

**Stellungnahme zu den Konzepten über die  
Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern  
und eines Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen**

<b><u>Inhalt:</u></b>	<b><u>Seite</u></b>
<b>Vorbemerkung</b>	<b>3</b>
<b>A. Ausgangslage</b>	<b>7</b>
I. Konzept zum Aufbau und Betrieb eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern am Leibniz-Rechenzentrum München (HLRB)	7
1. Derzeitige Kompetenz und EDV-Versorgungsstruktur auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens	8
2. Technische Zielvorstellungen	13
3. Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten und Anwendungsfelder	18
4. Nutzung der Kapazität	19
5. Kompetenznetzwerk	21
6. Finanzierung und zeitliche Realisierung	22
II. Konzept der Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein für ein Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen (HLRN)	23
1. Derzeitige Kompetenz und EDV-Versorgungsstruktur auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens	24
2. Technische Zielvorstellungen	29
3. Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten und Anwendungsfelder	33
4. Nutzung der Kapazität	35
5. Kompetenznetzwerk	36
6. Finanzierung und zeitliche Realisierung	37

<b>B. Stellungnahme</b>	<b>39</b>
I. Zum Bedarf an Höchstleistungsrechnern	39
II. Zum Konzept über den Aufbau und Betrieb eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern am Leibniz-Rechenzentrum München (HLRB)	44
1. Zu den fachlichen und technischen Voraussetzungen	44
2. Zu den technischen Zielvorstellungen und zum Bedarf	46
3. Zur Nutzung der Kapazität und zum Kompetenznetzwerk	48
4. Zur Finanzierung und zeitlichen Realisierung	49
III. Zum Konzept der Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein für ein Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen (HLRN)	49
1. Zu den fachlichen und technischen Voraussetzungen	50
2. Zu den technischen Zielvorstellungen und zum Bedarf	52
3. Zur Nutzung der Kapazität und zum Kompetenznetzwerk	53
4. Zur Finanzierung und zeitlichen Realisierung	54
<b>C. Zusammenfassende Empfehlung</b>	<b>55</b>
<b>Anhang (Tabellen, Glossar)</b>	<b>60</b>

## Vorbemerkung

Der Wissenschaftsrat hat bereits 1987 in seinen Empfehlungen zur Ausstattung der Hochschulen mit Rechenkapazität<sup>1)</sup> empfohlen, daß für ausgewählte Hochschulstandorte Höchstleistungsrechner zur Verfügung gestellt werden sollten.

Nachdem Anfang der 90er Jahre in einigen Ländern und Hochschulen die Beschaffung von Höchstleistungsrechnern geplant wurde, hat der Wissenschaftsrat 1995 eine Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität vorgelegt<sup>2)</sup>. Darin werden folgende zentrale Aussagen und Empfehlungen bezüglich der künftigen Einrichtung von Höchstleistungsrechnern gegeben:

- Um die Leistungsfähigkeit der Wissenschaft in Deutschland und im internationalen Wettbewerb im Bereich des Höchstleistungsrechnens nicht zu gefährden, sollten zur überregionalen Versorgung der Hochschulen und Forschungseinrichtungen mit Höchstleistungsrechenkapazitäten zwei bis vier Zentren für Höchstleistungsrechnen zeitlich gestaffelt errichtet werden. In der zeitlichen Abfolge sollte jeweils mindestens ein System entsprechend dem technischen Stand bereitgestellt werden. Dabei ist vor dem Hintergrund der Entwicklung der Rechnertechnologien ein Reinvestitionszyklus von zwei bis drei Jahren zu berücksichtigen.
- Optimale Nutzung und Bereitstellung von Höchstleistungsrechenkapazitäten erfordern eine darauf abgestimmte Grundversorgung mit Rechenkapazität. Neben der Ausstattung der Arbeitsgruppen mit PCs und Arbeitsplatzrechnern, deren Verbindung über lokale Server oder Vernetzung mit den Hochschulrechenzentren erfolgen soll, sind Workstation-Cluster, moderat-parallele Vektorrechner und massiv-parallele Rechner bis in mittlere Leistungsbereiche notwendige Voraussetzung.

---

<sup>1)</sup> Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Ausstattung der Hochschulen mit Rechenkapazität, Köln 1987, S. 36 f.

<sup>2)</sup> Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Empfehlungen zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995, S. 51 ff.

- Zentren für Höchstleistungsrechnen sind in ein Netzwerk verteilter fachlicher Kompetenz einzubinden. Fachliche Beratung, Einführung neuer Nutzer und die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses gehören zu den Aufgabengebieten eines Kompetenznetzwerks.
- Angesichts der mit der Einrichtung von Höchstleistungsrechenzentren verbundenen hohen Investitionssummen und der überregionalen Nutzung der Zentren sollten die Länder oberhalb eines bestimmten Rechenleistungsniveaus prüfen, ob solche Zentren im Verbund mehrerer Länder im Rahmen vertraglicher Vereinbarungen aufgebaut und finanziert werden sollten.
- Um die Inanspruchnahme von Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse sicherzustellen, ist der Zugang zu den Zentren für Höchstleistungsrechnen über Lenkungsausschüsse und Kommissionen zu regeln, die bundesweit die wissenschaftliche Begutachtung der eingereichten Projektanträge organisieren. Der Wissenschaftsrat empfiehlt wegen der besonderen technologischen Bedeutung von Höchstleistungsrechnern eine zusätzliche Projektfinanzierung außerhalb des HBFVG.
- Die Zusammenarbeit von Hochschulen mit industriellen Forschungs- und Entwicklungsabteilungen auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens wird vom Wissenschaftsrat insbesondere im Hinblick auf Synergieeffekte, Anwenderbezug und Technologietransfer begrüßt.

Neben den Empfehlungen des Wissenschaftsrates über die Einrichtung von Höchstleistungsrechenzentren hat die Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft in ihrer Stellungnahme „Zur Ausstattung der Hochschulen in der Bundesrepublik Deutschland mit Datenverarbeitungskapazität für die Jahre 1992 bis 1995“ (Bonn, 1991) und in den Empfehlungen „Informationsverarbeitung und Rechner für Hochschulen 1996 bis 2000“ (Bonn, 1996) gefordert, daß in Deutschland mehrere solcher Systeme bereitgestellt werden sollten. „Zeitlich versetzt sollte jeweils ein Rechner der neuesten Generation zugänglich sein. Außerdem ist wichtig, daß auch unterschiedliche Architekturen vorhanden sind, worauf bei der Beschaffung geachtet werden muß.“ (Bonn, 1996, S. 16).

Nachdem Baden-Württemberg 1992 einen Antrag zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners an der Universität Stuttgart als Nachfolgerechner der CRAY 2 zur Aufnahme in den Rahmenplan vorgelegt hatte, die positiven Voten der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft und des Wissenschaftsrates zu diesem Antrag vorlagen und ein Höchstleistungsrechenzentrum in einer ersten Ausbaustufe (30 Mio. DM) 1996 in Stuttgart eingerichtet wurde, liegen dem Wissenschaftsrat weitere Anmeldungen über die Einrichtung von Höchstleistungsrechenzentren vor. Hier handelt es sich zum einen um den Antrag Bayerns über den Aufbau eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (HLRB). Zum anderen haben die Länder Berlin (federführend), Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein eine Anmeldung für ein Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen (HLRN) eingereicht.

Zur Begutachtung der Anträge hat der Wissenschaftsrat die Arbeitsgruppe „Höchstleistungsrechner“ eingesetzt, die die vorliegende Stellungnahme vorbereitet hat. Die Diskussion in der Arbeitsgruppe hat ergeben, daß unabhängig von den aktuellen Rahmenplananmeldungen des Norddeutschen Verbunds und des Freistaats Bayern das ursprüngliche Konzept des Wissenschaftsrates zum Aufbau nationaler Höchstleistungsrechenzentren überprüft werden sollte. In diesem Zusammenhang hat insbesondere der Bund auf die Notwendigkeit grundständig neuer, konzeptioneller Überlegungen zur Einrichtung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern hingewiesen. Nach Auffassung der Arbeitsgruppe sollten in diesem Zusammenhang Fragen zur Netzanbindung und zur Software besonders berücksichtigt werden.

Der vom Wissenschaftsrat eingerichteten Arbeitsgruppe „Höchstleistungsrechner“ gehören auch Sachverständige an, die nicht Mitglieder des Wissenschaftsrates sind. Ihnen ist der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet. Die Arbeitsgruppe hat ferner die Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft um eine Stellungnahme zum künftigen Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten gebeten. Auch ihr ist der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet. Für die bereitwillig erteilten Auskünfte des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart, des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich und

des Rechenzentrums Garching über derzeitige und zukünftige Höchstleistungsrechenkapazitäten möchte der Wissenschaftsrat sich ebenfalls bedanken.

Der Wissenschaftsrat hat die Stellungnahme am 22. Januar 1999 verabschiedet.

## **A. Ausgangslage**

### **A. I. Konzept zum Aufbau und Betrieb eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern am Leibniz-Rechenzentrum München (HLRB)**

Bayern hat erstmalig zum 26. Rahmenplan einen Antrag über die Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen eingereicht. Geplant ist die Beschaffung eines Höchstleistungsrechners am Standort Leibniz-Rechenzentrum München der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ). Im Auftrag des Bayerischen Staatsministeriums für Unterricht, Kultus, Wissenschaft und Kunst wurden vom LRZ im Januar 1996 die Grundlagen für die Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums in Bayern skizziert.<sup>3)</sup>

Mit den Anmeldungen zum 28. Rahmenplan hat das Land ein „Konzept zum Aufbau und Betrieb eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen am LRZ München“ (Februar 1998) dem Wissenschaftsrat zugestellt, in dem Ausführungen zum Bedarf, zum Nutzungskonzept, zu technischen Zielvorstellungen, zur Finanzierung, zur Mitnutzung durch Industrie und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen, zur länderübergreifenden Zusammenarbeit, zu organisatorischen Zielvorstellungen und zur zeitlichen Realisierung gegeben werden.

Das Land wünscht die Installation des Höchstleistungsrechners am LRZ, da dort die fachlichen, sächlichen und räumlichen Voraussetzungen gegeben sind. Das LRZ soll die Funktion eines Betreiberzentrums einnehmen, das ein Bindeglied zwischen Benutzern, Hochschuleinrichtungen und Kompetenzzentren schaffen soll.

---

<sup>3)</sup> Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften: Überlegungen zur Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums in Bayern, München 1996.

## **1. Derzeitige Kompetenz und EDV-Versorgungsstruktur auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens**

### **a) Fachliche Kompetenz**

Fachliche Kompetenz auf dem Gebiet des wissenschaftlich-technischen Höchstleistungsrechnens – im folgenden auch High Performance Scientific Computing (HPSC) oder Supercomputing genannt – hat sich in der Wissenschaftslandschaft Bayerns insbesondere im Zusammenhang mit dem Forschungsverbund FORTWIHR (Forschungsverbund für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen) entwickelt. Sowohl an den Trägerhochschulen Technische Universität München und Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, als auch an der Universität Augsburg kann auf Erfahrungen im Hochleistungsrechnen vor allem auf den Gebieten der Materialwissenschaften, der Luft- und Raumfahrt, der Robotik, der Strömungsmechanik, der Prozeßsimulation und der Simulation elektrischer Schaltkreise hingewiesen werden. Fortschritte können in der Methodenentwicklung der Parallelisierung von Algorithmen, in der computergraphischen Darstellung komplexer Vorgänge und in der Lösung hochdimensionaler Systeme nichtlinearer Gleichungen verzeichnet werden. Bemerkenswert ist der mit FORTWIHR verbundene Anwendungsbezug und Technologietransfer zur Großindustrie sowie zu mittelständischen und kleinen Unternehmen. Über FORTWIHR hinaus beschäftigt man sich in anderen Forschungsverbänden und in einzelnen Arbeitsgruppen an verschiedenen bayerischen Universitäten mit Teilaspekten des Hochleistungsrechnens. Der Umgang mit parallelen Rechnerarchitekturen wurde auch im Rahmen der Sonderforschungsbereiche 182 „Multiprozessor- und Netzwerkkonfigurationen“ in Erlangen und 342 „Werkzeuge und Methoden für die Nutzung paralleler Rechnerarchitekturen“ an der TU München und in Drittmittelprojekten vorangetrieben.

Das 1964 gegründete LRZ ist wissenschaftliches Rechenzentrum für die Hochschulen in München und für die Akademie, landesweites Zentrum für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen (Supercomputer Center) und Kompetenzzentrum für Datennetze. Das LRZ betreibt seit etwa zehn Jahren für alle bayerischen Universitäten die Landeshochleistungsrechner. Neben der Verantwortung für den Betrieb der Rechner unterstützt das Rechenzentrum die Anwender auch bei der Um-



setzung der entsprechenden Algorithmen auf die vorhandenen Rechnerarchitekturen. Das LRZ ist ferner an dem vom BMBF geförderten und vom Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich geleiteten UNICORE-Projekt beteiligt (Uniformes Interface für Computer-Ressourcen), mit dem eine möglichst flexible Nutzung von Anwendersoftware auf verschiedenen Rechnersystemen erzielt werden soll.

#### **b) EDV-Versorgungsstruktur**

Dem Bericht „Datenverarbeitung in Lehre und Forschung an den Universitäten und Fachhochschulen in Bayern“ der bayerischen DV-Planungskommission von 1993 folgend, verfügen die bayerischen Hochschulen über eine verteilte, mehrstufige und kooperative Rechnerversorgungsstruktur.

Darin bilden die Arbeitsplatzrechner und Server in den einzelnen Universitätsinstituten die Basis der Leistungspyramide. Rechenintensive Fachdisziplinen, wie zum Beispiel die Physik, die Chemie und die Ingenieurwissenschaften können auf dedizierte Compute-Server zugreifen.

Zu Beginn der neunziger Jahre wurden im Bereich der Informatik und in den Rechenzentren (München, Erlangen) erste parallele Rechner beschafft. Etwa zeitgleich wurden an beiden Standorten Konfigurationen aufgebaut, die eine Zusammenschaltung der nachts nicht genutzten Workstations zu Vielprozessor-Systemen ermöglichten. Dadurch standen schon relativ frühzeitig produktionsreife parallele und vektorisierende Programme zur Verfügung, die auch über die Landesgrenze hinaus eingesetzt wurden.

Die Universitätsrechenzentren betreiben im Compute-Bereich in der Regel leistungsfähige Workstations als Überlaufkapazität für skalare Anwendungen. Daneben sind an den Universitäten mit entsprechendem Bedarf auch parallele und/oder vektorielle Rechensysteme vorhanden.

Der darüber hinausgehende Rechenbedarf soll über einen leistungsstarken Hochleistungsrechner am LRZ und von kleineren, möglichst kompatiblen Vor- und Nachbearbeitungsrechnern an den Hochschulen abgedeckt werden. Gemäß der Zielsetzung des bayerischen Landeshochleistungsrechnerkonzepts wurden im LRZ Ende der achtziger Jahre eine CRAY Y-MP 8-Anlage und in der Region CRAY Y-MP EL-Anlagen installiert.

1997/98 wurde die erste Rechnergeneration abgelöst durch SNI/Fujitsu VPP-Systeme (Mehrprozessor-Vektorrechner) mit verteiltem Speicher. Die leistungsstärksten Rechner stehen im LRZ. Die SNI/Fujitsu-Anlage rangiert nach der TOP500-Liste (05. November 1998) auf Platz 50. Kleinere Entwicklungssysteme zum SNI/Fujitsu VPP-Rechner stehen an den Universitäten Bayreuth, Erlangen, Nürnberg, Regensburg und Würzburg bereit (vgl. Tabelle 1 im Anhang).

Während die bayerischen Universitäten über einen Zugang zum Breitband-Wissenschaftsnetz mit einer Übertragungskapazität von 34 Mbit/s verfügen, weisen das LRZ und das Regionale Rechenzentrum Erlangen eine Hochgeschwindigkeitsverbindung von 155 Mbit/s auf; beide Einrichtungen sind am Gigabit-Testbed-Süd des DFN-Vereins beteiligt.

### **c) Auslastung und Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern**

Informationen über den Rechenzeitverbrauch auf den drei Landeshochleistungsrechnern des LRZ im Jahr 1997 können Tabelle 2 im Anhang entnommen werden.

Auf allen drei Anlagen entfallen auf die TU München, und hier schwerpunktmäßig auf die Fachrichtung Maschinenwesen, die größten Nutzungsanteile an Rechenzeit. Der VPP-Rechner wurde sogar zu 57 % von der TU München belegt. Der Landesvektorrechner CRAY T90 wurde auch von anderen bayerischen Universitäten stark in Anspruch genommen. Die drei bayerischen Landeshochleistungsrechner am LRZ sind voll ausgelastet.

Neben der Nutzung der Landeshochleistungsrechner am LRZ werden auch Hoch- und Höchstleistungsrechner außerhalb Bayerns genutzt. Nachfolgend werden die in erster Linie zu betrachtenden Einrichtungen genannt.

- Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Im Zeitraum 1. Januar bis 30. November 1997 entfielen 50,1 % der Systemleistung der CRAY T3E-Anlage auf bayerische Projekte. Dies entspricht 62,2 % der von Einrichtungen außerhalb Baden-Württembergs genutzten Kapazität. In der Zeit vom 1. Januar bis zum 31. Mai 1998 liegt der bayerische Anteil an der Gesamtsystemleistung bei 48,3 % (vgl. Tabelle 3 im Anhang).

Nach einer intensiven Nutzung der NEC SX-4 im Jahr 1996 hat sich der relative Anteil bayerischer Projekte 1997 auf dieser Anlage reduziert. Im Zeitraum vom 1. Januar bis zum 30. November 1997 nutzten bayerische Projekte 4,9 % der Systemleistung der NEC-Anlage. Dies waren 10,4 % der von Einrichtungen außerhalb Baden-Württembergs genutzten Kapazität. In der Zeit vom 1. Januar bis zum 31. Mai 1998 belegten bayerische Projekte auf diesem Rechner 13 % der Systemleistung (vgl. Tabelle 3 im Anhang).

Innerhalb der bayerischen Projekte entfällt der größte Leistungsanteil auf beiden Anlagen mit 18,6 % bzw. 12,4 % auf die Theoretische Physik der Universität Würzburg.

- Höchstleistungsrechenzentrum am Forschungszentrum Jülich (HLRZ)

In diesem Zentrum nutzen seit ca. drei Jahren verschiedene Gruppen aus der Physik, Chemie und Strömungsforschung (Augsburg, Bayreuth, Erlangen, München, Regensburg, Würzburg) Höchstleistungsrechenkapazitäten. In der zweiten Jahreshälfte 1997 belegten diese Gruppen 12,7 % der verfügbaren Rechenzeit auf den Anlagen CRAY T90 und J90 und 2 % auf den CRAY T3E-Anlagen. Von Januar bis Mai 1998 beanspruchten die genannten Projektgruppen 17,9 % der verfügbaren Rechenzeit auf den Anlagen CRAY T90 und J90 und 6,3 % auf den CRAY T3E-Anlagen. Auch auf diesen Anlagen überwiegt der Nutzungsanteil der Universität Würzburg (vgl. Tabelle 3 im Anhang).

- Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

In den Jahren 1996 und 1997 rechnet an diesem Zentrum insbesondere die Fakultät für Maschinenwesen der TU München in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Funktionalanalysis und numerische Mathematik am Fachbereich Mathematik der TU Berlin und dem Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik der TU Berlin an Modellen für manipulierte turbulente Strömungen; die Rechnungen wurden anschließend am LRZ fortgesetzt, graphisch ausgewertet und verfilmt.

#### d) EDV-Investitionen

Für die staatlichen Hochschulen, das LRZ und die Universitätsklinika wurden nach Angaben des Landes in den letzten drei Jahren (1995 bis 1997) rund 190 Mio. DM in die EDV-Ausstattung für die Bereiche Forschung und Lehre (einschließlich CIP und WAP, ohne Beschaffung aus Drittmitteln) sowie Verwaltung und Krankenversorgung investiert (ohne Bibliotheken; vgl. Tabelle 4 im Anhang).<sup>4)</sup> Dies entspricht einem jährlichen Durchschnitt von 63 Mio. DM. Davon entfallen im Mittel

- 38 % (23,8 Mio. DM) auf die neun staatlichen Universitäten,
- 25 % (15,8 Mio. DM) auf die sechs Universitätsklinika,
- 20 % (12,5 Mio. DM) auf die 15 Fachhochschulen (darunter auch fünf noch nicht vollständig ausgebaute „neue Fachhochschulen“ und zwei neue Fachhochschulabteilungen) und
- 17 % (11 Mio. DM) auf das LRZ.

