

Nytt från NSC

Nationellt Superdatorcentrum vid Linköpings universitet • nr 19 • oktober 2004

NATIONELLT SUPERDATORCENTRUM

5TH ANNUAL WORKSHOP ON **LINUX CLUSTERS FOR SUPER COMPUTING**



LINKÖPING 18-19 OKTOBER 2004

Jack Dongarra • University of Tennessee
Martyn Guest • CCLRC Daresbury Laboratory
Ken Museth • Linköping University
Greg Lindahl • Pathscale
Bruce Elmegren • IBM
Erik Aurell • SICS

Seminarier - Kurser - Utställning
Tekniska presentationer

Information och anmälan: www.nsc.liu.se/lcsc



**NATIONELLT
SUPERDATOR-
CENTRUM**



LINKÖPINGS UNIVERSITET

Linux Clusters for Super Computing 2004

I år händer det mer saker än vanligt i samband med LCSC. I anslutning till LCSC anordnas den första workshopen inom *Nordic Grid Neighbourhood* (NGN), ett nätverksprogram för att främja kontakt och kommunikation inom gridrelaterad verksamhet i Norden, Baltikum och nordvästra Ryssland.

Under LCSC anordnas också tekniska arbetsmöten för Nordugrid-samarbetet och säkerhetsansvariga inom Nordunet.

Trots det omfattande programmet kommer själva LCSC att genomföras på två dagar istället för tre som brukligt. Detta åstadkoms genom att schemat delvis parallelliseras. Mer information hittas naturligtvis på <http://www.nsc.liu.se/lcsc>.

Sök SNAC-resurser

Nu är det dags att söka datorresurser inför år 2005 från *Swedish National Allocation Committee*, SNAC. Passa på att söka dator-tid på NSC:s resurser med tilldelning från 1 januari 2005.

Ansökningstiden för tilldelning av resurser vid NSC och andra nationella HPD-centra samt Swegrid går ut torsdagen den 28 oktober klockan 16:00. Ofullständiga eller för sent inkomna ansökningar kommer ej att behandlas. För information och det elektroniska ansökningsformuläret se <http://www.snac.vr.se/>.



Bo Einarsson – en NSC-veteran som pensionerats

Bo deltog i det förberedelsearbete under 1988 som resulterade i att NSC bildades våren 1989 och var en av NSC:s första medarbetare. Han har under alla år varit vår expert på programspråket Fortran och matematiska bibliotek.

Han har med sitt gedigna kunnande i numeriska metoder och det i beräknings-sammanhang helt dominerande programspråket Fortran starkt bidragit till att NSC utvecklats till ett betydande nationellt beräkningscentrum.

Tack, Bosse! Vi önskar dig lycka till som pensionär.

MATS S. ANDERSSON
MSA@NSC.LIU.SE

NSC närmar sig forskningen vid LiU

Sven Stafström
föreståndare NSC
stafstrom@nsc.liu.se



Har det varit sommar i år? I alla fall gick den över ganska snabbt, några minnen från båtturer i stilla skärgårdsvatten och cykellopp finns dock kvar och hösten har hittills varit alldeles strålande. Arbetet på NSC är också mycket stimulerande, det var länge sedan jag lärde mig så mycket nytt under en så kort tid som under det gångna dryga halvåret som föreståndare för NSC.

Jag har tidigare beskrivit NSC:s verksamhet som uppdelad i tre huvudområden; drift och support, utveckling och förnyelse samt forskningsanknytning och jag tänkte beröra åtminstone två av dessa områden här. Vad gäller det förstnämnda området så ligger det i "NSC-andan" att alltid göra det yttersta för att hålla en hög tillgänglighet och tillförlitlighet på våra resurser. Oftast lyckas vi i våra ambitioner men ibland går det snett. Så skedde under sommaren då vi drabbades av ett flertal intrång. Som

ansvarig för verksamheten i en forskargrupp i beräkningsfysik vet jag hur frustrerande det är att behöva vänta på resultat som man behöver för en konferens eller en artikel. Nu vet jag också hur frustrerande det är att stå på andra sidan och delta i det arbete som läggs ner av vår personal för att städa upp efter dessa intrång. Vi har nu ytterligare höjt säkerhetsnivån på våra system och vi hoppas att vi i fortsättningen skall slippa problem av denna typ. Ni får också i detta nummer av Nytt från NSC några små tips hur ni kan minska risken att få era lösenord stulna. Arbetar vi tillsammans i dessa frågor så har vi stor chans att lyckas skydda oss mot ovälkomna inloggningar.

