



Empfehlung zur  
Einrichtung europäischer  
Höchstleistungsrechner

## **Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner**

Zusammenfassung	3
Vorbemerkung	4
A. Rechenbedarf ausgewählter Fachgebiete	5
B. Verfügbare und geplante Rechenleistung	27
C. Europäische Höchstleistungsrechner	31
D. Anhang	37
E. Glossar	40

## **Zusammenfassung**

Der Wissenschaftsrat hat in seiner Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern<sup>1)</sup> darauf hingewiesen, dass zur Sicherung der wissenschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit ein fortlaufender qualitativer und quantitativer Ausbau der Rechnerversorgung unverzichtbar ist. In Deutschland erfolgt entsprechend der Empfehlung der Ausbau von Höchstleistungsrechnern in der zeitlichen Abfolge von zwei bis drei Jahren, so dass jeweils mindestens ein System der höchsten Leistungsklasse zur Verfügung steht. Diese Beschaffungsstrategie hat bisher zu einer angemessenen Versorgung mit Höchstleistungsrechenkapazitäten in Deutschland geführt. Um künftig mit Japan, USA und neuerdings auch China wettbewerbsfähig zu werden, sind Höchstleistungsrechner der höchsten Leistungsklasse notwendig.

Zu den numerik-unterstützten Wissenschaftszweigen, die auf Höchstleistungsrechner der höchsten Leistungsklasse angewiesen sind, zählen die Klima- und Erdsystemforschung, Nanostrukturphysik, Festkörperphysik, Strömungsmechanik, Astrophysik, Quantenchromodynamik, Materialforschung, Chemie, Molekulardynamik, Polymerforschung und Biophysik. Der Bedarf dieser Fachgebiete nach Rechenkapazität ist wegen der ständig fortschreitenden Verfeinerung mathematischer Modelle und der zunehmenden Komplexität von Simulationen unbegrenzt. Die fortlaufende Verbesserung der Rechnerleistung hat eine Bedarfssteigerung zur Folge, die ihrerseits neue wissenschaftliche Fragestellungen ermöglicht und damit neuen Rechenbedarf initiiert. In allen diesen Fachgebieten gibt es Anwendungen, die einen Bedarf an Rechenleistung fordern, der selbst weltweit durch die heutigen leistungsstärksten Rechnersysteme nicht befriedigt werden kann. Um diese Fachgebiete angemessen mit Rechenleistung versorgen zu können, empfiehlt der Wissenschaftsrat, Höchstleistungsrechner der höchsten Leistungsklasse auf europäischer Ebene einzurichten. Die Finanzierung solcher Rechner kann nicht allein von einem Land getragen werden, sondern muss europäisch erfolgen.

---

<sup>1)</sup> Wissenschaftsrat: Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, Köln 2001, Bd. I, S. 229-262.

## **Vorbemerkung**

Die vorliegende Empfehlung wurde vom „Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ des Wissenschaftsrates erarbeitet. Der Koordinierungsausschuss ist für die strategische Beratung des Bundes und der Länder in der Frage der Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechnern zuständig. Hierzu erarbeitet der Ausschuss Empfehlungen zu Investitionsplanungen und führt Anhörungen zu zentralen Fragen im Zusammenhang mit der Nutzung und dem Betrieb von Höchstleistungsrechnern durch.

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

Der Wissenschaftsrat hat die Empfehlung am 12. November 2004 in Hamburg verabschiedet.

## **A. Rechenbedarf ausgewählter Fachgebiete**

Die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern für Wissenschaft und Forschung ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb. Höchstleistungsrechner werden in Wissenschaft und Industrie als forschungsunterstützende Instrumente insbesondere dort eingesetzt, wo reale Experimente nicht möglich, zu zeit- aufwendig oder zu teuer sind und wo Rechnersysteme niedrigerer Leistungsstufen nicht ausreichen. Sie stellen ein unverzichtbares Werkzeug für die Spitzenforschung dar. Mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern wurden in den vergangenen Jahren in zahlreichen Hochschulen und Forschungseinrichtungen wissenschaftliche Durchbrüche erzielt, die auf Rechnern niedrigerer Leistungsklassen nicht möglich gewesen wären. Die Bereitstellung der entsprechenden Infrastruktur ist eine Aufgabe der Forschungsförderung mit öffentlichen Mitteln. Ein offener Zugang unabhängig von Standort und der institutionellen Zugehörigkeit der Nutzer ist notwendig.

Für künftige Anwendungen einzelner Fachgebiete ist die derzeit technisch verfügbare Rechenkapazität jedoch nicht ausreichend, um die anstehenden Aufgaben zu lösen. Der Bedarf einzelner Fachgebiete an Rechenkapazität ist wegen der ständig fortschreitenden Verfeinerung mathematischer Modelle und der zunehmenden Komplexität von Simulationen unbegrenzt. Zudem nimmt die Zahl der Anwender und Fachgebiete stetig zu.

Bei den Anforderungen an Rechenkapazität muss zwischen Capacity- und Capability-Computing unterschieden werden. Beim Capacity-Computing handelt es sich um einen hohen Durchsatz sehr vieler Programmläufe kleineren oder mittleren Umfangs. Diese Art des Rechnens kann durch die Bereitstellung von entsprechender Rechenkapazität auf regionaler oder nationaler Ebene bzw. durch die künftige Nutzung von Methoden des Grid-Computings verhältnismäßig kostengünstig gelöst werden.

Beim Capability-Computing handelt es sich um die Durchführung von Simulationen mit großen Programmen. Diese Art der Simulationen stellt andere Anforderungen an die Kapazität eines Rechners als das Capacity-Computing. Problemstellungen im Bereich des Capability-Computings erfordern sehr hohe Rechenleistungen. Mit Ca-

pability-Computing werden Rechnungen auf Höchstleistungsrechnern bezeichnet, die einen bedeutenden Anteil der Prozessoren eines großen Parallelrechners konzentriert nutzen. Diese Rechnungen benötigen große Mengen an Speicherkapazitäten. Die für das Capability-Computing notwendigen hohen Kommunikationsbandbreiten und geringen Latenzzeiten sind technisch nur mit einem einzelnen Parallelrechner und nicht mit verteilten Rechnern zu erreichen. Für diese Klasse von Problemen ist der Aufbau europaweiter Höchstleistungsrechenkapazität notwendig.

Im Folgenden werden Beispiele derzeitiger und zukünftiger Forschungsarbeiten skizziert, für die die Errichtung eines Höchstleistungsrechners auf europäischer Ebene zwingend erforderlich ist.

### ***Klima- und Erdsystemforschung***

Im Bereich der Klima- und Erdsystemforschung wird die Nachfrage nach Höchstleistungsrechenleistungen über die heutigen Kapazitäten hinaus aus mehreren Gründen sehr rasch ansteigen. Zum einen wurde erkannt, dass ein Verständnis des „globalen Wandels“ schlechthin einen sehr viel breiteren Problembereich umfasst als nur den des „Klimawandels“. Die wissenschaftlichen Herausforderungen der nahen Zukunft liegen daher in der Entwicklung komplexer Erdsystemmodelle, womit frühere, rein physikalische Klimamodelle zu sehr viel umfassenderen Multi-Komponenten-Modellen auszubauen sind. Diese müssen z. B. biogeochemische Prozesse in den Ozeanen, in der Atmosphäre und an den Landoberflächen berücksichtigen. Zusätzlich gibt es ein wachsendes Interesse an Modellen, die die anthropogene Komponente des Erdsystems berücksichtigen. Solche Modelle werden daher strukturell viel komplexer werden als heute gebräuchliche Modelle – mit Konsequenzen für typische Anforderungen an die verfügbaren Rechenleistungen.

Des Weiteren werden Erdsystemmodelle der nächsten Generation weit höhere räumliche und zeitliche Auflösungen benötigen als heutige Modelle. So werden heute bereits räumliche Modellauflösungen von unter 10 km und zeitliche Auflösungen von unter 20 min für die Atmosphärenkomponente angestrebt. Eine Halbierung der aufgelösten Skalen geht in etwa mit einer Verachtfachung der benötigten Rechenzeit einher. Eine höhere Auflösung verspricht eine Reduktion der Modellierungsfehler, weil sie die Simulati-

on kleinskaliger Prozesse auf der Basis physikalischer Grundprinzipien erlaubt. Diese müssen in heutigen Modellen durch mehr oder weniger grobe Parametrisierungen angenähert werden. Gleichzeitig ergibt eine höhere Auflösung detailliertere räumlich-zeitliche Informationen und stellt damit eine verbesserte Entscheidungshilfe bereit, z. B. im Kontext der wirtschaftlichen Bodennutzung oder für praktische Anwendungen in den Versicherungs- und Rückversicherungsindustrien.

Solche hoch auflösenden Modelle benötigen Rechnersysteme, die neben Spitzenleistung in spezialisierten Tests eine hohe Sustainleistung liefern. Deren Prozessoren müssen so gekoppelt sein, dass sie ihre Daten mit hoher Bandbreite und geringer Latenzzeit austauschen können. Die notwendige Latenzzeit kann in einem großräumigen Netzwerk von Rechnern nicht erreicht werden. Deshalb ist es ohne erheblichen Leistungsverlust nicht möglich, ein einzelnes solches Modell auf mehrere räumlich von einander getrennte Rechner zu verteilen.

Die Validierung von Erdsystemmodellen muss sich auf die gesamte Bandbreite von verfügbaren Beobachtungsdaten abstützen, da ein systematisches Experimentieren mit dem Erdsystem zur Gewinnung von Messdaten nicht möglich ist. Im Zusammenhang mit Untersuchungen zum globalen Klimawandels kooperieren Klimamodellierer hierzu intensiv mit Paläoklimaforschern, um ein mechanistisches Verständnis von der Funktionsweise des Klimasystems und von früheren starken Veränderungen im Klimasystem zu entwickeln. Aufgrund der enormen Zeitspannen, die hierbei modelliert werden müssen, sind solche Studien heute nur mit relativ grobkörnigen, preiswerten, aber auch stark vereinfachten Modellen mittlerer Komplexität möglich. Diese vermitteln zwar wichtige Einsichten, können jedoch keinen Einblick in viele der räumlich-zeitlichen Skalen ermöglichen, die für das Systemverständnis von Interesse sind. Sogar bei moderater Auflösung würden die damit verbundenen Langzeitsimulationen mit den heutigen Rechenressourcen nicht zu realisieren sein. Will man also die höher auflösenden Modelle gegen solche Langfristdaten abgleichen, sind beträchtliche Steigerungen des Zeithorizonts der Simulationen erforderlich, die direkt proportional in die erforderliche Rechenzeit eingehen.