Nach Auskünften des Landes sollen die Voraussetzungen für vermehrte Großgerätebeschaffungen im EDV-Bereich durch höhere Ansätze bei der Titelgruppe 99 des aufgestellten Staatshaushaltes 1999/2000 geschaffen werden.

Für Bayern wurden für die Jahre 1995 bis 1997 insgesamt rund 166 Mio. DM als Globalbetrag für Großgeräte (Großgeräte nach §3 Nr. 4 HBFVG) in den Rahmenplan

---

<sup>4)</sup> Die Zahlen enthalten die in den Jahresabschlußrechnungen nachgewiesenen Ist-Ausgaben bei den Investitionstiteln 812 und 813 der Titelgruppe 99 der Hochschulkapitel und des LRZ (insgesamt 37,4 Mio. DM) sowie die durch eine Umfrage vom Juni/Juli 1998 ermittelten Ausgaben der Hochschulen im Rahmen der Ersteinrichtung (4,0 Mio. DM bzw. 5,8 Mio. DM bei Universitäten und Fachhochschulen) und der Klinika (15,8 Mio. DM).

aufgenommen (jährlicher Durchschnittswert rund 55,3 Mio. DM). Zu berücksichtigen ist, daß sich die Globalbeträge sowohl auf EDV-Geräte als auch auf weitere Großgeräte beziehen. Großgeräte als Teil der Ersteinrichtung sind in den Globalbeträgen nicht enthalten. In den Empfehlungen zum 28. Rahmenplan (1999 bis 2002) des Wissenschaftsrates wird für das Jahr 1999 ein Globalbetrag für Großgeräte (inkl. CIP und WAP) für Bayern von 65 Mio. DM empfohlen. Im Entwurf des 28. Rahmenplans für den Hochschulbau ist demgegenüber nach gewünschten Umdispositionen des Landes zugunsten der Großgerätepauschale ein Globalbetrag in der Höhe von rund 80,8 Mio. DM vorgesehen.

Angaben des Landes zufolge ist für den Rahmenplan für Hochschulbau in den drei Jahren 1998 bis 2000 eine Erhöhung der DV-Investitionen innerhalb der Ersteinrichtung von durchschnittlich bisher 10 Mio. DM pro Jahr auf 15 Mio. DM vorgesehen. Bei den Klinika werden die EDV-Beschaffungen noch stärker zunehmen.

Seit Anfang der neunziger Jahre wurden nach Angaben des Landes in Bayern rund 80 Mio. DM in den Aufbau hochschulinterner Rechnernetze (ohne Klinikbereich und Neubauten) investiert. Damit sind 75 % der in Frage kommenden Hochschulräume vernetzt.<sup>5)</sup> In den nächsten vier Jahren sind Maßnahmen zur Vervollständigung und weiteren Leistungsverbesserung der Hochschulnetze für weitere rund 35 Mio. DM geplant.

## **2. Technische Zielvorstellungen**

### **a) Hardware**

Das Land beabsichtigt die Beschaffung eines leistungsstarken moderat-parallelen Vektorrechners mit großem Hauptspeicher und entsprechend großem Plattenspeicher. Aufgrund einer höheren Effizienz der Auslastung des Einzelknotens wird die Installation eines moderat-parallelen Vektorrechners gegenüber der möglichen Be-

---

<sup>5)</sup> Bericht der bayerischen Netzkommission „Hochschulinterne Datennetze – Stand und Planung in Bayern“ (wird demnächst veröffentlicht).

schaffung eines massiv-parallelen Rechners, der sich aus einer größeren Anzahl leistungsschwächerer Einzelknoten zusammensetzt, favorisiert. Nach Einschätzung des Landes besteht in Deutschland derzeit ein Mangel Höchstleistungsrechnern, die sich besonders für Programme eignen, die sich nicht beliebig fein parallelisieren lassen. In einem Gespräch des LRZ mit Arbeitsgruppen, die zu den Hauptnutzern des geplanten Höchstleistungsrechners zählen werden, wurde nach Auskunft des Landes deutlich, daß die meisten Anwender großen Wert auf die Bereitstellung möglichst leistungsstarker und mit großem Hauptspeicher ausgestatteter Knoten legen. Auch hinsichtlich industrieller Anwendungen werden Vektorarchitekturen als gegenwärtig am geeignetsten bewertet.

Ferner beabsichtigt das Land die Beschaffung eines Systems zur interaktiven Vor- und Nachbearbeitung der Eingabedaten bzw. der errechneten Daten sowie ein Speicher- und Archivierungssystem für Massendaten.

Im Endausbau soll das Rechnersystem mindestens eine Dauerleistung von 0,4 Tflop/s erreichen. Dies entspricht einem Rechner mit einer Spitzenleistung von 1,5 bis 2 Tflop/s je nach Effizienz der Parallelisierung. Weitere Leistungsmaße sollen bei der Ausschreibung berücksichtigt werden. Ein- und Ausgabekapazität des Systems sollen der Leistung angeglichen werden. Einzelne Peripherie-Kanäle sollen auf HiPPI-Geschwindigkeit (ca. 100 MByte/s in beide Richtungen) ausgelegt sein. Die Netzverbindungen sollen ATM mit 622 MBit/s, in der zweiten Ausbaustufe Anschlußraten im GBit/s-Bereich unterstützen. Geplant ist die Einrichtung von Betriebsmodi, bei denen eine kleinere Prozessoranzahl für Testzwecke bereitgestellt werden kann. Für bestimmte Programmläufe sollen auch Blockzeiten angeboten werden.

Angestrebt wird ein Verhältnis Hauptspeicher (in GByte) zu Spitzenleistung (Gflop/s) von 1 zu 2. Im Endausbau soll eine Speichergröße von 750 bis 1.000 Gbyte erreicht werden.

Der Hintergrundspeicher setzt sich aus lokalen Platten für temporäre Daten, den lokalen Platten für längerfristige Datenspeicherung und einem Speicher für Massendaten zusammen. Die Kapazität der lokalen Platten soll das 6- bis 8-fache des Hauptspeichers betragen. Die Speichergröße für die längerfristige Datenhaltung und

Archivierung wird bei einer angenommenen Datenerzeugung von ca. 500 GByte/Tag auf 10 TByte Platten- und 600 TByte Bandkapazität geschätzt. Beide Speichertypen (Platten/Bänder) sollen nicht nur vom Höchstleistungsrechner, sondern auch von vor- und nachbearbeitenden Rechnern aus mit extrem großer Bandbreite (Größenordnung 40 bis 80 GByte/s) zugreifbar sein. Das dafür erforderliche Datenhaltungssystem wird am LRZ für die Landeshochleistungsrechner bereits aufgebaut und müßte für den Höchstleistungsrechner entsprechend erweitert werden.

Für die interaktive Vor- und Nachbearbeitung von Daten wird die Beschaffung eines zusätzlichen, interaktiv nutzbaren Rechners angestrebt, der den Zugriff zur langfristigen Datenhaltung des Höchstleistungsrechners und eine schnelle Netzanbindung ermöglicht. Hier ist ein Ausbau des vorhandenen Rechners erforderlich (Hauptspeichergröße ca. 32 GByte, Prozessorleistung 8 Gflop/s in der ersten Ausbaustufe, bis 2002 32 Gflop/s).

## **b) Software**

Der am LRZ geplante Höchstleistungsrechner soll ausschließlich unter dem Gesichtspunkt beschafft werden, daß auf dem Supercomputer gut vektorisierbare, parallele Programme mit optimaler Leistung laufen und der maximale Durchsatz erzielt wird.

Das Land begründet dies folgendermaßen:

- Im Bereich des wissenschaftlich-technischen Höchstleistungsrechnens liegen die meisten Programme in sehr effizient vektorisierten Versionen vor.
- Eine Bedarfsumfrage des Landes hat ergeben (vgl. Kapitel 3), daß auch die Mehrzahl der gewünschten Projekte für den geplanten Höchstleistungsrechner vektorisiert vorliegt bzw. vektorisierbar ist. Nahezu alle Programme wurden als parallelisierbar eingestuft.
- Message-Passing als Parallelisierungsmethode ist oft nur bis zu einer beschränkten Anzahl von Knoten effizient möglich. Solche Programme können daher nur eine hohe Leistung erbringen, wenn der einzelne Knoten sehr leistungsstark ist; dies trifft gegenwärtig vor allem für moderat-parallele Vektorrechner zu. Die meisten kommerziellen Anwendungen sind trotz erheblicher Anstrengungen der Hersteller

derzeit nur effizient bis zu einer kleinen Knotenanzahl parallelisierbar (meist bis 16 Knoten, selten bis 32 Knoten oder darüber). Im Zusammenhang damit wird auf die in EUROPORT-Projekten gemachten Erfahrungen hingewiesen. Viele Anwendungspakete (z. B. Finite-Elemente-Programme für Strukturanalysen) liegen nur für moderat-parallele Vektorrechner vor oder sind auf diesen Rechnern deutlich leistungsfähiger als auf massiv-parallelen Rechnern.

- Gegenwärtig ist Spitzenleistung für die meisten Programme vor allem auf einer Kombination leistungsfähiger Einzelknoten mit Message-Passing-Parallelisierung auf einer moderaten Anzahl paralleler Knoten zu erzielen. Nach Auskunft des Landes sind im Vergleich zur aufwendigen Parallelisierung für massiv-parallele Rechner erheblich geringere Anstrengungen zur Optimierung der Programme erforderlich.

Vor dem Hintergrund der Bedarfsumfrage des Landes geht man davon aus, daß auf dem geplanten Höchstleistungsrechner am LRZ fast ausschließlich eigenentwickelte Programme verwendet werden.

Zur Unterstützung der Benutzer bei der Portierung und Optimierung ihrer Programme auf den geplanten Höchstleistungsrechner ist eine mindestens ein- bis zweijährige herstellerseitige Benutzerunterstützung vorgesehen, die zusammen mit den Ansprechpartnern am LRZ erfolgen soll. Universitätsseitig soll die Benutzerbetreuung vom Kompetenznetzwerk (vgl. Kapitel 5) betrieben werden, das sich verstärkt mit den Weiterentwicklungen und Anpassungen der Algorithmik befassen soll.

Um sowohl die Leistungsfähigkeit des geplanten Rechners für vektorisierbare Anwendungsprogramme zu bewerten als auch den bei der Portierung dieser Programme auf den Rechner zu erwartenden Aufwand einschätzen zu können, hat das LRZ bisher sieben dieser Anwendungsprogramme, kommerzielle Codes und ein weit verbreitetes Molekulardynamik-Programm in seine Benchmarksuite aufgenommen. In Kontakten mit anderen Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland wird derzeit versucht, weitere vektorisierbare Benutzerprogramme zur Ergänzung der Benchmarks zu erhalten.



Zur effizienten Abstimmung zwischen Hardware und Software im geplanten Höchstleistungsrechenzentrum sollen verschiedene Parallelisierungsverfahren kombiniert und die Parallelität auf allen Ebenen ausgenutzt werden. Auf diesem Wege soll ein Vorstoß in höchste Leistungsklassen erreicht werden.

Zur Migration von Benutzerprogrammen auf den geplanten Höchstleistungsrechner sind die Anwender auf Compiler, Message-Passing-Bibliotheken, hochoptimierte mathematische Programmbibliotheken und Werkzeuge zur Optimierung sowie Debugger angewiesen. Die erforderlichen Werkzeuge und Bibliotheken sind auf den derzeit bzw. in absehbarer Zeit verfügbaren moderat-parallelen und massiv-parallelen Systemen vorhanden. Das LRZ ist als Standort für eine Testinstallation von UNICORE vorgesehen. Sobald UNICORE zur Einsatzreife gelangt ist, soll es auch auf dem bayerischen Höchstleistungsrechner installiert werden.

Eine große Anzahl der bekannten Programme für den geplanten Höchstleistungsrechner liegt bereits in einer Form vor, die ohne großen weiteren Aufwand leistungsfähig ausführbar sind. Auch zahlreiche eigenentwickelte Benutzerprogramme aus dem Bereich des Höchstleistungsrechnens sind bereits in optimierten Varianten für die unterschiedlichsten Architekturen verfügbar, da die Benutzer bisher schon auf bereits vorhandenen Höchstleistungsrechnern Projekte bearbeitet haben.

Hinsichtlich der Kooperationen zwischen den Hochschulen und der Industrie auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens sollen für industrielle Anwender vor allem kommerzielle Programmpakete, die von Independent Software Vendors erstellten Programme (ISV-Pakete), eingesetzt werden. Die meisten dieser Pakete sind nach Auskunft des Landes sowohl für massiv-parallele Rechner als auch für moderat-parallele Vektorrechner optimiert erhältlich, einige jedoch nur in nicht-parallelisierter Version, so daß unter Leistungsgesichtspunkten bisher den Vektorversionen der Vorzug gegeben wird. Im Zusammenhang damit wird auf Erfahrungen am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart verwiesen. Dort laufen Industrieanwendungen, die kommerzielle Anwendungspakete benötigen, fast ausschließlich auf dem moderat-parallelen Vektorrechner NEC SX-4.

### c) Vernetzung

Wie bereits im Zusammenhang mit den zukünftig vorgesehenen EDV-Investitionen erwähnt, ist eine Vervollständigung und weitere Leistungsverbesserung der Hochschulnetze geplant. Wegen der großen Datenmengen, die zwischen den graphischen Workstations beim Endkunden und dem Höchstleistungsrechner transferiert werden, wird eine weitere Erhöhung der Bitrate gewünscht.

### 3. Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten und Anwendungsfelder

1997 wurde vom LRZ im Auftrag des Bayerischen Staatsministeriums für Unterricht, Kultus, Wissenschaft und Kunst der Bedarf der Höchstleistungsrechenkapazität an den bayerischen Hochschulen, in der bayerischen Industrie und bei den in Bayern vertretenen außeruniversitären Forschungseinrichtungen (Deutsche Gesellschaft für Luft- und Raumfahrt, Fraunhofer Gesellschaft, Max Planck-Gesellschaft) erfragt. Es sollte in Erfahrung gebracht werden, welcher Bedarf an Höchstleistungsrechnern für Forschungsprojekte vorliegt, der von den bereits installierten Landeshochleistungsrechnern und bundesweit nutzbaren Höchstleistungsrechnern nicht abgedeckt werden kann. Ferner wurden technische Anforderungen bzgl. Rechenleistung, Prozessorzahl sowie Speicher- und Plattenausbau ermittelt. Zusammenfassend ergibt sich danach folgendes:

- Es wurden 135 Projektvorschläge eingereicht, die insgesamt rund 34.900 CPU-Stunden bei einer Rechenleistung von 1 Tflop/s umfassen würden.
- Acht Projektvorschläge wurden vom LRZ der Leistungskategorie „Extrem hohe Anforderungen“ und 45 Projekte der Kategorie „Hohe Anforderungen“ zugeordnet.<sup>6)</sup>
- Aufgeschlüsselt nach Fachgebieten entfällt die Mehrzahl der Projektvorschläge auf die Physik (63 Projekte mit rund 16.200 CPU-Stunden), gefolgt von der Strömungsmechanik (30 Projekte mit rund 10.100 CPU-Stunden). Die an-

---

<sup>6)</sup> „Extrem hohe Anforderungen“: Bedarf an Rechenleistung und Speicher wird auf dem geplanten HLRB nicht vollständig abzudecken sein; „Hohe Anforderungen“: Bedarf kann auf dem geplanten HLRB gedeckt werden. Ferner wurden Projekte in die Gruppen „Mittlerer Leistungsbedarf“ (Projekte im Grenzbereich der derzeit verfügbaren Kapazitäten), „Geringer Leistungsbedarf“ (für den geplanten HLRB ungeeignet) gebildet.

spruchvollsten Projekte stehen im Zusammenhang mit FORTWIHR (hauptsächlich München, Erlangen).

- Der im bayerischen Hochschulbereich angemeldete Bedarf für die nächsten drei Jahre würde einen Rechner der Spitzenrechenleistung von 1 Tflop/s zu 130 % auslasten.
- Vier Industrieunternehmen und die Deutsche Gesellschaft für Luft- und Raumfahrt, die Fraunhofer Gesellschaft und die Max Planck-Gesellschaft haben zehn bzw. 22 Projektvorschläge eingereicht. Die bayerische Industrie würde einen 1 Tflop/s-Rechner zu 2,5 % der Rechnerkapazität über einen Zeitraum von drei Jahren in Anspruch nehmen, wobei etwa 0,5 % nicht dem Bereich Höchstleistungsrechnen zugeordnet werden können. Anzumerken ist, daß die bayerische Industrie sich zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht zur Abnahme von Rechenkapazität verpflichten wollte. Organisatorische Fragen und finanzielle Beteiligung bzw. Rechenzeitkosten blieben noch ungeklärt. Die Projektthemen liegen im Bereich der Automobilindustrie, der Luftfahrtindustrie und der Strömungsmechanik. Der durch die oben genannten außeruniversitären Forschungseinrichtungen bezifferte Bedarf liegt laut Umfrage bei etwa 30 % der angenommenen Rechnerkapazität. Die Projekte können der Strömungsmechanik, Klimamodellierung und Schadstoffausbreitung zugeordnet werden.
- Es wird davon ausgegangen, daß für den geplanten Höchstleistungsrechner insgesamt eine Rechenleistung von 2 bis 3 Tflop/s benötigt wird, wovon allein 1 bis 2 Tflop/s durch bayerische Projekte ausgelastet würden.

#### **4. Nutzung der Kapazität**

Der geplante Höchstleistungsrechner am LRZ soll ausschließlich für Projekte genutzt werden, die rechenintensive Problemstellungen zum Gegenstand haben, die auf verfügbaren Hochleistungsrechnern nicht bearbeitet werden können. In erster Linie soll der Rechner für Belange der Wissenschaft eingesetzt werden. Eine Einbeziehung der Industrie ist vorgesehen.

Um den wissenschaftlich hohen Anspruch der auf dem geplanten Höchstleistungsrechner zu bearbeitenden Projekte zu gewährleisten, sollen ein Lenkungsausschuß

und ein Gutachterausschuß eingerichtet werden.

Vom *Lenkungsausschuß* sollen Ziele und Schwerpunkte für die Nutzung des Rechners festgelegt und kontrolliert werden. Er soll sich etwa ein- bis zweimal jährlich treffen und aus Vertretern der Bayerischen Staatsregierung, der Deutschen Forschungsgemeinschaft und bayerischen Wissenschaftlern zusammensetzen, die auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens kompetent sind. Der Direktor des LRZ soll als Gast an den Sitzungen teilnehmen. Der Lenkungsausschuß soll folgende Aufgaben wahrnehmen:

- Billigung der Nutzungs- und Betriebsordnung
- Bestimmung des Anwendungsprofils und Billigung der dazu notwendigen Betriebsformen
- Festlegung von Abrechnungsfomalismen
- Aufstellung von Regeln für die Vergabe von Rechenkapazität
- Anhörung des Kompetenznetzwerkes

Außerdem befaßt sich der Lenkungsausschuß mit der Software-Beschaffung und Hardware-Erweiterung und spricht diesbezüglich Empfehlungen aus.

Ein vom Lenkungsausschuß zu berufender *Gutachterausschuß* soll den wissenschaftlichen Anspruch und die wissenschaftliche Kompetenz des Antragstellers beurteilen. Die Mitglieder des Gutachterausschusses sollen gutachterliche Aufgaben an andere Wissenschaftler delegieren können.

Vom Land wurde zugesichert, daß Projekte von einem überwiegend überregional zusammengesetzten Gutachterausschuß nach ausschließlich wissenschaftlichen Kriterien begutachtet und ausgewählt werden sollen. Die vom Wissenschaftsrat geforderte 100%ige bundesweite Öffnung der Kapazitäten hat das Land zugesagt.

