

## **Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern**

<u>Inhalt</u>	<u>Seite</u>
Vorbemerkung .....	2
Thesen zum Höchstleistungsrechnen in Deutschland .....	4
A. Stellenwert des Höchstleistungsrechnens und Anforderungen an ein nationales Versorgungskonzept.....	7
B. Bedarf und Beschaffung .....	12
B.I. Nachfrage nach Höchstleistungsrechenkapazität .....	12
B.II. Hardware- und Softwareentwicklung .....	15
B.III. Beschaffungsstrategien .....	18
C. Netzwerke .....	20
C.I. Vernetzung .....	20
C.II. Netzwerke der Köpfe .....	21
C.III. Aus- und Weiterbildung.....	23
D. Versorgungskonzept.....	25
D.I. Nachfrageorientierte Steuerung durch Einführung von Gebühren .....	25
D.II. Nationaler Koordinierungsausschuß und wissenschaftliche Beiräte.....	29
II.1. Beurteilung von Investitionsentscheidungen durch einen nationalen Koordinierungsausschuß .....	29
II.2. Antragsbeurteilung durch wissenschaftliche Beiräte .....	33
E. Anhang .....	35
F. Glossar der wichtigsten Begriffe und Abkürzungen .....	39

## **Vorbemerkung**

Der Wissenschaftsrat hat im Januar 1999 eine Arbeitsgruppe eingesetzt, die das ursprüngliche in seiner Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität aus dem Jahre 1995<sup>1</sup> beschriebene Konzept zum Aufbau nationaler Höchstleistungsrechner auf seine Aktualität hin überprüfen sollte. Die Arbeitsgruppe hat sich dabei mit der gesamten inhaltlichen Breite des Gebietes befaßt, beginnend bei den neuen Entwicklungstendenzen im Höchstleistungsrechnen, der Diskussion von Angebot und Nachfrage von Höchstleistungsrechenkapazität, dem Stand und den Perspektiven einer nationalen Vernetzung sowie von Kooperationsmöglichkeiten zwischen universitären und außeruniversitären Nutzern bis hin zur Integration des wissenschaftlichen Rechnens in die Aus- und Weiterbildung an Universitäten und Fachhochschulen. Sie hat sich außerdem ausführlich mit der Frage der nutzer- und nutzungsbezogenen Finanzierung von Höchstleistungsrechnern auf der Grundlage einer Anfrage des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) auseinandergesetzt. Eine weitere Veranlassung zur Beschäftigung mit einer künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern ergab sich aus der Stellungnahme des Wissenschaftsrates zu den Konzepten über die Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern und eines Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen vom Januar 1999<sup>2</sup> sowie aus der beabsichtigten Beschaffung von Höchstleistungsrechnern durch weitere Länder und Universitäten.

Die Arbeitsgruppe hat die Empfehlung in insgesamt vier Sitzungen vorbereitet und am 2. und 3. September 1999 in Köln eine Anhörung mit internationaler Beteiligung zu fachlich-technischen Aspekten des Betriebs und der Nutzung von Höchstleistungsrechnern sowie zu organisatorisch-finanziellen Fragestellungen im Zusammenhang mit der Einführung eines Gebührenmodells durchgeführt. Insgesamt 18 Sachverständige, darunter Vertreter von Höchstleistungsrechenzentren, Repräsentanten der Nutzer von Höchstleistungsrechenkapazität sowie Experten aus den Bereichen Finanzwissenschaften und Wissenschaftsadministration wurden um die Beantwortung eines Fragenkatalogs und um eine mündliche Stellungnahme gebeten.

---

<sup>1</sup> Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Empfehlung zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, 1995 Köln, S. 51-70.

<sup>2</sup> Wissenschaftsrat: Stellungnahme zu den Konzepten über die Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern und eines Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen 1999, Drs. 3852/99.

In der Arbeitsgruppe haben auch Sachverständige mitgewirkt, die nicht Mitglieder des Wissenschaftsrates sind. Ihnen ist der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet. Ebenso sei den Experten gedankt, die Beiträge zur Anhörung geleistet haben.

Der Wissenschaftsrat hat diese Empfehlung am 12. Mai 2000 verabschiedet.

## **Thesen zum Höchstleistungsrechnen in Deutschland**

### **1. Höchstleistungsrechnen ist für die Spitzenforschung unverzichtbar.**

Mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern wurden in den zurückliegenden Jahren in zahlreichen Hochschulen und Forschungseinrichtungen wissenschaftliche Durchbrüche erzielt, die auf Rechnern niedrigerer Leistungsklassen nicht möglich gewesen wären. Dies betrifft beispielsweise Simulationen in der Elementarteilchen- und Vielteilchenphysik, in der Materialforschung, Strömungsdynamik, Strukturmechanik, Chemie, Geo- und Astrophysik und Klima- und Umweltforschung. Die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb. Die Bereitstellung der entsprechenden Infrastruktur ist eine Aufgabe des Staates. Ein offener Zugang unabhängig von den geographischen Voraussetzungen und den institutionellen Zugehörigkeiten der Nutzer ist notwendig.

### **2. Der Bedarf nach Rechenkapazität ist tendenziell unbegrenzt.**

Der Bedarf einzelner Fachgebiete nach Rechenkapazität ist wegen der ständig fortschreitenden Verfeinerung mathematischer Modelle und der zunehmenden Komplexität von Simulationen unbegrenzt. Die ständige Verbesserung der Rechnerleistung hat eine prognostizierbare Bedarfssteigerung um etwa den Faktor zehn in den nächsten zwei bis drei Jahren zur Folge, die ihrerseits neue Fragestellungen – und damit neuen Bedarf - initiieren wird.

### **3. Kontinuierliche Investitionen sind notwendig.**

Der exponentielle Leistungsanstieg der Spitzenrechner (etwa alle fünf Jahre eine Verzehnfachung der Rechenleistung) wird sich in den nächsten fünf bis zehn Jahren nicht wesentlich verlangsamen. Um die wissenschaftliche Wettbewerbsfähigkeit auch in Zukunft zu sichern, sind deshalb investive Anstrengungen, bezogen auf einen fortlaufenden qualitativen und quantitativen Ausbau der Rechnerversorgung und einer leistungsstarken Vernetzung, unverzichtbar. Darin eingeschlossen ist auch die bislang heterogene Ausstattung der Hochschulen mit Rechenleistung der unteren und mittleren Ebene.

#### **4. Kompetenznetzwerke fördern die effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern.**

Für eine effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern kommt es darauf an, großflächige Kompetenznetzwerke, bestehend aus wenigen Höchstleistungsrechenzentren und breitgestreuten Kompetenzzentren, zu etablieren. Darüber hinaus kann die Kooperation zwischen den Betreiberzentren von Höchstleistungsrechnern durch eine Abstimmung der fachlichen Bereiche, für die jedes Zentrum aufgrund seiner Beratungskompetenz, seiner maschinellen Ausstattung oder seines traditionell gewachsenen fachlichen Fokus besonders geeignet ist, noch weiter verbessert werden.

#### **5. Wettbewerb muß nutzerorientiert gestärkt werden.**

Die Höchstleistungsrechenzentren werden sich künftig verstärkt im Wettbewerb daran messen lassen müssen, inwieweit sie in der Lage sind, den Bedürfnissen der Nutzer durch Bereitstellung der erforderlichen Rechenleistung und einer problemadäquaten Service- und Beratungsleistung zu entsprechen.

#### **6. Optimale Nutzung und koordinierte Beschaffung setzen funktionierende Steuerungsmechanismen voraus.**

Für eine optimierte Nutzung und eine abgestimmte, institutionenübergreifende Beschaffung von Höchstleistungsrechnern sind Steuerungsmechanismen als Bestandteil eines nationalen Versorgungskonzepts erforderlich. In diesem Zusammenhang sollten bereits bestehende Mechanismen zur Förderung der Kostentransparenz weiter verbessert werden. Eine gebührenfinanzierte Steuerung zur Förderung des Wettbewerbs zwischen den Betreiberzentren erscheint allerdings wegen fehlender Marktmechanismen nicht geeignet, um eine bedarfsgerechte Nutzung von Höchstleistungsrechnern zu gewährleisten. Zudem besteht die Gefahr von Fehlanreizen und kaum absehbaren wirtschaftlichen Risiken, da ein Verlustausgleich mit institutionellen Mitteln nicht möglich ist.

## **7. Strategischer Abstimmungsbedarf erfordert einen Koordinierungsausschuß auf nationaler Ebene.**

Angesichts der Entwicklungsdynamik im Bereich des Höchstleistungsrechnens und seiner Bedeutung für die internationale Wettbewerbsfähigkeit ist eine strategische Abstimmung der Versorgung mit Höchstleistungsrechenkapazität im nationalen Rahmen unverzichtbar. Aufbau und Betrieb von Höchstleistungsrechnern müssen in eine bundesweite, institutionenübergreifende Investitionsstrategie eingebettet werden. Diese Aufgabe sollte einem neu einzurichtenden nationalen Koordinierungsausschuß übertragen werden. Die Tätigkeiten der Kommission für Rechananlagen der DFG, der Fachkommissionen der Trägerorganisationen der Höchstleistungsrechenzentren und der Wissenschaftlichen Beiräte an den Betreiberzentren bleiben davon unberührt.

## **8. Aus- und Weiterbildung müssen gestärkt werden.**

Die Arbeit mit Höchstleistungsrechnern ist bislang nur sehr unzureichend in Studiengänge integriert. Deshalb bedarf es neben einer gezielten Initiative zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens in Universitäten und Fachhochschulen auch geeigneter Weiterbildungsangebote. Die studentische Ausbildung darf sich dabei nicht auf die Nutzung von PC und Workstations beschränken, sondern sollte auch die Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern einschließen, da die jetzige Spitzenleistung in Zukunft zunehmend auch in der industriellen Entwicklung verfügbar sein wird. Dies gilt gleichermaßen für die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses. Darüber hinaus sollte für ausgewählte Forschergruppen ein Förderprogramm zum Wissenschaftlichen Rechnen aufgelegt werden.

## **9. Im Software-Bereich sind zusätzliche Anstrengungen erforderlich.**

Trotz guter Ansätze in der Algorithmenentwicklung kommt der Entwicklung und Vermarktung deutscher Simulationssoftware bislang kaum Bedeutung zu. Im Bereich der Softwareentwicklung sind verstärkte Anstrengungen mit dem Ziel einer Leistungssteigerung der Höchstleistungsrechner dringend erforderlich. Dabei wird es darauf ankommen, neben der numerischen Simulation künftig auch der wachsenden Bedeutung nichtnumerischer Anwendungen Rechnung zu tragen.

## **A. Stellenwert des Höchstleistungsrechnens und Anforderungen an ein nationales Versorgungskonzept**

Wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen erfordert eine Synthese aus fachspezifischer Kompetenz, mathematischer Methodik und informationstechnischem Instrumentarium auf höchstem Niveau. Die aus dieser Symbiose entwickelte Vorgehensweise ist zwischen Theorie und Experiment als eigenständige wissenschaftliche Methode etabliert. Sie nimmt in vielen Bereichen entscheidenden Einfluß auf die internationale Wettbewerbsfähigkeit von Wirtschaft und Wissenschaft.

Höchstleistungsrechner werden in Wissenschaft und Industrie als forschungsunterstützende Instrumente insbesondere dort eingesetzt, wo reale Experimente nicht möglich, zu zeitaufwendig oder zu teuer sind und wo Rechnersysteme niedrigerer Leistungsstufen nicht ausreichen. In Hochschulen und Forschungseinrichtungen wurden durch den Einsatz von Höchstleistungsrechnern zahlreiche wissenschaftliche Durchbrüche erzielt (beispielsweise bei Simulationen in der Elementarteilchenphysik, Materialforschung, geowissenschaftlichen und astrophysikalischen Fragestellungen, Klima- und Umweltforschung, statistischer Physik und Biowissenschaften).

Höchstleistungsrechnen stellt ein unverzichtbares Werkzeug für die Spitzenforschung dar. Die Bereitstellung der dazu erforderlichen Infrastruktur ist eine zentrale Aufgabe des Staates. Ihre Verfügbarkeit ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen wissenschaftlichen und industriellen Wettbewerb.

Aufgrund der großen Entwicklungsdynamik von Höchstleistungsrechnern (siehe Abb. 1) unterliegt auch ihre technische Definition einem ständigen Wandel: Sie zeichnen sich durch die jeweils weltweit neueste Technologie, modernste Architektur und höchste Leistungsfähigkeit aus. Ihre Einordnung in die nationale Rechnerversorgungsstruktur zur Ausstattung von Wissenschaft und Forschung mit Informationsverarbeitungskapazität sollte sich an einem Vierebenenmodell orientieren: Es besteht 1. aus der Arbeitsplatzebene, 2. der Instituts- bzw. Fachbereichsebene, 3. der Universitäts-/Landesebene der Hochleistungsrechenzentren sowie 4. der höchsten Ebene der bundesweit zugänglichen Höchstleistungsrechner. Auf den Bereich der Höchstleistungsrechner entfällt dabei deutlich weniger als ein Viertel des Gesamtinvestitionsvolumens der Rechnerversorgungsstruktur.