Arbetet med att knyta verksamheten vid NSC närmare till forskargrupper vid LiU är i full gång. En grupp på upp mot 20 forskare inom datavetenskap, matematik, numerisk analys, visualisering, samt inom

tillämpningsområden som bioinformatik, fysik, kemi, klimatsimuleringar och mekanik har träffats och dragit upp riktlinjerna för en satsning inom området dataintensiva beräkningar. I detta nummer av Nytt från NSC presenteras ett exempel på denna forskning från professor Igor Abrikosov, Weine Olovsson, Uppsala universitet och Janne Wallenius, KTH. Abrikosov kom för ett år sedan till LiU från Uppsala och vi på NSC, samt även kollegorna på Institutionen för Fysik och Mätteknik, IFM, önskar honom varmt välkommen till Linköping.

Vi är nu fullt uppe i slutspurten med förberedelserna inför Linux Cluster for Super Computing, LCSC. Det är nu femte gången denna workshop hålls och intresset ser ut att öka för varje år. I år samarrangerar vi vår workshop med Nordic Grid Neighbourhood (NGN) Workshop. Som framgår av annonsen på framsidan så innehåller LCSC/NGN i år presentationer av ett stort antal internationellt framstående HPD-expert, med professor Jack Dongarra i spetsen. Vi hoppas på en mycket givande workshop med ett stort antal deltagare både innanför och utanför Sveriges gränser. Välkomna till Linköping och NSC den 18–20 oktober.



Ny på NSC - Per Lundqvist

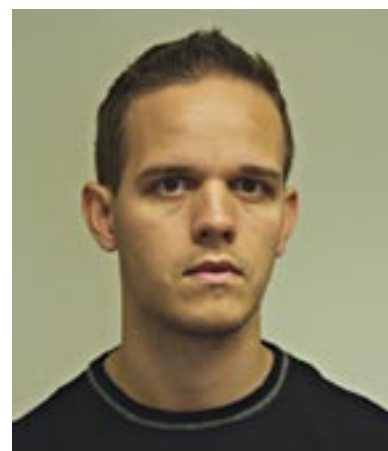
Jag har just avslutat min utbildning till civilingenjör i teknisk datavetenskap vid Umeå universitet med profilering inom parallella beräkningar. Profileringen innebär en fördjupning inom datakommunikation, parallellatorsystem och distribuerade system.

Mitt examensarbete med titeln "Kamerabaserad positionsbestämning av mark- och luftbrisader", utförde jag åt AerotechTelub i Växjö.

Som systemexpert vid NSC kommer jag vara ansvarig för driften av tre kommande kluster:

- Blixt – SMHI:s kluster som ska driftsättas i mars 2005.
- Det nya klustret för klimatforskningsprojektet SweClis.
- IFM:s kommande kluster.

PER LUNDQVIST
PERL@NSC.LIU.SE



Ny på NSC – Johan Gunnarsson

Jag är 24 år och kommer ursprungligen från Linköping. De senaste fyra åren har jag dock studerat på högskolan i Jönköping där jag först läste till högskoleingenjör i data-teknik och sedan byggde på med ett ettårigt magisterprogram.

Under studietiden har jag bland annat jobbat som programmerare av IP-telefoni-produkter samt varit engagerad i den lokala datorföreningen som systemansvarig.

På NSC kommer jag främst jobba med grid-relaterade uppgifter inom EGEE-projektet.