Ein Teil der Ressourcen ist für die bayerische Industrie und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen vorgesehen. Das Land geht davon aus, daß nach Installation eines Höchstleistungsrechners der Bedarf der bayerischen Industrie an Höchstleistungsrechenkapazitäten steigen wird.

## 5. Kompetenznetzwerk

Ein begleitendes Kompetenznetzwerk soll der Entwicklung und Förderung der Fachkompetenz im Bereich des wissenschaftlichen Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Bayern dienen. Es knüpft an die Arbeit des bayerischen Forschungsverbundes FORTWIHR an. Die Aufgaben des Kompetenznetzwerks sollen generell dezentral an den bayerischen Hochschulen und außeruniversitären Forschungseinrichtungen ausgeführt werden. Ziel ist auch die Einbindung der wichtigsten Forschungseinrichtungen einschließlich der in der Wirtschaft vorhandenen Fachkompetenz.

Als Aufgaben eines Kompetenznetzwerks werden genannt:

- Entwicklung und Pflege von Anwendungssoftware auf Höchstleistungsrechnern
- Unterstützung der Nutzer bei der Portierung ihrer Probleme auf Höchstleistungsrechner
- Heranbildung von Nachwuchs im technisch-wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnen
- Transfer von Know-how in die Industrie durch Bearbeitung gemeinsamer Projekte
- Entwicklung von Fortbildungsangeboten im wissenschaftlich-technischen Höchstleistungsrechnen auch durch Nutzung neuer Medien
- Veranstaltung von Workshops und Tagungen zur Schulung im Höchstleistungsrechnen
- Mitwirkung an der Verarbeitung des Wissens über Bedeutung, Methoden und Ergebnisse des Höchstleistungsrechnens in der Öffentlichkeit
- Schaffung einer Schnittstelle zu überregionalen und übernationalen Netzwerken

Am LRZ sollen weiterhin alle Projekte von wissenschaftlichen Mitarbeitern des LRZ betreut werden. Der Betreuer soll die vom Gutachterausschuß zugelassenen Nutzer während der Bearbeitungszeit beraten und die für die Bearbeitung notwendigen Betriebsmittel (Rechenzeit, Arbeitsspeicher, Archivspeicher, Anzahl der Prozessoren usw.) vergeben. Er leitet die Bearbeitung ggf. an andere geeignete Rechner (z. B. kleinere Anlagen oder Großrechner anderer Architektur) weiter.

Während die Betreuergruppe rechnernahe und serviceorientierte Aufgaben wahrnehmen soll, sind methodische, fachspezifische und wissenschaftliche Fragen an das Kompetenznetzwerk zu delegieren. Das Konzept für den bayerischen Höchstleistungsrechner sieht für die am LRZ eingerichtete Betreuergruppe eine Personalerhöhung um zwei wissenschaftliche Mitarbeiter/Mitarbeiterinnen (derzeit drei wissenschaftliche Mitarbeiter), für die System- und Betriebsgruppe, die für die Einstellung der Betriebsparameter und die laufende Überwachung des Betriebes zuständig ist, um drei wissenschaftliche Mitarbeiter/Mitarbeiterinnen (derzeit fünf wissenschaftliche Mitarbeiter und eine mathematisch-technische Assistentin) vor.<sup>7)</sup>

## 6. Finanzierung und zeitliche Realisierung

Eine Gesamtinvestitionssumme von 60 Mio. DM beinhaltet die Kosten für den Rechner, die Installation, den Netzanschluß, die Erweiterung des bestehenden Archivierungssystems und die graphischen Vor- und Nachbearbeitungsrechner.

Im Entwurf zum 28. Rahmenplan wurden für die Jahre 1999 bis 2001 jährliche Investitionsraten in der Höhe von 10 Mio. DM, 30 Mio. DM und 20 Mio. DM angemeldet.

Die zusätzlich anfallenden Betriebskosten werden mit 30 Mio. DM beziffert und setzen sich wie folgt zusammen:

- 21,5 Mio. DM Wartungskosten der Geräte bei sechs Jahren Standzeit (ein Jahr Gewährleistung, fünf Jahre Instandsetzung, sechs Jahre Instandhaltung). Angesetzt werden 6,5 % der Investitionssumme an jährlichen Ausgaben.
- 5 Mio. DM Energiekosten (bei 500 kW für Verbrauch, inkl. notwendiger Kühlleistung) über sechs Jahre und 0,19 DM/kWh
- 3,5 Mio. DM Personalkosten (zwei Betreuer/wissenschaftliche Angestellte und drei wissenschaftliche Mitarbeiter) über die Standzeit von sechs Jahren

Zur Finanzierung der Investitions- und Betriebskosten sind 60 Mio. DM aus Privatisierungserlösen des Landes und ein Bundesanteil an der Investitionssumme in der Höhe von 30 Mio. DM vorgesehen.

---

<sup>7)</sup> Im Haushaltsplan 1998 verfügt das LRZ über 118 Planstellen. Davon sind 56 Stellen der Nutzer-, Rechner- und Netzbetreuung zugeordnet. Zusätzlich gibt es befristet eingerichtete Projektstellen und studentische Hilfskräfte (Quelle: Angaben des Landes).

Die Installation des Rechnersystems soll in zwei Phasen erfolgen. Die erste Ausbaustufe soll im 3. bis 4. Quartal 1999 realisiert werden. Die zweite Ausbaustufe, die eine technische Modernisierung und den Endausbau beinhaltet, ist für das 4. Quartal 2001 vorgesehen. Die Gesamtstandzeit des Systems wird mit sechs Jahren (bis Mitte 2005) angegeben.

#### **A. II. Konzept der Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein für ein Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen (HLRN)**

Im Juli 1996 wurde von einer Arbeitsgruppe unter Beteiligung des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB) und des Regionalen Rechenzentrums für Niedersachsen/Hannover (RRZN) die Konzeption eines Norddeutschen Höchstleistungsrechenzentrums beschrieben.<sup>8)</sup>

Die zum 27. und 28. Rahmenplan vorgelegte Anmeldung über die Einrichtung eines Norddeutschen Höchstleistungsrechenzentrums und das in diesem Zusammenhang vorgelegte Konzept vom Januar 1998 wird vertreten durch die Länder Berlin (federführend), Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein. Von den sechs Ländern wurden zwei Arbeitsgruppen zur Erarbeitung der Konzeption und eines Verwaltungsabkommens eingesetzt. Brandenburg und Sachsen-Anhalt wünschen derzeit noch keine Einbeziehung, bedenken aber künftige Formen der Beteiligung. Das Verwaltungsabkommen, das den sechs Landesregierungen als Kabinettsvorlage vorliegt, wurde mit Ausnahme des Landes Niedersachsen bereits von den beteiligten Ländern verabschiedet.

Das vorgelegte Konzept über den gewünschten Norddeutschen Höchstleistungsrechner beinhaltet die Darstellung der geplanten Beschaffung, der Finanzierung, der

---

<sup>8)</sup> Norddeutscher Höchstleistungsrechner: Beschreibung der Konzeption eines norddeutschen Höchstleistungs-Rechenzentrums (HLR-Nord), 1. Juli 1996.

Nutzung und Verteilung der Ressourcen, des Betriebs, der verteilten Kompetenzstruktur und des Bedarfs.

Die Länder des geplanten Norddeutschen Verbunds haben sich für ein auf zwei Standorte verteiltes Höchstleistungsrechnersystem entschieden. Dieses soll den unterschiedlich geeigneten Rechnerarchitekturen für HPSC-Anwendungen Rechnung tragen und das bereits vorhandene Know-how in den vorgesehenen Betreiberzentren sowie die Verteilung der Anwendungsbereiche und örtlichen Fachkompetenzen im norddeutschen Raum berücksichtigen. Die Komponenten des Höchstleistungsrechnersystems sollen im ZIB in Berlin und im RRZN in Hannover angesiedelt werden.

## **1. Derzeitige Kompetenz und EDV-Versorgungsstruktur auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens**

### **a) Fachliche Kompetenz**

Das Konzept des Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen baut insbesondere auf langjähriger Erfahrung mit wissenschaftlichem Hochleistungsrechnen im Zusammenhang mit dem Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV) auf, der seit 1984 die Universitäten und Forschungseinrichtungen der Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein mit Hochleistungsrechnerkapazität versorgt.

Das *ZIB*, das als eines der beiden Betreiberzentren im HLRN-Projekt eingerichtet werden soll, wurde 1984 vom Land Berlin als rechtsfähige Einrichtung gegründet. In fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und weiteren wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin betreibt das ZIB Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vor allem in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik. Ein Schwerpunkt des ZIB liegt auf dem Gebiet des Scientific Computing. Die Forschungs- und Entwicklungsarbeit in den Bereichen Numerische Methoden und Diskrete Methoden gliedert sich in die fünf Abteilungen Numerische Analysis und Modellierung, Wissenschaftliche Software, Wissenschaftliche Visualisierung, Optimierung und Wissenschaftliche Informationssysteme. Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner als Dienstleistung für wissenschaftliche Einrichtungen im Land Berlin,



die in begrenztem Umfang auch anderen Ländern zur Verfügung stehen. Im Rahmen von Kooperationen können auch industrielle Anwender auf die Höchstleistungsrechenkapazitäten des ZIB zugreifen. Die Zuteilung von Rechenzeit erfolgt über einen Zulassungsausschuß. Das ZIB ist ebenso wie das LRZ in Bayern am UNICORE-Projekt beteiligt. Eine Arbeitsgruppe am ZIB beschäftigt sich ferner mit nichtnumerischen Projekten des Höchstleistungsrechnens (Kombinatorik, diskrete Optimierung), die auf der Hochleistungsebene auf Superskalar-Rechnern bearbeitet werden. Das ZIB ist die federführende Einrichtung des Berliner Landesnetzes BRAIN (Berlin Research Area Information Network). Neben der Kooperation mit wissenschaftlichen Einrichtungen werden vom ZIB Projekte mit Institutionen und Unternehmen aus den Bereichen Telekommunikation, Medizin, öffentlicher Nahverkehr und Logistik, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energieversorgung, Maschinen- und Fahrzeugbau durchgeführt.

Das RRZN in Hannover wurde 1971 gegründet. Bereits 1972/73 wurden im RRZN Hochleistungsrechner installiert. Seit 1984 hat das RRZN - bis zur Installation eines eigenen Vektorrechners - zunächst Projekte aus dem Raum Niedersachsen betreut, die auf Rechnern der zum damaligen Zeitpunkt höchsten Leistungsklasse in Berlin (ZIB) und Kiel durchgeführt wurden. Ab 1990 hat das RRZN leistungsfähige moderat-parallele Vektorrechner bzw. massiv-parallele Rechner (Siemens S400 bzw. VPP300 und CRAY T3E) in den Norddeutschen Verbund eingebracht. Der Schwerpunkt lag bei Vektorrechneranwendungen aus den Bereichen Finite-Element-Methoden, Meteorologie und Klimatologie, Physik und Chemie. Die auf den Höchstleistungsrechnern in Stuttgart und Jülich durchgeführten Projekte werden ebenfalls vom RRZN betreut. Ein besonderer Schwerpunkt des RRZN ist die Visualisierung wissenschaftlicher Ergebnisse. Leistungsfähige Graphikrechner wurden bereitgestellt und die Erstellung von Video-Filmen als Service angeboten, der weitgehend über das Netz genutzt werden kann. Ein Virtual Reality Studio wird zur Zeit aufgebaut. Darüber hinaus nimmt das RRZN an mehreren DFN-Projekten (z.B. Graphikanwendungen im Rahmen des RTB und DFN-EXPO) im Bereich der Visualisierung teil. Im kürzlich eingerichteten Netzkompetenzzentrum ist das RRZN für die niedersächsischen Hochschulen federführend. Ebenso liegt die Koordination eines landesweiten Datennetzes für die Hochschulen in den Händen des RRZN.

Arbeitsgruppen an der Universität Kiel, der Universität Hannover und Universität Rostock beschäftigen sich u.a. mit der Entwicklung effizienter Algorithmen. In den norddeutschen Ländern wird die Modellierungssoftware für Klimamodelle und Subsysteme des Klimasystems entwickelt. Hieran sind verschiedene Hochschulinstitute und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen beteiligt.

#### **b) EDV-Versorgungsstruktur**

Wie bereits erwähnt, praktizieren die Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein seit 1984 eine Verwaltungsvereinbarung (NVV), die die gemeinsame Nutzung und abgestimmte Neubeschaffung der Landeshochleistungsrechner regelt. Der NVV ist bestrebt, zu jeder Zeit an mindestens einem der drei Standorte Berlin, Hannover und Kiel einen Hochleistungsrechner zur Verfügung zu stellen. Der Vertrag der drei Länder bildet die Grundlage für die wechselseitige Nutzung dieser Rechner und für die Zusammenarbeit bei der Ausbauplanung. Während der moderat-parallele Vektorrechnerbedarf im NVV vornehmlich an den Standorten Hannover und Kiel gedeckt wird, stehen seit 1994 bzw. 1996 im ZIB zwei massiv-parallele Rechner (CRAY T3D, CRAY T3E) zur Verfügung.

Unterhalb der Hochleistungsrechnerebene sind Workstation-Cluster hoher Leistung angesiedelt. Wie sich die derzeitige Rechnerversorgung auf dem Gebiet des Hochleistungsrechnens in den sechs Ländern gestaltet, kann Tabelle 5 im Anhang entnommen werden.

In der TOP500-Liste vom 05. November 1998 nimmt die CRAY T3E/900-Anlage des ZIB Platz 36, die CRAY T3E/900 der Universität Rostock Platz 251 und die CRAY T3E am Alfred-Wegener-Institut in Bremerhaven, die zu 8 % mitgenutzt werden kann, Platz 310 ein.

Nach Auskünften der beteiligten Länder wird die für die Forschung verfügbare Rechenkapazität im Hochleistungsbereich (mehr als 1 Gflop/s) im Norddeutschen Verbund bis zum Jahresende eine Leistung von mehr als 500 Gflop/s erreichen.

### c) Auslastung und Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern

Tabelle 6 (Anhang) zeigt die Auslastung der in den norddeutschen Ländern bereitgestellten Hochleistungsrechner für das Jahr 1997. Die Anlagen am ZIB sind zu 100 % ausgelastet, wobei insbesondere die TU Berlin mit mehreren Projekten vertreten ist und vergleichsweise hohe Nutzungsanteile aufweist. Während der moderat-parallele Vektorrechner zum überwiegenden Teil von der Fachrichtung Chemie genutzt wird, ist auf dem massiv-parallelen Rechner die Fachrichtung Ingenieurwesen stärker mit Projekten vertreten. Die Rechner des ZIB wurden auch von Einrichtungen genutzt, die nicht dem Norddeutschen Verbund angehören (z. B. Universität Halle, TU Dresden). Auf den Rechnern des RRZN wurden überwiegend niedersächsische Projekte bearbeitet. Die Anlagen in Rostock, Kiel und Hamburg wurden fast ausschließlich von lokal ansässigen Projektarbeitern in Anspruch genommen.

Zusätzlich zu den Landeshochleistungsrechnern werden Projekte auch mit Hilfe von Rechenkapazitäten außerhalb des Norddeutschen Verbunds bearbeitet (vgl. Tabelle 7 im Anhang):

- Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Auf dem Höchstleistungsrechensystem des HLRS wurden 1998 zwei Projekte aus dem Bereich der Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften (Universität Kiel), sechs der Fachrichtung Chemie (TU Berlin, Universität Göttingen, HU Berlin) und ein Projekt aus dem Bereich der Ingenieurwissenschaften (Universität Hamburg) bearbeitet. Insgesamt wurden 15 % der Gesamtkapazität des massiv-parallelen Rechners in Anspruch genommen.

- Höchstleistungsrechenzentrum am Forschungszentrum Jülich (HLRZ)

Insgesamt elf Projekte aus den Bereichen Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften (1 Projekt), Chemie (2 Projekte), Ingenieurwesen (2 Projekte) und Physik (6 Projekte) nutzten im Jahr 1998 rund 5 % der moderat-parallelen Vektor- und 39 % der massiv-parallelen Rechner des HLRZ. Weitere 21 Projekte (10 Projekte auf den CRAY T3E-Anlagen, 11 auf der CRAY T90-Anlage) sind beantragt und zugelassen.

- weitere Einrichtungen

Die Universität Bremen hat einen Rechner am Institut of Fluid Science in Sendai Japan und von IBM in Karlsruhe genutzt. Ferner hat die Universität Bremen Kapazitäten des Deutschen Klimarechenzentrums (DKRZ) in Hamburg, des GMD-Forschungszentrums Informationstechnik, einen Höchstleistungsrechner in den Niederlanden (NLR) und in Italien (CIRA) in Anspruch genommen (Angaben über Rechenanteile liegen nicht vor). Am DKRZ wurden von der Universität Hamburg 1996 und 1997 18 % der Rechenkapazitäten und von der Universität Kiel 3 % bzw. 1,5 % belegt.

#### d) EDV-Investitionen

Die von den beteiligten Ländern in den vergangenen drei Jahren getätigten EDV-Investitionen belaufen sich insgesamt auf ca. 250 Mio. DM (Angaben der Länder). Dies entspricht einer durchschnittlichen jährlichen Investitionssumme von rund 83 Mio. DM. Hier handelt es sich sowohl um Mittel, die über die jeweiligen Landesprogramme im HBFG-Verfahren bereitgestellt wurden, als auch um Mittel, die die Hochschulen aus Drittmitteln oder anderen Kapiteln für die EDV-Ausstattung eingebracht haben. Ausgaben für Vernetzungsmaßnahmen und für Kliniken sind in den Angaben nicht enthalten (Ausnahme Schleswig-Holstein, Medizinische Universität Lübeck). Detaillierte Angaben über die getätigten und geplanten Investitionen können Tabelle 8 im Anhang entnommen werden. Von den insgesamt rund 250 Mio. DM EDV-Investitionen entfallen ca. 30 % auf zentrale Server und Geräte der Rechenzentren. Die für die nächsten zwei Jahre geplanten EDV-Investitionen werden von den beteiligten Ländern mit ca. 190 Mio. DM angegeben.

Im Zeitraum 1995 bis 1997 wurden für die beteiligten Länder insgesamt rund 411 Mio. DM als Globalbetrag für Großgeräte (Großgeräte nach § 3 Nr. 4 HBFG) in den Rahmenplan aufgenommen (jährlicher Durchschnittswert rund 137 Mio. DM). Zu berücksichtigen ist, daß sich die Globalbeträge sowohl auf EDV-Geräte als auch auf weitere Großgeräte beziehen. Großgeräte als Teil der Ersteinrichtung sind hingegen in den Globalbeträgen nicht enthalten. In den Empfehlungen zum 28. Rahmenplan (1999 bis 2002) des Wissenschaftsrates werden für das Jahr 1999 Globalbeträge für

Großgeräte (inkl. CIP und WAP) für die sechs Länder in der Größenordnung von insgesamt 127 Mio. DM empfohlen. Niedersachsen und Berlin binden nahezu 60 % der Gesamtempfehlungssumme. Im Entwurf des 28. Rahmenplans für den Hochschulbau ist für die sechs Länder insgesamt eine Großgerätepauschale in der Höhe von rund 104,3 Mio. DM vorgesehen.

In den Jahren 1996 bis 1998 wurden nach Angaben der beteiligten Länder rund 61 Mio. DM in die Ausstattung von Rechnernetzen investiert. Für die Jahre 1999 und 2000 sind Investitionen in der Höhe von 63 Mio. DM für diesen Bereich vorgesehen, wobei der Investitionsschwerpunkt im Berliner Hochschulraum liegen soll. Zum 28. Rahmenplan wurde dem Wissenschaftsrat ein Bericht über die Entwicklung der hochschulinternen Rechnernetze aller Berliner Hochschulen vorgelegt. Neben der Zielsetzung, die wissenschaftliche Kommunikation durch leistungsfähige Netze sowohl hochschulintern als auch landesweit zu unterstützen, sollen darüber hinaus die Wissenschaftsnetze in Berlin und Brandenburg zu einem Verbund gekoppelt werden. Eine Hochleistungsverbindung soll zwischen den beiden Ländern noch 1998 realisiert werden.

