



Stellungnahme zur Beschaffung
eines Nachfolgesystems des
Rechnerverbundes der Nord-
deutschen Länder für Hoch-
und Höchstleistungsrechnen

Stellungnahme
zur Beschaffung eines Nachfolgesystems
des Rechnerverbundes der Norddeutschen Länder
für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

Inhalt

	<u>Seite</u>
Vorbemerkung	4
A. Ausgangslage	6
I. Einsatzbereiche des Rechnersystems	7
II. Das geplante Hochleistungsrechnersystem	9
III. Der das Rechnersystem betreibende Verbund	12
IV. Projektmanagement und Kosten	15
B. Stellungnahme	17

Vorbemerkung

In seiner im Mai 2000 verabschiedeten Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern¹⁾ hat der Wissenschaftsrat eine unzureichende Koordination der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Beschaffungen von Höchstleistungsrechnern festgestellt. Der Wissenschaftsrat hat sich aus diesem Grund dafür ausgesprochen, eine institutionenübergreifende, bundesweit von einem geeigneten Ausschuss koordinierte Investitionsstrategie für Aufbau und Betrieb nationaler Höchstleistungsrechner in Hochschulen und außeruniversitären Forschungseinrichtungen zu entwickeln. Deren Erarbeitung ist dem im Mai 2001 eingerichteten „Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ des Wissenschaftsrates übertragen worden.

Der Koordinierungsausschuss ist für die strategische Beratung des Bundes und der Länder 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 mit einzubeziehen. Über Investitionsvorhaben in der Höhe von 7,5 bis 15 Mio. Euro sollte dem Ausschuss berichtet werden, Investitionen mit einem Volumen von 15 Mio. Euro und mehr werden vom Ausschuss wissenschaftspolitisch begutachtet.

Seit seiner Gründung hat der Koordinierungsausschuss mehrere Stellungnahmen zu Anmeldungen von Hoch- und Höchstleistungsrechnern der Länder verfasst. Im uni-

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

versitären Bereich hat das Land Baden-Württemberg im Jahr 2004 einen Höchstleistungsrechner mit einer Spitzenleistung von 11 Teraflop/s am Standort Stuttgart und einen Hochleistungsrechner von 3 Teraflops/s am Standort Karlsruhe errichtet.²⁾³⁾ Das Land Bayern hatte einen Höchstleistungsrechner mit einer Spitzenleistung von 40 Teraflop/s nach der letzten Ausbaustufe für das Jahr 2005 zum 33. Rahmenplan angemeldet.⁴⁾⁵⁾ Die Beschaffung eines Hochleistungsrechner/Speicherkomplexes für die Technische Universität Dresden wurde vom Land Sachsen angemeldet.⁶⁾

Das Land Berlin hat zum 35. Rahmenplan für den Hochschulbau die Beschaffung eines Nachfolgesystems des Rechnerverbundes der Norddeutschen Länder für Hoch- und Höchstleistungsrechnen angemeldet. Der Koordinierungsausschuss hat in seinen Sitzungen am 29. Juni und 6. Oktober 2004 den Antrag beraten. Das nachstehende Votum ist das Ergebnis dieser Beratungen.

*

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 20. Mai 2005 in Jena verabschiedet.

²⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 32. Rahmenplan für den Hochschulbau 2003–2006, Bd. 2, Köln 2002, S. BW 57–BW 61.

³⁾ Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Baden-Württemberg auf Errichtung eines Höchstleistungsrechners in Karlsruhe und Stuttgart zum 32. Rahmenplan, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2002, Bd. II, Köln 2003, S. 61–82.

⁴⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 33. Rahmenplan für den Hochschulbau 2004–2007, Bd. 2, Köln 2003, S. BY 32f.

⁵⁾ Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Bayern auf Beschaffung eines Höchstleistungsrechners für das Leibniz-Rechenzentrum zum 33. Rahmenplan, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2003, Bd. I, Köln 2004, S. 291–309.

⁶⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau 2005–2008, Bd. 3, Köln 2004, S. SN 42–SN 45.

A. Ausgangslage

Das Land Berlin hat zum 33. Rahmenplan für den Hochschulbau 2004 bis 2007 erstmalig die Beschaffung des Nachfolgesystems des Rechnerverbundes der Norddeutschen Länder für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) beantragt.⁷⁾ Diesem Verbund gehören die sechs Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein an. Er betreibt derzeit ein Hochleistungsrechnersystem, das aus zwei gleichen Teilsystemen sowie einer dedizierten Datenverbindung besteht, die an den beiden Standorten Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Regionales Rechenzentrum Niedersachsen in Hannover (RRZN) installiert sind. Der Wissenschaftsrat hat die Planungskosten für das angemeldete Vorhaben in Höhe von 0,4 Mio. Euro zur Aufnahme in den Rahmenplan empfohlen (Kategorie I). Das Land hat zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau eine Kostenerhöhung für das angemeldete Vorhaben in Höhe von 14,6 Mio. Euro angemeldet⁸⁾, die somit den gesamten Rechner einschließt. Angesichts des frühen Planungsstandes sah der Wissenschaftsrat von einem Votum zur Aufnahme in den Rahmenplan ab (Kategorie P). Es wurden Planungskosten in Höhe von 1,5 Mio. Euro freigegeben.