Es gibt eine große Nachfrage seitens politischer Entscheidungsträger, noch vorhandene Modellierungsunsicherheiten weiter zu reduzieren. Eine erfolgsversprechende Strategie, diesen Anforderungen nachzukommen, ist die Durchführung einer großen Zahl von Simulationen, die sich voneinander durch systematische Variation unsicherer Modellparameter unterscheiden. In einer verwandten Strategie vergleicht man Modellergebnisse, die mit konkurrierenden Rechenodes, angewandt auf dieselben Situationen der Lebenswirklichkeit, gewonnen werden. Moderne statistische Methoden erlauben es dann, durch gezielten Vergleich die im Modellensemble noch vorhandenen Unsicherheiten zu quantifizieren, und sie stellen Techniken bereit, mit denen erzielte Verbesserungen quantifiziert werden können. Der parallele Betrieb eines oder mehrerer Modelle in solchen Ensembles bedingt Rechenzeitanforderungen proportional zur Anzahl der Ensemblemitglieder. Hierbei ist ein Ensemble von zehn Realisierungen eine Minimalanforderung, während erst 100 bis 1.000 Realisierungen eine akzeptable Genauigkeit bei statistischen Auswertungen liefern können.

Zur zeitnahen Durchführung von Modellsimulationen wird zukünftig eine Rechenleistung von 15 Teraflop/s Sustainleistung und mehr notwendig sein. Ein Rechner für Klimamodelle mit der beschriebenen Sustainleistung muss dafür über eine Spitzenleistung von 50 bis 150 Teraflop/s verfügen.

### ***Nanostrukturphysik***

Das wissenschaftliche Rechnen auf Höchstleistungsrechnern hat sich in den letzten 15 Jahren als wichtige Säule der Festkörper-, Oberflächen- und Nanostrukturphysik etabliert. Durch die erreichte Rechnerleistung wurde quantenmechanischen, elektronenstrukturbasierten Theorien, die eine realistische Beschreibung und Vorhersage der mikroskopischen Eigenschaften realer Materialsysteme ohne empirischen Input ermöglichen, zur Anwendung und zum Durchbruch verholfen. Die wichtigste dieser Theorien ist die Dichtefunktionaltheorie, die mittels ab initio Methoden gelöst wird. Dazu wird das Vielteilchenproblem wechselwirkender Elektronen in Festkörpern auf ein Eielektronenproblem in einem selbstkonsistenten Potential abgebildet. Dieses Potential wird schrittweise berechnet. Abhängig von der Punkt- und Translations-symmetrie des Festkörpers oder der Oberfläche müssen in jedem Schritt bis zu 1.000 Eigenwertprobleme gelöst werden. Die Rechenzeit jedes dieser Probleme ska-



liert mit der Zahl der Atome in der Einheitszelle des Festkörpers. Die Rechenzeit steigt linear bis kubisch mit der Zahl der Atome. Die Rechnung muss für jeden äußeren Parameter, z. B. für jede neue Einstellung der Magnetisierung, wiederholt werden.

Auf derzeitigen Höchstleistungsrechnern sind statische Elektronenstrukturrechnungen für 200 bis 400 Atome pro Einheitszelle und ab initio molekulardynamische Rechnungen für Simulationszeiten von bis zu 10 Pikosekunden möglich. Dies erlaubt die Beschreibung komplexer Oberflächen und ihrer Rekonstruktionen, die Bestimmung von Reaktionsbarrieren für die Diffusion oder die Analyse chemischer Reaktionen adsorbierter Moleküle auf metallischen, halbleitenden und oxidischen Oberflächen.

Aufbauend auf der Dichtefunktionaltheorie wurde eine Theorie zur Berechnung der Selbstenergie von Quasiteilchen in realen Festkörpern entwickelt. Diese Theorie ermöglicht die Berechnung der Lebensdauern von Elektronen oder die Berechnung von Bandlücken in Halbleitern. Im Vergleich zur Dichtefunktionaltheorie erhöhen sich Speicherplatzbedarf und Rechenzeit etwa um einen Faktor 100, da die Selbstenergie frequenzabhängig und nichtlokal berechnet werden muss. Deshalb sind bisher nur Volumensysteme mit etwa 10 Atomen pro Einheitszelle behandelt worden. Diese Theorie wird erst in den kommenden Jahren erfolgreich sein, wenn leistungsstärkere Höchstleistungsrechner zur Verfügung stehen.

Rechnungen für magnetische Systeme können, verglichen mit der Dichtefunktionaltheorie um den Faktor 200 bis 500 aufwendiger sein. So war es erst im Jahr 2001 möglich, eine nichtkollineare magnetische Struktur, das heißt eine Struktur, in der sich die Richtung der Magnetisierungsachse von Atom zu Atom ändert, auf einer Oberfläche zu berechnen. Die für die Berechnung eines komplexen magnetischen Systems mit etwa 50 Atomen pro Einheitszelle benötigte Zeit liegt in der Größenordnung von 100.000 CPU Stunden. Deshalb gibt es bis heute keine ab initio molekulardynamischen Rechnungen für magnetische Systeme unter Berücksichtigung ihrer Magnetisierungsdynamik, obwohl einzigartige experimentelle Ergebnisse vorliegen

und das Forschungsgebiet von herausragender Bedeutung für die Entwicklung magnetischer Speichermedien ist.

Die quantitative Elektronentheorie ermöglicht die direkte theoretische Analyse von Experimenten der Festkörper- und Oberflächenphysik. Ein erfolgreiches Beispiel aus der Oberflächenphysik bietet die Simulation atomar auflösenden, spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie. Weniger erfolgreich konnten experimentelle Ergebnisse der atomar auflösenden Rasterkraftmikroskopie simuliert werden, da die Simulation und Analyse der Rasterkraftmikroskopieaufnahme einer einfachen Halbleiteroberfläche eine Gesamtrechenzeit von etwa 100.000 CPU Stunden benötigt. Nur mit Capability-Computern deutlich gesteigerter Leistungsfähigkeit können solche und viele andere Probleme erfolgreich in Angriff genommen werden.

Ein wesentlicher Trend in der Nanostrukturphysik ist die Verkleinerung bekannter Materialien wie des Halbleiters Silizium, aber auch vollkommen neuer Materialien. Zur Beschreibung nanoskaliger Strukturen wächst die Bedeutung quantenmechanischer Methoden. Allerdings sind vom Gesichtspunkt der Quantenmechanik aus die Systeme groß und komplex. Die Komplexität dieser Systeme ist zweifach: Zum einen handelt es sich um strukturell komplexe Systeme mit vielen Atomen pro Einheitszelle, zum anderen nimmt die Bedeutung der Wechselwirkung zwischen den Elektronen (Elektronenkorrelation) zu. Deshalb wird ein wesentlicher Aspekt der kommenden Jahre die Berücksichtigung stark korrelierter Elektronen mit Methoden sein, die über die Dichtefunktionaltheorie hinausgehen. Diese Methoden verbinden die in der Vielteilchenphysik entwickelte „dynamical mean field theory“ mit der Dichtefunktionaltheorie und weiteren Methoden zu einer quantitativen und materialspezifischen Beschreibung stark korrelierter Elektronensysteme.

Viele weitere Fragestellungen im Bereich der Festkörper-, Oberflächen- und Nanostrukturphysik können bisher aus Mangel an Rechenkapazität nicht oder nur unvollständig in Angriff genommen wurden. Dazu zählen die zunehmend komplexer werdenden Systeme wie Kohlenstoffnanoröhrchen gefüllt mit magnetischen Materialien oder molekulare Magnete, für die in einer zukünftigen Elektronik und Speichertechnologie eine bedeutende Rolle erwartet wird.

### ***Festkörperphysik***

Generell erlangt die Theorie der materialorientierten Festkörperphysik immer größere Bedeutung. Moderne Festkörpermateriale weisen eine Vielzahl neuartiger Eigenschaften auf, die schon heute vielfältige Anwendungen ermöglichen oder in Zukunft erwarten lassen. Ein Beispiel sind die Hochtemperatursupraleiter, deren mögliche Anwendungen von der Energiespeicherung über ultraschnelle elektronische Chips bis hin zur Computertomographie in der Medizin reichen. Supraleiter leiten den elektrischen Strom unterhalb ihrer so genannten Sprungtemperatur verlustfrei. Dabei sind die Elektronen zu Cooper-Paaren gebunden.

Hochtemperatursupraleiter haben hohe Sprungtemperaturen oberhalb der Temperatur des flüssigen Stickstoffs, der in der Technik und in der Medizin routinemäßig als Kühlmittel eingesetzt wird. Die theoretische Festkörper- und Materialphysik versucht, mit mikroskopischen Modellen bekannte Materialien zu verstehen und neue maßzuschneidern. Im Wechselspiel mit der experimentellen Physik entwickelt sie neue Wege zur Synthese von Funktionswerkstoffen und zeigt neue Möglichkeiten für deren Anwendung auf. Im Beispiel der Hochtemperatursupraleiter geht es darum, ein grundlegendes Verständnis für die hohen Sprungtemperaturen zu entwickeln sowie die vorherrschende empirische Suche nach noch höheren Sprungtemperaturen und weiteren verbesserten Materialeigenschaften durch genaue Voraussagen zu ersetzen.

Unter Berücksichtigung experimenteller Ergebnisse werden mikroskopische Modelle aufgestellt und auf Höchstleistungsrechnern implementiert. Eine besondere Hürde stellt die Berücksichtigung der Wechselwirkung der unvorstellbar hohen Zahl von Elektronen (Größenordnung  $10^{23}$  pro Kubikzentimeter) dar. Die hohen Sprungtemperaturen legen nahe, dass nicht, wie die für konventionelle Supraleiter allgemein akzeptiert, Gitterschwingungen die Elektronen zu Cooper-Paaren zusammenbinden. Tatsächlich konnte mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern in den letzten Jahren gezeigt werden, dass der Mechanismus der Paarbildung rein elektronischer Natur ist beziehungsweise auf dem Spin der Elektronen beruht. So lassen sich die ungewöhnlich hohen Sprungtemperaturen der Hochtemperatursupraleiter prinzipiell verstehen.

Eine zweite entscheidende Herausforderung konnte noch nicht gelöst werden. Bisher ist ungeklärt, wie der makroskopische supraleitende Strom von beispielsweise  $10^{23}$  Cooper-Paaren in einem Draht aus einem Hochtemperatursupraleiter zustande kommt. Die Lösung des Problems erfordert Simulationen für sehr große Modellsysteme. Zur Lösung wurden „Finite-Size-Scaling-Verfahren“ entwickelt, die auf Cluster-simulationen, insbesondere auf Quanten-Monte-Carlo Simulationen, aufbauen. Hierbei werden die Grenzen der gegenwärtig installierten Höchstleistungsrechner erreicht, da das sogenannte Fermion-Vorzeichen-Problem der Quanten-Monte-Carlo Simulationen exponentiell mit der Größe des simulierten Modells wächst. Dieses Problem entsteht generell bei der Simulation des Verhaltens von Elektronen (Fermionen) dadurch, dass die Wellenfunktion für Fermionen antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung von zwei Teilchen sein muss. Momentan werden verschiedene neuere Techniken (Quanten-Monte-Carlo Simulationen in Verbindung mit Renormierungsgruppen Techniken und in Verbindung mit Dynamical Mean Field Theory-Verfahren) getestet, um hier dennoch zu einem mikroskopischen Verständnis der Paarungsmechanismen und der Supraleitung zu kommen. Dieses Verständnis ist essentiell, um die immer noch im Wesentlichen empirische Suche nach verbesserten Materialeigenschaften durch ein Voraussagen erlaubendes Grundlagenverständnis zu ersetzen. Diese Berechnungen sind mit der momentan zur Verfügung stehenden Generation der Höchstleistungsrechner noch nicht durchführbar. Die erfolgreiche Fortführung dieser Arbeiten in Europa ist abhängig von einem weiteren Ausbau der Rechenkapazität.