## **2. Technische Zielvorstellungen**

### **a) Hardware**

Der HPSC-Rechner für den Norddeutschen Verbund soll sich aus zwei gekoppelten Hauptkomponenten zusammensetzen. Geplant ist die Installation eines massiv-parallelen Systems neuer Generation am ZIB Berlin und eines moderat-parallelen Systems am RRZN in Hannover. Zusätzlich sollen Komponenten für die Visualisierung der Simulationsabläufe und -ergebnisse sowie für die temporäre und langfristige Datenhaltung beschafft werden. Die Hauptkomponenten sollen folgende Leistungsmerkmale aufweisen:

#### Massiv-paralleler Rechner neuer Generation mit RISC-Prozessoren

- Rechenleistung im Tflop Bereich
- gemeinsam adressierter Hauptspeicher von mindestens 0,5 TByte
- angemessener Hintergrundspeicher für eine ausgewogene Konfiguration
- angemessene Ein- und Ausgabeleistung

#### Moderat-paralleler Vektorrechner

- Rechenleistung mindestens 0,5 Tflop/s (peak)
- Hauptspeicher mindestens 0,5 TByte
- angemessener Hintergrundspeicher für eine ausgewogene Konfiguration
- angemessene Ein- und Ausgabeleistung

#### Visualisierungssystem (VIS)

- mindestens 64 Prozessoren (SMP-Architektur)
- Gesamtleistung mindestens 25 Gflop/s
- mindestens 8 Graphikpipelines
- Hauptspeicher mindestens 128 GByte
- Hintergrundspeicher ca. 2 TByte
- High-End 3D-Graphikausgabe (Cave, Video, Drucker, 3D-Plotter)

Die beteiligten Länder gehen davon aus, daß vor dem Jahre 2002 keine grundlegend neuen Prozessor- und Systemarchitekturen zu erwarten sind und daher die geplante Kombination von moderat-parallelem Vektorrechner und massiv-parallelem Rechner neuer Generation vorerst nicht durch ein einziges einheitliches System ersetzt werden kann.

Aufgrund der auf zwei Standorte verteilten Ressourcen ist eine Abstimmung der Betriebsstrategien der unterschiedlichen Systemumgebungen erforderlich, die im NVV bereits in mehreren Projekten praktiziert wurde (z.B. ein Projekt über die verteilte Berechnung eines Ozeanmodells auf dem moderat-parallelen Vektorrechner des DKRZ Hamburg und dem massiv-parallelen Rechner des ZIB). Wichtige Voraussetzungen im Zusammenhang mit der Systemabstimmung bilden die geplanten Hochgeschwindigkeitsnetze zwischen RRZN und ZIB, die Schaffung eines einheitlichen Systems für den Rechner- und Dateizugriff durch das Projekt UNICORE, ein einheitliches

Network Queueing System (NQS) als Schnittstelle für den Stapelbetrieb und Absprachen zur Vereinheitlichung der Benutzeradministration.

Die sechs beteiligten Länder haben beschlossen, Hochleistungsrechner im Sinne des NVV weiterhin bereitzustellen. Damit soll erreicht werden, daß der geplante Höchstleistungsrechner nicht zur Abdeckung der Grundlast im Hochleistungsbereich herangezogen werden muß. Der NVV ist auf die Länder Bremen, Hamburg und Mecklenburg-Vorpommern zu erweitern. Massenspeicher für Datenarchivierung, Back-up und Datenübertragung sind an den geplanten Standorten vorhanden. Es wird vorausgesetzt, daß die Landeshochleistungsrechner weiterhin den einzelnen Hochschulen eine ausreichende technische und fachliche Umgebung zur Vorbereitung der für den Höchstleistungsrechner bestimmten Großprojekte bieten. Spezielle Zugangsrechner sind nicht vorgesehen.

#### **b) Software**

Für den geplanten Höchstleistungsrechner im Norddeutschen Verbund sollen selbst entwickelte bzw. kommerzielle Anwendungspakete eingesetzt werden. Diese Programme laufen derzeit bereits in Projekten der HLRN-Länder oder sollen zukünftig als Kern-Software für den Höchstleistungsrechner verwendet werden. Hinsichtlich der Lauffähigkeit der anzuwendenden Programme und dem damit zusammenhängenden Umstellungsaufwand wird von den beteiligten Ländern ausgeführt, daß viele der Programme bereits auf massiv-parallelen Rechnern - bei guter Skalierbarkeit - und auf moderat-parallelen Vektorrechnern eingesetzt werden.

Aufgegliedert nach Fachdisziplinen werden von den beteiligten Ländern folgende Angaben zum Software-Bereich gemacht:

- In der Chemie sollen kommerzielle und eigenentwickelte Programme eingesetzt werden, die teilweise für moderat-parallele und massiv-parallele Rechner verfügbar sind. Teilweise sind Portierungen und Optimierungen für die massiv-parallele Architektur erforderlich. Für die im HLRN-Gebiet geplanten Projekte werden weitere Anwendungspakete für erforderlich gehalten, die erst kürzlich verfügbar

wurden oder demnächst bereitgestellt werden sollen und wichtige Funktionalitäten auf massiv-parallelen Plattformen anbieten.

- In den Ingenieurwissenschaften ist der überwiegende Einsatz von eigenentwickelten Programmen vorgesehen. Für den Bereich der Strömungsmechanik ist mit einer Portierungszeit für mäßig komplexe Codes von ca. 0,5 Personenjahren zu rechnen. Hinsichtlich komplexer Codes eigenentwickelter und kommerzieller Programme wird eine Portierungszeit von mehreren Personenjahren veranschlagt.
- Für den Bereich der Physik sollen vor allem eigenentwickelte Programme, die größtenteils bereits für massiv-parallele Rechner entwickelt wurden (insbesondere am ZIB), benutzt werden. Aufgrund ihrer Kommunikationsstruktur sind viele Physik-Codes – auch für große massiv-parallele Systeme – mit vergleichsweise geringem Aufwand zu parallelisieren. In diesem Zusammenhang wird das praktizierte Fachberaterkonzept als vorteilhaft angesehen. Mithilfe der Fachberater konnte in relativ kurzer Zeit eine erfolgreiche Parallelisierung erreicht werden. Der Vektoranteil der im Bereich der Physik angeforderten CPU-Zeit beträgt nach Auskunft der beteiligten Länder weniger als 15 %. Es wird angenommen, daß dieser Anteil sinken wird, da viele Anwender, die derzeit noch Projekte auf moderat-parallelen Vektorrechnern bearbeiten, eine Umstellung auf massiv-parallele Systeme wünschen; teilweise wurde mit der Umstellung bereits begonnen.
- Für die Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften ist der Einsatz eigenentwickelter Software geplant, die für moderat-parallele und massiv-parallele Systeme bereits bzw. demnächst verfügbar und lauffähig ist.

Die beteiligten Länder im Norddeutschen Verbund gehen davon aus, daß sowohl im Zusammenhang mit der geplanten Hardware als auch durch den Neuentwurf der Programme, insbesondere durch den Einsatz neuer, architekturgemäßer Algorithmen für massiv-parallele Rechner, eine Leistungssteigerung erreicht werden kann. Nach Auskunft der beteiligten Länder können vor allem auf massiv-parallelen Rechnern aufgrund des größeren Speichers und der höheren Rechenleistung – im Vergleich zu den jetzigen Landeshochleistungsrechnern – deutlich umfangreichere Projekte und neue Problemstellungen höherer Komplexität bearbeitet werden. Es wird darauf hingewiesen, daß im HRLN-Gebiet die Fachberater bei der Portierung und Optimierung von Anwendungsprogrammen auf massiv-parallelen Rechnern seit langem Erfahrun-



gen gesammelt haben. Dies erfolgte teilweise in enger Kooperation mit den Software-spezialisten der Rechnerhersteller. Die beteiligten Länder im Norddeutschen Verbund gehen davon aus, daß die erforderliche Software-Anpassung zügig und effizient durchgeführt werden kann.

### **c) Vernetzung**

Die Hauptkomponenten des geplanten Höchstleistungsrechenzentrums sollen durch das Breitband-Wissenschaftsnetz des DFN-Vereins (B-WiN) miteinander verbunden werden. Ab dem Jahr 2000 wird der DFN-Verein das Gigabit-Wissenschaftsnetz bundesweit anbieten.

## **3. Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten und Anwendungsfelder**

Der Norddeutsche Verbund hat im Sommer 1997 eine Bedarfsumfrage bei wissenschaftlichen Hochschulen und Fachhochschulen gestartet. Eine konkrete Bedarfsumfrage bei Industrieunternehmen und außeruniversitären Forschungseinrichtungen wurde nicht durchgeführt. Kontakte, die teilweise über Kooperationsverträge abgesichert sind, bestehen bereits zum Max-Planck-Institut Potsdam (Gravitationsforschung), zum Institut für Klimafolgenforschung Potsdam (PIK) und zum DESY in Zeuthen.

Als Kriterium für die Aufnahme in die Projektliste wurde ein jährlicher CPU-Bedarf von mindestens 20.000 Stunden auf einem Rechner vom Typ CRAY T90 (Leistung ca. 2 Gflop/s pro Prozessor) bzw. eine Hauptspeicherkapazität von mindestens 50 GByte pro Programm angesetzt. Ein weiteres Auswahlkriterium stellte die bereits erteilte Zulassung und Bearbeitung auf einem Höchstleistungsrechner in Stuttgart oder Jülich dar. Auf der Grundlage dieser Kriterien wurden zunächst 105 Projekte berücksichtigt, die anschließend auf 96 Projekte reduziert wurden. Zusammenfassend ergibt sich bei Umrechnung der CPU-Anforderungen der einzelnen Projekte auf die Leistungseinheit 1 Tflop/s folgendes:

- Der jährliche CPU-Bedarf beträgt rund 21.500 Stunden.
- Von den 96 Projekten können 33 Projekte den Ingenieurwissenschaften, 25 Projekte der Physik, 21 Projekte den Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften sowie 17 Projekte der Chemie zugeordnet werden. Bezogen auf die Rechenzeit entfallen die größten Anteile auf die Physik (rund 8.200 CPU-Stunden/Jahr), gefolgt von den Ingenieurwissenschaften (rund 6.200 CPU-Stunden/Jahr). Der Forschungsbereich Chemie würde jährlich rund 4.100 CPU-Stunden und die Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften rund 3.000 CPU-Stunden Rechenkapazität binden. Bei 18 Projekten handelt es sich um Vorhaben, die schon für das HLRZ Jülich oder das HLRS Stuttgart zugelassen wurden, dort aber aus Kapazitätsgründen nur eingeschränkt durchgeführt werden können.
- Acht Projekte würden zur Bearbeitung Hauptspeicherkapazitäten zwischen 200 und 1.000 GByte benötigen. Ein Drittel der Projektvorschläge weist einen CPU-Bedarf von mehr als 200 Stunden pro Jahr auf, auf die ca. 80 % des gesamten CPU-Bedarfs entfallen. Darunter befinden sich auch Projekte aus norddeutschen Forschungsschwerpunkten wie Küsten- und Meeresforschung, Klimatologie und Strömungsmechanik. Die mittlere Projektdauer liegt bei drei bis vier Jahren.
- Die Rechnerleistung wurde zu etwa zwei Dritteln auf massiv-parallelen Rechnersystemen und zu einem Drittel auf vektor-parallelen Systemen gewünscht.
- Ohne Berücksichtigung von Projekten aus anderen Bundesländern würde die Durchführung der Projektvorschläge aus den sechs norddeutschen Ländern eine Rechnerleistung von ca. 2,4 Tflop/s erfordern.

#### 4. Nutzung der Kapazität

Der geplante Höchstleistungsrechner soll ausschließlich für sogenannte Grand-Challenge-Vorhaben<sup>9)</sup> eingesetzt und nicht zur Abdeckung der Grundlast im Hochleistungsbereich herangezogen werden. Von den beteiligten Ländern sollen gemeinsame Angelegenheiten grundsätzlicher Bedeutung von einem Verwaltungsrat entschieden werden, in dem jedes Land mit einer Stimme vertreten ist. Die Grundsätze für die Rechnernutzung sind in § 5 des Verwaltungsabkommens zum HLRN geregelt:

„1. Der Höchstleistungsrechner dient der Förderung der Wissenschaft und Forschung in der Bundesrepublik Deutschland.

2. Über die Zulassung von Projekten entscheidet die Zulassungskommission ausschließlich entsprechend der wissenschaftlichen Begutachtung nach den bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft üblichen Kriterien für die Beurteilung von Forschungsvorhaben. Kontingente von mindestens 50 % der Rechenkapazität für Projekte der am HLRN beteiligten Länder können der Zulassungskommission vom Verwaltungsrat vorgegeben werden. Die Zulassungskommission ist bestrebt sicherzustellen, daß gemittelt über drei Jahre jedes Land entsprechend seinem Finanzierungsanteil bei der Vergabe berücksichtigt wird. Zur Vorbereitung von Projektanträgen können die Zentren, in denen Komponenten des HLRN betrieben werden, unter bestimmten Voraussetzungen selbständig Kontingente vergeben.

3. Für Projekte deutscher Hochschulen und überwiegend öffentlich geförderter Forschungseinrichtungen in der Bundesrepublik Deutschland ist die Nutzung des Höchstleistungsrechnersystems entgeltfrei.

4. Industrieprojekte und kommerzielle Projekte werden nach Maßgabe vorhandener Kapazität ebenfalls von der Zulassungskommission beurteilt. Für die Rechnernutzung durch solche Projekte sind grundsätzlich Entgelte zu erheben. Die Einnahmen werden für die Förderung von wissenschaftlichen Projekten des HLRN verwendet.“  
(Verwaltungsabkommen, Stand 8.1.1998).

---

<sup>9)</sup> Zu den Grand-Challenge-Vorhaben zählen beispielsweise Voraussagen über langfristige globale Klimaveränderungen (gekoppelt mit Ozeanmodellen), Wetterprognosen über mehrere Tage, direkte Simulationen turbulenter Strömungen – etwa im Flugzeug- und Automobilbau -, schnelle und genaue Analysen großer Moleküle (z. B. Proteine). Derartige Projekte erfordern Rechenleistungen, die die heute verfügbaren Hochleistungsrechner weit übersteigen. In den USA nennt man die Lösung dieser fundamentalen Probleme „große Herausforderungen“ (Quelle: US-Office of Science and Technology Policy „Grand Challenges 1992“).

§ 4 des Verwaltungsabkommens regelt, daß die *Zulassungskommission* aus mindestens sieben und höchstens elf Wissenschaftlern zusammengesetzt sein soll, die auf Gebieten des HPSC fachlich ausgewiesen sind. Die Auswahl der Mitglieder soll vom Verwaltungsrat nach fachlichen Aspekten erfolgen; jedes Land des HLRN soll vertreten sein. Die Zulassungskommission soll Antragstellern auch Hinweise zur Nutzung anderer Zentren geben. Die Vergabepaxis, die vom ZIB seit Jahren praktiziert wird, soll auf alle Projekte des HLRN ausgedehnt werden.

In den Gesprächen mit den Vertretern des norddeutschen Konzepts haben jene zugesagt, zum einen eine 100%ige bundesweite Öffnung der Kapazitäten und zum anderen eine überwiegend überregionale Zusammensetzung der Zulassungskommissionen zu ermöglichen.

Neben der Zulassungskommission soll eine *Technische Kommission* eingerichtet werden, die u.a. für den Zugang zum Höchstleistungsrechner, für die organisatorische und technische Unterstützung des Benutzers zuständig ist und den Verwaltungsrat in technischen Fragen berät. Die Technische Kommission soll sich aus den Leitern des HLRN und den Leitern der Rechenzentren in den Betreiberzentren zusammensetzen.

## 5. Kompetenznetzwerk

Der Norddeutsche Höchstleistungsrechner soll in den Verbund der anderen Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland eingebunden werden entsprechend der Machbarkeitsanalyse über einen Verbund der Supercomputerzentren in Deutschland (VESUZ).<sup>10)</sup> Die in der Studie empfohlenen Maßnahmen sollen sukzessive umgesetzt und vom HLRN übernommen werden.

Im Mittelpunkt des einzurichtenden Kompetenzverbunds soll die vorhandene Beratungskapazität stehen. Innerhalb des HLRN bilden die Rechenzentren in den Sitzländern und die Landeshochleistungsrechenzentren die tragende Kompetenzstruktur.

---

<sup>10)</sup> Arbeitsgruppe zur Erstellung der Vesuz-Machbarkeitsanalyse: Verbund der Supercomputerzentren in Deutschland – eine Machbarkeitsanalyse -. (Federführung: Zentralinstitut für Angewandte Mathematik, Forschungszentrum Jülich), Oktober 1997.

Im Vorfeld der Projektbegutachtung durch die Zulassungskommission fällt Fachberatern eine wichtige Rolle zu. Derzeit sind etwa 20 HPSC-Fachberater im Bereich des geplanten HLRN tätig. Die Fachberater stellen das Bindeglied zwischen Anwendern einerseits und zwischen Algorithmik, numerischer Mathematik und Informatik andererseits her. Darüber hinaus steht an den Standorten Berlin und Hannover für Betrieb, Systembetreuung und Projektbegleitung weiteres Personal zur Verfügung.<sup>11)</sup> Auskünften der beteiligten Länder zufolge ist bei sechs Verbundpartnern eine personelle Verstärkung in der Fachberatung erforderlich. Es sollen auch Berater zu anwendungsübergreifenden methodischen Schwerpunkten des HPSC und im Hybridbereich innerhalb des Meta-Computings (Zusammenspiel von parallelen und vektorisierten Anwendungen) eingesetzt werden. Vorgesehen ist, daß jedem bewilligten Projekt ein regionaler Projektbetreuer aus den Landeshochleistungsrechenzentren zugewiesen wird, welcher wiederum Fachberater aus den entsprechenden Anwendungsfeldern, aus der Numerik oder Algorithmik hinzuzieht. Ferner soll jedes Projekt einen Projektbetreuer am jeweiligen Bearbeitungsort erhalten. Der Projektbetreuer soll in der Klärung fachlicher Fragen (z.B. bei der Fehleranalyse) und bei der Ressourcennutzung weiterhelfen.

Zielsetzung ist außerdem die Schaffung von thematischen Verbänden in den Anwendungsfächern, die eine Koordinierung der beteiligten Fachberater voraussetzt.

## **6. Finanzierung und zeitliche Realisierung**

Die Finanzierung wird im Verwaltungsabkommen der Länder § 2 geregelt. Demzufolge werden die investiven Maßnahmen im HLRN-Verbund unter Berücksichtigung der Beteiligung durch den Bund nach dem HBFVG getragen. Die Aufteilung der Investitionskosten durch die beteiligten Länder erfolgt nach dem Königsteiner Schlüssel.

Die Länder, in denen die Komponenten des Höchstleistungsrechnersystems angesiedelt sind (Sitzländer) tragen die konsumtiven Kosten für den laufenden Betrieb dieser Komponenten. Finanzielle, personelle, technische und strukturelle Fragen auf

---

<sup>11)</sup> Das ZIB verfügt im Bereich des Rechenzentrums über fünf wissenschaftliche und elf nicht-wissenschaftliche Personalstellen. Am RRZN sind zehn wissenschaftliche und sechs nicht-wissenschaftliche Personalstellen eingerichtet. (Quelle: Angaben der beteiligten Länder)

der Grundlage der vom HLRN-Verbund erlassenen Richtlinien und der jeweiligen landesrechtlichen Regelungen werden von den Sitzländern geregelt.

Im Entwurf des 28. Rahmenplans haben die beteiligten Länder für die Jahre 1999 bis 2002 eine jährliche Investitionssumme von 17,5 Mio. DM (Bundesanteil 8,75 Mio. DM) angemeldet.

Die Gesamtinvestitionssumme der ersten vier Jahre (70 Mio. DM) soll sich wie folgt aufteilen:

- 40 Mio. DM für den massiv-parallelen Rechner neuer Generation mit RISC-Prozessoren
- 20 Mio. DM für den moderat-parallelen Vektorrechner
- 10 Mio. DM für das Visualisierungssystem

Ziel ist, zu einem möglichst frühen Zeitpunkt die volle Leistung der Gesamtkonfiguration zu erreichen und eine größere technische Aktualisierung im Jahr 2002 vorzunehmen.