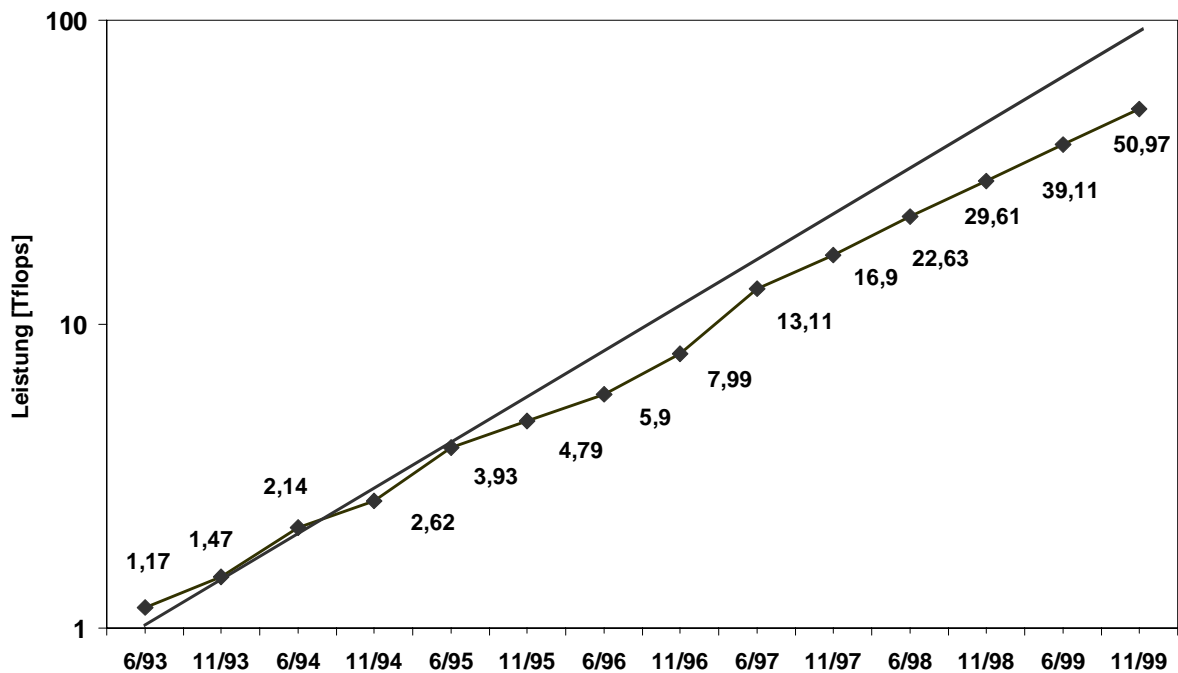


Abb. 1: Entwicklung der Gesamtleistung der in der TOP 500-Liste geführten Rechner im Zeitraum von 1993 bis 1999 (LINPACK Benchmark).

Die technischen Entwicklungen im Bereich des Höchstleistungsrechnens werden wesentlich durch die Regierungsprogramme in den USA und in Japan bestimmt. Diese Programme verfolgen strategische Ziele, zu deren Bearbeitung das Höchstleistungsrechnen benötigt wird. Darüber hinaus wird in beiden Ländern Forschung an und mit Höchstleistungsrechnern als nationale Herausforderung verstanden und in eigenen öffentlichen Programmen gefördert.

In den USA will man zum einen die Technologieführerschaft in der Informationstechnik erhalten, zum anderen mit eben dieser Informationstechnik einen entscheidenden Vorsprung in der Wirtschaft gewinnen. Am klarsten kommt dies bei dem ASCI-Programm (Accelerated Strategic Computing Initiative) und dem Programm zur Förderung der nationalen Supercomputing-Zentren zum Ausdruck.<sup>3</sup>

Das ASCI-Programm<sup>4</sup> bezieht sich auf dedizierte Anwendungsfelder im militärischen Bereich und dient primär der Entwicklung von Simulationsprogrammen zur Kontrolle der Einsatzfähigkeit atomarer Waffen bei Verzicht auf reale Tests. Darüber

<sup>3</sup> Vgl. auch den Bericht des Informations Technology Advisory Committee an den Präsidenten der USA vom März 1999 (PITAC).

<sup>4</sup> <http://www.llnl.gov/asci/>



hinaus werden jedoch allgemein Simulationsmethoden in einer Reihe von Wissenschaften unterstützt, wie z. B. Materialwissenschaften, Festkörperphysik, Chemie, Strömungsmechanik, Mathematik und Informatik. Sekundär dient das ASCI-Programm dazu, die Entwicklung neuer Rechner sowohl auf der Seite der Prozessoren als auch der Bezug auf I/O, Vernetzung und Speichertechnologie zu fördern. Da es gänzlich auf der Nutzung üblicher Prozessoren basiert und die geforderte Gesamtleistung durch deren Parallelisierung erreichen will, können die technischen Weiterentwicklungen im Workstation- und PC-Bereich direkt für Verbesserungen des Höchstleistungsrechnens umgesetzt werden. Aus der Kooperation von amerikanischen Höchstleistungsrechnerherstellern mit Pilotkunden aus dem militärischen und zivilen Bereich schöpfen sowohl die Supercomputerhersteller als auch die Prozessorhersteller und nicht zuletzt auch die Anwender in den USA erhebliche Vorteile. Insoweit ist das ASCI-Programm auch ein Förderprogramm für die den Prozessormarkt dominierende amerikanische IT-Industrie (Industrie der Informationstechnologie) durch die amerikanische Regierung.

Die USA wollen innerhalb des ASCI-Programms im Jahr 2001 Rechner mit einer Peakperformance von 30 Teraflop/s und im Jahr 2004 von 100 Teraflop/s in Betrieb nehmen. An effektiver maximaler Leistung dürften für das Jahr 2001 ca. drei Teraflop/s, für das Jahr 2004 bis zu zehn Teraflop/s zu erwarten sein. Der technische Aufwand (Räumlichkeit, Energie, Personal), um Rechner im 100 Teraflop/s-Bereich noch installieren und betreiben zu können, ist extrem hoch; die damit verbundenen Betriebskosten über die Laufzeit der Installation werden den Investitionskosten mindestens vergleichbar sein. Die Nutzung dieser Spitzenrechner ist im wesentlichen den amerikanischen Projektmitarbeitern am Verteidigungsprogramm des DoE (Department of Energy) vorbehalten. Für andere Wissenschaftler stehen sie nur teilweise zur Verfügung. Gleichwohl haben amerikanische Wissenschaftler durch den Zugang zu solchen Spitzenrechnern einen Wettbewerbsvorteil gegenüber Wissenschaftlern aus Deutschland.

Auch der Transfer moderner Softwaretechniken in Industrie und Verwaltung ist ein wichtiges Ziel der Supercomputing-Zentren. Handlungsleitend ist dabei der Grundsatz, alle Anwendungen, für die Höchstleistungsrechner nicht erforderlich sind, dezentral zu bearbeiten. Aus diesem Grunde wurde 1996 und 1997 die Versorgung mit Höchstleistungsrechnern von vier auf zwei Zentren der National Science Foundation

(NSF) reduziert.<sup>5</sup> Das Konzept wird durch substantiell verstärkte dezentrale Ausstattungen und Vernetzungen ergänzt. Der Grundgedanke der amerikanischen Entscheidungen ist, alle Anwendungen so dezentral wie möglich zu behandeln und die Superzentren für die Größtanwendungen zu reservieren.

Japan will durch das groß angelegte "Earth-Simulator-Projekt" entscheidende Fortschritte bei der Simulation gekoppelter Vorgänge zwischen Tektonik (Erdbebengefahr in Japan), Meeresströmungen (Japan als Insel), Atmosphäre und den von Menschen hervorgebrachten Umweltveränderungen erreichen. Damit setzt Japan zugleich die konsequente Unterstützung der heimischen IT-Industrie fort. Die japanischen Herstellerfirmen profilieren sich durch eigene Prozessorentwicklungen (Vektorprozessoren), da der RISC-Prozessormarkt von den USA dominiert wird.

Die beschriebenen amerikanischen und japanischen Regierungsprogramme fördern zwar indirekt auch die Wissenschaft, sie sind aber weder durch sie noch primär für sie initiiert. In Deutschland bestehen keine vergleichbaren Voraussetzungen, um eine dem ASCI-Programm oder dem Earth-Simulator-Projekt analoge nationale Initiative zu starten. Die Ausstattung mit Höchstleistungsrechnern bewegt sich in einer wesentlich kleineren Dimension. Eines der leistungsstärkeren derzeit in Deutschland geplanten Systeme ist das des Deutschen Wetterdienstes (DWD) in Offenbach mit effektiv 0,5 Teraflop/s für das aktuelle Wettervorhersagemodell im Jahr 2002, dies entspricht dann einer Peakperformance von etwa drei Teraflop/s.

Läßt man die im Rahmen dieser Initiativen in den USA und Japan besonderen (pilotweisen) Höchstleistungsrechner außer Acht und berücksichtigt lediglich die für die Wissenschaft verfügbaren Rechner, hat die Rechnerausstattung in Deutschland im wissenschaftlichen Bereich nach den USA ein mit Japan vergleichbares Niveau und einen Vorsprung vor Frankreich, England und anderen Industrienationen. Bei dieser Aussage ist zu berücksichtigen, daß die Leistungsfähigkeit der weltweit installierten Rechner jährlich nahezu um den Faktor zwei steigt (s. Abb. 1) und somit einen ständigen Aktualisierungsbedarf in der deutschen Rechnerausstattung induziert. Im kommerziellen Bereich, d. h. insbesondere im Einsatz von Superrechnern bei Kraft-

---

<sup>5</sup> Dies sind das San Diego Supercomputer Center (SCD) und das National Center for Supercomputer Applications in Urbana, Illinois (NCSA); dem Pittsburgh Supercomputer Center (PSC) und dem Cornell Theory Center in Ithaca, New York (CTC) ist der Status der Superzentren nicht wiedergewährt worden. Ein weiteres Center der NSF, das National Center for Atmospheric Research (NCAR) steht ausschließlich den Klimawissenschaftlern zur Verfügung.

fahrzeugherstellern, Banken, Versicherungen, wie auch im Bereich der Wetter- und Klimavorhersage ist Deutschland international konkurrenzfähig.

Die Dynamik im Bereich des Höchstleistungsrechnens, die ihren Ausdruck u. a. im exponentiellen Leistungsanstieg der Spitzenrechner und der Algorithmenentwicklung sowie einer stark verbesserten Infrastruktur im Bereich der Rechnerausstattung und Netze findet, wird sich in den nächsten fünf bis zehn Jahren nicht wesentlich verlangsamen. Die große Bedeutung für Wissenschaft und Forschung und die sich daraus ergebenden organisatorischen Herausforderungen und finanziellen Belastungen lassen es erforderlich erscheinen, ein nationales Versorgungskonzept mit dem Ziel der Bereitstellung einer exzellenten Forschungsinfrastruktur zu entwickeln, um eine ausreichende Versorgung sowie einen effizienten Ressourceneinsatz und eine effektive Nutzung der aus öffentlichen Mitteln bereitgestellten Höchstleistungsrechner zu gewährleisten.

Ein solches Konzept muß hinsichtlich des Einsatzes von Höchstleistungsrechnern den Aspekten Verfügbarkeit (Angebot an Verarbeitungsleistung im Spitzenbereich), Zugang über Hochleistungsnetze und nicht zuletzt den Anforderungen aus Beratung (Auf- und Ausbau von Kompetenzzentren) und Ausbildung (Wissenschaftliches Rechnen in der Universitäts- und Fachhochschulausbildung) Rechnung tragen. In diesem Zusammenhang erachtet es der Wissenschaftsrat als notwendig, in Deutschland Förderprogramme zu initiieren, welche die Methodenwissenschaften im Bereich des Höchstleistungsrechnens mit Fachwissenschaften unter einem klaren thematischen Bezug verbinden. Es muß auch den Belangen der Anwender aus Wissenschaft und Wirtschaft Rechnung tragen. Zudem muß die Planung personeller Ressourcen mit hohem Qualifikationsniveau berücksichtigt werden, die durch Aufbau und Betrieb neuester Technologie notwendig ist. Die Effizienz eines nationalen Versorgungskonzeptes muß sich ferner an der optimalen Nutzung des bestehenden Angebots und der optimalen Befriedigung des nachgefragten Bedarfs sowie an einer aktiven Förderung der Nachfrage von wissenschaftlich interessanten Fragestellungen messen lassen.

