



FÜR FORSCHUNG UND LEHRE

Höchstleistungsrechnen am LRZ und sein Umfeld

FORSCHUNGSVERBÜNDE AUS GANZ BAYERN SETZEN DIE RECHENKAPAZITÄTEN DES LEIBNIZ-RECHENZENTRUMS FÜR IHRE PROJEKTE EIN.

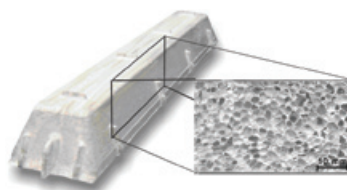
VON ARNDT BODE UND
CHRISTOPH ZENGER

Sechzig Millionen für einen Höchstleistungsrechner am LRZ. " So las man am 24. März 1996 in der Presse in Berichten über eine Regierungserklärung von Ministerpräsident Stoiber zur 2. Privatisierungsoffensive in Bayern. Diese Ankündigung war der Startschuss für

das Gebiet des Hochleistungsrechnens zu festigen und auszubauen. In der Ende 1994 erstellten Stellungnahme dieser Kommission wurde zum ersten Mal die Summe 60 Mio. DM, die man für einen Höchstleistungsrechner als erforderlich erachtete, festgeschrieben.

Forschungsverbund und SFB

Die Zeit war günstig. Zwei Jahre zuvor, im März 1992 war der Bayerische Forschungsverbund für Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen FORTWIHR eingerichtet und für eine Laufzeit von 3 Jahren mit insgesamt 10 Millionen DM von der Bayerischen Forschungsförderung gefördert worden. Diese Förderung bedeutete einen kräftigen Schub für die ganze Disziplin mit Schwerpunkten in München und Erlangen und trug auch dazu bei, dass die neue Disziplin des Höchstleistungsrechnens auch öffentlich auf vermehrtes Interesse stieß.

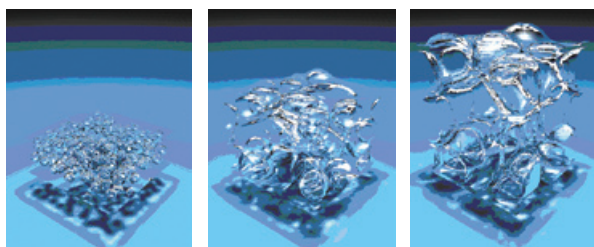


Allerdings muss darauf hingewiesen werden, dass dieser Forschungsverbund nur die Spitze des Eisbergs einer Fülle von Projekten im Hochleistungsrechnen darstellte, die über die Universitäten Bayerns verstreut in diesen Jahren bearbeitet wurden

und die vorhandene Kapazität an Rechenleistung deutlich überschritt, z.B. der an der TU München von 1990 bis 2000 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft geförderte Sonderforschungsbereich 342 *Werkzeuge und Methoden für die Nutzung paralleler Rechnerarchitekturen*. Im Juli 1994 hatte deshalb der 1. Sprecher von FORTWIHR, Christoph Zenger, der auch das zuvor genannte Expertengremium des Ministeriums leitete, in einem Schreiben an Staatsminister Zehetmair auf die im nationalen und internationalen Vergleich immer weiter ins Hintertreffen geratende Ausstattung mit Hochleistungsrechnerkapazität hingewiesen und um Ausbaumaßnahmen gebeten. Die bayerische Staatsregierung reagierte rasch und großzügig mit der Bereitstellung der 60 Millionen, zusammen mit der Förderung von FORTWIHR ein damals in Deutschland absolut einmaliges Engagement der Bayerischen Staatsregierung, um das wir von unseren Kollegen in den anderen Bundesländern auch entsprechend beneidet wurden.

Wettbewerb der Standorte

Damit war zwar eine günstige Ausgangssituation erreicht, aber zunächst musste sich Bayern noch als Standort für ein Höchstleistungszentrum nach den Vorgaben des Wissenschaftsrates durchsetzen. Dieser hatte 1995, also ein Jahr vor Bekanntgabe der Bayerischen Initiative, in einer *Empfehlung zur Versorgung der Wissenschaft und*



KONWIHR-Projekt FreeWIHR (U. Rude, Lehrstuhl für Systemsimulation; C. Körner, Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Technologie der Metalle; Universität Erlangen-Nürnberg): Lattice-Boltzmann-Simulation der Herstellung von Aluminiumschaumformteilen.

den Ausbau des LRZ zum Standort für einen von drei deutschen Zentren für Höchstleistungsrechnen in Deutschland neben dem Rechenzentrum der Universität Stuttgart und dem Rechenzentrum des Forschungszentrums Jülich.

Bayerns Spitzenstellung

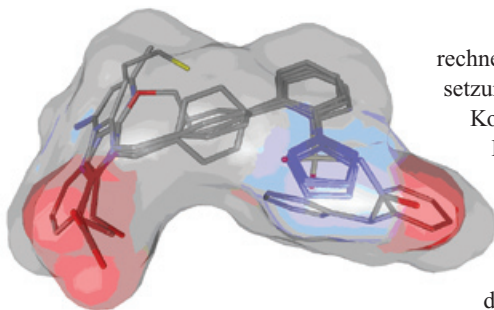
Diese Ankündigung kam zwar auch für die Insider überraschend, aber doch nicht wie der Blitz aus heiterem Himmel. Zwei Jahre zuvor hatte das Staatsministerium für Unterricht und Kultus eine Expertenkommission einberufen, um zu klären, welche Maßnahmen erforderlich seien, um die traditionell gute Stellung Bayerns auf dem



Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität gefordert, ca. drei Höchstleistungszentren einzurichten, die in zeitlich versetztem Beschaffungstakt Höchstleistungsrechner beschaffen sollten, die zum Beschaffungszeitpunkt jeweils mit der internationalen Spitze mithalten sollten. Nachdem Stuttgart bereits als Standort etabliert war, bewarben sich Bayern mit dem Standort München, aber zeitgleich auch der Norddeutsche Rechnerverbund mit einem auf Hannover und Berlin verteilten Standortkonzept. Obwohl befürchtet wurde, dass Hannover als Heimat des damals frisch gewählten Bundeskanzlers auch wegen eines nicht übersehbaren Rückstands der Region gegenüber Süddeutschland die besseren Chancen haben würde, ging Bayern als Sieger aus diesem Wettstreit hervor, wobei die von dem damaligen Ministerialrat Willisch hervorragend vorbereitete Strategie einen wesentlichen Beitrag leistete. Es war gleichzeitig ein hoffnungsvolles Indiz dafür, dass gute Sachargumente sich trotz manchmal aufkeimender Zweifel auch im politischen Umfeld immer noch durchsetzen können.

Beschaffung des HLRB I

Am 1. März 2000 wurde nach einem von den Hauptnutzern und den Fachleuten des LRZ sorgfältig durchgeführten Auswahlprozess der Rechner HLRB I der Firma Hitachi vom Typ SR8000-F1 installiert, ein Ereignis, das in der Fachwelt, aber auch in der Presse ein ungewöhnlich großes Interesse fand. Auf der Liste der weltweit leistungsfähigsten Rechner, der TOP500 nahm er zum Beschaffungszeitpunkt die respektable Position 5 ein, obwohl er nicht wie manche Konkurrenten auf einen möglichst guten Listenplatz, sondern auf die realen Bedürfnisse der Benutzer getrimmt war und erfüllte damit die vom



Wissenschaftsrat vorgegebenen Kriterien. Das änderte allerdings nichts daran, dass er wie seine Vorgänger praktisch vom ersten Tag an voll ausgelastet war und sich schon bald wieder eine längere Warteschlange von Benutzer-Jobs bildete.

Forschungsverbund KONWIHR

Der Weisheit des Wissenschaftsrates ist zu verdanken, dass mit der Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums auch die Förderung eines Kompetenznetzwerks verbunden ist. Damit soll sichergestellt werden, dass die teure Ressource auch so effizient wie möglich genutzt werden sollte. Nachdem der Bayerische Forschungsverbund FORTWIHR nach (für einen Forschungsverbund eher ungewöhnlichen) zwei Verlängerungen (FORTWIHR II und FORTWIHR III) im Jahre 2000 endgültig auslief, wurde vom Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst das Kompetenznetzwerk KONWIHR unter dem Sprecher Arndt Bode eingerichtet, indem Projekte aber auch Beratungsdienste auf dem neuen Bundeshöchstleistungs-

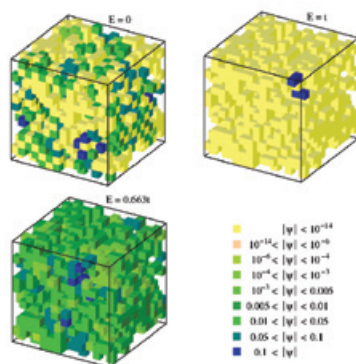
rechner gefördert wurden. Die Fortsetzung dieser Förderung für ein Kompetenznetzwerk zum neuen Bundeshöchstleistungsrechner ist noch nicht endgültig gesichert, die Wissenschaftler hoffen aber zuversichtlich, dass der Bayerische Staat, den vom Wissenschaftsrat geforderten Verpflichtungen nachkommt.

Einsatz in der Lehre

Die Installation des Höchstleistungsrechners trug auch Früchte in der Ausbildung. Bei der Beantragung des Höchstleistungsrechners bei DFG und Wissenschaftsrat wurde auch angekündigt, Studiengänge im Hochleistungsrechnen einzurichten, um auch in der Lehre ein Signal zu setzen. Dieses Versprechen, das bei der Bewilligung von den Gutachtern positiv gewürdigt wurde, ist eingehalten worden. Drei internationale Master-Studiengänge, die alle in englischer Sprache angeboten werden, wurden eingerichtet. Die Teilnehmer kommen überwiegend aus dem Ausland. In zeitlicher Reihenfolge sind es die Studiengänge Computational Engineering (CE) in Erlangen, Computational Mechanics (COME) an der TU München und Computational Science and Engineering (CSE) ebenfalls an der TU München. Alle drei Studiengänge bieten seit 2005 im Rahmen der Bavarian Graduate School for Computational Engineering ein Eliteprogramm an, das vom Bayerischen Elitenetzwerk gefördert wird. Auch bei der Besetzung mancher Professuren mag die gute Versorgung mit Rechenkapazität eine positive Rolle gespielt haben.

KONWIHR-Projekt ENZYMECH (T. Clark, J. Gasteiger, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg). Überlagerung von Angiotensin-II Antagonisten, welche die Bindung des blutdrucksteigernden Botenstoffs Angiotensin-II an seine Oberflächenrezeptoren der Blutgefäße blockieren können.

KONWIHR-Projekt HQS@HPC: (H. Fehske, Theoretische Physik, Universität Bayreuth/Greifswald; G. Wellein, RRZE, Universität Erlangen-Nürnberg). Das Bild zeigt die Amplitude der Wellenfunktion in einem 3D-Andersonungeordneten System und verdeutlicht die Ausbildung leitender Bereiche (Quantenperkolation) in Abhängigkeit von der Teilchenenergie oberhalb der Perkolationschwelle.



Prof. Bode ist Inhaber des Lehrstuhls für Rechnertechnik und Rechnerorganisation, Prof. Zenger Vorsitzender der Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