## B. Stellungnahme

### B. I. Zum Bedarf an Höchstleistungsrechnern

Der Wissenschaftsrat hat in seiner Empfehlung aus dem Jahr 1995 die Einrichtung von zwei bis vier Höchstleistungsrechenzentren befürwortet. Die Förderung derartiger Zentren wurde an eine Reihe von Bedingungen geknüpft, die die fachlichen und technischen Vorleistungen am geplanten Standort, den Aufbau von Kompetenznetzwerken und die Zugangsmöglichkeiten zu den Kapazitäten betrafen. Der empfohlene überregionale Aufbau von zwei bis vier Zentren sollte zeitlich gestuft erfolgen und bei jeweils mindestens einem System die technisch höchste Leistungsklasse vorgehalten werden.

Nachdem das Stuttgarter Höchstleistungsrechenzentrum bereits zwei Jahre in der ersten Ausbaustufe in Betrieb ist und zum 28. Rahmenplan von Bayern und Berlin (federführend) Anträge über den Aufbau von Höchstleistungsrechenzentren vorliegen, hat sich der Wissenschaftsrat erneut mit dem Bedarf für Höchstleistungsrechner auseinandergesetzt. Damit zusammenhängend wurden Informationen über die Nutzung und Auslastung von Höchstleistungsrechnern sowie Einschätzungen über den zukünftig zu erwartenden Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten beim

- Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS),
- Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich (HLRZ)<sup>12)</sup> und
- Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft und des Max-Planck-Instituts für Plasmaphysik

eingeholt.

---

<sup>12)</sup> Die Hermann-von-Helmholtz-Zentren Forschungszentrum Jülich und Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) haben mit Unterzeichnung des neuen Kooperationsvertrages im Sommer 1998 das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) gegründet, das in der Nachfolge des HLRZ dessen bundesweiten Aufgaben und Funktionen als Supercomputer-Zentrum übernommen hat. Das Zentralinstitut für Angewandte Mathematik erbringt im NIC dieselben Leistungen als Supercomputer-Zentrum wie bisher im Rahmen des HLRZ-Kooperationsvertrages.

Angaben der Zentren zufolge sind die verfügbaren Kapazitäten teilweise bereits weit überbucht. Vor diesem Hintergrund wird ein deutlich ansteigender Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten prognostiziert.

Bezüglich des *Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart* wurden insbesondere Engpässe bei den moderat-parallelen Vektorrechnern ausgewiesen. Der Bedarf an massiv-paralleler Rechenleistung wird demgegenüber als weniger angespannt angesehen. Insgesamt wurden in den vergangenen zwei Jahren 80 Projekte auf dem massiv-parallelen Rechner und 88 Projekte auf dem moderat-parallelen Vektorrechner bearbeitet, die nach Begutachtung durch externe Gutachter und Fachvertreter im Lenkungsausschuß in die Kategorie „Höchstleistungsrechner zwingend erforderlich“ eingestuft wurden. Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart geht davon aus, daß zukünftig eine stärkere Nutzung des massiv-parallelen Rechners erfolgt. Auf dem massiv-parallelen System wurden Projekte aus den Bereichen numerische Simulationen der Physik (45 %), der Strömungsmechanik (20 %), der Chemie (13 %), der Festkörperphysik (10 %) und der Klimavorhersage (9 %) bearbeitet. Ferner wurde die Anlage für Projekte der Bioinformatik, der Strukturmechanik, der Elektrotechnik, der Informatik und der Aerothermodynamik genutzt. Auf dem moderat-parallelen Vektorsystem wurden Projekte der Strömungsmechanik (66 %), der Festkörperphysik (20 %), der Chemie (7 %), der Physik (4 %), der Aerothermodynamik (3 %) sowie der Elektrotechnik (0,1 %) durchgeführt.

Im Rahmen des Kooperationsvertrages zwischen dem *Forschungszentrum Jülich* und DESY Hamburg über das Höchstleistungsrechenzentrum (HLRZ) stellt das Forschungszentrum Jülich Supercomputer-Ressourcen für Forschergruppen in Deutschland zur Verfügung. Die Anträge werden von unabhängigen Gutachtern bewertet. In den letzten zwei Jahren wurde die Ausstattung mit Supercomputern erneuert und zu einem Komplex von moderat-parallelen und massiv-parallelen Rechnern ausgebaut. Es werden 50 % der Rechnerleistung für HLRZ-Projekte, 35 % für Aufgaben der Institute des Forschungszentrums und 15 % für Projekte aus der Industrie reserviert. Von Mitte des Jahres 1997 bis Mitte des Jahres 1998 wurden 130 Projekte auf den Rechnern bearbeitet (davon 70 Projekte auf den massiv-parallelen Rechnern CRAY T3E). Durch die Bildung von Großprojekten, die über einen festgelegten Zeitraum einen erheblichen Teil der Rechnerressourcen beanspruchen, werden Aufga-



ben aus dem Bereich der Grand-Challenges angegangen. Für das zweite Halbjahr 1998 konnte aufgrund von Kapazitätsengpässen bei der verfügbaren Rechenzeit lediglich etwa die Hälfte bzw. ein Drittel der beantragten Projekte, die für den moderat-parallelen Vektorrechner bzw. für den massiv-parallelen Rechner vorgesehen waren, bewilligt werden. Thematisch lassen sich die Projekte grob der Astrophysik, der Chemie, der Elementarteilchenphysik und der Vielteilchenphysik zuordnen. Neben dem Forschungszentrum Jülich stellt im Rahmen der HLRZ- bzw. jetzt NIC-Kooperation DESY Zeuthen massiv-parallele Rechner für Projekte der Elementarteilchenphysik zur Verfügung.

Am *Rechenzentrum Garching* erfolgte ein Systemausbau der CRAY T3E-Anlage auf gegenwärtig 812 Prozessoren. Die verfügbare Rechenleistung und die Kapazität des Hauptspeichers konnten dadurch nochmals um 50 % gesteigert werden. Die Supercomputer stehen dem Institut für Plasmaphysik (IPP) zu 30 % und anderen Max-Planck-Instituten (MPI) zu 70 % zur Verfügung und werden ausschließlich mit Projekten belegt, die mit keinem anderen Rechner bearbeitet werden können. Der Supercomputer CRAY T3E im Rechenzentrum Garching wird ausschließlich Nutzern der Max-Planck-Gesellschaft bereitgestellt. Ca. 95 % der Kapazität wurden in den letzten beiden Jahren an sechs Großprojekte vergeben. Im genannten Zeitraum entfielen im Mittel 55 % der Ressourcen auf die Bereiche Materialwissenschaft/Chemie/Polymerforschung, 30 % auf Plasmaphysik/Fusionsforschung und 15 % auf Astrophysik/Astronomie. Es wird davon ausgegangen, daß der Anteil interdisziplinärer Projekte mit Beteiligung der Disziplinen Medizin und Biologie ansteigen wird. Kapazitätsengpässe führen dazu, daß nur die wichtigsten Projekte durchgeführt werden können. Teilweise wird die Nachfrage nach Rechenkapazität der höchsten Leistungsstufe auch durch die Nutzung externer Ressourcen in den USA, der Schweiz und in Japan befriedigt.

Darüber hinaus wurde die Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft bezüglich des Bedarfs an Höchstleistungsrechnern zu Rate gezogen. Die Kommission hat sich dabei „auf die Beantwortung der Frage beschränkt, ob die vorgelegten Unterlagen zur Auslastung der Rechenzentren in Jülich, München (MPG) und Stuttgart die Beschaffung eines weiteren Höchstleistungsrechners rechtfertigen und ist da zu einem negativen Ergebnis gekommen.“ (Schreiben

der Deutschen Forschungsgemeinschaft an die Geschäftsstelle des Wissenschaftsrates vom 14.10.1998). Mit Bezug auf die Empfehlungen der Kommission für Rechenanlagen über die „Informationsverarbeitung und Rechner für Hochschulen 1996 bis 2000“ (Bonn, 1996) wird jedoch erklärt, „daß in Deutschland mehrere Größtrechner für erforderlich gehalten werden. Zeitlich versetzt sollte jeweils ein Rechner der neuesten Generation zugänglich sein. Die Kommission stellt sich auch heute grundsätzlich hinter diese Empfehlung“ (ebenda).

Der Wissenschaftsrat nimmt die Stellungnahme der Deutschen Forschungsgemeinschaft zur Kenntnis und begrüßt, daß vor dem Hintergrund der Empfehlung des Wissenschaftsrates aus dem Jahr 1995 die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Ergebnis die jederzeitige Verfügbarkeit jeweils eines Rechners der aktuell höchsten Leistungsklasse für erforderlich hält.

Der leistungsstärkste Rechner, der in Deutschland derzeit zur Verfügung steht, rangiert nach der TOP500-Liste vom 05. November 1998 auf Platz 13 (Deutscher Wetterdienst, Offenbach: SGI/CRAY T3E/1200, 484 Prozessoren). Die CRAY T3E-Anlage im MPI/IPP Garching liegt mit 812 Prozessoren auf Platz 15, der CRAY T3E/900-Rechner am HLRS mit 540 Prozessoren auf Platz 16 und der CRAY T3E/600-Rechner am NIC mit 540 Prozessoren auf Platz 20. Hinsichtlich der Rechnerleistung lassen sich jedoch für die hiesigen Rechner deutliche Unterschiede zu den weltweit leistungsstärksten Rechnern feststellen. Dieser Abstand erhöht sich drastisch mit dem Ausbau der Supercomputersysteme in den US-Zentren im Rahmen des ASCI-Programms (Accelerated Strategic Computing Initiative) des Department of Energy.

Im internationalen Vergleich ist Deutschland auf dem Gebiet der Hardwareentwicklung und -produktion von Höchstleistungsrechnern nicht wettbewerbsfähig. Dies gilt mit Einschränkung auch für die Software-Entwicklung. Gleichzeitig zeichnet sich immer deutlicher ab, daß künftig eine wachsende Zahl komplexer Fragestellungen nur mit Rechnern der höchsten Leistungsklasse bearbeitet werden können und somit den Einsatz von Supercomputern unabdingbar machen. Der Umstand, daß lediglich eine vergleichbar geringe Zahl von Forschern mit Höchstleistungsrechnern arbeitet, darf nach Auffassung des Wissenschaftsrates nicht dazu führen, den strategischen

Nutzen von Supercomputern und die Bedeutung des im Umgang mit diesen Maschinen erworbenen Know-hows zu unterschätzen. Soll in Deutschland der Anschluß an die internationale Spitzenforschung gehalten werden, setzt dies nach Auffassung des Wissenschaftsrates größte Anstrengungen insbesondere auf dem Gebiet der numerischen Simulation komplexer Prozesse und der Entwicklung geeigneter Software voraus. Insbesondere mit der Klimaforschung, der Material- und Festkörperphysik, der Chemie, der Biomedizin, den Ingenieurwissenschaften, der Elementarteilchen- und Astrophysik sind Problemstellungen höchster Komplexität verbunden, auf deren Herausforderungen die USA und Japan frühzeitig reagiert haben (z. B. ASCI-Programm in den USA, Earth-Simulation Projekt in Japan). Solche Initiativen gibt es in Deutschland bislang nicht. Nach Auffassung des Wissenschaftsrates ist der hier zu beobachtende Rückstand, der auch mit den verfügbaren Ressourcen in Deutschland zusammenhängt, unter der Voraussetzung eines zügigen Leistungszuwachses noch aufholbar. Falls nicht spätestens im Jahr 2000 der geplante Höchstleistungsrechner in Betrieb genommen wird, ist im internationalen Vergleich eine Vergrößerung des Rückstands auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens zu Lasten Deutschlands unausweichlich, zumal die im HLRS, MPI/IPP und NIC installierten Höchstleistungsrechner im Jahr 2000 nicht mehr zu den leistungstärksten Rechnern zählen werden. Der Wissenschaftsrat hält vor diesem Hintergrund die rasche Realisierung eines weiteren Zentrums für erforderlich.

In der Kontinuität seiner bisherigen Empfehlungspraxis ist der Wissenschaftsrat unverändert der Auffassung, daß die gleichzeitige Beschaffung mehrerer Supercomputer der höchsten Leistungsklasse sich als nicht sachgerecht erweist, da die Erneuerung der vorhandenen Anlagen und die Verfügbarkeit des dann jeweils leistungstärksten Systems sinnvollerweise zeitlich versetzt erfolgen soll (meist im Zweijahresrhythmus). Vor diesem Hintergrund versteht der Wissenschaftsrat die beiden vorliegenden Anmeldungen zum Aufbau von Höchstleistungsrechenzentren mit entsprechenden Rechnerbeschaffungen als miteinander konkurrierende Anträge. Er wird deshalb aus den genannten Gründen zum jetzigen Zeitpunkt nur eines der beiden Vorhaben zur Aufnahme in den Rahmenplan empfehlen. Projekte, die unterhalb des Höchstleistungsrechenanspruchs liegen, sind wesentlich kostengünstiger auf anderen Rechenanlagen durchzuführen. Im Hinblick auf den erforderlichen Kompetenzzuwachs und dessen breitere Fundierung spricht sich der Wissenschaftsrat für

eine standortübergreifende Nutzung und eine aufgabenbezogene, koordinierte Vergabe von Rechenkapazität der höchsten Leistungsstufe aus. Die VESUZ-Machbarkeitsanalyse kann hier als Leitfaden dienen. Grundsätzlich ist in diesem Zusammenhang erneut zu betonen, daß Höchstleistungsrechner ausschließlich für Grand-Challenge-Projekte reserviert werden sollten und eine 100%ige bundesweite Öffnung auf der Grundlage von Nutzungs- und Entgeltregelungen unabdingbare Voraussetzung für eine Mitfinanzierung im Rahmen der Gemeinschaftsaufgabe Hochschulbau ist. Inhaltlich sollte nach Auffassung des Wissenschaftsrates den nichtnumerischen Anwendungsbereichen künftig besonderes Augenmerk geschenkt werden, da solche Aufgaben in ihrer Bedeutung erheblich zunehmen werden und ihre Lösung höchste Anforderungen an die algorithmische Methodik sowie an die Umsetzung auf Höchstleistungsrechner stellt.

Der Wissenschaftsrat weist in diesem Zusammenhang mit Nachdruck darauf hin, daß insbesondere hinsichtlich der Software-Entwicklung größte Anstrengungen erforderlich sind, um auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens den Anschluß an die internationale Entwicklung zu halten. Von vergleichbarer Bedeutung ist nach Auffassung des Wissenschaftsrates die Nutzerkompetenz, da ohne entsprechendes Know-how der Betrieb eines derartigen Zentrums nicht gewährleistet werden kann.

## **B. II. Zum Konzept über den Aufbau und Betrieb eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern am Leibniz-Rechenzentrum München (HLRB)**

### **1. Zu den fachlichen und technischen Voraussetzungen**

Bereits 1996 hat der Freistaat Bayern erste Überlegungen über die Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums am LRZ angestellt und zum 26. Rahmenplan einen entsprechenden Antrag eingereicht. Mit der Anmeldung zum 28. Rahmenplan wurde ein ausführliches Konzept vorgelegt, in dem die wesentlichen Aspekte im Hinblick auf den Aufbau eines weiteren Höchstleistungsrechenzentrums dargestellt wurden.

Ausdruck der besonderen Kompetenz auf dem Gebiet des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Bayern ist insbesondere der seit Jahren bestehende Forschungsverbund FORTWIHR mit den Trägerhochschulen Technische Universität München und Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg. Hervorzuheben ist dabei die Bündelung universitären Know-hows sowie der mit dem Forschungsverbund praktizierte Anwendungsbezug und Technologietransfer zur Industrie und zu mittelständischen und kleinen Unternehmen. Darüber hinaus befassen sich weitere bayerische Universitäten, beispielsweise im Rahmen von Sonderforschungsbereichen, mit Aspekten des Höchstleistungsrechnens.

Der Wissenschaftsrat begrüßt die bestehende Zusammenarbeit von Hochschulen mit industriellen Forschungs- und Entwicklungsabteilungen auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens. Er regt in diesem Zusammenhang an, verstärkte Anstrengungen zu unternehmen, um potentielle industrielle Anwender und außeruniversitärer Forschungseinrichtungen in die Nutzung der Ressourcen (kostenpflichtig) einzubeziehen.

Das in den 60er Jahren gegründete LRZ kann in seiner Funktion als landesweites Zentrum für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen und Kompetenzzentrum für Datennetze auf etwa zehnjährige Erfahrung hinweisen. Ferner ist das LRZ bei der Umsetzung der Algorithmen auf die vorhandenen Rechnerarchitekturen beteiligt. Der Wissenschaftsrat würdigt zudem die bereits gesammelten Erfahrungen und die Förderung auf dem Gebiet der Software-Entwicklung als wichtige Voraussetzung für den erfolgreichen Betrieb eines Höchstleistungsrechenzentrums.

Der Wissenschaftsrat hat in seiner Empfehlung aus dem Jahr 1995 betont, daß der Betrieb eines Höchstleistungsrechners darauf abgestimmte EDV-Zubringerstrukturen erfordert. Basierend auf dem Bericht der bayerischen DV-Planungskommission wird seit Anfang der 90er Jahre an den bayerischen Hochschulen zielstrebig der Aufbau einer mehrstufigen und kooperativen Rechnerversorgung verfolgt. Gemäß dem Anforderungsprofil erfolgt eine Verteilung der Projekte auf verschiedene Rechner. Die unterste Ebene der Leistungspyramide bilden Arbeitsplatzrechner, gefolgt von leistungsfähigen Workstation-Clustern, Compute-Servern und Landeshochleistungsrechnern. Nach Auffassung des Wissenschaftsrates ist die EDV-Versorgungsstruktur

unterhalb des geplanten Höchstleistungsrechners angemessen und eine zeitgemäße Weiterentwicklung gewährleistet.

Das vergleichsweise hohe Niveau der EDV-Ausstattung spiegelt sich auch in den bislang getätigten und geplanten EDV-Investitionen in Bayern wider. Von den insgesamt in den Jahren 1993 bis 1997 vom Wissenschaftsrat empfohlenen Investitionen im Rahmen des Wissenschaftler-Arbeitsplatz-Programms (227 Mio. DM) entfallen allein rund 22 % auf Bayern; die entsprechende Empfehlungsquote im Rahmen des Computer-Investitions-Programms beträgt etwa 24 % (Die entsprechenden Prozentanteile für die Länder des Norddeutschen Verbunds liegen bei insgesamt 19 % bzw. 18 %). Der Wissenschaftsrat hat Bayern für die Beschaffung von Großgeräten (einschließlich CIP und WAP) nach § 3 Nr. 4 HBFG für 1999 einen Globalbetrag von 65 Mio. DM empfohlen. Im Zuge der Beratung in den Gremien des Planungsausschusses hat der Freistaat ca. 16 Mio. DM aus dem Volumen für Bauvorhaben zugunsten des Globalbetrags umgewidmet. Dies entspricht einer Erhöhung um ca. 24 %, so daß im Entwurf des 28. Rahmenplans für den Hochschulbau für Bayern ein Globalbetrag für Großgeräte für das Jahr 1999 in der Größenordnung von rund 81 Mio. DM vorgesehen ist. Ferner werden umfangreiche Investitionen auf dem Gebiet der hochschulinternen Vernetzung in Bayern vorangetrieben. Nicht zuletzt hieran wird deutlich, daß in Bayern große Anstrengungen unternommen werden, um das Niveau der Rechnerausstattung in Forschung und Lehre und die dazugehörige Kommunikations-Infrastruktur innovativ weiterzuentwickeln.