### ***Strömungsmechanik***

Die numerische Simulation von Strömungsvorgängen erlangt in der Forschung eine immer größere Bedeutung. Anwendungen finden sich in nahezu allen Bereichen von Naturwissenschaft und Technik, z. B. im Automobilbau, Flugzeug- und Turbinenbau, in der Umwelttechnik oder in der Wetter- und Klimavorhersage. Die dabei auftretenden Strömungsvorgänge sind in der Regel sehr komplex. Zum einen sind sie fast immer turbulent, d.h. es treten sehr kleine räumliche und sehr kurze zeitliche Strukturen auf. Oft erhöhen gleichzeitig ablaufende chemische Reaktionen (Verbrennungen), Phasenübergänge, Wärmetransport oder Strukturbewegungen (d. h. wenn sich

ein Festkörper in einer Strömung bewegt und damit Einfluss auf die Strömung nimmt, wie z. B. ein schwingender Flugzeugtragflügel) die Komplexität weiter.

Entsprechend ergibt sich für die numerische Simulation ein extrem hoher Bedarf an Rechenkapazität. Dies lässt sich an Hand der Reynoldszahl ( $Re$ ) erläutern, der wichtigsten Kenngröße der Strömungsmechanik. In diese Kenngröße gehen die charakteristischen Geschwindigkeiten des Problems proportional und die Zähigkeit der beteiligten Fluide umgekehrt proportional ein. Der Rechenaufwand steigt stark, etwa kubisch, mit der Reynoldszahl an. Während man heutzutage z. B. die Strömung in einer Miniaturpumpe (bei  $Re = 100$ ) in wenigen Sekunden auf einem handelsüblichen PC berechnen kann, würde die Rechenzeit für die Umströmung eines Flugzeugs (bei  $Re = 10^8$ ) auf den derzeit weltweit leistungsfähigsten Rechnern eine Rechenzeit von über 100 Milliarden Jahren erfordern. Daraus lässt sich ableiten, dass der Bedarf an Rechenkapazität für Strömungssimulationen nach oben hin unbegrenzt ist.

Um Berechnungen für praxisrelevante Probleme, die fast immer sehr hohe Reynoldszahlen aufweisen, überhaupt durchführen zu können, ist es notwendig, die Komplexität der Probleme vorab durch vereinfachende Modellannahmen zu reduzieren. Solche Vereinfachungen (z. B. Turbulenzmodelle, Chemiemodelle) sind im Hinblick auf die Qualität der Berechnungsergebnisse allerdings nur bis zu einem gewissen Grade möglich, so dass auch die reduzierten Probleme noch immer durch eine hohe Komplexität gekennzeichnet sind. Zur Entwicklung und Validierung vereinfachter Modelle sind detaillierte Simulationen mit einem enormen Bedarf an Höchstleistungsrechenkapazität unabdingbar.

Die Verfügbarkeit einer adäquaten Höchstleistungsrechenkapazität für viele aktuelle Problemstellungen aus der Strömungsmechanik ist eine Voraussetzung, um international konkurrenzfähige Forschung und Entwicklung betreiben zu können. Dies ist auch vor dem Hintergrund zu sehen, dass in den vergangenen Jahren die Forschungsarbeiten hinsichtlich der Methoden des wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens intensiv vorangetrieben wurden, so dass heute hoch entwickelte, leistungsfähige Verfahren zur Strömungsberechnung auf Höchstleistungsrechnern zur Verfügung stehen.

## ***Astrophysik***

In der Astrophysik und der Gravitationsphysik ist in den nächsten Jahren ein großer Bedarf an Höchstleistungsrechnerkapazität zu erwarten. Zurzeit werden weltweit mit einem sehr hohen Förderaufwand Laserinterferometer als Gravitationswellendetektoren gebaut. Trotz einer relativen Empfindlichkeit von  $10^{-21}$  können Signale nur aus dem Rauschen extrahiert werden, wenn die Signalform bekannt ist. Die stärksten Quellen, die wahrscheinlich als erstes entdeckt werden, sind zwei verschmelzende Neutronensterne oder zwei verschmelzende Schwarze Löcher. Die Berechnung der genauen Signalform der abgestrahlten Gravitationswellen erfordert die numerische Lösung der dreidimensionalen, zeitabhängigen Einsteinschen Feldgleichungen – ein mathematisch und numerisch extrem anspruchsvolles Problem, an dem weltweit gearbeitet wird.

Ein weiteres astrophysikalisches Problem mit enormen Anforderungen an Rechen- und Speicherkapazität ist die numerische Berechnung der zeitlichen Entwicklung der großräumigen Strukturen im Kosmos. Hierzu muss die intrinsische Entwicklung von Milliarden von Galaxien mit ihrer gegenseitigen Wechselwirkung unter dem Einfluss der Dunklen Materie numerisch simuliert werden. Weitere Probleme in der numerischen Astrophysik sind die Simulation von Akkretionsphänomenen auf kompakte Objekte wie Weiße Zwerge, Neutronensterne und Schwarze Löcher. Dabei handelt es sich um dreidimensionale, zeitabhängige Probleme aus der Hydrodynamik und Magnetohydrodynamik, die bei Berücksichtigung der Turbulenz auf keinem derzeit installierten Höchstleistungsrechner berechnet werden können.

Eine weitere Herausforderung für die numerische Astrophysik ist die Simulation der Entstehung von Sternen und Planeten. Hierzu muss der Gravitationskollaps von Molekülwolken auf sehr unterschiedlichen Längenskalen modelliert werden. Die Simulation der dabei auftretenden nichtlinearen und turbulenten Prozesse wird nur mit speziell optimierten Computerprogrammen und den Höchstleistungsrechnern der nächsten Generation gelingen.

Am Ende der Sternentwicklung stehen Supernova-Explosionen und Gammablitz, die energiereichsten Ereignisse im Universum. Bei diesen Prozessen entstehen die

schweren chemischen Elemente. Komplexe kern- und teilchenphysikalische Reaktionen und Transportprozesse bestimmen die hydrodynamischen und magnetohydrodynamischen Vorgänge, die zur Sternexplosion führen. Mehrdimensionale strahlungs-hydrodynamische Computersimulationen dieser Vorgänge gehören zu den anspruchsvollsten Herausforderungen der modernen Astrophysik und erfordern die leistungsfähigsten verfügbaren Höchstleistungsrechner. Nur mit dem Einsatz von Höchstleistungsrechnern der nächsten Generation wird es möglich sein, die beobachtbaren Eigenschaften, etwa Explosionsenergie und Elementverteilung, genauer vorherzusagen.

### ***Quantenchromodynamik***

Im Rahmen des Standardmodells der Elementarteilchenphysik wird die Quantenchromodynamik als die fundamentale Quanten-Feldtheorie der starken Wechselwirkung betrachtet. Sie beschreibt die Bausteine des Atomkerns – Protonen und Neutronen – als Bindungszustände von drei Elementarteilchen, der Quarks. Ähnlich wie sich Elektronen und Kerne zu Atomen zusammenfinden, indem sie sich über den Austausch von Photonen elektrisch anziehen, bindet die starke Wechselwirkung die Quarks über den Austausch von Gluonen aneinander. Analog zur elektrischen Ladung wird die Wechselwirkung durch die starke Ladung beschrieben.

Mit der Gitter-Quantenchromodynamik (Gitter-QCD) wird die Formulierung der QCD auf einem vierdimensionalen Raum-Zeit-Gitter sowie ihre numerisch-statistische Simulation auf Höchstleistungsrechnern bezeichnet. Bislang ist die Computersimulation das einzige bekannte Verfahren, die QCD in genau dem Energiebereich ab initio auszuwerten, in welchem der Übergang von Quarks und Gluonen aus dem Aggregatzustand eines Quark-Gluon-Plasmas zu Proton und Neutron stattfindet. Die starke Ladung nimmt bei diesen niedrigen Energien infolge von Quantenfluktuationen so große Werte an, dass Störungsrechnungen nicht mehr greifen. Genau in diesem Energiebereich treffen sich das gemeinsame Ziel der Kern- und Elementarteilchenphysik, die wahrnehmbaren Kernkräfte aus ersten Prinzipien der starken Wechselwirkung heraus zu verstehen. Ab initio bedeutet in diesem Zusammenhang, dass eine fundamentale Theorie wie die QCD ohne den Umweg über Modelle oder Appro-

ximationen ausgewertet werden muss, will man sie bestätigen und ihre volle Vorhersagekraft nutzen.

Die Gitter-QCD ist in den letzten zehn Jahren zu einem Instrument herangereift, das für die Lösung der Theorien der Kern- und Elementarteilchenphysik sowie für die Planung, Auswertung und Interpretation bestehender und zukünftiger Beschleuniger-Experimente unverzichtbar geworden ist. Nur mit Hilfe der Gitter-QCD können die fundamentalen Größen der Elementarteilchenphysik, wie die Ladung der starken Kraft oder die Massen der Quarks, berechnet werden. Neben der Vorhersage exotischer Materie, wie der so genannten Leimbälle oder Glueballs, oder der Bestimmung von Verteilungsfunktionen der Quark- und Gluonendichten wird in der Gitter-QCD das einzige Verfahren gesehen, das zu einem Verständnis der Eigenschaften des Quark-Gluon-Plasmas führen kann.

Die deutschen Gruppen führen mit Großbritannien und Italien in Europa sowie den USA und Japan die weltweiten Aktivitäten im Bereich der Gitter-QCD an. Der zukünftige Erfolg und Verbleib der europäischen Gruppen an der Weltspitze steht und fällt mit der Verfügbarkeit adäquater Rechner-Ressourcen.

Die Lösung der Gitter-QCD gilt mittlerweile als eines der Grand-Challenge-Probleme der Computational Science. Die Gitter-QCD ist ein Beispiel für den Einsatz von Capability Computing, denn die vierdimensionale Struktur des Problems erfordert einerseits einen außerordentlich hohen Bedarf an Rechenleistung, garantiert andererseits aber auch eine gute Skalierbarkeit. Dabei kann grob zwischen der stochastischen Simulation der Theorie, wo Ensembles von Gluon-Feld-Konfigurationen generiert werden, und der Auswertung dieser Felder zur Bestimmung der physikalischen Größen unterschieden werden.

Die Auswertung kann zu sehr komplexen Programmstrukturen führen, bei oft großen Eingabe-Ausgabe-Raten sowie Anforderungen an Datenhaltung und Rechenleistung. Die stochastische Simulation ist weitaus aufwendiger. Seit etwa zehn Jahren kann diese Aufgabe von anteilig genutzten Rechnersystemen allein nicht mehr geleistet



werden. Der mittelfristige Bedarf an Rechenleistung liegt bei etwa 15 Teraflop/s Susteinleistung.

