

Mailer-Umstellung

**Öffnungszeiten um
Ostern**

**G-WiN-Anschluss mit
622 Mbit/s**

**Virenplage und
Virenschutz**

Linux-Cluster-Ausbau

Virtuelle Webserver

Gaussian 03

GWDG Nachrichten

3 / 2004

Inhaltsverzeichnis

1.	GWDG-Nachrichten mit neuer Strukturierung	3
2.	Wichtige Umstellung beim Mailer der GWDG	3
3.	Öffnungszeiten des Rechenzentrums um Ostern 2004	4
4.	Kontingenzzuweisung für das zweite Quartal 2004	4
5.	Vervierfachung der Bandbreite des G-WiN-Anschlusses	4
6.	Sicherheits-Services gegen Viren und Würmer	5
7.	Der Linux-Cluster bei der GWDG wächst um 80 Prozent.	7
8.	Virtuelle Webserver bei der GWDG	9
9.	Gaussian 03 bei der GWDG	11
10.	Nachtrag zu den Fileserver-Ausfällen im Januar	12
11.	Kurse des Rechenzentrums	13
12.	Betriebsstatistik Februar 2004	20
13.	Autoren dieser Ausgabe	20

GWDG-Nachrichten für die Benutzer des Rechenzentrums

ISSN 0940-4686

27. Jahrgang, Ausgabe 3 / 2004

<http://www.gwdg.de/GWDG-Nachrichten>

Herausgeber: Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen
Am Faßberg, 37077 Göttingen-Nikolausberg

Redaktion: Dr. Th. Otto Tel.: 0551 201-1828, E-Mail: Thomas.Otto@gwdg.de
Herstellung: S. Greber Tel.: 0551 201-1518, E-Mail: Sigrun.Greber@gwdg.de

1. GWDG-Nachrichten mit neuer Strukturierung

Sicherlich fällt Ihnen auf, dass die vorliegende Ausgabe der GWDG-Nachrichten eine neue Strukturierung der Artikel aufweist. Bisher wurden die Artikel einzelnen Rubriken wie z. B. „Sicherheit“, „Kommunikation und Netze“ oder „UNIX-Cluster“ zugeordnet. Diese für die vergangenen Jahre sicherlich sinnvolle Gliederungsform bereitete aber in der letzten Zeit mit der wachsenden Themenvielfalt in der wissenschaftlichen Datenverarbeitung zunehmend Probleme: Zum einen konnten oftmals Artikel wegen ihres umfassenden und komplexen Inhalts nicht eindeutig einer Rubrik zugeordnet werden, und zum anderen führte die auch daraus resultierende Neubildung weiterer Rubriken als eine mögliche Ausweidlösung dazu, dass Rubriken zunehmend nur mit einem Artikel besetzt wurden - eine „unschöne“ und nicht adäquate Gliederung.

Daher haben wir uns entschlossen, uns ab dieser Ausgabe von diesen „Gliederungszwängen“ zu lösen und die Artikel in fortlaufender Nummerierung aufzulisten. Ganz ohne Gliederungsschema werden und wollen wir aber nicht auskommen: Aktuelle und für viele oder alle Benutzer wichtige Themen (z. B. zu aktuellen Sicherheitsproblemen und -fragen)

werden vor den anderen Themen behandelt, thematisch verwandte Artikel werden nach Möglichkeit auch aufeinander folgen und die bekannten monatlichen Rubriken „Kurse“, „Betriebsstatistik“ und „Autorenverzeichnis“ werden immer am Ende der Artikelfolge stehen.

Wir hoffen, dass Ihnen die Gewöhnung an die neue Inhaltsstrukturierung nicht allzu schwer fällt. Ein Inhaltsverzeichnis wird Ihnen auch weiterhin einen ersten Themenüberblick verschaffen und die Artikelauswahl erleichtern. Auch in Zukunft werden wir uns bemühen, Sie umfassend mit wichtigen und aktuellen, allgemeinen wie speziellen Themen bzw. Informationen aus der GWDG zu versorgen, damit die GWDG-Nachrichten weiterhin ihre Funktion als bedeutende Informationsquelle für zahlreiche Benutzer des Rechenzentrums erfüllen. Auch Sie, die Leserinnen und Leser der GWDG-Nachrichten, können dazu beitragen, indem Sie dem Redakteur, Herrn Dr. Thomas Otto (E-Mail: totto@gwdg.de, Tel.: 0551 201-1828) Ihre Themenwünsche oder andere Anregungen mitteilen.

Otto

2. Wichtige Umstellung beim Mailer der GWDG

Das Mail-Aufkommen auf dem GWDG-Mailer hat nicht zuletzt durch die immer größer werdende Masse unwillkommener Werbe-Mails (SPAM) inzwischen eine Dimension erreicht, die eine befriedigende Verarbeitungsgeschwindigkeit mit nur einem leistungsfähigen System nicht mehr sicherstellt. Zugunsten einer besseren Lastverteilung werden die beiden Mailer-Funktionen „Postausgangs-Server“ und „Posteingangs-Server“ **ab dem 22. März** hardware-mäßig entkoppelt. Der Posteingangs-Server, der die eintreffenden Mails sammelt und dem Nutzer anbietet, wird ab diesem Zeitpunkt physikalisch auf einem anderen System abgebildet werden als der Postausgangs-Server, der zum Versand der Nachrichten dient. Damit diese Umstellung auch für die Nutzerschaft reibungslos vor sich gehen kann, sollte jeder Anwender unbedingt noch einmal überprüfen, dass in seinem Mailprogramm die entsprechend richtigen Adressen eingetragen sind:

Posteingangs-Server (POP3, IMAP):
mailbox.gwdg.de

Postausgangs-Server (SMTP):
mailer.gwdg.de

Wir hatten ja in der Vergangenheit schon mehrfach auf diese erforderliche Unterscheidung hingewiesen und um entsprechende Berücksichtigung bei der Konfiguration der jeweiligen Mail-Programme hinsichtlich des GWDG-Mailers gebeten.

Die vor längerer Zeit noch aus historischen Gründen gebräuchlichen Alias-Namen **popper.gwdg.de** und **imap.gwdg.de** werden in Zukunft nicht mehr unterstützt und sollten somit auch nicht mehr verwendet werden.

Falls bei der Konfiguration der einzelnen Mail-Programme Unklarheiten auftreten sollten, bieten die Anleitungen auf

<http://www.gwdg.de/service/netze/mailer/mail-client.html>

eine erste Hilfe. Darüber hinaus stehen natürlich auch die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter der GWDG jederzeit mit Rat und Tat zur Seite.

Reimann

3. Öffnungszeiten des Rechenzentrums um Ostern 2004

Das Rechenzentrum der GWDG ist sowohl an den beiden Osterfeiertagen, 11. und 12.04.2004, als auch am Karfreitag, dem 09.04.2004, geschlossen.

Am 10.04., Ostersonntag, ist das Rechenzentrum von 10.00 bis 18.00 Uhr geöffnet, jedoch ist während dieser Zeit nur unbedienter Betrieb möglich. Die Aufsicht wird durch Wachpersonal geführt.

Am 13.04., Dienstag nach Ostern, ist das Rechenzentrum ab 7.10 Uhr wieder wie üblich geöffnet.

Zu den Zeiten, in denen das Rechenzentrum im unbedienten Betrieb arbeitet oder geschlossen bleibt, werden die Rechenanlagen ohne Operateure betrieben. Wir bitten die Benutzer deshalb, sich darauf einzustellen. Die Betriebsbereitschaft der Rechenanlagen und Netze wird durch freiwillige Mitarbeiter gewährleistet.

Grieger

4. Kontingenzuweisung für das zweite Quartal 2004

Die nächste Zuweisung von Institutskontingenten für die Inanspruchnahme von Leistungen der GWDG erfolgt am Donnerstag, dem 1. April 2004. Die Höhe der Kontingente wird den Instituten per Brief oder per E-Mail mitgeteilt. Die Bemessung der Institutskontingente erfolgte nach den vorläufigen Richtlinien des Beirats der GWDG und den Ergänzungen der Beiratskommission für die Verteilung von Rechenleistung entsprechend dem Verbrauch im Zeitraum vom 01.09.2003 bis 29.02.2004. Nicht verbrauchte Kontingente werden zu 50 % in das nächste Quartal übertragen. Negative Verbrauchswerte werden zu 100 % mit dem neuen Institutskontingent verrechnet.

Jeder Benutzer kann den aktuellen Stand des Institutskontingents durch die Eingabe des Kommandos

```
kontingent
```

auf einer Workstation des UNIX-Clusters oder im WWW unter dem URL

```
http://www.gwdg.de/service/nutzung/  
kontingentierung
```

abfragen. Dort besteht auch die Möglichkeit, Informationen über den Stand des separaten Druckkontingents abzurufen.