Das Land Niedersachsen hat zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau die Nachfolge des Hochleistungsrechners Niedersachsen als Bestandteil des HLRN einschließlich Herrichtung einer Halle als Rechnerraum angemeldet. Auch hier hat der Wissenschaftsrat angesichts des frühen Planungsstandes von einem Votum in den Rahmenplan abgesehen. Planungskosten sowie Kosten für die baulichen Maßnahmen für den Rechnerraum wurden freigegeben.

Bereits 1999 hatte der Wissenschaftsrat zum damaligen Konzept des Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen Stellung genommen.⁹⁾ Er äußerte hinsichtlich

⁷⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 33. Rahmenplan für den Hochschulbau 2004–2007, Bd. 4, Köln 2003, S. BE 32f.

⁸⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau 2005–2008, Bd. 4, Köln 2004, S. BE 31f, sowie Bd. 5, S. NI 35f.

⁹⁾ Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur den Konzepten über die Einrichtung eines Zentrums für Höchstleistungsrechnen in Bayern und eines Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 1999, Köln 2000, S. 141-194.

des Konzepts die Bedenken, dass einer Aufteilung der Investitionssumme und der Rechnerkapazitäten auf zwei Standorte die erwünschte Leistungssteigerung im Höchstleistungsrechnen nur in unzureichendem Maße erzielt werden kann. Die Bearbeitung von Grand-Challenge-Projekten erfordere jedoch die Bereitstellung von Rechnern der höchsten Leistungsstufe. Allerdings empfahl der Wissenschaftsrat den Ländern Berlin und Niedersachsen, auf der Grundlage der Bedarfserhebung jeweils einen Landeshochleistungsrechner für die Standorte Berlin und Hannover zu beschaffen, den Länderverbund bestehen zu lassen und auf dieser Basis Erfahrungen im Hochleistungsrechnen zu sammeln, um zu einem späteren Zeitpunkt erneut um ein Bundeshöchstleistungs-Rechenzentrum zu bewerben.¹⁰⁾ Beide Länder meldeten zum 30. Rahmenplan für den Hochschulbau die Beschaffung jeweils eines Landeshochleistungsrechners an, der Wissenschaftsrat empfahl beide Vorhaben vorbehaltlich einer Zustimmung der Deutschen Forschungsgemeinschaft zur Aufnahme in den Rahmenplan. Im April 2004 erfolgte die Installation des Rechnersystems mit einer Spitzenleistung für beide Teilsysteme zusammen von 5 Teraflop/s.

A.I. Einsatzbereiche des Rechnersystems

Die Anwendungsgebiete des zurzeit bestehenden Rechnersystems sind entsprechend den spezifischen Interessen der das System nutzenden wissenschaftlichen Einrichtungen breit gefächert und umfassen Projekte aus den Fachgebieten Physik, Chemie, Biologie, Astronomie, Ozeanographie, Ingenieurwesen, Meteorologie und Meeresforschung. Derzeit wird das Rechnersystem von 72 Großprojekten aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie und Meeres- und Umweltforschung genutzt. In der Erprobungs- und Vorbereitungsphase befinden sich auch Projekte aus bisher nicht vertretenen Forschungsrichtungen wie Biologie, Bioinformatik, Elektrotechnik, Humanmedizin, Mathematik und Wirtschaftsinformatik.

Gegenwärtig wird das HLRN-System von den Technischen Universitäten Berlin, Braunschweig, Clausthal und Hamburg-Harburg, den beiden Berliner Universitäten

¹⁰⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 30. Rahmenplan für den Hochschulbau 2001-2004, Bd. 5, Köln 2000, S. N 30f.

Humboldt-Universität und Freie Universität sowie den Universitäten Bremen, Göttingen, Greifswald, Hamburg, Hannover, Kiel, Oldenburg und Rostock genutzt.

Das HLRN-System steht bundesweit allen Wissenschaftlern mit sehr großen Rechenkapazitätsanforderungen zur Verfügung. Das Rechnersystem ist primär vorgesehen für Anwender aus Forschung, Entwicklung und Lehre, deren Projekte im Wesentlichen aus öffentlichen Mitteln finanziert und an HBFG-geförderten Einrichtungen durchgeführt werden. Bei der Rechenzeitvergabe auf der Grundlage der Zulassungs- und Entgeltordnung¹¹⁾ werden Nutzer der HLRN-Länder bevorzugt.