Gerade auch mit Blick auf die Einbindung der Anwender-Gruppen in den neuen Mitgliedsstaaten der Europäischen Union würde die Idee von Höchstleistungsrechnern auf europäischer Ebene entscheidend zur Kooperation bei der stochastischen Simulation der QCD führen, ganz analog dem Betrieb von Beschleuniger-Großgeräten bei GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung), DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron) und CERN (Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire). Die Auswertungen ließen sich ideal auf nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnern durchführen, welche ohnehin im Grid-Verbund gekoppelt werden. Hier sei auf der Projekt DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications), das von der Europäischen Union finanziert wird, hingewiesen.<sup>2)</sup> Auf diese Weise könnten die europäischen Physiker die weltweite Führung auf dem Gebiet der Gitter-QCD übernehmen.

### ***Materialforschung***

Elektronenstrukturtheorie und Statistische Mechanik gehören zu den wichtigsten Grundpfeilern der Physik und Chemie. Mit ihnen können die Eigenschaften vieler einfacherer Materialien bereits quantitativ beschrieben und physikalisch verstanden werden. Das Verständnis der vielfältigen Phänomene in komplexeren, auch technisch wichtigen Materialien ist damit verglichen noch völlig unzureichend. Dies liegt im Wesentlichen an den viele Größenordnungen überspannenden Zeit- und Längenskalen, auf denen sich die entsprechenden Materialeigenschaften herausbilden und auf denen die Materialfunktionalitäten ablaufen. Dies betrifft unter anderem elektronische, magnetische und optische Bauelemente sowie Sensoren und auch Katalysatoren. Weitere Beispiele für den Forschungsbedarf auf dem Feld der Materialforschung sind die Oberflächenbeschichtung und die Reibung, z. B. im Hinblick auf Korrosionsschutz und Kratzfestigkeit. Auf all diesen Gebieten gibt es enge Bezüge zur Nanostrukturphysik.

---

<sup>2)</sup> Vgl. Abschnitt „EU-Projekt DEISA“ im Kapitel C „Europäische Höchstleistungsrechner“.

Das Feld der Elektronenstrukturtheorie mit der skizzierten materialwissenschaftlichen Zielrichtung befindet sich in einer sehr aktiven Phase, die durch schnelle Entwicklungen sowohl grundlegender Theorien als auch neuer Methoden, Algorithmen und Computerprogramme gekennzeichnet ist. Seit mehreren Jahren bildet sich eine Theorie zur atomistischen Modellierung komplexer Materialsysteme heraus, die auf der Grundlage der Quantenmechanik des wechselwirkenden Vielelektronenproblems (insbesondere Dichtefunktionaltheorie) konkrete Vorhersagen ermöglicht. Solche ab initio Theorien beinhalten die zuverlässige Beschreibung sowohl der beteiligten Elementarprozesse, wie das Brechen und den Aufbau chemischer Bindungen, als auch der Statistischen Mechanik des Zusammenwirkens der beteiligten Prozesse. Aktuelle und zukunftsfähige Anwendungsbereiche dafür sind Untersuchungen zur Aktivität von Katalysatoren und zum Kristallwachstum. Weitere bedeutende Forschungsthemen betreffen die Optoelektronik, elektronischen Transport sowie die Reibung. Entscheidend dabei ist die ab initio Berechnung angeregter elektronischer Zustände. Wichtige und noch weiter auszubauende Methoden dazu sind Selbstenergieverfahren (GW-Methoden mit Vertexkorrekturen bzw. Bethe-Salpeter-Gleichung zur Beschreibung von Korrelationseffekten), verbesserte Bandstrukturverfahren („exact change“-Potential) sowie zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie.

Wichtige Simulationen aus den Materialwissenschaften auf Höchstleistungsrechnern sind die Modellierung der Katalyse und des Kristallwachstums, beispielsweise des Wachstums von Nanostrukturen wie selbstorganisierten Halbleiter-Quantenpunkten auf Halbleiter-Oberflächen. Der Rechenaufwand eines typischen Katalyseprojekts läge heute, bezogen auf einen Prozessor mit circa 6 Gigaflop/s Spitzenleistung, bei circa 50 Jahren. Mit 25 Prozessoren werden also zwei Jahre benötigt. Das gilt aber nur für die Untersuchung eines modellartigen Katalysatormaterials mit einer einzigen einfachen chemischen Reaktion, z. B. für die Oxidation von Kohlenmonoxid auf einer oxidierten Ruthenium-Oberfläche. Rechnungen zu Halbleiter-Quantenpunkten, zu Materialien der Spintronik, zu Isolatoren mit hohen Dielektrizitätskonstanten („high-k-dielectrics“) für elektronische Bauelemente oder zur Stabilität biomolekularer Strukturen sind ähnlich rechenintensiv. Komplexere Prozesse an Oberflächen, beispielsweise die Umsetzung von Kohlenwasserstoffen an veränderlichen Metall-Oxid-Oberflächen oder an Nanopartikeln, können heute noch nicht berechnet werden.

Heute auch gleichfalls noch zu aufwendig ist die umfassende Berechnung dynamischer Prozesse, die beispielsweise die Transporteigenschaften von Halbleiterstrukturen bestimmen. Solche Untersuchungen erfordern eine zumindest 10-fach höhere, für umfassende Studien 100-fach höhere Rechenkapazität als zurzeit verfügbar.

Das nächste Ziel besteht darin, Untersuchungen mit einem Prozessor routinemäßig in einem Monat durchzuführen, die zurzeit noch 50 CPU-Jahre benötigen. Nur dann stehen die Ergebnisse ausreichend schnell zur Verfügung, um verschiedene Systeme vergleichen und Trends identifizieren zu können. Sowohl für die Grundlagenforschung als auch für die anwendungsbezogenen Materialwissenschaften würde dies einen großen Schritt nach vorne bedeuten. Die aufwendigsten Rechnungen gelten elektronenstrukturbasierten ab initio Simulationen der angesprochenen Probleme aus Physik und Chemie sowie kraftfeldbasierten Simulationen biomolekularer Prozesse.

### ***Theoretische Chemie***

Im Zentrum des Interesses der modernen Theoretischen Chemie steht die experimentfreie Untersuchung komplexer molekularer Systeme, d. h. wechselwirkender quantenmechanischer Vielteilchenprobleme. Zu diesen Systemen gehören große Moleküle und Cluster, aber auch Flüssigkeiten, Oberflächen, Chemiesorbate und Biomoleküle. Generell nimmt die Zahl der Fragestellungen zu Biomolekülen zu.

Ein effizientes Verfahren, um sowohl die Elektronenstruktur als auch die Dynamik molekularer Vielteilchensysteme auf atomistischer Skala zu berechnen, ist die von Car und Parrinello entwickelte Methode der ab initio Molekulardynamik. Zwei Erweiterungen sind die voll quantenmechanische ab initio Pfadintegralmethode sowie die nicht-adiabatische Verallgemeinerung. Die erste Erweiterung schließt wichtige quantenmechanische Effekte wie Tunneln und Nullpunktschwingungen ein, die insbesondere bei Wasserstoff essentiell sein können, wie z. B. bei Protonendiffusion. Die nichtadiabatische Erweiterung kann Kopplungen zwischen mehreren elektronischen Zuständen jenseits der Born-Oppenheimer-Näherung behandeln und erschließt somit die Photochemie, wie z. B. Strahlenschädigung der DNS.

Mit solchen ab initio Simulationen wird der Rechner im Verbund mit effizienten Algorithmen und Programmen zu einem virtuellen Labor, in dem chemische, physikalische und biochemische Prozesse auf der fundamentalen Ebene der Elektronen und Atomkerne dynamisch "in silico" ablaufen. Auf diese Weise können mit Standard Car-Parrinello-Methoden dynamische Prozesse seit etwa zehn Jahren ohne experimentelle Kenntnisse der Natur zeitaufgelöst studiert werden. Die aktuelle Entwicklung auf dem Gebiet der ab initio Simulationen wird von immer komplexeren Problemstellungen aus dem Bereich der Material-, Nano- und insbesondere Lebenswissenschaften dominiert.

Derartige fundamental in den Grundgesetzen der Physik und Chemie verankerte Simulationen erfordern einen beträchtlichen Ressourceneinsatz von Rechnern. So muss die quantenmechanische Wellenfunktion des Gesamtsystems aus Effizienzgründen permanent im Hauptspeicher verfügbar gehalten werden. Das verlangt unter Verwendung von Standard Car-Parrinello-Methoden bei heutigen Standardproblemen (ca. 100 schwere Atome) Hauptspeicher in der Größenordnung von 50 Gigabyte. Ein typischer Simulationsdurchlauf von ca. 10 Pikosekunden benötigt auf heutigen Rechnern mehrere CPU-Monate.

Der Rechen- und Speicherplatzaufwand steigt sehr stark mit der Systemgröße an: Der Weltrekord liegt bei einer 5 Pikosekunden Simulation einer Wasseroberfläche bestehend aus 250 Molekülen, wofür ein Rechner mit einer Spitzenleistung von 11 Teraflop/s über Monate eingesetzt wurde. Obwohl die Software aus Europa stammt, sind solche Rechnungen in Europa aufgrund fehlender Rechnerressourcen nicht durchführbar. Derartige Simulationen werden zukünftig Standardanwendungen sein, beispielsweise auf dem Rechner „Blue Gene/L“, so dass die „cutting edge“ Probleme dann im Bereich von 100 bis 500 Teraflop/s Spitzenleistung liegen werden. Damit wird es dann möglich sein, kleine Enzyme mit der Standard-Car-Parrinello Methoden zu behandeln, womit die Ära einer Quantenbiologie von dynamischen katalytischen Prozessen eröffnet wäre.

Für ab initio Pfadintegralsimulationen, bei denen auch die Atomkerne quantenmechanisch behandelt werden, steigt der Aufwand bezüglich Speicherplatz und Re-

chenzeit um ein bis zwei Größenordnungen relativ zur bisher diskutierten Standard-Car-Parrinello Methoden. Diese Rechnungen können jedoch aufgrund der mathematischen Struktur sehr gut hierarchisch parallelisiert werden. Bei nichtadiabatischen Car-Parrinello Simulationen steigt im Vergleich zu Standard-Car-Parrinello Methoden sowohl die Rechenzeit (Zeitschritt: Faktor 10 kleiner, Monte-Carlo Mittelung über ca. 10 bis 100 unabhängige molekulardynamische Trajektorien) um zwei bis drei Größenordnungen an. Somit wäre ein Spitzenbedarf von einem Petaflop/s für die parameterfreie Behandlung von nanokatalytischen und biochemischen Prozessen notwendig.

