



KÜHNE  
VISIONEN  
WERDEN **REALITÄT**

Der neue Höchstleistungsrechner  
am Leibniz-Rechenzentrum  
der Bayerischen Akademie der  
Wissenschaften



WISSENSCHAFT  
AUF HÖCHSTEM NIVEAU

# High Tech in High Speed Quality

## Ein Meilenstein auf dem Weg in die Informations- und Wissensgesellschaft



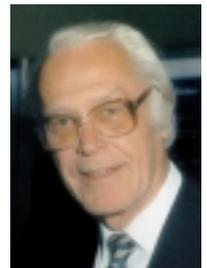
Hans Zehetmair

Bayerischer  
Staatsminister für  
Wissenschaft,  
Forschung und Kunst

Höchstleistungsrechnen ist eine der Schlüsseltechniken der Informationstechnologie. Ob Genomforschung, Strömungsmechanik oder Klimaanalyse: Super-Computer spielen heute die entscheidende Rolle bei der numerischen Simulation – neben Theorie und Experiment die dritte Säule technisch-wissenschaftlicher Erkenntnis. Aber nicht nur in den Wissenschaften, auch für industrielle Anwendungen, wie etwa in der Raumfahrt oder im Automobilbau, sind Höchstleistungsrechner nötig, um im globalen Wettbewerb weiter bestehen zu können.

Mit dem Ausbau des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften zu einem nationalen Zentrum für Höchstleistungsrechnen unterstreicht Bayern erneut seine Spitzenposition bei der Entwicklung und Anwendung innovativer Technologien der Wissensgesellschaft. Erhebliche Mittel aus Privatisierungserlösen haben dazu beigetragen, dieses Projekt innerhalb kürzester Zeit zu realisieren. Bayern bleibt damit weiterhin ein exzellenter Wissenschafts- und Forschungsstandort. Wie kein anderes Land mit Hochleistungsrechenkapazitäten und den dazu kompatiblen Vor- und Nachbereitungsrechnern an großen Universitäten ausgestattet, gilt Bayern darüber hin-

aus auch als Pionier bei der Entwicklung der Gigabit-Technik und verfügt zudem über extrem schnelle und breite Datenetze. Dazu kommt die hohe Priorität, die hier dem Ausbau der Universitäten und Fachhochschulen beigemessen wird: Die Ausgaben für Bildung, Wissenschaft und Forschung sind in Bayern überdurchschnittlich hoch; mit 3 % vom Bruttoinlandsprodukt erreichen die Forschungsausgaben Weltniveau. Anstrengungen, die sich längst auszahlen: Rund 1/3 aller deutschen Arbeitsplätze der Computerindustrie befinden sich in Bayern, im Bereich der elektronischen Medien sind es sogar fast 40 %. Und europaweit ist die Region München im Bereich der Informations- und Kommunikationstechnologien bereits die Nummer 2! Diesen Standortvorteil zu halten und weiter auszubauen ist für Wissenschaft, Wirtschaft und Politik in Bayern eine wichtige Aufgabe. Der neue SR8000-F1 des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ist in diesem Sinne ein weiterer und notwendiger Schritt in die richtige Richtung: Konsequenter und verantwortungsvoll eingesetzte Hochtechnologie schafft Sicherheit und Zukunft!