Tabelle 1: Nutzung der HLRN-Großprojekte nach Fachgebieten

Fachgebiet	2003	2004
Chemie	35 %	22 %
Ingenieurwissenschaften	5 %	18 %
Meeres- und Umweltforschung	26 %	20 %
Physik	27 %	32 %
Sonstige Fachgebiete	7 %	8 %

Quelle: Angaben der am Verbund beteiligten Länder

Die Kontingente zur Rechnernutzung werden durch den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN vergeben. Vor ihrer Zulassung auf dem HLRN-System müssen sich die wissenschaftlichen Projekte einer intensiven Begutachtung unterziehen, die sich an den Regeln der Deutschen Forschungsgemeinschaft orientiert und deren Qualitätsmaßstäbe mit denen der Höchstleistungsrechenzentren vergleichbar sind. Das Antragsvolumen beträgt bisher das Dreifache der verfügbaren Kapazität. Mehrfach konnte der Wissenschaftliche Ausschuss deshalb positiv begutachteten Projekte trotz wissenschaftlich unbestrittener Bedeutung nur ein reduziertes Kontingent einräumen. Die erzielte Auslastung liegt bei ca. 80 % der im Batch-Betrieb maximal abgebbaren Kapazität, ein nach Angaben des Landes in der Praxis eines Mehrbenutzerbetriebs auf massiv parallelen Systemen mit ihren systemimmanenten Verschnittsproblemen guter Wert.

¹¹⁾ <http://www.hlrn.de/org/Entgeltordnung.pdf>

A.II. Das geplante Hochleistungsrechnersystem

Bei einer Systemarchitektur steht nicht allein die Erzielung einer hohen Spitzenrechenleistung im Vordergrund, sondern die Realisierung eines im Hinblick auf Rechenleistung, Speicherdurchsatz und Kommunikationsleistung möglichst ausgewogenen Systems. Der künftige Rechenbedarf wurde mittels Nutzerumfrage ermittelt und entspricht der zwanzigfachen Kapazität des jetzigen Systems. Dies erfordert eine Spitzenleistung von über 100 Teraflop/s. Entsprechend der technologischen Entwicklung und dem geplanten Finanzvolumen kann voraussichtlich eine Spitzenleistung von 50 Teraflop/s erzielt werden.

Die Anforderungen an die Prozessorzahl werden dadurch charakterisiert, dass das zu beschaffende System eine möglichst flexible, dynamisch konfigurierbare Aufteilung der jeweiligen Anwendung auf die erforderlichen Prozessorzahlen gestatten sollte. Je nach Projekt reicht die Anzahl der effizient einzusetzenden Prozessoren von 128 bis 1.024 Prozessoren. Voraussetzungen für den effizienten Einsatz von sehr großen Prozessorzahlen sind fast immer eine hohe Kommunikationsleistung und geringe Latenzzeiten des Verbindungsnetzwerks. Programme, für die eine moderate Anzahl von Prozessoren ausreichend ist, z. B. kommerzielle Programme im Bereich der Chemie- und Strukturanalyseanwendungen, profitieren von einer hohen Skalarleistung und haben häufig einen hohen Haupt- und Sekundärspeicherbedarf.

Nutzerumfragen zufolge liegt der gesamte Hauptspeicherbedarf pro Programmlauf bei den einzelnen Projekten häufig bei über 2 Terabyte, mehrfach bei mehr als 25 Terabyte. Der Bedarf an temporärem Massenspeicher liegt unter 100 Gigabyte, kann diesen in Einzelfällen aber deutlich überschreiten. Als permanenter Massenspeicherbedarf ergab die Nutzerumfrage Werte zwischen 10 Gigabyte bis zu über 1 Petabyte. Über alle Projekte hinweg ergibt sich ein Online-Massenspeicherbedarf von über 3 Petabyte.

Aufgrund der Nutzerumfrage ist die Beschaffung eines Rechnersystems mit insgesamt ca. 50 Teraflop/s Spitzenrechenleistung, ca. 25 Terabyte Hauptspeicherkapazität und ca. 500 Terabyte SAN (Storage Area Network)-Plattenkapazität geplant. Die

Installation des Rechnersystems soll wie das derzeitige Rechnersystem an den beiden Standorten am ZIB in Berlin und am RRZN in Hannover erfolgen. Die Verbindung zwischen den zwei Komplexen wird zurzeit durch den HLRN-Link mit einer Bandbreite von 2,4 Gigabit/s realisiert. Für das beantragte Nachfolgesystem soll diese Verbindung mit dem DFN (Deutsches Forschungsnetz)-Verein auf eine Bandbreite von 10 Gigabit/s hochgerüstet werden.