Falls in Ausnahmefällen das Institutskontingent nicht ausreichen sollte, können schriftlich begründete Anträge an die Beiratskommission für die Verteilung von Rechenleistung gestellt werden. Solche Anträge sollen bis zum 24.5.2004 im Rechenzentrum eingereicht werden; Vordrucke und Hinweise dazu sind sowohl bei der Information als auch im WWW unter dem URL

```
http://www.gwdg.de/service/nutzung/  
antragsformulare
```

erhältlich. Da aber die Bearbeitung der Anträge mittlerweile **vollständig elektronisch** erfolgt, ist die Übersendung der Anträge mit Begründung per E-Mail an die Adressen wgrieger@gwdg.de oder gwdg@gwdg.de **erwünscht**.

Grieger

5. Vervierfachung der Bandbreite des G-WiN-Anschlusses

Der Anschluss der Universität Göttingen und der Göttinger Max-Planck-Institute sowie anderer am GÖNET angeschlossener Einrichtungen an das Wissenschaftsnetz G-WiN und darüber über den Dienst DFNInternet an das Internet erfolgt über den G-WiN-Anschluss der GWDG. Der Anschluss stellte bisher eine Übertragungsbandbreite von 155 Mbit/s bei einem monatlichen Übertragungsvolumen von 24 TByte zur Verfügung.

Der DFN-Verein passt die Leistungen - insbesondere das erlaubte Übertragungsvolumen - der Anschlüsse i. d. R. kostenneutral jährlich an. Am

17.02.2004 wurden vom DFN-Verein die erlaubten Übertragungsvolumina der G-WiN-Anschlüsse rückwirkend zum 01.01.2004 um 50 % erhöht.

Die diesjährige Anpassung hat für den Anschluss der GWDG nun zu einem zulässigen Volumen geführt, dass über die nominelle Leistung unseres 155-Mbit/s-Anschlusses hinausgeht. Daher ändert sich die Spezifikation des GWDG-Anschlusses nun auch bezüglich der Übertragungsrates. Für das GÖNET steht jetzt ein Anschluss mit 622 Mbit/s Bandbreite und 36 TByte/Monat Übertragungsvolumen zur Verfügung.

Um dies umzusetzen, hat der DFN-Verein uns auf deren Router (ar-goettingen1.g-win.dfn.de) einen Gigabit-Ethernet-Anschluss (statt bisher einem OC3-Anschluss) zur Verfügung gestellt. Da auch auf dem GÖNET-Router der GWDG (gr-gwdg1.gwdg.de) kurzfristig ein entsprechender Port verfügbar war, konnte die Umstellung des G-WiN-Anschlusses bereits am 04.03.2004 erfolgen.

Für diejenigen, die gelegentlich den Weg ins Internet mit traceroute o. ä. prüfen, sei angemerkt: Mit der Umstellung entfällt ein Router-Hop auf dem Weg ins Internet. Die Anbindung erfolgt direkt an den GÖNET-Router und nicht mehr über einen eigenen G-WiN-Router. Letzterer war bisher wegen der vom DFN-Verein vorgegebenen OC3-Schnittstelle mit Packet-over-Sonet-Protokoll nötig. Bei

einer Gigabit-Ethernet-Schnittstelle entfällt eine solche Notwendigkeit. Durch die Bereitschaft des DFN-Vereins, die Anbindung über Gigabit-Ethernet zu schalten (statt über Packet-Over-Sonet), konnte die Umstellung kurzfristig und ohne größere Investitionskosten erfolgen.

Die Anpassung durch den DFN-Verein erledigt damit auch die Diskussionen, ob ein Anschluss in einer leistungsfähigeren (und teureren) Klasse benötigt wird. Immerhin gab es im vergangenen Jahr gelegentliche Überlastungen am G-WiN-Anschluss, die bei sensiblen Anwendungen (z. B. Videoübertragungen) schon zu Störungen geführt hatten. Diese Probleme sollten jetzt der Vergangenheit angehören - zumindest für ein bis zwei Jahre.

Beck

6. Sicherheits-Services gegen Viren und Würmer

6.1 Aktueller Stand der Viren- und Würmerplage

Laut Statistik des beliebten Suchportals **google.de** rangiert in der Liste der am häufigsten gestellten Anfragen des Jahres 2003 das Wort „antivir“ immerhin auf Platz 8, sogar noch vor Entertainern wie Robbie Williams.

Bei „antivir“ handelt es sich um einen Virensch scanner der Firma H+BEDV, der sich allein schon deshalb größter Beliebtheit erfreut, weil er in der „Personal Edition“ für den privaten Einsatz kostenfrei zu beziehen ist. Generell zeigt das aber, dass das Thema „Viren und Würmer“ für die Anwenderschaft zu einem lästigen Dauerbrenner wird, nicht zuletzt seit die Plagegeister auch verstärkt die Aufmerksamkeit der Medien erlangt haben.

Doch welche Würmer quälen den Internet-Nutzer nun derzeit? Ein Blick auf die aktuelle Statistik der Firma Sophos für den Monat Januar offenbart denn auch gleich die lästigsten Vertreter dieser Gattung:

Rang	Virus	Prozentualer Anteil
1	W32/MyDoom-A	25,1 %
2	W32/Bagle-A	16,3 %
3	W32/Sober-C	9,9 %
4	W32/Dumaru-A	5,3 %
5	W32/Mimail-Varianten	11,6 %

Quelle: <http://www.sophos.de/virusinfo/topten/>

Der Spitzenreiter in dieser Aufstellung, der Wurm **MyDoom**, verbreitete sich Ende Januar bis in den Februar hinein extrem rasant. Dabei verschickte er sich von den infizierten Rechnern selbsttätig über einen Anhang per E-Mail an Adressen, die er auf dem lokalen Rechner vorfand, und verteilte sich zudem unter den verschiedensten Dateinamen auch über die Tauschbörsen. Auf den befallenen Rechnern öffnete der Wurm eine Hintertür, um so Angreifern Zugang zu diesen zu verschaffen. In dem Zeitraum vom 1. bis 12. Februar startete er darüber hinaus eine DoS(Denial of Service)-Attacke gegen die Server der Firma SCO, vermutlich aus Gründen, die mit den momentanen Rechtsstreitigkeiten zusammenhängen.

Dass nun die Nutzerschaft der GWDG weitestgehend von MyDoom verschont blieb, hat nicht zuletzt daran gelegen, dass der Mailer der GWDG sehr schnell die dafür erforderlichen Signaturen vorhielt. Der Verbreitungsweg über ankommende E-Mails blieb somit versperrt, da die Annahme virenverseuchter E-Mails generell verweigert wird (s. dazu auch die GWDG-Nachrichten 7/2003). Dass aber dennoch Infektionen vorkamen, könnte daran liegen, dass manche Nutzer-E-Mails über andere Provider – z. B. Freemail-Angebote – beziehen. Da hier bisweilen nicht der Virenschutz gewährleistet ist, wie ihn die GWDG anbietet, sollte man mit ankommender E-Mail aus diesen Quellen immer besonders vorsichtig umgehen.

Ein nicht minder großer Verdruss ergibt sich daraus, dass ärgerlicherweise moderne Würmer wie MyDoom zunehmend die Absenderadressen fälschen und somit für erhebliche Mail-Last sorgen, weil den eigentlich „unbescholtenen“ Nutzern zahl-

lose Nachrichten zukommen mit dem Inhalt, sie hätten infizierte Mails verschickt. Bei einem hinreichend geringen Speicherlimit des Mail-Kontos besteht dann auch noch die Gefahr des Überlaufens: Es werden keine weiteren E-Mails mehr angenommen, und womöglich wichtige Nachrichten erreichen plötzlich nicht mehr den Empfänger.

Hier können die Nutzer der GWDG aber entsprechend vorbeugen. Um zu ermitteln, wie viel von den standardmäßig zugeteilten 80 MByte auf dem eige-

nen Mail-Konto noch zur Verfügung stehen, sollte die folgende Webseite aufgerufen werden:

<https://mailer.gwdg.de>

Dort kann unter der Rubrik „Informationen zur Userid“ nach Eingabe von Benutzerkennung und Passwort der zur Verfügung stehende Speicherplatz (Quotas) in Erfahrung gebracht werden. Eine typische Ausgabe könnte in etwa folgendermaßen aussehen:

Quotas	
Kilobytes Used:	79228 Maximum(Hardlimit): 90000 Limit: 80000
Files Used:	22 Maximum: 0 Limit: 0

In diesem Fall wären bereits 79 MByte von den verfügbaren 80 MByte verbraucht. Abhilfe schafft hier dann nur noch Aufräumen des Eingangsordners oder in Ausnahmefällen die Beantragung der Erhöhung des Kontingents.

Da Würmer mittlerweile auch auf Sicherheitslöchern zielen können, wie im letzten Sommer der **W32/Blaster** auf die RPC-Schwachstelle oder der aktuelle **W32/Bizex-A** auf einen Fehler im Internet Explorer, sollten neben dem Einsatz eines aktuellen Virenschanners auch unbedingt das Windows-Betriebssystem auf dem aktuellen Stand gehalten werden. Um hier dem Anwender einen größtmöglichen Komfort zu gewährleisten, bietet die GWDG entsprechende Services an, die hier noch einmal in Erinnerung gebracht werden sollen.