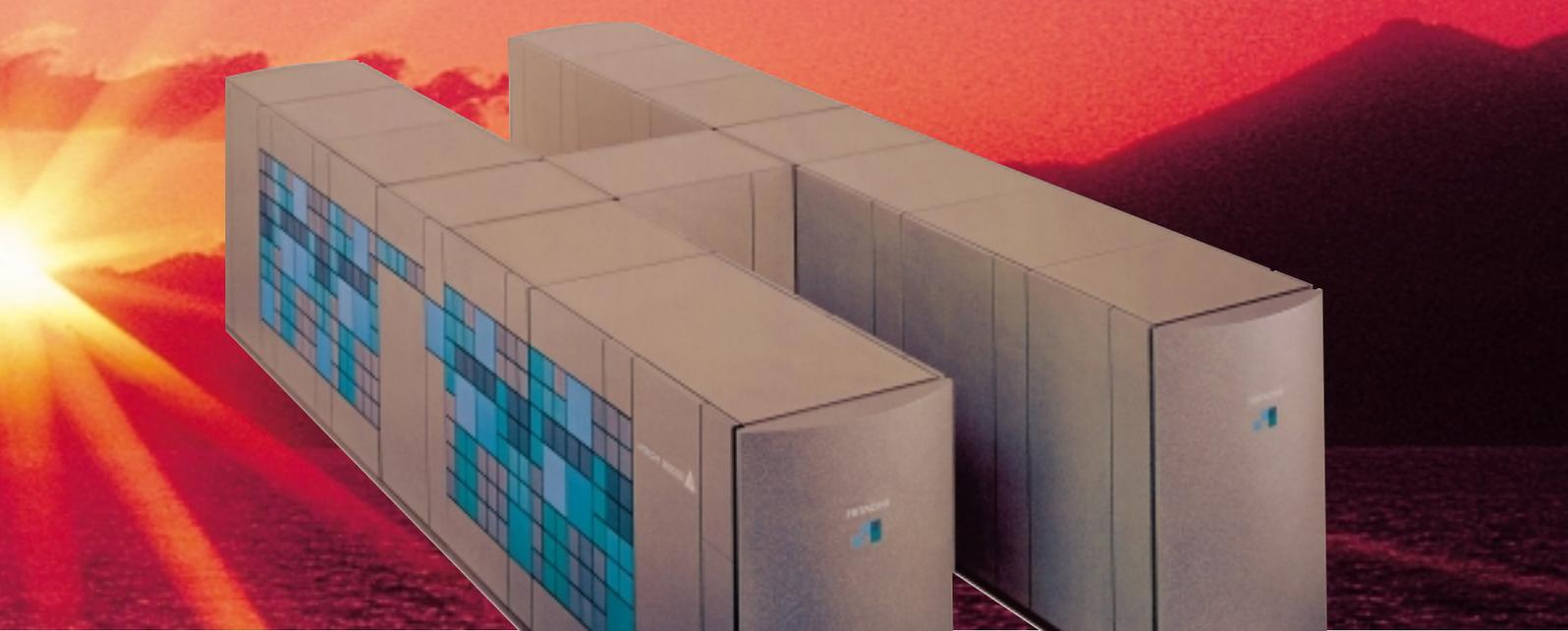


Prof. Dr.  
Heinrich Nöth

Präsident der  
Bayerischen  
Akademie der  
Wissenschaften

Prof. Dr. Heinrich Nöth

Hans Zehetmair



## Der neue Höchst- leistungsrechner am Leibniz- Rechenzentrum

Seit März 2000 ist am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in München der erste Teraflops-Rechner Deutschlands in Betrieb. Bereits in der ersten Lieferstufe ist der neue Hitachi SR8000-F1 mit einer Spitzenrechenleistung von 1,34 Tflop/s (1 Teraflop/s = 1 Billion Gleitkomma-Rechenoperationen pro Sekunde) nicht nur der schnellste Rechner in Deutschland – zum Installationszeitpunkt ist er der schnellste zivile Rechner der Welt. In einer zweiten Ausbaustufe soll er dann auf 2,2 Tflop/s ausgebaut werden. Zum Vergleich: Das bislang leistungsstärkste Rechnersystem in Europa war mit 0,98 Tflop/s ein Rechner des Deutschen Wetterdienstes in Offenbach.

Moderne Spitzentechnik, die allerdings auch ihren Preis hat: Der neue Höchstleistungsrechner kostet – einschließlich der für Wartung und Betrieb benötigten Gelder – 90 Millionen Mark. Mittel, die zu zwei Dritteln vom Freistaat Bayern und zu einem Drittel vom Bund getragen werden.

