



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 82 • Februar 2000

Neuer Molekulardynamik-Weltrekord mit über 5 Milliarden Atomen

Die Aufrüstung der CRAY T3E-1200 in Jülich zu einem Rechner mit 512 Prozessoren und 262 GB Hauptspeicher nahm die Forschergruppe um Dr. Johannes Roth am Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart zum Anlaß, die Grenzen heutiger Molekulardynamik-Simulationen auszutesten. Mit Hilfe des in Stuttgart entwickelten Programmpakets IMD war Dr. Roth am 28.10.1999 in der Lage, in einem Demonstrationslauf ein System bestehend aus 5180116000 Teilchen zu rechnen, was einem Würfel mit einer Kantenlänge von etwa 1540 Atomabständen oder etwa 0,42 Mikrometern entspricht. Dies bedeutet bereits einen Maßstab, der labortechnisch erfaßbar ist, und es ist somit prinzipiell nun möglich, Materialverformungen und Reißbildungen auf atomarem Level zu beschreiben und am Experiment zu verifizieren. Es wurden sechs Zeitschritte berechnet, von denen einer ungefähr 388 s dauerte. Bei diesen großen Teilchenzahlen kann man nur wenige Atomschwingungen beobachten: An einem Tag Rechenzeit könnte man 220 Zeitschritte berechnen. Für eine physikalisch aussagekräftige Simulation wären jedoch mehr als 10000 Zeitschritte erforderlich, die derzeit ca. ein Vierteljahr Rechenzeit benötigen.

Workshop über Message Passing (MPI)

Im Rahmen der Zusammenarbeit der deutschen Supercomputer-Zentren wird Rolf Rabenseifner vom Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) vom 29. bis 31. März 2000 im ZAM einen Workshop über die Programmierung von Parallelrechnern durchführen. Den inhaltlichen Schwerpunkt bildet die Kommunikationsbibliothek MPI (Message Passing Interface). Der Workshop steht allen Interessierten aus Wissenschaft und Forschung offen; eine Teilnahmegebühr wird nicht erhoben.

Ziel des Workshops ist es, Anwender in die Programmie-

rung von Parallelrechnern wie CRAY T3E einzuführen. Zunächst werden nach einer allgemeinen Diskussion verschiedener paralleler Programmiermodelle die wichtigsten Elemente von MPI-1 vorgestellt. In praktischen Übungen werden die Teilnehmer das Gelernte in Programme umsetzen und erproben. Anschließend wird auf Details der Programmierung in MPI-1 und auf die Erweiterungen in MPI-2 eingegangen, z. B. einseitige Kommunikation oder parallele Ein-/Ausgabe.

Eine Anmeldung bis zum 8. März 2000 ist erforderlich. Einzelheiten zum Kurs und das Anmeldeformular finden Sie unter: http://www.hlrs.de/mpi/mpl_Spring2000.html

Submission von Cray-Jobs über das Web

Da bei der Submission von Cray-Jobs über das WWW-Interface eine Übertragung von Userid und Paßwort stattfindet, wird ein sicherer Zugang mit Verschlüsselung angeboten unter <https://batch.cray.kfa-juelich.de/>.

Bei der ersten Benutzung muß ein Zertifikat akzeptiert werden, das vom ZAM bereitgestellt wird und ein Jahr gültig ist. Der sichere Zugang gewährleistet dieselbe Funktionalität wie das bisherige Batch-Interface über WWW, nämlich

- Erstellung und Änderung von Job-Skript-Dateien,
- Submission von Jobs an alle Cray-Systeme,
- Statusabfrage des Network Queuing Systems und der eigenen Jobs,
- Information über die eigenen Jobs,
- Abbruch von Jobs,
- Anzeige und Transfer des Job-Outputs.

(Ansprechpartner: Holger Markert, Tel. 3631)

Hintertüren

Hintertüren, insbesondere wenn sie unverschlossen sind, werden gerne von Einbrechern für ihr schändliches Tun benutzt. Hintertüren (Backdoors) auf Rechnern sind Programme, die über das Internet heimlich von Hackern

auf fremden Rechnern eingeschleust werden, um dort Zugang zu haben. Eine neue Abart solcher Backdoor-Programme (es gibt derzeit weit über 100 Varianten) ist Backdoor.SubSeven, dessen Leistungsfähigkeit erstaunlich ist (<http://www.f-secure.com/v-descs/subseven.htm>). Es besitzt über 110 verschiedene Funktionen, mit denen ein Windows-PC fast vollständig von ferne über das Netz kontrolliert werden kann. Eine der gefährlichen Funktionen ist die ständige Erfassung von Tastaturanschlägen; die so gewonnene Information wird per Internet sofort an den „Besitzer“ des Backdoor geschickt, sobald der PC online ist. Paßwörter und Passphrases (PGP!) werden somit zur leichten Beute, und auch die stärkste Verschlüsselung vertraulicher Informationen ist damit wirkungslos. Daß dieses keine Theorie ist, zeigte kürzlich die Entdeckung eines solchen Backdoors auf dem PC eines FZJ-Mitarbeiters.

