

# Hoch- und Höchstleistungsrechner- versorgung der Hochschulen in NRW

## Ein Statusbericht

**des Arbeitskreises der Leiter der Hochschulrechenzentren (ARNW)**

**im Auftrag des Wissenschaftlichen Ausschusses des Landes (WAL)**

**Redaktionelle Bearbeitung: G. Schwichtenberg und H. Ziegler, Dortmund**

**W. Held und B. Neukäter, Münster**

Im April 1998, Vers. 4

### **Vorbemerkung:**

Dieser Statusbericht gibt den Ausstattungstand und die Anwendungsschwerpunkte nach den Kenntnissen der Hochschulrechenzentren wieder; es wird kein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben, denn es wurden keine hochschulweiten Erhebungen durchgeführt. Es ist keine Bedarfsanalyse und keine Analyse der besten Versorgung in NRW vorgenommen worden; dazu müßten die Hochschulen befragt werden. Für die Diskussion dieser offenen Punkte und weiterer Fragen stehen die Hochschulrechenzentren auf Wunsch zur Verfügung.

Natürlich sind die wiedergegebenen Daten für NRW präziser als für andere Bundesländer oder gar andere Länder in Europa oder der Welt, die zum Vergleich aufgenommen wurden.

### **Inhalt**

Zusammenfassung .....	2
Allgemeine Bemerkungen .....	3
Aufgabenfelder für Hoch- und Höchstleistungsrechner in NRW .....	4
Ausstattung in NRW und anderswo .....	6
Bewertungen, Schlußfolgerungen und offene Fragen .....	11
Gesamtdiskussion aller DV-Ausstattungen .....	15

## Zusammenfassung

Die Anwendungen für Hoch- und Höchstleistungsrechner kommen in NRW wie überall auf der Welt vor allem aus den Fachbereichen Physik, Chemie, Mathematik, Informatik und den Ingenieurwissenschaften. In zunehmendem Maße werden große Server für die Informationsbereitstellung, -aufbereitung und -archivierung eingesetzt, nicht zuletzt wegen der wachsenden Bedeutung multimedialer Anwendungen. In Zukunft ist mit einer starken Zunahme des Bedarfs zu rechnen.

In Aachen, Bielefeld, Dortmund, Düsseldorf, Duisburg, Köln und Paderborn sind Hochleistungsrechner vorhanden. In Bochum, Essen und Wuppertal sind ebenfalls leistungsfähige Rechner installiert, jedoch unterhalb des Hochleistungsrechnerniveaus. Dortmund, Düsseldorf, Duisburg, Essen und Köln betreiben ihre Rechner im Verbund. Parallelrechner sind derzeit noch nicht in Bonn, Hagen, Münster und Siegen vorhanden. Höchstleistungsrechner sind an Nordrhein-Westfälischen Hochschulen nicht anzutreffen.

Die Hochleistungsrechner sind an allen Standorten ausgelastet, die Warteschlangen werden nicht leer. Da die Nutzung der Systeme nur im Rahmen des Verfügbaren möglich ist, kann man den wirklichen Bedarf nicht erkennen. Aus Vergleichen mit anderen Bundesländern könnte man jedoch schließen, daß in NRW allenfalls nur die Hälfte der benötigten Kapazität verfügbar ist. Ähnliche Erfahrungen werden auch aus den NRW-Hochschulrechenzentren berichtet. Der vermutete Fehlbedarf sollte durch eine Befragung der Hochschulen bestätigt werden. Höchstleistungsrechenkapazität wird in Jülich, Stuttgart, Karlsruhe und anderen deutschen Höchstleistungsrechenzentren in Anspruch genommen, teilweise sogar im Ausland.

Hochleistungsrechner werden in den Rechenzentren qualifiziert betreut und können dort effizient und kostengünstig betrieben werden. Die landesweite Heterogenität der Ausstattung hat sich bewährt. Das Konzept »Hochleistungsrechner im Verbund« sollte weiter verfolgt werden. Die Verstetigung der Ausbaumittel für Hochleistungsrechner ist sehr wünschenswert, weil ihr Ausbau dann flexibler an den Bedarf angepaßt und Vorteile aus der laufenden Verbesserung des Preis- und Leistungsverhältnisses erzielt werden können.

Die Installation eines Höchstleistungsrechners an einer Hochschule in NRW ist einerseits mit sehr hohen Kosten verbunden. Eine nicht vorhandene, aber notwendige Ausstattung kann andererseits jedoch großen Schaden durch Wettbewerbsverlust zur Folge haben. Hier sollte die Entscheidung über die weitere Vorgehensweise mit einer externen Evaluation der bisherigen und einer Einschätzung der künftigen Nutzung einhergehen. Es scheint ferner notwendig zu sein, Forschungsziele festzulegen, für deren Bearbeitung Größtrechner benötigt werden. Diese Forschungsziele sollten unter Aspekten der technologische Weiterentwicklung und der Profilierung der Hochschulen in NRW festgelegt werden. Es sollten Fragen mit wirtschaftlichem Potential und die Technologiepolitik des Landes eingebracht werden.

Entscheidungen zur Ausstattung mit Hoch- und Höchstleistungsrechnern können zu höheren Investitionen als bisher führen. Daher müssen sie im Zusammenhang mit allen anderen DV-Investitionen und laufenden Kosten der DV gesehen werden. Es ist kritisch zu prüfen, ob man an anderer Stelle durch veränderte Konzepte z.B. zu einer besseren Auslastung von Geräten, zu geringerem Betreuungsaufwand und damit u.U. zu Einsparungen kommen kann, um die DV insgesamt finanzieren zu können.

## Allgemeine Bemerkungen

Es gibt verschiedene Möglichkeiten der Leistungssteigerung von Rechnern. Dabei wird den Parallelrechnern auch in Zukunft eine wichtige Rolle zufallen, wenn die Rechenleistung zur Lösung anstehender Probleme weiter gesteigert werden muß, da die Erhöhung der Taktrate und damit die Reduktion der Zykluszeit an physikalische Grenzen stößt.

Nach M. J. Flynn<sup>1</sup> unterscheidet man bei den Rechnern SISD-, SIMD-, MISD- und MIMD-Typen. Diese Klassifikation spielt heute praktisch aber keine allzu große Rolle mehr.

Für Parallelrechner, evtl. in Verbindung mit Vektoreinrichtungen, ist die Unterscheidung nach den Speichermodellen wichtiger. Man unterscheidet Systeme mit Shared Memory<sup>2</sup>, Distributed Memory<sup>3</sup> und Virtual Shared Memory<sup>4</sup>. Die Prozessoren und Speicher eines Parallelrechners sind in der Regel eng und schnell gekoppelt und in einem Gehäuse untergebracht. Möglich ist auch die lose Kopplung von Skalarrechnern über Rechnernetze. Diese Rechner können dann wie ein Parallelrechner arbeiten. Hier ist die Netz-Bandbreite oft ein großer Engpaß. Werden ganze Parallelrechner über Netze gekoppelt, so spricht man von Metacomputing der Parallelrechner.

