



KONZEPT FÜR EINEN NEUEN HESSISCHEN HOCHLEISTUNGSRECHNER AN DER TU DARMSTADT – ENTWURF –

Bearbeitung:

Prof. Dr. rer. nat. Michael Schäfer

Geschäftsführender Direktor des DZWR

1. November 1999

1. Einleitung

Aufgrund des immer günstiger werdenden Preis-Leistungs-Verhältnisses und der stark gestiegenen Rechenleistung wird der Einsatz von Hochleistungsrechnern in Verbindung mit entsprechenden Simulationsmethoden für immer mehr Bereiche in Naturwissenschaft und Technik zu einer kostengünstigen Alternative im Vergleich zu teureren, zeitaufwendigen experimentellen Untersuchungen. In vielen Industriezweigen hat sich das Hochleistungsrechnen in den letzten Jahren bereits zu einer Schlüsseltechnologie entwickelt.

Mit der Abschaltung des derzeitigen Hochleistungsrechners VPP300/6 an der TU Darmstadt im Jahre 2000, der schon jetzt den Anforderungen nicht mehr gerecht wird, wird keine ausreichende Kapazität mehr bestehen, um die Grundversorgung an Hochleistungsrechenkapazität an der TU Darmstadt zu gewährleisten. Es ist daher erforderlich hier einen entsprechenden Ersatz bereitzustellen, der auch den gestiegenen Anforderungen Rechnung trägt, da sich die TU Darmstadt (als *Technische* Universität!) andernfalls von einer anerkanntermaßen immer wichtiger werdenden Zukunftstechnologie verabschieden würde.

Vor obigem Hintergrund bemüht sich das DZWR um eine Lösung für die Nachfolge des VPP300/6-Rechners. Es wurde ein Konzept für die Realisierung und den Betrieb eines Hochleistungsrechners an der TU Darmstadt entwickelt, welches insbesondere auch die Einbeziehung der anderen hessischen Universitäten vorsieht. Das geplante Rechnersystem dient hierbei dem Ziel einen wesentlichen Beitrag zur Abdeckung der Grundversorgung an Hochleistungsrechenkapazität für alle hessischen Universitäten zu leisten.

2. Bedarfssituation

Eine entsprechende Umfrage hat ergeben, daß an der TU Darmstadt ein erheblicher Bedarf für die Verfügbarkeit eines zentralen Hochleistungsrechners besteht. Für die DZWR-Mitglieder sowie eine Reihe weiterer Kollegen (siehe Liste Anhang I) ist die Möglichkeit der Nutzung eines derartigen Rechners von essentieller Bedeutung. Dies gilt insbesondere im Hinblick auf eine national und international konkurrenzfähige Forschung aber auch im Sinne einer modernen bedarfsorientierten Ausbildung. Der Erfolg von Sonderforschungsbereichen, Graduiertenkollegs und einer Vielzahl unterschiedlichster Einzelprojekte, quer durch die verschiedenen

Fachbereiche, hängt entscheidend von der Möglichkeit der Nutzung einer zentralen Hochleistungsrechnerkapazität ab.

Die an der TU Darmstadt laufenden bzw. geplanten Einzelforschungsprojekte mit Hochleistungsrechenbedarf verteilen sich wie folgt auf die verschiedenen Fachbereiche (siehe Liste mit entsprechenden Forschungsvorhaben in Anlage II):

Fachbereich	Projekte
Architektur	5
Mathematik	2
Physik	10
Mechanik	3
Chemie	5
Bauingenieurwesen	3
Maschinenbau	30
Elektrotechnik	3
Gesamt	61

Es ist abzusehen, daß sich durch anstehende Neuberufungen in verschiedenen Fachbereichen die Anzahl der Projekte bis zur Installierung des Rechners noch erhöht.

Legt man einen mittleren Rechenzeitbedarf pro Projekt und Jahr von 200 Stunden auf einem Rechner mit 100 GFlops Peak-Leistung zugrunde (ein durchaus nicht zu hoch gegriffener Wert), so ergibt sich alleine für die TU Darmstadt der Bedarf für ein System mit ca. 140 GFlops Peak-Leistung.

Da mit der zu erwarteten Steigerung der Rechenleistung (Verdopplung ca. alle 18 Monate) naturgemäß auch die Anforderungen der Benutzer wachsen, wird sich der Bedarf über die ins Auge gefaßte Zeitdauer bis ins Jahr 2005 sukzessive steigern. Diese abzusehende Entwicklung muß bei der Neubeschaffung mittels eines Stufenkonzepts berücksichtigt werden.

Die Dringlichkeit des Bedarfs wird auch dadurch unterstrichen, daß sich eine Reihe von Fachgebieten zu einer Eigenbeteiligung an der Finanzierung des Systems bereit erklärt haben.

