



Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Baden-Württemberg auf Errichtung eines Höchstleistungsrechner-Systems in Karlsruhe und Stuttgart zum 32. Rahmenplan



**Stellungnahme**  
**zur Anmeldung des Landes Baden-Württemberg auf Errichtung**  
**eines Höchstleistungsrechner-Systems in Karlsruhe und Stuttgart**  
**zum 32. Rahmenplan**

	<u>Seite</u>
Vorbemerkung.....	2
A. Ausgangslage .....	11
A.I. Einsatzbereiche des Höchstleistungsrechners .....	11
A.II. Der geplante Höchstleistungsrechner.....	11
A.III. Beteiligte Institutionen.....	15
A.IV. Die Nutzer.....	17
A.V. Projektmanagement, Standort, Kosten und Zeitplanung .....	20
V.1. Projektmanagement.....	20
V.2. Standort .....	21
V.3. Kosten .....	21
V.4. Zeitplanung .....	23
B. Stellungnahme.....	24
C. Zusammenfassung .....	28

## **Vorbemerkung**

### *Veranlassung*

In seiner im Mai 2000 verabschiedeten Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern<sup>1</sup> 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

---

<sup>1</sup> 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 Höchstleistungsrechnern<sup>2</sup>*

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

---

<sup>2</sup> 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 beabsichtigt das Land Baden-Württemberg im Jahr 2004 und das Land Bayern im Jahr 2005 die konkrete Beschaffung jeweils eines Höchstleistungsrechners. An außeruniversitären Beschaffungsiniciativen 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	0,9 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 Baden-Württemberg*

Das Land Baden-Württemberg hat zum 32. Rahmenplan einen gemeinsam von den Universitäten in Karlsruhe und Stuttgart getragenen Höchstleistungsrechner als Beschaffungsvorhaben in Kategorie I 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 Baden-Württemberg 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**

Die Hauptanwendungsgebiete liegen nach Darstellung des Landes in Physik, Strömungsmechanik, Strukturanalyse und Strukturoptimierung, Mathematik, Chemie, Elektrotechnik und Informatik. Numerische Simulationen zur Lösung von hoch komplexen Problemen kommen in allen Bereichen der Physik zum Einsatz, einschließlich der Geo- und Astrophysik, Chemie, Materialwissenschaften, Strömungs- und Strukturdynamik, Wetter- und Klimavorhersage und in der Umweltforschung. Zu den Schwerpunkten der Anwendungen in der Strömungsmechanik gehören die Untersuchungen der Strömungen am Flugzeug, bei der Verbrennung, in Turbinen oder in Blutgefäßen. Darüber hinaus wird derzeit gemeinsam mit den Universitäten des Landes eruiert, in welchen Fachgebieten gesellschaftspolitisch bedeutende Fragestellungen behandelt werden, deren Lösung durch höchstleistungsrechnergestützte Simulationsrechnungen beschleunigt werden könnten. Außerdem sollen neben den genannten Fachgebieten zukünftig auch die Bereiche Lebenswissenschaften und Energieforschung gefördert und unterstützt werden.

### **A.II. Der geplante Höchstleistungsrechner**

Geplant ist die Beschaffung eines Höchstleistungsrechner-Systems der obersten Leistungsklasse. Vorgesehen ist ein System, dessen Bausteine eng gekoppelte SMP-Knoten sind. Das System soll als verteiltes System an zwei Standorten (Karlsruhe und Stuttgart) aufgestellt und von dem durch die Rechenzentren der Universitäten Karlsruhe (Scientific Supercomputing Center, SSC) und Stuttgart (Hochleistungsrechenzentrum Stuttgart, HLRS) getragenen Höchstleistungsrechnerkompetenzzentrum (hkz-bw) geplant, beschaffen und betrieben werden. Die Kopplung der beiden Systeme erfolgt physikalisch über die Netzverbindung des Baden-Württemberg extended LAN (BeWü) mit einer Bandbreite von 10 Gbps. Die logische Verknüpfung erfolgt über ein gemeinsames Filesystem, das aus der Sicht einer Anwendung nur einen einzigen Datenraum anzeigt. Die Kommunikation zwischen den Systemen kann innerhalb der Anwendung über die am HLRS entwickelte Bibliothek

PACX-MPI erfolgen. Das Gesamtsystem stellt sich dem Anwender gegenüber als ein einheitliches System mit einem Single-System-Image dar.

Durch die Realisierung des Höchstleistungsrechners in Form von zwei Teilsystemen erwartet das Land, unterschiedlichen Anforderungen der Nutzer an das Verhältnis von Rechenleistung zu verfügbarem Hauptspeicher, von Rechenleistung zu Kommunikationsleistung und von Rechenleistung zu I/O-Leistung (lokal bzw. global) gerecht zu werden.