Bei der derzeitigen Bereitstellung von Höchstleistungsrechnern handelt es sich um ein System, das optimiert und angepaßt werden muß, um auch den künftig veränderten Anforderungen gerecht werden zu können. Erforderlich ist eine Stärkung der

Koordination und Kooperation auf der Ebene der Rechenzentren, eine Öffnung für künftige Nutzer sowie Förderungsmaßnahmen in der Softwareentwicklung.

Da die Bereitstellung von Höchstleistungsrechnern als Aufgabe staatlicher Grundversorgung angesehen wird und die rapide Entwicklungsdynamik eine strategische Abstimmung der nationalen Beschaffungen erforderlich macht, ist nach Auffassung des Wissenschaftsrates ein nationales Versorgungskonzept unverzichtbar.

## **B. Bedarf und Beschaffung**

### **B.I. Nachfrage nach Höchstleistungsrechenkapazität**

Höchstleistungsrechner, die mit japanischen oder amerikanischen Spitzenrechnern vergleichbar wären, stehen außerhalb dieser beiden Länder nicht zur Verfügung. Solche Installationen wären aus deutscher Sicht allenfalls auf europäischer Ebene möglich. In Deutschland folgt die strategische Forschungsförderung anderen Gesichtspunkten. Die für Wissenschaftler aus Universitäten und Forschungsorganisationen zugänglichen Rechner sind im Gegensatz zu den Installationen des ASCI- oder Earth-Simulator-Programms aus der Wissenschaft selbst initiiert und im allgemeinen für vergleichsweise breite Anwendungsfelder ausgelegt. Für künftige Anwendungen einzelner Fachgebiete ist die derzeit technisch verfügbare Informationsverarbeitungskapazität jedoch nicht ausreichend, um die anstehenden Aufgaben zu lösen. Zur Sicherung der wissenschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit sind deshalb ständige Investitionen zur fortlaufenden Erneuerung sowie für einen qualitativen und quantitativen Ausbau erforderlich. Dies ist nicht nur für die internationale Konkurrenzfähigkeit der deutschen Spitzenforschung im Bereich des Höchstleistungsrechnens bedeutsam, sondern hat auch Auswirkungen auf die Spitzenforschung mit Rechnern in den nächstniedrigeren Leistungsklassen, z. B. der Workstation-Cluster. Darüber hinaus werden dedizierte Höchstleistungsrechner für spezielle Anwendungen, beispielsweise in der Klimaforschung, als zusätzliche Versorgung benötigt.

Um Höchstleistungsrechnern optimal nutzen zu können, muß eine angemessene Grundversorgung von Forschung und Lehre mit Informationsverarbeitungskapazität vor Ort vorhanden sein. Die Ausstattung der Hochschulen mit Rechenleistungen der

unteren und mittleren Kategorie muß deshalb dem jeweils aktuellen technischen Stand entsprechen. Die Versorgungsqualität in diesen Leistungsklassen ist heterogen und erfordert permanente finanzielle Anstrengungen. Ebenso bedeutsam ist die Netzverfügbarkeit (vgl. dazu Kap. C.I.).

Hinsichtlich der Prognose des zukünftigen Bedarfs an Höchstleistungsrechenkapazität ist von einer Steigerung um etwa den Faktor zehn in zwei bis drei Jahren auszugehen. Es handelt sich um eine neue Qualität und Quantität der Nachfrage nach Rechenleistung und –kapazität. Die nachgefragte und für die Anwendung zu erschließende Rechnerleistung liegt derzeit im Teraflop/s-Bereich, eine Sättigung der Nachfrage ist nicht in Sicht. Dies liegt u. a. in einer höheren Leistungsfähigkeit der Rechensysteme begründet, die sich durch eine zunehmende Verfeinerung der mathematischen Simulation und Modellbildung auf die Initiierung neuer höchstleistungsrechenrelevanter Projekte auswirkt. Zudem ist in diesem Zusammenhang eine Vergrößerung der Zahl der Anwender zu beobachten.

Der überwiegende Anteil der Nutzung entfällt dabei auf numerische Fragestellungen aus Wissenschaft und Technik. Es wird jedoch erwartet, daß nichtnumerischen Anwendungen aufgrund ihrer großen wirtschaftlichen Bedeutung künftig ein höherer Stellenwert zukommen wird.

Die Bedarfsdeckung erfolgt bislang durch Antragstellung bei deutschen sowie aus einigen Fachgebieten auch bei europäischen oder amerikanischen Höchstleistungsrechenzentren. Nur in wenigen Ausnahmefällen verfügen die Nutzer über institutseigene leistungsfähige Rechner. So stehen beispielsweise einigen Instituten der Max-Planck-Gesellschaft Projektrechner zur Verfügung. Ausgewählte Fachgebiete wie beispielsweise die Klima- und Umweltforschung decken ihren Bedarf mit dedizierten Höchstleistungsrechnern, die nur einer eingeschränkten Nutzergruppe offen stehen. Desweiteren entwickeln sich derzeit erste Marktangebote für wissenschaftliche Dienstleistungen im Höchstleistungsrechenbereich.

Die steigende Anzahl von Anträgen auf Rechenzeit sowie die Begrenztheit der öffentlichen Finanzmittel für Ersatz- und Erneuerungsinvestitionen machen Steuerungsmechanismen erforderlich.

Die starken Impulse des Höchstleistungsrechnens auf die Modellbildung in Wissenschaft und Forschung („virtuelles Labor“) machen gleichzeitig in der Industrie die Computersimulation zum unverzichtbaren Instrument für die Optimierung der Pro-

duktzyklen („virtuelles Produkt“). Hier spielen Höchstleistungsrechner bei der Simulation von Crash-Tests von Automobilen, in der Raum- und Luftfahrt, bei der Optimierung des Chip-Designs, in der Hydrodynamik oder bei chemischen Entwicklungen eine Rolle. Trotz des erreichten hohen Niveaus kann eine stark zunehmende Nachfrage nach Höchstleistungsrechenkapazität etwa durch die Behandlung integrierter Systeme (multidisziplinäre Methoden) erwartet werden. Die Folgen sind eine deutliche Verkürzung des Produktentwicklungszyklusses und eine Reduzierung der Entwicklungskosten. Die wachsende Rolle der industriellen Anwender wird auch deutlich an der zunehmenden Installation von Hochleistungsrechnern für numerische und verstärkt auch nichtnumerische Anwendungen etwa bei Daten-bankanwendungen, Data Mining oder Bildverarbeitung bei Banken, Versicherungen und anderen Großunternehmen.

Industrielle Nutzer nehmen derzeit nur einen geringen Rechenzeitanteil auf den nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnern in Anspruch. Die Gründe sind in erster Linie in ihren Sicherheitsanforderungen an die nicht firmeninterne Nutzung von Höchstleistungsrechnern und in einem divergierenden Betriebsprofil, welches u. a. eine sofortige Verfügbarkeit, eine langfristige Planung der Aufträge und garantierte Reaktionszeiten verlangt, zu sehen, welches mit den Anforderungen der akademischen Nutzer kollidiert. Auch weisen die bestehenden Informationsverarbeitungskapazitäten durch öffentlich finanzierte Forschung eine hohe Auslastung auf. Zudem ist die Industrie noch ungenügend an leistungsfähige Netze angebunden.

Indirekten Zugang zu den Kapazitäten der nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechner gewinnen industrielle Nutzer durch vielfältige Formen der Kooperation mit Forschungsinstituten. Hier findet ein wichtiger Wissenstransfer statt. Der Wissenschaftsrat begrüßt die Zusammenarbeit von Hochschulen mit industriellen Forschungs- und Entwicklungsabteilungen auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens und hebt den Anwendungsbezug, die Möglichkeiten des Technologietransfers und die zu erzielenden Synergieeffekte hervor. Er unterstützt nachdrücklich eine Forcierung von Kooperationsbildung und –ausbau, mittelfristig auch im Bereich der klein- und mittelständischen Unternehmen.

Die öffentlich finanzierte Forschung muß im Zugang erste Priorität genießen. Darüber hinaus sollten für industrielle Nutzer von den Rechenzentren verstärkt Rechenzeitkontingente gegen eine angemessene Entgeltregelung bereitgestellt werden. Die

vom BMBF getragene Förderung von Verbundvorhaben von Wissenschaft und Wirtschaft mit dem Ziel, die praktische Anwendbarkeit des parallelen Höchstleistungsrechnens für industrielle Probleme aufzuzeigen, hat zur Lösung vieler Forschungs- und Entwicklungsaufgaben aus konkreten Anwendungsproblemen geführt und sollte verstärkt weitergeführt werden.

## **B.II. Hardware- und Softwareentwicklung**

Die Hardwareentwicklung folgt nach einer Dominanz von Multi-Vektorrechnern und einem anschließenden Übergang zu massiv parallelen Rechnern derzeit einer Tendenz zu Cluster-Architekturen mit fetten SMP-Knoten.<sup>6</sup> Diese Systeme bieten den Vorzug einer großen Flexibilität im Einsatz. Zudem nähern sich die verschiedenen Architekturen einander an, und auch die Sprünge zwischen ihnen vermindern sich. Die Technologieentwicklung ist allerdings offen und nur für einen Zeitraum von zwei bis drei Jahren prognostizierbar.

Das Haupteinsatzgebiet für Höchstleistungsrechner ist das wissenschaftlich-technische Rechnen, seine wichtigste Methodik die numerische Simulation. Damit werden vorwiegend Probleme behandelt, deren mathematische Modelle sich durch Systeme von (partiellen) Differentialgleichungen beschreiben lassen und die im allgemeinen nur über Diskretisierungsansätze näherungsweise mit numerischen Verfahren gelöst werden können. In diese Kategorie fällt ein Großteil herausfordernder technischer und naturwissenschaftlicher Aufgabenstellungen beispielsweise aus den Bereichen Klimamodellierung, mittel- und langfristige Wettervorhersage, turbulente und viskose Strömungen, neue Materialien, virtuelle Produktentwicklungen (z. B. im Automobil- und Flugzeugbau), Umweltschutzmodelle, Kerngebiete der Physik, Chemie, Biologie und Medizin.

Die nichtnumerischen Anwendungsgebiete sind ebenfalls weit gefächert, aber wenig klassifiziert und vergleichsweise gering für Höchstleistungsrechner erschlossen. Potentielle nichtnumerische Anwendungsbereiche sind Bildverarbeitung und Visualisie-

---

<sup>6</sup> MP-SMP: Message Passing Symmetric Multi-Processor; vgl. zur Entwicklung der Rechnerarchitekturen auch die Abb. 6 im Anhang E.

rung, Datenbankanwendungen, finanztechnische und ökonomische Modelle, Decision Support, Mustererkennung, Data/Text Mining (Entdeckung von Wissenszusammenhängen in großen Datenbeständen) sowie Analyse- und Prognoseverfahren, die auf Cluster Verfahren (Support Vector Machines), graphentheoretischen Methoden (Bayes-Netze), adaptiven Verfahren (neuronale Netze, genetische Algorithmen) und diskreten Optimierungsverfahren basieren. Für die Behandlung dieser Anwendungen kommen unterschiedlichste, nicht auf numerischen Verfahren beruhende Methoden, Algorithmen und Werkzeuge zum Einsatz. Die Anforderungen an die Rechner differieren wesentlich stärker als im Einsatzbereich der numerischen Simulation, bei der die Leistungsfähigkeit der Floating-Point-Einheit eines Rechners entscheidend ist.

Nach Auffassung des Wissenschaftsrates kommt der Softwareentwicklung, die eine Leistungssteigerung der Höchstleistungsrechner verfolgt, eine besondere Bedeutung zu. In einigen Bereichen wurden durch die Entwicklung und Optimierung von Algorithmen in den letzten 20 Jahren Fortschritte erzielt, die in ähnlicher Größenordnung liegen wie die durch Rechnerentwicklung erreichten Leistungssteigerungen (siehe Abb. 2 und 3).

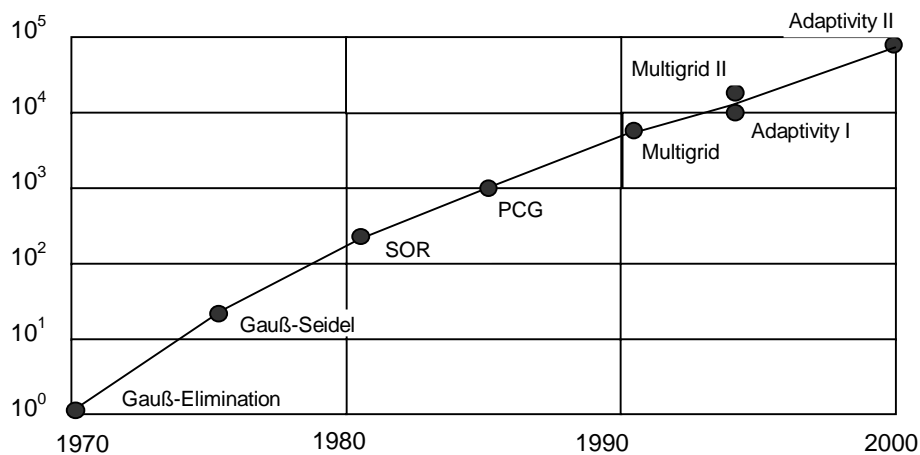


Abb. 2: Leistungssteigerung von Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen durch neue Algorithmen seit 1970.<sup>7</sup>

<sup>7</sup> Abb. 2 und 3: Die Abszisse bildet den Steigerungsfaktor normiert auf 1970 ab; F. Durst, K. Wechsler: Private Kommunikation LSTM Erlangen.