6.2 Automatischer Update über den SUS-Server der GWDG

Damit sich nicht jeder Anwender selber um die aktuell verfügbaren Korrekturen für sein Betriebssystem und die Internet-Zugangsprogramme wie Internet Explorer und Outlook Express kümmern muss, bietet die GWDG schon seit fast einem Jahr den Software-Update-Service (SUS) an (s. dazu auch die GWDG-Nachrichten 5/2003). Dieser Dienst steht für die Windows-Versionen 2000, XP und 2003 zur Verfügung. Eine Anleitung zur Konfiguration des eigenen Systems findet sich unter

<http://sus.gwdg.de>

Für den Fall, dass man gerne wissen möchte, welche aktuellen Sicherheitsprobleme es gibt und was man zu deren Behebung tun müsste, finden sich auf der folgenden Seite die wichtigsten Informationen:

<http://www.gwdg.de/service/sicherheit/aktuell/index.html>

Und um schließlich eine genauere Aufstellung der derzeit erforderlichen Korrekturen für die jeweiligen Betriebssysteme oder Office-Produkte zu erhalten,

braucht man nur die nachfolgenden Seiten zu konsultieren:

<http://www.gwdg.de/service/sicherheit/aktuell/sec-inst.html>

6.3 Automatischer Update-Service für den Virenschanner von Sophos

Da der Einsatz eines möglichst aktuellen Virenschanners angesichts der Wurmplage dringend empfehlenswert ist, sollten die Installation und die regelmäßige Aktualisierung möglichst ohne weiteres Zutun des Nutzers geschehen. Aufgrund einer Lizenzvereinbarung sind die Mitarbeiter und Studierenden der niedersächsischen Hochschulen wie auch die Mitarbeiter der Institute der Max-Planck-Gesellschaft berechtigt, die Antiviren-Software der Firma Sophos zu nutzen. Über den automatischen Update-Service der GWDG kann der Virenschanner recht einfach installiert und aktualisiert werden, vorausgesetzt, es besteht eine hinreichend schnelle Internet-Anbindung. Eine genauere Anleitung hierfür findet sich auf folgendem Server:

<http://antivir.gwdg.de>

Natürlich sollte auch ein stets aktualisierter Virenschanner den Anwender nicht in allzu großer Sicherheit wiegen. Zum einen ist die Verbreitungsgeschwindigkeit von modernen Würmern bisweilen so hoch, dass die Hersteller von Antiviren-Software mit der Aktualisierung und Verteilung der angepassten Signaturen bisweilen nicht mehr hinterher kommen. Die in diesem Fall dann zuschlagende heuristische Erkennungsmimik, also das Erkennen eines Virus anhand typischer Merkmale wie z. B. verdächtigen Code, kann einfach nicht diese Treffsicherheit bieten. Andererseits sind auch die Virenschanner generell nicht unfehlbar, wie Vergleichstests immer wieder demonstrieren. Der Anwender ist also gut beraten, bei seinen „Streifzügen“ im Internet und beim Sichten der eintreffenden Nachrichten stets größte Vorsicht walten zu lassen.

Reimann

7. Der Linux-Cluster bei der GWDG wächst um 80 Prozent

7.1 Neue Hardware

Durch eine Beschaffung der Forschungsgruppe von Herrn Prof. Dr. Manfred Schüssler vom Max-Planck-Institut für Aeronomie konnte der Linux-Cluster bei der GWDG Mitte Januar um 45 Knoten erweitert werden. Diese Beschaffung erfolgte im Rahmen einer vereinbarten engen Kooperation und ermöglicht hiermit einen Kapazitätsausbau um 80 %, der beiden Seiten durch die Integration der neuen Knoten in den bestehenden Cluster Vorteile bringt - davon später mehr.

Insgesamt stehen jetzt 99 Dual-Pentium4-Knoten (3,06 GHz Taktrate) für rechenintensive, parallele Anwendungen zur Verfügung. Nimmt man eine ideale Skalierung von 54 auf 99 Knoten an (frühere Benchmarks zeigen, dass dies durchaus realistisch ist), dann ist die gesamte Rechenleistung des Clusters jetzt 745 GigaFlop/s im Linpack-Benchmark – das wäre Platz 183 in der aktuellen Liste der 500 schnellsten Rechner der Welt (www.top500.org).

Die größte Hürde bei der Installation der neuen Knoten war sicherlich ihre Integration in das bestehende Scali/Dolphin-Hochgeschwindigkeitsnetzwerk. Die ehemalige Konfiguration als zweidimensionaler Torus mit 6x9 Knoten finden Sie in den GWDG-

Nachrichten vom Oktober 2003. An dieser Stelle macht es Sinn, sich noch einmal das Prinzip dieser Vernetzung klarzumachen: Das Netz besteht aus unabhängigen Ringen, auf denen Daten unidirektional transportiert werden. Da solche Ringe nicht besonders gut skalieren (die maximale Länge beträgt 12 Knoten) und zudem der Ausfall eines Knotens den gesamten Ring unbrauchbar macht, wird für größere Installationen ein Trick verwendet: Jeder Knoten ist Teil von zwei unabhängigen, orthogonalen Ringen, deren Gesamtheit ein Gitternetz in Form des erwähnten Torus (eines „Schwimmreifens“) bildet. Fällt ein Knoten aus, werden zwar beide Ringe, auf denen er sich befindet, unbrauchbar, aber das von Scali entwickelte Routing erreicht über Umwege immer noch jeden Knoten im Gitter, der wenigstens an einem funktionierenden Ring angeschlossen ist. Bei der Erweiterung des Linux-Clusters wurden nun die bestehenden 9-Knoten-Ringe erhalten. Die 6-Knoten-Ringe wurden dagegen aufgetrennt und um je fünf Knoten erweitert. Außerdem bilden die neuen Knoten fünf neue 9-Knoten-Ringe, so dass sich nun insgesamt eine 11x9-Topologie ergibt.

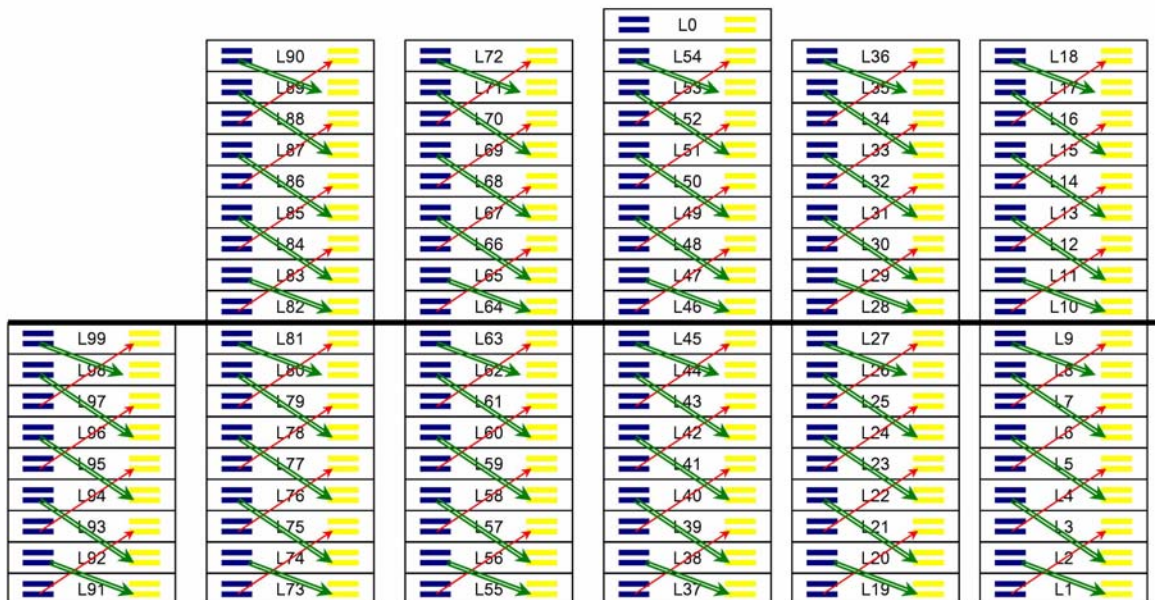


Abb. 1: Die Verkabelung der 9-Knoten-Ringe

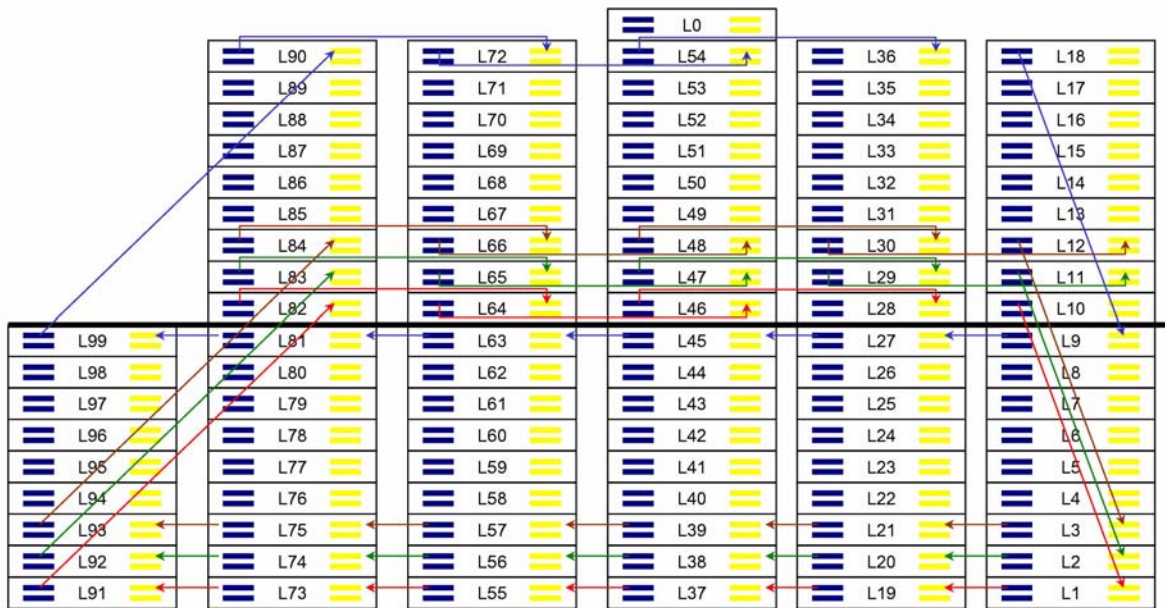


Abb. 2: Die Verkabelung der 11-Knoten-Ringe. (Der Übersicht halber ist nur ein Teil der Verkabelung dargestellt.)