Die objektive Bewertung der Rechenleistungen für Parallelrechner ist noch schwieriger als für herkömmliche Rechner. Sie hängt entscheidend ab von der Aufgabenstellung und der Rechnerarchitektur. Folgende Maße für die Rechenleistung liegen für viele Systeme vor und werden als erste Näherung immer wieder herangezogen: Rpeak, Rmax und TPP (toward peak performance)<sup>5</sup>. Die Peak-Leistung Rpeak ist ein theoretischer Maximalwert. Rmax und TPP wurden bei der Lösung großer linearer Gleichungssysteme gemessen; bei Rmax wurde ein System mit möglichst vielen Unbekannten gelöst, bei TPP waren es 1.000 Unbekannte. Zwischen diesen Maßen besteht in nicht zu engen Grenzen ein gewisser Zusammenhang. Wir haben in diesem Statusbericht diese Maße notiert, soweit sie uns vorlagen. Bei Vergleichen haben wir aus Gründen der Einfachheit die Peak-Leistung verwendet. Weitere Leistungsmerkmale sind die SPECmark-Werte (SPECint-rate, SPECfp-rate,...)<sup>6</sup>, die aus standardisierten Programmen unterschiedlicher Art ermittelt werden.

Das größte Problem für den breiten Einsatz der Parallelrechner ist das Fehlen eines durchgängigen Programmierparadigmas. Für unterschiedliche Anwendungen sind unterschiedliche

---

<sup>1</sup> M. J. Flynn: Some computer organizations and their effectiveness, IEEE Trans. Comput. C-21, 1972, 948-960

<sup>2</sup> Shared Memory: Alle Prozessoren greifen auf einen gemeinsamen Arbeitsspeicher zu, wobei die einzelnen Prozessoren in der Regel ein eigenes Cache-Memory haben. Shared Memory Systeme sind relativ leicht zu programmieren. Dieser Speichertyp ist jedoch in der Vergangenheit im allgemeinen nur für bescheidene Prozessorzahlen realisierbar gewesen (z.B. ca. 16); neuerdings werden allerdings schon Systeme mit 64 und 128 Prozessoren angeboten.

<sup>3</sup> Distributed Memory: Jeder Prozessor besitzt einen eigenen Arbeitsspeicher. Ein Datenaustausch erfolgt nach Anfrage an die CPU, in deren lokalem Speicher die Daten liegen. Rechner dieses Typs sind auf leistungsfähige interne Datenübertragungskanaäle angewiesen. Die Programmierung ist relativ aufwendig.

<sup>4</sup> Virtual Shared Memory: Ein gemeinsamer Speicher wird auf einem Rechner mit Distributed Memory simuliert. Das erleichtert die Programmierung.

<sup>5</sup> J. J. Dongarra, Performance of Various Computers Using Standard Linear Equations Software (Linpack Benchmark Report), University of Tennessee Computer Science Technical Report, CS-89-85, March 10, 1998. Aktuelle Version: <http://performance.netlib.org/performance/html/PERFORM.ps> bzw.: <http://performance.netlib.org/performance/html/PDStop.html>

<sup>6</sup>Siehe: <http://www.specbench.org>

Programmiermodelle geeignet, die sich ihrerseits in unterschiedlicher Weise auf die zur Verfügung stehende Hardware abstützen, so daß eine universelle Systemlösung nicht machbar erscheint. Dies bedeutet, daß bei der DV-Versorgung des Landes eine gewisse Heterogenität in den Systemstrukturen sinnvoll ist. Heterogenität ist also einerseits recht wichtig. Heterogenität beinhaltet aber andererseits für Nicht-Spezialisten die Gefahr, zu mangelhaften Entscheidungen bei der Auswahl der geeigneten Plattform für eine Programmieraufgabe zu kommen. Deshalb sind kompetente Ansprechpartner notwendig, um über die verschiedenen Möglichkeiten aufzuklären und die ersten Schritte einfacher werden zu lassen. Diese Ansprechpartner müssen vor Ort zeitlich ausreichend verfügbar sein.

## **Aufgabenfelder für Hoch- und Höchstleistungsrechner in NRW**

Hochleistungsrechner werden vornehmlich für aufwendige numerische Berechnungen in den Naturwissenschaften und in technischen Disziplinen eingesetzt. Dazu einige Beispiele aus NRW.

Die ersten drei Themen sind als klassisch zu bezeichnen. Aufgaben dieser Art werden seit langem bearbeitet. Es handelt sich eher um Themen der Grundlagenforschung. Den entsprechenden Wissenschaftlern ist die Computer-Nutzung geläufig. Die Inanspruchnahme von Rechenkapazität wächst kontinuierlich weiter an, sie ist extrapolierbar:

- Erforschung der mechanischen, elektrischen und magnetischen Eigenschaften von geordneten und ungeordneten Festkörpern in der Physik
- Berechnungen von quantenphysikalischen Phänomenen der Physik durch Quantenchromodynamik, Quantenelektrodynamik, SU-Theorien, Eichtheorien und Gittereichtheorien
- Wenig-Teilchen Systeme

Die Themen der folgenden Gruppe können erst durch den Einsatz von Rechnern angegangen werden. Sie erfordern erhebliche Rechenkapazitäten:

- Polymerphysik
- Simulation von Makromolekülen
- Klassische und quantenmechanische Molekulardynamik in Physik und Chemie
- Fluidodynamik (CFD) bei grundlegenden Untersuchungen der physikalischen Chemie, bei anwendungsorientierten Untersuchungen in der Chemietechnik, in Verbindung mit der Konstruktion von Aggregaten im Maschinenbau, in der Geophysik und in weiterem Sinne in der Meteorologie
- Mustererkennung und Experimentsimulation in der Elementarteilchenphysik

Die nächste, neuere Themengruppe ist ebenfalls erst durch die Verfügbarkeit großer Rechnerleistungen möglich geworden. Es handelt sich eigentlich um ältere Themen, die nun aber in neuen Anwendungsfeldern, also nicht unbedingt in der Grundlagenforschung, eingesetzt werden. Verfügbare Rechner und Software gestatten eine neue Qualität der Untersuchungen und Problemlösungen, die dafür jedoch sehr nahe an reale Anwendungen heranführen. Der Rechenbedarf steigt aber nicht nur durch die genaueren Rechnungen, sondern vor allem auch durch die neuen Nutzergruppen an. Da es sich hier um anwendungsnahe Themen handelt, werden Aufgaben dieser Art auch aus Gründen des wirtschaftlichen Wettbewerbs vorrangig zu bearbeiten sein. Wenn diese Aufgaben nicht in NRW gelöst werden können, werden sich schnell andere Hochschulen finden.

