugreifen. Für Neuinstallationen bzw. Upgrades von PC/TCP V2.05 und älter wird vom ZAM eine Autoinstall-Diskette zur Verfügung gestellt. Weitere Informationen gibt die TKI-0175.

LPR/LPQ-Client und Print Spooler für MS-Windows

Zur Ausgabe von Dokumenten auf den über KFAnet/INTERNET erreichbaren Netzwerkdruckern werden für MS-Windows 3.x ein LPR/LPQ-Client sowie ein Print Spooler angeboten. Beide Programme liegen zusammen mit der Dokumentation und dem DLL-Support als selbstentpackende Datei *winlpr01.exe* auf dem ftp-Server des ZAM unter */pub/msdos/kfanet/winlpr*.

PC-Eudora

Unter dem Namen PC-Eudora bietet die Firma Qualcomm Inc. eine E-Mail-Software mit einer benutzerfreundlichen Oberfläche für MS-Windows 3.x an. Fenstertechnik mit Pull-Down-Menüs gestattet die komfortable Bearbeitung und Archivierung der E-Mail auf dem PC. PC-Eudora basiert auf dem POP3-Protokoll und setzt einen über KFAnet/INTERNET erreichbaren POP3-Server voraus; PC-Benutzer in der KFA können den zentralen POP3-Server auf dem AIX-Cluster des ZAM nutzen. Für einen größeren Benutzerkreis innerhalb eines Instituts sollte jedoch ein eigener POP3-Server eingerichtet werden. Bis zur Version 1.1a10 wird PC-Eudora als Public-Domain-Software angeboten und liegt einschließlich der Dokumentation als selbstentpackende Datei *pce11a10.exe* auf dem ftp-Server des ZAM unter */pub/msdos/kfanet/pctcp*.

Neue ZAM-Benutzerdokumentation

TKI-0241 MOPAC 93 auf den CRAY-Rechnern

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

Veranstaltungen im ZAM

Programmierung in C

Referent: Günter Egerer, ZAM

Termin: 8. - 12.11.1993, jeweils 14.00 - 16.00 Uhr
am Freitag 13.30 - 15.30 Uhr

Das SAS-System zur statistischen Datenanalyse

Referenten: Paul Jansen, Monika Marx, ZAM

Termin: 6. - 10.12.1993, jeweils 8.30 - 10.00 Uhr

Graphische Werkzeuge in UNIX-Systemen

Referent: Dieter Bartel, ZAM

Termin: 6.12.1993, 14.00 - 17.00 Uhr

Redaktion: Dr. Sabine Höfler-Thierfeldt, Tel. 4416