JOHAN GUNNARSSON
JOHAN@NSC.LIU.SE

Ab initio-simuleringar av materialegenskaper

Från grundläggande teori mot design av material

Betydelsen av olika material för vårt samhälle är svår att överskatta. Som exempel kan nämnas höghållfasta superlegeringar, magnetiska material, eldfasta material, och supraleidare. De senaste åren har nya experimentella metoder inom materialfysik lett till att man kan framställa material som aldrig tidigare existerat. Därför upptäcks idag ständigt nya och detta leder till ett ökat intresse för hur dessa material egentligen fungerar. Övergripande kunskap rörande materials egenskaper vid olika temperaturer, tryck och sammansättningar är nödvändig för utveckling och design av nya material. Detta kan studeras praktiskt med olika experimentella tekniker, men även teoretiskt med hjälp av beräkningar. Vi har nu nått en punkt där *ab initio*-teori (teori utan antaganden baserade på experiment) kan förutse experimentella resultat, och där dessa förutsägelser pålitlighet är hög. Trots den höga nivå som den experimentella materialvetenskapen redan uppnått står vi just nu inför vad som kan komma att bli ett av denna vetenskaps största genombrott. Teoribildning inom detta komplexa fält har tidigare mest varit av förklarande natur. Teorier har hjälpt oss att tolka och förstå experimentella resultat, och när en teori inte har kunnat förklara iakttagelserna har vi förkastat den. Idag har de teoretiska metoderna börjat hinna ikapp och används mycket mer prediktivt.

Teorins utveckling

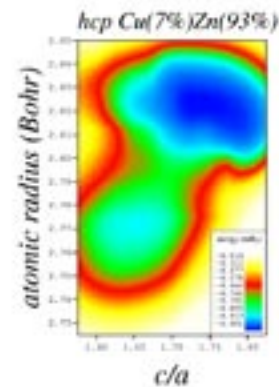
De revolutionära upptäckter som gjordes inom fysiken i början av 1900-talet och som följdes av formulerandet av de grundläggande principerna för kvantmekaniken och statistisk fysik, ledde till en nytt forskningsområde, teorin kring elektronstrukturen. År 1927 tillämpade Sommerfeld den kvantmekaniska beskrivningen på metaller enligt den fria elektronmodellen och erhöll en kvalitativt korrekt beskrivning av vissa grundegenskaper, som exempelvis elektronbidraget till den specifika värmekapaciteten hos en metall. Möjligheterna att undersöka materialegenskaper från *ab initio*-elektron-teori ökade enormt när Kohn med medarbetare formulerade täthetsfunktionalteorin (density functional theory, eller DFT) och den lokala spintäthetsapproximationen (local spin density approximation, eller LSDA) i mitten av 60-talet. Denna genombrytande teori belönades med Nobelpriset 1998. Samtidigt skedde en snabb utveckling av numeriska metoder inom den kondenserade materiens teori och en exponentiell ökning av datakapaciteten. Modernare da-

torer i kombination med en stark teoretisk utveckling gjorde det möjligt att utföra *ab initio*-simuleringar för verklighetstroga material. Simuleringarna använder sig av elektronstrukturteorin, som i sin tur är baserad på kvantmekaniken. *Ab initio*-arbetssättet tillåter oss idag att få pålitliga resultat för termodynamiska, mekaniska, elektriska och magnetiska egenskaper, bland metaller, halvledare och isolatorer utan några justerbara parametrar anpassade efter experiment. Många praktiska problem inom materialvetenskapen löses framgångsrikt inom ramen för LSDA-DFT, och den används inte längre bara av fysiker, utan av kemister, geofysiker, biofysiker, metallurjer och inom andra vetenskapliga områden. Grundforskningen inom detta område motiveras kraftigt av praktiska applikationer, och många problem som idag undersöks av teoretiker inom kondenserad materia, kommer från tvärvetenskapliga kontakter och direkt från industrin.

Att beräkna materialegenskaper

Alla material är uppbyggda av atomer. Egenskaperna hos dessa material bestäms av atomernas inbördes ordning och deras möjlighet att påverka varandra. Elektronerna som är längst ifrån atomkärnorna kan sägas bilda ett slags "kitt" som binder ihop atomkärnorna till varandra. För att teoretiskt kunna beskriva materialegenskaperna, så utgår man från Schrödingerekvationen för att beräkna materialets elektronstruktur. På grund av det enorma antalet atomer ($\sim 10^{23}$) står man inför ett mycket komplicerat problem. För kristallina material (d.v.s. där atomernas positioner intar symmetriska positioner) kan man ta hjälp av symmetrin och reducera problemet till en mer hanterbar nivå. I det enklaste fallet innehåller den minsta symmetrienheten, enhetscellen, en enda atom. De flesta system är dock långt mer komplicerade än så och enhetscellen innehåller många atomer av olika slag. Vi studerar material som består av flera olika sorters atomer och eftersom relationerna dem emellan styrs av en mängd variabler, kommer man snart till komplicerade matematiska problem.