## **2. Zu den technischen Zielvorstellungen und zum Bedarf**

Am LRZ plant der Antragsteller die Beschaffung einer leistungsstarken kompakten moderat-parallelen Vektorrechneranlage inklusive eines Systems zur interaktiven Vor- und Nachbearbeitung der Eingabedaten. Angestrebt wird eine Spitzenleistung von 1,5 bis 2 Tflop/s. Dies entspräche einer Kapazitätssteigerung von mindestens einer Zehnerpotenz gegenüber der bereits in Stuttgart bzw. am LRZ installierten Anlage. Der Wissenschaftsrat begrüßt den Aufbau einer entsprechenden Anlage, die für die nächsten zwei bis drei Jahre die geeignetste Lösung zur Bearbeitung von sogenannten Grand-Challenge-Vorhaben darstellt. Vergleichbare Rechnerkapazitäten

stehen in Deutschland bislang nicht zur Verfügung. Mit der geplanten Vektorrechneranlage wird ein erheblicher Leistungs- und Qualitätssprung erzielt. Bei massiv-parallelen Rechnern ist realistischerweise von einem Leistungssprung nicht vor dem Jahr 2001 auszugehen. Im Hinblick auf den Zusammenhang von Beschaffungszeitpunkt und technologischer Aktualität sowie vor dem Hintergrund, daß zum gegenwärtigen Zeitpunkt moderat-parallele Vektorrechner der höchsten Leistungsklasse vergleichsweise schnell und zu einem günstigen Preis-Leistungsverhältnis beschaffbar sind, befürwortet der Wissenschaftsrat das bayerische Konzept.

Auch hinsichtlich des Software-Aspekts stimmt der Wissenschaftsrat mit der Einschätzung des Landes überein, wonach die erforderliche Abstimmung zwischen Hardware- und Softwareumgebung für Vektorrechner mit geringerem Aufwand realisiert werden kann als dies gegenwärtig noch für massiv-parallele Rechner gilt. Höchstmögliche Rechenleistungen lassen sich derzeit für die meisten Programme mit einer Kombination leistungsfähiger Einzelknoten mit Message-Passing-Parallelisierung auf einer moderaten Anzahl paralleler Knoten erzielen. Im Vergleich zu massiv-parallelen Rechnern liegen für moderat-parallele Rechner die meisten Programme in vektorisierten Versionen vor. Von Vorteil ist auch, daß in Bayern zahlreiche eigenentwickelte Programme bereits in optimierten Varianten für die unterschiedlichsten Architekturen vorliegen, so daß der zu erwartende Umstellungsaufwand hinsichtlich der Migration von Benutzerprogrammen relativ gering eingeschätzt werden kann. Auch im Rahmen von Industrieprojekten auf dem Gebiet des Hoch- und Höchstleistungsrechnens werden bislang überwiegend Software-Pakete eingesetzt, die auf moderat-parallelen Vektorrechnern laufen.

Die derzeitige umfangreiche Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechenkapazitäten innerhalb und außerhalb Bayerns sowie die Ergebnisse der vom Antragsteller differenziert durchgeführten Bedarfsumfrage bei potentiellen Nutzern an den Hochschulen, bei der Großindustrie und bei außeruniversitären Forschungseinrichtungen müssen als Indiz für einen hohen Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazitäten angesehen werden. Auswertungen der Bedarfsumfrage haben ergeben, daß sich ca. 75 bis 80 % der bayerischen Projektvorschläge (Hochschulbereich) für eine Bearbeitung auf moderat-parallelen Vektorrechnern eignen. Nur ca. 20 bis 25 % der Anträge lassen sich besser auf massiv-parallelen Rechnern bearbeiten. Die Bedarfs-

umfrage hat ferner verdeutlicht, daß in Bayern Kapazitätsengpässe hinsichtlich der Versorgung mit moderat-parallelen Vektorrechnern bestehen. Der Bedarf an massiv-parallelen Rechnern ist derzeit noch vergleichsweise geringer und soll auf anderen Höchstleistungsrechnern, insbesondere am HLRS, gedeckt werden, wo in der ersten Jahreshälfte 1998 ca. 48,3 % der auf der CRAY T3E verfügbaren Rechenkapazität durch bayerische Projekte beansprucht wurden. Der entsprechende Anteil des Norddeutschen Verbunds beläuft sich auf ca. 15 %, da das ZIB über einen eigenen Rechner CRAY T3E verfügt.

### **3. Zur Nutzung der Kapazität und zum Kompetenznetzwerk**

Zielvorstellung des Antragstellers ist, daß der geplante Höchstleistungsrechner ausschließlich für Grand-Challenge-Projekte genutzt werden soll. Weniger rechenintensive Problemstellungen sollen gemäß dem Anforderungsprofil an Landeshochleistungsrechner bzw. andere Rechner verteilt werden. Die fachliche Beurteilung von Projektanträgen und die Zuweisung auf den Höchstleistungsrechner soll mittels eines Lenkungs- und eines Gutachterausschusses erfolgen. Der Wissenschaftsrat erwartet, daß die Zusammensetzung des Lenkungs- und Gutachterausschusses überwiegend überregional erfolgt und die Bewertung des wissenschaftlichen Anspruchs und der wissenschaftlichen Kompetenz des Projektbearbeiters nach den bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft üblichen Begutachtungspraktiken vorgenommen wird.

Für den Wissenschaftsrat ist eine unabdingbare Voraussetzung für die Aufnahme des Vorhabens in den Rahmenplan, daß die Kapazitäten zu 100 % bundesweit zur Verfügung gestellt werden. Vom Land wurde zugesichert, daß Projekte von einem überwiegend überregional zusammengesetzten Gutachterausschuß nach ausschließlich wissenschaftlichen Kriterien begutachtet und ausgewählt werden sollen.

Der Wissenschaftsrat befürwortet die Bemühungen des Landes zum Aufbau eines Kompetenznetzwerks und die damit verbundene Anschubfinanzierung durch das Land. Auf die Bedeutung solcher Netzwerke, die die fachliche und die für das jeweilige Rechnersystem spezifische Betreuung der Nutzer, die Förderung des wissen-



schaftlichen Nachwuchses und die Pflege überregionaler und internationaler Kontakte auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens gewährleisten sollen, hat der Wissenschaftsrat bereits 1995 hingewiesen. In diesem Zusammenhang ist die vom Freistaat Bayern beabsichtigte Software-Initiative für innovative Rechnerarchitekturen ausdrücklich zu begrüßen.

#### **4. Zur Finanzierung und zeitlichen Realisierung**

Nach Auskunft des Antragstellers ist die Finanzierung sowohl der anteiligen Investitionskosten als auch der Betriebskosten in Höhe von 60 Mio. DM landesseitig durch Privatisierungserlöse abgesichert. Der Bundesanteil beträgt 30 Mio. DM. Nach Auskunft des Antragstellers geht die Finanzierung des Höchstleistungsrechners nicht zu Lasten der EDV-Grundversorgung, da die Investitionsmittel für den Höchstleistungsrechner gesondert bereitgestellt werden.

Die erste Ausbaustufe soll im 3. und 4. Quartal 1999 realisiert werden. Bereits im Jahr 2001 ist die Umsetzung der zweiten Ausbaustufe geplant. Der Wissenschaftsrat befürwortet den vorgesehenen zügigen Aufbau dieses Höchstleistungsrechenzentrums. Der Aufbau ist insbesondere dadurch begünstigt, daß leistungsfähige und vergleichsweise kostengünstige moderat-parallele Vektorrechner bereits im Jahre 1999 beschaffbar sind.

#### **B. III. Zum Konzept der Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein für ein Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen (HLRN)**

Nachdem im Juli 1996 erste Überlegungen zur Einrichtung eines norddeutschen Höchstleistungsrechenzentrums entwickelt worden waren, haben die Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein unter Federführung des Landes Berlin zum 27. und 28. Rahmenplan ein entsprechendes Vorhaben angemeldet und Anfang des Jahres 1998 dem Wissen-

schaftsrat ein ausführliches Konzept vorgelegt. Inzwischen ist das Verwaltungsabkommen, das den Beteiligungsumfang der sechs Länder im einzelnen regelt, von fünf Kabinetten verabschiedet.

Der Wissenschaftsrat, der in seiner Empfehlung zum Höchstleistungsrechnen die Gründung länderübergreifender Zusammenschlüsse angeregt hatte, würdigt ausdrücklich die von den beteiligten Ländern unternommenen Anstrengungen, eine Verbundlösung zur Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums zu erreichen. Er sieht darin ein wissenschaftspolitisch beispielhaftes Vorgehen, das der Intention des Hochschulbauförderungsgesetzes im Hinblick auf ein bundesweit ausgewogenes Angebot an Lehr- und Forschungsleistung in besonderer Weise Rechnung trägt. In Erwartung dauerhaft angespannter öffentlicher Haushalte und in Kenntnis des finanziell unterschiedlichen Leistungsvermögens der einzelnen Länder sieht der Wissenschaftsrat im Zusammenschluß des Norddeutschen Verbundes ein wissenschaftspolitisches Modell, das längerfristig Bestand haben sollte und in Fällen wie diesen besser als länderbezogene Einzelanstrengungen geeignet erscheint, die Wettbewerbsfähigkeit der darin zusammengeschlossenen Länder auf dem Gebiet der besonders kostenintensiven Infrastruktur für Wissenschaft und Forschung sicherzustellen.

## **1. Zu den fachlichen und technischen Voraussetzungen**

Erfahrungen auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens wurden in den Ländern Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein vor allem im Zusammenhang mit dem 1984 gegründeten Norddeutschen Vektorrechnerverbund gesammelt. Innerhalb der Länder des Norddeutschen Verbunds stellt das ZIB, das als Betreiberzentrum für den geplanten massiv-parallelen Höchstleistungsrechner neuer Generation fungieren soll, nach Ansicht des Wissenschaftsrates eine hinsichtlich des Scientific Computing herausragende Einrichtung in Deutschland dar. So wurden im ZIB in der jüngsten Vergangenheit bereits zwei vergleichsweise leistungsstarke massiv-parallele Rechner installiert. Auch in den anderen Rechenzentren werden verstärkte Bemühungen zur Steigerung der fachlichen und technischen Kompetenz auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens unternommen. Insgesamt weist der Verbund zwar eine eindrucksvolle Gesamtrechenleistung von ca. 520

Gflop/s aus. Diese verteilt sich jedoch auf eine Vielzahl an Standorten mit dem Schwerpunkt am ZIB, an dem über 45 % der gesamten Rechenleistung installiert ist. Im RRZN in Hannover, das als Standort für den geplanten moderat-parallelen Vektorrechner vorgesehen ist, lag der Schwerpunkt bislang auf Vektorrechneranwendungen und auf der Visualisierung von Ergebnissen. In den Rechenzentren der weiteren Länder des Norddeutschen Verbunds bilden insbesondere Workstation-Cluster hoher Leistung die Versorgungsstruktur unterhalb der Hochleistungsrechnerebene. Im Hochleistungsbereich sollen die Länder Bremen, Hamburg und Mecklenburg-Vorpommern dem Norddeutschen Vektorrechnerverbund angegliedert werden. Vom Wissenschaftsrat werden die Bemühungen zur Verbesserung der hochschul- und landesinternen Wissenschaftsnetze in Berlin sowie hinsichtlich des geplanten Netzverbunds zwischen Berlin und Brandenburg anerkannt.

Insgesamt wurden nach Angaben der beteiligten Länder des Norddeutschen Verbunds jährlich durchschnittlich 83 Mio. DM in den EDV-Bereich investiert, wobei die Schwerpunkte in den Ländern Berlin und Niedersachsen lagen. In den nächsten zwei Jahren sind nach Auskunft der beteiligten Länder 190 Mio. DM jährlich für den EDV-Bereich vorgesehen. In den Jahren 1993 bis 1997 entfielen rund 19 % des gesamten Empfehlungsvolumens des Wissenschaftsrates (227 Mio. DM) im Rahmen des Wissenschaftler-Arbeitsplatz-Programms auf die sechs norddeutschen Länder (Anteil Bayerns am Gesamtbetrag 22 %). Die entsprechende Empfehlungsquote bezüglich des Computer-Investitions-Programms lag bei 18 % (Anteil Bayerns am Gesamtbetrag 24 %). Anzumerken ist ferner, daß die sechs norddeutschen Länder die vom Wissenschaftsrat empfohlene Investitionssumme für den Globalbetrag für Großgeräte für das Jahr 1999 im Entwurf des 28. Rahmenplans für den Hochschulbau um insgesamt 18 % zugunsten von Bauvorhaben umdisponiert haben. Der Wissenschaftsrat bekräftigt vor diesem Hintergrund seine Auffassung, daß eine optimale Nutzung von Höchstleistungsrechnern eine darauf abgestimmte Grundversorgung mit Rechenkapazität und entsprechende investive Maßnahmen erfordert.

## 2. Zu den technischen Zielvorstellungen und zum Bedarf

Der Norddeutsche Verbund hat ein Zwei-Standorte-Konzept entwickelt, in dem am ZIB ein massiv-paralleler Rechner neuer Generation und am RRZN in Hannover ein moderat-paralleler Vektorrechner mit Visualisierungssystem installiert werden sollen. Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, daß die Beschaffung eines massiv-parallelen Rechners neuer Bauart gegenwärtig noch nicht empfohlen werden kann, da von den Herstellerfirmen die ASCI-Verpflichtung bislang nicht eingelöst wurde und die für das ASCI-Programm der USA geplanten Systeme daher als Produktionsmaschinen noch nicht ausgereift sind. Die derzeit in Deutschland verfügbaren leistungsfähigsten massiv-parallelen Rechner, Anlagen des Typs CRAY T3E, sind bereits seit 1996 auf dem Markt. Demgegenüber läßt – wie bereits im Zusammenhang mit dem bayerischen Konzept ausgeführt – die Beschaffung eines moderat-parallelen Vektorrechners zum vorgesehenen Beschaffungszeitpunkt die dann aktuell verfügbare, höchste Leistungsstufe erwarten. Vor diesem Hintergrund bezweifelt der Wissenschaftsrat, daß bezüglich des norddeutschen Konzepts mit der angesetzten Investitionssumme und der Aufteilung auf zwei Standorte die zu fordernden Spitzenrechenleistungen erreicht und Projekte höchsten Anspruchs bearbeitet werden können. Mittel- und langfristig gesehen werden massiv-parallele Rechner an Bedeutung gewinnen und in die geforderten höchsten Leistungsbereiche vorstoßen (große Anzahl von Prozessoren) und darüber hinaus im Vergleich zu moderat-parallelen Vektorrechnern ein günstigeres Preis-Leistungsverhältnis aufweisen. Gegenwärtig kann allerdings davon ausgegangen werden, daß der Schwerpunkt der Höchstleistungsrechnerversorgung in den Ingenieurwissenschaften, in wichtigen Bereichen der Naturwissenschaften und auch in der Industrie noch bei moderat-parallelen Vektorrechnern liegen wird.

Anzumerken ist ferner, daß die Anpassung von Software an massiv-parallele Rechner und die Entwicklung neuer paralleler Algorithmen sehr aufwendig ist. Während Software für moderat-parallele Vektorrechner umfangreich und erprobt verfügbar ist, gilt dies für massiv-parallele Rechner nur in begrenztem Maße; hier befindet man sich in noch stärkerem Maße in der Forschungs- und Entwicklungsphase. Unter Leistungsgesichtspunkten ist gegenwärtig noch festzustellen, daß auf massiv-parallelen Systemen eine größere Anzahl von leistungsschwächeren Einzelknoten eingesetzt

wird als auf moderat-parallelen Vektorrechnern; die Effizienz der Auslastung des Einzelknotens ist bei moderat-parallelen Vektorrechnern höher. Auch treten mit fortschreitender Parallelisierung immer höhere Verluste auf, so daß die Effizienz moderat-paralleler Systeme auf massiv-parallelen Systemen in der Regel bisher nicht erreicht wird. Hingegen führt die Umstellung und Optimierung von Programmen auf Architekturen mit leistungsfähigen Einzelknoten, die eine hohe interne Parallelität sowie einen schnellen Hauptspeicherzugriff aufweisen, in der Regel zu einer deutlichen Steigerung der Effizienz und des Durchsatzes.

Im Vergleich zur Bedarfsumfrage des Freistaats Bayern hat eine Bedarfsumfrage der norddeutschen Länder ergeben, daß etwa zwei Drittel der Rechnerleistung auf massiv-parallelen Rechnern und ein Drittel auf vektor-parallelen Systemen gewünscht wird. Die Länder haben in den Beratungen erläutert, daß über eine Beteiligung von Industrie und außeruniversitären Forschungseinrichtungen nachgedacht worden sei. Da dies in der Ausarbeitungsphase des Konzepts die gewünschte Verbundlösung möglicherweise gefährdet hätte, sei zunächst davon Abstand genommen worden, um den bei der Verbundlösung zu Beginn ohnehin überdurchschnittlichen Regelungsbedarf beherrschbar zu halten. Das norddeutsche Konzept sei jedoch prinzipiell auch als Angebot an Industrie und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen zu verstehen.

Zur Deckung der vom Norddeutschen Verbund geltend gemachten Nachfrage nach Rechenleistung weist der Wissenschaftsrat auf die bundesweite Öffnung der bereits vorhandenen Höchstleistungsrechenzentren in Stuttgart, Jülich und künftig München sowie auf die schon jetzt in den norddeutschen Ländern vorhandene Ausstattung mit Rechnerkapazität hin, die mit Blick auf die gegenwärtig geplanten Projekte zur Bedarfsdeckung zunächst ausreichend erscheinen.

### **3. Zur Nutzung der Kapazität und zum Kompetenznetzwerk**

Ebenso wie im bayerischen Antrag soll der geplante Höchstleistungsrechner auch im norddeutschen Konzept ausschließlich zur Bearbeitung von Grand-Challenge-Vorhaben und nicht zur Abdeckung der Grundlast im Hochleistungsbereich einge-

setzt werden. Um dies zu gewährleisten, sollen in Anlehnung an die Empfehlung des Wissenschaftsrates aus dem Jahr 1995 überwiegend überregional zusammengesetzte Lenkungsausschüsse eingerichtet werden. Der Norddeutsche Verbund plant die Einrichtung einer Zulassungskommission sowie einer Technischen Kommission, die eine wissenschaftliche Begutachtung entsprechend den Kriterien der Deutschen Forschungsgemeinschaft vornehmen bzw. den Zugang zu den geplanten Höchstleistungsrechnern unter organisatorischen und technischen Aspekten regeln soll. Der Wissenschaftsrat hält es auch hier für unabdingbar, 100 % der Höchstleistungsrechenkapazitäten für die bundesweite Nutzung bereitzustellen und den beteiligten Ländern keine Zugangsprivilegien einzuräumen. Der Wissenschaftsrat weist darüber hinaus mit Nachdruck auf die Notwendigkeit hin, eine überregionale Zusammensetzung der Gutachterausschüsse sicherzustellen. Er begrüßt in diesem Zusammenhang die Zusage der beteiligten Länder, die Kapazitäten für eine bundesweite Nutzung zu öffnen und die Gutachterausschüsse überwiegend überregional zusammenzusetzen. Vor dem Hintergrund der komplexen Verbundstruktur regt er an, präzise Nutzungs- und Entgeltregelungen zu vereinbaren und begrüßt ausdrücklich die von den norddeutschen Ländern geplante Einbindung des Höchstleistungsrechenzentrums in einen Kompetenzverbund sowie die sukzessive Umsetzung der in der VESUZ-Machbarkeitsanalyse empfohlenen Maßnahmen.

#### **4. Zur Finanzierung und zeitlichen Realisierung**

Dem norddeutschen Konzept zufolge ist eine Aufteilung der Investitionskosten durch die beteiligten Länder nach dem Königsteiner Schlüssel vorgesehen. Die konsumtiven Kosten sollen von den Ländern, in denen die Hauptkomponenten der Rechner installiert werden, getragen werden. Die Gesamtinvestitionssumme von 70 Mio. DM soll auf vier Jahre gestreckt werden, wobei im Jahr 2002 eine technische Aktualisierung vorgenommen werden soll. Der Wissenschaftsrat befürwortet prinzipiell die angestrebte Realisierung der vollen Leistung der Gesamtkonfiguration zum frühestmöglichen Zeitpunkt. Angesichts des bereits angeführten Sachverhalts, daß massiv-parallele Rechner der nächsten Generation zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht ausgereift beschaffbar sind, ist die kostengünstige Beschaffung eines massiv-parallelen Rechners der geforderten Leistungsklasse nach Auffassung der Arbeitsgruppe des

Wissenschaftsrates in den nächsten zwei Jahren auszuschließen. Außerdem erfordert die notwendige Kopplung der verschiedenartigen Systemarchitekturen eine Vorlaufphase, so daß bis zur Inbetriebnahme zwangsläufig mit zeitlichen Verzögerungen zu rechnen ist. Aus der Sicht des Wissenschaftsrates ist darüber hinaus unbefriedigend, daß derzeit über den Zeitpunkt des Erreichens des geplanten Tflop/s-Niveaus noch keine konkrete Auskunft gegeben werden kann. Bezweifelt wird schließlich, daß mit der Aufteilung der Investitionssumme auf zwei Standorte die zu fordernde Spitzenrechenleistung und der gewünschte Qualitätssprung erzielt werden können.