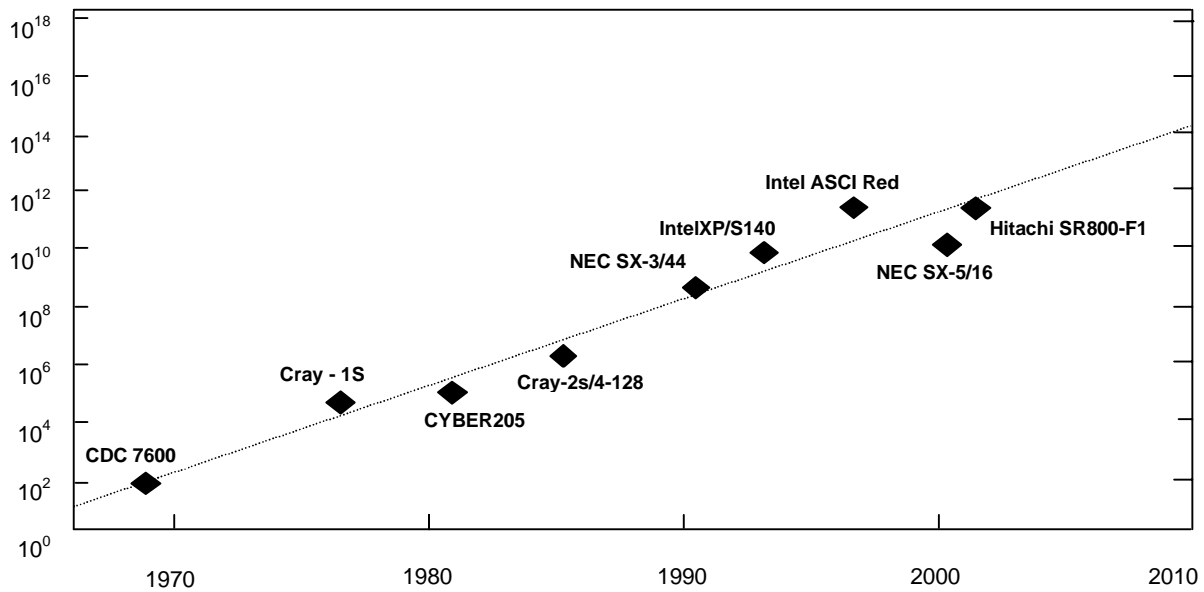


Abb. 3: Steigerung der Rechnerleistung seit 1970. Alle fünf Jahre erfolgte eine Verzehnfachung der Rechnerleistung.<sup>7</sup>

Deutsche Wissenschaftler sind bei der mathematischen Modellierung der Fragestellungen international anerkannt. Doch weist die wissenschaftliche Softwareentwicklung in Deutschland aufgrund mangelnder Anreize und fehlender wissenschaftlicher Anerkennung für sich profilierende Wissenschaftler nur eine niedrige Priorität auf. Der Wissenschaftsrat sieht hier ein wissenschaftsstrategisch bedeutendes Potential und empfiehlt nachdrücklich die Förderung der Entwicklung markt- und produktorientierter Software, einen verstärkten Technologietransfer beispielsweise durch Ausgründungen und eine stärkere internationale Zusammenarbeit.

In Deutschland muß das Höchstleistungsrechnen stärkeren Eingang in neue Forschungsbereiche finden. Bestehende Einsatzgebiete müssen weiterentwickelt und neue eröffnet werden. Der Wissenschaftsrat empfiehlt in diesem Zusammenhang, gezielte Programme zur Förderung innovativer Projekte im Anwendungs-, Algorithmen- und Softwarebereich sowie für die Nachwuchsförderung zu etablieren. Diese sollten mit der gleichen finanziellen Ausstattung versehen werden, wie sie für die Hardwarenachfolgebeschaffungen erforderlich sind und sämtlichen Anwendern aus dem akademischen und industriellen Umfeld zur Verfügung stehen.

Trotz guter Ansätze in der Algorithmenentwicklung kommt der Entwicklung und Vermarktung deutscher Simulationssoftware bislang kaum Bedeutung zu. Als zukunfts

trächtig schätzt der Wissenschaftsrat in diesem Zusammenhang den Bereich des Virtual Engineering ein, der sich mit der Entwicklung von Simulationsumgebungen befaßt, die interoperabel und interaktiv Designprozesse mit Simulation, Optimierung und Visualisierung zusammenführen. Er hält deshalb verstärkte Anstrengungen im Bereich der Software-Entwicklung für erforderlich und weist dabei ausdrücklich auf das Kommerzialisierungspotential entsprechender Anwendungssoftware, beispielsweise auf das wichtige Gebiet der Mensch-Maschine-Schnittstelle hin.

Zur Stimulierung neuer Anwendungen in Gebieten, die bislang nicht genügend partizipieren, sind Schwerpunktsetzungen vorzunehmen. Dies sollte durch Förderprogramme zum weiteren Ausbau des Höchstleistungsrechnens in bestimmten Anwendungsbereichen, beispielsweise für nichtnumerische Anwendungen, erfolgen.

### **B.III. Beschaffungsstrategien**

Ein nationales Versorgungskonzept muß den Aufbau und die Ausstattung nationaler Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Forschung und deren bundesweite Nutzung unabhängig von der Unterschiedlichkeit der institutionellen Trägerschaft auf Dauer sicherstellen. Insbesondere ist zu gewährleisten, daß für die deutsche Spitzenforschung keine Nachteile in der Verfügbarkeit modernster Höchstleistungsrechner im internationalen Vergleich entstehen.

Entscheidungen über Neu-, Ersatz- oder Erweiterungsinvestitionen sind vor dem Hintergrund einer auf den konkreten Fall bezogenen, im nationalen Rahmen abgestimmten umfassenden Bedarfsprüfung zu treffen. Die hieraus abgeleiteten Kapazitäts- und Leistungsvorgaben sollten auch für eine bedarfsgerechte Beurteilung der bestehenden Höchstleistungsrechner herangezogen werden.

Der Wissenschaftsrat bekräftigt seine 1995 geäußerte Empfehlung, den Zugang unabhängig von der institutionellen Zugehörigkeit des Nutzers zu öffnen. Dabei wird in der Regel für die Trägerorganisationen der Rechenzentren ein gesondertes Kontingent zu reservieren sein.

Der geographische Standort eines Höchstleistungsrechners ist bei leistungsfähiger Vernetzung von nachgeordneter Bedeutung. Gleichwohl ist der Wissenschaftsrat der

Auffassung, daß eine Anbindung an Hochschulen oder außeruniversitäre Forschungseinrichtungen angestrebt werden sollte.

Bei der Beschaffung sollten aus Gründen der Anwendungsvielfalt und der daraus resultierenden Leistungsanforderungen unterschiedliche Rechnerarchitekturen ebenso berücksichtigt werden wie die Bereitstellung dezentraler Entwicklungsplattformen. Von größter Bedeutung ist in diesem Zusammenhang eine Minimierung der Beschaffungs- und Inbetriebnahmezeiträume, um bei schnellen Investitionszyklen eine optimale Ausnutzung des bestehenden Zeitfensters zu gewährleisten.

Folgende Beschaffungsstrategien haben sich als sinnvoll erwiesen:

- Stufenpläne in zwei bis drei Phasen, verbunden mit einem konkreten Zeitziel, um die Leistungsfähigkeit des Gesamtsystems relativ zur technologischen Weiterentwicklung möglichst lange zu erhalten,
- vorzugsweise Neuanschaffung gegenüber einer Rechneraufrüstung (ältere Rechner können am gleichen Ort ggf. noch in der zweiten Leistungsebene eingesetzt werden) sowie
- Beschaffung zu Beginn einer neuen Hardwareproduktion.

Für die optimale Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit der erforderlichen Informationsverarbeitungskapazität ist die - abgesehen von den Supercomputern der ASCI- oder Earth-Simulator-Installationen - jeweils höchste Leistungsklasse der Höchstleistungsrechner für die deutsche Wissenschaft und Forschung bereitzustellen. Beschaffungen sind in der zeitlichen Abfolge so aufeinander abzustimmen, daß im Zeitabstand von relevanten Innovationszyklen der deutschen Wissenschaft jeweils mindestens ein System entsprechend dem neuesten technischen Stand zur Verfügung steht. Um diesem Abstimmungsbedarf Rechnung zu tragen, schlägt der Wissenschaftsrat die Einrichtung eines nationalen Koordinierungsausschusses vor (siehe Kapitel D.II.).

## C. Netzwerke

### C.I. Vernetzung

Im Interesse einer optimierten nationalen Versorgung mit Höchstleistungsrechenkapazität kommt einer Vernetzung der bestehenden Höchstleistungsrechner eine Schlüsselfunktion zu. Ein nationales Konzept, das die vorhandenen Ressourcen optimal ausnutzt, wird erst tragfähig, wenn die notwendigen Netzverbindungen in Deutschland geschaffen sind. Voraussetzung sind die Bereitstellung einer ausreichenden Übertragungskapazität, einer entsprechenden Datendurchlaßfähigkeit sowie die Gewährleistung der notwendigen Datensicherheit. Dies sollte ergänzt werden durch eine Harmonisierung der organisatorischen und administrativen Randbedingungen an den einzelnen Rechnerstandorten.<sup>8</sup> Die Planungen des Vereins zur Förderung eines deutschen Forschungsnetzes (DFN-Verein), mit Unterstützung des BMBF ab dem Jahr 2000 ein GigaBit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) stufenweise aufzubauen, sind ein entscheidender Schritt in diese Richtung und werden vom Wissenschaftsrat ausdrücklich begrüßt.<sup>9</sup> Damit werden die Voraussetzungen geschaffen, sowohl in der Fläche einen leistungsfähigen Zugang zu Informationsverarbeitungsressourcen zu gewährleisten, als auch Funktions- und Lastverbände zwischen Höchstleistungsrechenzentren einzurichten.

Der Wissenschaftsrat spricht sich nachdrücklich dafür aus, die Zugangsnetze zum GigaBit-Netz in den Regionen und Hochschulstandorten in ihren Übertragungskapazitäten und Übertragungs- und Vermittlungstechniken auszubauen. Besondere Anstrengungen sind in diesem Zusammenhang im Bereich der Inhouse-Vernetzung in den Hochschulen und Forschungseinrichtungen erforderlich.

Mit der zu erwartenden Übertragungskapazität wird der Spitzenbedarf aller Forschungsgruppen nicht zu befriedigen sein. Eine Reihe von Grand-Challenge-

---

<sup>8</sup> Hierzu wird in dem vom BMBF geförderten Projekt UNICORE eine Software-Infrastruktur entwickelt, die Anwendern einen intuitiven, konsistenten und sicheren Zugang zu verteilten Rechnerressourcen ermöglicht. Gewährleistet werden insbesondere eine architektur- und betriebssystemunabhängige Erstellung von Batch-Jobs, die Verteilung von Aufgaben auf mehrere Rechner und deren Synchronisation sowie ein sicherer Dateitransfer zwischen den UNICORE-Systemen.

<sup>9</sup> Wissenschaftsrat: Stellungnahme zum Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (DFN-Verein), in: Empfehlung zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995, S. 7-32.

Anwendungen sind aus diesem Grund nicht für einen geographischen Rechnerverbund geeignet. Der Wissenschaftsrat sieht in diesen Fällen eine enge Kopplung mit einem Höchstleistungsrechenzentrum als sinnvoll an.