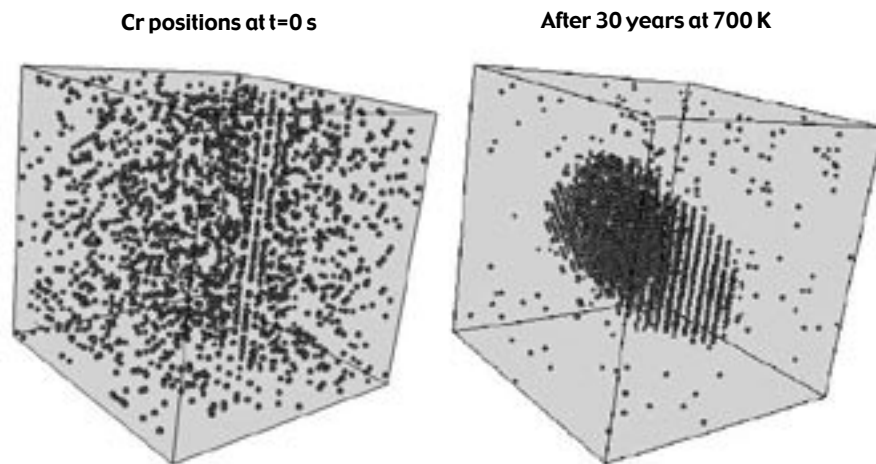
Låt oss betrakta ett relativt enkelt exempel som illustrerar de problem som uppkommer vid simuleringar. Det första uppgiften man behöver lösa är att bestämma en uppställning av atomer i rummet, eftersom alla materialegenskaper beror på detta arrangemang. Om vi tar oss an kristallina material, så finns det ett ändligt antal av möjliga kristallstrukturer som det kan anta.



Figur 1. Den totala energin för den oordnade $\text{Cu}_{0.07}\text{Zn}_{0.93}$ legeringen beräknad i ref. [1] som en funktion av medelatometradien och planavståndens ratio, c/a .

DFT låter oss hitta den stabila kristallstrukturen och optimera atomernas positioner i kristallen genom energiminimering. Den totala energin är en unik funktional av elektrontätheten, och atompositionerna inträder i ekvationerna som yttre parametrar. Problemet består av att variationerna i den totala energin som en funktion av dessa parametrar är små jämfört med energin för varje enskild atom. Detta kräver ett ständigt utvecklingsarbete inom metodologin, som inkluderar både framtagandet av nya teoretiska metoder med ett färre antal approximationer för att lösa de kvantmekaniska ekvationerna, och utvecklandet av nya mer effektiva algoritmer för att beräkna DFT.

I figur 1 visar vi ett av de senaste exemplen för denna typ av beräkningar, där uppgiften bestod av att optimera planavstånden i hexagonalt tätpackade (hexagonal closed packed, HCP) legeringar mellan Cu och Zn som en funktion av koncentrationen [1]. Den totala energin för en legering med 7% Cu och 93% Zn visas som en funktion av två yttre parametrar, atomradien (relaterad till volymen per atom) och planavståndens förhållande c/a . Det globala minimum svarar mot en radie av 2,83 Bohr och $c/a = 1,75$. Den viktigaste punkten här är att energin som en funktion av dessa två parametrar ändrar sig med mindre än 1 mRy (eller 10^{-3} Ry), inom hela ramen för figuren, medan de totala energierna för Cu och Zn har storleksordningen 10^3 och 10^4 Ry för respektive atom. Det betyder att metoderna som används har en noggrannhet på 8 till 10 decimaler! Figur 1 visar de första precisa beräkningarna som demonstrerade möjligheten att optimera planavstånd för oordnade metalliska legeringar. Detta erhöles genom omfattande numeriska beräkningar vilka använde sig av en ny algoritm utvecklad av



Figur 2. Distribution av Cr-atomer i en låda med 16 000 atomer, från simuleringar ref. [2] före och efter den termiska åldringen vid 700 K. Totalt är det 20% Cr-atomer i lådan. En stark segregation av Cr-atomer observeras, med bildandet av ett enda kluster.