Die physikalische Verkabelung sieht etwas anders aus, als die Vorstellung von Ringen zunächst nahelegt. Der Grund ist, dass die Leistung des Dolphin-Netzwerkes mit wachsender Kabellänge rapide abnimmt. Daher kommt das Führen eines Kabels von einem Ende des Clusters zum anderen Ende nicht in Frage. Statt dessen wählt man eine so genannte „interleaved“-Verkabelung, die in den Abbildungen 1 und 2 dargestellt ist, und die die Kabellängen möglichst klein hält. Der Vorgang des Verkabelns ist relativ aufwändig und erfordert Geduld und Präzision. Diese Arbeiten wurden, wie bei der Erstinstallation, von der Firma Scali durchgeführt.

7.2 Bewährte Software

Für die Benutzer des Linux-Clusters ändert sich, bis auf die deutlich erhöhte, zur Verfügung stehende Kapazität des Clusters, nichts. Die in den GWDG-Nachrichten 10/2003 beschriebene Ressourcenverwaltung mittels LSF bleibt aus ihrer Sicht unverändert. Unter der Oberfläche wurden allerdings einige Änderungen vorgenommen, mit dem Ziel, der Forschungsgruppe Schüssler die ihrer Investition entsprechende Rechenleistung zu garantieren, ohne deshalb den Cluster aufteilen zu müssen. Dazu wird der in LSF integrierte „fairshare scheduler“ verwendet. Beim „fairshare scheduling“ werden dynamische Prioritäten an die Ressourcenanforderungen („batchjobs“) der Benutzer vergeben und die Anforderungen dann gemäß diesen Prioritäten erfüllt. Die

dynamischen Prioritäten werden ständig neu berechnet, und zwar aus dem Quotienten des festen Anteils, den jeder berechnete Benutzer an der zur Verfügung stehenden Kapazität hat (seines „shares“), und seiner gegenwärtig verwendeten und in letzter Zeit verbrauchten Ressourcen. Dieser Mechanismus wurde bislang bereits verwendet, um die gerechte Verteilung der Cluster-Ressourcen auf die einzelnen Benutzer zu gewährleisten, wobei alle Benutzer einen gleich großen Anteil haben. Vor diese Prioritätenschicht wird jetzt noch eine weitere gesetzt, die dynamisch Prioritäten für zwei Gruppen von Benutzern ermittelt, nämlich zum einen die Mitglieder der Forschungsgruppe Schüssler, zum anderen die aller Benutzer. Dabei erhält die Forschungsgruppe Schüssler einen Anteil, der ihrer Investition in den Cluster entspricht, und daher, so lange sie diesen Anteil nicht verbraucht, eine höhere Priorität. Innerhalb der beiden Gruppen greift wie bisher das „fairsharing“ auf Benutzerebene. Man spricht von hierarchischem „fairsharing“.

Vorteile ergeben sich so für beide Seiten: Die Forschungsgruppe Schüssler kann auch die nicht von ihr finanzierten Knoten verwenden und dort den ihr zustehenden Anteil an den Ressourcen verbrauchen, ohne dazu mit zwei verschiedenen Queues planen zu müssen. Die anderen Benutzer des Clusters profitieren, da ihnen die von der Forschungsgruppe Schüssler zeitweilig nicht genutzten Ressourcen automatisch zur Verfügung stehen.

7.3 Unveränderte Auslastung

Linux-Cluster Auslastung

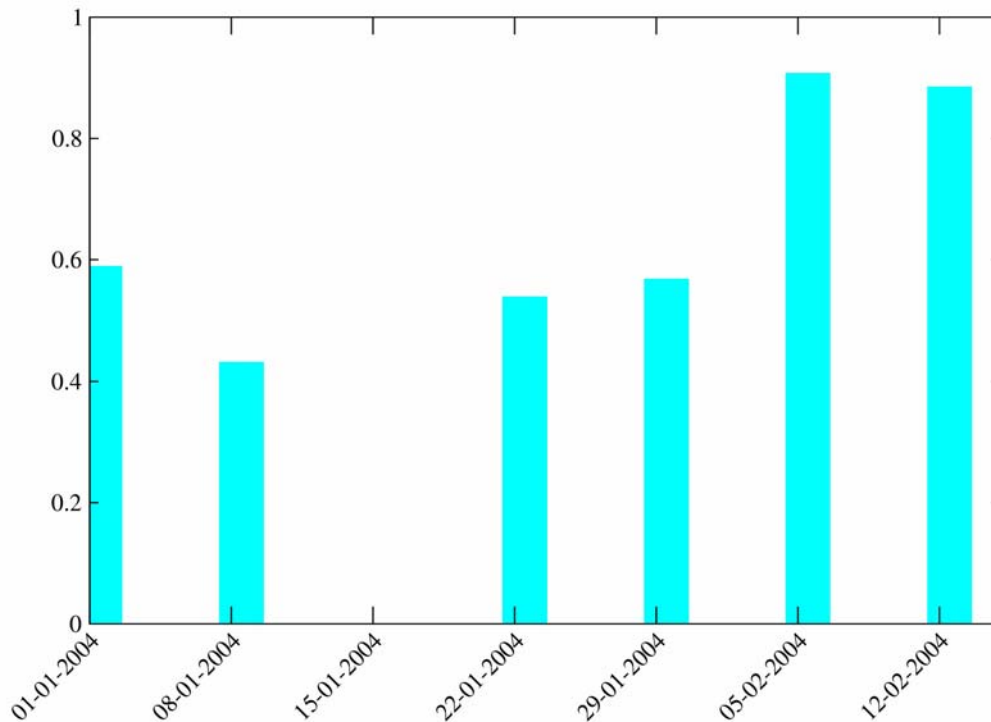


Abb. 3: Nutzungsstatistik des Linux-Clusters Anfang 2004

Die Auslastung des Linux-Clusters hat sich mit seiner Erweiterung nicht verändert. Abbildung 3 zeigt, dass sie schon bald nach der Erweiterung (vom 14. bis 23. Januar) und der Behebung anfänglicher Instabilitäten wieder ungefähr 90 % betrug. Eine höhere Auslastung ist kaum möglich, da für parallele Jobs immer wieder Knoten reserviert werden müssen. Zwar können kurze Jobs die reservierten Knoten dank des „backfilling“-Mechanismus dennoch nutzen, Leerstände lassen sich aber nicht

immer vermeiden. Die hohe Auslastung zeigt zum einen, dass der Bedarf an Rechenleistung auch nach der Erweiterung nicht gedeckt ist, zum anderen aber auch, dass die relativ günstigen Linux-Cluster mit Hochgeschwindigkeitsnetzwerk eine für die Benutzer wertvolle Ergänzung des klassischen Angebots an Rechenkapazität bei der GWDG darstellen. Dies wird auch bei weiteren Beschaffungen zu berücksichtigen sein.

Boehme

8. Virtuelle Webserver bei der GWDG

Die Institute und Einrichtungen der Max-Planck-Gesellschaft und der Universität Göttingen können ihre Webserver von der GWDG betreiben lassen. Über das Konzept des virtuellen Webbrowsers ist es möglich, dass die einzelnen Server unter dem Namen des jeweiligen Instituts laufen, obwohl sie auf zentralen Servern in der GWDG angesiedelt sind. Die Vorteile dieses gemeinsamen Betriebs von Webservern sind

- der schnelle Internet-Anschluss,
- verbesserte Sicherheit der Rechner und

- Datensicherheit durch regelmäßigen Backup.

Die Rechner der GWDG sind mit einem 622-Mbit/s-Zugang an das G-WiN angeschlossen. Natürlich profitieren auch die Webserver von dieser schnellen Anbindung – die Informationssuchenden bekommen ihre Seiten zügiger.

