



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Nr. 96 • Juni 2001

Umstellung von Z-Mail auf Netscape Messenger

Wie bereits in „ZAM Aktuell“ Nr. 94 angekündigt, soll auf den Workstation-Gruppen das Mail-Angebot vereinheitlicht werden und nur noch über den Mail-Server imapsrv.fz-juelich.de erfolgen. Insbesondere die Nutzer des Mail-Programms Z-Mail müssen daher ein anderes Programm einsetzen, nämlich Netscape Messenger. Zur Erleichterung des Übergangs von Z-Mail zum Netscape Messenger wird das Skript `zmail2ldif` angeboten. Dieses Skript wandelt Adressen und Mail-Listen, die im Z-Mail über Aliases eingetragen sind, in das *ldif-Format* um, das man in das Netscape Address Book importieren kann.

Der Aufruf des Skripts `zmail2ldif` erfolgt ohne Parameter; die Vorgehensweise für den Import in Netscape wird dabei erläutert. Das Skript wird zusammen mit der Netscape-Distribution auf dem Software-Distribution-Server bereitgestellt und ist somit auf den zentral verwalteten Systemen verfügbar. Wir bitten alle Z-Mail-Nutzer, die Umstellung bis zum 30. Juni 2001 vorzunehmen.

Weitere Informationen zu Netscape und zu E-Mail findet man in den Technischen Kurzinformationen TKI-0334 und TKI-0343. (Ansprechpartnerin: Meike Wegmann, Tel. 6765)

Conference on Computational Physics (CCP)

Das wissenschaftliche Programm der in diesem Jahr vom John von Neumann-Institut für Computing ausgerichteten Konferenz, die vom 5. bis 8. September 2001 im Eurogress Aachen stattfinden wird, liegt jetzt vor. Es wird zur Zeit im Rahmen des 2nd Announcements verschickt und ist in elektronischer Form auf dem Konferenz-Web-Server vorhanden. Das Programm besteht aus Plenarvorträgen am Vormittag und vierzügigen Parallelsitzungen am Nachmittag. Insgesamt werden 15 namhafte Plenarsprecher und 48 weitere eingeladene Experten ihre neuesten Forschungsergebnisse im Bereich Computational Physics vorstellen. Darüber hinaus wurden im Rahmen eines Begutachtungsverfahrens

aus über 350 eingereichten Extended Abstracts 72 Vorträge ausgewählt; der überwiegende Teil der restlichen Beiträge konnte als Poster-Präsentation akzeptiert werden. Besonders erfreulich an der hohen Anzahl der eingereichten Beiträge ist die Tatsache, daß die Autoren aus 40 verschiedenen Ländern kommen, darunter ein hoher Anteil aus Ländern des früheren Ostblocks.

Interessenten können sich ab sofort mit Hilfe des auf dem Web-Server bereitgestellten Registrierungsformulars zur Konferenz anmelden und ggf. eine Unterkunft buchen. Weitere Einzelheiten finden sich auf dem Konferenz-Web-Server <http://www.fz-juelich.de/ccp2001>; Fragen richten Sie bitte an ccp2001@fz-juelich.de oder direkt an den Konferenzsekretär Dr. Norbert Attig (Tel. 4416).

Oracle für Linux

Auch für Linux-Rechner gibt es jetzt die Möglichkeit, die zentrale Oracle-Datenbank im ZAM zu benutzen. Diese Oracle-Client-Software für die Produktfamilie „Programmer“ und „Developer“ hat die Version 8.1.7 und ist sowohl mit der derzeitigen Version der Produktionsdatenbank (FZJA) als auch mit der für Herbst geplanten neuen Version kompatibel.

Auf den Linux-Systemen in den Workstation-Gruppen ist die Client-Software bereits vorhanden. Für stand-alone Linux-Systeme kann die Software vom Software-Distribution-Server des ZAM installiert werden. (Ansprechpartner: Walter Elmenhorst, Tel. 6762; Bernd von Studnitz, Tel. 6567)

Neue Version von Tcl/Tk

Eine neue Version von Tcl/Tk (Version 8.3.3) ist auf dem zentralen AIX, den AIX-Workstation-Gruppen und den Linux-Systemen in den Workstation-Gruppen verfügbar. Detaillierte Hinweise zum neuen Release sind über die URL <http://www.ActiveState.com/ASPN/Downloads/ActiveTcl> erhältlich. Neben Tcl/Tk wurden auch die damit gebundenen Pakete Expect (Version 5.32) und Oratcl (Version 3.2) aktualisiert.

Das Zusatzpaket tclx wird nicht mehr unterstützt, da diese Erweiterungen weitgehend in tcl enthalten sind. Die alten Programme tclx, oratcl und orawish sind bis zum 1.8.2001 weiterhin verfügbar. Wir bitten alle Benutzer, bis zu diesem Termin ihre Anwendungen auf tclsh oder wish bzw. expect oder expectk umzustellen.

Der Zugang zum Oracle-Datenbankserver wird über das Erweiterungspaket Oratcl ermöglicht. Das jetzt verwendete Interface Oratcl3.2 basiert auf der Oracle-Software 8i. Für den Zugang zur Oracle-Datenbank wird eine Interface Library db_call_lib zur Verfügung gestellt. Diese Funktionen können mit `source {/usr/local/TclCS/dbcall_lib.tcl}` im Script nachgeladen werden. Die Beschreibung der Datenbank-Prozeduren ist zu finden in `/usr/local/TclCS/dbcall_lib.txt`.