Es sei hervorgehoben, daß das neu zu beschaffende System ausschließlich für den *Grundbedarf* an Hochleistungsrechenkapazität gedacht ist, der nach den Empfehlungen des Wissenschaftsrates und der Deutschen Forschungsgemeinschaft auf Landesebene abgedeckt werden sollte. Der *Spitzenbedarf* an *Höchstleistungsrechenkapazität*, der an einigen Fachgebieten ebenfalls vorhanden ist, soll über die Bundeshöchstleistungsrechenzentren (derzeit in Stuttgart und München) abgedeckt werden.

3. Technische Zielvorstellungen

Es werden gegenwärtig im wesentlichen vier Typen von Rechnerarchitekturen auf dem Markt angeboten, die für die Beschaffung prinzipiell in Frage kämen:

- Parallele Vektorrechner:
Systeme mit (vergleichsweise wenigen) Hochleistungsvektorprozessoren wie z.B. Siemens/Fujitsu VPP5000 oder NEC SX-5.
- Message-Passing-Systeme (MP-Systeme):
Systeme mit nachrichtengekoppelten RISC-Prozessoren mit verteiltem Speicher wie z.B. IBM-RS6000 SP2, Cray T3E.

- Symmetrische Multiprozessorsysteme (SMP-Systeme):
Systeme mit RISC-Prozessoren mit gemeinsamem Speicher wie z.B. von SUN, Compaq, HP, SGI.
- SMP-Cluster (MP-SMP-Systeme):
Nachrichtengekoppelte SMP-Systeme (Kombination von MP- und SMP-Systemen) wie z.B. IBM-RS6000 SP, SGI Origin 2000/SN1 oder HP-9000-V.

Gespräche mit entsprechenden Firmenvertretern wurden bereits geführt, insbesondere auch im Hinblick auf geplante Weiter- bzw. Neuentwicklungen für den ins Auge gefaßten Zeitraum bis zum Jahre 2005.

Wichtige allgemeine Kriterien für die Auswahl sind:

- eine hohe Rechenleistung,
- eine ausgewogene Rechen-, Speicher- und I/O-Kapazität,
- eine angemessene periphere Infrastruktur (Hard- und Software) für einen effizienten Rechenzentrumsbetrieb.

Diese Kriterien sind vornehmlich im Hinblick auf die auf dem Rechnersystem einzusetzende Anwendungssoftware zu sehen. Eine entsprechende Umfrage ergab, daß die Anwendungen der Mehrzahl der Benutzer gut parallelisieren. Teils handelt es sich hierbei um kommerzielle Programmsysteme, die vom jeweiligen Anbieter bereits in parallelen Versionen angeboten werden, teils werden an den Fachgebieten eigene Programme, die bereits parallelisiert sind, eingesetzt. Anwendungen, die eine hohe Leistung bislang ausschließlich aus der Vektorisierung beziehen können, sind nur in geringer Zahl vorhanden. Diese können, nicht zuletzt unter Ausnutzung der entsprechenden am DZWR vorhandenen Kompetenz, mit vergleichsweise geringem Aufwand für den Einsatz auf parallelen Systemen modifiziert werden, was in den meisten Fällen ohnehin bereits durchführt bzw. zumindest in Planung ist.

Aufgrund obiger Überlegungen sowie der Einschätzung der Entwicklungen auf dem Rechnermarkt wird daher ein MP-, SMP- oder MP-SMP-System favorisiert. Eine Festlegung auf eine dieser Klassen bzw. ein bestimmtes System aus einer dieser Klassen ist hierbei zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht erforderlich. Diese kann zu gegebener Zeit, hauptsächlich anhand des jeweiligen Preis-Leistungs-Verhältnisses getroffen werden.

Die Installation des Systems soll in drei Phasen erfolgen. Nach der Erstinstallation sollte etwa zwei Drittel der Rechenleistung zur Verfügung stehen. Nach zwei Jahren soll das System durch eine Erneuerung bzw. Ergänzung auf die volle Ausbaustufe gebracht werden. Nach weiteren zwei Jahren sollte das System auf den dann zu diesem Zeitpunkt neuesten Stand der Technik gebracht werden, um den bis dahin gestiegenen Anforderungen gerecht zu werden.

Um eine effiziente Nutzung des Systems auch durch die anderen hessischen Hochschulen zu ermöglichen, ist ferner für eine leistungsfähige Netzanbindung des Rechners zu sorgen.

4. Nutzungskonzept

Der Rechner wird am Rechenzentrum der TU Darmstadt installiert. Die Rechenzentren der hessischen Universitäten betreiben den Rechner gemeinsam unter Federführung des Rechenzentrums der TU Darmstadt.

