".trash" aufgehoben werden. Standard ist bei uns 30 Minuten. Dieser Wert gilt auch über die FTP-Sitzung hinaus. Bei der ersten Benutzung sollte dieser Wert gesetzt werden.

- **quote chgrp** group_name filename - Ändert den Gruppennamen eines Files. Dazu muß man der Eigentümer des Files und Mitglied der neuen Gruppe oder Superuser sein.
- **quote ln** file1 file2 - Anlegen eines symbolischen Links innerhalb von UniTree+.
- **quote mstage** file[s]_mit_wild_cards - Dieses Kommando verbindet die Funktionalität des

native ftp-Subkommandos **mget** mit der UniTree-Erweiterung **stage** ohne den Operanden waittime (vgl. RZ-Mitteilungen Nr.6).

- **quote umask** maske - Setzen der Maske der Zugriffsrechte für neue Files in UniTree+.

FTP mit seinen Ergänzungen kann den Manuals **man ftp** für ftp allgemein und **man 1 ftp** für UniTree-Spezifika entnommen werden.

Weitere Neuerungen in UniTree+ betreffen die Reorganisation des VHS-Archives, die Möglichkeit, Files, die über einen längeren Zeitraum nicht angefaßt wurden, auf offline-Medien auszulagern, sowie eine günstigere Verwaltung des gesamten System.

Christoph Weickmann
weickmann@rz.hu-berlin.de

Höchstleistungsrechner am Konrad-Zuse-Zentrum für Informatik Berlin (ZIB)

Was ist das ZIB?

Das ZIB ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin. Es betreibt Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik. Zugleich betreibt das ZIB den Berliner Landeshöchstleistungsrechner. Dieser soll es gestatten, Probleme der aktuell höchsten Komplexitätsklasse in Angriff zu nehmen, für die die Rechnerkapazitäten der Rechenzentren der Universitäten nicht mehr ausreichen. Die Benutzer dieser Rechner kommen etwa zu jeweils einem Drittel aus den Bereichen Chemie, Physik und anderen naturwissenschaftlichen Fächern.

Dieser Artikel soll den Nutzern des Rechenzentrums der Humboldt-Universität, die Projekte mit großem Ressourcenbedarf planen, helfen, ihren Weg zum ZIB zu finden.

Über welche Rechner verfügt das ZIB ?

Die Recherausstattung des ZIB besteht im wesentlichen aus zwei Vektorrechnern der Firma Cray Research, Inc.:

- eine Cray X-MP mit 2 Prozessoren, 128 MByte Hauptspeicher, 8.5 ns interner Zykluszeit, theoretischer Gleitkommaleistung 235 MFLOPS je CPU, 8 GByte Plattenspeicher sowie einem 1 GByte großen Hintergrundspeicher (SSD) mit

einer Transferrate zum Hauptspeicher von 1 GByte/s.

- eine Cray Y-MP2E mit 2 Prozessoren, 512 MByte Hauptspeicher, 6 ns interner Zykluszeit, theoretischer Gleitkommaleistung 333 MFLOPS je CPU, 32 GByte Plattenspeicher; ein Archivspeichersystem STK 4400 ACS mit einer Gesamtkapazität von 4 TByte (Filesystem: /perm).

Als Vorrechner stehen eine 4-Prozessor Sun SPARC 4/670 und eine SGI Indigo² (Visualisierungsservice) zur Verfügung. Diese Vorrechner sollten für das Pre- und Post-Processing der Jobs (Editieren, Visualisierung, Datei-Operationen) benutzt werden. Auf den Archivspeicher kann sowohl von den Vorrechnern als auch von der Cray X-MP direkt (über NFS) zugegriffen werden.

Die Internet-Namen für diese Rechner sind:

- Sun SPARC: ufer.ZIB-Berlin.DE
- SGI Indigo²: aventurin.ZIB-Berlin.DE
- Cray Y-MP2E: cray.ZIB-Berlin.DE
- Cray X-MP: crax.ZIB-Berlin.DE

Welche Software findet man am ZIB?

Auf den Rechnern laufen die entsprechenden UNIX-Derivate: SunOS und IRIX auf den Vorrechnern bzw. UNICOS auf den Crays. Auf den Vektorrechnern ist, neben den üblichen UNIX-Programmen, folgende Software installiert (die mit einem * markierten Pro-

dukte sind z. Z. nur auf der Cray Y-MP2E verfügbar):