Das System soll folgende Anforderungen erfüllen:

- Die realisierbare Leistung für ein einzelnes, noch zu bestimmendes Anwendungsprogramm soll bei 2 bis 3 TFlop/s liegen.
- Daraus ergibt eine Spitzenleistung zwischen 10 und 20 TFlop/s.
- Die Kommunikationsleistung des Netzes innerhalb der beiden Komponenten soll für die Latenz im Bereich weniger Mikrosekunden (einstellig) und für die Bandbreite im Bereich von 10 Gbps für Punkt-zu-Punkt-Verbindungen liegen.
- Das System soll die Leistungszahlen 1:1:10 für Leistung, Hauptspeicher und Plattenplatz erfüllen. Es wird angestrebt, dass pro Flop ein Byte Hauptspeicher, d.h. insgesamt ca. 15 TB, und 10 Byte Plattenplatz, d.h. insgesamt ca. 150 TB, bereitstehen soll.
- Das System soll eine Kommunikationsbandbreite zu Hochgeschwindigkeitsnetzen und zur Kopplung der beiden Systemteile im Bereich von bis zu 10 Gbps realisieren können.

Das Land betont, dass im Rahmen der Beschaffung kein vollständiger Systemwechsel stattfindet. Durch die Fokussierung auf ein einziges Architekturkonzept (Cluster von SMPs) sowie auf Standardwerkzeuge (Debugger, Analysewerkzeuge etc.) wird der Übergang auf die nächste Rechnergeneration erheblich erleichtert. Eine hohe Portabilität der Parallelisierung ist durch die Verwendung von standardisierten Programmierschnittstellen gewährleistet. Erforderlich ist eine Anpassung der Programme

an die Struktur der Prozessoren und eine Berücksichtigung der Architektur in der Programmierung. Die Benutzung der verteilten Rechnerressourcen durch eine einzelne Applikation wird sowohl auf System- als auch auf Anwendungsebene als eine besondere Herausforderung angesehen. Das Land verweist auf die am HLRS bestehende PACX-MPI Bibliothek als ein Werkzeug, das die Kopplung mehrerer Parallelrechner ermöglicht und sieht im Grid-Computing zusätzliche Möglichkeiten für gekoppelte Anwendungen (Strömung, Struktur).

Das Land sieht die technische Machbarkeit der geplanten Beschaffung als gegeben an. Eine im Herbst 2001 durchgeführte Marktanalyse hat nach Aussage des Landes ergeben, dass sich acht Hersteller in der Lage sehen, ein derartiges System im Jahr 2003/2004 zu liefern.

An den Rechenzentren Karlsruhe und Stuttgart sind aktuell sechs Rechnersysteme mit zusammen 539 GB Hauptspeicher und einer Spitzenleistung von zusammen 1.082 GFlop/s installiert, deren Finanzierung zum überwiegenden Teil durch das HBFVG, teilweise unter Beteiligung der Industrie, erfolgte. Der leistungsstärkste Rechner ist eine am HLRS installierte Cray T3E-900/512 mit 412 GFlop/s Spitzenleistung, beschafft im Jahr 1996.

Die methodisch-fachliche und mathematisch-informatische Beratung der Benutzer soll in den Bereichen Rechnerarchitekturen und Programmier Techniken sowie für Numerische Verfahren und ihre Implementierung, bspw. für Systeme partieller Differentialgleichungen auf Vektor- und Parallelrechnern, erfolgen. Die Benutzer können auf die innerhalb dieser Softwareprojekte gesammelten Erfahrungen bei der Entwicklung von Software für Höchstleistungsrechner zurückgreifen.

Für kooperative Forschungsvorhaben wie im Grid-Computing oder für Projekte aus den Lebenswissenschaften und der Energieforschung beabsichtigt das Land gemeinsam mit den Universitäten Karlsruhe und Stuttgart jährlich 1 Mio. € bereitzustellen. Es sollen gezielt Kooperationen mit wissenschaftlichen Nutzern gefördert wer-

den, die in entsprechende Forschungsinitiativen, wie sie beispielsweise Sonderforschungsbereiche darstellen, übergeleitet werden sollen.

Die geplante Installation des Höchstleistungsrechners wird durch das bestehende Kompetenznetzwerk Wissenschaftliches Rechnen in Baden-Württemberg (WiR-BaWü) unterstützt. Hierzu zählen das Hochleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), das Interdisziplinäre Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg und das Institut für Wissenschaftliches Rechnen und Mathematische Modellbildung (IWRMM) der Universität Karlsruhe. Schwerpunkte im Wissenschaftlichen Rechnen liegen zudem bei weiteren Arbeitsgruppen an verschiedenen Universitäten und Forschungseinrichtungen in Baden-Württemberg sowie an landesweit insgesamt 46 Sonderforschungsbereichen und 30 Graduiertenkollegs, besonders an den Universitäten Heidelberg, Karlsruhe, Stuttgart und Tübingen.

Voraussetzung für die projektförmige Nutzung des geplanten Höchstleistungsrechners ist ein unter den Aspekten fachliche Relevanz des Forschungsthemas, Notwendigkeit des Einsatzes eines Höchstleistungsrechners sowie unter Beachtung der nachweisbaren Fähigkeiten des Antragstellers im Umgang mit den Grundtechniken von Parallelrechnern positiv begutachteter und bewilligter Projektantrag. Die Begutachtung erfolgt durch einen Lenkungsausschuss.

Nach Auffassung des Landes erweitert der geplante Höchstleistungsrechner das bestehende nationale Angebot im Spitzenbereich, indem es die derzeit maximal verfügbare Leistung für zivile Einrichtungen (mit Ausnahme des Großprojekts Earth Simulator) für deutsche Forscher nutzbar macht. Nach Aussage des Landes erfolgte eine Beschaffungsabstimmung mit den übrigen Höchstleistungsrechenzentren im Rahmen der Arbeitsgruppe der Leiter der Höchstleistungsrechenzentren wie auch im Koordinierungsausschuss der Vorsitzenden deren Lenkungsausschüsse.