## Wozu braucht man Höchst- leistungsrechner?

Höchstleistungsrechner werden immer dann benötigt, wenn „normale“ Rechner nicht mehr in der Lage sind, die enormen Anforderungen an Rechenleistung und Speicherplatz zu erfüllen, die für wirklichkeitsnahe Simulationen und Modellierungen von Vorgängen in der Natur und Technik nötig sind. Auf diese Weise lassen sich heute in der Medizin beispielsweise Operationen durch bildgebende Verfahren unterstützen oder in der Luftfahrt Turbulenzstrukturen untersuchen. Für den Bau immer sichererer Autos können Crash-Simulationen durchgeführt werden, und Wetterprognosen werden durch regionale Klimamodelle verbessert.

Für Forschung, die mit der internationalen Entwicklung Schritt halten will, sind heute – in allen technisch-wissenschaftlichen Disziplinen – extrem leistungsfähige Rechner unabdingbar. Wie bereits 1995 vom Wissenschaftsrat vorgeschlagen, vollzieht sich nun mit der Inbetriebnahme des Höchstleistungsrechners Hitachi SR8000-F1 plangemäß der Ausbau des Leibniz-Rechenzentrums zu einem der Zentren für Höchstleistungsrechnen in Deutschland.



# KÜHNE VISIONEN

# WERDEN REALITÄT

## Der leistungsfähigste zivile Großrechner der Welt

Derzeit ist das von der japanischen Firma Hitachi gelieferte Rechnersystem SR8000-F1 im zivilen Bereich weltweit die Nummer 1. Seine Prozessoren werden in Gruppen zu je neun als Rechenknoten mit besonders hoher Leistung betrieben, können aber auch einzeln als Elemente eines Parallelrechners genutzt werden – ein neuartiger Supercomputer, der die Vorzüge älterer Vektorrechner mit den Merkmalen moderner Parallelrechner vereinigt.

Die Hitachi SR8000-F1 am LRZ besitzt 112, im Endausbau 168 Rechenknoten. In einem Rechenknoten können acht von dessen neun RISC-Prozessoren mit je 1,5 Gflop/s Spitzenrechenleistung durch Hardware und Software zu einer virtuellen Vektor-CPU mit 12 Gflop/s Spitzenrechenleistung zusammengefasst werden. Damit kann bereits jetzt eine Gesamtrechenleistung von 1,34 Tflop/s, im Endausbau dann 2,2 Tflop/s erreicht werden (1 Tera-Flop/s = 1 Billion Gleitkomma-Rechenoperationen pro Sekunde).

Bei einer traditionellen Vektor-CPU werden vektorisierbare Rechenoperationen über ein Fließband („Vektorpipe“) abgewickelt, mit dem pro Takt ein oder mehrere Speicherinhalte (also z.B. Zahlen) an die CPU geliefert werden. Bei der Hitachi SR8000-F1 wird die vektorisierbare Rechenoperation dagegen auf acht der neun Rechenwerke eines Knotens aufgeteilt oder es werden einzelne Speicherinhalte lange vor ihrem Gebrauch in die Register geladen. So sind alle Rechenwerke achtfach nutzbar und nicht nur die in traditionellen Vektor-CPU's mehrfach vorhandenen Floating Point Pipes.

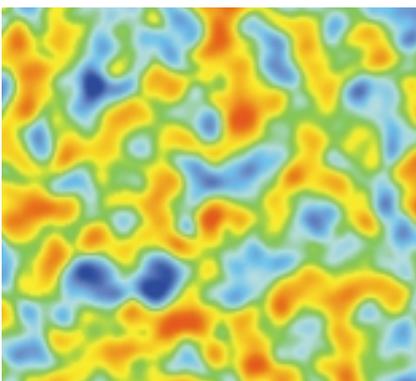
### Weitere Leistungsmerkmale (in Klammern Daten im Endausbau):

- Mit 928 (1376) Gigabyte Hauptspeicher lassen sich auch die größten bisher von Benutzern benannten Rechenprobleme bearbeiten (1 Gigabyte = 1 Milliarde Byte).
- Mit einer Gesamtplattenkapazität von 7,4 (10.0) Terabyte lassen sich die dabei anfallenden riesigen Datenmengen mit großer Bandbreite abspeichern oder auch lesen (1 Terabyte = 1 Billion Byte).