## **C.II. Netzwerke der Köpfe**

Die Betreiberzentren von Höchstleistungsrechnern stellen neben dem Auf- und Ausbau der verfügbaren Netzinfrastruktur die tragenden Säulen eines nationalen Versorgungskonzeptes dar. Neben Planung, Installation und Betrieb der zentralen maschinellen Ressourcen und der damit verbundenen Weiterentwicklung der Versorgungskonzepte leisten sie umfangreiche Dienstleistungen für die Spitzenforschung. Angesichts ihrer begrenzten finanziellen und personellen Kapazitäten können sie nicht die spezifische Hardware, Software und Fachkenntnisse in der vollen Breite des Nutzerspektrums bereithalten. Dies wäre im Zuge ihrer Aufgabenentwicklung von der Bereitstellung einer informationstechnischen Grundversorgung zur Erfüllung spezifischer Anforderungen im Bereich des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens auch nicht sinnvoll. Gleichzeitig wird mit der in naher Zukunft zu erwartenden bundesweiten Verfügbarkeit schneller und leistungsfähiger Netze der Standortfaktor an Bedeutung verlieren. Aufgrund des Umfangs und der Komplexität der Anforderungen hält es der Wissenschaftsrat für erforderlich, die Arbeitsteilung und Kooperation zwischen den Betreiberzentren von Höchstleistungsrechnern zu stärken. Bestehende Leistungsangebote sollten auf die Lösung wissenschaftlicher Probleme ausgewählter Fachgebiete fokussiert werden. Denkbar erscheint in diesem Zusammenhang eine nationale Abstimmung der fachlichen Bereiche, für die jedes Höchstleistungsrechenzentrum aufgrund seiner Beratungskompetenz, der maschinellen Ausstattung oder seines traditionell gewachsenen fachlichen Spektrums besonders geeignet erscheint, ohne auf diesem Weg einer zu engen Orientierung an einzelnen Disziplinen Vorschub zu leisten. Vor dem skizzierten Hintergrund empfiehlt der Wissenschaftsrat den Betreiberzentren von Höchstleistungsrechnern, sich in Verbindung mit Kompetenzzentren und Nutzern zu „Centers of Excellence“ weiterzuentwickeln und fachliche Schwerpunkte in der Beratung zu setzen.

In vielen Anwendungsfeldern des Höchstleistungsrechnens ist die numerische und algorithmische Struktur entscheidend für den Erfolg eines Forschungsvorhabens auf der jeweils eingesetzten Rechnerarchitektur. So ist für die auf dem Gebiet der Computersimulation tätigen Arbeitsgruppen ein erhebliches Know-how in diesem Bereich unerlässlich. Für Anwendungen der höchsten Komplexitätsklasse ist es erforderlich, auf ein Netzwerk fachlicher Kompetenz von rechnernahen Beratungsleistungen methodisch-fachlicher und mathematisch-informatischer Art zurückgreifen zu können.

Deshalb empfiehlt der Wissenschaftsrat, wie schon in seiner Empfehlung aus dem Jahre 1995 angeregt, künftig in Deutschland großflächige Kompetenznetzwerke zu etablieren, bestehend aus wenigen Höchstleistungsrechenzentren, welche durch leistungsfähige Netze verbunden sind, und breitgestreuten Kompetenzzellen, die spezifische Kenntnisse in dediziert höchstleistungsrechenrelevanten Anwendungsfeldern besitzen und damit auch für die Ausbildung von besonderer Bedeutung sind. Nur so ist es möglich, überregional die verteilte fachliche Kompetenz der jeweils leistungsfähigsten Gruppen in Anspruch zu nehmen und zusammenzuführen.<sup>10</sup> Kompetenzzentren müssen dabei nicht zwangsläufig am Standort des Höchstleistungsrechners angesiedelt sein. Den Höchstleistungsrechenzentren fällt dabei die Aufgabe zu, als Kristallisationskerne für die Entwicklung leistungsfähiger Kompetenznetzwerke zu wirken.

Die Rechenzentren können nach Auffassung des Wissenschaftsrates dazu beitragen, die Rahmenbedingungen des Höchstleistungsrechnens in Deutschland weiter zu verbessern. Dazu zählt eine gegenseitige Überlassung von Rechenzeitkontingenten zu Testzwecken oder die Abstimmung der Sicherheitsvorschriften und -maßnahmen ebenso wie die Koordination der Möglichkeiten, Massendaten zu archivieren oder die Organisation gemeinsamer Ausbildungsangebote im Bereich des Höchstleistungsrechnens. Sie werden sich künftig in Kombination mit den Kompetenzzentren im Wettbewerb daran messen lassen müssen, inwieweit sie in der Lage sind, den Bedürfnissen des Nutzers durch Bereitstellung der notwendigen Rechenleistung und problemadäquater Service- und Beratungsleistungen zu entspre-

---

<sup>10</sup> Angesichts der zunehmenden Schwierigkeiten bei der Rekrutierung und Bindung herausragender Wissenschaftler insbesondere aus den Naturwissenschaften und der Informatik empfiehlt der Wissenschaftsrat, die Stellenausstattung im Rahmen der institutionellen Förderung der Einrichtungen zu überprüfen und wo notwendig anzupassen. Vgl. auch: Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Sicherung der Flexibilität von Forschungs- und Personalstrukturen in zehn außeruniversitären Einrichtungen in den neuen Ländern, Köln 1995, S. 213-220.

chen. In enger Abstimmung mit den Nutzern sollten Anforderungen an eine Weiterentwicklung spezieller Software sowie an die Soft- und Hardwarebeschaffungen auch gegenüber den Herstellerfirmen koordiniert werden. Nicht zuletzt sollte der Wissens- und Personalaustausch auf europäischer Ebene intensiviert werden.

Handlungsbedarf sieht der Wissenschaftsrat in einer verstärkten Einbindung von kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMU) in die Serviceangebote der Kompetenznetzwerke. Bei KMUen kommt das Höchstleistungsrechnen aufgrund des hohen Personal- und Investitionsaufwandes bisher kaum zum Einsatz. Der Wissenschaftsrat empfiehlt, das Wissen und die Erfahrungen in den Kompetenzzentren auch kleinen und mittelständischen Unternehmen zugänglich zu machen, um eine Umsetzung in praxiswirksame Anwendungen im Sinne eines Technologietransfers zwischen Wissenschaft und Wirtschaft zu erreichen und die Unternehmen bei der Einführung des Höchstleistungsrechnens aktiv zu unterstützen.

Die an einigen Höchstleistungsrechenzentren bereits praktizierte Bildung von projektgebundenen Beratungsgruppen, bestehend aus Wissenschaftlern aus den Anwendungsdisziplinen, Mathematikern und Informatikern, hat sich bewährt und sollte verstärkt werden. Die in die Beratungsgruppen eingebundenen Fachberater benötigen Freiräume für eigene wissenschaftliche Arbeit an Höchstleistungsrechnern, um eine fachliche und informationstechnische Aktualität der Fachberatung zu gewährleisten. Die Nachfrage nach Beratungsleistungen seitens der Nutzer fällt je nach Anwendungsfeld und Vorerfahrung sehr unterschiedlich aus. Zwar ist es daher in zunehmendem Maße unerlässlich, daß der einzelne Wissenschaftler auch Experte in der Nutzung von Höchstleistungsrechnern ist. Gleichwohl sollte dieser in Einzelfragen beispielsweise zur Visualisierung seiner Forschungsergebnisse oder in Fragen der Parallelisierung von Algorithmen auf Kompetenzzentren zurückgreifen können.

### **C.III. Aus- und Weiterbildung**

Die Arbeit mit Höchstleistungsrechnern ist bislang nur sehr unzureichend in Studiengänge integriert. Die Universitäten und stärker noch die Fachhochschulen weisen in diesem Bereich ein deutliches Ausbildungsdefizit auf. Erste Ansätze bieten Studiengänge wie Technomathematik oder Computational Science and Engineering; diese

Angebote sind aber bei weitem nicht ausreichend, um den Mangel an von der Industrie in zunehmendem Maße nachgefragten Fachkräften zu beheben. Deshalb bedarf es nach Auffassung des Wissenschaftsrates einer gezielten Initiative zu den Ausbildungsaspekten des Wissenschaftlichen Rechnens in Universitäten und Fachhochschulen mit dem Ziel, spezialisierte Studiengänge mit interdisziplinärer Ausrichtung zu schaffen. Sie sollten über einen ausreichenden Praxisbezug verfügen und die Datenverarbeitung und Numerik mit den Anwendungsstudiengängen verbinden. Besondere Relevanz wird künftig die numerische Simulation von Prozessen in den verschiedensten Fachrichtungen erlangen. Ferner sollten spezielle Aspekte der Rechnerarchitektur und Programmiermethoden in ausreichendem Maße berücksichtigt werden. Der Wissenschaftsrat sieht darüber hinaus Spielräume, um Methoden der Nutzung von Höchstleistungsrechnern stärker in die bestehenden Studiengänge der Natur- und Ingenieurwissenschaften sowie der Informatik und Mathematik zu integrieren. Hier gilt es, eine ausreichende Interdisziplinarität sowie einen ausreichenden anwendungsorientierten Zugang zu vermitteln.

In der Forschung hat der Einsatz des Höchstleistungsrechnens selbst in den ingenieur- und naturwissenschaftlichen Disziplinen noch nicht in alle Bereiche hinreichend Einzug gehalten. Der Wissenschaftsrat sieht in einer gezielten Nachwuchsförderung einen geeigneten Weg, um künftig verstärkt die Arbeit mit Höchstleistungsrechnern zu fördern und hält in diesem Zusammenhang ein Förderprogramm in Form einer Initiative zum Wissenschaftlichen Rechnen für ausgewählte Forschergruppen für erforderlich.

Lebenslanges Lernen ist besonders in solchen Bereichen wichtig, die einen schnellen Wissenszuwachs erfahren. Allein durch die Entwicklungen in der numerischen Mathematik und der Bereitstellung von Computerleistung sind kontinuierliche Weiterbildungsprogramme notwendig. Hier ist mit einem stark wachsenden Bedarf zu rechnen. Gleichzeitig hält der Wissenschaftsrat die Qualität, Quantität und Verfügbarkeit der IT-Kapazität auf Hoch- und auf Höchstleistungsrechnern für die Ausbildung gegenwärtig für nicht ausreichend. Die studentische Ausbildung darf sich nicht auf die Nutzung von PC und Workstation beschränken, auch die Ausbildung im Einsatz von Hoch- und Höchstleistungsrechnern ist nach dem Grundstudium erforderlich. Sie könnte beispielsweise mit Hilfe von Entwicklungsplattformen in den Kompetenzzentren gefördert werden. Der Wissenschaftsrat empfiehlt deshalb, geeignete Kurzlehr-



gänge mit einer fach- oder architekturenspezifischen Orientierung weiter zu entwickeln, um dem sich abzeichnenden Ausbildungsbedarf Rechnung zu tragen.

Die Kooperation der Rechenzentren, Universitäten und Fachhochschulen sollte besonders für den Bereich der Ausbildung verstärkt und ausgeweitet werden. Hier sollte eine Verzahnung von architekturbezogenen Kursangeboten der Höchstleistungsrechenzentren mit methodisch-fachlichen Studienangeboten der Hochschulen erzielt werden. Ein großflächiger Verbund von Kompetenzzentren und -zellen in Deutschland wird dabei nach Auffassung des Wissenschaftsrates sowohl für die Studienangebote an Universitäten und Fachhochschulen wie auch für die Nachwuchsförderung und Weiterbildung von großer Bedeutung sein. Für diesen Bedarf sollten die Höchstleistungsrechenzentren ausreichende Rechenzeiten reservieren.

## **D. Versorgungskonzept**

### **D.I. Nachfrageorientierte Steuerung durch Einführung von Gebühren**

Höchstleistungsrechner werden derzeit im Bereich von Wissenschaft und Forschung in Deutschland in der Regel über Investitionsprogramme beschafft und überwiegend bzw. bis zur Hälfte vom Bundesministerium für Bildung und Forschung finanziert. Hierzu zählen Beschaffungen im Rahmen der Gemeinschaftsaufgabe von Bund und Ländern nach dem Hochschulbauförderungsgesetz (HBFVG) und Investitionsmaßnahmen für Großforschungseinrichtungen und für die Max-Planck-Gesellschaft. Die Bereitstellung von Höchstleistungsrechnern in den Hochschulen und Forschungseinrichtungen erfolgt bisher überwiegend angebotsorientiert; ihre Nutzung ist in der Regel kostenlos. Die Kontingentierung der Leistungsabnahme erfolgt durch wissenschaftliche Lenkungsausschüsse der einzelnen Höchstleistungsrechenzentren.

Um eine optimierte Nutzung und eine abgestimmte institutionenübergreifende Beschaffung sicherzustellen, hält der Wissenschaftsrat die Einführung von Steuerungsmechanismen für erforderlich. Er hat sich in diesem Zusammenhang mit der Frage auseinandergesetzt, inwieweit eine nachfrageorientierte Steuerung im Wettbewerb im Gegensatz zur derzeitigen angebotsorientierten Bereitstellung von

Höchstleistungsrechnern als Bestandteil eines nationalen Versorgungskonzepts zu deren bedarfsgerechterer Nutzung beitragen kann. Hierzu hat er verschiedene Modelle einer nachfrageorientierten Steuerung erörtert und sich dabei besonders eindringlich mit einer auf Gebührenfinanzierung aufbauenden Steuerung auseinandergesetzt.

Grundsätzlich begrüßt der Wissenschaftsrat Bestrebungen, zu einer nachfrageorientierten Bereitstellung von Höchstleistungsrechenkapazität zu gelangen und somit den tatsächlichen Bedarf an Rechenzeit zum Ausgangspunkt der Investitionssteuerung zu machen. Aus wissenschaftlichen, wissenschaftspolitischen und ökonomischen Gründen ist er jedoch der Auffassung, daß durch die Einführung von Gebühren zum jetzigen Zeitpunkt eine gleichwertige oder bessere Versorgung mit Höchstleistungsrechenkapazität nicht zu erwarten ist.