### ***Molekulardynamik***

In der klassischen Molekulardynamik werden die Wege (Trajektorien) aller Einzelpartikel eines Vielteilchensystems unter dem Einfluss wechselseitiger und äußerer Kräfte berechnet. Aus der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen erhält man die Trajektorien sämtlicher Teilchen und kann damit jede beliebige Observable bestimmen. In einem gewissen Sinne wird ein numerisches Experiment durchgeführt, bei dem aber im Gegensatz zum realen Experiment der Ablauf genau kontrollierbar ist. Da die grundlegenden Gleichungen der Physik direkt verwendet werden, ist es nicht notwendig, die zu untersuchenden Prozesse vorab vereinfachend zu modellieren. Die Molekulardynamik wird deshalb gerade dort eingesetzt, wo eine solche Modellierung gar nicht möglich ist.

Modelliert werden müssen allein die zugrunde liegenden Kraftgesetze. Für viele Systeme erweisen sich klassische effektive Wechselwirkungen als ausreichend. Damit können sehr große Systeme mit mehreren Millionen Teilchen simuliert werden. Für manche Zwecke, z. B. die Berücksichtigung chemischer Reaktionen, müssen die Elektronen allerdings quantenmechanisch mit ab-initio-molekulardynamischen Methoden beschrieben werden. Dies schränkt die auf heutigen Rechnern behandelbaren Systemgrößen erheblich ein.

Die Molekulardynamik ist eine universelle Methode mit einem sehr breiten Einsatzspektrum. Sie wird zur Untersuchung der Eigenschaften komplexer Festkörper und Polymere in den Materialwissenschaften, von Phasendiagrammen in der Verfahrens-

technik, der Struktur von Makromolekülen zur Wirkstoffoptimierung in der pharmazeutischen Chemie, der Faltung und Dynamik von Biomolekülen, des Schüttverhaltens von granularen Medien wie Mehl und Sand, von Schockwellen in Festkörpern, Flüssigkeiten und Gasen, der Bewegung der Galaxien im Kosmos und vielem anderem mehr verwendet. Das Verhalten derartiger Vielteilchensysteme ist sehr komplex und der analytischen Theorie wenig zugänglich. Dabei kann die Molekulardynamik insbesondere dazu dienen, die grundlegenden Prozesse im System aufzudecken sowie die Materialparameter zu liefern, die in weitergehende Modelle für ingenieurmäßige Rechnungen eingehen.

Simulationen auf dem Niveau einzelner Teilchen bedeuten einen erheblichen Rechenaufwand. Pro Zeitschritt und Teilchen werden mit modernen Prozessoren ca. 10 Mikrosekunden benötigt. Im atomaren Bereich muss zur genauen Abtastung der Atomschwingungen ein Zeitschritt von einer Femtosekunde angesetzt werden. Wenn die Bewegungen von 10 Millionen Teilchen für eine Nanosekunde berechnet werden sollen, bedeutet dies eine Simulationsdauer von  $10^8$  CPU-Sekunden, das sind circa 30.000 CPU-Stunden oder 1.200 CPU-Tage. Selbst für die vergleichsweise kurze Simulationszeit von einer Nanosekunde werden Höchstleistungsrechner der nächsten Generation benötigt. Tatsächlich sind solche Simulationen beispielsweise in den Materialwissenschaften unerlässlich, wenn mechanische Vorgänge wie die Rissausbreitung oder die Materialermüdung simuliert werden sollen.

### ***Soft Matter***

Die Forschung an weicher kondensierter Materie (soft matter) umfasst die Physik und Chemie vor allem synthetischer und biologischer Polymere, Kolloide, Membrane, sowie organisch-anorganischer Hybridsysteme. Klassische Kettenmoleküle, d.h. Polymere im engeren Sinne, bilden mittlerweile nur noch eine Untergruppe der weichen Materialien und dienen als Referenz für die Modellbildung.

Auf Grund der relativ geringen Energiedichte in diesen Materialien spielen thermische Fluktuationen eine entscheidende Rolle: Die Materialien sind „weich“. Die räumlich großen Moleküle können in ihrer Form (Konformation) stark fluktuieren. Das hat zur Folge, dass Prozesse auf der mikroskopisch atomaren beziehungsweise auf der

mesoskopischen Ebene in gleichem Maße zu ihren Eigenschaften beitragen. Zwischen den typischen Zeitskalen der lokalen Atombewegungen und der meso- bzw. makroskopischen Phänomene liegen oft zehn und mehr Dekaden. Wird die Rechenzeit für die molekulardynamische Simulation einer atomar aufgelösten Polymer-schmelze (z. B. Polystyrol) an Hand eines relativ kleinen Systems aus 100.000 Atomen und einer typischen Relaxationszeit von  $10^{-5}$  Sekunden abgeschätzt, so ergeben sich bei gängigen Prozessoren mehr als 3.000 Prozessorjahre. Damit wäre aber gerade einmal das Verhalten eines Systems während der Dauer einer Relaxationszeit simuliert. Fragen nach dem Verhalten unter Scherung (z. B. bei Extrusion wie der Herstellung von CDs im Spritzgussverfahren) oder bei verschiedenen Polymerisationsgraden verlangen viele Simulationen dieser Art. Deshalb können heute Simulationen der Dynamik von Polymerschmelzen nur auf einem stark idealisierten Niveau durchgeführt werden. Ähnliches gilt auch für die Simulation von einfachen Polyelektrolyten im impliziten Lösungsmittel (z. B. wird das Wasser nur als dielektrischer homogener Hintergrund berücksichtigt), für Mehrskalensimulationen von Systemen relativ kurzer Ketten oder für Studien zu Mehrkomponentensystemen. Andere wissenschaftlich interessante Fragestellungen sind noch komplexer und zeitaufwändiger. Trotz aller Beschränkungen sind in den letzten Jahren aber beeindruckende Fortschritte erzielt worden.

Die wünschenswerte ständige Begleitung experimenteller Untersuchungen durch Simulationen ist nur durch signifikante Steigerung der heute verfügbaren Rechnerleistung möglich. Die Lösung kann nicht nur in einer weiteren Parallelisierung liegen, da in vielen Fällen die Zeitentwicklung der Systeme verfolgt werden muss. Daher gibt es neben dem Bedarf an wesentlich leistungsstärkeren Höchstleistungsrechnern seit Jahren intensive Bemühungen, Simulationsmethoden zu entwickeln, mit denen die verschiedenen Längen- und Zeitskalen systematisch untereinander verbunden werden können (Multiskalensimulationen). Ein wirklicher Fortschritt ist nur dann möglich, wenn beide Entwicklungen Hand in Hand gehen. Beispiele sind die Berücksichtigung der lokalen Ionenwechselwirkungen und der Eigenschaften der expliziten Lösungsmittel (z. B. der molekularen Struktur des Wassers) bei Polyelektrolyten, zu denen fast alle Biopolymere zählen, die Dynamik realistischer Polymerschmelzen mit verzweigten Polymeren, das Phasenverhalten von Mehrkomponentensystemen oder

skalenübergreifende Rechnungen mit realistischer Dynamik und mit Berücksichtigung der Änderungen der Konformationen kleiner und später auch größerer Biopolymere.

Höchstleistungsrechner, die um Größenordnungen schneller als die heute verfügbaren sind, würden den Zugang zu wichtigen neuen Fragestellungen öffnen. Dazu gehören z. B. die Turbulenzunterdrückung in Flüssigkeiten durch Zugabe von Polymeren („turbulent drag reduction“), Membranfluktuationen und Membranfunktionen inklusive ihrer Wechselwirkung mit Membranproteinen und der realistischen Berücksichtigung des umgebenden Wassers, die Strukturbildung und Funktion von molekularen Aggregaten sowie der Zusammenhang der variablen Konformation von Makromolekülen mit funktionelle Gruppen (z. B. Chromophore bei fluoreszierenden Polymeren) und ihren elektronischen Eigenschaften. Die letzten Beispiele stehen in engem Bezug zu anderen Feldern der Computational Science, z. B. der Katalyseforschung, der Quantenchemie und der Strömungsmechanik. Um auf den genannten Gebieten konkurrenzfähig bleiben und an den beschriebenen Entwicklungen Teil haben zu können, ist eine um Größenordnungen höhere Rechnerleistung als heute und der Zugang dazu sowohl auf nationaler als auch auf internationaler Ebene unabdingbar.

### ***Biophysik (Life Science)***

Die Computersimulation der Dynamik von Biomolekülen beschreibt deren atomare Bewegung in der Regel durch numerisches Lösen der klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen aller beteiligten Atome. Auf diese Weise entsteht ein Film der funktionellen Abläufe, z. B. in einem Membranprotein. Ein typisches Simulationssystem umfasst gegenwärtig ein Protein, das in eine Lipidmembran eingebettet ist. Ein solcher Komplex besteht aus etwa 100.000 Atomen, deren gegenseitige  $5 \times 10^9$  interatomaren Wechselwirkungen aufgrund ihrer Langreichweitigkeit vollständig berücksichtigt werden müssen. Bei einer Integrationsschrittweite von typischerweise  $10^{-15}$  Sekunden werden  $2 \times 10^{17}$  Fließkommaoperationen benötigt, um die Dynamik des Systems über den relativ kurzen Zeitraum von einer Nanosekunde verfolgen zu können.



Angesichts der Tatsache, dass die meisten biochemischen Vorgänge auf sehr viel längeren Zeitskalen als auf einer Nanosekunde ablaufen – im Falle der Proteinfaltung etwa im Bereich von Mikrosekunden bis Sekunden – sind die meisten biologischen Fragestellungen wegen begrenzter verfügbarer Rechenleistung noch nicht beantwortbar. Insbesondere zuverlässige Simulationen von großen Systemen wie dem Ribosom (ca.  $2 \times 10^{16}$  Atome) und von Prozessen mit sehr langen Simulationszeiten wie der Proteinfaltung können nur mit Hilfe leistungsstärkerer Höchstleistungsrechner abgedeckt werden. Jede Zunahme an verfügbarer Rechenkapazität wird neue biologische Einsichten und Erkenntnisse über molekularbiologische Mechanismen und Prozesse mit potentiell pharmakologischer Bedeutung ermöglichen. Entsprechend ist für das Gebiet der computergestützten und theoretischen molekularen Biophysik das parallele Höchstleistungsrechnen ein zentrales Instrument und unverzichtbar.

Neben diesem Bedarf der konventionellen Molekulardynamik entsteht zusätzlicher Bedarf an Rechenzeit durch die zunehmende Verwendung von Methoden der Statistischen Mechanik („Ensemble-Molekulardynamik“), welche die parallele Berechnung einer großen Zahl von Simulations-Trajektorien erfordert, und durch den zunehmenden Bedarf an „First-principles“-Simulationen von Experimenten. Um diesen Bedarf zu decken, ist ein breites Spektrum von Höchstleistungsrechnern mit unterschiedlicher Gewichtung und Optimierung von Kommunikation und Rechenleistung erforderlich, etwa abgesteckt durch die „Thunder“-Installation am Lawrence Livermore National Laboratory einerseits und Blue Gene/L oder den Earth Simulator andererseits. Dem Capability-Rechnen kommt damit zentrale Bedeutung für die Biophysik und die Lebenswissenschaften in Europa zu.