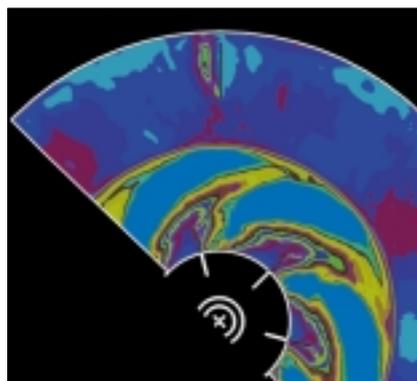
- Im internen Verbindungsnetz können bis zu 86 (114) Gigabyte/s an Daten zwischen den Rechenknoten ausgetauscht werden (1 Gigabyte/s = 1 Milliarde Byte pro Sekunde).
- Die neun Prozessoren eines Knotens haben Zugriff auf einen gemeinsamen Hauptspeicher.
- Die Kommunikationsanbindung an das Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WIN) des DFN-Vereins (DFN = Deutsches Forschungsnetz) und damit an das weltweite Internet erfolgt über eine HIPPI-Interface, eine schnelle Übertragungsmethode, die 800 Megabit/s theoretische Bandbreite erreicht (1 Megabit/s = 1 Million Bit pro Sekunde).

Eindrucksvoll sind nicht nur Geschwindigkeit und Leistung des neuen Superrechners, auch seine physischen Dimensionen, der Energiebedarf und die abgegebene Wärme sprengen den bisher am LRZ gewohnten Rahmen:

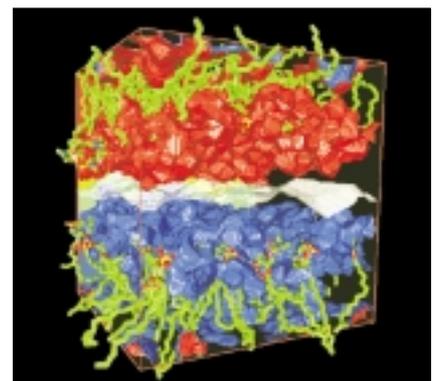
- Abmessungen (ohne Plattenspeicher): 9 m x 8 m, 1,80 m hoch
- Gewicht: 23 Tonnen
- Energieverbrauch: 610.000 Watt
- Energiebedarf des Gesamtsystems (inkl. Kühlung): knapp 1.000.000 Watt (1 Megawatt).