L. Vitos *et al.* [1], baserad på den så kallade Exakta Muffin-Tin Orbital-metoden.

Det är viktigt att inse att konventionella elektronstrukturberäkningar inom ramen för DFT förutsäger materialegenskaper för grundtillståndet, vilket är vid $T = 0$ K.

Det finns metoder som tillåter en att behandla effekten av en temperatur skillnad från 0, det mest berömda exemplet i detta fall torde vara *ab initio*-molekylärdynamik enligt Car och Parrinello. Inom denna metod kombineras molekulärdynamik och DFT, och det givna problemet löses därför helt ur en kvantmekanisk angreppsvinkel. Olyckligtvis så är metoden mycket krävande i form av datorresurser, och täcker för närvarande ganska begränsade tid- och längdskalor. Samtidigt har en forskning kring alternativa beräkningsverktyg startat, och det har framgått att en lyckad beskrivning av material kan uppnås inom ramen för en så kallad multiskalemodellering. Från denna uppnår man en lösning av hela problemet genom ett steg-för-steg-användande av teoretiska metodologier, som är lämpliga för den enskilda längd- och/eller tidsskalan följd av ett lämpligt grovmaskigt nät när man fortsätter mot nästa (större) skala. Till exempel, om man startar med en lösning av ett kvantmekaniskt problem inom DFT för ett relativt litet system (~ 100 atomer), kan man utifrån dessa resultat bestämma interaktionen mellan olika atomer och använda dem i simuleringar (klassisk molekulärdynamik eller statistisk mekanik, t.ex. Monte Carlo-tekniken), som inkluderar 10^3 till 10^5 partiklar. I och med detta så kan man exempelvis studera sprickfortplantning, smältning, eller uppordning inom metaller och legeringar. För simuleringar av mekaniska egenskaper (d.v.s. egenskaper på mikronskalan) behöver man ofta substituera en atomär beskrivning med kontinuumteorier.

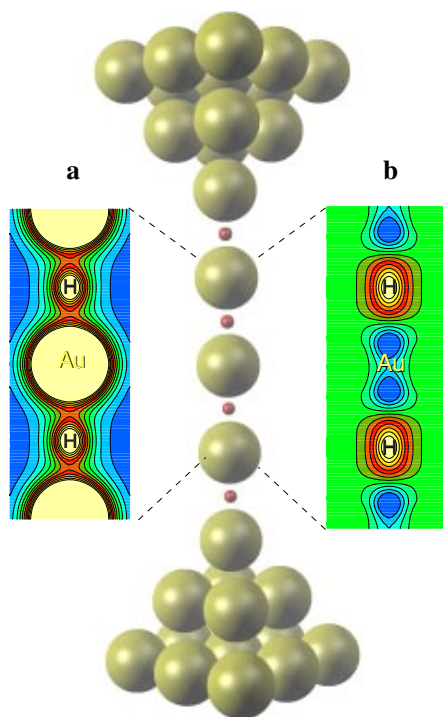
Det senare kan göras, t.ex. inom ramen för fas-fältmodellen.

Svällning av neutronbestrålat stål

Ett exempel som illustrerar den potentiella styrkan hos tillvägagångssättet är simuleringar av ferritiska Fe-Cr-stål, som utförs för att hitta stålkompositioner med högre resistens mot strålskador. Här är den teknologiska bakgrunden att den avgörande faktorn som begränsar bränsleförbrukandet i snabba neutronreaktorer är svällningen

av dess klädningsmaterial. Användandet av ferritiska martensitiska stål som konstruktionsmaterial för snabba neutronreaktorer har förespråkats p.g.a. deras relativt låga grad av svällning vid högre temperaturer. Medan en signifikant mängd experimentella resultat har ackumulerats har den teoretiska förståelsen för mekanismerna bakom svällningen av neutronbestrålat stål stannat kvar på en kvalitativ nivå. För att kvantifiera analysen krävs multiskalemodellering. De

forts. s. 5



Skorodumova and Simak, Phys. Rev. B - Rapid Commun. 67, 121404 (2003)