Zu berücksichtigen ist auch das Bestreben, ausgehend von der Sequenz („human genome project“) über die Dynamik und Funktion von Biomolekülen deren Vernetzung stärker ins Zentrum zu rücken (systems biology) mit dem Ziel, ganze metabolische Funktionsnetzwerke quantitativ zu verstehen und so beispielsweise Medikamente besser und individueller dosieren zu können. Angesichts der großen Zahl beteiligter Proteine (beim Menschen ca. 28.000) werden Faltungssimulationen, welche heute nur mit erheblichem Aufwand (mehrere Monate Rechenzeit auf einem Höchst-

leistungsrechner) an Peptiden oder sehr kleinen Proteinen gelingen, im zukünftig routinemäßig in großer Zahl bewältigt werden müssen. Besondere Bedeutung kommt dem Verständnis der Enzymkatalyse zu, welche die Kombination von Kraftfeld-basierten mit quantenchemischen Codes erfordert und den Rechenleistungsbedarf um weitere zwei bis drei Größenordnungen erhöht.

## **B. Verfügbare und geplante Rechenleistung**

### ***Nationale Rechenleistung***

Unter den weltweit 500 leistungsfähigsten Hoch- und Höchstleistungsrechnern<sup>3)</sup> sind 35 Rechner in Deutschland installiert. Von diesen stehen den universitären und außeruniversitären Forschungseinrichtungen neun zur Verfügung, die übrigen 18 werden von Wirtschaftsunternehmen kommerziell betrieben und genutzt. Das Ranking der installierten Rechner in der TOP 500-Liste orientiert sich vor allem an der theoretischen Spitzenleistung und gibt insofern nur sehr beschränkt die real erzielbare Leistung (Sustainleistung) für wissenschaftliche Anwendungen wieder.

Der zurzeit leistungsstärkste Höchstleistungsrechner in Deutschland steht im John von Neumann-Institut für Computing des Forschungszentrums Jülich. Er hat eine Spitzenleistung von 8,9 Teraflop/s und wurde im Februar 2004 in Betrieb genommen. Auf der Top 500-Liste vom November 2004 belegt er Platz 30.

Im Frühjahr 2005 wird am High Performance Computing Center in Stuttgart ein Rechner mit einer Spitzenleistung von 11 Teraflop/s installiert werden. Das Land Bayern wird 2005 einen Rechner mit einer Spitzenleistung von 20 Teraflop/s im Neubau des Leibniz-Rechenzentrums in Garching errichten,<sup>4)</sup> der 2007 auf 40 Teraflop/s ausgebaut wird. Damit folgt der Aufbau von Höchstleistungsrechnern in Deutschland der Empfehlung des Wissenschaftsrates, in der zeitlichen Abfolge von zwei bis drei Jahren jeweils mindestens ein System der höchsten Leistungsklasse national zur Verfügung zu stellen.

Neben der reinen Hardware ist die Unterstützung der Anwender bei der Nutzung der Höchstleistungsrechner von großer Bedeutung. Diese Unterstützung entwickelte sich in Deutschland auf breiter Ebene. Das hierarchische Versorgungskonzept mit den drei Zentren Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, John von Neumann-Institut für Computing Jülich und Leibniz-Rechenzentrum Garching sowie mehreren Hochleis-

---

<sup>3)</sup> TOP 500 Supercomputer Sites: [www.top500.org](http://www.top500.org), Stand November 2004

<sup>4)</sup> Wissenschaftsrat: 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, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2002, Köln 2003, Bd. II, S. 83-102.

tungsrechenzentren, begleitet durch die Förderung von Kompetenznetzwerken, ist in Europa unerreicht. Dieser Entwicklungsstand ist ein Ergebnis der intensiven Förderung der Höchst- und Hochleistungsrechner in Deutschland. Die Informatikforschung in den Zentren und Universitäten hat die Basis für einen adäquaten Einsatz der Höchst- und Hochleistungsrechner geschaffen, und zwar durch interdisziplinäre Zusammenarbeit mit den Fachwissenschaften bei den Applikationen, durch die Entwicklung von auf diesen Rechnertyp zugeschnittenen Software und durch die Erforschung grundlegender Eigenschaften verschiedener Rechnerarchitekturen.

Auch im Vergleich zu den amerikanischen Forschungszentren wie z. B. die der National Science Foundation ist die deutsche Infrastruktur zur Applikationsunterstützung wettbewerbsfähig. Werden allerdings die durch das Department of Defense bzw. Department of Energy betriebenen Zentren<sup>5)</sup> mit berücksichtigt, so haben diese auf Grund ihrer Größe der Einrichtungen noch einen deutlichen Vorsprung, insbesondere bei Prototypentwicklungen im Datenmanagement und bei der Entwicklung von Algorithmen sowie bei der Konzeption neuer Paradigmen (z. B. Grid-Computing).

### ***Rechenleistung in Europa***

Von den weltweit 500 leistungsfähigsten Hoch- und Höchstleistungsrechnern stehen 128 in 12 verschiedenen europäischen Ländern – Deutschland (35 Rechner), Finnland (1), Frankreich (15), Großbritannien (42), Italien (15), Niederlande (5), Portugal (3), Russland (1), Schweden (4), Schweiz (3), Spanien (3) und Weißrussland (1). Von diesen Rechnern werden mindestens 35 im Rahmen von Wissenschaft und Forschung genutzt.

Im europäischen Vergleich der Rechenleistung der Hoch- und Höchstleistungssysteme nimmt Deutschland sowohl im Hinblick auf die leistungsstärksten Systeme als auch im Hinblick auf die akkumulierte Leistung der Systeme seit vielen Jahren zusammen mit Großbritannien Spitzenpositionen ein. Der schnellste Rechner in Großbritannien und steht auf Platz 11 der weltweit leistungsfähigsten Höchstleistungsrechner. Ein weiterer Rechner in Großbritannien befindet sich unter den 20

---

<sup>5)</sup> Z. B. Los Alamos National Laboratory, Lawrence Livermore National Laboratory, National Energy Research Scientific Computing Center.

schnellsten Rechnern. Deutschland belegt mit der Installation am Forschungszentrum Jülich im Februar 2004 Platz 30 unter den TOP 500.

In 2007 soll in Großbritannien der Höchstleistungsrechner HECToR (High End Computing Terascale Resources) mit einer Spitzenleistung von 100 Teraflop/s installiert werden. Die weiteren Ziele seien eine Verdopplung der Rechnerleistung auf 200 Teraflop/s bis zum Jahr 2008 und anschließend auf 400 Teraflop/s bis zum Jahr 2010.

Der derzeit leistungsfähigste europäische Höchstleistungsrechner wurde im Oktober 2004 am Nationalen Zentrum für Supercomputer an der Universität Barcelona installiert. Er hat eine Spitzenleistung von 31,3 Teraflop/s und liegt in der Top 500-Liste auf Platz 4. Die Kosten belaufen sich auf 70 Mio. Euro.

### ***Internationale Rechenleistung***

Im weltweiten Vergleich kann festgestellt werden, dass in den USA und in Japan deutlich leistungsfähigere Systeme installiert wurden (Anhang 1). In beiden Ländern hat dabei die Unterstützung der heimischen Computerindustrie eine entscheidende Rolle gespielt. In den USA war die Nutzung der größten Systeme für viele Jahre dem Department of Defense bzw. dem Department of Energy vorbehalten, seit vier bis fünf Jahren stehen diese Systeme zum größten Teil auch zivilen Projekten offen. Weiterhin verfügen die drei Höchstleistungsrechenzentren der National Science Foundation<sup>6)</sup> über Höchstleistungsrechner, die ausschließlich für die zivile Forschung und Wissenschaft genutzt werden.

Der weltweit leistungsfähigste Höchstleistungsrechner befindet sich in den USA. Er hat eine Spitzenleistung von 91,8 Teraflop/s. Von den weltweit zehn schnellsten Höchstleistungsrechnern stehen acht in den USA, einer in Japan und einer in Spanien. Für diese Höchstleistungsrechner werden Leistungen (Linpackwerte) von 9,8

---

<sup>6)</sup> Dies sind das Center for Supercomputing Research & Development, Illinois ([www.csrd.uiuc.edu](http://www.csrd.uiuc.edu)), das Pittsburgh Supercomputing Center ([www.psc.edu](http://www.psc.edu)) und das San Diego Supercomputer Center ([www.sdsc.edu](http://www.sdsc.edu))

bis 70,7 Teraflop/s und theoretische Spitzenleistungen von 15,3 bis 91,8 Teraflop/s angegeben (Anhang 1).

In den USA wurde vom Office of Science and Technology Policy des Weißen Hauses im Mai 2004 ein Plan für das High-End Computing vorgestellt.<sup>7)</sup> Darin wird den staatlichen Stellen, die über Höchstleistungsrechner verfügen, eine engere Zusammenarbeit bei der Nutzung und Entwicklung ihrer Ressourcen empfohlen. Außerdem wird darauf hingewiesen, dass einige Institutionen Schwierigkeiten hätten, die für große Forschungsprojekte nötige Rechnerkapazität zu bekommen, insbesondere dann, wenn die die Rechnungen nur auf Höchstleistungsrechnern durchgeführt werden können. Das Department of Energy will einen 250 Mio. US-Dollar teuren Höchstleistungsrechner mit einer Spitzenleistung von 250 Teraflop/s bauen. Dieser Rechner soll am Oak Ridge National Laboratory in Tennessee aufgestellt werden.

Anfang 2005 soll in den USA der Rechner „Blue Gene“ mit einer Spitzenleistung von 360 Teraflop/s für 100 Mio. US-Dollar installiert werden. Gebaut wird dieser Höchstleistungsrechner für das Lawrence Livermore National Laboratory in Kalifornien. Die darauf folgenden geplanten Maschinen in den Jahren 2006/2007 („Blue Gene/P“) und 2007/2008 („Blue Gene/Q“) und sollen bis zu 1.000 Teraflop/s beziehungsweise 3.000 Teraflop/s Spitzenleistung haben.

---

<sup>7)</sup> [www.hpcc.gov/pubs](http://www.hpcc.gov/pubs)

### **C. Europäische Höchstleistungsrechner**

Zur Sicherung der wissenschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit ist ein fortlaufender qualitativer und quantitativer Ausbau der Rechnerversorgung unverzichtbar. Damit Europa und somit auch Deutschland künftig weiterhin mit Japan, den USA und China wettbewerbsfähig ist, ist die Beschaffung von Höchstleistungsrechnern der höchsten Leistungsklasse notwendig. Die Kosten für international führende Höchstleistungsrechner betragen etwa 200 Mio. Euro und können nicht mehr von einem einzelnen Staat aufgewendet werden. Die Wettbewerbsfähigkeit im internationalen Rahmen kann auf die Dauer sehr viel effizienter durch eine europäische Finanzierung und den Zusammenschluss von nationalen Ressourcen erreicht werden, wie dies bei naturwissenschaftlichen und technischen Großgeräten schon der Fall ist. Der Wissenschaftsrat empfiehlt daher, Höchstleistungsrechner der höchsten Leistungsklasse auf europäischer Ebene einzurichten.

#### ***EU-Projekt DEISA***

Die Beschaffung und Nutzung europäischer Höchstleistungsrechner erfordert eine Koordination der an der Einrichtung solcher Rechenzentren beteiligten Länder. Als wesentliche Vorbereitung für die Etablierung europäischer Höchstleistungsrechner kann das von der Europäischen Union im Rahmen des 6. Rahmenprogramms geförderte Projekt DEISA<sup>8)</sup> (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications) angesehen werden. Dieses Projekt wurde am 1. Mai 2004 mit einem Kostenumfang von 28 Mio. Euro für die Dauer von fünf Jahren gestartet. An DEISA sind Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren aus Deutschland, Finnland, Frankreich, Großbritannien, Italien und den Niederlanden<sup>9)</sup> und zukünftig auch Spanien beteiligt. Die Intention des Projekts ist es, einen Verbund der vorhandenen Höchstleistungsrechner in den nationalen Staaten aufzubauen und gemeinsam zu betreiben. Hierzu werden die vorhandenen Hoch- und Höchstleistungsrechner der am Projekt beteilig-

---

<sup>8)</sup> [www.deisa.org](http://www.deisa.org)

<sup>9)</sup> Derzeitige Mitglieder: Deutschland: Forschungszentrum Jülich, Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft; Finnland: Finnish Information Technology Centre for Science; Frankreich: Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique; Großbritannien: Edinburgh Parallel Computing Centre, European Centre for Medium-Range Weather Forecasts; Italien: Consorzio Interuniversitario; Niederlande: SARA Computing and Networking Services. Zukünftige Mitglieder: Leibniz Rechenzentrum in München, Rechenzentrum Stuttgart, Spanish High Performance Centre in Barcelona.

ten europäische Länder mittels moderner Grid-Technologie miteinander gekoppelt. Wesentliche Voraussetzung für eine effektive Kopplung ist der transparente Datenzugriff, der durch ein globales Dateisystem über alle Höchstleistungsrechenzentren hinweg erreicht werden soll. Die so zusammengeschlossene Rechenleistung wird zu Projektbeginn mehr als 100 Teraflop/s betragen. Mit dem Projekt wird keine zusätzliche Rechnerleistung beschafft. Vielmehr dient das Projekt dazu, herausragenden europäischen Wissenschaftlern Rechnerressourcen effizient zur Verfügung zu stellen und unter anderem die Möglichkeit zu eröffnen, auch den jeweils stärksten europäischen Rechner nutzen zu können. Insofern kann das DEISA-Projekt als der ideale Ausgangspunkt für die Etablierung europäischer Höchstleistungsrechner angesehen werden.

### ***ERA-Net***

Da die Wettbewerbsfähigkeit im internationalen Rahmen auf Dauer nur durch eine europäische Initiative und den Zusammenschluss von nationalen Ressourcen erreicht werden kann, begrüßt der Wissenschaftsrat die begonnene Verständigung von Wissenschaftsinstitutionen in Europa zur Bereitstellung von Rechenkapazität auf europäischer Ebene. So haben sich Deutschland, Großbritannien und Frankreich zusammengeschlossen und bereiten derzeit einen Antrag für ein ERA-Net (European Research Area) zur Förderung durch die Europäische Union vor. Das ERA-Net soll dazu dienen, Vorbereitungen für die Errichtung und den Betrieb eines oder mehrerer europäischer Höchstleistungsrechner zu treffen. Die Schaffung gemeinsam genutzter europäischer Höchstleistungsrechenzentren ist die einzige Möglichkeit, dem Bedarf nach höchster Rechenleistung in Europa gerecht zu werden. Durch Zusammenlegung von Ressourcen, Personal und Infrastruktur können sehr viel größere und leistungsfähigere Einzelsysteme installiert werden, als dies auf nationaler Ebene in Anbetracht der derzeitigen und mittelfristig absehbaren Haushaltssituationen in den für solche Spitzensysteme qualifizierten Ländern Europas möglich wäre.

### ***Europäische Rechnerpyramide und Beschaffungsstrategie***

Die derzeitige Versorgungsstruktur mit Rechenkapazität in Deutschland besteht aus vier Ebenen: 1. der Arbeitsplatzebene, 2. der Instituts-/Fachbereichsebene, 3. der Hochschulebene der Hochleistungsrechenzentren sowie 4. der Ebene der bundes-



weit zugänglichen Höchstleistungsrechner. Nach Ansicht des Wissenschaftsrates hat sich diese Rechnerpyramide in Deutschland bewährt und sollte um die Ebene der europäischen Höchstleistungsrechner ergänzt werden. Dies bedeutet, dass in Europa Höchstleistungsrechner installiert werden sollen, die leistungsfähiger sind als die jeweiligen nationalen Höchstleistungsrechner. Die europaweit zugänglichen Höchstleistungsrechner sollten in regelmäßigen Abständen zyklisch durch neue, leistungsfähigere Systeme ersetzt werden. Die Beschaffungen sollten so abgestimmt sein, dass im Zeitabstand von relevanten Innovationszyklen – circa alle zwei bis drei Jahre – der europäischen Wissenschaft jeweils ein System entsprechend dem neuesten technischen Stand und der höchsten Leistungsklasse zur Verfügung steht. Langfristig bedeutet dies, dass bei einer Standzeit eines Rechners von etwa fünf bis sechs Jahren die Einrichtung von drei europäischen Höchstleistungsrechnern notwendig ist.

Voraussetzung für die Erweiterung der Rechnerpyramide auf die europäische Ebene ist, dass die nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren in ihrer Funktion in der Rechnerpyramide erhalten bleiben und in regelmäßigen Abständen mit adäquaten Rechnern auf dem bisherigen Niveau ausgestattet werden. Europäische Höchstleistungsrechner stellen eine Ergänzung und keinen Ersatz der nationalen Höchstleistungsrechenzentren dar.

### ***Standort***

Jedes europäische, bisher national operierende Höchstleistungsrechenzentrum sollte sich um den Standort als europäisches Höchstleistungsrechenzentrum bewerben können. Die Schaffung neuer Zentren „auf der grünen Wiese“ ist nach Ansicht des Wissenschaftsrates nicht sinnvoll, da es erfahrungsgemäß zeitlich eine ganze Wissenschaftlergeneration braucht, um ein Zentrum hoher Qualität zur vollen Funktionsfähigkeit und Fachkompetenz zu führen. Außerdem spricht sich der Wissenschaftsrat entsprechend seiner Empfehlung für die nationale Versorgung mit Rechenkapazität für eine Anbindung eines europäischen Rechenzentrums an eine Hochschule oder außeruniversitäre Forschungseinrichtung aus. Auf Grund der langjährigen Erfahrung im Höchstleistungsrechnen, der etablierten Unterstützung der Anwender und den bereits eingerichteten Kompetenzzentren hält es der Wissenschaftsrat für nahelie-

gend, dass Deutschland Standort eines der europäischen Höchstleistungsrechner wird.

### ***Verteilung der Rechenzeit***

Die Verteilung der Rechenzeit sollte nach wissenschaftlichen Gesichtspunkten vergeben werden und nicht nach Länderproporz. Hierbei empfiehlt der Wissenschaftsrat, sich an europäischen Zentren wie CERN (Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire) in der Schweiz oder dem ECMWF (Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage) in Großbritannien, zu orientieren. Dort erfolgt die Verteilung des Zugangs zu den Ressourcen durch wissenschaftliche Lenkungsausschüsse. Die Rechenkapazität eines europäischen Höchstleistungsrechners sollte nur für Aufgaben vergeben werden, welche durch die in den nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren verfügbaren Rechner niedrigerer Leistungsklassen nicht oder mit nicht vertretbarem Aufwand bearbeitet werden können.

### ***Vernetzung***

Eine leistungsfähige Vernetzung der europäischen Höchstleistungsrechenzentren mit den nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren der einzelnen europäischen Staaten muss gewährleistet sein. Voraussetzung sind die Bereitstellung einer ausreichenden Übertragungskapazität, einer entsprechenden Datendurchlassfähigkeit sowie die Gewährleistung der notwendigen Datensicherheit. Dies sollte durch eine Harmonisierung der organisatorischen und administrativen Randbedingungen an den einzelnen Rechnerstandorten ergänzt werden.

### ***Serviceleistung***

Neben Planung, Installation und Betrieb der zentralen maschinellen Ressourcen muss ein europäisches Höchstleistungsrechenzentrum umfangreiche Dienstleistungen für die Spitzenforschung erbringen. Der Wissenschaftsrat hält es für erforderlich, auf ein Netzwerk fachlicher Kompetenz von rechnernahen Beratungsleistungen methodisch-fachlicher und mathematisch-informatischer Art zurückgreifen zu können.

### **Softwareentwicklung**

Der Softwareentwicklung, die eine Leistungssteigerung der Höchstleistungsrechner verfolgt, kommt eine besondere Bedeutung zu. Fortschritte bei der Lösung großer Probleme werden nie allein durch die Installation leistungsstarker Hardware sondern immer auch durch Fortschritte in der Softwareentwicklung erzielt. Europäische Rechenzentren müssen auch als Kristallisationspunkte für die Bildung von Kompetenznetzwerken und Computational Science Communities wirken. Neben dem Betrieb des Höchstleistungsrechners selbst muss geklärt werden, welche weiteren Aufgaben europäische Höchstleistungsrechenzentren übernehmen sollen und welche Leitfunktionen ihnen hierbei zukommen sollen, insbesondere bei der Entwicklung von Software und Algorithmen, beim Transfer von Know-how und im Bereich der Aus- und Weiterbildung.

### **Finanzierung**

Die Finanzierung eines Höchstleistungsrechners der höchsten Leistungsklasse in Europa sollte gemeinsam von den am Höchstleistungsrechner beteiligten Staaten übernommen werden. Die Kosten für einen Höchstleistungsrechner belaufen sich derzeit auf etwa 200 Mio. Euro.<sup>10)</sup> Bedenkt man die kommenden Steigerungen der Rechenleistung und die damit verbundenen Kosten, wie sie sich in den USA abzeichnen, erscheint eine gemeinsame Finanzierung in Europa um so näherliegend.

Deutschland hat in den letzten Jahren eine sehr gute Infrastruktur aufgebaut, die in Europa mit an der Spitze steht. Der Wissenschaftsrat hält daher Deutschland für einen ausgezeichneten Standort für einen solchen Rechner. Für den Fall, dass die Ansiedlung eines solchen europäischen Rechners in Deutschland gelingen sollte, kämen damit auf den Bund und die Länder Kosten in der Größenordnung von 30 bis 50 Mio. Euro zu. Dies bewegt sich im Rahmen der derzeit für nationale Höchstleistungsrechner aufgewendeten Mittel.

---

<sup>10)</sup> Der japanische Höchstleistungsrechner „Earth Simulator“ kostete 400 Mio. US-Dollar. Dabei handelte es sich um ein Pilotprojekt. Im Falle des europäischen Höchstleistungsrechners kann von deutlich geringeren Kosten ausgegangen werden.

Der Wissenschaftsrat bittet den Bund, in den Gremien der Europäischen Union auf die Einrichtung eines Höchstleistungsrechners hinzuwirken und dabei dafür Sorge zu tragen, dass Deutschland Standort eines europäischen Höchstleistungsrechners wird.