Wirbelfeld

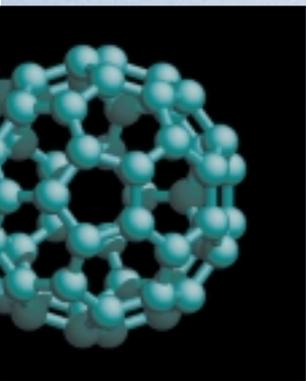


Verteilung turbulenter Energie in einem Rührwerk

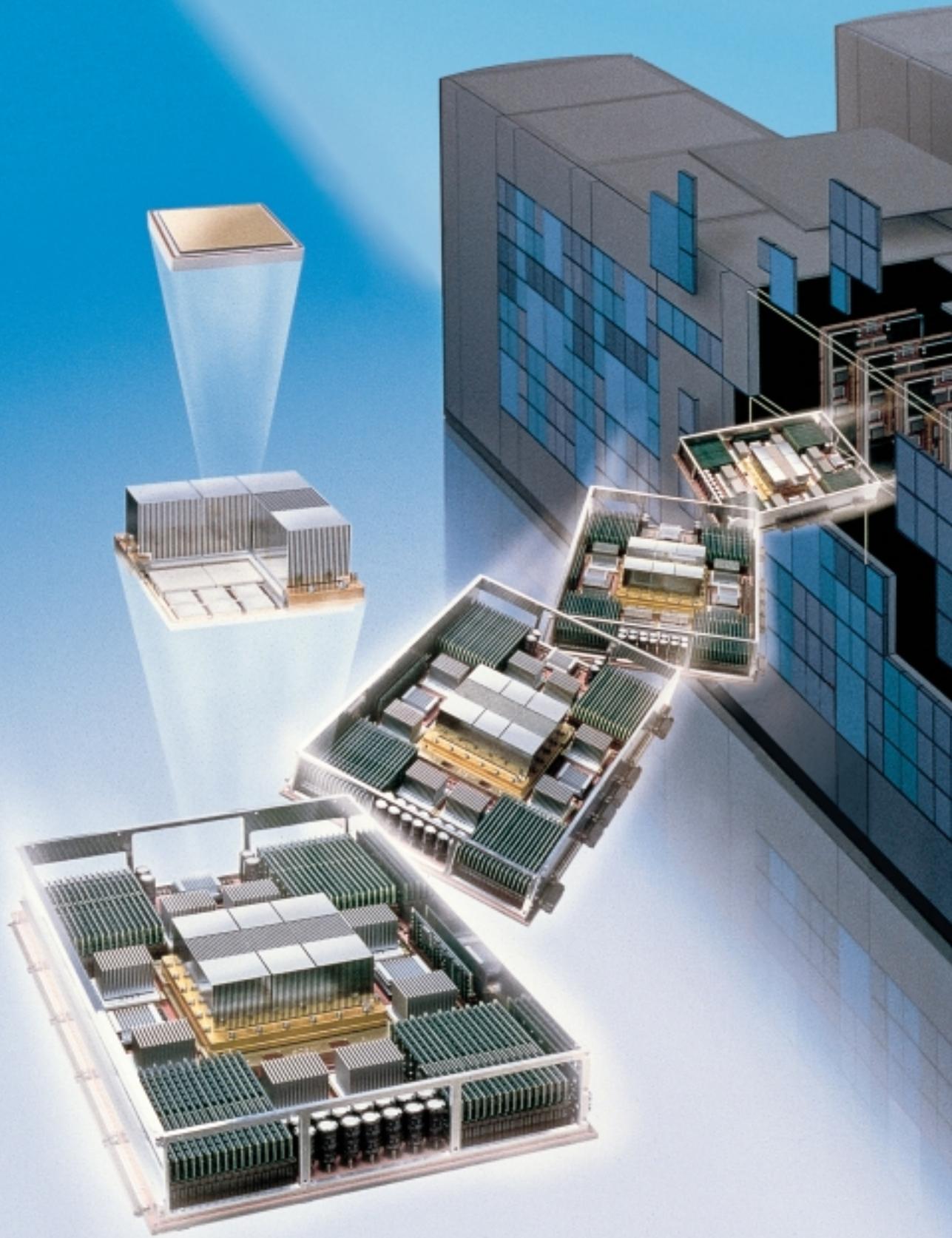


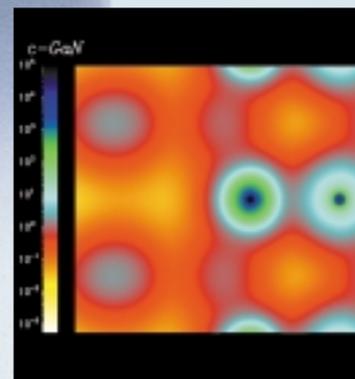
Simulation einer Lipidmembran





Fullerenmolekül





Ladungsdichte in einem Galliumnitrid-Kristall

## Wer kann den neuen Höchstleistungsrechner nutzen?

Der neue Rechner steht zur Bearbeitung von rechenintensiven sowie ein- und ausgabeintensiven Programmen in Forschung, Wissenschaft und Wirtschaft zur Verfügung, wenn die Aufgaben nicht an kleineren Systemen durchführbar sind. Das heißt, dass hier Forscher aus ganz Deutschland Aufgaben bearbeiten können, die um ein Mehrfaches größer und aufwendiger sind als bisher möglich. Solche Anforderungen bestehen in vielen Forschungsgebieten, wie z.B. in der