Die Vernetzung und die Einbindung des geplanten Höchstleistungsrechners in künftige Netze zum Grid-Computing erfolgt durch das BelWü-Netz des Landes Baden-Württemberg, ebenso wie die Anbindung an das Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN



des Deutschen Forschungsnetz (DFN) und internationale Forschungsnetze.<sup>3</sup> Für europäische Partner erfolgt die Anbindung über das europäische Forschungsnetz GÉANT.

### **A.III. Beteiligte Institutionen**

Die Rechnerversorgungsstruktur an den Hochschulen in Baden-Württemberg orientiert sich nach Aussage des Landes an der sog. Rechnerpyramide. In Baden-Württemberg ist nach Auffassung des Landes aktuell kein Höchstleistungsrechner installiert. Über Hochleistungsrechner verfügen ab dem Jahre 2003 die Universität Stuttgart mit der NEC SX-5 sowie der Hitachi SR-8000 (im Rahmen der hww-GmbH) und die Universität Karlsruhe mit der IBM SP-SMP sowie der VPP-5000 (im Rahmen des Virtuellen Rechenzentrums Karlsruhe mit dem Forschungszentrum Karlsruhe, FZK). Nach Inbetriebnahme des geplanten Höchstleistungsrechners sollen die genannten Systeme die Versorgung der spezifischen Belange an Hochleistungsrechenkapazität der beiden technisch-ingenieurwissenschaftlich geprägten Universitäten übernehmen und im Rahmen eines Landeskonzeptes auch den entsprechenden Bedarf an den übrigen Hochschulen im Lande abdecken. Des weiteren wurde im Jahr 2001 am Rechenzentrum der Universität Ulm ein SUN-Fire-System installiert, das als gemeinsamer Compute-Server von den Universitäten Stuttgart und Ulm genutzt wird. Applikationsserver und Lokale Arbeitsplatzrechner mit einer großen Nutzungsbreite bilden die weiteren Elemente der Rechnerpyramide.

An den Rechenzentren der Universitäten Karlsruhe und Stuttgart werden seit 1983 Hochleistungsrechner für den lokalen wie nationalen Bedarf betrieben. An beiden Rechenzentren sind seitdem jeweils neun Installationen von Rechnern unterschiedlicher Leistungsklassen getätigt worden. Mit der Gründung der Betreibergesellschaft

---

<sup>3</sup> Nach Aussage des Landes wurde vom BelWü 2001 eine flächendeckende Versorgung der Forschungseinrichtungen in Baden-Württemberg mit 2,4 Gbps aufgebaut. Für Rechnerkoppelungen, wie sie für das an den Standorten Karlsruhe und Stuttgart geplante verteilte System erforderlich sind, stehen separate Verbindungen zur Verfügung, auf denen Übertragungsleistungen von bis zu 10 Gbps realisiert werden können. Die Anbindung an das deutsche Forschungsnetz G-WiN soll über eine 2,4 Gbps-Leitung via Frankfurt erfolgen. Ebenfalls über Frankfurt erfolgt eine Anbindung an das europäische Forschungsnetz GÉANT und das amerikanische Forschungsnetz Abilene.

Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft (hww GmbH) im Jahr 1996 erfolgt der Betrieb gemeinsam mit der Industrie. Im Rahmen vielfältiger Kooperationsprojekte und Arbeitskreise bestehen Kontakte zu weiteren Rechenzentren in Nordamerika, Japan und Europa.

An beiden genannten Rechenzentren besteht ein umfangreiches Angebot an Beratungsleistungen für die Nutzer, welches sich in online abrufbare Informationsangebote, Helpdesk Systeme für den First Level Support, Projektpatenschaften, die eine Begleitung der Projekte durch wissenschaftliche Mitarbeiter des hkz-bw garantieren, sowie Workshops und Trainingskurse gliedert. Es ist ein weiterer Ausbau des Beratungsangebotes auf weitere Belange des Höchstleistungsrechnens geplant.

Der Personalbedarf für den Betrieb, die Betreuung und die Weiterentwicklung des geplanten Höchstleistungsrechners gliedert sich im Wesentlichen in die drei Bereiche

- unmittelbarer Systembetrieb der Rechner und Netze,
- Betreuung der Anwendungsplattform und Unterstützung der Nutzer sowie
- Entwicklungsarbeiten und Forschungsprojekte.