Die Rechner gegen Einbrüche, Datenvernichtung oder Verfälschung von Informationen sicher zu machen, kostet einiges an Arbeit. Wenn viele Webserver auf einem Rechner realisiert sind, braucht

diese Arbeit nur einmal gemacht zu werden und belastet die Institute nicht.

Die Daten, die die Server präsentieren, werden täglich durch ein Backup gesichert.

8.1 Reale und virtuelle Server

Für die Realisierung der virtuellen Server stehen derzeit drei Maschinen bereit, von denen zwei besonders leistungsfähig sind:

1. eine unter Solaris betriebene **SUN Enterprise 450**, an die im Storage Area Network gelegener Plattenspeicher im Umfang von 580 GByte angeschlossen ist
2. eine unter Linux laufende **Dell PowerEdge 2650**
3. eine unter Linux laufende **Dell PowerEdge 1655 MC**

Auf allen Rechnern ist das Datenbanksystem MySQL installiert, und als Skriptsprachen, mit denen u. a. die Anbindung der Datenbank an die Server realisiert wird, stehen PHP, Perl und Python zur Verfügung. Auf einigen Rechnern sind virtuelle Server auch an PostgreSQL-, Kleio- oder AllegroC-Datenbanken angebunden.

Neue Kunden werden i. d. R. nur noch auf den Rechner Nr. 2 gebracht, da die SUN in ihrer Kapazität bereits ausgelastet ist. Der Rechner Nr. 3 ist mit Software ausgestattet, die in der GWDG noch nicht ausgiebig erprobt ist, u. a. mit einem Tomcat-Server, der die Verwendung von Java-Servlets und -Serverpages erlaubt. Zur Zeit bedienen die drei Rechner zusammen 195 virtuelle Webserver, zu denen noch einige hinzukommen, die gerade aufgebaut werden oder Testzwecken dienen. Der am meisten frequentierte aus dieser Zahl ist der zentrale Webserver der Max-Planck-Gesellschaft (<http://www.mpg.de>), von dem z. B. im Januar diesen Jahres 690.135 Seiten erfolgreich abgerufen wurden.

Die Administratoren der virtuellen Webserver haben natürlich auch Zugriff auf die server-eigenen Protokoll-Dateien, über die sie ermitteln können, welche Fehler sie in ihrem HTML- oder Skript-Code gemacht haben, und von wo wie oft auf welche Seiten zugegriffen wurde. Außerdem werden auf allen Rechnern HTML-Seiten mit Monatsstatistiken der einzelnen virtuellen Server erzeugt.

Die virtuellen Server werden durch – pro Rechner – je einen Apache-Webserver realisiert, der so konfiguriert ist, dass entsprechende in einem Nameserver eingetragene Adressen auf bestimmte Verzeichnisse abgebildet werden: so genannte namensbasierte virtuelle Server. Für den Anbieter bedeutet dieses Konzept, dass er nur eine entsprechende

Adresse (URL), Platz auf dem Server und einen Zugang dorthin benötigt.

8.2 Einrichtung eines virtuellen Webservers

Grundlage für die Einrichtung eines neuen virtuellen Webservers ist zunächst die Festlegung der Adresse (URL). Als Ansprechpartner steht Ihnen Herr Günter Koch (E-Mail: gkoch@gwdg.de, Tel.: 0551 201-1550) bzw. als sein Vertreter Herr Michael Reimann (E-Mail: mreiman1@gwdg.de, Tel.: 0551 201-1826) zur Verfügung. Die Top-Level-Domain und die Domain sind dabei auf jeden Fall vorgegeben: also entweder „**uni-goettingen.de**“ oder „**mpg.de**“, je nachdem in welchem Bereich das Angebot angesiedelt werden soll. Die Adressen würden also dann in etwa so lauten:

`http://www.name.uni-goettingen.de`

bzw.

`http://www.name.mpg.de`

wobei der Text für *name* innerhalb gewisser Grenzen gewählt werden kann.

Nach Festlegung der Adresse kann dann der virtuelle Webserver eingerichtet werden. Der Antragssteller sollte bereits über eine gültige GWDG-Benutzerkennung verfügen. Falls eine solche noch beantragt werden muss, findet sich der entsprechende Antrag im WWW unter dem URL

`http://www.gwdg.de/service/nutzung/
antragsformulare/
benutzerkennung_form.pdf`

Die Benutzerkennung wird dann von den Administratoren auf den Webserver übertragen. Die zugehörigen Kennwörter werden zwar zu Beginn vom UNIX-Cluster übernommen, aber nicht automatisch mit ihm gleichgezogen. Weiterhin bekommt er ein Verzeichnis zugewiesen, wohin er seine Daten kopieren kann. Hierzu wird der Einsatz sicherer Übertragungsprotokolle wie **SSH (Secure SHell)**, **SCP (Secure CoPy)** und **SFTP (Secure FTP)** dringend empfohlen. Falls entsprechende Programme nicht auf dem jeweiligen Rechner verfügbar sein sollten, lassen sich problemlos kostenfreie Varianten herunterladen und installieren:

- **MS Windows:**

entweder das frei verfügbare **WINSCP2**:

`http://www.gwdg.de/samba/windows/
winscp2.exe`

oder das etwas komfortablere **SSHWin**:

`http://www.gwdg.de/service/sicherheit/
ssh/sshwin.html`

- **UNIX/Linux:**

Jedes moderne UNIX/Linux-System unterstützt bereits von Hause aus das sichere **SFTP**-Protokoll.

Die Texte, Grafiken und Skripte für den Webserver werden i. d. R. auf dem Rechner mit dem Namen `vweb1.gwdg.de` liegen. Mit ihm muss man sich verbinden, wenn man sie dorthin transportieren will. Die Verzeichnisstruktur auf dem Server sieht in etwa so aus, dass unterhalb von `/www` die MPG-Server und unterhalb von `/www-uni` die Server aus dem Universitäts-Umfeld beheimatet sind. CGI-Skripte, die ein eigenes Verzeichnis erfordern, und eigene Datenbanken müssen vom Administrator gesondert eingerichtet werden, ebenso wie die Berechtigung, spezielle Zugriffsrechte für die Webseiten vorzunehmen. Nähere Informationen hierzu sind im WWW unter dem URL

```
http://www.gwdg.de/service/netze/  
www-server/htaccess-gwdg.html
```

zu finden.

Die GWDG übernimmt übrigens für die WWW-Server nur die Funktion eines „Web-Hosters“, stellt also den möglichst reibungslosen Betrieb sicher, und wird somit größere Projekte lediglich in der Planungsphase beratend begleiten können. Die im

Rahmen der Realisierung dann bisweilen anfallenden umfangreicheren Unterstützungsleistungen beim Aufbau der für größere Web-Auftritte oftmals erforderlichen Datenbanken und Programmierarbeiten müssen aber von den Anwendern jeweils selbst geleistet werden. Auch rechtlich sind natürlich die Anwender bzw. die Direktoren ihrer Institute für die Inhalte Ihrer Webserver und für die Einhaltung des Teledienstgesetzes (TDG) verantwortlich. Gute Informationsmaterialien zum letzten Punkt Internet/Telekommunikation findet man u. a. auf den Seiten des Hamburgischen Datenschutzbeauftragten:

```
http://fhh.hamburg.de/stadt/Aktuell/  
weitere-einrichtungen/  
datenschutzbeauftragter/  
informationmaterial/  
internet-telekommunikation/  
orientierungshilfe-tele-und-  
mediendienste.html
```

Koch, Reimann

9. Gaussian 03 bei der GWDG

9.1 Neues in Gaussian 03

Das Quantenchemie-Programmpaket Gaussian ist jetzt in der Version 03 bei der GWDG verfügbar. Gaussian zeichnet sich vor allem durch seinen großen Funktionsumfang und die relativ einfache Bedienbarkeit aus. Beim Versionsprung von g98 auf g03 hat das Programm wiederum eine ganze Reihe interessanter neuer Features und Verbesserungen erhalten. Zu den Highlights gehören:

- **QM:MM:** Die elektrostatischen Eigenschaften der MM-Region können jetzt bei der Berechnung der QM-Region berücksichtigt werden. Außerdem sind nun analytische Frequenzen für QM:MM-Rechnungen verfügbar, und der Optimierer soll deutlich schneller und zuverlässiger geworden sein.
- **Periodische Randbedingungen:** Gaussian erlaubt nun DFT- und HF-Rechnungen unter periodischen Randbedingungen, also z. B. für Kristalle, Oberflächen oder Polymerstränge.
- **Ab initio Moleküldynamik:** Born-Oppenheimer-Moleküldynamik (Berechnung der Wellenfunktion für jeden Dynamikschritt) steht für alle Methoden mit analytischen Gradienten zur Verfügung. Atom-Centered Density Matrix Propagation (ADMP) ist für (Hybrid-)DFT und QM:MM

verfügbar. Ähnlich der Car-Parrinello-Moleküldynamik (CPMD) werden hier die Kerne und die Wellenfunktion zusammen propagiert. ADMP verwendet aber atomzentrierte Basisfunktionen, im Unterschied zu CPMD, das auf ebenen Wellen basiert.