- Astronomie: Nukleare Verbrennung in Sternen, Hydrodynamik und Strahlungstransport in Sternatmosphären
- Biochemie: Molekulardynamik in Zellverbänden
- Chemie: Bestimmung der Struktur von Molekülen
- Elektrotechnik: Optimierung von Hochspannungsanordnungen
- Geophysik: Ausbreitung seismischer Wellen
- Informatik: Software Engineering, Methode für parallele Anwendungen
- Ingenieurwissenschaften: Gekoppelte Strömungs- und Struktursimulationen, Aerodynamik von Automobilen und Flugzeugen, Crash-Simulationen
- Mathematik: Adaptive Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen
- Medizin: Bildgebende Verfahren in der Operationsunterstützung und Körpermodellierung
- Meteorologie: Regionale Klimamodellierung
- Physik: Simulation von Hochtemperatur-Supraleitern, Simulation von Schmelzprozessen und Kristallwachstum
- Strömungsmechanik: Untersuchungen der Turbulenzstruktur

## Der Lenkungsausschuss

Die an das Leibniz-Rechenzentrum gerichteten Projektanträge auf Nutzung von Ressourcen des Höchstleistungsrechners werden zur Begutachtung an den Lenkungsausschuss weitergeleitet. Der Lenkungsausschuss besteht aus Vertretern des Bayerischen Staatsministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst, der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und bayerischer Wissenschaftler. Er hat zwölf Mitglieder, die den wissenschaftlichen Anspruch und die wissenschaftliche Kompetenz der Antragsteller auf Nutzung des Höchstleistungsrechners beurteilen. Sie stellen sicher, dass die beantragten Projekte nicht an kleineren Rechnern der hierarchischen Versorgungsstruktur (Arbeitsplatzrechner, Institutsrechner, Compute-Server in Universitätsrechenzentren, Landeshochleistungsrechner) bearbeitet werden können. Sie achten auch darauf, dass die beantragten Projekte für den Höchstleistungsrechner geeignet sind und prüfen gegebenenfalls, ob sie nicht besser an Höchstleistungsrechnern anderer Architektur bearbeitet werden sollten. Für genehmigte Projekte legt der Lenkungsausschuss die Laufzeit des Projekts, Rechnerressourcen und eventuell Kriterien für die Bedienungsgüte am Höchstleistungsrechner fest.

## Das Betriebs- und Organisationskonzept

Die Organisation des Betriebs des neuen Höchstleistungsrechners erfolgt im Zusammenwirken von

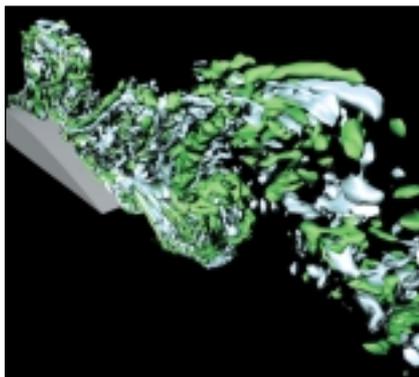
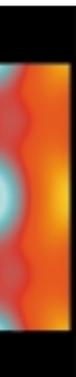
- Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften als Betreiber des neuen Höchstleistungsrechners
- Lenkungsausschuss des Höchstleistungsrechners
- Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR).

Der Betrieb des Höchstleistungsrechners wird nach den vom Lenkungsausschuss erlassenen Regeln organisiert. Das Leibniz-Rechenzentrum fungiert – als Betreiber des Höchstleistungsrechners in Bayern – als erste Beratungsinstanz (insbesondere für die rechnernahe Basisbetreuung der Benutzer) und als Bindeglied zwischen Benutzern, Lehrstühlen, Instituten und Kompetenznetzwerk.