Zusammenfassend ergibt sich die folgende Personalaufstellung (Angaben in Vollzeitstellen):

Tabelle 1: Personalbedarf

Aufgabe	Bedarf	Vorhanden
Beratung und Unterstützung der Nutzer	6	6
Betreuung der Anwendungs-Software-Systeme	2	2
Betreuung der Basis-Anwendungs-Software (Bibliotheken etc.)	2	2
Programmierungsumgebungen, Werkzeuge, Schnittstellen etc.	2	2
Middleware (Scheduling, Datenmanagement, Accounting etc.)	4	4
Betriebssystem und Systemumgebung	4	4
Hardware & RZ-Infrastruktur (technische Betriebsüberwachung)	2	2
Netzanbindung & Kommunikation	2	2
Benutzerverwaltung & sonstige Administration	2	2
<b>Gesamt</b>	<b>26</b>	<b>26</b>

Quelle: Angaben des Landes

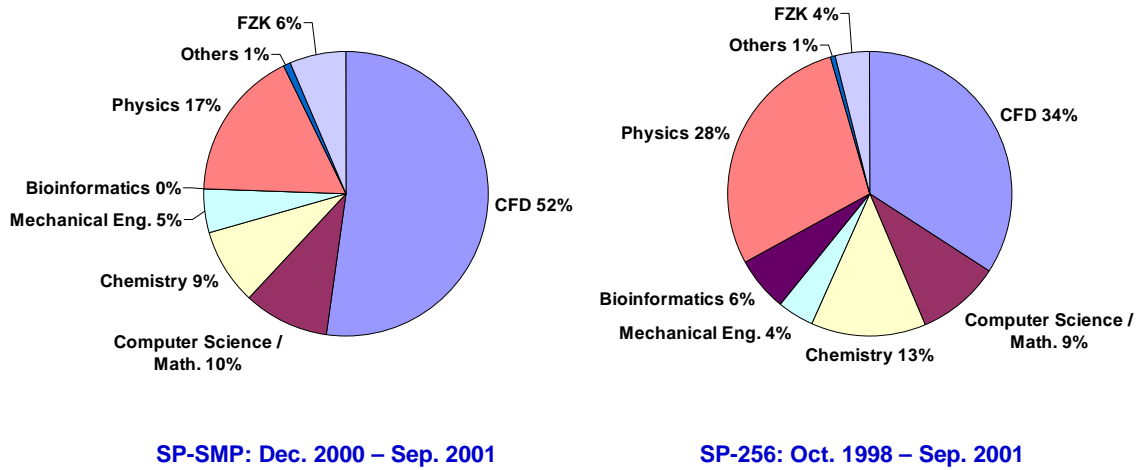
Von den 26 Personalstellen sollen angesichts der breiten Themenstreuung und der erforderlichen fachlichen Kompetenzen 22 mit Universitäts- oder Fachhochschulabsolventen besetzt werden, für vier Stellen ist eine Fachausbildung Voraussetzung. Der Personalbedarf kann nach Aussage des Landes durch die vorhandenen Personalkapazitäten in Karlsruhe und Stuttgart vollständig abgedeckt werden.

Für kooperative Forschungsvorhaben beabsichtigten das Land und die beiden beteiligten Universitäten, jährlich zusätzlich 1 Mio. € bereitzustellen (siehe Abschnitt A.II). Dies entspricht einem Personaläquivalent von weiteren 15 Wissenschaftlern.

#### **A.IV. Die Nutzer**

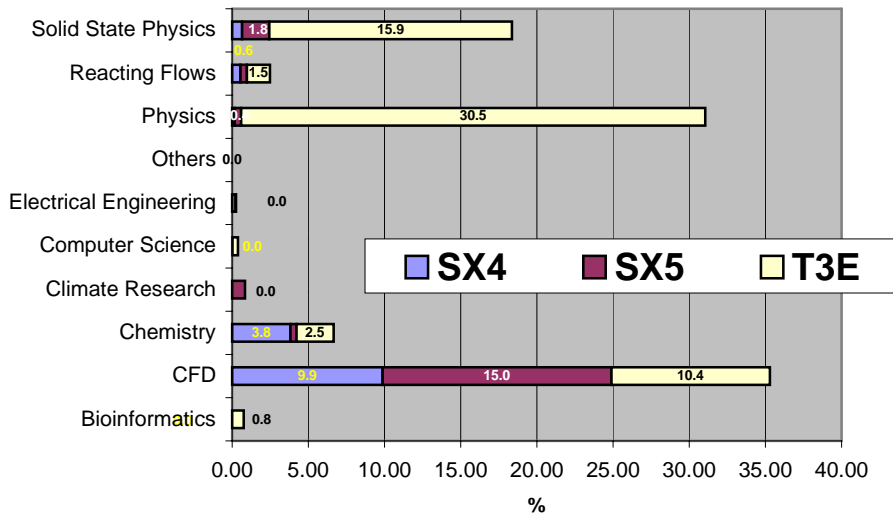
Bislang werden die Höchstleistungsrechner des HLRS und des SSC Karlsruhe überwiegend von Anwendern aus den Naturwissenschaften (i.w. Physik und Chemie) und den Ingenieurwissenschaften (insbesondere der Strömungsmechanik) genutzt.

Abbildung 1: Nutzung der IBM RS/6000 SP Systeme am SCC nach Fachgebieten



Quelle: Angaben des Landes

Abbildung 2: Nutzung der Rechner des HLRS nach Fachgebieten



Quelle: Angaben des Landes

Das Land geht auch in Zukunft von einer Konzentration auf die bestehenden Anwendungsschwerpunkte Physik und Strömungsmechanik aus, eine steigende Nachfrage nach Rechenzeit wird in den Lebenswissenschaften sowie in der Bioinformatik und

der Mathematik/Informatik erwartet. Das Land betont gleichzeitig, dass durch die Bereitstellung einer zehnfach höheren „Capability“ neue, bislang nicht bearbeitbare Anwendungen erschlossen werden können.

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

Die Nutzung der Systeme durch die Industrie erfolgt über eine institutionelle Kooperation industrieller und universitärer Partner. Die hww GmbH (Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft Betriebsgesellschaft mbH) wurde im Jahr 1995 von debis Systemhaus (dSH, jetzt T-Systems, Anteil 20 %), der Porsche AG (10%) und der Universität Stuttgart (12,5 %) sowie dem Land Baden-Württemberg (12,5 %) gegründet. Die Universität Karlsruhe wurde 1996 in die Gesellschaft aufgenommen (Anteil 12,5 %). Die Universität Heidelberg (12,5 %) sowie das Joint Venture von T-Systems und dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt, dSH-Solutions for Research (SfR, 20 %), traten dem Unternehmen später bei. Ziel der hww GmbH ist der kosteneffiziente Betrieb von Supercomputern und technischen Servern. Im Lauf der letzten sechs Jahre hatte die Industrie einen Nutzungsanteil von rund 8% an den Systemen. Dies entspricht dem finanziellen Beitrag der Industrie. In der Zukunft wird sich die Nutzung der Systeme an den finanziellen Beiträgen der Industrie orientieren. (siehe Abschnitt A.V.3 zu Details der Finanzierungsanteile).

Die Hinführung des wissenschaftlichen Nachwuchses zum Höchstleistungsrechnen sowie die Weiterqualifikation der Nutzer und Mitarbeiter erfolgt durch Vorlesungen, Studiengänge, Diplomarbeiten und Promotionen. In Stuttgart vertreten das HLRS und das Institut für Computeranwendungen (ICA) das Lehr- und Forschungsgebiet „Anwendungen der Informatik im Maschinenwesen“. Die Forschung auf dem Gebiet des „Computational Science“, die das HLRS durchführt, hat zur Einrichtung der Studienrichtung „Modellierung und Simulation im Maschinenbau (CSE)“ geführt. Angeboten werden die Studienrichtungen Modellierung und Simulation im Maschinenbau (CSE) und Allgemeiner Maschinenbau mit den Hauptfächern Methoden der Modellierung und Simulation und Angewandte Informatik und den Pflichtfächern Softwa-

reentwurf für technische Systeme und Simulation mit Höchstleistungsrechnern. In Karlsruhe bieten das interfakultative Institut für Wissenschaftliches Rechnen und Mathematische Modellbildung (IWRMM) und die Fakultäten für Mathematik und Informatik Studiengänge, Lehrveranstaltungen und Workshops zum Thema Wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen an. Hieran beteiligen sich das SSC und weitere Einrichtungen.

Seit 1998 wird vom wissenschaftlichen Lenkungsausschuss einmal jährlich ein Ergebnisworkshop mit den Anwendern durchgeführt, bei der auch die Fortschreibung der Höchstleistungsrechnerplanung in Baden-Württemberg mit den Nutzern erörtert wird. Die Hauptergebnisse wurden in bislang vier Tagungsbänden veröffentlicht.

## **A.V. Projektmanagement, Standort, Kosten und Zeitplanung**

### V.1. Projektmanagement

Der Betrieb des geplanten Höchstleistungsrechners erfolgt im Auftrag des Höchstleistungsrechnerkompetenzzentrums (hkz-bw) durch die Betriebsgesellschaft für Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft mbH (hww GmbH). Die Anlagen werden an die hww GmbH vermietet und zu 80% von der hkz-bw zurückgekauft, die restlichen 20% werden von den beteiligten industriellen Partnern nachgefragt. Kunden der hww GmbH sind allein die Gesellschafter, die wiederum selbst den Kundenservice für ihre Endkunden sicherstellen müssen. Der Vorstand des hkz-bw zeichnet für die üblichen Kernaufgaben eines Rechenzentrums verantwortlich. Die Koordinierung und Kapazitätssteuerung erfolgt durch einen gemeinsamen wissenschaftlichen Lenkungsausschuss.<sup>4</sup>

---

<sup>4</sup> Dessen Aufgaben sind: Bestimmung der Anwendungsprofile, Festlegung der vorhandenen Rechenkapazität, Aufstellung der Regeln für die Vergabe von Rechenkapazität, Entscheidung über Projektanträge und Vergabe von Rechenkapazität, Mitwirkung bei der Hard- und Softwareauswahl, Billigung der Abrechnungsformalisten, Mitwirkung bei der Festlegung von Betriebsformen zur Abdeckung des Anwenderprofils, Mitwirkung bei der Erstellung der Nutzungs- und Betriebsordnung, Stellungnahme zum Rechenschaftsbericht der Höchstleistungsrechenzentren, Anhörung der Kompetenzzentren (WIR).

Das Budget des hkw-bw und damit das Budget für den Gesamtbetrieb, die Nutzerbetreuung und die Projekte des hkw-bw wird jährlich in einem Wirtschaftsplan von der Mitgliederversammlung festgestellt. Dabei bringen die beiden Universitäten grundsätzlich jeweils die Hälfte der erforderlichen Mittel ein, die Mittel für den Rückkauf der Rechenzeit von der hww GmbH wird von den beiden Universitäten im Verhältnis der lokalen Rechenkapazitäten zur Verfügung gestellt.

## V.2. Standort

Für die Installation in Stuttgart wird die Rechnerstellfläche mit ca. 500 –700 m<sup>2</sup> und der Energiebedarf für das Rechnersystem und die Peripherie mit ca. 1 MW abgeschätzt. Im geplanten Neubau ist ein Rechnerraum mit einer Fläche von 700 m<sup>2</sup> sowie einer Rechnerumschlagfläche von 200 m<sup>2</sup> vorgesehen. Die Kapazität für Energieversorgung und Kühlung einschließlich der notwendigen Haustechnik liegt bei rund 1,5 MW. Neben den erforderlichen Funktions- und Nebenflächen ist eine zusätzliche Fläche in der Größenordnung von 100 m<sup>2</sup> für das Betriebspersonal vorgesehen. Dem Rechnergebäude angeschlossen ist ferner ein Institutsbereich für wissenschaftliche Mitarbeiter, der über eine Gesamtfläche von ca. 450 m<sup>2</sup> verfügen wird.

Am Rechenzentrum der Universität Karlsruhe liegt eine geeignete Infrastruktur zur Unterbringung eines Höchstleistungsrechners einschließlich notwendiger Arbeits- und Büroflächen bereits vor.

## V.3. Kosten

Die Investitionskosten betragen laut Anmeldung zum 32. Rahmenplan 62,8 Mio. €. Davon entfallen 40 Mio. € auf den wissenschaftlichen Anteil des Rechnerkomplexes, 10 Mio. € auf den kommerziell genutzten Teil und 12,8 Mio. € auf den Neubau in Stuttgart. Die Kosten für den Neubau sind die Kosten lt. Haushaltsunterlage-Bau einschließlich der Ersteinrichtung. Die Kosten für den Rechnerkomplex stellen aus Landessicht Obergrenzen dar, die nicht überschritten werden.

20% der Kapazität des Höchstleistungsrechners werden an die Industrie gegen Kostenersatz abgegeben. Für die restlichen Investitionskosten in Höhe von 40 Mio. € sowie der Baukosten in Höhe von 12,8 Mio. € beabsichtigt das Land eine Finanzierung im Rahmen des HBFG.

Tabelle 2: Aufwendungen für Investitionen und Betrieb des geplanten Höchstleistungsrechners

	Investitionskosten
	[Mio. €]
Gesamt	50
davon Finanzierung HBFG	40
davon Finanzierung Industrie (20%)	10

	Betriebskosten bei einer Nutzungszeit von 5 Jahre	Betriebskosten, davon ...			
		Wartung	Strom, Klima, Raum	Betrieb hww	Zins
	[Mio. €]	[Mio. €]	[Mio. €]	[Mio. €]	[Mio. €]
Gesamt	36,5	20	5	2,5	9
davon Finanzierung durch das Land	28,2	15	4	2	7,2
davon Finanzierung durch die Industrie (20%)	8,3	5	1	0,5	1,8

Quelle: Angaben des Landes



An zusätzlichen Aufwendungen nennt das Land:

	Aufwendungen in der Nutzungszeit von 5 Jahren	Finanzierung
Nutzerservice und Anwenderunterstützung (insgesamt 18 Personalstellen)	8,5 Mio. €	durch die Universitäten Karlsruhe und Stuttgart
Software und sonstige Sachkosten	12,5 Mio. €	durch die Universitäten Karlsruhe und Stuttgart
Projektstellen für Entwicklung und Forschung	7,5 Mio. €	durch das Land BW und die Universitäten Karlsruhe und Stuttgart

Quelle: Angaben des Landes

#### V.4. Zeitplanung

Der Höchstleistungsrechner soll zur Jahreswende 2003/2004 den regulären Betrieb aufnehmen. Die Ausschreibung des Teilnahmewettbewerb ist für 4/5 2002, die Vertragsverhandlungen für 10/2002 bis 1/2003, die Lieferung für 10/2003 und die Abnahme für 11/2003 bis 1/2004 avisiert. Es wird von einer Lieferzeit von 6 bis 9 Monaten ausgegangen.

## 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 Baden-Württemberg, zum 32. Rahmenplan einen Höchstleistungsrechner als Beschaffungsvorhaben 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 sieht es als Voraussetzung an, dass für den Höchstleistungsrechner in seiner Gesamtkapazität ein offener, bundesweiter Zugang unabhängig von der institutionellen Zugehörigkeit der Nutzer gewährleistet sein wird.

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 dieser Leistungsklasse der Wissenschaft und Forschung in Deutschland zur Verfügung steht.<sup>5</sup> Er begrüßt die unter zeitlichen Gesichtspunkten erfolgte Abstimmung des in Baden-Württemberg geplanten Höchstleistungsrechners mit bestehenden oder beabsichtigten Beschaffungen in Berlin/Hannover, München und Jülich. Er erachtet die fachliche Ausrichtung der beiden Betreiberzentren des in Baden-Württemberg geplanten Höchstleistungsrechners, des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) und des Scientific Supercomputing Center Karlsruhe (SSC) auf den Bereich der Ingenieurwissenschaften und die vorgesehene Erweiterung im Rahmen des Höchstleistungsrechner-Kompetenzzentrums Baden-Württemberg (hkz-bw) auf die Lebenswissenschaften und die Energieforschung als sinnvoll und an den bestehenden fachlichen Hintergrund als schlüssig anknüpfend an. Die aktuelle Nachfrage und

---

<sup>5</sup> 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.

der prognostizierte zukünftige Bedarf an Rechenleistung für die vertretenen Fachgebiete sind überzeugend durch Nutzerbefragungen dokumentiert und rechtfertigen nach Auffassung des Wissenschaftsrates die Inanspruchnahme von Höchstleistungsrechenkapazität.

Der exponentielle Leistungsanstieg der Spitzenrechner weltweit und die daraus erwachsende prognostizierbare Bedarfssteigerung machen nach Auffassung des Wissenschaftsrates in Deutschland kontinuierliche investive Anstrengungen in Höchstleistungsrechner zur Sicherung der wissenschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit erforderlich. Der Wissenschaftsrat sieht es als Ziel einer nationalen Investitionsstrategie an, für Wissenschaft und Forschung stets einen Rechner der obersten Leistungsklasse national zur Verfügung zu stellen. Der Wissenschaftsrat hat allerdings aus den folgenden Gründen Zweifel, ob dieses Ziel mit dem gekoppelten Rechnersystem zwischen Stuttgart und Karlsruhe erreichbar ist:

- Bei einer Verteilung von Rechenkapazitäten auf zwei Standorte ist die Bearbeitung von besonders anspruchsvollen Applikationen, wie sie nur für Höchstleistungsrechner typisch sind, nach dem derzeitigen Stand der Technik nur eingeschränkt möglich. Die bestehende 10 Gbps-Verbindung zwischen den beiden Teilsystemen in Karlsruhe und Stuttgart kann für ein verteiltes File- und Batch-System als adäquate technische Voraussetzung angesehen werden, unvermeidbar bleiben aber hohe Latenzzeiten der Vernetzung. Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, dass ein Grid-Computing als Konsequenz moderner Rechnerarchitekturen, leistungsfähiger Datennetze und verteilter Arbeits- und Programmorganisationen zunehmend an Bedeutung gewinnen wird. Die Entwicklung wesentlicher Programme und Werkzeuge für das Grid-Computing, um Höchstleistungsrechner auf Applikationsebene zu koppeln, steht allerdings noch aus. Der Wissenschaftsrat begrüßt, dass im Rahmen des Höchstleistungsrechner-Kompetenzzentrums Baden-Württemberg (hkz-bw) auch Projekte mit Forschungsgruppen besonders in dem Arbeitsbereich Grid-Computing gefördert werden sollen und hebt die verschiedenen internationalen Kooperationen des HLRS und des SSC auf den Gebieten des Grid-Computing besonders hervor. Er sieht es jedoch nicht als zielführend an, zum jetzigen Zeitpunkt unter den gegebenen technischen Unsicherheiten ein gekoppeltes und verteiltes System von Höchstleistungsrechnern zu installieren.

- Aus Sicht der Nutzer von Höchstleistungsrechenkapazitäten stellt ein heterogenes Grid-Computing ein zwar wünschenswertes, dennoch aber erst in weiterer Zukunft realisierbares Instrument zur Bereitstellung höchster Rechenkapazitäten dar. Für die Nutzer bleibt es weiterhin wesentlich, Preprocessing, Processing und Post-processing an einem Standort in Anspruch nehmen zu können.
- Die vorgesehene Installation verschiedener Rechnerarchitekturen in Stuttgart und Karlsruhe führt nach Auffassung des Wissenschaftsrates nicht dazu, dass die Anforderungen verschiedener Nutzergruppen nach unterschiedlichen Verhältnissen von Rechenleistung, verfügbarem Hauptspeicher, Kommunikationsleistung und I/O-Leistung auf höchstem Leistungsniveau erfüllt werden können. Die Bereitstellung von Höchstleistungsrechnern verschiedener Architekturen, unterschiedlicher Ausstattungen und verschiedener Hersteller muss auf nationaler Ebene realisiert werden.

Der Wissenschaftsrat ist der Auffassung, dass höchste Rechenleistungen unter den gegebenen technischen Randbedingungen und Nutzeranforderungen zur Zeit nur nach dem „Ein-Standort-Prinzip“ erbracht werden können.<sup>6</sup> Er spricht sich daher gegen ein gekoppeltes Rechnersystem zum Zwecke des Höchstleistungsrechnens mit den Standorten Stuttgart und Karlsruhe zum jetzigen Zeitpunkt aus und empfiehlt stattdessen die Installation eines Höchstleistungsrechners in Stuttgart und eines Hochleistungsrechners in Karlsruhe. Er verschließt sich damit im Kontext einer nationalen Investitionsstrategie auch etwaiger, das Ziel der Bereitstellung höchster Rechenleistung einschränkender, regionalpolitischer Motive für eine physische und logische Kopplung zweier verteilter Rechnerressourcen.