### **C. Zusammenfassende Empfehlung**

Der Wissenschaftsrat bekräftigt seine Empfehlung aus dem Jahr 1995 hinsichtlich der Förderung von Höchstleistungsrechenzentren. Angesichts der wachsenden Bedeutung der rechnergestützten Erforschung komplexer Prozesse, der technologischen Entwicklungen auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens sowie im Hinblick auf die internationale Konkurrenzfähigkeit ist es unabdingbar, Supercomputer der höchsten Leistungsklasse in Deutschland zu installieren. Nachdem 1996 das über die Gemeinschaftsaufgabe Hochschulbau finanzierte Höchstleistungsrechenzentrum in Stuttgart in Betrieb genommen wurde, liegen zum 28. Rahmenplan Anträge des Freistaats Bayern und des Landes Berlin (federführend) über die Einrichtung von Höchstleistungsrechenzentren vor.

Auf der Basis der Empfehlung des Wissenschaftsrates aus dem Jahr 1995, wonach in Deutschland insgesamt zwei bis vier Zentren für Höchstleistungsrechnen in zeitlicher Stufung aufgebaut werden sollten, spricht sich der Wissenschaftsrat für die Förderung eines weiteren Höchstleistungsrechenzentrums aus. Dem Konzept des Freistaats Bayern ist nach Auffassung des Wissenschaftsrates der Vorzug zu geben.

Die Entscheidung zugunsten des bayerischen Antrags wurde von folgenden Erwägungen geleitet:

- Die vom Land beabsichtigte Beschaffung einer moderat-parallelen Vektorrechneranlage stellt gegenwärtig und für die nächsten zwei bis drei Jahre die zur Bearbeitung von sogenannten Grand-Challenge-Vorhaben überzeugendste Lösung dar. Vergleichbare Rechnerarchitekturen der höchsten Leistungsklasse stehen in Deutschland gegenwärtig nicht zur Verfügung.
- Im Vergleich zur geplanten Installation eines massiv-parallelen Rechners neuer Generation – die dem norddeutschen Konzept zugrundeliegt - gestaltet sich der vorgesehene Aufbau einer moderat-parallelen Vektorrechneranlage unproblematischer, da ein moderat-paralleler Vektorrechner, der einen Leistungssprung gegenüber den bisherigen Anlagen darstellt, aufgrund der derzeit günstigeren Marktsituation bereits 1999 beschaffbar ist. Angesichts der auf den vorhandenen Rechenanlagen festzustellenden Kapazitätsengpässe, den damit einhergehenden Leistungsgrenzen und den hohen Bedarfsanforderungen fällt der raschen Handlungsfähigkeit und dem Zeitpunkt der möglichen Inbetriebnahme eines Supercomputers eine wichtige Rolle zu.
- Da im bayerischen Konzept die gesamte Investitionssumme in eine leistungsstarke, kompakte moderat-parallele Vektorrechneranlage neuesten Typs fließen soll und eine Zentralisierung der Rechenkapazitäten an einem Standort angestrebt wird, bietet sich die Chance, Spitzenrechenleistungen und den erforderlichen Qualitäts- und Leistungssprung auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens in Deutschland zu erreichen sowie den Rückstand gegenüber den USA und Japan zu verringern.
- Auch hinsichtlich der erforderlichen raschen und effizienten Abstimmung zwischen geplanter Hardware und Software ist gegenwärtig noch davon auszugehen, daß der Umstellungsaufwand für die Migration von Benutzerprogrammen auf moderat-parallele Vektorrechner vergleichsweise geringer ist als für massiv-parallele Rechner.
- Die EDV-Versorgungsstruktur unterhalb des geplanten Höchstleistungsrechners bietet in Bayern aufgrund der seit einigen Jahren zielstrebig verfolgten Förderung und getätigten Investitionsmaßnahmen auf diesem Gebiet einen geeigneten Unterbau für die optimale Nutzung des Höchstleistungsrechners. Auf dieser Grundlage kann auch eine Verteilung der Aufgaben auf Rechenanlagen gemäß den Anforderungsprofilen der eingereichten Projektanträge ermöglicht werden.



- Die bislang auf Supercomputern in Deutschland durchgeführten Projekte sowie die Ergebnisse der unter den beteiligten Ländern durchgeführten Bedarfsumfrage legen den Schluß nahe, daß zum einen in Bayern bereits umfangreiche Erfahrungen auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens gesammelt wurden, zum anderen Anforderungen an zusätzliche Kapazitäten begründet erscheinen. In diesem Zusammenhang stellt auch das LRZ mit der dort vorhandenen fachlichen und technischen Kompetenz eine hervorragend geeignete Plattform für ein Höchstleistungsrechenzentrum dar. Die Kontakte, die bereits zur Industrie und zu außeruniversitären Forschungseinrichtungen bestehen, sollten im Rahmen des geplanten Höchstleistungsrechenzentrums weiterhin gepflegt und intensiviert werden. Der Wissenschaftsrat hält es hinsichtlich der Nutzungsoptionen für unabdingbar, daß zum einen die Lenkungsausschüsse überwiegend überregional zusammengesetzt sind und zum anderen die Gesamtkapazität bundesweit zur Verfügung gestellt werden.

Der Wissenschaftsrat weist mit Nachdruck darauf hin, daß mit dem Votum für den bayerischen Antrag das norddeutsche Konzept gleichwohl eine besondere Würdigung verdient. Hier sind in erster Linie der bislang in der Hochschulbauförderung einmalige wissenschaftliche, wissenschaftspolitische und finanzpolitische Konsensbildungsprozeß der beteiligten sechs Länder und die damit sich bietenden Chancen der Kooperation hervorzuheben. Der Wissenschaftsrat hat bereits in der Empfehlung aus dem Jahr 1995 zu Verbundlösungen im Zusammenhang mit Höchstleistungsrechenzentren angeregt und erkennt die im Norddeutschen Verbund unternommenen Anstrengungen in hohem Maße an. Hinsichtlich des Koordinationsaufwands kann ohne Zweifel ein im Vergleich zum bayerischen Konzept höherer Anspruch konstatiert werden.

Die fachliche und technische Kompetenz im Bereich des Hoch- und Höchstleistungsrechnens am ZIB und in etwas eingeschränkterem Maße am RRZN in Hannover ist als herausragend zu bezeichnen. Auch an den anderen Standorten des Norddeutschen Verbunds können verstärkte Anstrengungen in der wissenschaftlichen Auseinandersetzung mit Höchstleistungsrechnen festgestellt werden.

Der Wissenschaftsrat äußert jedoch hinsichtlich des norddeutschen Konzepts in der aktuell vorliegenden Fassung folgende Bedenken:

- Mit der Aufteilung der Investitionssumme und der Rechnerkapazitäten auf zwei Standorte (Berlin/Hannover) kann nach Auffassung des Wissenschaftsrates die erwünschte Leistungssteigerung im Höchstleistungsrechnen nur in unzureichendem Maße erzielt werden. Die Bearbeitung von Grand-Challenge-Projekten erfordert jedoch die Bereitstellung von Supercomputern der höchsten Leistungsstufe.
- Die geplante Beschaffung eines massiv-parallelen Rechners neuer Generation für den Standort ZIB verzögert vor dem Hintergrund der Marktsituation – massiv-parallele Rechner neuer Bauart werden derzeit von den Herstellerfirmen noch nicht ausgereift angeboten – die rasche Handlungsfähigkeit und den für das Jahr 1999 dringend erforderlichen Aufbau eines weiteren Höchstleistungsrechenzentrums. Die Beschaffung leistungsfähiger und vergleichsweise kostengünstiger moderat-paralleler Vektorrechner wäre bereits im Jahr 1999 möglich. Da jedoch nur der kleinere Teil der geplanten Investitionssumme für den für den Standort Hannover vorgesehenen moderat-parallelen Vektorrechner aufgebracht werden soll, könnte im Vergleich zum bayerischen moderat-parallelen Vektorrechner nur ein erheblich weniger leistungsfähiger Rechner beschafft werden.
- Der Zeitpunkt der Inbetriebnahme des neuen Höchstleistungsrechenzentrums würde womöglich auch dadurch verzögert, daß die Kopplung der unterschiedlichen Systemarchitekturen eine gewisse Vorlaufphase erforderlich macht.
- Auch die erforderliche Anpassung von Hardware- und Softwareumgebung ist für massiv-parallele Rechner derzeit noch aufwendiger als für moderat-parallele Vektorrechner.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt nach Maßgabe seiner Hinweise das bayerische Vorhaben zur Aufnahme in den 28. Rahmenplan (Kategorie I). Die Empfehlung steht unter der Voraussetzung, daß die Installation eines moderat-parallelen Vektorrechners innerhalb eines Jahres erfolgt. Der Wissenschaftsrat bittet die Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft nach Vorlage des Großge-

räteantrags des Freistaats Bayern, die Begutachtung der Anmeldung nach wissenschaftlichen und apparatetechnischen Gesichtspunkten vorzunehmen.

Der Wissenschaftsrat beschließt, eine Arbeitsgruppe einzurichten, die das ursprüngliche Konzept zum Aufbau nationaler Höchstleistungsrechenzentren überprüfen soll. Ziel sollte sein, ein grundständig neues Konzept zu entwickeln, das den Aspekten der Netzanbindung und Software ebenso Rechnung trägt wie einer optimalen Nutzung der vorhandenen bzw. neu aufzubauenden Höchstleistungsrechner. In dieses Konzept sollen neben den universitären auch die außeruniversitären Höchstleistungsrechner einbezogen werden.

Der Freistaat Bayern verpflichtet sich, ein Finanzierungsmodell auf der Grundlage von Gebühren rückwirkend auch auf den bayerischen Höchstleistungsrechner anzuwenden, sobald ein solches neues Modell eingeführt wird. Damit soll sichergestellt werden, daß dem Leibniz-Rechenzentrum kein Wettbewerbsvorteil aus der Beschaffung des bayerischen Höchstleistungsrechners gegenüber anderen Höchstleistungsrechenzentren entsteht.

Der Norddeutsche Verbund wird gebeten, innerhalb eines Jahres ein überarbeitetes Konzept für ein Höchstleistungsrechenzentrum vorzulegen. Dabei ist die Rechenkapazität des Höchstleistungsrechners am Klimarechenzentrum in Hamburg zu berücksichtigen.

**Tabelle 1: EDV-Versorgung auf der Ebene Hochleistungsrechner in Bayern**

Einrichtung	Rechnertyp	Gflop/s	Beschaffungsjahr
Augsburg	IBM RS/6000 SP, 14 thin nodes	9,0	1997
Bayreuth	Cray Y-MP EL, 2 Prozessoren <sup>1)</sup>	0,2	1992
	SGI Power Challenge, 12 Prozessoren	3,4	1996
	SNI/Fujitsu VPP300, 2 Prozessoren	4,4	1998
Erlangen-Nürnberg	Cray Y-MP EL, 4 Prozessoren <sup>1)</sup>	0,5	1992
	HP/Convex SPP1600, 48 Prozessoren	12,0	1993/97
	SUN Enterprise 4000, 8 Prozessoren	2,6	1996
	SNI/Fujitsu VPP300, 6 Prozessoren	13,2	1997
	Parsytec CC, 10 Prozessoren	2,7	1996
	Power Explorer, 24 Prozessoren	1,9	1997
	DEC Alpha Server, 4 Prozessoren	3,2	1997
	SGI Onyx, 4 Prozessoren	1,5	1997
	2 Sun Ultra, 2/4 Prozessoren	2,0	1997
Regensburg	SGI Challenge, 8 Prozessoren	0,8	1994
	Cray J90se, 8 Prozessoren	2,0	1996
	SNI/Fujitsu VX/2, 2 Prozessoren	4,4	1998
Würzburg	Cray Y-MP EL, 2 Prozessoren <sup>1)</sup>	0,2	1992
	SNI/Fujitsu VPP300, 2 Prozessoren	4,4	1998
	2 DEC Alpha Server, je 2 Prozessoren	2,3	1996
LMU München	2 SGI Origin, 4/6 Prozessoren	3,9	1997
TU München	DEC Alpha Server, 2 Prozessoren	1,2	1994/95
	2 SGI Power Challenge, 6/10 Prozessoren	6,2	1996/97
	2 SGI Origin, je 4 Prozessoren	3,1	1997
	WS-Cluster mit PVM	7,5	
Leibniz-Rechenzentrum	IBM SP2, 77 Knoten, verteilter Speicher	20,7	1995
	Cray T94 (gemeinsamer Speicher)	7,2	1996
	SNI/Fujitsu VPP 700/52, 52 Prozessoren (verteilter Speicher für vektorisierbare, daten- u. speicherintensive Projekte)	114,4	1997/98
	IBM RS/6000, 4 Prozessoren	3,2	1997
<b>Summe</b>		<b>238,1</b>	

Anmerkungen:

An den Universitäten Bamberg und Passau ist keine Hochleistungsrechenkapazität vorhanden.

1) wurde (Bayreuth) bzw. wird (Erlangen, Würzburg) außer Betrieb genommen

(grau unterlegt: binärkompatible Entwicklungsrechner zur VPP-Anlage am LRZ)

Quelle: Angaben des Landes

**Tabelle 2: Rechenzeitverbrauch (in Stunden und %) nach Einrichtungen und Fachgebieten auf den drei Rechnern am LRZ (1997)**

Einrichtung	Cray T90		IBM/SP2		VPP 700/52	
	h	in %	h	in %	h	in %
<i>TU München</i>						
Physik	62,6	0,2	3.125,4	0,7	461,6	0,4
Chemie, Biologie, Geow.	703,4	2,3	48.887,7	11,0	8.632,1	7,1
Bauing., Vermessungsw.	-	-	330,4	0,1	206,9	0,2
Maschinenwesen	8.409,1	27,9	165.132,4	37,1	59.498,4	49,2
Elektro- u. Inform.technik	0,2	0,0	371,5	0,1	0,0	0,0
Informatik	44,6	0,2	215,5	0,0	45,2	0,0
Brauwesen, Lebensmittel- techn., Milchwissensch.	0,0	0,0	-	-	-	-
<b>Summe</b>	<b>9.219,8</b>	<b>30,6</b>	<b>218.062,8</b>	<b>49,1</b>	<b>68.844,2</b>	<b>57,0</b>
<i>LMU München</i>						
Volkswirtschaft	-	-	41,7	0,0	-	-
Medizin	-	-	19.250,4	4,3	-	-
Philos., Wiss.th., Statistik	0,0	0,0	-	-	-	-
Physik	2.285,8	7,6	80.135,7	18,0	1.400,5	1,2
Chemie und Pharmazie	1.334,8	4,4	4.959,7	1,1	3.067,6	2,5
Geowissenschaften	0,0	0,0	-	-	-	-
<b>Summe</b>	<b>3.620,6</b>	<b>12,0</b>	<b>104.387,4</b>	<b>23,5</b>	<b>4.468,1</b>	<b>3,7</b>
<i>Bayr. Akademie d. Wiss.</i>						
Mathem.-naturw. Klasse	10,7	0,0	0,7	0,0	103,2	0,1
LRZ	153,9	0,5	1.994,8	0,5	3.264,3	2,7
<b>Summe</b>	<b>164,6</b>	<b>0,6</b>	<b>1.995,5</b>	<b>0,5</b>	<b>3.367,5</b>	<b>2,8</b>
<i>sonstige bayr. Hochschulen</i>						
FH München	0,0	0,0	-	-	-	-
U Augsburg	416,7	1,4	65.966,5	14,8	4.824,6	4,0
U Bamberg	0,0	0,0	-	-	-	-
U Bayreuth	2.167,5	7,2	17.343,9	3,9	9.739,4	8,1
U Erlangen-Nürnberg	5.855,1	19,5	10.442,4	2,3	3.003,7	2,5
U Regensburg	4.625,1	15,4	17.393,3	3,9	13.320,9	11,0
U Würzburg	4.006,8	13,3	9.280,5	2,1	11.888,4	9,8
<b>Summe</b>	<b>17.071,1</b>	<b>56,7</b>	<b>120.426,6</b>	<b>27,1</b>	<b>42.777,0</b>	<b>35,4</b>
<i>Körperschaften</i>	-	-	30,1	0,0	-	-
<i>sonstige</i>	3,6	0,0	9,4	0,0	1.351,6	1,1
<b>Gesamtsumme</b>	<b>30.079,8</b>	<b>100,0</b>	<b>444.911,8</b>	<b>100,0</b>	<b>120.808,4</b>	<b>100,0</b>

Quelle: Angaben des Landes

**Tabelle 3: Nutzung bayerischer Projekte auf Rechnern des HLRS Stuttgart und HLRZ Jülich  
(1.1.98 bis 31.5.98)**

Universität	Fachgebiet	Jobs	Leistungsanteil in %
<b>Cray T3E (HLRS)</b>			
Würzburg	Hochtemperatur-Supraleitung	5.277	18,6
LMU München	Klimasimulation für den süddt. Raum	7.005	9,5
TU München	Dir. Numer. Simulation turbul. Strömungen	5.139	7,3
LMU München	Molekulardynamik v. biol. Lipidmembranen	823	5,0
Bayreuth	Strömungen im flüssigen Erdkern	1.136	5,0
Bayreuth	Exakte Diagonalisierung stark korrel. Elek.System	243	2,9
Erlangen-Nürnberg	Dir. Numer. Simulation turbul. Strömungen	164	< 0,1
TU München	Ingenieurwendungen in der Informatik	2	<0,1
<b>Summe</b>			<b>48,3</b>
<b>NEC SX-4 (HLRS)</b>			
Würzburg	Hochtemperatur-Supraleitung	1.222	12,4
Erlangen-Nürnberg	Chemie gemischter Clusterverbindungen	34	0,3
Erlangen-Nürnberg	Direkte Numerische Simulation	330	0,3
Erlangen-Nürnberg	Automobil- u. Flugzeugaerodynamik	54	< 0,1
LMU München	Klimasimulation für den süddt. Raum	45	< 0,1
Bayreuth	Exakte Diagonalisierung stark korrel. Elek.System	2	< 0,1
Erlangen-Nürnberg	Visualisierung von Volumina	7	< 0,1
TU München	Dir. Numer. Simulation turbul. Strömungen	1	<0,1
<b>Summe</b>			<b>13,0</b>

Universität	Projekt	CPU-h/ Monat	Leistungsanteil in %
<b>Cray T90/J90 (HLRZ)</b>			
Würzburg	Entstehung von protostellaren Scheiben	230	5,2
Augsburg	Magnetische Phasenübergänge	130	2,9
Regensburg	Oberflächen von Alkalihalogeniden	77	1,7
Regensburg	Nichtlineare Rumpfkorrekturen	76	1,7
Würzburg	Multiphotonen-Ionisation	64	1,4
Regensburg	Matrix-isolierte organische Moleküle	47	1,1
Würzburg	Quanten-Monte-Carlo Hubbard-Modelle	43	1,0
Regensburg	Metalle	42	1,0
Regensburg	Anharmonische Effekte in Halbleitern	36	0,8
Regensburg	Si (111)-Oberflächen mit Adsorbaten	29	0,7
Erlangen-Nürnberg	Berechnungen an Zn-Enzymen	14	0,3
Regensburg	Höchstleistungs-Monte-Carlo-Methoden	3	0,1
Würzburg	Spektroskop. Eigenschaften großer Moleküle	1	<0,1
<b>Summe</b>		<b>792</b>	<b>17,9</b>
<b>Cray T3E (HLRZ)</b>			
Würzburg	Elektron-Systeme	10.140	3,4
Bayreuth	Exakte Diagonalisierung	5.764	1,9
LMU München	Kohlenmonoxid-Myoglobin	2.378	0,8
Würzburg	Multiphotonen-Prozesse	686	0,2
<b>Summe</b>		<b>18.968</b>	<b>6,3</b>