Bei einer rein nachfrageorientierten Steuerung, welche eine Finanzierung der Investitions- und Betriebskosten durch Nutzergebühren vorsieht, ist zu vermuten, daß die Betreiberzentren ihr Angebot an Rechenkapazität im mittleren Leistungsbereich zu Lasten der Spitzenleistung verstärken könnten, weil hier eine stärkere Nachfrage in der Bearbeitung von risikoärmeren Produktions- und Routineabläufen und daraus resultierend verbesserte Refinanzierungsmöglichkeiten erwartet werden. Für die Spitzenforschung notwendige technische Innovationen, beispielsweise der Umstieg von Vektor- auf Parallelrechner, würden ebenso verzögert oder unterbunden wie Forschungsimpulse und Anreize im Bereich der Softwareentwicklung oder die Erschließung, Integration und Bereitstellung weiterer oder neuartiger Leistungsangebote, welche bisher erfolgreich angebotsorientiert gefördert werden. Besonders gefährdet wäre nach Auffassung des Wissenschaftsrates der wissenschaftliche Austausch und Wissenstransfer, der Auf- und Ausbau von Kompetenzzentren einschließlich deren fachübergreifendem Beratungsangebot sowie die zum effizienten Betrieb von Höchstleistungsrechnern unerläßliche Kooperation zwischen Nutzern und Betreibern.

Die mit einem preisgestützten Steuerungssystem verbundenen Vorteile für eine effiziente Allokation von Angebot und Nachfrage lassen sich unter den gegebenen Randbedingungen des Einsatzes von Höchstleistungsrechnern nicht realisieren. Bei den angebotenen Leistungen der Rechenzentren handelt es sich zudem weitgehend um Systemunilate, welche in Bezug auf Qualität und PreisLeistungsverhältnis nicht

vergleichbar und daher nicht austauschbar sind. So stellen die verschiedenartigen Anwendungen der einzelnen Nutzer unterschiedliche Anforderungen an die Rechnerarchitektur (z.B. Vektorisierung, Parallelisierbarkeit, Interaktivität). Innerhalb eines Rechnertyps führen Herstellerspezifika, Programmiersprachen und/oder Konstruktions- und Verarbeitungsformen dazu, daß die Qualität der angebotenen Rechenleistung für den Anwender nicht gleichwertig ist. Ein entsprechender Preis Leistungsvergleich besitzt nur geringe Aussagekraft. Aus den genannten Gründen ist eine Bewertung durch einen Markt und eine Preisermittlung unter vergleichbaren Konditionen nur in sehr eingeschränktem Maße möglich.

Die derzeitige Situation auf dem Feld für Höchstleistungsrechenkapazität zeichnet sich durch eine geringe Zahl von Anbietern und hochspezialisierten Nachfragern aus. Damit Marktmechanismen wirken können, müssen sowohl Anbieter als auch Nachfrager in ausreichender Zahl vorhanden sein, so daß ein hinreichender Preisdruck entsteht, der für die Nachfrager einen Anreiz zur Änderung ihres Nachfrageverhaltens bewirkt und die Anbieter andererseits veranlaßt, ihr Angebot der veränderten Nachfrage anzupassen. Im Bereich des Höchstleistungsrechnens wird die notwendige Marktdynamik auch dadurch erschwert, daß die Nachfrager ihre Anwendungen auf die jeweils verfügbare Architektur hin entwickeln und somit zumindest mittelfristig Bindungen mit entsprechendem Änderungsaufwand eingehen. Es ist zu erwarten, daß die Wahl eines Anbieters, d. h. eines Höchstleistungsrechenzentrums, aus Sicht des Nutzers eher von der konkret vorhandenen Rechnerarchitektur, der technischen und personellen Unterstützung und einer problemadäquaten Service- und Beratungsleistung geprägt sein wird als vom jeweiligen Preis pro Rechenstunde. In diesem Zusammenhang kommt der an anderer Stelle bereits ausgeführten Empfehlung einer Stärkung des Wettbewerbs zwischen den Höchstleistungsrechenzentren besondere Bedeutung zu.

Der Wissenschaftsrat weist zudem darauf hin, daß Höchstleistungsrechenzentren bisher überwiegend als öffentlich-rechtliche Einrichtungen des Wissenschaftsbetriebs, zumeist als unselbständige Einheiten größerer Wissenschaftsorganisationen, deren Aufgabe die Forschungsförderung ist, geführt werden. Rechenzentren, die sich durch Gebühren verschiedener Nutzer finanzieren, stellen dagegen wirtschaftliche Geschäftsbetriebe dar. Etwaige Verluste dürften von den bisherigen Trägerorganisa-

tionen nicht mit steuerbegünstigten Mitteln ausgeglichen werden.<sup>11</sup> Die daraus resultierenden erheblichen wirtschaftlichen Risiken liegen auf der Hand.

Aus den genannten Gründen gelangt der Wissenschaftsrat zu dem Fazit, daß durch eine nachfrageorientierte Steuerung der Nutzung von Höchstleistungsrechnern durch Einführung von Nutzungsgebühren die Ziele eines nationalen Versorgungskonzeptes, für Wissenschaft und Forschung eine exzellente Forschungsinfrastruktur bereitzustellen und deren effektive Nutzung zu gewährleisten, nicht erreicht werden können. Die Folgen wären ein qualitativer und quantitativer Verlust von Höchstleistungsrechenkapazität und daraus resultierend eine Schwächung von Wissenschaft und Forschung im internationalen wissenschaftlichen und industriellen Wettbewerb.

Der Wissenschaftsrat ist zudem der Auffassung, daß eine Marktsteuerung nur eines ausgewählten Teils der Forschungsinfrastruktur, dessen Investitionsaufwand in dem eingangs genannten Vierebenenmodell nur gering im Vergleich zum Gesamtinvestitionsvolumens der Rechnerversorgungsstruktur ausfällt (siehe Abschnitt A), in einer ansonsten weitgehend regulierten Forschungslandschaft wenig plausibel erscheint. Insofern bleibt offen, ob die genannten Mechanismen grundsätzlich geeignet sind. Diese Frage könnte nur nach grundlegender Prüfung der gesamten Infrastruktur beantwortet werden.

Der Wissenschaftsrat hält es unabhängig davon für sinnvoll, innerhalb einer einheitlichen Nutzergemeinschaft, wie es beispielsweise in der Max-Planck-Gesellschaft praktiziert wird, die Nachfrage von Nutzern nach Rechenzeit, Beratungsleistungen und anderen Leistungen eines Rechenzentrums durch eine Kostenrechnung zu

---

<sup>11</sup> Bei der Einführung eines Gebührenmodells sind haushalts- und steuerrechtliche Rahmenbedingungen, welche sich aus dem Zuwendungsrecht, dem Umsatzsteuerrecht sowie der Abgabenordnung ergeben, zu beachten: Höchstleistungsrechenzentren, welche zur eigenen Refinanzierung der Investitions- und Betriebsmittel mit der Absicht, Einnahmen zu erzielen, ihren Nutzern und Nutzergruppen Gebühren in Rechnung stellen, gelten als wirtschaftlicher Geschäftsbetrieb im Sinne der Abgabenordnung. Die gemeinnützigen Trägerorganisationen verlieren insoweit die Gemeinnützigkeit, so daß Steuervergünstigungen nach den Einzelsteuergesetzen für diesen Bereich nicht mehr greifen. Durch die Teilnahme der Höchstleistungsrechenzentren am wirtschaftlichen Verkehr und im Wettbewerb zu anderen Höchstleistungsrechenzentren treten diese als Unternehmer auf und führen steuerbare Umsätze im Sinne des Umsatzsteuergesetzes auf, welche umsatzsteuerpflichtig sind. Eine Steuerbefreiung für staatliche Hochschulen aus Forschungstätigkeiten greift nicht, da die Durchführung von – wenn auch sehr komplexen – Rechenoperationen auf Höchstleistungsrechnern nicht selbst Forschungsgegenstand ist, sondern unter Anwendung gesicherter Erkenntnisse erfolgt. Mit den in den Höchstleistungsrechenzentren entstehenden Gewinnen wären die Trägerorganisationen bzw. der gewerbliche Betrieb des Höchstleistungsrechenzentrums unbeschränkt körperschaftssteuer- und gewerbesteuerpflichtig. Eine Behandlung der rechtlich selbständigen Höchstleistungsrechenzentren als steuerbegünstigte Forschungsförderungseinrichtungen ist nur in besonders gelagerten Fällen möglich.

steuern, um Indikatoren für den tatsächlichen Bedarf an Rechenzeit zu erhalten und Kostenbewußtsein zu fördern.<sup>12</sup> Um für den Nutzer eine Übersicht und Kostentransparenz zu gewährleisten, ist es erforderlich, die in den Rechenzentren bereitstehenden Mechanismen zur Erfassung der Vollkosten der Leistungen verstärkt zu nutzen. Auch wenn die Nutzer ihre Nachfrageentscheidung nicht in erster Linie auf der Basis von Zahlungsströmen treffen, kann deren Dokumentation das Kostenbewußtsein für den wirtschaftlichen Umgang mit öffentlich finanzierten Ressourcen fördern und wichtige Kriterien für den Vergleich der Höchstleistungsrechenzentren liefern. In der Frage der Übertragbarkeit auf Universitäten ist der Wissenschaftsrat jedoch der Auffassung, daß aufgrund eines fehlenden Marktes die Gefahr von Fehlanreizen, kombiniert mit unabsehbaren wirtschaftlichen Risiken nicht von der Hand zu weisen ist. Dieser Weg erscheint deshalb nicht geeignet, eine bedarfsgerechte Nutzung von Höchstleistungsrechnern zu gewährleisten.

## **D.II. Nationaler Koordinierungsausschuß und wissenschaftliche Beiräte**

### **II.1. Beurteilung von Investitionsentscheidungen durch einen nationalen Koordinierungsausschuß**

Die Dynamik im Bereich des Höchstleistungsrechnens, die ihren Ausdruck u.a. im exponentiellen Leistungsanstieg der Spitzenrechner und der Algorithmenentwicklung findet, sowie die Bedeutung des Höchstleistungsrechnens für die internationale Wettbewerbsfähigkeit der nationalen Spitzenforschung machen eine strategische Abstimmung der nationalen Beschaffungen erforderlich. Dies wird besonders deutlich, wenn man die Finanzierungsverpflichtungen des Bundes betrachtet, denen eine abgestimmte, Bestand und prognostizierten Bedarf berücksichtigende Investitionsplanung nur innerhalb eines jeweils gegebenen institutionellen Rahmens (Universitäten, Helmholtz-Gemeinschaft, Max-Planck-Gesellschaft) entspricht. Die Koordination der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Beschaffungen und eine damit verbundene, bundesweit abgestimmte Optimierung des Leistungsangebots findet bislang ihre Grenze an der institutionellen Zugehörigkeit des jeweiligen Zuwendungsempfängers.

---

<sup>12</sup> Neben der Steuerung durch Gebühren ist auch in diesem Fall eine Überprüfung des Zugangs nach wissenschaftlicher Qualität unerlässlich und wird auch in der MPG durchgeführt.

Erforderlich ist hingegen nach Auffassung des Wissenschaftsrates eine institutionenübergreifende, bundesweit von einem geeigneten Ausschuss koordinierte Investitionsstrategie für Aufbau und Betrieb nationaler Höchstleistungsrechner.

Insbesondere bei Beschaffungen mit wechselnden Standorten kommt der Kenntnis des gesamten Bundesbedarfs in Bezug auf das derzeitige und in Zukunft zu erwartende Anforderungsprofil sowie einem Überblick über das Gesamtspektrum der existierenden Ausstattungen und der Kenntnis grundlegender fachlicher Entwicklungstendenzen eine besondere Bedeutung zu, um bei einer Architekturempfehlung die aktuellen Defizite zu berücksichtigen und für Bund, Länder, Fördereinrichtungen und Wissenschaft bei ihren Investitionsentscheidungen eine breite Entscheidungsbasis vorzubereiten.

Ziel einer Abstimmung und Koordination der Rahmenbedingungen bei den Beschaffungen auf Ebene der Rechenzentren ist es, der schnellen Entwicklung auf unterschiedlichen Architekturen und Plattformen folgen zu können. Eine Vorgabe, unabhängig vom Bedarf bzw. Anforderungskatalog verschiedene Architekturen berücksichtigen zu müssen, erscheint jedoch nicht sinnvoll. Hingegen können Risikoabwägung und Innovationsförderung im Einzelfall Gesichtspunkte sein, bestimmte Architekturen zu bevorzugen. Vor dem Hintergrund der schnellen Innovationszyklen läuft jede Beschaffung unter ganz spezifischen Gegebenheiten ab, die sich in wenigen Jahren entscheidend wandeln.

Aus den genannten Gründen erneuert der Wissenschaftsrat seine Empfehlung aus dem Jahre 1995 zur bundesweiten Koordination von Höchstleistungsrechenzentren und empfiehlt die Einrichtung eines nationalen Koordinierungsausschusses zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern. Dieser sollte in seine Überlegungen auch die Beschaffungen von Projektrechnern der obersten Leistungsklasse der verschiedenen Forschungseinrichtungen sowie die für ausgewählte Fachgebiete wie beispielsweise der Klima- und Umweltforschung bzw. Plasmaforschung zur Verfügung stehenden dedizierten Höchstleistungsrechner insoweit mit einbeziehen, als durch deren Bereitstellungen Auswirkungen auf die nationale Versorgungsstruktur zu erwarten sind.

Im einzelnen sollte der Koordinierungsausschuß die folgenden Aufgaben übernehmen können:

A Investitionsentscheidungen

- Prospektive Bedarfsermittlung im Rahmen des verfügbaren Finanzvolumens im Vorfeld beabsichtigter Installationen. Bund und Länder müssen an der Bedarfsermittlung beteiligt werden, um den Zusammenhang zwischen Bedarf und Finanzierung herzustellen.
- Strategische Beratung zu Investitionsentscheidungen unabhängig von ihrer jeweiligen institutionellen Zugehörigkeit, um eine Abstimmung im investiven Bereich der Höchstleistungsrechenzentren zu erreichen. Die Empfehlungen richten sich an den Bund und die Länder sowie an die Trägerorganisationen der Höchstleistungsrechenzentren.

B Orientierungshilfen

- Erarbeitung von Stellungnahmen und Durchführung von Anhörungen zu zentralen Fragen im Zusammenhang mit der Nutzung und dem Betrieb von Höchstleistungsrechnern (beispielsweise Metacomputing).
- Unterstützung des Ausschusses für den Hochschulausbau des Wissenschaftsrates bei Investitionsvorhaben mit Finanzierung über das Hochschulbauförderungsgesetz.

C Weiterentwicklung von Steuerungsmodellen

- Entwicklung und Erprobung bedarfsorientierter Selbstregelungsmechanismen.
- Prüfung verschiedenartiger Kostenrechnungsmodelle für geeignete Nutzergemeinschaften.

Der Koordinierungsausschuß sollte in seine Überlegungen um ein Versorgungskonzept grundsätzlich alle deutschen Höchstleistungsrechenzentren unabhängig von der institutionellen Trägerschaft einbeziehen. Betrachtet werden sollte kein festgeschriebener Kreis. Ausgangspunkt sollten zunächst diejenigen Rechenzentren sein, die bei den Erörterungen zur Erstellung der vorliegenden Empfehlung vertreten waren. Darüber hinaus sollte jedem Rechenzentrum, das einen Höchstleistungsrecher betreiben möchte, die Möglichkeit eingeräumt werden, beim Koordinierungsausschuß die Aufnahme in diesen Kreis zu beantragen. Umgekehrt sollte es dem Koor-

dinierungsausschuß freistehen, Rechenzentren in diesen Kreis neu aufzunehmen, bzw. nicht länger zu betrachten. Die Kriterien, wonach dies geschieht, sind vom Koordinierungsausschuß im einzelnen zu erarbeiten. Hierbei sollte neben der Leistungsstärke der Rechner<sup>13</sup> auch die Beratungskompetenz der Zentren betrachtet werden.

Dem nationalen Koordinierungsausschuß sollten Repräsentanten universitärer und außeruniversitärer Forschungseinrichtungen, der Industrie sowie von Bund und Ländern angehören. Bei der Auswahl der Mitglieder sollte darauf geachtet werden, daß sowohl die wichtigsten Anwendungsgebiete des Höchstleistungsrechnens als auch die Methodenwissenschaften vertreten sind. Der Koordinierungsausschuß wird vom Wissenschaftsrat eingesetzt.

Die Mitgliedschaft im Ausschuß sollte auf eine Zeit von drei Jahren bei einmaliger direkter Wiederberufung beschränkt bleiben. Der Ausschuß sollte sich vorbehalten, Vertretern weiterer Gremien einen ständigen Gaststatus einzuräumen und in Einzelfragen zusätzliche Sachverständige in die Beratungen einzubeziehen sowie einen Vertreter in die Sitzungen der wissenschaftlichen Beiräte der aktuellen Höchstleistungsrechenzentren entsenden zu können. Mit Blick auf seine Funktion sollten als ständige Gäste Vertreter der Höchstleistungsrechenzentren bzw. ihrer wissenschaftlichen Beiräte, der Kommission der Rechenanlagen der DFG sowie der Fachkommissionen der Trägerorganisationen dem Ausschuß angehören. Der Wissenschaftsrat empfiehlt, nach einer Erprobungsphase von fünf Jahren über Aufgaben und Funktion des nationalen Koordinierungsausschusses erneut zu beraten.

Der Wissenschaftsrat sieht im Koordinierungsausschuß eine wichtige Schnittstelle zur Förderung des Informationsflusses. Er spricht Empfehlungen an Bund, Länder und Trägerorganisationen von Höchstleistungsrechtern aus, die in Analogie der Empfehlungen des Wissenschaftsrates zur Rahmenplanung Grundlage entsprechender Investitionsentscheidungen sind.

Ein bundesweites Koordinierungsgremium würde nach Auffassung des Wissenschaftsrates das bereits vorhandene Beratungsangebot sinnvoll ergänzen. Bislang existiert in Deutschland kein institutionenübergreifendes Gremium, welches den Be-

---

<sup>13</sup> Eine Möglichkeit der Bestimmung der derzeit leistungsstärksten deutschen Höchstleistungsrechner bietet die Orientierung an der TOP 500 Liste (siehe Anhang E, Tabelle 1a). Die Übersicht versteht sich aufgrund der rapiden Entwicklungsdynamik im Bereich des Höchstleistungsrechnens als eine Momentaufnahme.



reich des Höchstleistungsrechnens zu seiner zentralen Aufgabe macht. Das BMBF befaßt sich bisher mit strategischen Fragen der künftigen Entwicklung des wissenschaftlichen Rechnens, mit der Definition von Schwerpunktthemen und deren Förderung, nicht hingegen mit einer bundesweit abgestimmten Beschaffungsstrategie für Höchstleistungsrechner. Die Kommission für Rechenanlagen der DFG prüft das Kostenleistungsverhältnis und die apparatetechnische Plausibilität von Investitionen, soweit sie im Rahmen des HBFG finanziert werden, greift also ausdrücklich nicht über den institutionellen Rahmen, der durch die Hochschulen gesetzt wird, hinaus und konzentriert sich auf Fragen der technischen Optimierung.

Der Koordinierungsausschuß muß wissenschaftlich neutral und forschungspolitisch unabhängig sein. Vor diesem Hintergrund bietet es sich an, den Koordinierungsausschuß beim Wissenschaftsrat anzusiedeln. Für eine solche Lösung spricht die für den Wissenschaftsrat konstitutive Verbindung von Wissenschaft und Politik, eine institutionenübergreifende Perspektive sowie Erfahrungen mit Standortempfehlungen, Bedarfserhebungen und strategischen Nutzungskonzepten.

## **II.2. Antragsbeurteilung durch wissenschaftliche Beiräte**

Die wissenschaftlichen Beiräte der Rechenzentren praktizieren eine bewährte Auswahl- und Vergabepaxis von Rechenzeit mit großer Bedeutung bei der Antragsbeurteilung. Sie sind zur Bewertung der wissenschaftlichen Substanz von Anträgen und für eine sachgerechte Verteilung der Ressourcen an Rechenzeit unverzichtbar.

Durch ihre Aufgaben auf operativer Ebene unterscheiden sie sich deutlich von dem in Abschnitt D.II.1 dargestellten nationalen Koordinierungsausschuß.

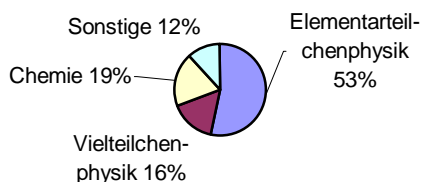
Nach Auffassung des Wissenschaftsrates sollten die wissenschaftlichen Beiräte Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse nur für die Aufgaben sicherstellen, welche durch die an den Hochschulen und Forschungseinrichtungen verfügbaren Rechner niedrigerer Leistungsklassen nicht oder mit nicht vertretbarem Aufwand bearbeitet werden können. In der Begutachtung von Einzelanträgen ist eine stärkere fachdisziplinäre Durchdringung (wenigstens Teilnahme von einem Fachgutachter) erforderlich sowie eine verbesserte Transparenz der personellen und fachlichen Beset-

zung. Die Mitgliedschaft im Beirat sollte auf eine Zeit von drei Jahren bei einmaliger direkter Wiederberufung beschränkt bleiben.

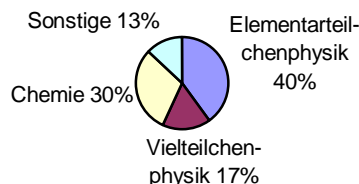
## E. Anhang

**Abb. 4: Nachgefragte Rechenleistung einzelner Fachgebiete am NIC Jülich**

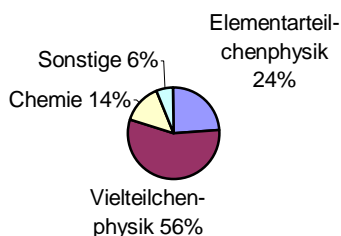
**CPU-h 1998 (insg. 3.2 Mio h)  
auf der CRAY T3E-600**



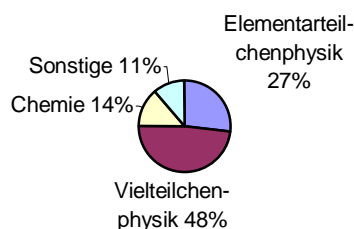
**CPU-h 1. Halbjahr 1999 (insg. 1.4 Mio h)  
auf der CRAY T3E-600**



**CPU-h 1998 (insg. 1.0 Mio h) auf der  
CRAY T3E-900**

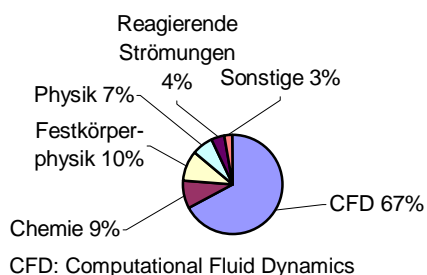


**CPU-h 1. Halbjahr 1999 (insg. 1.0 Mio h)  
auf der CRAY T3E-900/1200**

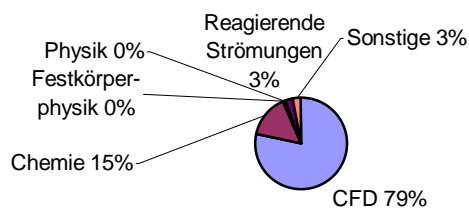


**Abb. 5: Nachgefragte Rechenleistung einzelner Fachgebiete am HLRS Stuttgart**

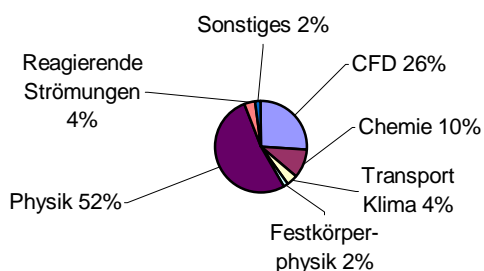
**Fächerverteilung 1998 auf der NEC**



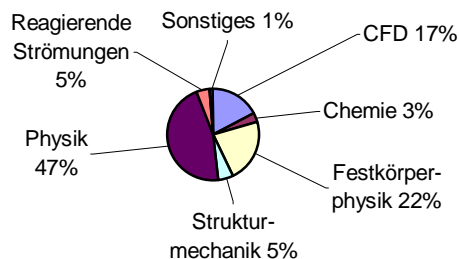
**Fächerverteilung 1. Halbjahr 1999 auf der  
NEC**