Tabelle 2: Leistungsziele des HLRN-Nachfolgesystems, im Vergleich dazu die der Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums und HLR Stuttgart

	HLRN	Leibniz-Rechenzentrum		HLR Stuttgart
Geplante Inbetriebnahme	2006	2006	2007	2005
Spitzenrechenleistung	ca. 50 Teraflop/s	33 Teraflop/s	70 Teraflop/s	10–20 Teraflop/s
Hauptspeicherkapazität	ca. 25 Terabyte	20 Terabyte	40 Terabyte	15 Terabyte
SAN-Plattenkapazität	ca. 500 Terabyte	340 Terabyte	660 Terabyte	150 Terabyte

Quelle: Angaben der am Verbund beteiligten Länder

Nach Angaben des Landes können noch keine verbindlichen Aussagen zur Auswahl einer konkreten Rechnerarchitektur gemacht werden. Die Entscheidungskriterien sind die Anwendungsleistung und die Anwendungsprogramme, die im HLRN eingesetzt werden. Der Fokus liegt auf der Beschaffung eines parallelen Systems aus SMP(Shared-Memory-Processor)–Knoten mit hoher Hauptspeicherausstattung. Leistungsstarke Clustersysteme sollen nicht von der Wahl ausgeschlossen werden, da die neuen 64-Bit-CPU's und die schnellen Netzwerke eine Alternative zu proprietären Lösungen darstellen. Angesichts der sich immer weiter öffnenden Leistungsschere zwischen CPU- und Speicherzugriffsleistung kämen auch (Hybrid-)Vektorrechner in die engere Auswahl, da sie über eine bessere Speicheranbindung verfügen und damit eine höhere Effizienz bieten.

Das derzeitige HLRN-System besteht aus zwei nahezu identischen Teilkomplexen, die als ein virtuelles Gesamtsystem mit einer Auslastung von 80 % betrieben werden. Die zahlreichen wissenschaftlichen Publikationen der mit dem Rechnersystem erzielten wissenschaftlichen Ergebnisse dokumentieren aus Sicht der Antragsteller den Erfolg des HLRN. Das Konzept hat sich somit sowohl aus Nutzer- als auch aus Betreibersicht bewährt und soll daher beibehalten werden. Der HLRN-Verbund sieht insbesondere die folgenden Vorteile einer solchen homogenen Lösung:

- *Synergie in Betrieb und Betreuung:* Sowohl beim Betrieb der Teilkomplexe (bezogen auf Hardware und Software) als auch bei der Fachbetreuung der Benutzer werden durch die enge Zusammenarbeit der Mitarbeiter erhebliche Synergieeffekte genutzt.
- *Lastverteilung und Auslastung:* Ein Benutzerauftrag, der nicht auf spezielle Eigenschaften eines bestimmten Teilkomplexes angewiesen ist, wird – automatisch gesteuert – auf dem weniger ausgelasteten Teilkomplex abgearbeitet. Dadurch entsteht ein geringerer Verschnitt.
- *Ausfallsicherheit:* Bei Arbeiten an einem Teilkomplex steht der andere Teilkomplex weiterhin den Benutzern zur Verfügung.
- *Ein-System-Eigenschaft:* Projekte mit sehr großen Anforderungen können die an beiden Standorten vorhandenen Ressourcen gleichzeitig als ein homogenes System nutzen.
- *Ersparnisse bei Software-Lizenzen:* Besonders teure Softwareprodukte brauchen für alle Benutzer nur auf einem Teilkomplex angeboten zu werden.
- *Finanzielle Aspekte:* Der Kauf zweier gleichartiger Teilsysteme bietet eine bessere Verhandlungsposition bei dem Hersteller – sowohl im Hinblick auf den Beschaffungspreis als auch auf die Wartungskonditionen.

Der Nachteil einer homogenen Lösung besteht nach Auffassung des Verbundes darin, dass den Anwendern nur eine Systemarchitektur (entweder Vektorrechner oder massiv parallele Rechner) zur Verfügung steht. Eine komplementäre Lösung für das HLRN hat allerdings gegenüber einer homogenen Lösung weniger Vorteile, zumal

komplementäre Architekturen an anderen Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren zur Verfügung stehen.

An die Software werden folgende Anforderungen formuliert:

- Die für Betrieb und Nutzung erforderlichen Softwarepakete für Systemmanagement, Programmentwicklung und Test sowie wichtige numerische und nichtnumerische Anwendungssoftware müssen effizient implementiert sein, im Zusammenspiel zuverlässig funktionieren und vom Anbieter verbindlich längerfristig unterstützt sein;
- eine effiziente Message Passing Interface(MPI)-Bibliothek ist unabdingbar, da die Mehrzahl der HLRN-Anwendungsprogramme für die Kommunikation mit MPI optimiert ist. OpenMP wird eine zunehmend wichtige Rolle spielen, allerdings erwartet der Antragsteller realistischerweise keinen gemeinsamen Adressraum über das Gesamtsystem. Die Cray-spezifischen Shared-Memory-Funktionen spielen im HLRN zurzeit eine geringe Rolle;
- die gemeinsame Datenverwaltung spielt im HLRN-Verbund eine zunehmend wichtige Rolle. Daher muss eine Systemsoftware existieren, die ähnlich dem Storage Resource Broker (SRB) eine verteilte Datenspeicherung über alle HLRN-Standorte und den effizienten Datenzugriff gewährleistet. Auch Daten-Staging aus den bestehenden Archivsystemen heraus muss unterstützt werden.