## D. Anhang

### Anhang 1: Liste der Top10 Höchstleistungsrechner aus der TOP500-Liste, Stand November 2004

Rang	Hersteller Typ	Linpackwert in GFlop/s	Spitzen- leistung in GFlop/s	Standort Land/Jahr
1.	BlueGene/L DD2 beta-System (0.7 GHz PowerPC 440) / 32768 IBM	<b>70720</b>	<b>91750</b>	IBM/DOE United States/2004
2.	SGI Altix 1.5 GHz, Voltaire Infiniband / 10160 SGI	<b>51870</b>	<b>60960</b>	NASA/Ames Research Center/NAS United States/2004
3.	Earth-Simulator / 5120 NEC	<b>35860</b>	<b>40960</b>	The Earth Simulator Center Japan/2002
4.	eServer BladeCenter JS20 (PowerPC970 2.2 GHz), Myrinet / 3564 IBM	<b>20530</b>	<b>31363</b>	Barcelona Supercomputer Center Spain/2004
5.	Intel Itanium2 Tiger4 1.4GHz - Quadrics / 4096 California Digital Corporation	<b>19940</b>	<b>22938</b>	Lawrence Livermore National Laboratory United States/2004
6.	ASCI Q - AlphaServer SC45, 1.25 GHz / 8192 HP	<b>13880</b>	<b>20480</b>	Los Alamos National Laboratory United States/2002
7.	1100 Dual 2.3 GHz Apple XServe/Mellanox Infiniband 4X/Cisco GigE / 2200 Self-made	<b>12250</b>	<b>20240</b>	Virginia Tech United States/2004
8.	BlueGene/L DD1 Prototype (0.5GHz PowerPC 440 w/Custom) / 8192 IBM/ LLNL	<b>11680</b>	<b>16384</b>	IBM - Rochester United States/2004
9.	eServer pSeries 655 (1.7 GHz Power4+) / 2944 IBM	<b>10310</b>	<b>20019.2</b>	Naval Oceanographic Office (NAVOCEANO) United States/2004
10.	PowerEdge 1750, P4 Xeon 3.06 GHz, Myrinet / 2500 Dell	<b>9819</b>	<b>15300</b>	NCSA United States/2003

**Anhang 2: Liste und Platzierung aller in Deutschland installierten Höchstleistungsrechner aus der TOP500-Liste, Stand November 2004**

<b>Rang</b>	<b>Typ Hersteller</b>	<b>Linpackwert in GFlop/s</b>	<b>Spitzenleistung in GFlop/s</b>	<b>Standort/Jahr</b>
30.	eServer pSeries 690 (1.7 GHz Power4+) / 1312 IBM	<b>5568</b>	<b>8921</b>	Forschungszentrum Juelich (FZJ)/ 2004
50.	BladeCenter Xeon 3.06 GHz, Gig-Ethernet / 1064 IBM	<b>3755</b>	<b>6511.68</b>	Bank (H)/2004
85.	pSeries 690 Turbo 1.3 GHz / 822 IBM	<b>2198.44</b>	<b>4274.4</b>	Max-Planck-Gesellschaft MPI/IPP/ 2003
93.	SP Power3 375 MHz 16 way / 1920 IBM	<b>2106</b>	<b>2880</b>	Deutscher Wetterdienst/2003
94.	ALiCEnext, Opteron 1.8 GHz, GigE, Parastation / 1024 Angstrom	<b>2083</b>	<b>3686.4</b>	Universität Wuppertal/2004
154.	Opteron 2.0 GHz, GigE / 896 NEC	<b>1778</b>	<b>3584</b>	DaimlerChrysler/2004
168.	SR8000-F1/168 / 168 Hitachi	<b>1653</b>	<b>2016</b>	Leibniz Rechenzentrum/2002
181.	DL140, Opteron 2.2 GHz, Myrinet / 512 HP	<b>1576</b>	<b>2252.8</b>	AMD/2004
182.	DL140, Opteron 2.2 GHz, Myrinet / 512 HP	<b>1576</b>	<b>2252.8</b>	AMD/2004
198.	SX-6/192M24 / 192 NEC	<b>1484</b>	<b>1536</b>	DKRZ - Deutsches Klimarechenzentrum/2003
214.	pSeries 690 Turbo 1.3GHz / 512 IBM	<b>1384</b>	<b>2662.4</b>	HLRN an der Universität Hannover / RRZN/2004
215.	pSeries 690 Turbo 1.3GHz / 512 IBM	<b>1384</b>	<b>2662.4</b>	HLRN am ZIB/Konrad Zuse-Zentrum für Informationstechnik/2004
236.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 640 HP	<b>1263.3</b>	<b>2240</b>	Deutsche Telekom AG/2004
249.	xSeries Xeon 3.06 GHz, Myrinet / 260 IBM	<b>1231.05</b>	<b>1591.2</b>	DaimlerChrysler/2004
256.	xSeries Xeon 3.06 GHz, Myrinet / 256 IBM	<b>1215.31</b>	<b>1566.72</b>	MTU Aero Engines/2004
260.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 320 HP	<b>1210</b>	<b>1920</b>	HP Financial Services/2004
266.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 288 HP	<b>1210</b>	<b>1728</b>	SDH/2004
273.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 256 HP	<b>1210</b>	<b>1536</b>	SARL International/2004

<b>Rang</b>	<b>Typ Hersteller</b>	<b>Linpackwert in GFlop/s</b>	<b>Spitzen- leistung in GFlop/s</b>	<b>Standort/Jahr</b>
287.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 256 HP	<b>1198.1</b>	<b>1536</b>	SARL International/2004
288.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 256 HP	<b>1198.1</b>	<b>1536</b>	SHD/2004
347.	BladeCenter HS20 Xeon 3.06 GHz, Gig-Ethernet / 280 IBM	<b>1051.4</b>	<b>1713.6</b>	Bayer CropScience GmbH/2004
360.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 512 HP	<b>1024.3</b>	<b>1792</b>	BMW AG/2004
361.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 512 HP	<b>1024.3</b>	<b>1792</b>	BMW AG/2004
362.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 512 HP	<b>1024.3</b>	<b>1792</b>	BMW AG/2004
373.	DL360G3, Pentium4 Xeon 3.2 GHz, Myrinet / 256 HP	<b>1015.5</b>	<b>1638.4</b>	Siemens/2004
374.	DL360G3, Pentium4 Xeon 3.2 GHz, Myrinet / 256 HP	<b>1015.5</b>	<b>1638.4</b>	Siemens/2004
385.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 512 HP	<b>1013</b>	<b>1792</b>	Magirus International/2004
409.	eServer Opteron 2.0 GHz, Gig-E / 432 IBM	<b>987.1</b>	<b>1728</b>	FinanzIT/2004
412.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 192 IBM	<b>971.2</b>	<b>1152</b>	BMW AG/2004
413.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 192 IBM	<b>971.2</b>	<b>1152</b>	BMW AG/2004
414.	Integrity Superdome, 1.5 GHz, HPlex / 192 IBM	<b>971.2</b>	<b>1152</b>	BMW AG/2004
470.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 448 HP	<b>897</b>	<b>1568</b>	Magirus International/2004
474.	Fire 15k/6800 Cluster / 672 Sun	<b>891.4</b>	<b>1209.6</b>	RWTH Aachen/2003
475.	Opteron 2.0 GHz, GigE / 360 NEC	<b>891</b>	<b>1440</b>	VW (Volkswagen AG)/2004
499.	SuperDome 875 MHz/HyperPlex / 416 HP	<b>850.6</b>	<b>1456</b>	Magirus International/2004

## E. Glossar

**Bandbreite:** Die maximale Datenmenge, die in einem Zeitintervall über eine Verbindung (Memory-Busse, Netze, I/O-Kanäle usw.) transportiert werden kann.

**Capability-Computing:** Eine, meist aber gleichzeitig mehrere Anforderungen an Rechnerressourcen (Rechenzeit oder Rechenleistung, Hauptspeicher, I/O-Bedarf, usw.) für ein Programm zur Lösung eines Problems sind so hoch, dass sie „als Ganzes“ nur von speziell dafür ausgelegten Höchstleistungsrechnern bearbeitet werden können.

**Capacity-Computing:** Große Mengen an (Einzel-)Berechnungen (etwa eine Parameterstudie, die einen großen Parameterraum abdecken soll), wobei das Einzelprogramm keine allzu großen Rechnerressourcen benötigt, die Vielzahl der Programmabläufe jedoch extrem hohe Anforderungen an Durchsatz und Rechenleistung stellt.

**CPU:** Central Processing Unit (Zentraleinheit eines Rechners)

**Femto:** Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^{-15}$  Einheiten

**Flop/s:** Floatingpoint Operations Per Second: Gleitkommaoperationen pro Sekunde; Maß für Rechenleistung von Rechnern.

**Giga:** Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^9$  Einheiten

**Grid:** System für die Erbringung von Daten-, Informations- und Rechendiensten, wobei die technischen Details der konkreten, typischerweise geographisch verteilten Realisierung hinter Oberflächen (Interfaces) verborgen sind. Die Leistung wird im Allgemeinen system-, orts- und organisationsübergreifend bereitgestellt. Der Nutzer, der üblicherweise Mitglied einer „Community“ (Gruppe mit gemeinsamer Interessenslage) ist, sieht nur die „Steckdose“, aus der er den gewünschten Dienst bezieht, nicht aber die technischen Details, die zur Produktion der Rechen-, Daten- oder Anwendungsleistung erforderlich sind. Daher auch der Name „Grid“, der aus dem englischen „Power Grid“ für Energieversorgungsnetz abgeleitet ist.

**Latenzzeit:** Die Zeit, die zwischen der Anforderung und dem Empfang des ersten Bits von Daten vergeht.

**LINPACK Benchmark:** Standard Benchmark im High Performance Technical Computing, der die Rechenleistung bei der numerischen Lösung von sehr großen linearen Gleichungssystemen misst. Für reale Anwendungsprofile eher obsolet, da er stark von der Spitzenleistung des Rechners, aber nur schwach oder gar nicht von



anderen Leistungsmerkmalen wie Bandbreiten abhängt. LINPACK ist die Basis für die so genannte TOP-500-Liste.

**Nano:** Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^{-9}$  Einheiten

**Peta:** Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^{15}$  Einheiten

**Simulation:** Durchführung von Experimenten an einem Modell, welche oftmals vollständig am Computer realisiert werden können.

**Sustainleistung:** Mittlere Leistung eines Rechners im Dauerbetrieb. Es muss jedoch eventuell darauf geachtet werden, auf welche Art von Anwendungen sich der Dauerbetrieb bezieht (z. B. Sustained Benchmark Performance, Sustained Performance für beliebige Applikationen, Sustained Performance für einen repräsentativen Querschnitt von Anwendungen, usw.).

**Tera:** Vorsatzzeichen zu einer Einheit; bedeutet  $10^{12}$  Einheiten

**TOP 500-Liste:** Liste der leistungsstärksten, weltweit installierten Rechner ([www.top500.org](http://www.top500.org))