

INFORMATIK

Vom Münchner Königsplatz nach Europa

INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AM LEIBNIZ-RECHENZENTRUM.

VON ARNDT BODE

Als der in Augsburg ansässige Mathematiker Johann Heinrich Lambert – Akademiemitglied seit 1759 – seinem berühmten Kollegen Leonhard Euler im Februar 1761 von der neu gegründeten Churbayerischen Akademie der Wissenschaften berichtete, brauchte der Brief mehrere Tage, bis ihn der Empfänger, damals an der Berliner Akademie tätig, lesen konnte.

Heutige digitale Postdienste

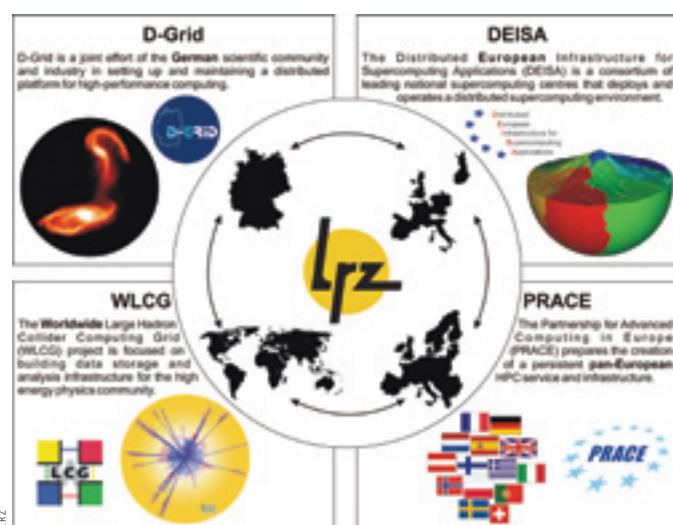
Heute wäre der Brief in Bruchteilen einer Sekunde am anderen Ende der Welt. Diese im Sinne des Wortes blitzschnelle Kommunikation auch über größte Entfernungen hinweg ermöglicht das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften mit dem von ihm betriebenen Münchner Wissenschaftsnetz und der Anbindung der akademischen Einrichtungen Münchens an das Internet. Jeden Monat werden von den Hochschulen Münchens und der Akademie 200 Terabytes, also 200 Billionen Bytes, Daten über das Internet empfangen und 300 Terabytes gesendet, mit einer Geschwindigkeit von zehn Gigabits pro Sekunde, was etwa 10.000 DSL-Anschlüssen entspricht. Aber die Einbindung des LRZ in die europäische und internationale Forschung geht weit über die Internetanbindung hinaus und bedeutet sehr viel mehr als nur Postdienste.

Vom Königsplatz nach Europa

Am 7. März 1962 gründete die Bayerische Akademie der Wissenschaften ihre Kommission für Informatik. Diese Kommission betreibt seither das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), zunächst in der Richard-Wagner-Straße am Münchner Königsplatz, anschließend viele Jahre in der Barer Straße am Karolinenplatz und seit 2006 in einem Neubau in Garching bei München. In diesen Jahren wuchs nicht nur die Rechenleistung, sondern auch die Vernetzung, sowohl die Vernetzung der technischen Systeme im Großraum München als auch die Vernetzung der Forscher in München und Bayern mit ihren Kollegen in aller Welt.

Weltweiter Bezug von Rechenleistung: das Grid-Computing

Während sich die internationale Zusammenarbeit früher vor allem auf gemeinsam bearbeitete Forschungsthemen und deren Untersuchung an den Rechnern des LRZ sowie den Austausch von Daten über die Netze, seit 1991 vor allem über das Internet, beschränkte, kam Ende der 90er Jahre immer stärker der Wunsch auf, für einige besonders anspruchsvolle Berechnungen mehrere Supercomputer gleichzeitig zu benutzen. Besonders die Teilchen- und die Astrophysiker trieben diese Entwicklung voran und entwickelten erste Software-Prototypen, die es erlaubten, die unterschiedlichsten Ressourcen wie Rechner, Instrumente, Software



und Daten koordiniert zur Lösung der „großen Herausforderungen“, der „Grand Challenges“, einzusetzen. Sie nannten es Grid, und die Anspielung auf das Stromnetz, das im Englischen so bezeichnet wird, war durchaus beabsichtigt: der Bezug von Rechenleistung der verschiedensten Supercomputer in aller Welt sollte so einfach werden wie die Entnahme des Stroms aus der Steckdose.