Die wissenschaftliche Federführung übernimmt das DZWR in Funktion eines Kompetenzzentrums im Bereich des Hochleistungsrechnens. Die notwendige fachübergreifende Kompetenz

ist durch die interdisziplinäre Zusammensetzung des DZWR sowie entsprechende Forschungsaktivitäten der DZWR-Mitglieder gewährleistet.

Der Rechner ist prinzipiell für Nutzer aller hessischen Universitäten zugänglich. Die einzelnen Rechenzeitkontingente richten sich vorrangig nach der finanziellen Beteiligungen der einzelnen Hochschulen, Fachbereiche bzw. Fachgebiete (siehe unter 5. Finanzierung). Dies kann durch eine entsprechende Prioritätenvergabe erreicht werden, die bei allen zur Diskussion stehenden angebotenden Systemen per Software erfolgen kann.

Das DZWR organisiert regelmäßige Benutzer-Kolloquien für alle Nutzer in Hessen, die den Erfahrungsaustausch zwischen allen Benutzern des Rechners ermöglichen.

5. Finanzierung

Die TU Darmstadt wird aus zentralen Mitteln über die Jahre 2000 bis 2005 einen Betrag von insgesamt 4 Mio DM bereitstellen. Eine entsprechende Zustimmung des STA III liegt bereits vor. Ferner tragen einzelne Fachgebiete der TU Darmstadt mit einer einmaligen Eigenbeteiligung von insgesamt DM 200 000,- zur Finanzierung bei.

Auch die anderen hessischen Hochschulen sind aufgefordert, je nach den entsprechenden Anforderungen, einen Beitrag zur Finanzierung des Rechnersystems zu leisten, um sich die entsprechenden Prioritäten bei der Rechenzeitverteilung zu sichern. Konkrete Zusagen liegen hierzu jedoch bislang nicht vor.

Es wird erwartet, daß die Hochschulmittel durch Mittel des HMWK ergänzt werden. Diese zentralen Landesmittel kommen allen hessischen Hochschulen zugute, indem die entsprechenden Rechenzeitkontingente gleichmäßig auf alle hessischen Hochschulen verteilt werden.

Beispielhaft sei nachfolgend ein Finanzierungsmodell für die Investitions- und Betriebskosten für den neuen Hessischen Hochleistungsrechner in den Jahren 2000 bis 2005 angeführt (Beträge in 1000 DM). Es wird von folgender Verteilung von Betriebs- und Investitionskosten ausgegangen:

Kosten	2000	2001	2002	2003	2004	2005
Betriebsmittel	VPP300/6	500	500	500	500	500
Investitionsmittel						
1.Phase Summe 2000 und 2001	5600					
2.Phase Summe 2002 und 2003			4600			
3.Phase Summe 2004 und 2005					4000	
Gesamt	5600	500	5100	500	4500	500

Die notwendigen Landesmittel könnten sich wie folgt verteilen:

Institution / Jahr	2000	2001	2002	2003	2004	2005
TU Darmstadt						
HRZ-Wartungsmittel	VPP300/6	600	600	600	600	600
TUD zentral	400	300	300			
Nutzer, Institute	200					
Uni Frankfurt						
Uni Gießen	100	100	100	100	100	100
Uni Marburg	300	300	300	300	300	300
Uni Kassel						
HMWK	500	500	500	500	500	500
Gesamt	1500	1800	1800	1500	1500	1500

Die Verdopplung der Landesinvestionsmittel über HBFG durch Bundesmittel (jeweils für zwei aufeinanderfolgende Jahre) ergäbe die folgende Gesamtfinanzierung für das System:

Institution / Jahr	2000	2001	2002	2003	2004	2005
Land (Betrieb)		500	500	500	500	500
Land (Investition)	2800		2300		2000	
Bund	2800		2300		2000	
Gesamt	5600	500	5100	500	4500	500

Die Installation des neuen Systems erfolgt hierbei im 4. Quartal 2000, die Abnahme am 1.1.2001, die Außerbetriebnahme des VPP300/6-Rechners am 31.12.2000.

Von Seiten der TU Darmstadt sind die in diesem Finanzierungsmodell angegebenen Beträge zugesagt. Die anderen eingesetzten Beträge sind beispielhaft zu verstehen und je nach den Gegebenheiten zu modifizieren.

Obiges Finanzierungsmodell ergäbe unter strikter Zugrundelegung der Finanzierungsanteile als Verteilungskriterium die folgenden anteiligen Nutzungskontingente für die hessischen Universitäten:

Institution	Anteil
TU Darmstadt	50,00 %
Uni Frankfurt	6,25 %
Uni Gießen	12,50 %
Uni Marburg	25,00 %
Uni Kassel	6,25 %

Die Zuteilung der Kontingente innerhalb der Universitäten bleibt diesen selbst überlassen.