Figur 3. Fördelningen av laddningstätheten (a) och skillnaden mellan den verkliga tätheten och den atomära laddningstätheten för guld och väte beräknat i ref. [3] för den monoatomära delen av guldnanotråden. Bakgrundsfärgens ändring från blått via grönt och rött till gult indikerar en täthetsökning, vilket innebär i (b) att den blåa delen visar bristen, och den gula överskottet av elektroner. Partiell elektronladdningsöverföring mellan guld- och väteatomer kan ses tydligt.

forts. fr. s. 4

numeriska verktyg som applicerats inkluderar *ab initio*-lösningar av Schrödinger-ekvationen, molekylärdynamiska simuleringar av rekylkaskader, Monte Carlo-simuleringar av defekt-evolution och kvasi-kontinuum-stegeteori. Figur 2 visar distributionen av Cr-atomer i en låda med 16 000 atomer, före och efter simuleringen med termisk åldring vid 700 K. Totalt är det 20% Cr-atomer i lådan. En klar segregation av Cr observeras, med bildandet av ett enda kluster [2]. Formeringen av Cr-kluster observeras på en tid- och temperaturskala som stämmer bra överens med mätningar av härdning för binära legeringar med hög andel Cr.

Kvasikrystaller och nanotrådar

Teknologisk utveckling kräver material med speciella och ibland okonventionella egenskaper. Således har kvalitativt nya klasser av material tagits fram med egenskaper som är fascinerande för forskare, så väl som för ingenjörer. Experimentellt kan man nu legera oblandbara element. Det är möjligt att växa magnetiska nanopartiklar i diamagnetiska eller halvledarmatriser, eller vid ytor, att preparera små fristående nanotrådar, och att syntetisera kristaller med förbjudna symmetrier, så kallade kvasikrystaller. Den teoretiska fysiken spelar en allt viktigare roll inom sådana forskningsområden som nanovetenskap, informationsteknologi, energiforskning och bioteknologi. Betydelsen av teoretiska simuleringar kan illustreras av följande exempel. Fristående guldnanotrådar fås ofta från den mekaniskt kontrollerbara "break junction"-tekniken eller genom sveptunnelmikroskopi (STM), då spetsen först körs in i guldprovet och när den dras tillbaka formar en nanotråd, en monoatomär brygga mellan spetsen och provet. I de flesta experiment så har sådana nanotrådar varit förvånansvärt stabila, med signifikant långa interatomära avstånd, jämfört med bulk för kristallint guld. *Ab initio*-simuleringar [3] förklarade den ovanliga strukturella stabiliteten hos guldnanotrådarna för stora avstånd mellan guldatomerna. De visar att lätta atomer, troligtvis upptäckta i tidigare experiment, stabiliserar de experimentellt observerade strukturerna, vilka annars skulle vara ostabila för rena guldnanotrådar. Speciellt för väteföreningar är den ökade kohesionen ett resultat av en partiell elektrontätthetsöverföring från guld till väteatomerna (se Figur 3).

Jordens kärna

Genom "state-of-the-art"-beräkningsmetoder kommer den teoretiska fysiken som använder det mycket kraftfulla verktyget i formen av datorsimuleringar, att spela en allt större och viktigare roll inom många forskningsområden. Tack vare våra nya

metoder kan mycket komplicerade system ändå studeras noggrant. Detta öppnar nya spännande möjligheter att på ett realistiskt sätt behandla ett material. Till exempel har övergångszonen mellan jordens kärna och den undre manteln på cirka 3000 kilometers djup mycket speciella egenskaper. Genom att använda en speciell cell, där diamanthärlor kan tvingas samman mot ett centrum och där sätta ett materialprov under högt tryck, upphettat med laser, har forskarna kunnat studera hur järn och kiseldioxid reagerar och i vilka proportioner de bildar de föreningar som ger denna övergångszon dess speciella egenskaper. För att bekräfta de experimentella resultaten har vi gjort teoretiska beräkningar av vilka olika kombinationer som uppstår mellan kända grundämnen vid det tryck det är fråga om. Resultaten visar att vid dessa höga tryck så reagerar inte järn och kiseldioxid med varandra utan föreningar av järn och kisel separeras i stället till i det närmaste rent järn och en speciell, mycket kiselrik förening. Denna kiselförening har högre täthet än manteln men lägre än kärnan och ansamlas därför i övergångszonen mellan kärna och mantel. Det är också denna kiselförening som besitter denna oväntat höga elektriska ledningsförmåga som kan förklara varför jordaxeln bringas ur sitt normala kraftfält och kan bringas i en vinglande rörelse [4].