A.III. Der das Rechnersystem betreibende Verbund

Der Verbund ist das Ergebnis wissenschafts- und finanzpolitischer Weichenstellungen zur Stärkung Norddeutschlands als Wissenschaftsstandort. Die enge Kooperation der sechs norddeutschen Länder ermöglicht den direkten Austausch wissenschaftlicher Ergebnisse im HLRN-Kompetenzverbund und fördert so die Zusammenarbeit der norddeutschen Wissenschaftler untereinander.

Die Betreiberzentren ZIB in Berlin und RRZN in Hannover verfügen über langjährige Erfahrungen im Betrieb von Hochleistungsrechnern für wissenschaftliche Anwendun-

gen im Verbund. Aufbauend auf den Erfahrungen des länderübergreifenden Verbunds „Norddeutscher Vektorrechner-Verbund“ koordinieren die sechs norddeutschen Länder seit 1993 die überregionale Nutzung der Hochleistungsrechnersysteme in ihren Wissenschaftsbereichen. 1995 empfahl die Konferenz der Wissenschaftsressorts der norddeutschen Länder die Beschaffung eines Höchstleistungsrechners in der Region, an dessen Finanzierung sich der Bund beteiligen sollte. Im Jahr 1998 meldeten die norddeutschen Länder erstmals das Vorhaben „Norddeutsches Zentrum für Höchstleistungsrechnen HLRN“ zum Rahmenplan für den Hochschulbau an. Nach mehreren Beratungen wurde das Konzept 2001 positiv bewertet. Im gleichen Jahr erfolgte die Ausschreibung und im Jahr 2002 die Inbetriebnahme des HLRN-Systems.

Das organisatorische Konzept des HLRN-Verbunds ist im Verwaltungsabkommen der beteiligten Bundesländer geregelt. Alle gemeinsamen Angelegenheiten von grundsätzlicher Bedeutung werden von einem Verwaltungsrat entschieden. Der Verwaltungsrat wird durch den Wissenschaftlichen Ausschuss und die Technische Kommission als ständige Kommissionen beraten und unterstützt.

Der Wissenschaftliche Ausschuss bestimmt über die Zulassung von Projekten entsprechend einer wissenschaftlichen Begutachtung nach den bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft üblichen Kriterien für die Begutachtung von Forschungsvorhaben. Er arbeitet mit den entsprechenden Gremien der Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland zusammen und gibt den Antragstellern gegebenenfalls Hinweise zur Nutzung anderer Höchstleistungsrechenzentren, insbesondere dann, wenn dies aus technischen Gründen anzuraten ist. Der Wissenschaftliche Ausschuss beteiligt sich an der Durchführung von fachbezogenen HLRN-Workshops.

Von den beteiligten Ländern sind für den Verbund jeweils federführende Rechenzentren benannt worden. Deren Vertreter bilden die Technische Kommission des HLRN. Sie ist verantwortlich für das Systemkonzept des HLRN, die Systemauswahl, die Steuerung der Betriebsparameter und die Realisierung des Zugangskonzepts mit Anbindung an das Wissenschaftsnetz. Die Technische Kommission berät den Verwaltungsrat in allen technischen Fragen. Ferner koordiniert sie die Fachberatung im

jeweiligen Bundesland und ist ebenfalls an der Durchführung von Workshops beteiligt.

Bei Beantragung einer Nutzung des HLRN-Systems werden dem Projekt ein Fachberater und ein lokaler Betreuer zugewiesen. Die lokalen Betreuer sind Mitarbeiter der am Verbund beteiligten Rechenzentren der sechs Länder und als Ansprechpartner vor Ort und für Zugangsfragen zuständig. Die Fachberater sind die direkten Ansprechpartner der Anwender insbesondere bei allen fachlichen Benutzerfragen. Sie sind Wissenschaftler und zum größten Teil in Forschungsvorhaben aus den Fachgebieten Biochemie, Bioinformatik, Chemie, Geowissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Physik eingebunden und kommen von den das Rechnersystem nutzenden Wissenschaftseinrichtungen und den das System betreibenden Rechenzentren. Neben der Hilfestellung beim Antragsverfahren liegen die Hauptaufgaben der Fachberater in der Beratung bei algorithmischen Fragen und der effizienten Nutzung des Systems. Sie geben Hilfestellung beim Einsatz von Softwarepaketen, bei der Parallelisierung und Optimierung vorhandener Software und zur Datenhaltung. Die Schulung der Nutzer erfolgt durch Vorträge, Workshops und Kolloquien sowie Lehrveranstaltungen.

Parallel zur Beschaffung des derzeitigen Rechnersystems wurde das Kompetenznetzwerk der norddeutschen Fachberater ins Leben gerufen, das über die Ländergrenzen hinweg dem Nutzer eine optimale auf sein Fachgebiet bezogene Betreuung und Unterstützung bietet. In Bremen gibt es mit dem Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen (BremHLR) und in Niedersachsen mit dem Internationalen Zentrum für computergestützte Ingenieurwissenschaften (ICCES) zusätzliche Fördermaßnahmen des Kompetenzverbundes.

