



## ZAM aktuell

*Höchstleistungsrechner  
Datenkommunikation  
Kooperatives Computing  
Mathematik*

*Nr. 79 • November 1999*

### **Das Gigabit-Wissenschaftsnetz kommt**

Am 19. Oktober 1999 haben der Vorstand des Vereins zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN-Verein), der Vorstand der Deutschen Telekom und die Geschäftsführung der DeTeSystem GmbH den Vertrag zur Errichtung und zum Betrieb des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN) unterzeichnet (siehe auch <http://www.dfn.de/presse/dfn-presse/pm99-10-19.html>).

Das G-WiN wird - als deutscher Teil des weltweiten Internet2 - mit modernster Glasfasertechnik ausgerüstet und Anschlußkapazitäten bis 2,4 Gbit/s ermöglichen. Es soll im Frühjahr 2000 stufenweise aufgebaut und in Betrieb genommen werden; damit wird es das derzeit genutzte B-WiN ablösen.

Für das Forschungszentrum Jülich plant das ZAM die Teilnahme am G-WiN mit einer Anschlußkapazität von 622 Mbit/s; diese Kapazität soll auch vorläufig die leistungsfähige Verbindung der vier deutschen Höchstleistungsrechenzentren bieten.

### **Vervierfachung der Transatlantik-Kapazität**

Seit dem 20. Oktober 1999 stehen den Benutzern des deutschen Breitband-Wissenschaftsnetzes (B-WiN) drei zusätzliche Leitungen mit jeweils 155 Mbit/s Bandbreite für die Kommunikation mit Institutionen in den USA und mit Ländern, die über die USA erreicht werden, zur Verfügung. Diese Vervierfachung der Kapazität führt zu einer spürbaren Verbesserung der Transatlantik-Kommunikation.

Um einen Engpaß im B-WiN-Kernnetz zu vermeiden, wurden die Aufpunkte für die Transatlantik-Leitung auf die vier B-WiN-Standorte Hannover, Köln, Leipzig und München verteilt. Dies bedeutet für die Benutzer im Forschungszentrum, daß ihre US-Kommunikation von Jülich aus über den zentralen B-WiN-Aufpunkt Köln direkt zum B-WiN-Standort New York läuft. (Ansprechpartnerin: Sabine Werner, Tel. 2742)

### **Das Finite-Element-Paket ANSYS**

Auf IBM R50 steht das Finite-Element-Paket ANSYS/Multiphysics in der Version 5.5 zur Verfügung. Diese Software ersetzt das bisher auf CRAY J90 angebotene ANSYS, da von der aktuellen Version keine Portierung auf CRAY J90 existiert.

ANSYS/Multiphysics ist ein modular aufgebautes Finite-Element-Paket, das alle Berechnungsmöglichkeiten von ANSYS/Mechanical, ANSYS/Emag und ANSYS/FLOTRAN in einem Produkt zusammenfaßt:

ANSYS/Mechanical umfaßt lineare und nichtlineare Statik und Dynamik und ermöglicht Temperaturfeldberechnungen. Mit ANSYS/Emag können stationäre, harmonische und transiente Berechnungen für elektromagnetische Felder/Ströme durchgeführt werden. ANSYS/FLOTRAN ist das Strömungsmodul von ANSYS zur Ermittlung von Druckabfällen, Strömungsgeschwindigkeiten und Druckkräften.

Weitere Informationen findet man unter <http://www.fz-juelich.de/zam/mathe/physics/ansys.html>. (Ansprechpartner: Dr. Bernd Körfgen, Tel. 6761)

### **Analyse und Visualisierung von Molekülen mit MOLMOL**

MOLMOL (MOleculare analysis and MOleculare display) ist ein Programm zur Darstellung, Analyse und Manipulation der 3D-Struktur biologischer Makromoleküle. Dabei wird die Untersuchung von Protein- und DNA-Strukturen, die beispielsweise durch NMR bestimmt wurden, besonders unterstützt. Auch für andere Molekülarten ist MOLMOL interessant, da es neben den üblichen Ausgabeformaten wie PostScript und Rastergraphik die Generierung von VRML-Dateien (3D-Modelle für das WWW) und von POV-Ray-Dateien (für hochqualitatives Rendern mit Beleuchtung, Schatten und Texturen für Präsentation und Publikation) vorsieht.