Quelle: Angaben des Landes

**Tabelle 4: EDV-Investitionen an den staatlichen Hochschulen in Bayern und Globalbetrag für Großgeräte für das Jahr 1999**

Einrichtung	Investitionen (Mio. DM)	Globalbetrag für 1999	
	1995-1997	WR <sup>4)</sup>	Planungsausschuß <sup>5)</sup>
<b>Universitäten <sup>1)</sup></b>			
Augsburg	4,8		
Bamberg	2,5		
Bayreuth	3,3		
Erlangen-Nürnberg	15,6		
LMU München	13,6		
TU München	21,4		
Passau	0,9		
Regensburg	2,2		
Würzburg	7,1		
<i>Summe</i>	<i>71,4</i>		
<b>Klinika <sup>2)</sup></b>			
Erlangen	3,2		
LMU-Großhadern	10,1		
LMU-Innenstadt	14,6		
TU München r.d. Isar	7,4		
Regensburg	4,0		
Würzburg	8,0		
<i>Summe</i>	<i>47,3</i>		
<b>Fachhochschulen <sup>1)</sup></b>			
<i>Summe</i>	<i>37,4</i>		
<b>LRZ <sup>3)</sup></b>			
<i>Summe (Großgeräte)</i>	<i>33,0</i>		
<b>Gesamtsumme</b>	<b>189,1</b>	<b>65,0</b>	<b>80,8</b>

1) Ist-Ausgaben (ohne Drittmittel) bei den DV-Investitionstiteln 81299, 81399 der Hochschulhaushalte (nach Zentralrechnungen des Finanzministeriums) sowie DV-Investitionen innerhalb von Ersteinrichtungsmaßnahmen (nach Umfrage bei den Hochschulen vom Juni/Juli 1998)

2) nach Umfrage bei den Hochschulen Juni/Juli 1998, z.T. Schätzungen

3) Kapitel 15 50, TG 99 (nach den Zentralrechnungen der Haushaltsjahre 1995-1997)

4) Globalbeträge für Großgeräte, CIP, WAP für das Jahr 1999 (Empfehlung des Wissenschaftsrates zum 28. Rahmenplan)

5) Entwurf zum 28. Rahmenplan (Planungsausschuß, Stand 18.01.1999)

Quelle: Angaben des Landes, Globalbeträge für das Jahr 1999 siehe Fußnoten 4 und 5

**Tabelle 5: EDV-Versorgung auf der Ebene Hochleistungsrechnen in den sechs Ländern des Norddeutschen Verbunds**

Land/Einrichtung	Rechnertyp	Gflop/s	Beschaffungsjahr
<b>Berlin</b>			
FU Berlin	SGI Origin div. WS-Cluster	8,7	1997
TU Berlin	CRAY T3E (24 Prozessoren) div. WS-Cluster	21,6	1997
HU Berlin	WS-Cluster hoher Leistung div. WS-Cluster	36,2	
ZIB	CRAY T3E (144 Prozessoren)	129,6	1997
	CRAY T3D (256 Prozessoren)	38,0	1994
	CRAY J90 (16 CPUs)	3,2	1995
	SGI Onyx 2 (Visualisierung)	1,6	1997
	in Beschaffung: Aufrüstung T3E auf 216 Prozessoren und Ersatz für T3D	194,4	1998
<i>Summe</i>	<i>(bis Nov. '98)</i>	<i>238,9</i>	
	<i>(ab Dez. '98 nach Aufrüstung u. Ersatzbesch.)</i>	<i>265,7</i>	
<b>Bremen</b>			
U Bremen	2 CRAY J90 (ges. 32 Prozessoren)	6,4	1993/94
	2 HP V-Class (ges. 32 Prozessoren)	31,0	1998
	2 SGI Onyx (Visualisierung)	1,2	1992
	IBM SP2 (6 Prozessoren)	2,0	1993/94
	div. WS-Cluster		
Hochsch. Bremen	HP Convex 1600 (8 Prozessoren)	2,0	1997
	HP Convex 2000 (4 Prozessoren)	2,0	1997
AWI (8 %iger Nutzungsanteil)	CRAY T3E (128 Prozessoren)	76,8	1997
	CRAY J90 (8 CPUs)	1,6	1996
	CRAY J90 (4 CPUs)	0,8	1995
<i>Summe (ohne AWI)</i>		<i>44,6</i>	
<b>Hamburg</b>			
U Hamburg	SGI 900 (18 CPUs)	8,0	1995
	in Beschaffung: HP Hyper Class 48/20 (48 Pr.)	46,0	1998
	in Planung: Ausbau HP Hyper Class (128 Pr.)		
TU Hamburg-Harburg	HP SPP2000 (16 Prozessoren)	11,5	1997
	Parsytec Gigacl. (128 Prozessoren)	10,2	1994
	div. WS-Cluster		
	in Planung: Parallelrechner (128 Pr.)		
DKRZ (17 %iger Nutzungsanteil)	CRAY C90 (16 CPUs)	14,4	1994
	CRAY J90 (8 CPUs)	1,6	1996
	CRAY T3D (128 Prozessoren)	19,0	1994
<i>Summe (ohne DKRZ)</i>		<i>75,7</i>	
<b>Mecklenburg-Vorpommern</b>			
U Rostock	WS-Cluster hoher Leistung CRAY T3E (40 Prozessoren)	4,0	
	div. WS-Cluster	36,0	1997
U Greifswald	in Beschaffung: Onyx 2 (Visualisierung)	1,2	
	div. WS-Cluster		
<i>Summe</i>		<i>41,2</i>	
<b>Niedersachsen</b>			
TU Braunschweig	CRAY T3E (24 Prozessoren)	21,6	1996
	SGI Power Challenge (12 Prozessoren)	4,8	1997
	SGI Origin 2000 (4 Prozessoren)	1,6	1997
	div. WS-Cluster		
U Göttingen	CRAY T3E (16 Prozessoren)	9,6	1996
	SGI Power Challenge	1,2	1996
	WS Cluster (zentral)	3,2	
	div. WS-Cluster		
U Hannover	CRAY T3E (20 Prozessoren)	18,0	1997
	SNI VPP 300/4	8,8	1996
	div. WS-Cluster		
	in Beschaffung: SGI Onyx 2 (Visualisierung)	1,2	
	in Planung: Ausbau VPP auf 8 CPUs (1999)		
<i>Summe</i>		<i>70,0</i>	
<b>Schleswig-Holstein</b>			
U Kiel	CRAY T94 div. WS-Cluster	7,2	1996
	in Beschaffung: Aufrüstung J939 in CRAY SV-1 (20 CPUs)	20,0	
<i>Summe</i>		<i>27,2</i>	
<b>Gesamtsumme (nach Aufrüstung am ZIB)</b>		<b>524,4</b>	

WS Workstation

Quelle: Angaben der beteiligten Länder



**Tabelle 6: Nutzung der norddeutschen Hochleistungsrechner (1997) nach Einrichtungen und Fachgebieten (in %)**

Einrichtung	ZIB		RRZN	Rostock	Kiel	U Hamburg	TU HH-Harburg
	CRAY (VR)	CRAY T3D/T3E	VPP 300/4 (VR)	CRAY T3E	CRAY T90 (VR)	SCC 900	SPP2000
<b>FU Berlin</b>							
UKG	13,0	5,3					
Chemie	7,3		3,1				
Physik		13,2					
<b>HU Berlin</b>							
Chemie	6,4	1,7					
Physik		5,6					
<b>TU Berlin</b>							
Chemie	35,6	1,7	11,2				
Ingenieurw.	9,1	28,0			1,0		
Physik		18,6			1,8		
<b>TU Braunschweig</b>							
UKG			1,7				
Chemie			7,9				
Ingenieurw.			5,2				
<b>TU Clausthal</b>							
Chemie			1,2				
Physik			3,1				
<b>U Göttingen</b>							
Chemie			6,5				
<b>U Hamburg</b>							
Chemie						x	
Physik						x	
<b>TU HH-Harburg</b>							
UKG							x
Chemie							
Ingenieurw.							
Physik						x	
<b>U Hannover</b>							
UKG		1,7	5,2				
Chemie		9,6	26,4				
Ingenieurw.			5,7				
Physik		1,1	3,1				
<b>U Kiel</b>							
UKG					20,5		
Chemie	6,7				3,6		
Ingenieurw.		13,3					
Physik	7,0				62,4		
<b>U Rostock</b>							
UKG				2,6			
Chemie				41,3			
Physik				12,9			

Einrichtungen außerhalb des Norddeutschen Verbunds

<b>TU Dresden</b>							
Ingenieurw.	1,8						
<b>U Halle</b>							
Chemie	5,5						
<b>I.f. Ostseef. Warnemünde</b>							
UKG				23,7			
<b>U Potsdam</b>							
Chemie	2,0						
Physik					5,7		
<b>Summe 1)</b>	<b>94,4</b>	<b>99,8</b>	<b>80,2</b>	<b>80,5</b>	<b>95,0</b>		

UKG	15,0	7,0	6,9	25,3	22,1		
Chemie	65,5	13,0	56,3	41,3	5,1		
Ingenieurw.	11,8	41,3	15,1	12,9	1,0		
Physik	7,7	38,7	6,2		71,7		
<b>Summe 1)</b>	<b>100,0</b>	<b>100,0</b>	<b>84,4</b>	<b>79,5</b>	<b>99,9</b>		

VR Vektorrechner

UKG Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften

1) Gesamtsumme nach Fachgebieten kann von der Summe der Teilsummen abweichen, da in den Listen des Antragstellers nur Einzelprojekte aufgeführt sind, die mehr als 1 % des Rechners belegen.

Quelle: Angaben der beteiligten Länder

Tabelle 7: Nutzung norddeutscher Projekte auf Rechnern des HLRS Stuttgart und HLRZ Jülich (1998)

Universität	Fachgebiet	Projekte	Leistungsanteil in %
<b>Vektorrechner (HLRS)</b>			
U Kiel	Umwelt-, Klima- u. Geowiss.	1 Projekt	
TU Berlin	Chemie	2 Projekte	
U Göttingen	Chemie	3 Projekte	
U Hamburg	Ingenieurw.	1 Projekt	
<b>Summe</b>		<b>7 Projekte</b>	
<b>Parallelrechner (HLRS)</b>			
U Kiel	Umwelt-, Klima- u. Geowiss.	1 Projekt	
HU Berlin	Chemie	1 Projekt	
<b>Summe</b>		<b>2 Projekte</b>	<b>insges. 15 %</b>

Universität	Fachgebiet	Projekte	Leistungsanteil in %
<b>Vektorrechner CRAY T90 (HLRZ)</b>			
Schleswig-Holstein	Umwelt-, Klima- u. Geowissensch.	1 Projekt	0,2
Schleswig-Holstein	Ingenieurwesen	1 Projekt	<0,1
Schleswig-Holstein	Physik	1 Projekt	1,4
Niedersachsen	Chemie	1 Projekt	0,1
Niedersachsen	Physik	2 Projekte	2,9
Berlin	Physik	1 Projekt	0,7
<b>Summe</b>		<b>7 Projekte</b>	<b>5,4</b>
<b>Parallelrechner CRAY T3E (HLRZ)</b>			
Berlin	Chemie	1 Projekt	2,5
Niedersachsen	Ingenieurwissenschaften	1 Projekt	<0,1
Niedersachsen	Physik	1 Projekt	3,4
DESY und U Hamburg	Physik	1 Projekt	33,4
<b>Summe</b>		<b>4 Projekte</b>	<b>39,4</b>

Quelle: Angaben der beteiligten Länder

**Tabelle 8: EDV-Investitionen in den sechs Ländern des Norddeutschen Verbunds und Globalbetrag für Großgeräte für das Jahr 1999**

Land/Einrichtung	Investitionen (ca. Mio. DM)			Globalbetrag für 1999	
	1996-1998	davon zentral <sup>1)</sup>	1999-2000	WR <sup>2)</sup>	Planungsausschuß <sup>3)</sup>
<b>Berlin</b>					
FU Berlin	25	5,4			
TU Berlin	7	0,6			
HU Berlin	18	4,3			
Fachhochschulen	4,5	1			
ZIB	3	3			
<i>Summe</i>	<i>57,5</i>	<i>14,3</i>	<i>49,0</i>	<i>37,0</i>	<i>21,7</i>
<b>Bremen</b>					
U Bremen	12	7,0			
AWI (Landesanteil)	1				
<i>Summe</i>	<i>13</i>	<i>7,0</i>	<i>16,0</i>	<i>6,0</i>	<i>8,2</i>
<b>Hamburg</b>					
U Hamburg	29	18,0			
TU Hamburg-Harburg	11,5	7,5			
Fachhochschule	6,5	4,5			
<i>Summe</i>	<i>47</i>	<i>30,0</i>	<i>30,0</i>	<i>15,0</i>	<i>17,3</i>
<b>Mecklenburg-Vorpommern</b>					
<i>Summe</i>	<i>24</i>	<i>2,7</i>	<i>16,0</i>	<i>19,0</i>	<i>10,2</i>
<b>Niedersachsen</b>					
<i>Summe</i>	<i>51</i>	<i>17,0</i>	<i>40,0</i>	<i>38,0</i>	<i>36,1</i>
<b>Schleswig-Holstein</b>					
U Kiel	30	5,0			
Med. Uni. Lübeck	18				
Fachhochschulen	12				
<i>Summe</i>	<i>60</i>	<i>5,0</i>	<i>40,0</i>	<i>12,0</i>	<i>10,8</i>
<b>Gesamtsumme</b>	<b>252,5</b>	<b>76,0</b>	<b>191,0</b>	<b>127,0</b>	<b>104,3</b>

- 1) Mittel für zentrale Server und Geräte, die in der Regel von den Rechenzentren der Hochschulen betrieben werden.
  - 2) Globalbeträge für Großgeräte, CIP, WAP für das Jahr 1999 (Empfehlung des Wissenschaftsrates zum 28. Rahmenplan)
  - 3) Entwurf zum 28. Rahmenplan (Planungsausschuß, Stand 18.01.1999)
- Quelle: Angaben der beteiligten Länder, Globalbeträge für das Jahr 1999 siehe Fußnoten 2 und 3

## Glossar der wichtigsten Begriffe und Abkürzungen

ASCI	Accelerated Strategic Computing Initiative (DoE, USA Government)
ATM	Asynchronous Transfer Mode (Breitband-Übertragungstechnik, z.B. für Breitband-ISDN)
B-WiN	Breitband-Wissenschaftsnetz (DFN)
Benchmark	Programmpaket, das zur Bewertung von Rechnern und Algorithmen auf Rechenanlagen ausgeführt wird (Benchmarksuite = mehrere derartiger Programmpakete)
Bit	Binärzeichen oder Maßeinheit für Informationsmenge
BRAIN	Berlin Research Area Information Network (Berliner Wissenschaftsnetz zur Koordination der übergreifenden Datenübertragung)
Byte	Informationseinheit; entspricht 8 Bit
CIP	Computer-Investitions-Programm (Hochschulbauförderungsgesetz)
CISC	Complex Instruction Set Computers (konventionelle Prozessorarchitektur mit umfangreichem Befehlssatz, z. B. zur besseren Unterstützung von Hochsprachen)
Cluster	(Lose) gekoppelter Verbund von (Arbeitsplatz)Rechnern, Pool
Compiler	Werkzeug zum Übersetzen von Quelltexten in Maschinenprogramme
CPU	Central Processing Unit (Zentraleinheit eines Rechners)
Debugger	Werkzeug zum Suchen und Beseitigen von Programmfehlern
DESY	Deutsches Elektronen-Synchrotron
DFN	Deutsches Forschungsnetz e.V.
DKRZ	Deutsches Klimarechenzentrum
DoE	Department of Energy (USA)
EUROPORT	Von der GMD und Smith System Engineering durchgeführte EU-Projekte zur Demonstration des Nutzens der Parallelisierung.
Finite- Elemente-	
Methode	Universelles Verfahren zur Diskretisierung von Differentialgleichungen und Integralgleichungen
Flop/s	Floatingpoint Operations Per Second: Gleitkommaoperationen pro Sekunde; Maß für Rechenleistung von Rechnern
FORTWIHR	Forschungsverbund für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen in Bayern

G(iga) Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^9$  Einheiten

GMD Akronym für GMD-Forschungszentrum Informationstechnik

#### Grand-Challenge-Vorhaben

Zu den Grand-Challenge-Vorhaben zählen beispielsweise Voraussagen über langfristige globale Klimaveränderungen (gekoppelt mit Ozeanmodellen), Wetterprognosen über mehrere Tage, direkte Simulationen turbulenter Strömungen – etwa im Flugzeug- und Automobilbau -, schnelle und genaue Analysen großer Moleküle (z. B. Proteine). Derartige Projekte erfordern Rechenleistungen, die die heute verfügbaren Hochleistungsrechner weit übersteigen. In den USA nennt man die Lösung dieser fundamentalen Probleme „große Herausforderungen“ (Quelle: US-Office of Science and Technology Policy „Grand Challenges 1992“).

HLR Höchstleistungsrechner

HLRB Höchstleistungsrechenzentrum Bayern

HLRN Höchstleistungsrechenzentrum Nord

HLRS Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart

HLRZ Höchstleistungsrechenzentrum im Forschungszentrum Jülich (mitgetragen vom Deutschen Elektronen-Synchrotron)

HPSC High Performance Scientific Computing

K(ilo) Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^3$  Einheiten

LRZ Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in München

M(ega) Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^6$  Einheiten

#### Massiv-paralleler Rechner

Parallelrechner mit einer großen Zahl (mindestens einigen hundert) von Prozessorelementen (z.B. RISC-Prozessoren) mit eigenem (lokalen) Hauptspeicher

#### Message-

Passing Programmiertechnik für die nachrichtenorientierte Kommunikation zwischen Komponenten paralleler und verteilter Programme

#### Moderat-paralleler Vektorrechner

Multiprozessorsystem aus parallelen (bis etwa hundert) Zentraleinheiten mit starken Funktionseinheiten, die zur schnellen Bearbeitung

von Vektoren nach dem Pipeline/Fließband-Prinzip arbeiten. Beim Pipeline-Prinzip werden mehrere Operationen – wie bei der Montage am Fließband – überlappt bearbeitet.

MPI/IPP	Max-Planck-Institut/Institut für Plasmaphysik
NIC	John von Neumann-Institut für Computing (HLRZ-Nachfolgeinstitut, getragen vom Forschungszentrum Jülich und DESY)
NQS	Network Queueing System
NVV	Norddeutscher Vektorrechnerverbund
PIK	Institut für Klimafolgenforschung Potsdam
Prozessor	Arithmetisch-logische Funktionseinheit innerhalb eines Rechners
RISC	Reduced Instruction Set Computer (Prozessorarchitektur mit einem gegenüber den CISC-Prozessoren reduzierten Befehlssatz)
RRZN	Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen in Hannover
RTB	Regionale(s) Testbed(s) (Pilot-ATM-Netz(e) als B-WiN-Vorläufer)
Skalierbarkeit	Eigenschaft, daß sich die Leistung eines parallelen Rechnersystems durch Steigerung der Zahl der Prozessoren an steigende Anforderungen einer Anwendung anpaßt
T(era)	Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet $10^{12}$ Einheiten
UNICORE	Uniformes Interface für Computer-Ressourcen (Software-Verbundprojekt; vom BMBF finanziert; Beteiligung von deutschen Software-Firmen, deutschen Großforschungseinrichtungen, Rechenzentren der Wissenschaft, Deutscher Wetterdienst; Leitung: Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich)
VESUZ	Verbund der Supercomputerzentren in Deutschland (Machbarkeitsanalyse für den BMBF, 1997)
WAP	Wissenschaftler-Arbeitsplatz-Programm (Hochschulbauförderungsgesetz)
ZIB	Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin