



Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Bayern auf Neubau eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum und zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners im Zusammenhang mit der Errichtung eines Gebäudes für das

Leibniz-Rechenzentrum zum 32. Rahmenplan

**Stellungnahme
zur Anmeldung des Landes Bayern auf
Neubau eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum**

und

**zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners im Zusammenhang
mit der Errichtung eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum**

zum 32. Rahmenplan

	<u>Seite</u>
Vorbemerkung.....	2
A. Ausgangslage	11
A.I. Einsatzbereiche des Höchstleistungsrechners	11
A.II. Der geplante Höchstleistungsrechner.....	12
A.III. Die beantragende Institution.....	15
A.IV. Die Nutzer.....	17
A.V. Projektmanagement, Standort, Kosten und Zeitplanung	19
V.1. Projektmanagement.....	19
V.2. Standort.....	19
V.3. Kosten	21
V.4. Zeitplanung.....	22
B. Stellungnahme.....	23
C. Zusammenfassung	26

Vorbemerkung

Veranlassung

In seiner im Mai 2000 verabschiedeten Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern¹ hat der Wissenschaftsrat eine unzureichende Koordination der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Beschaffungen von Höchstleistungsrechnern festgestellt. Eine bundesweit abgestimmte Optimierung des Leistungsangebots findet bislang nicht in ausreichendem Maße statt. Der Wissenschaftsrat hat sich aus diesem Grund dafür ausgesprochen, eine institutionenübergreifende, bundesweit von einem geeigneten Ausschuss koordinierte Investitionsstrategie für Aufbau und Betrieb nationaler Höchstleistungsrechner auch außerhalb der Hochschulen zu entwickeln. Deren Erarbeitung ist dem neu eingerichteten „Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ des Wissenschaftsrates übertragen worden.

Aufgaben und Zusammensetzung des Nationalen Koordinierungsausschusses für die Nutzung und Beschaffung von Höchstleistungsrechnern

Der Koordinierungsausschuss ist für die strategische Beratung des Bundes und der Ländern in der Frage der Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechnern zuständig. Alle Anträge auf Einrichtung von Höchstleistungsrechnern und deren infrastrukturelle Peripherie, die für universitäre und außeruniversitäre Einrichtungen gemeinsam aus Fördermitteln des Bundes und der Länder zukünftig beschafft werden sollen, werden durch den Koordinierungsausschuss begutachtet. Die Finanzierungsmöglichkeit für die einzelne geplante Investitionsmaßnahme ist von einem positiven Votum des Koordinierungsausschusses abhängig.

Der Koordinierungsausschuss hat sich darüber verständigt, seine strategischen Planungen auf die leistungsstärksten deutschen Höchstleistungsrechner zu konzentrieren, gleichzeitig aber die leistungsmäßig darunter liegenden Hochleistungsrechner

¹ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, S. 229-261, Köln 2001.

mit einzubeziehen. Über Investitionsvorhaben in der Höhe von 7,5 bis 15 Mio. € sollte dem Ausschuss berichtet werden, Investitionen mit einem Volumen von 15 Mio. € und mehr werden vom Ausschuss wissenschaftspolitisch begutachtet.

Im einzelnen übernimmt der Koordinierungsausschuss die folgenden Aufgaben:

A Empfehlungen zu Investitionsentscheidungen

- Prospektive Bedarfsermittlung im Rahmen des verfügbaren Finanzvolumens im Vorfeld beabsichtigter Installationen.
- 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.
- 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, beispielsweise industrielle Nutzer.

Der Koordinierungsausschuss ist vom Wissenschaftsrat eingesetzt worden. Die institutionenübergreifende Perspektive spiegelt sich auch in der Zusammensetzung des Ausschusses wider: In ihm sind universitäre und außeruniversitäre Nutzer und Betreiber von Höchstleistungsrechnern gleichermaßen vertreten.

Zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern²

Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, dass mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern in den zurückliegenden Jahren in zahlreichen Hochschulen und Forschungseinrichtungen wissenschaftliche Durchbrüche erzielt wurden, die auf Rechnern niedrigerer

² Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, a.a.O.

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, bundesweiter Zugang unabhängig von den geographischen Voraussetzungen und den institutionellen Zugehörigkeiten der Nutzer muss auf Dauer gewährleistet sein.

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

Der exponentielle Leistungsanstieg der Spitzenrechner wird sich in den nächsten fünf bis zehn Jahren nicht wesentlich verlangsamen. Um die wissenschaftliche Wettbewerbsfähigkeit auch in Zukunft zu sichern, sind deshalb investive kontinuierliche 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 Leistungsebene. Der Aufbau von Höchstleistungsrechnern sollte in der zeitlichen Abfolge so vorgenommen werden, dass jeweils mindestens ein System der höchsten Leistungsklasse zur Verfügung steht. Nach den Erfahrungen der letzten Jahrzehnte ist davon auszugehen, dass Rechner-systeme der höchsten Leistungsklasse in zeitlichen Abständen von zwei bis drei Jahren nicht mehr dem jeweiligen Stand der technischen Entwicklung entsprechen. Dementsprechend ist der Zeitpunkt für Erneuerungsinvestitionen - unter Beachtung einer prospektiven Bedarfsermittlung und im Rahmen des verfügbaren Finanzvolumens - zu bemessen.

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.

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.

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.

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.

Nach Auffassung des Wissenschaftsrates sollten die wissenschaftlichen Beiräte der Höchstleistungsrechenzentren Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse nur für die Aufgaben vergeben, 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 erforderlich sowie eine

verbesserte Transparenz der personellen und fachlichen Besetzung. Eine Abstimmung der Begutachtungsverfahren aller wissenschaftlichen Beiräte der Höchstleistungsrechenzentren sollte angestrebt werden.

Vorgehensweise der Begutachtung von Beschaffungen von Höchstleistungsrechnern

Der Koordinierungsausschuss hat die aktuellen Höchstleistungsrechenzentren in Garching, Jülich, München und Stuttgart sowie die Hochleistungsrechenzentren in Berlin, Hannover und Karlsruhe zum Ausgangspunkt seiner Betrachtungen gewählt. Es handelt sich hierbei freilich nicht um einen festgeschriebenen Kreis von Rechenzentren. Lange Vorlaufzeiten in der Investitionsplanung machen jedoch einen weiten Planungshorizont erforderlich. Der Koordinierungsausschuss hat aus diesem Grund mit Schreiben vom 9. August 2001 an alle Länder die Bitte gerichtet, bestehende universitäre wie außeruniversitäre Initiativen sichtbar zu machen und weitere anzuregen, um eine umfassende Kenntnis der Planungen der Länder als Voraussetzung für eine strategische, bundesweite Investitionsplanung zu erhalten. Hierzu liegen jeweils eindeutige schriftliche Aussagen der Mehrzahl der Länder vor. Danach beabsichtigen nur das Land Baden-Württemberg im Jahr 2004 und das Land Bayern im Jahr 2005 die konkrete Beschaffung jeweils eines Höchstleistungsrechners. An außeruniversitären Beschaffungsinitiativen ist der Ausbau der am Rechenzentrum Garching (2002) und am Forschungszentrum Jülich (2002 und 2004) installierten Rechenkapazitäten vorgesehen beziehungsweise in Teilen bereits unmittelbar vollzogen.

Nach Aussagen der Länder stellen sich deren Investitionsplanungen für Höchst- und Hochleistungsrechner wie folgt dar (Stand 19. März 2002, die Angaben zum DKRZ und RZG sind durch eine Abfrage des Koordinierungsausschusses ergänzt):

Bundesland	Technischer Stand 2001	Geplante Aufstellung eines Rechners mit aufgeführter Spitzenrechenleistung (peak performance)			
		2002	2003	2004	2005
BW	1 TFlop/s RUS ~ 0,3 TFlop/s RZK			15 TFlop/s RUS / RZK	
BY	2 TFlop/s LRZ 0,5 TFlop/s RZG	5 TFlop/s RZG			40 TFlop/s LRZ
BE	am NDtRV beteiligt 0,4 TFlop/s ZIB	1,5 TFlop/s ZIB am NDtRV beteiligt			frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
BB	Bedarf wird extern gedeckt		10 TFlop/s DESY Zeuthen		
HB	am NDtRV beteiligt				frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
HH	am NDtRV beteiligt < 0,1 TFlop/s DKRZ	0,5 TFlop/s DKRZ (1. Ausbaustufe) 1,0 TFlop/s DKRZ (2. Ausbaustufe)	1,5 TFlop/s DKRZ (3. Ausbaustufe)		frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
MV	am NDtRV beteiligt				frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
NI	am NDtRV beteiligt ~ 0,1 TFlop/s RRZN	1,5 TFlop/s RRZN			frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
NRW	0,92 TFlop/s FZJ/NIC	5,8 TFlop/s FZJ/NIC (1. Ausbaustufe)		10 TFlop/s FZJ/NIC (2. Ausbaustufe)	
RP	Bedarf wird extern gedeckt				
SH	am NDtRV beteiligt				frühestens 2005: Option auf Ausbau der Rechner des NDtRV: 3 – 5 TFlop/s
TÜ	Bedarf wird extern gedeckt				

Hinweis: Antworten der Länder Hessen, Saarland, Sachsen und Sachsen-Anhalt liegen nicht vor.

Legende

DESY Zeuthen: Deutsche Elektronen-Synchrotron, Teilinstitut Zeuthen

DKRZ: Deutsches Klimarechenzentrum GmbH

FZJ: Forschungszentrum Jülich GmbH

LRZ: Leibniz-Rechenzentrum München

NDtRV: Norddeutscher Verbund für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen

NIC: John von Neumann-Institut für Computing, Forschungszentrum Jülich

RRZN: Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen Universität Hannover

RUS: Rechenzentrum Universität Stuttgart

RZG: Rechenzentrum Garching

RZK: Rechenzentrum der Universität Karlsruhe (TH)

ZIB: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Gemäß den bestehenden und geplanten Höchst- und Hochleistungsrechnern ergeben sich folgende Investitionskosten und Finanzierungsformen:

Bundesland	Installation	Investitionskosten [Mio. Euro]							Betrieb			
		Gesamt Rechner Gebäude	Raten						Finanzierung	Nutzungsdauer [Jahre]	Jährliche Betriebskosten [Mio. €]	Finanzierung
			2001	2002	2003	2004	2005	2006				
BW	15 TFlop/s RUS / RZK	<u>R</u> : 50,0 <u>G</u> : 12,8	<u>R+G</u> : 0,1	<u>R+G</u> : 1,4	<u>R+G</u> : 22,0	<u>R+G</u> : 24,2	<u>R+G</u> : 15,1		<u>R</u> : 40 Mio. HBFG, 10 Mio. Industrie <u>G</u> : HBFG	5	7,3	Land
BY	40 TFlop/s LRZ	<u>R</u> : 38,0 <u>G</u> : 33,8 1)	<u>G</u> : 0,1	<u>G</u> : 0,7	<u>G</u> : 3,5	<u>R</u> : 3,8 <u>G</u> : 10,0	<u>R</u> : 11,0 <u>G</u> : 10,0	<u>R</u> : 11,0 <u>G</u> : 9,5	HBFG	5	3,6 - 3,8	Land
	5 TFlop/s RZG	<u>R</u> : 12,5 <u>G</u> : noch offen							MPG/IPP	5	0,5	MPG/IPP
BE	1,5 TFlop/s ZIB	<u>R</u> : 10,2 <u>G</u> : keine		<u>R</u> : 2,1	<u>R</u> : 2,6	<u>R</u> : 3,0	<u>R</u> : 2,6		HBFG			Land
BB	10 TFlop/s DESY Zeuthen	<u>R + G</u> : 5,0							HGF	noch offen		HGF
HH	1,5 TFlop/s DKRZ (3. Ausbaustufe)	<u>R+G</u> : 33,5							Bund	5	3,75 - 5	Gesellschafter 2)
NI	1,5 TFlop/s RRZN	<u>R</u> : 10,2 <u>G</u> : 1,2		5,8	3,0	2,6			HBFG			Land
NRW	10 TFlop/s FZJ/NIC	<u>R</u> : 66,5 <u>G</u> : 10,0							HGF	5	5	HGF

Anmerkungen

- 1) Neubau eines Gebäudes für das LRZ, darunter auch Nutzungsanteil für den geplanten Höchstleistungsrechner.
- 2) Gesellschafter des DKRZ sind Max-Planck-Gesellschaft (55 %), Freie und Hansestadt Hamburg, vertreten durch die Universität (27 %), Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (9 %) und GKSS Forschungszentrum Geesthacht (9 %).

Der Koordinierungsausschuss hat desweiteren zur Vorbereitung seiner Begutachtungen einen „Fragenkatalog zur wissenschaftspolitischen Begutachtung der Beschaffung eines Höchstleistungsrechners“ erarbeitet, mit dem Aussagen

- zu den Einsatzbereichen des geplanten Höchstleistungsrechners,
- zum technischen Aspekten des geplanten Höchstleistungsrechners,
- zur antragstellenden Institutionen,
- zu den Nutzern und
- zum Projektmanagement sowie zur Standort-, Kosten- und Zeitplanung

erbeten werden.

Begutachtung der Anmeldung des Landes Bayern

Das Land Bayern hat zum 32. Rahmenplan den Neubau eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum und die Beschaffung eines Höchstleistungsrechners im Zusammenhang mit der Errichtung eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum angemeldet.

Die Vollversammlung des Wissenschaftsrates hat die Empfehlungsbefugnis für Großgeräte auf den Ausschuss für Hochschulausbau delegiert. Dieser hat zur weiteren Beratung den Koordinierungsausschuss um ein wissenschaftspolitisches Votum zu der Anmeldung des Landes Bayern gebeten. Das nachstehende Votum ist Ergebnis der Beratungen des Koordinierungsausschusses anlässlich seiner Sitzung am 19. März 2002.

*

An der Vorbereitung der Stellungnahme haben Sachverständige mitgewirkt, die nicht Mitglied des Wissenschaftsrates sind; ihnen ist der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet.

Der Wissenschaftsrat hat die Stellungnahme am 17. Mai 2002 in Mannheim verabschiedet.

A. Ausgangslage

A.I. Einsatzbereiche des Höchstleistungsrechners

Schwerpunkte der Anwendungen sieht das Land in den Bereichen Fluidodynamik, Festkörperphysik, Hochenergiephysik, Astrophysik, Chemie, Biophysik, Geowissenschaften, Biologie, Meteorologie und Umweltwissenschaften. Exemplarisch werden Anwendungen zur Untersuchung der Aerodynamik von Fahrzeugen und Flugzeugen, der Vernetzung von Simulationsverfahren in der industriellen wie auch in der wissenschaftlichen Praxis (Gekoppelte Probleme), in der Entwicklung neuer, innovativer Materialien (Hochtemperatur-Supraleiter, Formgedächtnismaterialien, Materialien sehr hoher Widerstandsfähigkeit gegen mechanische, chemische und andere Belastungen), Untersuchungen zu Metall-Isolatorübergängen, Magnetismus und Supraleitung aus der Festkörperphysik und die parameterfreie Lösung der Gleichungen der Quantenchromodynamik (QCD) genannt. Zum Verständnis komplexer technischer Systeme und für Grundlagenuntersuchungen bei Materialien ist die numerische Simulation eine wesentliche Voraussetzung, da sich wichtige Details der experimentellen Untersuchung entziehen und auch analytischen Hilfsmitteln der Mathematik nicht zugänglich sind. Weitere Anwendungen werden in den Biowissenschaften wie Molekularbiologie, Gentechnik, Bioinformatik, in der Biologie zur Nachbildung der neuronalen Verarbeitung, in den Geowissenschaften zur Entwicklung regionaler Wettervorhersage- und Klimamodelle und zur Berechnung seismischer Wellenfelder sowie in der Umweltforschung zur Verarbeitung von über Satelliten erfasste Datenmengen gesehen.

Durch die Einrichtung von Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland hat sich die Situation der Forschung in diesen Bereichen nach Aussage des Landes deutlich verbessert. Besonders hervorgehoben werden dadurch ermöglichte Forschungsarbeiten, die in anwendungsorientierten Bereichen wie der Hochtemperatur-Supraleitung und der Turbulenzforschung, aber auch in der Grundlagenforschung zuzurechnenden Gebieten wie der Astrophysik durchgeführt werden konnten.

Das Land weist weiter auf Transfermöglichkeiten zwischen Wissenschaft und Wirtschaft hin, da methodische und Softwareentwicklungen für Höchstleistungsrechner aufgrund der Entwicklungsdynamik in etwa 5-10 Jahre von Standardrechnern in Wissenschaft und Wirtschaft verwendet werden können.

A.II. Der geplante Höchstleistungsrechner

Das Land ist nach einer Marktanalyse der Ansicht, dass Höchstrechenleistung nur mittels gleichzeitiger Parallelisierung durch die Überlappung von Hauptspeicherzugriffen und Rechenoperationen, durch Soft- oder Hardware Prefetching oder auch durch (Pseudo-)Vektorisierung innerhalb eines Prozessors, durch fein granulare Parallelisierung auf der SMP-Ebene und durch grob granulare Parallelisierung unter Nutzung mehrerer SMP-Knoten erreicht werden kann. Derzeit sind für das Höchstleistungsrechnen weltweit Cluster aus leistungsstarken SMP-Knoten die mit Abstand verbreitetste und in der Regel kostengünstigste Plattform.