MOLMOL hat eine graphische Benutzerschnittstelle und erlaubt interaktive 3D-Transformationen und Stereodarstellung. Es basiert auf OpenGL. Einen Überblick über Möglichkeiten und Funktionsumfang bekommt man auf der Homepage <http://www.mol.biol.ethz.ch/wuthrich/software/molmol>. Im ZAM-Benutzerhandbuch BHB-0162 sind Users' Guide, Tutorials und eine ausführliche Kommandoreferenz zusammengefaßt. MOLMOL steht auf dem Software-Distribution-Server für alle vom ZAM unterstützten Systeme zur Verfügung. (Ansprechpartner: Dieter Bartel, Tel. 6423)

## Grace - ein graphisches Analyse-Tool für 2D-Daten

Mit Grace, dem Nachfolgeprodukt von xmgr, kann man 2D-Daten in Form von Linien-, Scatter- und Balkendiagrammen darstellen. Einsatzmöglichkeiten liegen unter anderem in den Bereichen: Regression, Splines, running averages, DFT/FFT, cross/auto-correlation. Grace kann im Batch-Modus ablaufen und unterstützt neben PostScript verschiedene andere Ausgabeformate wie PDF, GIF, PNG.

Weitere Informationen finden Sie auf der Grace-Homepage <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace>. Das Benutzerhandbuch BHB-0161 enthält als Originalabdruck den User's Guide, das Tutorial, die FAQs sowie Informationen zu den mitgelieferten Beispielprogrammen.

Grace ist auf dem zentralen Rechner IBM R50 und den Workstation-Gruppen verfügbar und kann über den Software-Distribution-Server des ZAM für die Plattformen AIX, Irix, Solaris, Digital Unix und Linux installiert werden. (Ansprechpartnerin: Marlene Busch, Tel. 4100)

## C++-Programmierung mit KCC

KCC, ein portabler, hoch-optimierender C++-Compiler der Firma Kuck & Associates (KAI), wird im ZAM schon seit einiger Zeit auf Cray T3E benutzt. Er unterstützt fast den kompletten neuen ISO-C++-Standard, insbesondere eine vollständige ISO-konforme Standard-Bibliothek. Diese ist thread-sicher für alle Plattformen außer CRAY T3E.

Er liefert die Leistung handkodierter C-Programme auch für objekt-orientierte C++-Programme. Ein wesentlicher Vorteil ist die Portabilität, d.h. gleiche Syntax, Standard-Bibliothek, Fehlermeldungen und Optimierungen auf allen unterstützten Plattformen.

Wegen der guten Erfahrungen mit KCC wurden zehn Lizenzen für weitere Plattformen beschafft. Auf dem Software-Distribution-Server stehen KCC-Pakete für AIX, Solaris, Irix und Tru64 zur Installation bereit. KCC gibt es auch für Intel/Linux. Linux-Benutzer wenden sich bitte bei Bedarf an Dr. Bernd Mohr, Tel. 2054. Ausführliche Dokumentation findet man unter <http://www.fz-juelich.de/zam/cxx/KCC/>.

## Neue ZAM-Dokumentation

- TKI-0345 Wissenschaftliche Publikationen 1999 des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik
- BHB-0161 Grace - ein graphisches Analyse-Tool für 2D-Daten
- BHB-0162 MOLMOL - Manual
- IB-9909 The UNICORE Architecture - Seamless Access to Distributed Resources
- IB-9910 TOPAS - Automatic Performance Statistics Collection on the CRAY T3E

## ZAM/NIC-Veranstaltungen

### Praxisbezogene Einführung in das System IDL zur wissenschaftlich-technischen Visualisierung

Referenten: Marlene Busch, ZAM; Heinz Heer, Michael Wagener, ZEL

Termin: 8. - 10.11.1999, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [graphik.zam@fz-juelich.de](mailto:graphik.zam@fz-juelich.de), Tel. 4100

### Explorative Analyse und Visualisierung von Daten mit SAS/INSIGHT

Referenten: Paul Jansen, Dr. Wolfgang Meyer, ZAM

Termin: Donnerstag, 11.11.1999, 14.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

### Erstellung wissenschaftlicher Texte mit LaTeX (weiterführende Themen)

Referenten: Stephan Graf, Beate Herrmann, ZAM

Termin: 15. - 16.11.1999, 9.00 - 12.00 Uhr und  
17.11.1999, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [text.zam@fz-juelich.de](mailto:text.zam@fz-juelich.de), Tel. 6578

### Datenbankentwicklung mit Oracle

Referent: Walter Elmenhorst, ZAM

Termin: 22. - 26.11.1999, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [W.Elmenhorst@fz-juelich.de](mailto:W.Elmenhorst@fz-juelich.de), Tel. 6762

### Scientific WorkPlace

Referent: Stephan Graf, ZAM

Termin: Montag, 29.11.1999, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [text.zam@fz-juelich.de](mailto:text.zam@fz-juelich.de), Tel. 6578

### Konzepte von OpenGL

Referent: Dr. Herwig Zilken, ZAM

Termin: Dienstag, 30.11.1999, 9.00 - 16.30 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an [H.Zilken@fz-juelich.de](mailto:H.Zilken@fz-juelich.de), Tel. 2482

### Normalmodenpropagation in Flüssigkeiten und Gläsern

Referent: Dr. Michael Buchner, Universität Bielefeld

Termin: Dienstag, 7.12.1999, 13.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

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