Mit der Installation eines Höchstleistungsrechners in Stuttgart wäre die Voraussetzung geschaffen, die größtmögliche Rechenleistung Nutzern bundesweit unabhängig

---

<sup>6</sup> Er hat sich vergleichbar in einer früheren Empfehlung (Stellungnahme zu den Konzepten über die Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern und eines Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 1999, Köln 2000, S. 141 ff.) geäußert.

von deren geographischen Voraussetzungen und institutionellen Zugehörigkeiten zur Verfügung zu stellen. Mit der Beschaffung eines Hochleistungsrechners in Karlsruhe könnte im Sinne der sog. Rechnerpyramide, die eine nach Leistung und Nutzungsbreite gestaffelte kooperative Rechnerversorgung vorsieht, der landesweite Bedarf an hoher Rechenleistung abgedeckt werden. Bezogen auf einen anzustrebenden Installationszeitpunkt beider Rechner im Jahr 2004 sieht der Wissenschaftsrat eine Leistungsverteilung nach jetziger Kenntnis der Entwicklungslinien von 12-15 TFlop/s in Stuttgart und 2-3 TFlop/s in Karlsruhe als sinnvoll an. Das Investitionsvolumen sollte dem Verhältnis der Leistungen entsprechen.

Für eine effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern hat sich der Wissenschaftsrat in einer früheren Empfehlung für den Aufbau großflächiger Kompetenznetzwerke, bestehend aus wenigen Höchstleistungsrechenzentren und dezentralen Kompetenzzentren, ausgesprochen.<sup>7</sup> Der Wissenschaftsrat unterstreicht die im Land Baden-Württemberg vorhandenen Kompetenzen im wissenschaftlichen Rechnen und begrüßt ausdrücklich die mit Gründung des Höchstleistungsrechner-Kompetenzzentrums Baden-Württemberg (hkz-bw) avisierte Kompetenzbündelung. Die verstärkte Zusammenführung der in Stuttgart und Karlsruhe vorhandenen methodischen und ingenieurwissenschaftlichen Kompetenzen werden neue Synergien eröffnen, um verbessert den Bedürfnissen der Nutzer durch Bereitstellung von problemadäquaten Service- und Beratungsleistungen zu entsprechen. Dabei kommt dem wissenschaftlichen Umfeld eines Höchstleistungsrechners besondere Bedeutung zu. Hier sieht der Wissenschaftsrat am Standort Karlsruhe gute Voraussetzungen, durch ein Angebot an Betreuungs- und Entwicklungsleistungen besonders für Nutzer ohne einschlägige Kenntnisse im wissenschaftlichen Rechnen die Nutzung und Auslastung von Höchstleistungsrechnern entscheidend zu verbessern. Der Aufbau von Hochleistungsrechenkapazitäten in Karlsruhe sollte auch mit einer Aufstockung der bestehenden Personalkapazitäten des dortigen Kompetenzzentrums verbunden sein.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt, in das hkz-bw neben den Universitäten in Stuttgart und Karlsruhe auch die Universität Heidelberg und das Forschungszentrum Karlsruhe mit einzubeziehen.

---

<sup>7</sup> Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Wissenschaftsrat: Stellungnahmen und Empfehlungen 2000, Bd. 1, S. 229 ff., Köln 2001.

Der Wissenschaftsrat unterstreicht die an beiden Standorten vorliegenden Erfahrungen in der Zusammenarbeit mit industriellen Nutzern und dem Transfer zwischen Wissenschaft und Wirtschaft. Besonders am Standort Stuttgart liegen hierzu sehr gute Bedingungen vor. Der Wissenschaftsrat begrüßt die finanzielle Beteiligung der Industrie an dem geplanten Höchstleistungsrechner, hält es aber für erforderlich, die finanzielle Beteiligung an die von der Industrie in Anspruch genommenen Rechenkapazitäten anzupassen.

### **C. Zusammenfassung**

Das Land Baden-Württemberg hat zum 32. Rahmenplan einen gemeinsam von den Universitäten in Karlsruhe und Stuttgart getragenen Höchstleistungsrechner als Beschaffungsvorhaben in Kategorie I angemeldet. Geplant ist die Beschaffung eines Rechnersystems, dessen Bausteine eng gekoppelte SMP-Knoten sind. Das System soll als verteiltes System an zwei Standorten (Karlsruhe und Stuttgart) aufgestellt werden. Auf der Basis der im Land Baden-Württemberg existierenden Netzwerkinfrastruktur sollen die beiden Komponenten direkt gekoppelt werden.

Der Wissenschaftsrat begrüßt die Initiative des Landes Baden-Württemberg, hat jedoch technisch wie wissenschaftspolitisch begründete Zweifel, ob die Bereitstellung höchster Rechenleistung mit dem gekoppelten Rechnersystem zwischen Stuttgart und Karlsruhe erreichbar ist. Er spricht sich stattdessen für die Installation eines Höchstleistungsrechners in Stuttgart und eines Hochleistungsrechners in Karlsruhe aus. Mit der Installation eines Höchstleistungsrechners in Stuttgart wäre die Voraussetzung geschaffen, die größt mögliche Rechenleistung Nutzern bundesweit unabhängig von deren geographischen Voraussetzungen und institutionellen Zugehörigkeiten zur Verfügung zu stellen. Mit der Beschaffung eines Hochleistungsrechners in Karlsruhe könnte der landesweite Bedarf an hoher Rechenleistung abgedeckt werden. Zur Stärkung des wissenschaftlichen Umfeld eines Höchstleistungsrechners sollte am Standort Karlsruhe das Angebot an Betreuungs- und Entwicklungsleistungen weiter ausgebaut werden. Hierzu ist eine Aufstockung der bestehenden Personalkapazitäten des dortigen Kompetenzzentrums erforderlich.