Der geplante Höchstleistungsrechner soll daher als ein homogenes Cluster aus leistungsstarken SMP-Knoten mit entsprechend leistungsfähigem Kommunikationsnetzwerk ausgelegt sein, so dass das System als Ganzes von einer einzigen Applikation genutzt werden könnte. Der geplante Höchstleistungsrechner soll am Leibniz-Rechenzentrum München (LRZ) installiert werden, welches bereits den aktuellen Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB) Hitachi SR8000-F1/168 betreibt. Der HLRB ist in der Endausbaustufe seit Anfang Januar 2002 ein Cluster aus 168 SMP-Knoten mit jeweils 8 Prozessoren und 12 GFlop/s Spitzenrechenleistung, die über einen dreidimensionalen Crossbar-Switch als Verbindungsnetzwerk bidirektional mit jeweils 1 GByte/s kommunizieren können. Jeder Knoten hat mindestens 8 GByte Hauptspeicher. Die Eckdaten der erwarteten Leistungscharakteristika sind in der nachfolgenden Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1: Leistungscharakteristika des geplanten Höchstleistungsrechners

	Installierter HLRB	Geplanter Höchstleistungsrechner
Spitzenrechenleistung	2 TFlop/s	40 TFlop/s
Hauptspeicher	2 TByte	20 TByte
Hintergrundspeicher	10 TByte	300 TByte
Bandbreite (Platten aggregiert)	3,3 GByte/s	100 GByte/s

Quelle: Angaben des Landes

Compiler, Software-Werkzeuge (Debugger, Profiler), Bibliotheken und Software-Pakete von Drittanbietern werden den Nutzern zur Verfügung gestellt. Um die Anpassung bestehender Programme (Portabilität) für die Benutzer zu erleichtern, ist ein Stufenkonzept der Beschaffung vorgesehen, bei dem zunächst die Hälfte der angestrebten Rechenkapazität aufgestellt und nach eineinhalb Jahren ein Ausbau auf die angestrebte Gesamtkapazität erfolgt. Für die Migrationsphase ist eine Schulung der Anwender in engem Kontakt mit dem Hersteller beabsichtigt, den Größtbenutzern sollen frühzeitig Testmöglichkeiten auf Vorabsystemen zur Verfügung gestellt werden. Trotz der zuvor beschriebenen Standards verbleiben nach Aussage des Landes zahlreiche vorzunehmende algorithmische Anpassungen insbesondere an die Hierarchie des Hauptspeichersystems. Hierbei gilt es, die immer größer werdenden Caches und die verschiedenen Cache-Levels optimal auszunutzen. Zudem sind programmtechnische Anpassungen mit Modifikationen an den Systemschnittstellen notwendig, deren Erleichterung durch Reduzierung auf wenige Schnittstellen und eine verbesserte Kompatibilität und Portabilität zum Zeitpunkt der Beschaffung erwartet wird.

Das Land sieht die technische Machbarkeit der geplanten Beschaffung als gegeben an, da Systeme vergleichbarer Bauart bereits existieren (ASCI White am Lawrence Livermore National Laboratory mit einer Spitzenrechenleistung von 12 TFlop/s) und potentielle Hersteller Cluster aus leistungsstarken SMP-Knoten als durchgehende Produktpolitik verfolgen.

In der nationalen Abstimmung der Beschaffung weist das Land auf die Zusammenarbeit der Betreiberzentren von Höchstleistungsrechnern im Rahmen des Verbundes der Supercomputer-Zentren (VESUZ) hin, die sich auf Kooperationen beim Betrieb der Systeme und der Betreuung der Benutzer sowie auf eine zeitliche Abstimmung von Beschaffungen erstreckt.

Nach Aussage des Landes erfolgte eine Beschaffungsabstimmung mit den übrigen Höchstleistungsrechenzentren im Rahmen der Arbeitsgruppe der Leiter der Höchstleistungsrechenzentren, des Koordinierungsausschuss der Vorsitzenden deren Lenkungsausschüsse wie auch im Arbeitskreis Supercomputing des Zentrums für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. (ZKI). Das Land spricht sich gegen eine Festlegung eines Zentrums auf ein Fachgebiet und eine bestimmte Rechnerarchitektur aus und sieht es als entscheidend an, die Eignung einer Architektur von den im Fachgebiet verwendeten Methoden abhängig zu machen. Das Land sieht es als entscheidend an, dass in Deutschland ein Spektrum unterschiedlicher Architekturen verfügbar bleibt.

Das LRZ ist am Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN des Deutschen Forschungsnetzes (DFN) angebunden. Der bestehende Höchstleistungsrechner ist mit einer Gigabit-Ethernet als Kommunikationsnetz-Interface ausgestattet. Das LRZ ist Teil des Resource-Sharing, in dem über ein Grid-Computing und eine Grid-Middleware zum vereinfachten Absetzen von Batch-Aufträgen (GLOBUS und UNICORE) auf verteilte Rechenressourcen zugegriffen werden kann. Das Land weist darauf hin, dass das LRZ an Vortests des sog. Meta-Computing beteiligt ist, bei dem mehrere Höchstleistungsrechner durch schnelle Netze und geeignete Software miteinander zu einem einzigen, virtuellen Rechner verbunden werden sollen. Alle Vernetzungen sind auch für den geplanten Höchstleistungsrechner vorgesehen.