- Mehrfeld-Probleme (Fluid-Struktur-Interaktion, thermomechanische Kopplungen usw.)
- Simulation des Verhaltens in mechanischen und technischen Systemen und Prozessen
- Nichtlineare Berechnungen von Tragstrukturen
- Algorithmische Zahlentheorie in der Mathematik
- Evolutionäre Prozeßoptimierung in Maschinenbau und Informatik
- Teilchen- und Fluidsimulationen in der Plasmaphysik
- Nichtlineare Dynamik
- Simulation von neuronalen Netzen in der Informatik und in ihre Anwendungen
- Simulation verfahrenstechnischer Prozeßketten z.B. zur Energiewandlung
- Virtual Reality

Schließlich ist eine vierte Gruppe von Aufgaben zu nennen, die ebenfalls Ressourcen in steigendem Umfang benötigt. Diese Anwendungen erfordern zwar nicht in jedem Fall höchste Rechenleistungen, stellen aber regelmäßig hohe Anforderungen an Speicherkapazitäten, interne Übertragungsraten, Vernetzung und Ein- und Ausgabe-Leistungen. Der Bedarf wächst dabei oft sehr schnell, etwa für die Bereitstellung von Ressourcen für alle Studierenden.

- Server für Informationsbereitstellung, -aufbereitung und -archivierung, u.a für Multimediaaufzeichnungen
- Mail-, News, WWW- und Dialog-Server (in großem Umfang auch für die Studierenden)
- Hochleistungsgrafik und -digitalisierung (i.a. noch keine Nutzung über Netze möglich)

Beispielsweise ergibt sich für eine Multimedia-Aufzeichnung mit einem angenommen Bild von 1.000\*1.000 Pixeln, einer Farbtiefe von 24 Bit und einer Bildwiederholrate von 25 Bildern/s ein Speicherbedarf von 270 Gbytes/h und eine Übertragungsrate von 600 Mbit/s. Diese Werte sind durch Kompression in der Regel höchstens auf 1/100 zu reduzieren; realistischer ist in vielen Fällen ein Kompressionsfaktor von 1/10. Speichert man mehrere Multimedia-Daten dieses Umfangs und geht man davon aus, daß mehrere Studierende gleichzeitig auf diese Video-Daten zugreifen wollen, so erkennt man schnell, daß an allen Hochschulstandorten Hochleistungsserver zur Verfügung stehen müssen, wenn Multimedia ernsthaft angewendet werden soll. Die Bearbeitung multimedialer Daten (Videos) kann insbesondere für 3D-Videos außerdem sehr rechenaufwendig werden.

Von Anwendern selbst entwickelte parallelisierte Programme erreichen vermehrt Produktionsreife. Dabei wird in vielen Fällen mit großem Erfolg HPF (High Performance FORTRAN) eingesetzt. Mittels HPF können viele relativ leicht programmieren, wenn auch nicht immer die bestmögliche Rechenleistung erzielt wird. Der Programmierer kann die Verteilung von Daten und Programmteilen auf die Prozessoren durch Anweisungen steuern. In steigendem Umfang werden daneben für spezielle Aufgaben gefertigte kommerzielle Programmpakete eingesetzt, z. B.: Amsterdam Density Facility, ANSYS, CFD, Discover, FASTEST, Gamess, Gaussian, Molcas, Molpro und Wien95.

## Ausstattung in NRW und anderswo

In NRW verfügt keine Hochschule über einen Höchstleistungsrechner (Peak-Leistungen über 100 Gflop/s). Sieben Hochschulen - Aachen, Bielefeld, Dortmund, Düsseldorf, Duisburg, Köln, Paderborn - verfügen über Kapazitäten im Hochleistungsrechnerbereich (über 10 Gflop/s Peak-Leistung). Drei weitere Standorte - Bochum, Essen und Wuppertal - verfügen ebenfalls über leistungsfähige Parallelrechner, die jeweils zwischen 4 und 7,7 Gflop/s erbringen. Parallelrechner sind derzeit noch nicht in Bonn, Hagen, Münster und Siegen vorhanden. Nähere Angaben dazu in Tabelle 1, in der alle Vektorrechner und Parallelrechner mit mehr als 4 Prozessoren enthalten sind.

Bis auf die Vektorrechner von NEC und SGI/Cray sowie dem massiv parallelen Rechner SGI/Cray T3E sind alle wesentlichen Rechnerarten vertreten. Die Gesamtleistung aller Hochleistungsrechner (über 10 Gflop/s) an NRW-Hochschulen liegt dabei in der Größenordnung von 160 Gflop/s (Peak-Leistung). Die Gesamtleistung aller auch kleineren Parallel- und Vektorrechner (Tabelle 1) liegt bei 210 Gflop/s. Ca. 50% dieser Rechenleistung entfallen auf den NRW-Rechnerverbund (bestehend aus Dortmund, Duisburg, Düsseldorf, Essen und Köln) und auf die RWTH Aachen. Die Rechenleistung in Aachen ist auch für andere Hochschulen nutzbar. **Kapazitätsreserven sind jedoch nach den Angaben der Hochschulrechenzentren an den verschiedenen Standorten keine vorhanden; im Gegenteil beträgt der als Erfahrungswert sich zeigende Bedarf mehr als das Doppelte der vorhandenen Kapazität. Die Batch-Warteschlangen werden praktisch nicht leer.** In Paderborn ist die Mitnutzung durch Externe zwar möglich (Inanspruchnahme ca. 50%), es handelt sich aber ausschließlich um innovativ eingesetzte Systeme, die nicht im „Produktionsbetrieb“ genutzt werden können.

Hochschule	Hersteller	Modell	Anzahl Proz.	Rpeak (Gflop/s)	Rmax (Gflop/s)	TPP (Mflop/s)	Mitnutzung durch andere
Aachen	Fujitsu	VPP300/8	8	17,6	17,1	15488	Landesrechner
Aachen	Fujitsu	VX/1S	1	2,2	---	1936	nein
Bielefeld	HP	Exemplar V-Class	16	12,8	10,7	5367	später vorgesehen
Bielefeld	QSW	Quadrics QH1	128	6,4			möglich
Bielefeld	QSW	Quadrics QH1	128	6,4			möglich
Bielefeld	QSW	Quadrics QH2	256	12,8			ja
Bochum	SGI	Power Challenge	12	4,3	3,4	3000	
Bochum	SGI	Origin 2000	8	3,1	2,7	2000	
Dortmund	IBM	SP	36	20,2	13,9	15840	NRW-Rechnerverbund
Duisburg	Conex/HP	SPP S2000	32	23,0	15,0		NRW-Rechnerverbund
Düsseldorf	SGI	Origin2000/Onyx2	32	12,5	10,9	10415	NRW-Rechnerverbund
Essen	IBM	RS/6000 SP	16	7,7	5,8	6496	ja
Köln	SGI	Power Challenge	16	4,8	3,7	3033	wird landesweit genutzt
Köln	Sun	Enterpr. 10000	40	20,0	17,1		wird landesweit genutzt
Paderborn	SNI	SCI-Cluster	64	19,2			
Paderborn	Parsytec	CC-48	48	12,8			
Paderborn	Parsytec	GC/PP-64	64	10,2			
Paderborn	Parsytec	Gcel-1024	1024	4,4			
Wuppertal	TMC	CM2			0,3	---	ja
Wuppertal	TMC	CM5	32	4,0	1,9	---	ja
Wuppertal	QSW	Quadrics Q4	32	1,6			

Tab. 1: Vektor- und Parallelrechner mit mehr als 4 Prozessoren in NRW

An allen Universitäten stehen außerdem Compute-Server mit bis zu 4 Prozessoren (neben vielen anderen Servern) bereit, die in der Regel Rechenleistung im Batch-Betrieb anbieten und eine Grundversorgung für alle Fachbereiche der jeweiligen Hochschule bereitstellen. Ihre Leistung liegt unterhalb der Leistung der in Tabelle 1 aufgeführten Rechner (siehe Tabelle 2). Alle anderen kleineren Server, die in den Hochschulen in großer Zahl genutzt werden, sind hier nicht erfaßt worden.