- Compiler: Fortran90*, Fortran77, ANSI C, C++*, LISP, Pascal
- Basisbibliotheken (Numerik): BLAS, EISPACK, LINPACK, LAPACK, NAG Fortran, NAG C*, IMSL, CERNLIB
- Tools: AIT*, PVM, RJETOOL
- Graphik/Visualisierung: CVT* (X11R5, Motif, XView, DGL, PEXlib), MPGS, NCAR Graphics, AVS*, NAG Graphics, BIZEPS (Fortran), GKS, NewGKS, XGKS
- Chemie:
 - Simulationsumgebung: UniChem* (MNDO93, CADPAC5.1, DGauss2.1, GAUSSIAN92)
 - *ab initio* Pakete: GAUSSIAN92, CADPAC*, MOLPRO92*, SPARTAN*, GAMESS-US, RPAC, GRADSCF
 - DFT-Pakete: DGauss*, DMol*
 - semi-empirische Pakete: MNDO93*, MOPAC, AMPAC
 - Kraftfeld-Pakete: CHARMM*, AMBER, GROMOS
- Computeralgebra: REDUCE
- Strukturmechanik: ADINA, ABAQUS

Was sollte beim Rechnen beachtet werden ?

Zur effizienten Nutzung von Vektorrechnern gehört der Einsatz von *vektorierten Programmen*. Verwendet man *selbstgeschriebene Programme*, dann sind dazu im allgemeinen Anpassungen erforderlich. Die meisten vom ZIB bereitgestellten Pakete sind speziell für die Cray-Architektur optimiert (z. B. in der Chemie: GAUSSIAN92, MOLPRO92, MNDO93, MOPAC).

Durch die Vektorisierung kann die Ausführungszeit eines Programms um einen Faktor 10-20 verkürzt werden. Falls sich ein Programm nicht oder nur in kleinen Teilen vektorisieren läßt, ist es nicht für den Ablauf auf einem Vektorrechner geeignet (wohl aber auf einer Workstation). Es ist deshalb wichtig, sich über das Problem der Vektorisierung Gedanken zu machen, bevor man in Erwägung zieht, auf einer Vektormaschine zu rechnen.

Was bedeutet Vektorisieren?

Ein Programm läßt sich vektorisieren, wenn es Operationen enthält, die unabhängig voneinander ausgeführt werden können und damit parallel ausgeführt werden könnten. Ein Vektorrechner ist aber dennoch kein Parallelrechner; die Operationen laufen nicht parallel sondern überlappend ab (Pipeline-Prinzip). Beispielsweise ist folgende Fortran-Schleife

```
do i = 1, 100    a(i) = b(i) + c(i) enddo
```

vektorisierbar, während

```
do i = 2, 100    a(i) = a(i - 1) + b(i) enddo
```

nicht vektorisierbar ist, weil die einzelnen Schleifendurchläufe nicht unabhängig voneinander sind.

Welche Dienstleistungen bietet das ZIB an ?

Beratung

Zur möglichst effektiven Ausnutzung der vorhandenen Ressourcen bietet das Rechenzentrum des ZIB einen (fachspezifischen) Beratungsservice an. Nutzer aus der Humboldt-Universität wenden sich bitte an:

- Herrn Dr. Steinke (mit Schwerpunkt Chemie) Tel.: 89604-144, E-mail: Steinke@ZIB-Berlin.DE
- Herrn Dr. Stüben (mit Schwerpunkt Physik) Tel.: 89604-214, E-mail: Stueben@ZIB-Berlin.DE

Video-Service

Zur Erstellung von Videos kann ein entsprechender Service des ZIB benutzt werden. Über die NQS-Schnittstelle und einer Filmbeschreibungssprache kann ein Nutzer des ZIB (computer-generierte) Bilder zu einem Film kombinieren und auf VHS-Kassette spielen lassen. Für Detailfragen sollte man sich vorher an Herrn Müller (Tel.: 89604-267, E-mail: Mueller@ZIB-Berlin.DE) wenden.

Wie kommt man an die ZIB-Rechner ?

Die Vektorrechnerkapazität des ZIB steht zu 70% Berliner Nutzern und Nutzern aus den neuen Bundesländern sowie zu jeweils 15% Nutzern aus Niedersachsen und Schleswig-Holstein zur Verfügung (zwischen den Bundesländern Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein besteht eine Vereinbarung über die wechselseitige Nutzung von Vektorrechnern).

Rechenerlaubnisse für die Vektorrechner erteilt das Rechenzentrum der HUB (Ansprechpartner: Herr Rybczak, Tel. 2093-2724, E-mail: rybczak@rz.huberlin.de). Projekte mit einem Rechenzeitbedarf von mehr als 100 CPU-Stunden müssen einen Antrag beim Zulassungsausschuß stellen (Ansprechpartner: über E-mail an zulassung@zib-berlin.de).

Wer mehr über das ZIB nachlesen möchte, kann über die ZIB-Informationendienste

- gopher: gopher ufer.zib-berlin.de
- World Wide Web (WWW):
<http://www.zib-berlin.de/>

weitere Detailinformationen erhalten.

Thomas Steinke
Hinnerk Stüben
Konrad-Zuse-Zentrum für
Informationstechnik Berlin (ZIB)