



## ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik

Nr. 124 • Mai 2004

### Sicherheit in Linux/Unix-Workstation-Gruppen

Seit einiger Zeit werden auf den Clients der Workstation-Gruppen lokale Datenbereiche wie Spool sowie /tmp- und /private-Filesysteme cron-gesteuert auf viren-infizierte Dateien untersucht. Im Verdachtsfall wird der Nutzer automatisch per E-Mail informiert. Er hat die Möglichkeit, mit dem Kommando `f-prot.sh <filename>` diese Dateien selbst zu prüfen und gegebenenfalls zu löschen. Ebenso werden die NFS-gemounteten Daten im Heimat-Filesystem auf den jeweiligen Gruppenservern regelmäßig kontrolliert. Die ersten Scans zeigen, dass derzeit nur in geringem Umfang infizierte Dateien vorhanden sind. Angesichts der steigenden Bedrohungen in diesem Bereich ist die Maßnahme jedoch notwendig, um den aktuell guten Stand zu halten.

Für die Nutzer von VMware ist mit den bereitgestellten Images für Win98, Win2000 und WinXP der Virens Scanner von NAI installiert. Hier werden beim Start die aktuellen Virenmuster geladen und ein Wächterprogramm wird aktiviert, welches die Laufwerke kontrolliert. Jeder Nutzer sollte prüfen, ob dies bei seiner Emulation auch in gewünschter Weise abläuft. Zusätzlich wird empfohlen, die aktuellen Windows-Patches einzuspielen. Informationen dazu findet man über [http://www.fz-juelich.de/zam/neues/vmware\\_sicherheit](http://www.fz-juelich.de/zam/neues/vmware_sicherheit).

Bei jedem Zugriff auf passwortgeschützte Ressourcen sollte die Kommunikation nach Möglichkeit verschlüsselt ablaufen, um das Ausspähen von Passwörtern zu vermeiden. Deshalb sind Internet-Dienste wie telnet und ftp schon seit einiger Zeit durch sichere Befehle wie ssh, scp und sftp abgelöst worden. Ab jetzt ist in allen Gruppen auch der Zugriff auf das Heimat-Filesystem über ein Samba-Share (siehe TKI-0325) so eingerichtet, dass das Passwort verschlüsselt übertragen wird.

Informationen zum Angebot des ZAM zur Administration von Linux-Arbeitsplätzen im Rahmen von Workstation-Gruppen finden Sie in der TKI-0275 und in dem Informationsblatt

[http://www.fz-juelich.de/zam/neues/WSG\\_Flyer](http://www.fz-juelich.de/zam/neues/WSG_Flyer). (Ansprechpartner: Willi Homberg, Tel. 2424)

### Tool zum Schutz gegen Spam: Greylisting

In den vergangenen Wochen wurde auf dem zentralen Mail-Eingang des Forschungszentrums ein neues Tool zur Spam-Abwehr implementiert und getestet, das zurzeit sehr effektiv ist. Es ist mittlerweile unter dem Namen „Greylisting“ allgemein verfügbar und kann von den Mail-Benutzern bei Bedarf individuell aktiviert werden.

Normalerweise nutzen Mail-Server Warteschlangenmechanismen (Queueing), um sicherzustellen, dass auch bei temporären Problemen eine Zustellung möglich ist. Nimmt der Empfänger z.B. wegen einer Wartung eine Mail nicht an, so wird deren Zustellung zu einem späteren Zeitpunkt - typischerweise innerhalb der folgenden 30-60 Minuten - erneut versucht.

Greylisting nutzt die Tatsache, dass Spam (und auch automatisch von infizierten Rechnern versendete Viren-Mail) meist nur genau einmal gesendet wird, und verlangt von absendenden Servern, dass sie eine Queue betreiben. Eine Mail, die erstmals von einem Server kommt, wird abgewiesen, bei einem wiederholten Zustellversuch innerhalb von 12 Stunden jedoch angenommen. Mail-Server, die auf diese Weise den Betrieb einer Mail-Queue nachgewiesen haben, werden in einer Datenbank entsprechend markiert und in Zukunft direkt bedient.

FZJ-interne Mail ist von diesem Verfahren ausgenommen, wird also immer ohne Verzögerung ausgeliefert.