Das LRZ war in den vergangenen zehn Jahren führend an der Entwicklung des Grid-Computings in Europa beteiligt. Nach einigen ersten Projekten wurden eine eigene Gruppe „Verteilte Ressourcen“ und ein Arbeitskreis Grid-Computing gegründet, die Projekte wie D-Grid, DEISA oder WLCG, das weltweite Computing Grid für das Large Hadron Collider-Experiment am CERN in Genf, koordinieren und durchführen. Mit dem Projekt

Grid-Computing am Leibniz-Rechenzentrum: eine Projektübersicht.

D-Grid fördert das Bundesministerium für Bildung und Forschung die Entwicklung der neuen Grid-Technologien in Deutschland. Das Ziel der D-Grid-Initiative ist es, die Grid-Aktivitäten in Deutschland zu bündeln, um einerseits Synergieeffekte auszunutzen und andererseits nach außen mit einer Stimme aufzutreten. Die D-Grid-Infrastruktur wird inzwischen von über 1.500 Wissenschaftlern an ca. 100 deutschen Hochschul- und Forschungsinstituten sowie Partnern aus der Industrie genutzt.

Höchstleistungsrechnen in Europa: DEISA und GÉANT

DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputer Applications) ist ein Konsortium führender nationaler Höchstleistungs-Rechenzentren in Europa, das eine langfristig angelegte verteilte Produktionsumgebung für das Höchstleistungsrechnen im europäischen Maßstab betreibt. DEISA wird von der Europäischen Union gefördert, ebenso wie GÉANT, ein spezielles europäisches Höchstleistungsnetz, das den besonders schnellen Datenaustausch zwischen den Höchstleistungsrechnern ermöglicht. Um den Einsatz der bereitgestellten Höchstleistungsrechner und -netze zu fördern, dient die DEISA Extreme Computing Initiative (DECI) ganz direkt und praktisch dazu, einige besonders anspruchsvolle wissenschaftliche „Flaggschiff“-Applikationen durchzuführen, die ohne die DEISA-

Geplanter Ausbau bis 2011: Das LRZ wird um einen zweiten Rechnerwürfel (rechts) und ein weiteres Büro- und Arbeitsgebäude (vorne Mitte) erweitert.

Ausbau des LRZ zum Europäischen Supercomputing Centre

Ab 2011 wird im Leibniz-Rechenzentrum in Garching der nächste Höchstleistungsrechner mit dem Namen „SuperMUC“ installiert. Die erwartete Rechenleistung liegt bei mehreren Petaflops (10¹⁵ Rechenoperationen in der Sekunde). Bereits heute reicht der Platz im Rechnergebäude des LRZ kaum aus, um auch die vielen Server für Forschungseinrichtungen im Großraum München zu betreiben, für die das LRZ Platz, elektrischen Strom und Klimatisierung bereitstellt. Auch die Zahl der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter steigt ständig, um die stark erweiterten Dienstleistungen des LRZ anbieten zu können.

Deshalb werden Bund und Länder in den nächsten Jahren mehr als 135 Millionen Euro für den Ausbau des LRZ zur Verfügung stellen. Das Rechnergebäude wird verdoppelt, ein weiteres Gebäude für die Mitarbeiter und eine „Cave“ für dreidimensionale Visualisierung sind geplant. Die Bauarbeiten beginnen im Herbst 2009.

Weitere Informationen: www.lrz.de

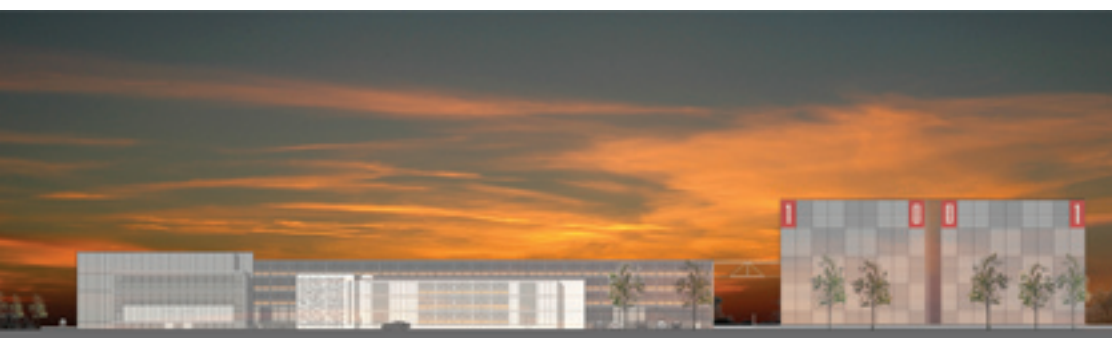
Infrastruktur nicht möglich wären. Das LRZ unterstützt in DECI u. a. Projekte aus der Astrophysik, Plasmaforschung, Erdbebenforschung, Chemie, Biologie und natürlich der Informatik.