Hochschule	Hersteller	Modelle	Anzahl Proz.	Hauptspeicher (MB)	Anzahl Server desselben Modells	TPP (Mflop/s)	Anwendungsfelder
<b>Aachen</b>	HP	J282	2	1024	2	994	Softwareerstellung, Visualisierung, CFD, Chemie, FEM
	SGI	Origin 200	4	4098	2	1272	
	SGI	Challenge M	1	384	2	261	
	SGI	Onyx 2000	4		1	1292	
	IBM	RS/6000-595	1	512	1	440	
	IBM	RS/6000-591	1	256	1	274	
	IBM	RS/6000-590	1	512	2	237	
<b>Bielefeld</b>	HP	J282	2	400	3	994	allgem. Nutzung
<b>Bochum</b>	IBM	RS/6000-595	1	1024	1	440	
	SUN	E3002 UltraSPARC		512	1	268	
<b>Bonn</b>	IBM	RS/6000-530H	1	128	1	55	naturwiss. Institute
	IBM	RS/6000-560	1	128	1	67	
<b>Dortmund</b>	IBM	RS/6000-990	1	1536	1	255	allgem. Nutzung, Beilstein
	IBM	RS/6000-43P 133MHz	1	128	11		Chemie, Physik, E-Technik, Chemietechnik
	Sun	Enterprise 4000	4	1024			
<b>Duisburg</b>	IBM	RS/6000-550 und andere	1	128	7	insges. 200	Physik
	Sun	Enterprise 4000	4		1	871	
	HP	HP9000-K460	3		1	1300	
<b>Düsseldorf</b>	Sun	Enterprise 4000	4	2048	1	871	CIP-Pool
	Sun	SPARCserver 1000	4	1024	1		CIP-Pool
	Convex	C-3840	4	1024	1	425	alter Compute-Server
<b>Essen</b>	IBM	RS/6000-SP-Knoten	1	2048	3	440	Chemie, Physik
<b>Köln</b>	IBM	RS/6000-990	1	2048	1	254	interaktiver Betrieb, Statistik
<b>Köln</b>	DEC	Alpha 7000/640	4		1	538	
<b>Münster</b>	IBM	RS/6000-590	1	256	3	237	allgem. Nutzung
	IBM	RS/6000-390	1	128	1	181	
<b>Wuppertal</b>	SGI	Origin 200	4	4098	2	1272	FEM, Chemie
	SGI	Challenge I	4	1024	3	1044	allgem. Nutzung

Tab. 2: Compute-Server mit bis zu 4 Prozessoren

Teilkapazitäten aus Jülich, Stuttgart und Karlsruhe können bundesweit genutzt werden. Die Kapazitäten des LRZ München und des ZIB Berlin (Norddeutscher Rechnerverbund) stehen begrenzt überregional zur Verfügung. Eine Nutzung der Kapazitäten in Berlin und München durch Hochschulen aus NRW ist nicht bekannt. Die Rechner in Jülich, Karlsruhe und Stutt-

gart werden von Gruppen fast aller Hochschulen in NRW genutzt. Tabelle 4 zeigt, welche Fachbereiche nach Kenntnis der Hochschulrechenzentren erhebliche Rechnerkapazitäten nutzen.

Für die Nutzer der Hochschulen in Deutschland stehen - mit unterschiedlichen Zugangsberechtigungen – größere Hoch- und Höchstleistungsrechner an folgenden Standorten zur Verfügung (Tab.3).

Computer	Standort	Peak-Leistung in Gflop/s
SGI/Cray T3E	MPI/IPP Garching	403
SGI/Cray T3E	Forschungszentrum Jülich	307
SGI/Cray T3E	Forschungszentrum Jülich	230
SGI/Cray T3E	Universität Stuttgart	307
NEC SX-4	Universität Stuttgart	64
SGI/Cray T3E	DWD Offenbach	204
SGI/Cray T3E	ZIB Berlin	137
Fujitsu VPP700	LRZ München	75
IBM SP	Universität Karlsruhe	68

Tab. 3: Größere Hoch- und Höchstleistungsrechner in Deutschland

	Parallelrechner vor Ort	Biol./Med.	Chemie	Informatik	Ing.-wiss.	Mathem.	Physik	Pharma.
<b>Aachen</b>	ja		1		3		3	
<b>Bielefeld</b>	ja		1			1	1	
<b>Bochum</b>	ja	1	1		3		3	
<b>Bonn</b>	nein		2				2	
<b>Dortmund</b>	ja		3		1	3	3	
<b>Duisburg</b>	ja		1		1	2	1	
<b>Düsseldorf</b>	ja	1	1	1		1	1	1
<b>Essen</b>	ja		3		1		3	
<b>Hagen</b>	nein				2	2		
<b>Köln</b>	ja		1	1			1	
<b>Münster</b>	nein		2				2	
<b>Paderborn</b>	ja			1				
<b>Siegen</b>	nein							
<b>Wuppertal</b>	ja			2	3	3	3	

Tab. 4: Fachbereiche mit erheblichem Rechenbedarf (Nutzung vor Ort=1, extern=2, beides=3)

In Tabelle 5 ist der Umfang der Nutzung einiger externer Höchstleistungsrechner durch Hochschulen aus NRW in Prozessorstunden pro Monat angegeben. Die Angaben stammen von den Betreibern der Rechner. Sie sind nicht vollständig; z. B. fehlen Angaben für die SGI/Cray T3E der Universität Stuttgart, da dieser Rechner erst kürzlich installiert wurde und uns konkrete Zahlen noch nicht zur Verfügung standen. Weiterhin sind zum Teil Gemeinschaftsprojekte mit Forschern aus anderen Bundesländern nicht erfaßt, die einen erheblichen Umfang haben. Zum Beispiel werden in einem Gemeinschaftsprojekt von DESY in Hamburg und der Theoretischen Physik in Münster zusammen 70.000 Stunden pro Monat auf der T3E in Jülich in Anspruch genommen und in Tab. 5 nicht erfaßt (das sind 143% der angegebenen T3E-Nutzung). Geringfügige Diskrepanzen zwischen den Tabellen 4 und 5 zeigen darüber hinaus, daß von den Rechenzentren auch nicht alle Aktivitäten der Fachbereiche erfaßt wurden.