Die Beratungsleistungen im Umfeld des Höchstleistungsrechners in Bayern (HLRB) werden vom LRZ, in Teilbereichen auch von Mitarbeitern des Kompetenznetzwerks für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR) erbracht und sollen für den geplanten Höchstleistungsrechner weiter ausgebaut werden. Die Betreuergruppe am LRZ berät die Benutzer rechnernah und

service-orientiert in allen Fragen, die das installierte Rechensystem, die auf ihm installierte Anwendersoftware, die Fehlerverfolgung und -korrektur, die Erstellung von Dokumentationen, die rechner-spezifischen Programmoptimierungen sowie die Kooperationsmöglichkeiten zwischen Benutzern unterschiedlicher Fachbereiche betreffen. Hauptziel von KONWIHR ist es, die Nutzer von Hoch- und Höchstleistungsrechnern in Bayern fachlich zu unterstützen und das Einsatzpotential der Höchstleistungsrechner durch Forschungs- und Entwicklungsvorhaben auszuweiten. Hierbei wird auf eine enge Zusammenarbeit zwischen Grundlagendisziplinen, Anwendern und beteiligten Rechenzentren sowie auf Transfer und Anwendung der Ergebnisse Wert gelegt. KONWIHR fördert mit einem Finanzvolumen von etwa 1,2 Mio. € pro Jahr derzeit 20 Projekte und etwa gleich viele Projektmitarbeiter. Eine Unterstützung von Projekten außerhalb Bayerns ist dabei nicht möglich.

Anträge auf Rechenzeit am derzeitig installierten Höchstleistungsrechner werden durch einen überregional zusammengesetzten Lenkungsausschuss begutachtet. Wesentliches Kriterium ist neben der wissenschaftlichen Bedeutung des Projekts die Notwendigkeit des Einsatzes eines Höchstleistungsrechners aufgrund der Leistungsanforderungen. Der Antragsteller ist verpflichtet, jährlich in einem Statusbericht den Fortgang des Projekts und die erzielten Ergebnisse darzustellen.

A.III. Die beantragende Institution

Der geplante Höchstleistungsrechner soll am Leibniz-Rechenzentrum München (LRZ) installiert werden. Compute-Server am LRZ sind

- ein 8-fach SMP-System IBM pSeries 690 HPC mit 32 GByte Hauptspeicher,
- ein Linux-Cluster als zentraler lokaler Compute-Server für die Münchener Universitäten. Dieses Cluster soll Ende 2002 erheblich ausgebaut werden.
- der bayerische Landeshochleistungsrechner Fujitsu Siemens VPP7000/52, ein Vektor-MPP-System für vektorisierbare Programme bis zu 16 Knoten,

- der Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB) Hitachi SR8000-F1/168. Der geplante Höchstleistungsrechner stellt die Ersetzung des bestehenden Höchstleistungsrechners (HLRB) nach dessen Betriebsende im Jahre 2005 dar.

Das LRZ hat seit 1988 als Bayerisches Landeshochleistungsrechenzentrum insgesamt sieben Rechnersysteme beschafft, teilweise ausgebaut und betrieben. Zu zwei Systemen wurden binär kompatible Entwicklungsrechner an sechs bayerischen Universitäten beschafft und betrieben.

Kooperationen mit anderen nationalen wie internationalen Rechenzentren bestehen für zahlreiche Projekte (z.B. UNICORE, Gigabit-Testbed, Peridot), in der gemeinsamen Darstellungen der erzielten Forschungsergebnisse und durch einen Erfahrungsaustausch im Rahmen verschiedener nationaler Arbeitskreise.

Das LRZ berät und betreut seit 1988 lokal und deutschlandweit die Nutzer ihrer Höchst- und Hochleistungsrechnern. Ein wesentlicher Bestandteil der Benutzerbetreuung ist die Unterstützung der Endbenutzer beim Einsatz dieser Systeme. Dazu zählen insbesondere die Vermittlung von Kenntnissen über die jeweiligen Programmiermethoden, die Bereitstellung bzw. die eigene Entwicklung geeigneter Tools zur Programmentwicklung und -überwachung sowie die Auswahl, Installation und Betreuung von Software für die wichtigsten Anwendungsgebiete. Die eigentliche Nutzerberatung geschieht durch ausführliche Dokumentation (meist in WWW-Form), durch Kurse und (virtuelle) Workshops, aber auch durch intensive Einzelberatung. Das LRZ leistet in Einzelfällen auch Optimierungen von Benutzercodes für die jeweilige Plattform.

Am LRZ sind rd. 10 wissenschaftliche Mitarbeiter für den bestehenden HLRB zuständig, weitere rd. 10 tragen zu kleineren Teilen oder indirekt zum Betrieb des bestehenden HLRB in Bereichen wie Archivierung, Sicherheit, Netzzugang, Benutzerverwaltung und Abrechnung, Organisation und Betrieb bei. Von den insgesamt rd. 20 Personen-Äquivalenten sind zwei Drittel als wissenschaftliche Mitarbeiter, die Übrigen als technisches Personal oder studentische Hilfskräfte beschäftigt. Im Rahmen

von KONWIHR stehen in Erlangen am Regionalen Rechenzentrum (RRZE) vier weitere Wissenschaftler für Beratungstätigkeiten zur Verfügung. Nach Aussage des Landes erlaubt die beim HLRB bestehende Betriebssituation, den geplanten Höchstleistungsrechner ohne neuen Personalbedarf oder eine Umwidmung von Personal zu betreiben. Einsatzmöglichkeiten für zusätzliches Personal werden in der Portabilität und Wiederverwendbarkeit von Programmen und deren Anpassung an ein Grid-Computing gesehen.

A.IV. Die Nutzer

Mit Verweis auf die Erfahrung bei vergangenen Installationen leistungsstarker Rechnersysteme erwartet das Land bei der geplanten Beschaffung einen steigenden Bedarf an Höchstrechenleistungskapazität, der mit der Steigerung der Rechenleistung Schritt hält und zu einer vollen Auslastung des Höchstleistungsrechners führen wird.

Ausgehend von der derzeitigen Nutzung des HLRB werden als Hauptanwendungsbereiche Fluidodynamik, Festkörperphysik, Hochenergiephysik, Astrophysik, Chemie, Biophysik, Geowissenschaften, Biologie, Meteorologie und Umweltwissenschaften erwarten. Wesentliche Nutzer der Rechenkapazitäten sind derzeit Universitäten (rd. 50 %), das Leibniz-Rechenzentrum (rd. 19%), Max-Planck-Institute (rd. 14%) und ein von universitären wie außeruniversitären Einrichtungen getragenes Großprojekt auf dem Gebiet der Quanten-Chromodynamik (rd. 8%). Für 2002 ist eine Benutzerumfrage in Bayern für die Nachfolge des Landeshochleistungsrechners geplant, aus deren Ergebnissen erste Anforderungen für den geplanten Höchstleistungsrechner gezogen werden sollen. Eine detailliertere Benutzerumfrage ist für Anfang 2004 avisiert.

Das Land betont die Offenheit des geplanten Höchstleistungsrechners für Wissenschaftler aller Disziplinen und sieht bei der Nutzung keine Beschränkung auf bestimmte Fachgebiete.

Die Nutzung des HLRB hat zu zahlreichen Ergebnissen und Veröffentlichungen geführt, die in verschiedenen Berichtsbänden seit 1997 veröffentlicht und in Statusseminaren präsentiert werden. Patentierungen sind keine bekannt.

Die Anforderungen der Benutzer werden durch regelmäßige Benutzerumfragen und -kontakte erfragt. Die Auswahl des bestehenden HLRB unterstand einer größtenteils aus Nutzern zusammengesetzten Auswahlkommission und wurde durch eine umfangreiche Benutzerbefragung begleitet. Im Herbst 2002 ist ein Treffen aller Nutzer des HLRB vorgesehen (User Meeting).

Gegenwärtig werden die am LRZ betriebenen Rechensysteme nicht direkt durch Nutzer aus der Wirtschaft in Anspruch genommen. Für eine mögliche Einbindung der anwendungsorientierten Forschung und Entwicklung der Industrie sieht das Land gemeinsame Projekte im Rahmen von Kooperationen mit Universitätseinrichtungen und dem KONWIHR als zielführender an. Als Voraussetzung für eine über vereinzelte Projekte hinausgehende industrielle Nutzung nennt das Land eine institutionell gleichberechtigte Einbeziehung der Industrie bereits in der Planungs- und Beschaffungsphase.

Seit Beginn des Wintersemesters 2001/02 wird an der Technischen Universität München der interdisziplinäre und fakultätsübergreifende Master-Studiengang Computational Science and Engineering (International Master's Program) angeboten. Neben der Vermittlung von Kenntnissen in den Basisfächern Angewandte Mathematik und Informatik werden die wichtigsten Anwendungsfelder des wissenschaftlichen Rechnens aus Ingenieur- und Naturwissenschaften behandelt. Das Master's Program wird unterstützt durch das LRZ, das KONWIHR sowie durch den Bayerischen Forschungsverbund für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen (FORTWIHR). An der Universität Erlangen-Nürnberg wird ein Bachelor- und ein internationales Master-Programm Computational Engineering angeboten. Die Möglichkeiten der Nutzung der Hochleistungsrechner am LRZ ist eine wichtige Komponente dieser Studiengänge. Am LRZ werden neben Einführungskursen in die (parallele) Programmierung Kurse und Workshops zu vertiefenden Themen (über parallele Algorithmen, Optimierung für RISC-Prozessoren, Nutzung von Performanceanalysetools

etc.) veranstaltet. Lehrgänge zur Benutzerschulung werden auch von KONWIHR angeboten. Die Weiterbildung der Mitarbeiter des LRZ erfolgt darüber hinaus durch die Teilnahme an externen Tagungen und Seminaren und ggf. an Lehrveranstaltungen und Kolloquien der Technischen Universität München.

A.V. Projektmanagement, Standort, Kosten und Zeitplanung

V.1. Projektmanagement

Der Beschaffungsvorgang beginnt mit einer Markterkundung bei den in Frage kommenden Anbietern durch das LRZ. Unter Einbeziehung des Lenkungsausschusses werden darauf aufbauend die Ausschreibungsunterlagen erstellt und auf deren Basis ein HBFEG-Antrag gestellt. Nach der Auswertung der eingegangenen Angebote auf die Ausschreibung entscheidet das LRZ im Einvernehmen mit dem Lenkungsausschuss und unter angemessener Beteiligung der Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften auf der Basis der Zuschlagskriterien über die Auswahl des Höchstleistungsrechners.

Das Budget des LRZ wird in Abstimmung mit der Bayerischen Akademie der Wissenschaften und dem zuständigen Ministerium verwaltet. Der Betrieb erfolgt durch das LRZ.

V.2. Standort

Der geplante Höchstleistungsrechner soll im Neubau des LRZ auf dem Forschungscampus Garching installiert werden. Das bisherige Gebäude des LRZ wurde Ende der 60er Jahre gebaut und entspricht nach Aussage des Landes von der Größe und der technischen Ausstattung her nicht mehr den modernen Erfordernissen. Die dazu erforderlichen Bauplanungen sind angelaufen. Nach Aussage des Landes sieht der Neubau insgesamt 5.790 qm Hauptnutzfläche (2.080 qm Rechner- und Systemräu-

me, 1.920 qm Büros, 950 qm Schulungs- und Seminarräume, 840 qm Bibliothek und Sonstiges) und 3.000 qm zusätzliche Funktionsfläche für unterstützende Infrastruktur (Strom, Kälte, Klima, Netzzuführung etc.) vor.

Die Aufstellungsfläche für den Höchstleistungsrechner beträgt 560 m² zuzüglich weiterer Infrastrukturflächen für Klimatisierung, Kühlung und Energieversorgung mit einer Leistung von bis zu 2,5 MW.