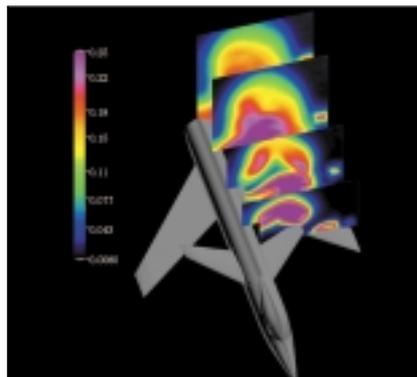
Da die am Leibniz-Rechenzentrum vorhandenen Gruppen

- Hochleistungsrechnen in der Abteilung Benutzerbetreuung,
- Hochleistungssysteme in der Abteilung Rechensysteme und
- Netzbetrieb in der Abteilung Kommunikationsnetze

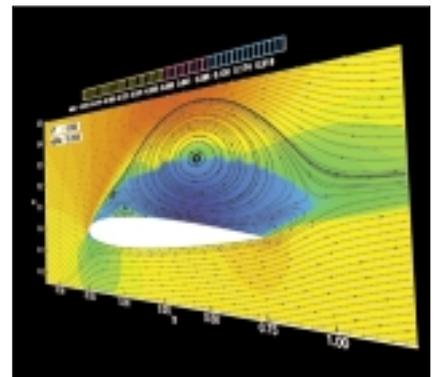
bereits durch den Betrieb der Landeshochleistungsrechner gut für den Betrieb des Höchstleistungsrechners vorbereitet sind, wurde am Leibniz-Rechenzentrum bewusst auf die Einführung neuer Organisationsstrukturen verzichtet – auf diese Weise können Synergien optimal genutzt werden.



Wirbelstraße an einer umströmten Tragfläche



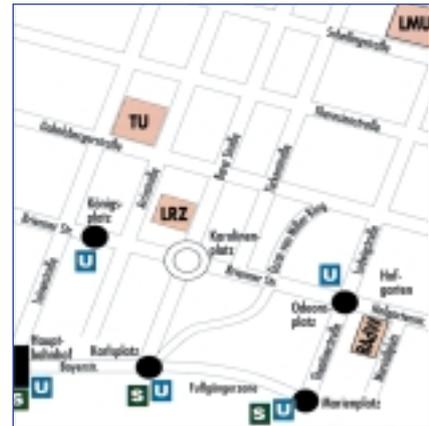
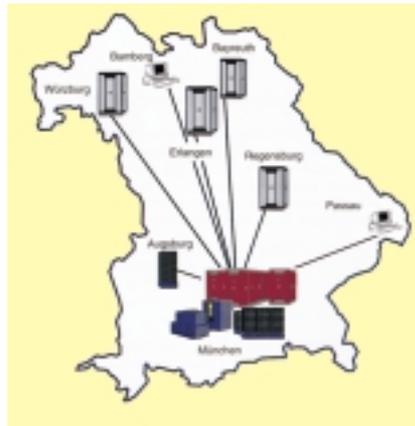
Vier Geschwindigkeitsprofile an einem Flugzeug



Strömungsprofil an einer Tragfläche

# Das Leibniz-Rechenzentrum

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften geht zurück auf die im Jahr 1962 von den Akademiemitgliedern Hans Piloty und Robert Sauer gegründete „Kommission für elektronisches Rechnen“. Diese bis heute von der Bayerischen Akademie der Wissenschaften betriebene „Kommission für Informatik“ errichtete mit Unterstützung durch den Freistaat Bayern ein gemeinsames Rechenzentrum für Forschung



Ministerpräsident Dr. Edmund Stoiber im Gespräch mit Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering im Rechnerraum des LRZ

## Das LRZ als Hochschulrechenzentrum

Rechenzentrum ist eigentlich irreführend: Heute stehen die Rechner direkt am Arbeitsplatz. Grundlage dafür ist das Konzept einer „verteilten, kooperativen DV-Versorgung“. Es erlaubt nicht nur den Zugang zum weltweiten Internet, sondern vor allem auch den ständigen, wechselseitigen Zugriff auf Daten und Informationen, den Zugang zu Programmen auf anderen Rechnern, die gemeinsame Benutzung teurer Endgeräte und vieles mehr.

und Lehre für alle Münchner Hochschulen: Das heutige Leibniz-Rechenzentrum. Sein Name ist eine Reverenz gegenüber dem großen Philosophen und Universalgelehrten Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716), der das binäre Zahlensystem wiederentdeckt und eine der ersten funktionierenden Vier-Spezies-Rechenmaschinen entworfen hat.