- **Angeregte Zustände:** Hier hat sich besonders viel getan. Neu ist die Restricted-Active-Space-SCF(RASSCF)-Methode, bei der der von CAS-SCF bekannte Active Space weiter unterteilt wird in stark besetzte, schwach besetzte und im jeweiligen Problem besonders aktive Orbitale. CASSCF soll deutlich schneller sein, außerdem können nun NBOs für die Definition des aktiven Raumes verwendet werden. Schließlich sind CI-singles und TDDFT nun auch zusammen mit Solvenzmodellen verfügbar.
- **Molekulare Eigenschaften:** Die Liste der neuen Eigenschaften, die mit g03 berechnet werden können, ist zu lang, um sie hier zu wiederholen. Sie reicht von magnetischen über optische Größen bis zu Schwingungs-Rotationskopplungen. Auch hier können jetzt Solvenzeffekte berücksichtigt und QM:MM-Rechnungen verwendet werden.
- **Algorithmen:** Reine DFT-Rechnungen können jetzt ohne Genauigkeitsverlust deutlich schnell-

ler durchgeführt werden, da die explizite Berechnung von vielen Zwei-Elektronen-Integralen vermieden wird. In HF- und Hybrid-DFT-Rechnungen lässt das Screening der Beiträge zum exakten Austausch dessen Berechnung jetzt linear skalieren. Außerdem gibt es Verbesserungen beim Initial Guess und der SCF-Konvergenz.

Eine vollständige Liste der Neuigkeiten in g03 finden Sie unter:

http://www.gaussian.com/g_brochures/g03_new.htm

Auf der Gaussian-Homepage finden Sie außerdem auch das Online-Manual unter

http://www.gaussian.com/g_ur/g03mantop.htm

9.2 Benutzung von Gaussian 03

Das neue Lizenzmodell von Gaussian erfordert es, dass Anwender in eine spezielle Benutzergruppe eingetragen werden, um Gaussian 03 nutzen zu können. Wenn Sie Gaussian 03 verwenden wollen, wenden Sie sich daher bitte per E-Mail an Herrn Dr. Christian Boehme (cboehme1@gwdg.de). Wir würden uns freuen, wenn Sie bei der Gelegenheit Ihre geplanten Anwendungen kurz vorstellen und uns auch den geplanten Umfang Ihrer Rechnungen mitteilen könnten. Dies erlaubt uns eine bessere Einschätzung der für Gaussian 03 insgesamt zu erwartenden Anforderungen an unsere Ressourcen. Wenn Sie dies wünschen, können Sie auch gerne unsere Beratung bei der Planung und Durchführung Ihres Projektes in Anspruch nehmen.

Gegenwärtig kann Gaussian 03 auf der IBM RS/6000 (gwdk032) sowie auf dem Linux-Cluster (gwdu102) eingesetzt werden. Die Dokumentation zur Benutzung des Batch-Systems auf dem Linux-Cluster finden Sie unter

<http://www.gwdg.de/service/rechenanlagen/parallelrechner/linux-cluster.html>

Ein Gaussian-Jobscript `gaussjob` (s. unten) können Sie demnach für 24 h serielle Ausführung submittieren mit

```
bsub -n 1 -w 24:00 gaussjob
```

Für die parallele Ausführung (maximal zwei CPUs) benötigen Sie zusätzlich den `-x`-Schalter, die zweite CPU wird von Gaussian 03 selbst angefordert (erfordert `%nproc=2` im Gaussian-Input-File; nicht alle Teile von Gaussian 03 sind parallelisiert):

```
bsub -n 1 -w 24:00 -x gaussjob
```

Für die IBM finden Sie die notwendigen Informationen unter

http://www.gwdg.de/service/rechenanlagen/parallelrechner/sp_handbuch_gwdg/index.html

Einen seriellen Gaussian-Job mit 1 GByte RAM und 2 GByte Scratch können Sie also über Codine submittieren mit

```
qsub -l a=ai,c=24:00:00,\
d=1024M,scr=2 gaussjob
```

Ein paralleler Job wird über den Loadleveler submittiert:

```
llsub -l SMPNODES=1,\
WCT=24:00:00 gaussjob
```

Dabei können über `%nproc=#` im Gaussian-Input-File bis zu vier Prozessoren angefordert werden.

Das Jobscript `gaussjob` muss mindestens enthalten:

```
#!/bin/ksh
export g03root="/usr/product/gaussian"
. $g03root/g03/bsd/g03.profile
export GAUSS_SCRDIR="/scratch"
g03 < input.com > output.log
```

Bei weiteren Fragen zur Anwendung von Gaussian können Sie sich an Herrn Dr. Christian Boehme (E-Mail: cboehme1@gwdg.de, Tel.: 0551 201-1559) wenden.

Boehme

10. Nachtrag zu den Fileserver-Ausfällen im Januar

Ende Januar kam es im UNIX-Cluster der GWDG mehrfach zu frühmorgentlichen Ausfällen des zentralen Fileservices. Die betroffene Maschine zeigte keinerlei Reaktion mehr, und es gab keine verwertbaren Fehlermeldungen im Vorfeld des Ausfalls. Dadurch zog sich die Analyse des Problems über einige Tage hin, in deren Morgenstunden sich derartige Ausfälle mehrfach wiederholten. Letztlich zeigte sich als Ursache eine Überlastung des internen

Datenbus (PCI-Bus), ausgelöst durch eine Routineprozedur zur Defragmentierung des Plattenplatzes.

Das Problem ist behoben, so dass seitdem keine weiteren Ausfälle mehr zu beklagen waren. Wir konnten unsere Benutzer wegen des frühen Redaktionsschlusses leider nicht mehr zeitnah in der vorherigen Ausgabe der GWDG-Nachrichten informieren; daher dieser Nachtrag.

Hattenbach

11. Kurse des Rechenzentrums

11.1 Allgemeine Informationen zum Kursangebot der GWDG

11.1.1 Teilnehmerkreis

Das Kursangebot der GWDG richtet sich an die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus den Instituten der Universität Göttingen und der Max-Planck-Gesellschaft sowie aus anderen wissenschaftlichen Einrichtungen, die zum erweiterten Benutzerkreis der GWDG gehören. Eine Benutzerkennung für die Rechenanlagen der GWDG ist nicht erforderlich.

11.1.2 Anmeldung

Anmeldungen können schriftlich per Brief oder per Fax unter der Nummer 0551 21119 an die

GWDG
Kursanmeldung
Postfach 2841
37018 Göttingen

oder per E-Mail an die Adresse auftrag@gwdg.de mit der Subject-Angabe „Kursanmeldung“ erfolgen. Telefonische Anmeldungen können wegen der Einbeziehung der Kurse in die interne Kosten- und Leistungsrechnung der GWDG nicht angenommen werden. Aus diesem Grund können Anmeldungen auch nur durch den Gruppenmanager - eine der GWDG vom zugehörigen Institut bekannt gegebene und dazu autorisierte Person - oder Geschäftsführenden Direktor des Instituts vorgenommen werden. Die Anmeldefrist endet jeweils 7 Tage vor Kursbeginn. Sollten nach dem Anmeldeschluss noch Teilnehmerplätze frei sein, sind auch noch kurzfristige Anmeldungen in Absprache mit dem Dispatcher (Tel.: 0551 201-1523, E-Mail: auftrag@gwdg.de) möglich. Eine Anmeldebestätigung wird nur an auswärtige Institute oder auf besonderen Wunsch zugesendet. Falls eine Anmeldung wegen Überbelegung des Kurses nicht berücksichtigt werden kann, erfolgt eine Benachrichtigung.

11.1.3 Kosten bzw. Gebühren

Die Kurse sind - wie die meisten anderen Leistungen der GWDG - in das interne Kosten- und Leistungsrechnungssystem der GWDG einbezogen. Die bei den Kursen angegebenen Arbeitseinheiten (AE) werden vom jeweiligen Institutskontingent abgezogen. Für die Institute der Universität Göttingen und der Max-Planck-Gesellschaft erfolgt keine Abrechnung in EUR.

11.1.4 Rücktritt und Kursausfall

Absagen durch die Teilnehmer oder die zugehörigen Gruppenmanager bzw. Geschäftsführenden

Direktoren können bis zu 8 Tagen vor Kursbeginn erfolgen. Bei späteren Absagen durch die Teilnehmer oder die zugehörigen Gruppenmanager bzw. Geschäftsführenden Direktoren werden die für die Kurse berechneten Arbeitseinheiten vom jeweiligen Institutskontingent abgebucht. Sollte ein Kurs aus irgendwelchen Gründen, zu denen auch die Unterschreitung der Mindestteilnehmerzahl bei Anmeldeschluss sowie die kurzfristige Erkrankung des Kurshalters gehören, abgesagt werden müssen, so werden wir versuchen, dies den betroffenen Personen rechtzeitig mitzuteilen. Daher sollte bei der Anmeldung auf möglichst vollständige Adressangaben inkl. Telefonnummer und E-Mail-Adresse geachtet werden. Die Berechnung der Arbeitseinheiten entfällt in diesen Fällen selbstverständlich. Weitergehende Ansprüche können jedoch nicht anerkannt werden.