Ausschließlich dem Höchstleistungsrechner zuzuordnende Flächen sind:

	Fläche [qm]
Rechnerraum	560
Visualisierungssystem	100
Anteilige Fläche Archivsysteme, Netz	300
Anteilige Fläche Leitwarte u.ä.	50
Mitarbeiteräume und Gäste	250
Sonstige Räume	250
Gesamtfläche	1.510

Quelle: Angaben des Landes

Das Land weist darauf hin, dass das Raum- und Nutzungskonzept des Neubaus eine synergetische Nutzung durch den geplanten Höchstleistungsrechner und die am LRZ installierten weiteren Rechnersysteme für Systemräume und Infrastrukturflächen sowie für Lagerräume, Mitarbeiteräume und Schulungsräume gewährleistet.

V.3. Kosten

Die zu erwartenden Gesamtkosten betragen

- 38 Mio. € an Investitionskosten für den Höchstleistungsrechner,
- 34,9 Mio. € für den Neubau eines Gebäudes für das LRZ, davon 33,1 Mio. € Baukosten und 1,8 Mio. € für die Ersteinrichtung und
- 18 - 19 Mio. € an Betriebskosten für Elektrizität, Kühlung, Wartung und Personal bei einer Nutzungszeit von fünf Jahren.

Ausschließlich dem Höchstleistungsrechner zuzuordnende Baukosten sind (Schätzkosten):

	Baukosten [EUR]
Rechnerraum, Visualisierungssystem, anteilige Fläche Archivsysteme und Netz, anteilige Fläche Leitwarte u.ä.	7.809.475
Mitarbeiteräume und Gäste, Sonstige Räume	2.535.338
Anteilige Baukosten für Höchstleistungsrechner	10.344.813

Quelle: Angaben des Landes

Bei vorgesehenen Gesamtkosten des Neubaus des Rechenzentrums in Höhe von 33,1 TEUR (ohne Ersteinrichtungskosten) entfallen rd. 31 % der Baukosten auf Flächen für den geplanten Höchstleistungsrechner.

Über die Nutzungsdauer des Höchstleistungsrechners hinaus entstehen nach Aussage des Landes keine langfristigen Folgekosten. Die Ausschreibung des HLRB ist als Festpreis-Ausschreibung vorgesehen, die Finanzierung soll vollständig nach dem HBFG erfolgen. Die Einwerbung von Drittmitteln oder eine Kostenbeteiligung der Industrie ist nicht vorgesehen.

V.4. Zeitplanung

Der Höchstleistungsrechner soll im Jahr 2005 den regulären Betrieb aufnehmen. Die detaillierte Zeitplanung zeigt die folgende Übersicht:

LRZ-Neubau in Garching	2002 - 2005
Beantragung des HöLR	2002 - 2004
Ausschreibung	2004
Auswahl	Ende 2004
Aufstellung	2. Hälfte 2005
Ausbau	1. Hälfte 2007
Betriebsende	2010

Quelle: Angaben des Landes

B. Stellungnahme

Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, dass mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern in den zurückliegenden Jahren in zahlreichen Hochschulen und Forschungseinrichtungen wissenschaftliche Durchbrüche erzielt wurden, die auf Rechnern niedrigerer Leistungsklassen nicht möglich gewesen wären. Die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb in Wissenschaft und Forschung. Der Wissenschaftsrat begrüßt daher die Initiative des Landes Bayern, zum 32. Rahmenplan zur Vorbereitung der Beschaffung eines ab 2005 geplanten Höchstleistungsrechners in der Nachfolge des derzeit im Leibniz-Rechenzentrum München als nationalem Höchstleistungsrechenzentrum verfügbaren, zum Jahreswechsel 2001/2002 auf 2 TFlop/s erweiterten Rechners (Hitachi SR 8000) einen Gebäudeneubau für das Leibniz-Rechenzentrum München anzumelden und auf diese Weise die im Land bestehenden Infrastrukturen und Kompetenzen weiter auszubauen und damit einen erhöhten Beitrag zur nationalen Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Rechenkapazitäten der höchsten Leistungsklasse zu leisten.

Der Wissenschaftsrat hat sich in einer früheren Empfehlung dafür ausgesprochen, dass der Aufbau von Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse in der zeitlichen Abfolge so vorgenommen werden sollte, dass jeweils mindestens ein Rechner der obersten Leistungsklasse der Wissenschaft und Forschung in Deutschland zur Verfügung steht.³ Die derzeit bekannten Leistungsparameter des geplanten Höchstleistungsrechners lassen erwarten, dass dieses Ziel - im Vergleich zu bestehenden und geplanten weiteren Installationen - grundsätzlich erreicht werden kann.

Der seit April 2000 am Leibniz-Rechenzentrum installierte Rechner (Hitachi SR 8000) zählte zum Beschaffungszeitpunkt zu den fünf leistungsstärksten Rechnern weltweit und war der leistungsstärkste Rechner außerhalb der USA. Für Wissenschaft und Forschung wurde erstmals in Deutschland eine Rechenleistung von mehreren TFlop/s zur Verfügung gestellt. Das Leibniz-Rechenzentrum hat sich bei dessen Betrieb und in der Beratung der verschiedenen Nutzergruppen eine hohe Kompetenz im

³ Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995, S. 51 – 70.

wissenschaftlichen Rechnen erworben, welche geeignete fachliche und technische Voraussetzungen auch für eine Folgeinstallation erwarten lässt. Das LRZ nimmt seit dem Jahr 2000 die Aufgabe und Funktion eines Höchstleistungsrechenzentrums im Sinne des Wissenschaftsrates, d. h. mit bundesweitem Angebot an Rechenkapazität und Fachkompetenz erfolgreich wahr.

Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, dass die Arbeit mit Höchstleistungsrechnern bislang nur sehr unzureichend in Studiengänge integriert ist. Neben einer gezielten Initiative zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens in Universitäten und Fachhochschulen bedarf es auch geeigneter Weiterbildungsangebote. Der Wissenschaftsrat begrüßt die neu eingerichteten Studiengänge im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens an den Universitäten München und Erlangen-Nürnberg und sieht hierin einen wichtigen Beitrag zur Förderung dieser Disziplin bereits auf Ebene der studentischen Ausbildung. Er bittet die Universitäten, die Akkreditierung der Studiengänge rasch einzuleiten.

Da wesentliche Kenngrößen des geplanten Höchstleistungsrechners abschließend erst durch die ab 2003 erfolgende Marktanalyse und die für 2004 geplante Nutzerbefragung festgelegt werden, sieht der Wissenschaftsrat aufgrund des frühen Planungsstandes von einer Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Bayern auf Beschaffung eines Höchstleistungsrechners am Leibniz-Rechenzentrum in München ab, stellt aber fest, dass auf Grund der hohen Fachkompetenz des Leibniz-Rechenzentrums dessen prinzipielle Eignung für den Betrieb einer Nachfolgeinstallation gegeben ist. Unabhängig von der technischen Auslegung des geplanten Höchstleistungsrechners sieht es der Wissenschaftsrat weiter als Voraussetzung an, dass ein offener, bundesweiter Zugang unabhängig von dem Standort in Deutschland und den institutionellen Zugehörigkeiten der Nutzer gewährleistet sein wird, wie er seit dem Jahr 2000 vom LRZ als Höchstleistungsrechenzentrum geboten wird.⁴

Der Wissenschaftsrat erkennt an, dass das Land Bayern seine mittel- bis langfristigen Investitionsplanungen zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners mit dem zeitlich vorgelagerten Neubau eines Rechenzentrums zu dessen Beherbergung ver-

⁴ Der Wissenschaftsrat hat in seinen Mai-Sitzungen 2002 den geplanten Höchstleistungsrechner zur grundsätzlichen Aufnahme in den Rahmenplan empfohlen (Kategorie II); vgl. Empfehlungen zum

knüpft. Er sieht den Neubau eines Rechenzentrums in Garching als unabdingbare Voraussetzung für die geplante Installation eines Höchstleistungsrechners im Jahr 2005 an. Die vorgesehene Installation einer Spitzenleistung von 40 TFlop/s bringt erweiterte Anforderungen an die Energieversorgung und die Klima-Infrastruktur mit sich. Aufgrund der gegebenen beengten Raumsituation und aus Gründen des Denkmalschutzes kann das bestehende Leistungsangebot am derzeitigen Standort des Leibniz-Rechenzentrums in der Innenstadt von München nicht mehr ergänzt werden.

Der Wissenschaftsrat befürwortet die für die Installation eines neuen Höchstleistungsrechners erforderlichen Neubaumaßnahmen, die in ihrer baulichen und technischen Auslegung auch für künftige weitere Installationen ausreichend dimensioniert sein müssen. Er weist aber darauf hin, dass der vorgesehene Neubau eines Rechenzentrums in Garching nicht ausschließlich zur Beherbergung des geplanten Höchstleistungsrechners dient, sondern wesentlich auch der informationstechnischen lokalen Grundversorgung der beiden Münchner Universitäten und der übrigen Hochschulen im Münchner Raum und darüber hinaus der Versorgung mit Hochleistungsrechenkapazität in Bayern. Deren Beurteilung ist nicht Gegenstand einer Stellungnahme zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners.

Für die Installation eines Höchstleistungsrechners ist eine erneute Befassung des „Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ sowie eine Beurteilung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft anlässlich einer Anmeldung zum Rahmenplan zur konkreten Beschaffung des Höchstleistungsrechners erforderlich.

C. Zusammenfassung

Das Land Bayern hat zum 32. Rahmenplan zur Vorbereitung der Beschaffung eines ab 2005 geplanten Höchstleistungsrechners einen Gebäudeneubau für das Leibniz-Rechenzentrum München angemeldet.

Der geplante Höchstleistungsrechner soll im Neubau des Leibniz-Rechenzentrums auf dem Forschungs-Campus Garching installiert werden. Geplant ist ein homogenes Cluster aus leistungsstarken SMP-Knoten mit entsprechend leistungsfähigem Kommunikationsnetzwerk. Angestrebt wird eine Spitzenrechenleistung von 40 TFlop/s und ein Hauptspeicher von 2 Tbyte. Der geplante Höchstleistungsrechner soll den aktuellen Höchstleistungsrechner in Bayern nach dessen Betriebsende im Jahr 2005 ersetzen.

Das Leibniz-Rechenzentrum hat sich bei dem Betrieb des aktuell installierten Höchstleistungsrechners und in der Beratung der verschiedenen Nutzergruppen eine hohe Kompetenz im wissenschaftlichen Rechnen erworben, welche geeignete fachliche und technische Voraussetzungen auch für eine Folgeinstallation erwarten lässt.

Der Wissenschaftsrat sieht den Neubau eines Rechenzentrums in Garching - soweit dieser die für die Unterbringung des geplanten Höchstleistungsrechners erforderlichen Flächen umfasst - als unabdingbare Voraussetzung für die geplante Installation eines Höchstleistungsrechners im Jahr 2005 an.

Da wesentliche Kenngrößen des geplanten Höchstleistungsrechners noch abschließend festzulegen sind, sieht der Wissenschaftsrat aufgrund des frühen Planungsstandes von einer Stellungnahme zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners am Leibniz-Rechenzentrum ab. Die derzeit bekannten Leistungsparameter des geplanten Höchstleistungsrechners lassen die Bereitstellung von Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse zum Zeitpunkt der Beschaffung grundsätzlich erwarten.⁵

⁵ Siehe Fußnote 4.