Hinzu kommt, daß nicht nur die Funktion und die Daten des eigenen Rechners gefährdet sind. Durch den Mitschnitt der Tastaturanschläge fallen dem Hacker möglicherweise auch Benutzerkennungen und Paßwörter anderer Rechner in die Hände. Damit ist er in der Lage, sich einfach in diese Rechner einzuwählen, mögliche Schwachstellen im System auszuspähen und dann gegebenenfalls weitere Backdoors einzurichten oder sonstige Schäden anzurichten.

Wie kann man sich schützen? Die wichtigste Regel ist hier: Niemals Programme oder Makros ausführen, die nicht zweifelsfrei „sauber“ sind! Ausführbaren Code erhält man zum Beispiel verborgen in E-Mail-Attachments oder über Net-News. Aber auch Shareware-Programme transportieren hin und wieder solche ungebetenen Gäste. Moderne Viren-Scanner mit der neuesten Vireninformation können eine Vielzahl dieser Backdoors erkennen. Daher sind solche Virenscanner ein Muß für jeden PC, der an das Internet angeschlossen ist.

Eine weitere Sicherheitsmaßnahme ist der Einsatz eines lokalen Firewall. Hier empfiehlt das ZAM AtGuard (siehe TKI-0349), mit dem jeglicher Netzverkehr des PCs protokolliert und kontrolliert werden kann. Ein unbemerktes Abfließen von Informationen kann somit wirkungsvoll unterbunden werden. Weitere Hinweise zu diesem Thema können der neuen Technischen Kurzinformation „Zur Sicherheit von Windows-PCs im Internet“ (TKI-0354) entnommen werden. (Ansprechpartner: Dr. Burkhard Mertens, Tel. 3176)

Einrichten von Netzwerkdruckern unter Windows 95/98

In letzter Zeit häufen sich Postscript-Fehler, die auf einer falschen Einstellung der Druckeroptionen unter Windows 95 und 98 beruhen. Besonders oft sind hiervon auch Notebooks betroffen. Nachdem ein Netzwerkdrucker unter Windows eingerichtet wurde, müssen die Rückmeldungen des Druckers („bidirektionale Unterstützung“) deaktiviert werden. Dazu sind folgende Schritte nötig:

- unter „Arbeitsplatz“ im Ordner „Drucker“ den entsprechenden Drucker mit der rechten Maustaste anklicken,
- im Kontextmenü „Eigenschaften“ auswählen,
- über „Details“ -> „Spool-Einstellungen...“ die „bidirektionale Unterstützung“ deaktivieren.

Dies muß für jeden Netzwerkdrucker gemacht werden. Weitere Informationen zu diesem Thema können Sie auch in der TKI-0197 nachlesen. (Ansprechpartner: Herbert Schumacher, Tel. 3523)

Neue ZAM-Dokumentation

TKI-0354 Zur Sicherheit von Windows-PCs im Internet
 IB-9921 Specification Techniques for Automatic Performance Analysis Tools

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

ZAM/NIC-Veranstaltungen

Die zeitliche Entwicklung von Normalmoden in Flüssigkeiten

Referent: Dr. Michael Buchner, Universität Bielefeld
 Termin: Dienstag, 8.2.2000, 13.30 Uhr
 Ort: Hörsaal im ZAM

Winterschool: „Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry“

Termin: 21. - 25.2.2000
 Ort: Auditorium des Forschungszentrums Jülich
 Programm: <http://www.fz-juelich.de/wsqc/>

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

MPI-Workshop

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

Wenn Sie regelmäßig per E-Mail über unsere Veranstaltungen informiert werden möchten, schicken Sie eine E-Mail an majordomo@fz-juelich.de mit dem Inhalt: `subscribe kurse_zam`.

Weitere Veranstaltungshinweise:

ZAM: <http://www.fz-juelich.de/zam/news/kurse/>
 NIC: <http://www.fz-juelich.de/nic/Aktuelles/>

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