11.1.5 Kursorte

Die meisten Kurse finden in Räumen der GWDG oder des Max-Planck-Instituts für biophysikalische Chemie statt. Der Kursraum und der Vortragsraum der GWDG befinden sich im Turm 6, UG des Max-Planck-Instituts für biophysikalische Chemie, Am Fassberg, 37077 Göttingen, der Große Seminarraum im Allgemeinen Institutsgebäude dieses Instituts. Die Wegbeschreibung zur GWDG bzw. zum Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie sowie der Lageplan sind im WWW unter dem URL

<http://www.gwdg.de/gwdg/standort/lageplan>

zu finden. Der gemeinsame Schulungsraum von GWDG und SUB befindet sich im Untergeschoss der Niedersächsischen Staats- und Universitätsbibliothek, Platz der Göttinger Sieben 1, 37073 Göttingen.

11.1.6 Ausführliche und aktuelle Informationen

Ausführliche Informationen zu den Kursen, insbesondere zu den Kursinhalten und Räumen, sowie aktuelle kurzfristige Informationen zum Status der Kurse sind im WWW unter dem URL

<http://www.gwdg.de/service/kurse>

zu finden. Anfragen zu den Kursen können an den Dispatcher per Telefon unter der Nummer 0551 201-1524 oder per E-Mail an die Adresse auftrag@gwdg.de gerichtet werden. Zweimal jährlich wird ein Katalog mit dem aktuellen GWDG-Kursprogramm versendet. Interessenten, die in den Verteiler aufgenommen werden möchten, können dies per E-Mail an die Adresse gwdg@gwdg.de mitteilen.

11.2 Kurse von April bis Dezember 2004 in thematischer Übersicht

EDV-Grundlagen und Sonstiges

Kurse	Termine	Vortragende
Datenschutz - Verarbeitung personenbezogener Daten auf den Rechenanlagen der GWDG	• 18.06.2004	Dr. Grieger
Einführung in die Nutzung des Leistungsangebots der GWDG	• 09.06.2004 • 15.09.2004 • 08.12.2004	Dr. Grieger Dr. Grieger Dr. Grieger
Einführung in Aufbau und Funktionsweise von PCs	• 03.05.2004 • 13.09.2004	Eyßell Eyßell
Führung durch das Rechnermuseum	• 16.04.2004 • 14.05.2004 • 04.06.2004 • 02.07.2004 • 20.08.2004 • 17.09.2004 • 08.10.2004 • 12.11.2004 • 10.12.2004	Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell Eyßell
Einführung in die Bedienung von Windows-Oberflächen	• 04.05.2004 • 14.09.2004	Eyßell Eyßell

Betriebssysteme

Kurse	Termine	Vortragende
UNIX/Linux-Windows-Systemintegration mit SAMBA	• 24.06.2004 - 25.06.2004	Dr. Heuer
Grundkurs UNIX/Linux mit Übungen	• 25.05.2004 - 27.05.2004 • 31.08.2004 - 02.09.2004 • 07.12.2004 - 09.12.2004	Hattenbach Hattenbach Hattenbach
Schnellkurs UNIX für Windows-Benutzer mit Übungen	• 07.06.2004 - 08.06.2004 • 05.07.2004 - 06.07.2004 • 29.11.2004 - 30.11.2004	Dr. Bohrer Dr. Bohrer Dr. Bohrer
Installation und Administration von UNIX-Systemen	• 20.04.2004 - 23.04.2004 • 14.12.2004 - 17.12.2004	Dr. Heuer, Dr. Sippel Dr. Heuer, Dr. Sippel
UNIX für Fortgeschrittene	• 22.11.2004 - 24.11.2004	Dr. Sippel
Die Windows-Active-Directory-Domäne	• 06.10.2004 - 08.10.2004	Quentin

Betriebssysteme

Kurse	Termine	Vortragende
Windows XP für Systembetreuer	• 04.10.2004 - 05.10.2004	Quentin

Netze / Internet

Kurse	Termine	Vortragende
Das Internet als Werkzeug für die Biowissenschaften	• 02.04.2004 • 15.10.2004	Dr. Liesegang Dr. Liesegang
Sicherheit im Internet für Anwender	• 02.12.2004	Reimann
Web Publishing I	• 28.10.2004 - 29.10.2004	Reimann
XML	• 29.09.2004 - 01.10.2004	Reimann, Koch

Grafische Datenverarbeitung

Kurse	Termine	Vortragende
Arbeiten mit CAD, Grundlagen	• 06.09.2004 - 10.09.2004	Witt
CorelDRAW - Grundlagen	• 05.04.2004 - 06.04.2004 • 19.10.2004 - 20.10.2004	Wagenführ Wagenführ
Grundlagen der Bildbearbeitung mit Photoshop	• 28.06.2004 - 29.06.2004	Töpfer
Photoshop für Fortgeschrittene	• 10.06.2004 - 11.06.2004 • 23.08.2004 - 24.08.2004	Töpfer Töpfer

Sonstige Anwendungssoftware

Kurse	Termine	Vortragende
Datenbanksystem MS Access, Einführung mit Übungen	• 10.05.2004 - 14.05.2004 • 22.11.2004 - 26.11.2004	Dr. Kneser Dr. Kneser
Einführung in das Computeralgebra-System Mathematica	• 18.05.2004 - 19.05.2004	Dr. Schwardmann
Anwendungen in Lotus Notes	• 26.10.2004 - 27.10.2004	Greber, Dr. Grieger
Ideenorganisation mit OneNote und MindManager	• 03.06.2004 - 04.06.2004	Reimann
Outlook - Mailing und Groupware	• 06.05.2004 - 07.05.2004	Reimann
PDF-Dateien: Erzeugung und Bearbeitung	• 07.07.2004 - 08.07.2004	Dr. Baier, Koch
PowerPoint	• 07.04.2004 - 08.04.2004 • 21.12.2004 - 22.12.2004	Reimann Reimann
Projektplanung mit MS Project	• 19.08.2004 - 20.08.2004	Reimann
SAS - Grundlagen	• 15.06.2004 - 17.06.2004 • 09.11.2004 - 11.11.2004	Wagenführ Wagenführ

Sonstige Anwendungssoftware

Kurse	Termine	Vortragende
Methoden und Werkzeuge der Sequenzanalyse: GCG, EMBOSS, STADEN	• 29.03.2004 - 01.04.2004	Dr. Bohrer, Dr. Liesegang
	• 11.10.2004 - 14.10.2004	Dr. Bohrer, Dr. Liesegang
Mit StarOffice zum Schwarzen Loch	• 30.04.2004 • 12.11.2004	Dr. Grieger Dr. Grieger

Programmiersprachen

Kurse	Termine	Vortragende
Einführung in die Programmiersprache Fortran 90/95	• 27.09.2004 - 28.09.2004	Dr. Schwardmann
Programmierung von Parallelrechnern	• 27.04.2004 - 29.04.2004	Prof. Haan, Dr. Schwardmann
	• 02.11.2004 - 04.11.2004	Prof. Haan, Dr. Schwardmann

**11.3 Kurse von April bis Dezember 2004
in chronologischer Übersicht**

Kurs	Vortragende	Termin	Anmelde- schluss	AE
Methoden und Werkzeuge der Sequenzanalyse: GCG, EMBOSS, STADEN	Dr. Bohrer, Dr. Liesegang	29.03.2004 - 01.04.2004 09.30 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	22.03.2004	16
Das Internet als Werkzeug für die Biowissenschaften	Dr. Liesegang	02.04.2004 09.30 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	26.03.2004	4
CorelDRAW - Grundlagen	Wagenführ	05.04.2004 - 06.04.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	29.03.2004	8
PowerPoint	Reimann	07.04.2004 - 08.04.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	31.03.2004	8
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	16.04.2004 10.00 - 12.00 Uhr	09.04.2004	0
Installation und Administration von UNIX-Systemen	Dr. Heuer, Dr. Sippel	20.04.2004 - 23.04.2004 09.30 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	13.04.2004	6
Programmierung von Parallel- rechnern	Prof. Dr. Haan, Dr. Schwardmann	27.04.2004 - 29.04.2004 09.15 - 12.15 Uhr und 14.00 - 17.00 Uhr	20.04.2004	12
Mit StarOffice zum Schwarzen Loch	Dr. Grieger	30.04.2004 09.15 - 12.00 Uhr	23.04.2004	2