Die Werte beziehen sich auf den jeweiligen Rechnertyp, sind also nicht unmittelbar vergleichbar. Um dennoch eine grobe Vorstellung von der aufgewandten Rechenleistung zu vermitteln, könnte man (unter allen Vorbehalten) die angegebenen Rechenleistungen zur Leistung des Landesrechners vom Typ Fujitsu VPP-300/8 in Beziehung setzen. Dabei käme man auf etwa die vierfache Rechenleistung, die außerhalb der Hochschulen in Anspruch genommen wird.

	HLRZ Jülich (Cray T90) Prozessor- Stunden/Monat	HLRZ Jülich (Cray T3E) Prozessor- Stunden/Monat	SSC Karlsruhe (IBM SP) Prozessor- Stunden/Monat	HLRS Stuttgart (NEC SX-4) Prozessor- Stunden/Monat	DKRZ Hamburg (Cray C90) Prozessor- Stunden/Monat
<b>Mflop/s pro Proz.</b>	<b>1800</b>	<b>900</b>	<b>480</b>	<b>2000</b>	<b>950</b>
Aachen	255	1.000		137	
Bielefeld	130	14.800		160	
Bochum	167	4.800			
Bonn	170	2.500			112
Dortmund	85	850			
Duisburg	13	2.400			
Düsseldorf		700			
Essen		2.000	13.910		
Hagen					
Köln	305	4.000	4.570		20
Münster	65	5.660			
Paderborn		10.000			
Siegen		32			
Wuppertal	50	160			
<b>Summe</b>	<b>1.240</b>	<b>48.902</b>	<b>18.480</b>	<b>297</b>	<b>132</b>

Tab.5: Inanspruchnahme von Höchstleistungsrechnern außerhalb der Hochschulen in NRW

Von den 500 leistungsstärksten Computern weltweit<sup>7</sup> befinden sich nur 41 in Deutschland (266 in den USA, 94 in Japan). Davon stehen 32 Rechner Hochschulen und öffentlichen Forschungseinrichtungen zur Verfügung. Von diesen 32 sind acht in NRW beheimatet, wovon drei (Köln, Aachen, Dortmund) an Hochschulen angesiedelt sind.

Werden ausschließlich die Rechenkapazitäten der Hochschulen verglichen, so führen bei Bezugnahme auf die Bevölkerung Finnland, Schweden, Norwegen und Japan. Erst an fünfter Stelle hinter der Schweiz findet sich Deutschland (Abbildung 1a). Bezogen auf das Bruttonationalprodukt (BSP)<sup>8</sup> liegen USA und Japan vorn. Deutschland und Großbritannien folgen im Abstand gleichauf (Abbildung 1b). Kanada und Italien haben übrigens keine Höchstleistungsrechner aus Top500 in ihren Hochschulen.

Im Vergleich der deutschen Bundesländer führen bezogen auf die Bevölkerung Berlin und Baden-Württemberg vor Mecklenburg-Vorpommern, Sachsen, Hamburg, Bayern und NRW (Abbildung 2a). Dabei ist zu berücksichtigen, daß in Berlin das Konrad-Zuse-Zentrum mit erfaßt wurde, weil es für die Versorgung der Hochschulen zuständig ist. Bei Bezugnahme auf das Bruttoinlandsprodukt (BIP)<sup>9</sup> liegt Baden-Württemberg vor NRW, Berlin, Bayern und Sachsen (Abbildung 2b).

Beim Vergleich mit den anderen Bundesländern erkennt man, daß NRW bei der Versorgung eine andere Strategie verfolgt und eine möglichst breite Ausstattung mit Hochleistungsrechenkapazität anstrebt. Das geht z.B. aus Abbildung 3 hervor, in der die Anzahl der erfaßten Parallel- und Vektorrechner aufgetragen wurde. NRW hat eine deutlich höhere Rechnerdichte als die anderen Bundesländer. Zu berücksichtigen ist allerdings, daß die Erhebung in NRW genauer sein dürfte als für die anderen Bundesländer.

Vergleicht man die Bundesländer bezüglich der maximal 4 größten an Hochschulen installierten Rechner, so liegt wiederum Baden-Württemberg deutlich vor Berlin und Bayern (Abbildung 4).

## **Bewertungen, Schlußfolgerungen und offene Fragen**

Das Hoch- und Höchstleistungsrechnen war und bleibt eine notwendige Voraussetzung für konkurrenzfähige Forschung und Entwicklung in den naturwissenschaftlichen und technischen Fächern sowie zunehmend auch in Bereichen wie Medizin, Wirtschaftswissenschaften, Geisteswissenschaften und Kunst. Bisher war die Gruppe der Nutzer von Hoch- und Höchstleistungsrechnern relativ klein. So beanspruchen typischerweise die fünf größten Nutzer einer Hochschule 60% der vorhandenen Rechenleistung; 90% der Rechenleistung wird von den zehn größten Nutzern verbraucht. Für den Einsatz eines Parallelrechners, insbesondere seine Programmierung, ist bisher spezialisiertes Wissen erforderlich. Dieses Wissen ist noch nicht weit verbreitet. Die ohnehin begrenzte Rechenkapazität und das aufwendige Betreuungsverfahren stellen Hürden und keine Motivation zur Nutzung derartiger Rechner dar. In Zukunft wird sich das Hochleistungsrechnen auf internationaler Ebene wohl einem sehr viel größeren Nutzerkreis erschließen, wenn einfach anzuwendende parallelisierte Programmpakete verstärkt auf den Markt kommen und das Anwendungsspektrum sich erweitert. Der beschränkende Faktor ist dann nur noch die angemessen disponierbare Rechenleistung.