Zur Umsetzung der Empfehlungen des Wissenschaftsrates, im Höchstleistungsrechnen thematische Verbünde zu schaffen, werden im Rahmen von Workshops Nutzergruppen zusammengeführt, die an verwandten Fragestellungen oder mit gleichen Programmaspekten arbeiten. Der erste Workshop dieser Art wurde im Jahr 2003 zum Thema „Quantenchemie/Dichtefunktionaltheorie“ in Berlin durchgeführt.

Das Kompetenznetzwerk wird durch die Einbindung der an mehreren Hochschulen vorhandenen Lehrstühle für wissenschaftliches Rechnen oder Hochleistungsrechnen erweitert. Dadurch kann die numerische und algorithmische Unterstützung der Projekte gezielt verbessert und die Aus- und Weiterbildung auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens und der effizienten Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern gefördert werden.

A.IV. Projektmanagement und Kosten

Das Betriebskonzept des derzeitigen Rechnersystems soll für das Folgesystem fortgeschrieben werden. Das HLRN-System besteht derzeit insgesamt aus zwei identischen Komplexen eng gekoppelter IBM pSeries 690 Server am ZIB und am RRZN sowie der dedizierten Datenverbindung („HLRN-Link“). Die Aufteilung auf zwei Standorte stellt technisch und organisatorisch eine große Herausforderung dar. Sie ermöglicht aber auch, die Betreiberkosten zu verteilen und den Betrieb im Sinne der Hochverfügbarkeit durch die Bereitstellung von zwei unabhängigen gleichartigen Komplexen von Rechnern zu gewährleisten. Durch spezialisierte Fachberater an den Betreiberzentren und in einem flächendeckenden Kompetenznetzwerk wird eine optimale und bedarfsnahe Betreuung der Benutzer sichergestellt. Im Rahmen des Verbundes wurden die notwendigen Techniken zur Realisierung der Ein-System-Eigenschaft für die Nutzer des HLRN erarbeitet und implementiert, eine nach Auffassung des HLRN auch im Kontext des Grid-Computing zukunftsweisende Entwicklung.

Das HLRN-System wird als ein gemeinsames virtuelles System betrieben. Die Ein-System-Eigenschaft wird durch die folgenden Maßnahmen und Software-Mechanismen realisiert:

- Gemeinsame Benutzerverwaltung;
- Systemweite Bereitstellung der Heimat-Dateisysteme;
- Benutzerzugang über ein gemeinsames Batch-System;
- Identische Versionen der eingesetzten System- und Anwendungssoftware.

Die notwendigen Software-Entwicklungen wurden von HLRN-Mitarbeitern in Zusammenarbeit mit dem Hersteller durchgeführt.

Entsprechend der Anmeldung zu 34. Rahmenplan werden für das Nachfolgesystem des HLRN insgesamt 30 Mio. Euro, in zwei Teilsystemen von je 15 Mio. Euro, durch Berlin und Niedersachsen als Sitzländer des HLRN-Rechnersystems beantragt. Der Anteil der sechs beteiligten Länder an der Finanzierung ergibt sich aus dem Königsteiner Schlüssel von 2003. Die Finanzierung ist über einen Zeitraum von vier Jahren (2006 bis 2009) vorgesehen. Die Installation des Rechnersystems soll nach derzeitigem Prüfungsstand im 3. Quartal 2006 erfolgen.

Tabelle 3: Aufteilung der Gesamtkosten

Land	Bundesanteil HFBG	Landesanteile
Berlin	7,500 Mio. €	3,1815 Mio. €
Bremen		0,6135 Mio. €
Hamburg		1,6260 Mio. €
Mecklenburg-Vorpommern		1,4070 Mio. €
Niedersachsen	7,500 Mio. €	6,0450 Mio. €
Schleswig-Holstein		2,1270 Mio. €
Summe	15,000 Mio. €	15,000 Mio. €

Quelle: Angaben der am Verbund beteiligten Länder

Die jährlichen Betriebskosten werden nach dem Verwaltungsabkommen zwischen den beteiligten Ländern alleine von Berlin und Niedersachsen getragen und belaufen sich nach derzeitigem Schätzungen (ohne Personalkosten) auf je ca. 1,5 Mio. Euro. Für den Betrieb des Rechners einschließlich Administration und Benutzerverwaltung sind in ZIB und RRZN jeweils ca. neun Personalstellen vorhanden. Die Fachberatung wird von insgesamt ca. zehn Mitarbeitern im ZIB, RRZN und den anderen Rechenzentren des HLRN-Verbundes durchgeführt.

Im ZIB sind für die Installation des geplanten Systems keine baulichen Maßnahmen notwendig; im RRZN wird zum vorgesehenen Installationszeitpunkt ein neuer Maschinenraum in Betrieb gehen. Diese Maßnahme wurde zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau angemeldet.