Doch beschränkt sich der Beitrag des LRZ nicht auf „Manpower“ und „Grid-Middleware“, also Software, sondern umfasst auch harte Technik: Das BMBF stellte Sondermittel zum Aufbau der Grid-Infrastruktur bereit; die davon beschaffte Hardware betreibt das LRZ u. a. für die Münchner Hochenergie- und Astrophysiker in seinem Rechnergebäude. Solches „attended housing“ ist einer der Gründe, warum der Platz im Rechnergebäude des LRZ nicht mehr ausreicht (s. Infokasten oben).

Und natürlich bringt das LRZ seinen Höchstleistungsrechner SGI Altix 4700 in die europäischen Projekte ein. Dies bedeutet, Rechenzeit an Forscher in anderen europäischen Ländern abzugeben und dafür Rechenzeit dort für Forscher aus Deutschland zu erhalten, die auf spezielle, in Deutschland nicht verfügbare Supercomputer angewiesen sind. Dieser Austausch braucht rechtliche, organisatorische und finanzielle Rahmenvereinbarungen, die oft schwieriger zu erreichen sind als die technischen Lösungen.

PRACE

Eine dauerhafte europaweite High Performance Computing (HPC)-Infrastruktur zu schaffen, ist das vordringliche Ziel von PRACE, der Partnership for Advanced Computing in Europe. Der Aufbau einiger gesamteuropäischer HPC-Zentren soll die Konkurrenzfähigkeit Europas im weltweiten Wettbewerb in Wirtschaft, Wissenschaft und Forschung nachhaltig sichern. Die Rechner, die hierfür nötig sind, sind die wirklichen Supercomputer: Höchstleistungsrechner, die Milliarden von Rechenoperationen pro



HERZOG UND PARTNER

Sekunde, also Petaflops, ausführen können. Auch wenn diese Rechner im Inneren immer dichter werden, so werden sie doch gleichzeitig immer größer, weil Hunderttausende von Rechenkernen benötigt werden, um diese Rechenleistung zu erzielen. Einer dieser europäischen Supercomputer soll 2011 am LRZ in Betrieb genommen werden. Eine Voraussetzung dafür ist, den Platz im Rechnergebäude des LRZ für diesen Petaflops-Rechner zu verdoppeln (s. Infokasten S. 28).

PRACE wird wie DEISA und GÉANT von der EU gefördert. 18 Partner beteiligen sich daran: Frankreich, die Niederlande, Spanien, Großbritannien, Italien und Deutschland bilden die „Principal Partners“, die sich bereiterklärt haben, einen solchen Supercomputer zu installieren und auch den größten Teil davon zu finanzieren. Das LRZ ist als Teil des deutschen Gauss Centre for Supercomputing (GCS) vertreten und bewirbt sich darum, einer der Standorte eines solchen europäischen Supercomputers

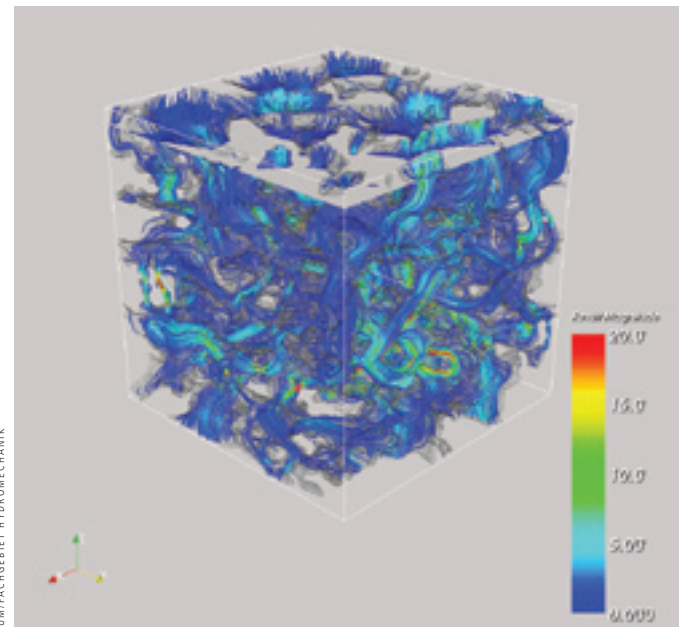
zu sein. Weitere Partner in PRACE sind Österreich, die Schweiz, Finnland, Griechenland, Norwegen, Polen, Portugal, Schweden, Zypern, Irland, Serbien und die Türkei.