Das LRZ, ein modernes Dienstleistungsunternehmen, ist heute

- wissenschaftliches Rechenzentrum für die Hochschulen in München und für die Akademie,
- Zentrum für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen („Supercomputing Center“) und
- Kompetenzzentrum für Datenkommunikationsnetze.

Die Dienste des LRZ können von allen Angehörigen der Münchner Hochschulen (ca. 80.000 Studenten, 7.800 wissenschaftliche und 4.300 sonstige Mitarbeiter) genutzt werden.

Zentral ist die Aufgabe der Koordination und der Vermittlung zwischen den Anwendern: Technisch durch den Betrieb des Rechnernetzes und das Angebot von Netzdiensten wie E-Mail oder WWW, personell durch Kurse und Schulungen, durch Koordination von Software-Beschaffung und Campuslizenzen sowie durch Hilfestellung in Problemfällen oder bei der Erschließung neuer Anwendungsmöglichkeiten.

## Das LRZ als Supercomputing-Zentrum

Seit über zehn Jahren betreibt das LRZ für alle bayerischen Universitäten die Landeshochleistungsrechner; sie werden dezentral durch kompatible, kleinere Entwicklungsrechner ergänzt. Seit März 2000 betreibt das LRZ zusätzlich den Hitachi SR8000-F1, einen Höchstleistungsrechner, der bundesweit genutzt

werden kann. Das LRZ betreibt nicht nur die Superrechner (SNI/Fujitsu VPP700/52, IBM SP2/77, CRAY T90/4), es unterstützt auch bei der Umsetzung adäquater Algorithmen auf vorhandene Rechnerarchitekturen. Dies geschieht in enger Zusammenarbeit mit anderen Zentren und Forschungsgruppen, insbesondere mit dem Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen (KONWIHR).

## Das LRZ als Kompetenzzentrum für Netze

Das LRZ hat die zentrale Bedeutung von Netzen frühzeitig erkannt und sich auf diesem Gebiet zu einem bundesweiten Know-how-Träger entwickelt. Neueste Kommunikationstechnologien wurden in Deutschland erstmals am LRZ pilotiert, so z.B. die erste X.25-2Mb-Strecke, die erste ATM-34Mb-Strecke, der erste 155Mb-Anschluss, DQDB und – auch mittels Gigabit-Technik mit Wellenlängenmultiplex (WDM) – die weltweit erste 2,5Gb-ATM-Strecke.

## Forschung am LRZ

Das LRZ stellt Nutzern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Technik nicht nur Infrastruktur und Dienstleistungen zur Verfügung – hier wird auch geforscht. Einer der Schwerpunkte ist modernes Netz- und Systemmanagement (Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering). Auch auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens ist das LRZ intensiv in die Forschung eingebunden durch eine eigene Arbeitsgruppe, durch die Mitarbeit bei KONWIHR und insbesondere durch die Mitglieder der Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften Prof. Dr. Roland Bulirsch (Bahnberechnungen von Raumfahrzeugen, Robotersteuerung), Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann (mathematische Modellierung von modernen Werkstoffen) und Prof. Dr. Christoph Zenger (Ständiger Sekretär der Kommission für Informatik und Mitglied des Direktoriums des LRZ).



**Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften**  
Barer Straße 21  
80333 München

Telefon: 089/289-28784  
Telefax: 089/2809460  
E-Mail: lrzpost@lrz.de  
Internet: <http://www.lrz.de>

**Vorsitzender des Direktoriums und Leiter des LRZ:**  
Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering  
Telefon: 089/289-28700, E-Mail: [hegering@lrz.de](mailto:hegering@lrz.de)