B. Stellungnahme

Die Verfügbarkeit von Hoch- und Höchstleistungsrechnern für Wissenschaft und Forschung ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb. Hoch- und Höchstleistungsrechner werden in Wissenschaft und Industrie als forschungsunterstützende Instrumente insbesondere dort eingesetzt, wo reale Experimente nicht möglich, zu zeitaufwendig oder zu teuer sind und wo Rechnersysteme niedrigerer Leistungsstufen nicht ausreichen. Sie stellen ein unverzichtbares Werkzeug für die Forschung dar. 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.

In seiner Empfehlung zum Höchstleistungsrechnen¹²⁾ hat der Wissenschaftsrat die Gründung länderübergreifender Zusammenschlüsse angeregt, um im Verbund Hoch- und Höchstleistungsrechner aufbauen und betreiben zu können. Er würdigt ausdrücklich die von den beteiligten Ländern unternommenen Anstrengungen und unterstützt daher die Initiative der Länder Berlin und Niedersachsen, das im 33. Rahmenplan für den Hochschulbau¹³⁾ erstmals beantragte Nachfolgesystem des Rechnerverbundes der Norddeutschen Länder für Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Berlin und Niedersachsen zur Aufnahme in den 35. Rahmenplan und Freigabe der Mitfinanzierung (Kategorie I) anzumelden. Er begrüßt es, die in den Ländern bestehenden Infrastrukturen und Kompetenzen weiter auszubauen und damit einen nachhaltigen Beitrag zur nationalen Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Rechenkapazität zu leisten. Mit der Installation des angemeldeten Nachfolgesystems wird in der nationalen Rechnerversorgungsstruktur¹⁴⁾ bestehend aus bundesweit zugänglichen Höchstleistungsrechnern, Hochleistungsrechenzentren auf der Universitäts- und Landesebene, Rechnern auf der Instituts- bzw. Fachbereichsebene

¹²⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Empfehlungen zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995, S. 51–70.

¹³⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 33. Rahmenplan für den Hochschulbau 2004-2007, Bd. 4, Köln 2003, S. BE 32f.

¹⁴⁾ Wissenschaftsrat: Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, Köln 2001, S. 229–261.

sowie auf der Arbeitsplatzebene die Ebene der Hochleistungsrechenzentren deutlich gestärkt.

Die Länder Berlin und Niedersachsen melden ein Rechnersystem an, das aus zwei Hochleistungsrechnern mit einer Spitzenrechenleistung von jeweils ca. 25 Teraflop/s, einer Hauptspeicherkapazität von insgesamt ca. 25 Terabyte und einer Plattenkapazität von insgesamt ca. 500 Terabyte SAN-Plattenkapazität besteht. Das Rechnersystem soll an den beiden Standorten am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und am Regionalen Rechenzentrum Niedersachsen in Hannover (RRZN) installiert werden. Es stellt die Nachfolge des derzeit im HLRN-Verbund verfügbaren Rechnersystems dar, das aus zwei identischen Landeshochleistungsrechnern besteht. Die Kopplung der beiden derzeit installierten Rechner erfolgt physikalisch über eine Netzverbindung mit einer Bandbreite von derzeit 2,4 Gigabit/s, die für das beantragte Nachfolgesystem auf 10 Gigabit/s hochgerüstet werden soll. Die Netzanbindung zwischen beiden Systemen erfüllt hinsichtlich der Bandbreite, vor allem aber der Latenz nicht die Bedingungen, die es den meisten parallelisierten Programmen erlauben würden, auf beiden Systemen gleichzeitig mit guter Leistung zu laufen, so dass es sich hierbei um zwei Hochleistungsrechner und nicht um einen Höchstleistungsrechner handelt.

Der Antrag enthält keine verbindlichen Aussagen zur Auswahl einer konkreten Rechnerarchitektur, es wird aber wieder die Anschaffung zweier identischer Hochleistungsrechner angestrebt. Die Entscheidungskriterien sind die Anwendungsleistung und die Anwendungsprogramme, die im HLRN eingesetzt werden. Dabei ist bei der Auswahl der konkreten Rechnerarchitektur eine Reihe wichtiger Randbedingungen zu beachten. Im Blick auf die Hardware müssen folgende Voraussetzungen gewährleistet sein:

- Aufgrund der weiter divergierenden Entwicklung bei Prozessorleistung und erzielbarer Speicherbandbreite muss auf eine effiziente Speicheranbindung mit ausgewogener Speicherhierarchie geachtet werden;

- die Einzelknoten sollten zwar möglichst einige hundert Gigabyte Hauptspeicher bieten, der Speicher des Gesamtsystems muss aber nicht über einen gemeinsamen Adressraum zugreifbar sein;
- das zu beschaffende System muss sich nahtlos in die vorhandene Infrastruktur der Archivsysteme, Netze, Visualisierung und Betriebstechnik an den Standorten Berlin und Hannover sowie in die Systemumgebung der Zugangs- und Vorrechners der HLRN-Partner einfügen lassen;
- der Hersteller sollte seine Eignung im technisch/wissenschaftlichen Umfeld durch repräsentative Referenzinstallation bewiesen haben. Ein hohes Maß an Flexibilität bei der Unterstützung des Gesamtsystems und bei der Optimierung von Anwenderprogrammen muss nachgewiesen werden.