Diese neue Version ermöglicht erstmals einen Zugang zur Oracle-Datenbank über Tcl unter Linux. (Ansprechpartnerin: Beate Herrmann, Tel. 6146)

Import von Workstation-Filesystemen auf den Cray-Systemen

Auf den Cray-Systemen besteht seit langem die Möglichkeit, Filesysteme von Workstations zu importieren, ohne daß die numerischen UserIDs übereinstimmen. Durch das sogenannte „Uid Mapping“ wird erreicht, daß ein Workstation-Benutzer eindeutig einer Cray-UserID zugeordnet wird. Sollten Sie als Administrator/Benutzer von dieser Möglichkeit Gebrauch machen und Filesysteme auf die Cray-Rechner exportieren, dann beachten Sie bitte, daß jegliche Reorganisation der Filesysteme seitens der Workstation oder der Wegfall einer gesamten Workstation Auswirkungen auf die Zugreifbarkeit der importierten Daten hat. Änderungen dieser Abbildungen müssen auf den Cray-Rechnern nachvollzogen werden.

Bitte informieren Sie das ZAM (Cray-Systemadministration, Tel. 4380) rechtzeitig über geplante Änderungen, so daß für die Benutzer unnötige Einschränkungen vermieden werden. Bitte melden Sie auch nicht mehr genutzte Uid-Mapping-Kombinationen wieder ab, um unberechtigten Zugriff auf Ihre Daten zu verhindern. (Ansprechpartnerin: Jutta Docter, Tel. 6763)

AMBER 6

Das parallele Molekulardynamik-Programm SANDER (Simulated Annealing with NMR-Derived Energy Restraints) aus dem Softwarepaket AMBER 6 wurde auf CRAY T3E installiert. Es bietet viele Funktionen zur Simulation von gelösten Makromolekülen und reinen Flüssigkeiten. Das Programm, das von einer Wissenschaftlergruppe um Peter Kollmann, UCSF, entwickelt wurde, wird heute weltweit insbesondere in der Molekularbiologie eingesetzt. Unter anderem wurde damit die bisher aufwendigste Computersimu-

lation auf einer CRAY T3E durchgeführt, um die Proteinfaltung für ein realistisches Modellsystem über einen Zeitraum von 1 μ s zu simulieren. Die neue Version von SANDER beinhaltet neben anderen Erweiterungen eine Überarbeitung der Particle-Mesh-Ewald-Methode, die eine schnelle Variante der konventionellen Ewald-Summation darstellt, welche für die Behandlung der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkungen eingesetzt wird. (Ansprechpartner: Dietmar Koschmieder, Tel. 3439)

ZAM/NIC-Veranstaltungen

NIC-Projektberichte

- 9.00-9.45 Prof. Grassberger, NIC-Jülich: Bericht der Forschungsgruppe „Komplexe Systeme“
- 9.45-10.15 Prof. Schmid, Universität Bielefeld: Simulation von Grenzflächen in Flüssigkristallen
- 10.15-10.45 Dr. Meier, Universität Marburg: Einfluß von Ladungsträger-Korrelationen in optisch angeregten Halbleiter-Heterostrukturen
- 11.15-11.45 Dr. Marian, Universität Bonn: Modellierung der Struktur von nitridischen Keramiken: Vom molekularen Vorläufer zum amorphen Festkörper
- 11.45-12.30 Dr. Jansen, NIC DESY-Zeuthen: Bericht der Forschungsgruppe „Elementarteilchenphysik“
- 12.30-13.00 Dr. Janka, MPI für Astrophysik, Garching: Neutrino-Strahlungshydrodynamik – Explosionen von Sternen

Termin: Mittwoch, 13. Juni 2001, 9.00 - 13.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Maple 7 – new capabilities

Referent: Dr. Tom Lee, Waterloo Maple Inc., Kanada

Termin: Mittwoch, 13.6.2001, 14.00 - 16.00 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

VSR-Projektberichte

- 13.30-14.30 Dr. Olaf Nitzsche, ICG-IV: Modellierung des reaktiven Stofftransportes in Böden und Grundwasser mit parallelen Rechnern
- 14.30-15.30 Prof. Dr. Walter Zimmermann, Universität Saarbrücken: Viskoelastizität – Verhalten einzelner Polymere in einfachen Strömungen

Termin: Montag, 18.6.2001, 13.30 - 15.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Mehr Sicherheit für Windows-PCs im Internet

Referent: Dr. Jürgen Meißburger, ZAM

Termin: 27. - 28.6.2001, jeweils 14.00 - 16.30 Uhr

Ort: Hörsaal im ZAM

Daten auswerten mit SAS – Einführungskurs

Referenten: Paul Jansen, Monika Marx, ZAM

Termin: Mittwoch, 4.7.2001, 9.00 - 12.00 Uhr

Ort: Ausbildungsraum im ZAM

Anmeldung an statistik.zam@fz-juelich.de, Tel. 6430

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