Vi är tacksamma mot L. Vitos, N. V. Skorodumova, S. I. Simak, och P. Olsson för hjälp med figurer till denna artikel.

Referenser

- [1] L. Vitos, I. A. Abrikosov, and B. Johansson, "Anisotropic lattice distortions in random alloys From first-principles theory", *Phys. Rev. Lett.* **87**, 156401 (2001).
- [2] J. Wallenius, I. A. Abrikosov, R. Chakarova, C. Lagerstedt, L. Malerba, P. Olsson, V. Pontikis, N. Sandberg, D. Terentyev, "Development of an EAM potential for simulation of radiation damage in Fe-Cr alloys", *J. Nucl. Mat.* **329-333**, 1175 (2004).
- [3] N. V. Skorodumova and S. I. Simak, "Stability of gold nanowires at large Au-Au separations", *Phys. Rev. B - Rapid Commun.* **67**, 121404 (2003).
- [4] L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, F. Langenhorst, D. Dobson, D. Rubie, C. Gessmann, I. A. Abrikosov, B. Johansson, V. I. Baykov, L. Vitos, T. Le Bihan, W. A. Crichton, V. Dmitriev, and H.-P. Weber, "Iron-silica interaction at extreme conditions and the electrically conducting layer at the base of Earth's mantle", *Nature* **422**, 58 (2003).

IGOR A. ABRIKOSOV,
INSTITUTIONEN FÖR FYSIK OCH
MÄTTEKNIK, LINKÖPINGS UNIVERSITET

WEINE OLOVSSON,
FYSISKA INSTITUTIONEN,
UPPSALA UNIVERSITET

JANNE WALLENIUS,
KUNGLIGA TEKNISKA HÖGSKOLAN,
STOCKHOLM

Vårt delade säkerhetsansvar

Våren och sommaren har varit dyster ur ett säkerhetsperspektiv. Ett stort antal dataintrång av mer eller mindre allvarlig grad har gjorts på en lång rad universitet. Inkräktarna har varit särskilt intresserade av superdatorcentra och deras användargrupper.

NSC fick också sin släng av slevan i början av sommaren, då intrång gjordes på Monolith och ytterligare ett antal system. Skadorna kunde begränsas i och med att intrången snabbt upptäcktes, och inga användardata förlorades. Arbetet med att städa upp och inte minst att verifiera integriteten hos övriga system ledde dock till långa driftsstopp, vilket naturligtvis orsakade problem för våra användare. Vi beklagar detta.

Intrången är polisanmälda av oss och andra universitet, och förundersökning pågår.

Den huvudsakliga intrångsvägen har varit via användarkonton som fått sina lösenord stulna. På system som inkräktarna har fått kontroll över har de bytt ut ssh-klienten till en modifierad version som omärkligt loggar de lösenord som användarna skriver in för att logga in på andra system. Med hjälp av dessa kan inkräktarna komma in på nya system, och där använda lokala säkerhetshåll för att få systemprivilegier. Inkräktarna har också försökt knäcka konton som haft dåliga lösenord.

Vad kan man då göra för att stoppa sådana här intrång? Vi har lagt mycket jobb på att säkra och övervaka våra system, men i slutändan vilar säkerheten i användarnas händer.

Goda säkerhetsvanor behöver inte vara betungande för användaren, men kan göra inkräktarnas jobb mycket svårare. Nedan följer några av de viktigaste punkterna.

Använd bra lösenord

Vikten av bra lösenord kan inte överskattas. Vi har sett fall där en användare hade en variant av sitt förnamn som lösenord på alla system, vilket inkräktarna naturligtvis tackade och bockade för. Gör inte så!

Använd inga namn eller existerande ord som lösenord. En hyggligt bra metod är att ta initialbokstäverna i en nonsensfras, gärna med varierande skiftlägen och specialtecken. Exempelvis kan frasen "Robinson-Kalle förlovat sig med Robert Aschberg." ge lösenordet "R-KfsmRA."

forts. s. 6

Ha separata lösenordsdomäner

Använd inte samma lösenord på mer än ett system. Även om inkräktarna kommer åt ditt lösenord på ett system, ska de inte få tillgång till alla system du har konton på.