Die Vorteile von zwei Teilsystemen unterschiedlicher Architektur würden darin liegen, dass damit den unterschiedlichen Anforderungen der Nutzer an das Verhältnis Rechenleistung zu verfügbarem Hauptspeicher, Rechenleistung zu Kommunikationsleistung und Rechenleistung zu I/O-Leistung entsprochen werden kann. Die Gründe für zwei identische Teilsysteme überwiegen nach Ansicht der beteiligten Länder aber den Nachteil, dass den Anwendern nur eine Systemarchitektur zur Verfügung stehen würde. Der Wissenschaftsrat schließt sich dieser Ansicht an und unterstützt die Entscheidung, auch beim Nachfolgesystem identische Hochleistungsrechner zu installieren.

Das beantragte Kosten-Leistungsverhältnis ist nach Ansicht des Wissenschaftsrates zu optimistisch. Es erscheint derzeit unrealistisch, die gewünschte Spitzenrechenleistung von 50 Teraflop/s für die angemeldeten 30,0 Mio. Euro zu realisieren. Die geschätzten Betriebskosten ohne Personalkosten von 1,5 Mio. Euro jährlich entsprechen den bisherigen Erfahrungen.

Das angemeldete Rechnersystem stellt die Nachfolge der beiden derzeitigen, im Jahr 2002 installierten Landeshochleistungsrechner dar. Die Auslastung des Rechnersystems liegt bei 80 %, nach Auffassung des Wissenschaftsrates in der Praxis eines Mehrbenutzerbetriebs auf massiv parallelen Systemen mit ihren systemimmanenten Verschnittproblemen ein guter Wert. Die aktuelle Nachfrage und der prognos-

tizierte zukünftige Bedarf an Rechenleistung für die vertretenen Fachgebiete sind überzeugend durch Nutzerbefragungen dokumentiert und rechtfertigen die Inanspruchnahme von Hochleistungsrechenkapazität. Der Wissenschaftsrat weist darauf hin, dass das gegenwärtige HLRN-System derzeit nur von Nutzern der am Verbund beteiligten Länder genutzt wird. Nach Angaben der Länder Berlin und Niedersachsen ist das Rechnersystem bundesweit zugänglich. Die starke Nutzung durch die an Verbund beteiligten Länder beruht darauf, dass Nutzer aus HLRN-Ländern auf der Grundlage der Zulassungs- und Entgeltordnung des HLRN bevorzugt werden. Der Wissenschaftsrat empfiehlt Wege zu suchen, um einen bundesweitem Zugang zu gewährleisten.

Ein auf zwei Standorte verteiltes Rechnersystem erfordert eine Abstimmung der Betriebsstrategien. Dies beinhaltet eine gemeinsame Nutzerverwaltung, systemweite Bereitstellung der Heimat-Datensysteme, Nutzerzugang über ein gemeinsames Batch-System und identische Versionen der eingesetzten System- und Anwendungssoftware. Der Verbund hat in den drei Jahren seit Bestehen des derzeitigen Rechnersystems eine hohe Kompetenz in der Abstimmung der Betriebsstrategien erworben, welche geeignete Voraussetzungen für die Nachfolgeinstallation erwarten lässt.

Eine fachlich notwendige Unterstützung der Nutzer erfolgt durch hauptberuflich tätige Fachberater an den beiden Standorten der Hochleistungsrechner. In den anderen am Verbund beteiligten Ländern wird diese Aufgabe im Nebenamt erfüllt. Zusätzlich erfolgt eine Nutzerunterstützung durch das Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen (BremHLR) in Bremen und durch das Internationale Zentrum für computer-gestützte Ingenieurwissenschaft (ICCES) in Niedersachsen. Die enge Kooperation der sechs norddeutschen Länder ermöglicht den direkten Austausch wissenschaftlicher Ergebnisse im HLRN-Verbund und fördert so die Zusammenarbeit der Wissenschaftler untereinander. Der Erfolg des HLRN wird auch durch eine Vielzahl von wissenschaftlichen Publikationen belegt.

Der Wissenschaftsrat befürwortet die Anträge der Länder Berlin und Niedersachsen und empfiehlt die Vorhaben zur Aufnahme in den 35. Rahmenplan für den Hoch-

schulbau (Kategorie I). Für die Beschaffung eines Hochleistungsrechners ist eine Beurteilung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft anlässlich einer Anmeldung zum Rahmenplan zur konkreten Beschaffung des Hochleistungsrechners erforderlich.