Weitere Information zu diesem Thema findet sich auf den neu gestalteten Mail-Seiten des ZAM <http://www.fz-juelich.de/zam/mail>. Wenn Sie das Greylisting für Ihre Mail-Adresse aktivieren wollen, wählen Sie bitte den Unterpunkt „Greylist“ aus. (Ansprechpartner: Martin Sczimarowsky, Tel. 6411)

## Verbundprojekt HPC-Chem erfolgreich abgeschlossen

Am 25. März veranstalteten der Projektträger Informationstechnik im DLR und das ZAM das Abschluss-Meeting des Projektes HPC-Chem (High Performance Computing in der Chemie). Das Projekt wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert und vom ZAM koordiniert. Es hatte zum Ziel, wichtige Programmsysteme aus der Quantenchemie mit einer für industrielle Anwendungen geeigneten Methodenvielfalt (Korrelations-, Dichtefunktional- und Ab-Initio-Molekulardynamik-Methoden) weiterzuentwickeln. In diesem Vorhaben wurden die Programmsysteme MOLPRO (Universität Stuttgart), TURBOMOLE (Universität Karlsruhe) und QUICKSTEP (ETH Zürich, Lugano) methodisch weiterentwickelt und gleichzeitig an moderne parallele Rechnerarchitekturen angepasst. Durch die Entwicklung von linear bzw. fast-linear mit der Molekülgröße skalierenden Methoden und deren parallele Implementierung werden nun quantenchemische Rechnungen für große Systeme routinemäßig möglich, z.B. DFT-Rechnungen für Cluster mit mehr als 1000 Atomen. Der industrielle Einsatzbereich der genannten Programme wurde zudem durch die Einbindung des Lösungsmittelmodells COSMO erweitert.

Die Arbeitspakete des ZAM beinhalteten u. a. die effiziente Parallelisierung von TURBOMOLE, die Implementierung leistungsfähiger paralleler Algorithmen der linearen Algebra und einer linear-skalierenden Fast-Multipole-Methode für kontinuierliche Ladungsverteilungen. Die neuen Programmversionen werden derzeit in Zusammenarbeit mit den industriellen Partnern intensiv getestet. Die Programmsysteme TURBOMOLE, MOLPRO und QUICKSTEP werden nach Abschluss der Evaluierungs- und Optimierungsarbeiten auf dem IBM-Supercomputer Jump zur Verfügung gestellt, so dass die Ergebnisse dieses Projektes von Wissenschaftlern in Jülich und im NIC genutzt werden können.

Neben dem ZAM waren die folgenden Partner beteiligt: Universität Stuttgart (Prof. Werner), Universität Karlsruhe (Prof. Ahlrichs), ETH Zürich (Prof. Parrinello), BASF AG, Bayer AG, Robert Bosch GmbH, Infracor GmbH (Marl, Degussa-Gruppe) und COSMOlogic GmbH Co. KG (Leverkusen). (Ansprechpartner: Dr. Johannes Grotendorst, Tel. 6585)

## Neuer Haupteingang des ZAM, Umzug des Informationszentrums

Nachdem das neue Gebäude vom ZAM bezogen wurde, ist nun auch das Informationszentrum mit Beratung und Dispatch in den neuen Räumlichkeiten untergebracht. Es befindet sich jetzt im ZAM-Neubau im Erdgeschoss der Rotunde. Daher wurde auch der Haupteingang des ZAM verlegt und ist nun am Neubau (Geb. 16.4, E1) neben der Rotunde zu finden.

## Neue ZAM-Dokumentation

- IB-2004-01 Asymptotically Exact Calculation of the Exchange Energies of One-Active-Electron Diatomic Ions with the Surface Integral Method
- IB-2004-02 Exchange Energy for Two-Active-Electron Diatomic Systems within the Surface Integral Method
- IB-2004-06 EPILOG Binary Trace-Data Format
- NIC-Serie 24 Synchronization and Interdependence Measures and their Applications to the Electroencephalogram of Epilepsy Patients and Clustering of Data

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

### NIC-Seminar: Architektur und Leistung des ATOLL-Verbindungsnetzwerks

Referent: Prof. Dr. Ulrich Brüning, Universität Mannheim  
Termin: Dienstag, 25.5.2004, 14.00 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### VSR-Seminar: Die Clustermethode in der Fest/flüssig-Grenzflächenphysik

Referent: Dr. Jorge E. Müller, ISG3  
Termin: Dienstag, 8.6.2004, 13.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### VSR-Seminar: Nanoscale magnetism from first principles

Referent: Dr. Gustav Bihlmayer, IFF  
Termin: Dienstag, 8.6.2004, 14.15 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

### Korn Shell-Programmierung

Referenten: Thomas Plaga, Meike Wegmann, ZAM  
Termin: 15. - 17.6. und 22. - 24.6.2004, 8.15 - 10.30 Uhr  
Ort: Ausbildungsraum im ZAM  
Anmeldung an [M.Wegmann@fz-juelich.de](mailto:M.Wegmann@fz-juelich.de), Tel. 1463  
Dieser Kurs findet an den selben Tagen auch nachmittags von 14.15 - 16.30 Uhr statt.

### Mehr Sicherheit im Internet für Windows-Benutzer

Referent: Dr. Jürgen Meißburger, ZAM  
Termin: 15. und 17.6.2004, jeweils 14.00 - 16.30 Uhr  
Ort: Hörsaal im ZAM

Weitere Veranstaltungshinweise:

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

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