Det är bättre att behöva skriva upp lösenorden på en lapp i skrivbordslådan än att använda samma lösenord överallt.

Lita på få system

Sträva efter att ange lösenord på så få system som möjligt. Undvik i möjligaste mån långa kedjor av inloggnings, eftersom det då blir många system som ska hantera dina lösenord. Med andra ord, koncentrera användandet av kommandon som ssh och scp till så få system som möjligt.

Använd kryptonycklar

Ett bra sätt att minska risken för lösenordsstöld är att helt enkelt inte använda lösenord för inloggning.

Genom att skapa sig ett kryptonyckelpar och låta ssh använda dem för autentiseringen kan man logga in på andra system utan att behöva ange sitt lösenord.

Det kan tyckas att användandet av kryptonycklar inte ger några större fördelar – kryptonycklar kan ju stjälas lika väl som lösenord – men använder man därtill ssh-agent och "agent forwarding" för att hantera sina nycklar vinner man i både säkerhet och bekvämlighet.

Detaljerna kring detta skulle räcka till en egen artikel, men man kan läsa mer i till exempel kapitel 4 av Damien Millers utmärkta ssh-introduktion på <http://www.mindrot.org/~djm/auug2002/ssh-tutorial.pdf>.

LEIF NIXON
NIXON@NSC.LIU.SE

Kalendarium

The 5th Annual Workshop on Linux Clusters for Super Computing

18–19 October, 2004, NSC, Linköping, Sweden
<http://www.nsc.liu.se/lcsc>

GCC 2004, The 3rd International Conference on Grid and Cooperative Computing

21–24 October, 2004, Wuhan, China.
<http://grid.hust.edu.cn/gc2004>

11th Workshop on the Use of High Performance Computing in Meteorology at ECMWF

25–29 October, 2004, Reading, England.
<http://www.ecmwf.int/newsevents/meetings/workshops/>

SC2004, High Performance Computing, Networking and Storage Conference

6–12 November, 2004, Pittsburgh, PA, USA.
<http://www.sc-conference.org/sc2004/>

5th IEEE/ACM International Workshop on Grid Computing

8 November, 2004, Pittsburgh, USA.
<http://www.gridbus.org/grid2004/>

ISPA-2004, Second International Symposium on Parallel Processing and Applications

13–15 December 2004, Hong Kong, China.
<http://www.comp.polyu.edu.hk/ISPA04>

HiPC 2004, The 11th International Conference on High Performance Computing

19–22 December, 2004, Bangalore, India.
<http://www.hipc.org/>

HPCA-11, The 11th International Symposium on High-Performance Computer Architecture

12–16 February, 2005, Palace Hotel, San Francisco, USA.
<http://www.hpcacnf.org/hpca11/>

European Grid Conference 2005

14–16 February, 2005, Amsterdam Science Park, Amsterdam, The Netherlands.
<http://genias.biz/egc2005/>

HPC2005, High Performance Computing Symposium Grand Challenges in Computer Simulation - SCS Spring Simulation Multiconference (SMC'05)

2–8 April 2005, San Diego, USA
<http://www.caip.rutgers.edu/hpc2005>

IPDPS 2005, 19th International Parallel & Distributed Processing Symposium

4–8 April 2005, Denver, Colorado, USA
<http://www.ipdps.org>

4th International Workshop On High Performance Computational Biology

4 April, 2005, Denver, Colorado, USA.
<http://www.hicomb.org>

First Workshop on System Management Tools for Large-Scale Parallel Systems

8 April, 2005, Denver, Colorado, USA.
Held in conjunction with IPDPS 2005
<http://www.ece.rutgers.edu/~yyzhang/ipdps-ws/>

CCGrid05, 5th IEEE/ACM Symposium on Cluster Computing and the Grid

9–12 May, 2005, Cardiff, UK.
<http://www.cs.cf.ac.uk/ccgrid2005/>



LINKÖPINGS UNIVERSITET

Nationellt Superdatorcentrum, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Tel: 013-28 26 18, fax: 013-28 25 35, e-post: info@nsc.liu.se

www.nsc.liu.se