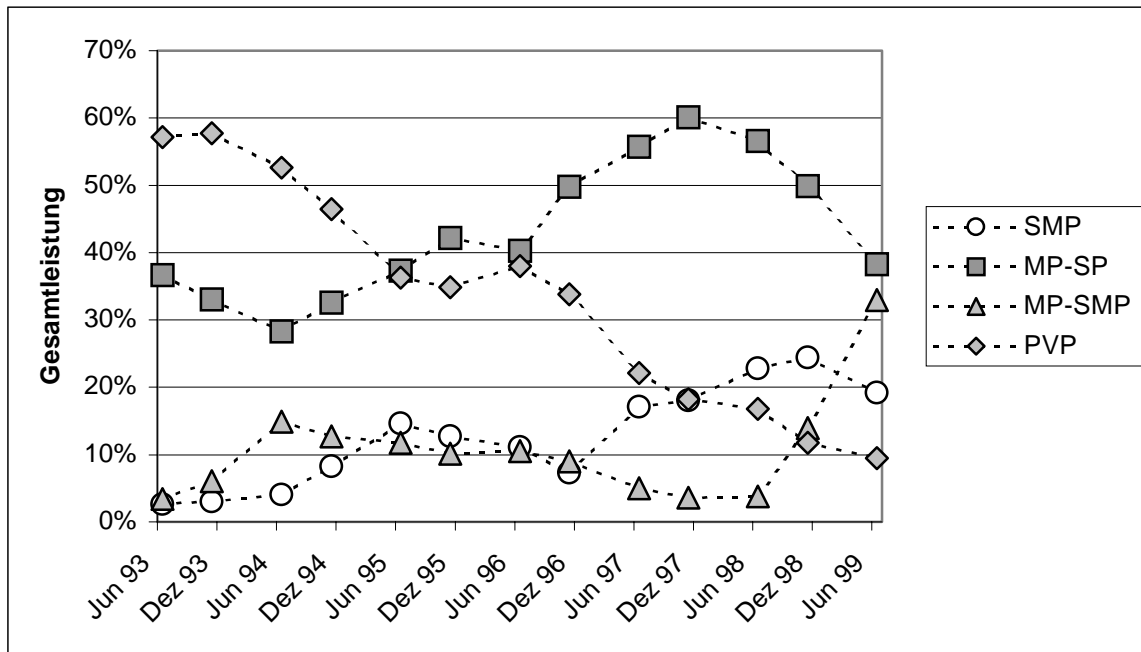
**Fächerverteilung 1998 auf der T3E**



**Fächerverteilung 1. Halbjahr 1999 auf der  
T3E**



**Abb. 6: Zeitliche Entwicklung der Höchstleistungsrechner nach Architekturmerkmalen und Rechnergesamtleistung in der TOP-500-Liste**



Für Höchstleistungsrechner werden zur Zeit vier grundlegend verschiedene Architekturen eingesetzt: 1. Rechner mit gemeinsamem Speicher (Symmetric Multi-Processor, **SMP**, Sun, Compaq, HP und SGI, unterer und mittlerer Leistungsbereich der TOP 500-Liste), 2. Nachrichtengekoppelte skalare Rechner (Message Passing Scalar Processor, **MP-SP**, Cray T3E und IBM SP 2 Power2, P2SC, etwa 60% der gesamten TOP-500-Leistung), 3. Cluster von SMP-Rechnern (Message Passing Symmetric Multi-Processor, **MP-SMP**, Intel Paragon, IBM SP PowerPC, Power3, SGI Origin Cluster, HP-XClass Cluster, SUN HPC Cluster, Compaq DS/ES Cluster und Hitachi SR-8000, drängen MP-SP-Systeme zurück) und 4. Parallele Vektorrechner (Parallel Vector Processor, **PVP**, Cray Y-MP, T90 und PVP-Architekturen von Fujitsu, Hitachi und NEC, Absinken auf ca. 10 % der gesamten TOP-500-Leistung).

(Quelle: J. Dongarra, H.W. Meuer, E. Strohmaier: TOP 500 Supercomputer Sites November 1999, in: Technical Report, RUM-Bericht 59/99)

**Tabelle 1a: TOP500-Teilliste der in Deutschland in Wissenschaft und Forschung eingesetzten Installationen – Stand November 99**

RANK	INSTITUTE, SITE	YEAR	MANUFACTURER	COMPUTER	PROCS	RMAX	RPEAK
9	Deutscher Wetterdienst	1999	Cray/SGI	T3E1200	812	671	0.974
20	Forschungszentrum Juelich (FZJ)	1999	Cray/SGI	T3E1200	540	448	0.648
25	Max-Planck-Gesellschaft MPI/IPP	1997	Cray/SGI	T3E	812	355	0.487
27	HWW/Universitaet Stuttgart	1996	Cray/SGI	T3E900	540	341	0.486
39	ZIB/Konrad Zuse-Zentrum f. Informationstechnik	1999	Cray/SGI	T3E900	404	254	0.364
42	Forschungszentrum Juelich (FZJ)	1996	Cray/SGI	T3E	540	235	0.324
93	Leibniz Rechenzentrum	1998	Fujitsu	VPP700/52	52	106	0.114
129	HWW/Universitaet Stuttgart	1999	NEC	SX-4/40H2	40	77	0.08
179	AWI (Alfred Wegener Institut)	1998	Cray/SGI	T3E	134	58	0.08
289	Universitaet/Forschungszentrum Karlsruhe	1997	IBM	SP2/256	256	44	0.068
290	Max-Planck-Gesellschaft MPI/Fritz-Haber-Institut	1999	Hewlett-Packard	N4000 360 MHz/HyperPlex	80	44	0.115
349	Forschungszentrum Karlsruhe	1999	IBM	SP Power3 222 MHz	64	42	0.057
351	Universitaet Paderborn - PC2	1999	Fujitsu-Siemens	hpcLine Cluster	192	41	0.086
454	University Bonn - Dep. of Applied Mathematics	1999	Self-made	Parnass2 Cluster	128	34	0.058
494	Universitaet/Forschungszentrum Karlsruhe	1997	Fujitsu	VPP300/16	16	34	0.035

**Tabelle 1b: TOP500-Teilliste der in Deutschland industriell eingesetzten Installationen - Stand November 99**

RANK	INSTSITE	YEAR	MANUFACTURER	COMPUTER	PROCS	RMAX	RPEAK
69	DeTeCSM	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	420	129	0.279
95	DeTeCSM	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	342	105	0.227
96	IBM	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	340	105	0.226
115	Thyssen	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	268	83	0.178
123	BASF	1998	IBM	SP PC604e 332 MHz	256	79	0.17
124	Bayer AG	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	256	79	0.17
125	Bayer AG	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	256	79	0.17
130	Deutsche Telekom AG	1999	IBM	SP Power3 200 MHz	128	77	0.102
133	RWE	1998	IBM	SP PC604e 332 MHz	244	76	0.162
134	Deutsche Telekom AG	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	242	75	0.161
151	Krupp Hoesch Info.	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	202	63	0.134
152	Deutsche Telekom AG	1999	IBM	SP Power3 200 MHz	104	63	0.083
173	Deutsche Bank	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	188	59	0.125
194	Bayer AG	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	176	55	0.117
197	BMW AG	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	172	54	0.114
223	DeTeCSM	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	164	51	0.109
231	Artmedia Berlin	1999	Hewlett-Packard	V2500/HyperPlex	64	51	0.113
235	Deutsche Telekom AG	1999	Hewlett-Packard	V2500/HyperPlex	64	51	0.113
236	Deutsche Telekom AG	1999	Hewlett-Packard	V2500/HyperPlex	64	51	0.113

RANK	INSTSITE	YEAR	MANUFACTURER	COMPUTER	PROCS	RMAX	RPEAK
237	Deutsche Telekom AG	1999	Hewlett-Packard	V2500/HyperPlex	64	51	0.113
253	BASF	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	162	51	0.108
258	Government	1999	Hewlett-Packard	N4000 440 MHz/ HyperPlex	80	50	0.141
278	VW (Volkswagen AG)	1999	Hewlett-Packard	N4000 440 MHz/ HyperPlex	64	46	0.113
282	Merck	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	144	45	0.096
305	Commerzbank	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	64	44	0.051
306	Commerzbank	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	64	44	0.051
308	Deutsche Telekom AG	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	64	44	0.051
309	Deutsche Telekom AG	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	64	44	0.051
338	VW (Volkswagen AG)	1999	NEC	SX-4/22H5	22	43	0.044
353	BASF	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	130	41	0.086
354	CompuNet	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	130	41	0.086
380	Lufthansa	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	126	40	0.084
390	Government	1999	Hewlett-Packard	V2500/HyperPlex	48	40	0.084
407	Commerzbank	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	56	39	0.045
408	Mannesmann Mobilfunk	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	56	39	0.045
409	Mannesmann Mobilfunk	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	56	39	0.045
416	Audi AG	1999	Fujitsu	VPP5000/4	4	38	0.038
429	Deutsche Telekom AG	1999	Sun	HPC 10000 400 MHz	54	37	0.043
432	Audi AG	1998	Fujitsu	VPP300/16E	16	36	0.038
453	Lidl & Schwartz	1999	IBM	SP PC604e 332 MHz	108	34	0.072
458	Bank	1999	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
460	Commerzbank	1998	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
461	Commerzbank	1998	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
462	Commerzbank	1998	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
463	Commerzbank	1998	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
464	Commerzbank	1998	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
465	Commerzbank	1999	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
466	Commerzbank	1999	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043
467	Deutsche Morgan Grenfell	1999	Sun	HPC 10000 333 MHz	64	34	0.043

R<sub>max</sub>: maximal achieved performance (Angaben in Gigaflop/s)

R<sub>peak</sub>: theoretical peak performance (Angaben in Teraflop/s)

Procs: Anzahl der installierten Prozessoren

(Quelle: <http://www.top500.org>)

## F. Glossar

<b>Algorithmus</b>	Verfahren zur schrittweisen Umformung von Zeichenreihen
<b>Architektur</b>	Aufbau von Rechnern im Sinne einer Beschreibung seiner Komponenten und ihrer Beziehungen
<b>Benchmark</b>	Programmpaket, das zur Bewertung von Rechnern und Algorithmen auf Rechenanlagen ausgeführt wird (Benchmarksuite = mehrere derartiger Programmpakete)
<b>Cluster</b>	(Lose) gekoppelter Verbund von (Arbeitsplatz-)Rechnern, Pool
<b>Computational Science and Engineering</b>	Studiengänge „Rechnergestütztes Ingenieurwesen“ und „Rechnergestützte Wissenschaften“
<b>CPU</b>	Central Processing Unit (Zentraleinheit eines Rechners)
<b>Data/Text Mining</b>	Entdeckung von Wissenszusammenhängen in großen Datenbeständen
<b>Entwicklungsplattform</b>	Dezentral installierter, an einen zentralen Höchstleistungsrechner angekoppelter Rechner des gleichen Architekturtyps
<b>Flop/s</b>	Floatingpoint Operations Per Second: Gleitkommaoperationen pro Sekunde; Maß für Rechenleistung von Rechnern
<b>G(iga)</b>	Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet $10^9$ Einheiten
<b>Grand-Challenge-Vorhaben</b>	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).
<b>Informationsverarbeitungskapazität</b>	Grundsätzlich zählt zur rechnergestützte Informationsverarbeitung (engl.: information processing) jeder Vorgang, der sich auf die Erfassung, Speicherung, Übertragung oder Transformation von Information bezieht. Ein wesentliches Kennzeichen der computergestützten Verarbeitung ist die Automatisierung. Eine Information trägt den Gehalt einer Nachricht, die aus Codes zusammengesetzt ist.
<b>I/O</b>	Abkürzung für Input/Output, steht für "Ein- und Ausgabeadresse", spezieller Speicherbereich für den Datenaustausch zwischen dem Betriebssystem und einem Gerät
<b>Massiv-paralleler Rechner</b>	Parallelrechner mit einer großen Zahl (mindestens einigen hundert) von Prozessorelementen (z.B. RISC-Prozessoren) mit eigenem (lokalem) Hauptspeicher
<b>Modellierung</b>	Beschreibung realer Prozesse mit mathematischen Mitteln

<b>Moderatparalleler Vektorrechner</b>	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 – überlappend bearbeitet.
<b>Numerik</b>	Teilgebiet der Mathematik, dessen Aufgabe die zahlenmäßige Behandlung mathematischer Probleme ist
<b>Parallelisierung</b>	Erstellung eines parallelen oder verteilten Programms zur Lösung einer Aufgabe auf einem Parallelrechner oder Rechnernetz
<b>Peakperformance</b>	Spitzenleistung
<b>Prozessor</b>	Arithmetisch-logische Funktionseinheit innerhalb eines Rechners
<b>RISC</b>	Reduced Instruction Set Computer (Prozessorarchitektur mit einem gegenüber den CISC-Prozessoren reduzierten Befehlssatz)
<b>Simulation</b>	Durchführung von Experimenten an einem Modell, welche oftmals vollständig am Computer realisiert werden können
<b>Skalierbarkeit</b>	Eigenschaft, daß sich die Leistung eines parallelen Rechnersystems durch Steigerung der Zahl der Prozessoren an steigende Anforderungen einer Anwendung anpaßt
<b>T(era)</b>	Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet $10^{12}$ Einheiten
<b>TOP 500-Liste</b>	Liste der leistungsstärksten, weltweit installierten Rechner ( <a href="http://www.top500.org/">http://www.top500.org/</a> )
<b>Vektorisierung</b>	Optimierung des Codes eines Programms für die effiziente Ausführung auf einem Vektorrechner
<b>Visualisierung</b>	Aufbereitung und graphische Darstellung von in einer Simulation berechneter Daten zu deren Veranschaulichung, Interpretation und besseren Verständnis
<b>Workstation</b>	Universalrechner auf der Basis eines oder mehrerer Höchstleistungsmikroprozessoren