Kurs	Vortragende	Termin	Anmelde- schluss	AE
Einführung in Aufbau und Funktionsweise von PCs	Eyßell	03.05.2004 09.15 - 12.30 Uhr	26.04.2004	2
Einführung in die Bedienung von Windows-Oberflächen	Eyßell	04.05.2004 09.15 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	27.04.2004	4
Outlook - Mailing und Groupware	Reimann	06.05.2004 - 07.05.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	29.04.2004	8
Datenbanksystem MS Access, Einführung mit Übungen	Dr. Kneser	10.05.2004 - 14.05.2004 09.00 - 12.00 Uhr	03.05.2004	10
Führung durch das Rechnermuseum	Eyßell	14.05.2004 10.00 - 12.00 Uhr	07.05.2004	0
Einführung in das Computeralgebra-System Mathematica	Dr. Schwardmann	18.05.2004 - 19.05.2004 09.00 - 12.00 Uhr und 13.00 - 16.00 Uhr	11.05.2004	8
Grundkurs UNIX/Linux mit Übungen	Hattenbach	25.05.2004 - 27.05.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	18.05.2004	12
Ideenorganisation mit OneNote und MindManager	Reimann	03.06.2004 - 04.06.2004 9.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	27.05.2004	8
Führung durch das Rechnermuseum	Eyßell	04.06.2004 10.00 - 12.00 Uhr	28.05.2004	0
Schnellkurs UNIX für Windows-Benutzer mit Übungen	Dr. Bohrer	07.06.2004 - 08.06.2004 13.30 - 16.30 Uhr	31.05.2004	4
Einführung in die Nutzung des Leistungsangebots der GWDG	Dr. Grieger	09.06.2004 17.15 - 20.00 Uhr	02.06.2004	0
Photoshop für Fortgeschrittene	Töpfer	10.06.2004 - 11.06.2004 09.30 - 16.00 Uhr	03.06.2004	8
SAS - Grundlagen	Wagenführ	15.06.2004 - 17.06.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	08.06.2004	12
Datenschutz - Verarbeitung personenbezogener Daten auf den Rechenanlagen der GWDG	Dr. Grieger	18.06.2004 09.15 - 12.00 Uhr	11.06.2004	2
UNIX/Linux-Windows-Systemintegration mit SAMBA	Dr. Heuer	24.06.2004 - 25.06.2004 09.30 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	17.06.2004	8
Grundlagen der Bildbearbeitung mit Photoshop	Töpfer	28.06.2004 - 29.06.2004 09.30 - 16.00 Uhr	21.06.2004	8
Führung durch das Rechnermuseum	Eyßell	02.07.2004 10.00 - 12.00 Uhr	25.06.2004	0
Schnellkurs UNIX für Windows-Benutzer mit Übungen	Dr. Bohrer	05.07.2004 - 06.07.2004 13.30 - 16.30 Uhr	28.06.2004	4

Kurs	Vortragende	Termin	Anmelde- schluss	AE
PDF-Dateien: Erzeugung und Bearbeitung	Dr. Baier, Koch	07.07.2004 - 08.07.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	30.06.2004	8
Projektplanung mit MS Project	Reimann	19.08.2004 - 20.08.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	12.08.2004	8
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	20.08.2004 10.00 - 12.00 Uhr	13.08.2004	0
Photoshop für Fortgeschrittene	Töpfer	23.08.2004 - 24.08.2004 09.30 - 16.00 Uhr	16.08.2004	8
Grundkurs UNIX/Linux mit Übungen	Hattenbach	31.08.2004 - 02.09.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	24.08.2004	12
Arbeiten mit CAD, Grundlagen	Witt	06.09.2004 - 10.09.2004 09.00 - 16.00 Uhr, (am 06.09. ab 10.00 Uhr; am 10.09. bis 13.00 Uhr)	30.08.2004	20
Einführung in Aufbau und Funktionsweise von PCs	Eyßell	13.09.2004 09.15 - 12.30 Uhr	06.09.2004	2
Einführung in die Bedienung von Windows-Oberflächen	Eyßell	14.09.2004 09.15 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	07.09.2004	4
Einführung in die Nutzung des Leistungsangebots der GWDG	Dr. Grieger	15.09.2004 17.15 - 20.00 Uhr	08.09.2004	0
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	17.09.2004 10.00 - 12.00 Uhr	10.09.2004	0
Einführung in die Programmier- sprache Fortran 90/95	Dr. Schwardmann	27.09.2004 - 28.09.2004 09.00 - 12.00 Uhr und 13.00 - 16.00 Uhr	20.09.2004	8
XML	Reimann, Koch	29.09.2004 - 01.10.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	22.09.2004	12
Windows XP für Systembetreuer	Quentin	04.10.2004 - 05.10.2004 09.15 - 15.30 Uhr	27.09.2004	8
Die Windows-Active-Directory- Domäne	Quentin	06.10.2004 - 08.10.2004 09.15 - 15.30 Uhr	29.09.2004	12
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	08.10.2004 10.00 - 12.00 Uhr	01.10.2004	0
Methoden und Werkzeuge der Sequenzanalyse: GCG, EMBOSS, STADEN	Dr. Bohrer, Dr. Liesegang	11.10.2004 - 14.10.2004 09.30 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	04.10.2004	16
Das Internet als Werkzeug für die Biowissenschaften	Dr. Liesegang	15.10.2004 09.30 - 12.30 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	08.10.2004	4

Kurs	Vortragende	Termin	Anmelde- schluss	AE
CorelDRAW - Grundlagen	Wagenführ	19.10.2004 - 20.10.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	12.10.2004	8
Anwendungen in Lotus Notes	Greber, Dr. Grieger	26.10.2004 - 27.10.2004 09.15 - 16.30 Uhr	19.10.2004	8
Web Publishing I	Reimann	28.10.2004 - 29.10.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	21.10.2004	8
Programmierung von Parallel- rechnern	Prof. Dr. Haan, Dr. Schwardmann	02.11.2004 - 04.11.2004 09.15 - 12.15 Uhr und 14.00 - 17.00 Uhr	26.10.2004	12
SAS - Grundlagen	Wagenführ	09.11.2004 - 11.11.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	02.11.2004	12
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	12.11.2004 10.00 - 12.00 Uhr	05.11.2004	0
Mit StarOffice zum Schwarzen Loch	Dr. Grieger	12.11.2004 09.15 - 12.00 Uhr	05.11.2004	2
Datenbanksystem MS Access, Einführung mit Übungen	Dr. Kneser	22.11.2004 - 26.11.2004 09.00 - 12.00 Uhr	15.11.2004	10
UNIX für Fortgeschrittene	Dr. Sippel	22.11.2004 - 24.11.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.15 - 15.30 Uhr	15.11.2004	12
Schnellkurs UNIX für Windows- Benutzer mit Übungen	Dr. Bohrer	29.11.2004 - 30.11.2004 13.30 - 16.30 Uhr	22.11.2004	4
Sicherheit im Internet für Anwender	Reimann	02.12.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	25.11.2004	4
Grundkurs UNIX/Linux mit Übungen	Hattenbach	07.12.2004 - 09.12.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.00 Uhr	30.11.2004	12
Einführung in die Nutzung des Leistungsangebots der GWDG	Dr. Grieger	08.12.2004 17.15 - 20.00 Uhr	01.12.2004	0
Führung durch das Rechner- museum	Eyßell	10.12.2004 10.00 - 12.00 Uhr	03.12.2004	0
Installation und Administration von UNIX-Systemen	Dr. Heuer, Dr. Sippel	14.12.2004 - 17.12.2004 09.30 - 12.00 Uhr und 13.30 - 16.30 Uhr	07.12.2004	16
PowerPoint	Reimann	21.12.2004 - 22.12.2004 09.15 - 12.00 Uhr und 13.00 - 15.00 Uhr	14.12.2004	8

12. Betriebsstatistik Februar 2004

12.1 Nutzung der Rechenanlagen

Rechner	Zahl der Prozessoren	CPU-Stunden
DECalpha	12	5.223,42
IBM RS/6000 SP	224	105.707,37
IBM Regatta	96	41.526,44

12.2 Betriebsunterbrechungen

Rechner/PC-Netz	Störungen		Systempflege	
	Anzahl	Stunden	Anzahl	Stunden
UNIX-Cluster	0		0	
IBM SP/Regatta	0		0	
PC-Netz	1	1,00	2	0,70
Nameserver	0		0	
Mailer	0		1	0,50

13. Autoren dieser Ausgabe

Name	Artikel	E-Mail-Adresse / Telefon-Nr.
Dr. Holger Beck	<ul style="list-style-type: none"> Vervierfachung der Bandbreite des G-WiN-Anschlusses 	Holger.Beck@gwdg.de 0551 201-1554
Dr. Christian Boehme	<ul style="list-style-type: none"> Der Linux-Cluster bei der GWDG wächst um 80 Prozent Gaussian 03 bei der GWDG 	Christian.Boehme@gwdg.de 0551 201-1559
Dr. Wilfried Grieger	<ul style="list-style-type: none"> Öffnungszeiten des Rechenzentrums um Ostern 2004 Kontingenzuweisung für das zweite Quartal 2004 	wgrieger@gwdg.de 0551 201-1512
Jürgen Hattenbach	<ul style="list-style-type: none"> Nachtrag zu den Fileserver-Ausfällen im Januar 	jhatten@gwdg.de 0551 201-1517
Günter Koch	<ul style="list-style-type: none"> Virtuelle Webserver bei der GWDG 	gkoch@gwdg.de 0551 - 201-1550
Dr. Thomas Otto	<ul style="list-style-type: none"> GWDG-Nachrichten mit neuer Strukturierung 	totto@gwdg.de 0551 201-1828
Michael Reimann	<ul style="list-style-type: none"> Wichtige Umstellung beim Mailer der GWDG Sicherheits-Services gegen Viren und Würmer Virtuelle Webserver bei der GWDG 	mreiman1@gwdg.de 0551 201-1826