---

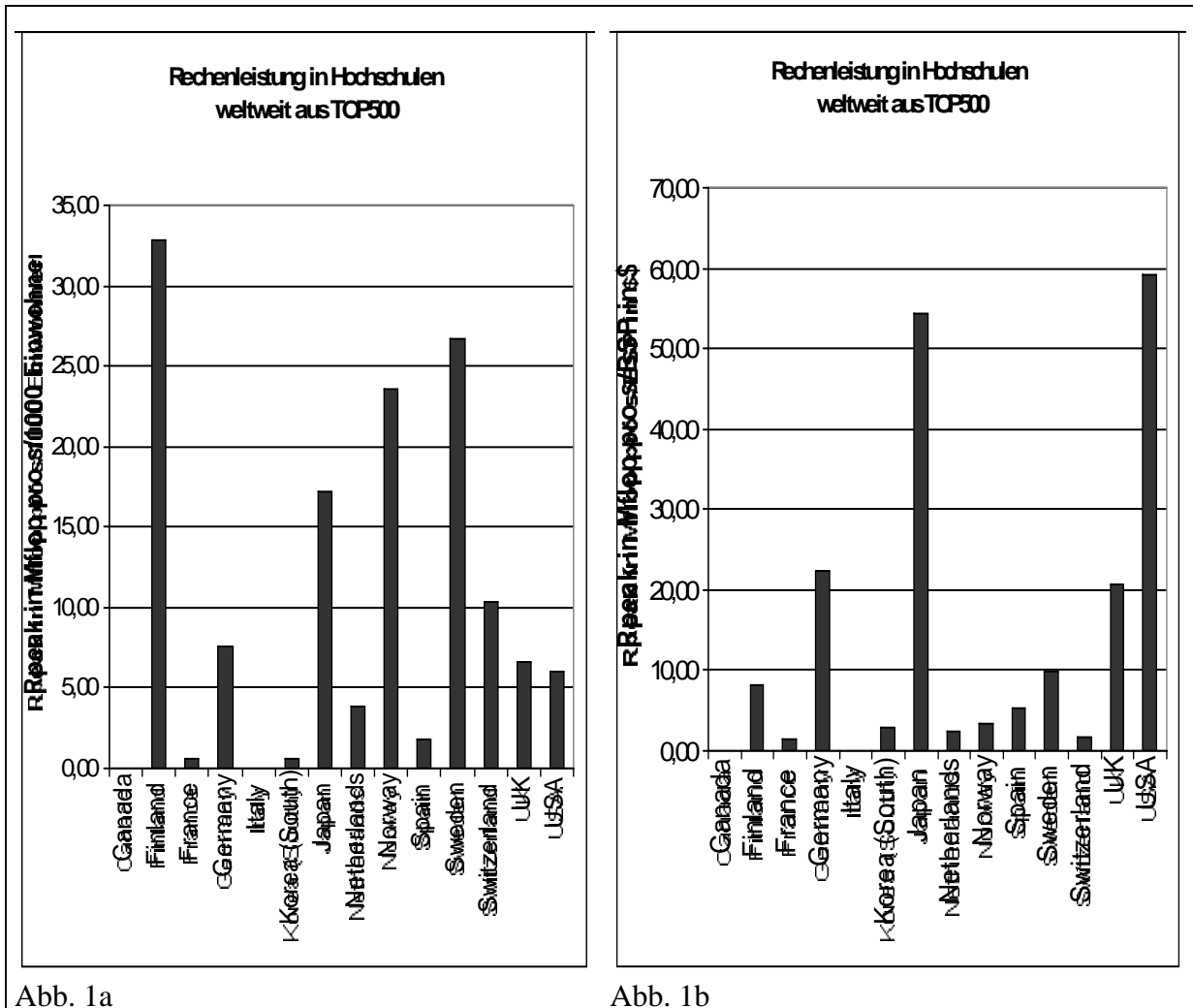
<sup>7</sup> J.J. Dongarra, H.-W. Meuer u. E. Strohmaier: Top500 Supercomputer Sites 2/97, RZ der Universität Mannheim, RUM-Bericht 53/97, 11/97 und <http://parallel.rz.uni-mannheim.de/top500/>

<sup>8</sup> Bevölkerungszahlen der Länder und Daten zum BSP: Der Fischer Weltatlas '98, Frankfurt/Main 1997

<sup>9</sup> Bevölkerungszahlen der Bundesländer und Daten zum BIP: Institut der deutschen Wirtschaft, Zahlen zur wirtschaftlichen Entwicklung der Bundesrepublik Deutschland 1996, Köln 1996

## Hochleistungsrechner

Hochleistungsrechner sind nach den Aussagen der entsprechenden Rechenzentren von den Nutzern akzeptiert. Sie werden mit garantierter Betriebsgüte in den Rechenzentren kompetent angeboten und sind dort in der Regel besser auslastbar als entsprechende Server in den Fachbereichen.