Aus dem Projekt PRACE haben sich erste Konsortien entwickelt, die Wissenschaft und Industrie zusammenbringen. In PROSPECT werden Möglichkeiten zu einer Zusammenarbeit zwischen HPC-Zentren und der europäischen Industrie für die Weiterentwicklung im HPC-Umfeld ausgelotet. Herbert Huber, Gruppenleiter am LRZ, ist Sprecher des STRATOS-Konsortiums, das sich vorrangig mit den aufkommenden Technologien für Rechner jenseits der Petaflops-Marke beschäftigt, vor allem aus Sicht der Anforderungen der Nutzer dieser Supercomputer. Ein Arbeitsschwerpunkt ist die Förderung der Entwicklung besonders energieeffizienter Komponenten und deren Integration in zukünftige Petaflopsrechner gemeinsam mit der europäischen und weltweiten HPC-Industrie. STRATOS versteht

Internationale Projekte: das Beispiel des MAC

Das LRZ ist eine der Institutionen, die das Munich Centre for Advanced Computing (MAC) bilden. Das MAC ist ein Forschungskonsortium, das über Fächer-, Instituts-, und Abteilungsgrenzen hinweg Forschungen zusammenfasst, die das Höchstleistungsrechnen und seine Anwendungen zum Schwerpunkt haben. Neben sieben Fachbereichen der TU München sind daran u. a. die LMU München, Max-Planck-Institute und das LRZ beteiligt. Auch internationale Partner der TU München, z. B. die King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) in Saudi-Arabien, kooperieren mit diesem Konsortium.

Eines der Projekte beschäftigt sich mit der Simulation der CO₂-Sequestrierung, dem Verbringen von Kohlendioxid in Erdöllagerstätten, um so die Entsorgung von Kohlendioxid mit der Erdölförderung zu verbinden. In einem weiteren Projekt namens „Virtual Arabia“ soll eine virtuelle, interaktive, dreidimensionale Umgebung geschaffen werden, die es ermöglicht, sich in den geologischen Strukturen Saudi-Arabiens virtuell ober- und unterirdisch zu bewegen, sich seismische und atmosphärische Prozesse anzusehen und die Auswirkungen des Baus großer Gebäude und von Eingriffen in diese Strukturen zu studieren. Weitere Informationen: www.mac.tum.de



sich auch als Sprachrohr für besondere europäische Bedürfnisse und Gegebenheiten sowie für die Förderung der europäischen HPC-Industrie durch die Etablierung einer „European Technology Platform“ für das Höchstleistungsrechnen.

Europa hat erkannt, dass der Schritt zum Petascale-Computing mit Zigttausenden von Multicore-Prozessoren eine riesige Herausforderung nicht nur für Hardware, Software, Betrieb und Infrastruktur darstellt, sondern auch für Programmiermodelle und Algorithmen. Diese Aufgaben können nur in enger Zusammenarbeit seiner führenden Institutionen gelöst werden. Mit den jetzt genehmigten Plänen zum Ausbau zu einem europäischen Zentrum für Supercomputing ist das Leibniz-Rechenzentrum für diesen Wettbewerb sehr gut gerüstet.



Simulation der Strömung durch eine poröse Schicht, hier Asphalt. Durch moderne Simulationssoftware ist es möglich, in den Asphalt hineinzuschauen. Ein computertomografisches Verfahren bestimmt die Porenstruktur. Die Simulation verdeutlicht, wie komplex die Durchströmung einer porösen Schicht ist. Durch solche Simulationen kann man die Durchlässigkeiten ermitteln und Transportprozesse in einem porösen Medium im Detail analysieren. Derartige Prozesse werden im MAC-KAUST-Projekt „CO₂-Sequestrierung“ simuliert.

Der Autor ist ordentliches Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, seit 2008 Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums und o. Professor für Informatik an der TU München.