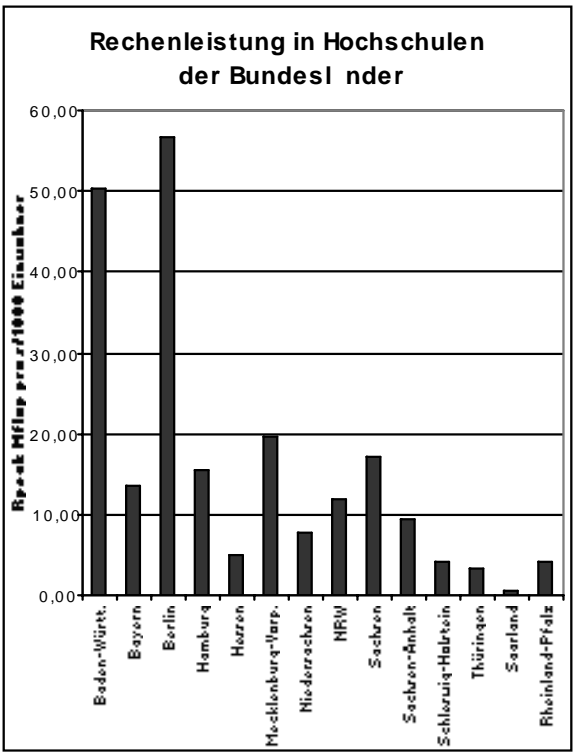


Abb. 2a

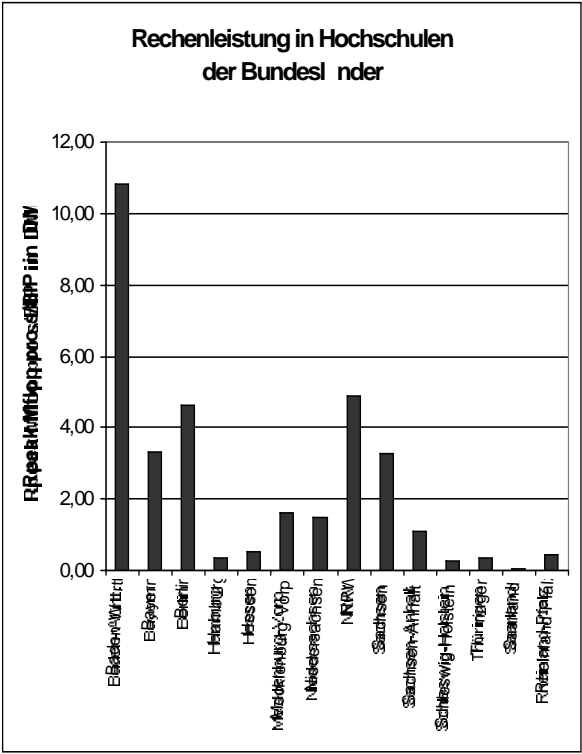


Abb. 2b

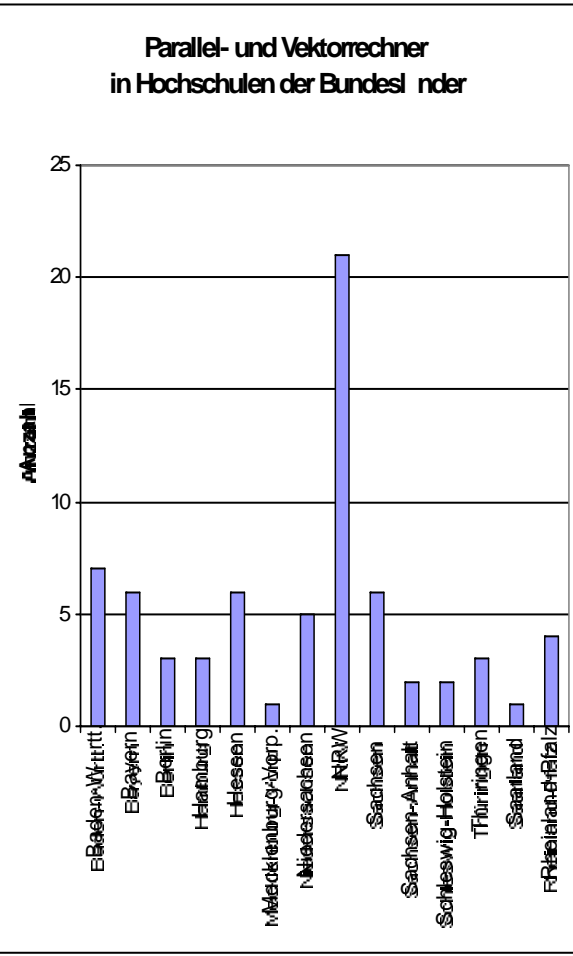


Abb. 3

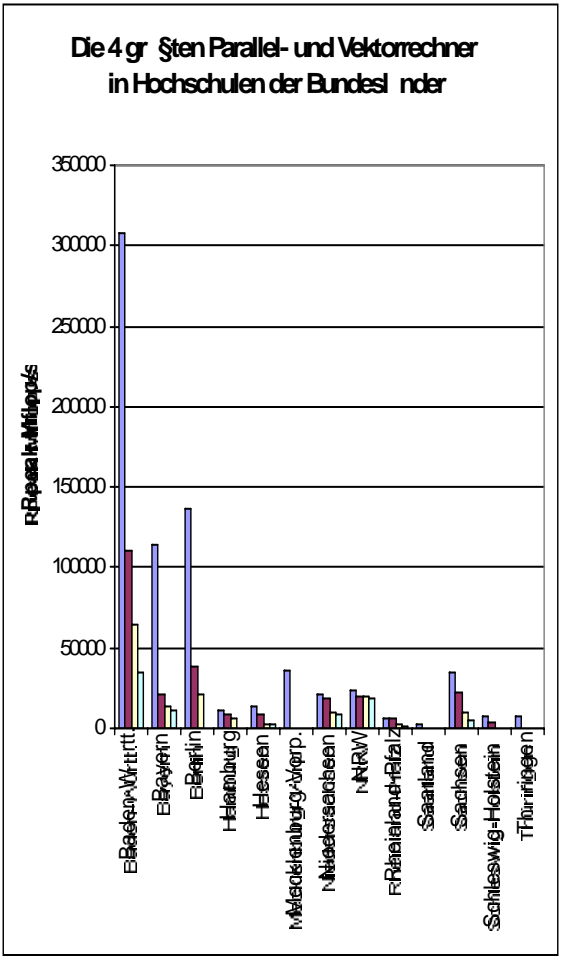


Abb. 4

Die landesweit beachtete Heterogenität der Systeme hat sich bewährt. Die Fortsetzung der heterogenen Ausstattung eröffnet Nutzern mit relativ geringem Aufwand die jeweils benötigten günstigsten Ressourcen, wenn, wie in NRW gegeben, die erforderliche Netzkapazität zur Verfügung steht. Heterogenität hilft auch ein wenig mit, die „Auswahlkämpfe“ um das vermeintlich beste Produkt bei anstehenden Beschaffungen abzumildern und die Auswahlprozesse zu verkürzen. Wer dann vor Ort nicht zum Zuge kommt, findet in einer landesweit vernetzten Rechnerstruktur in einer anderen Hochschule gleichwertigen Ersatz. Metacomputing hält schließlich Höchstleistungsrechner von kleinen und mittleren parallelisierbaren Problemen frei. Höchstleistungsrechner können so auf sehr wenige Standorte in Deutschland beschränkt bleiben.

Viele der vorhandenen Hochleistungsrechner werden inzwischen auch für andere als Batch-Aufgaben genutzt (s.o.). Sie können außerdem der Bereinigung der an manchen Rechenzentren in viel zu großer Zahl vorhandenen kleinen Server dienen; ein Parallelrechner mit 50 Prozessoren ist deutlich einfacher zu betreiben als 50 eigenständige Server mit je einem Prozessor, die heute vielerorts anzutreffen sind. Die einzelnen Prozessoren eines Parallelrechners können ja voneinander unabhängige Programme bearbeiten und verschiedenen Aufgaben gewidmet werden. Sie sind somit flexibel an die verschiedenen Aufgabenfelder anpaßbar. Hochleistungsrechner in Rechenzentren sind nach Aussagen der erfahrenen Rechenzentren wirtschaftlicher und mit weniger Personal zu betreiben als einzelne Server in kleinen „Nebenrechenzentren“. In der Industrie, die vielmehr unter Kostendruck arbeiten muß, wird der Konzentration der Ressourcen größte Aufmerksamkeit geschenkt und es wird entsprechend konsequent gehandelt. Auch die Hochschulen müßten diese neuen Konzepte und ihre Auswirkungen auf die zukünftigen Ausstattungen erproben.

Entgegen allen Prognosen ist der zentral in Anspruch genommene Rechenbedarf nirgendwo rückläufig. Mail-, Web- und File-Dienste wachsen überproportional. Selbst der totgesagte zentrale Dialogbetrieb wächst mit der Zahl der Nutzer weiter an, obwohl erst an einigen Hochschulen 50% der Studierenden und nicht 100%, wie von der Landesregierung erwünscht, als Nutzer gewonnen wurden.

Aus der Sicht der Hochschulen, die über Hochleistungskapazitäten verfügen, spielt das von der DFG einst eingeführte 4-Ebenen-Modell der Rechnerversorgung praktisch keine wesentliche Rolle mehr. Es wird nur noch ein 3-Ebenen-Modell gesehen, in dem Arbeitsplatzausstattungen, Hochleistungs- und Spezialserver in Rechenzentren und Größtrecher außerhalb der eigenen Hochschule Relevanz haben. Die Hochleistungs- und Spezialserver können, abgesehen von Batch-Anwendungen, wegen der vor Ort benötigten großen Datenmengen in der Regel nicht an weit entfernten Standorten in Anspruch genommen werden. Wenn diese Systeme vor Ort ausgelastet sind, führt jede zusätzliche Inanspruchnahme zu Betriebsstörungen. Die Nachfrage wächst dabei häufig schneller, als Erweiterungsbeschaffungen etwa im Rahmen von HBFG-Maßnahmen möglich sind. Deshalb muß die Ausstattung jeweils so bemessen sein, daß eine kurzfristige Steigerung der Nachfrage aufgefangen werden kann. Mit einer Verstärkung der verfügbaren Haushaltsmittel könnte darüber hinaus nach einer Anfangsausstattung der Geräte der Ausbau dem Bedarf folgen. Insbesondere könnten so die regelmäßigen Preis-/Leistungsgewinne ausgenutzt werden.

Diese Hochleistungsrechner müssen von den Hochschulen entsprechend ihren Gegebenheiten bedarfsbezogen ausgesucht und in eigener Verantwortung nutzbar sein, damit nachteilige Abhängigkeiten vermieden werden können. Das Konzept der am NRW-Rechnerverbund beteiligten Hochschulen scheint sich bewährt zu haben. Ein Erfahrungsbericht liegt aber derzeit

noch nicht vor. Hochleistungsrechner müssen schließlich die Höchstleistungsrechner von kleinen und mittleren Problemen freihalten.

## **Höchstleistungsrechner**

Eine relativ kleine Gruppe von Wissenschaftlern benötigt unbedingt Höchstleistungsrechner. In einem großen Bundesland wie NRW wird die kritische Masse dazu erreicht, denn neben Theorie und Empirie spielt die Simulation in der Forschung eine immer größere Rolle.

Dabei ist außerordentlich schwierig zu bewerten, ob die Kosten und die erzielten Ergebnisse im Einklang stehen. Vermutlich kann man sich einer objektiven Entscheidung nur annähern, wenn Fachkollegen die erzielten Resultate oder die geplanten Vorhaben begutachten. Derartige Begutachtungen haben sich bei DFG-Projekten bewährt. Auch bei Berufungen wird die Qualifikation der Bewerber durch externe Gutachten nachgewiesen. Der ARNW sieht sich jedenfalls zu dieser fachlichen Beurteilung sicher nicht in der Lage; er kann allenfalls programmtechnische Ratschläge beim Einsatz der Geräte geben.

Die Frage, ob NRW als großes Bundesland jeweils einen modernsten Höchstleistungsrechner haben sollte, ist sehr sorgfältig zu prüfen. Fehlentscheidungen kosten entweder unnötig viel Geld oder aber verringern die Wettbewerbsfähigkeit der Hochschulen, was unmittelbar Auswirkungen auf die Wirtschaft haben kann, denn die nutzenden Wissenschaftler kommen meist noch aus ingenieur- oder naturwissenschaftlichen Bereichen. Sie kooperieren oftmals mit Betrieben. Es kann auch negative Auswirkungen auf internationale Kooperationen geben, bei denen die erforderlichen Grundausstattungen oder der geregelte Zugang zu ihnen gefordert werden.

Begleitend zu der o.a. vorgeschlagenen Begutachtung scheint es notwendig zu sein, Forschungsziele festzulegen, für deren Bearbeitung Größtrechner benötigt werden. Diese Forschungsziele sollten unter Aspekten der technologische Weiterentwicklung und der Profilierung der Hochschulen in NRW festgelegt werden. Neben der Sicherung der Grundlagenforschung sollten verstärkt Fragen mit wirtschaftlichem Potential und die Technologiepolitik des Landes eingebracht werden. Eine ausdrückliche Mononutzung eines Höchstleistungsrechners für einige wenige Fächer ist nicht ratsam. Eine Inanspruchnahme muß für alle Wissenschaftler möglich sein, wenn ihre Themen mit den Forschungszielen im Einklang sind.

Auch bei Größtrechnern spielt die landeseigene Auswahl und das landeseigene Verfügungsrecht über die Ressource eine nicht zu unterschätzende Rolle.

## **Gesamtdiskussion aller DV-Ausstattungen**

Mittelfristig kann durch eine mangelhafte Rechnerausstattung sowohl bei Hoch- als auch bei Höchstleistungsrechnern der Spitzenforschung in NRW Schaden zugefügt werden. Selbst im nationalen Vergleich sind Probleme etwa bei Berufungen und der Einwerbung von Drittmitteln zu erwarten. Um dem entgegenzuwirken, sind verschiedene Punkte zu bedenken.

- Wie und wo soll Höchstleistungs-Rechenkapazität in Zukunft zur Verfügung gestellt werden?
- Was spricht für den weiteren Ausbau der Hochleistungsrechner an allen Hochschulen?
- Soll der Rechnerverbund NRW ausgebaut und erweitert werden, um allen Nutzern aus einer Vielfalt die optimalen Hard- und Softwarekonfigurationen anbieten zu können? Sol-

len aus demselben Grund an den Hochschulen verstärkt Anwendungs- und Kompetenzschwerpunkte gebildet werden?

Hochleistungsrechner werden in zunehmendem Maße für neue Dienste genutzt (neben Simulation und Numerik). Informationsbereitstellung, Informationsaufbereitung, multimediale Anwendungen, Datenbankanwendungen, Langzeitarchivierung und Datensicherung kommen als wichtige Aufgaben hinzu. Hierfür sind weniger reine Rechenleistung als vielmehr Ein- und Ausgabeleistung, interne Datenübertragungsleistung, Plattenkapazität, Archivierungsroboter und gute Netzanbindung notwendig. Diese Leistungsmerkmale sind leider ebenso kostenträchtig wie hohe Rechenleistungen, insbesondere dann, wenn große Anforderungen an die Zuverlässigkeit gestellt werden müssen. In welcher Breite kommen diese neuen Dienste in der nächsten Zukunft durch die Multimedia-Entwicklungen auf uns zu?

Entscheidungen zu Hoch- und Höchstleistungsrechnern müssen im Zusammenhang mit allen anderen DV-Investitionen und laufenden Kosten der DV gesehen werden. Dazu gehören die Rechnernetze, die Arbeitsplatzausstattungen gemäß CIP, WAP, für technische und für bibliothekarische Mitarbeiter/innen und Verwaltungsangestellte, allgemeine Server, Peripherie, Softwareversorgung und neue Anwendungsschwerpunkte. Diese Themen erneut aufzuarbeiten, erfordert zwar weiteren Zeitaufwand, diese Arbeiten sind aber unverzichtbar, wenn man Ausstattungsschwerpunkte nicht fehleinschätzen will. Dabei sind aktuelle technische Entwicklungen und organisatorische Konzepte zu bedenken, die u.U. schon heute oder in Kürze deutlich preiswertere Ausstattungen ermöglichen. Entsprechende Einsparungen könnten fehlende Mittel für andere DV-Ressourcen ausgleichen.

Viele der hier aufgeworfenen Fragen zumindest im Bereich der Hochleistungsrechner müssen in erster Linie die Hochschulen selbst beantworten.