



INFORMATIK

Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums unter den Top Ten der Welt

NACH WENIGER ALS EINEM BETRIEBSJAHR WURDE DER HÖCHSTLEISTUNGSRECHNER DES LEIBNIZ-RECHENZENTRUMS (LRZ) DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN ERWEITERT. IN DER LISTE DER SCHNELLSTEN RECHNER DER WELT BELEGT ER NUN PLATZ 10.

VON LUDGER PALM

Im Gegensatz zu vielen anderen Supercomputern unter den schnellsten der Welt, die nur für einen bestimmten Teil von wissenschaftlichen Fragestellungen besonders geeignet sind, zeichnet sich die SGI Altix 4700 des Leibniz-Rechenzentrums in Garching bei München dadurch aus, dass auf ihr alle Methoden des wissenschaftlichen Rechnens sehr gut durchgeführt werden können: Bei der Auswahl des Rechners wurde Wert auf ein ausbalanciertes Systemdesign gelegt und darauf, dass Forscher der verschiedensten Wissenschaftsgebiete ihn effizient nutzen können. Dies

Die Aufrüstung des Rechners im „Rechnerwürfel“ des LRZ in Garching.



ist durch die sehr schnelle Hauptspeicheranbindung, das äußerst leistungsfähige interne Netz sowie den großen gemeinsamen Hauptspeicher gewährleistet.

Beim Endausbau im April 2007 wurden die bisherigen 4096 Intel Itanium2 Madison-Prozessoren durch Intel Itanium2 Montecito-Doppelkern-Prozessoren ersetzt, bei denen jeder Prozessorchip zwei Rechenkerne enthält. Insgesamt stehen jetzt 9728 Rechenkerne zur Verfügung, die eine Spitzenrechenleistung von 62,3 Teraflops, also 62.300.000.000.000 Rechenoperationen pro Sekunde, erbringen können. Der Arbeitsspeicher wurde von 17 auf 39 Terabyte und der angeschlossene Festplattenspeicher von 300 auf 600 Terabyte erweitert. „Die neuen Doppelkerne übertreffen die Erwartungen an ihre Rechenleistung deutlich“, erklärt Matthias Brehm, Leiter der Gruppe Hochleistungsrechnen. Dies sei ein guter Schritt auf dem Weg zum Petaflop-Computer. Ein künftiger Petaflop-Computer soll 1 Billionen, also 1.000.000.000.000.000 Rechenoperationen pro Sekunde leisten.

Weltrekorde

Der Höchstleistungsrechner des LRZ hält mehrere Weltrekorde. So

ist es auf ihm erstmals gelungen, 1024 Prozessoren auf einen gemeinsamen, so genannten Shared-Memory-Speicher zuzugreifen zu lassen. Im Normalbetrieb können 512 Rechenkerne diesen gemeinsamen Hauptspeicher von 2 Terabyte, also 2.000 Gigabyte, schreiben und lesen. Kein anderer Rechner der Welt bietet diese Möglichkeit, die eine schnellere Entwicklung von Software zur effizienten Nutzung so vieler Prozessoren erlaubt (OpenMP). Ein anderes Programmierverfahren (MPI) ermöglicht die gemeinsame Nutzung aller 9728 Rechenkerne und der gesamten 39 Terabyte Hauptspeicher.

Das Konzept, einen neuen Supercomputer bereits nach einer kurzen Betriebszeit zu erweitern, bewährte sich wie schon beim letzten Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums: Alle Programme der Anwender laufen völlig unverändert auf dem schnelleren Rechner. Nur für einige wenige ist eine weitere Optimierung notwendig, um die erweiterten Möglichkeiten der neuen Prozessoren voll auszunutzen. Darin werden die Nutzer von den Wissenschaftlern des Leibniz-Rechenzentrums unterstützt, die über langjährige Erfahrungen im optimalen Einsatz von Höchstleistungsrechnern verfügen.



Galaxien, Erdbeben, Supraleitung

Auch der erweiterte Rechner wird vor allem für die Simulation komplexer Systeme und Prozesse in der Physik, Materialforschung, Strömungsdynamik, Astrophysik, Chemie sowie in den Geo- und Biowissenschaften eingesetzt. Beispiele hierfür sind die Untersuchung der Turbulenz, von Strömungen in porösen Gebilden, das Zusammenwirken von Strömungen und deformierbaren Strukturen, die Entstehung und Ausbreitung von Schall, Hochtemperatursupraleitung, Formgedächtnismaterialien, chemische Reaktionen bei Verbrennungs- und Katalyseprozessen, die Ausbreitung von seismischen Wellen und Erdbeben sowie die Untersuchung der Beziehungen zwischen Sequenz, Struktur und Funktion bei Proteinen.

So untersuchen Professor Igel und seine Mitarbeiter an der Ludwig-Maximilians-Universität München die Ausbreitung seismischer Wellen im Inneren der Erde nach einem Erdbeben. Diese dreidimensionalen Simulationen erfordern es, Hunderte Millionen Gitterpunkte zu erfassen. Das Ziel ist ein besseres Verständnis des Erdinneren. Sie simulieren auch die Bewegung der Erdoberfläche im Rechner, speziell im Kölner Becken nach dem Erdbeben der Stärke 5,9 bei Roermond 1992.

Die Gruppe um Professor Hanke an der Universität Würzburg nutzt den Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums, um die Hochtemperatursupraleitung besser zu verstehen. Dazu untersuchten sie die kollektive Bewegung einer riesigen Zahl von Elektronen in Festkörpern. Die hierbei auftretenden neuartigen Effekte sollen helfen, gezielter nach Materialien zu suchen, die bei möglichst hohen Temperaturen den elektrischen Strom ohne Widerstand leiten. Stefan Gottlöber und seine Kol-

legen vom Astrophysikalischen Institut Potsdam widmen sich den ganz großen Fragen: Mit 150 Millionen Teilchen simulieren sie den Anfang unseres Universums, die Entstehung von Filamentstrukturen und die Bildung von Galaxien unter verschiedenen Bedingungen.

Neue Methoden für neue Rechner

„Das System erlaubt völlig neue Applikationen“, erläutert Professor Hegering, Leiter des Leibniz-Rechenzentrums. So konnte jüngst Tobias Gradl vom Institut für Informatik der Universität Erlangen eine Multigrid-Simulation mit 307 Milliarden Unbekannten durchführen und dabei mit 9000 Prozessorkernen eine hervorragende Rechenleistung erreichen. Multigrid-Verfahren werden zur Lösung von Systemen von partiellen Differentialgleichungen eingesetzt, wie sie in der Physik, Struktur- oder Strömungsmechanik vorkommen.

Die Wissenschaftler brauchen Höchstleistungsrechner nicht nur zur Beantwortung konkreter wissenschaftlicher Fragen. Genauso wichtig ist die Möglichkeit, auf einem solchen Rechner die Entwicklung von Software für sehr viele parallel arbeitende Prozessoren zu erlernen, die effizient läuft. Denn auch wenn die Miniaturisierung der einzelnen Komponenten immer weiter voranschreitet, so werden die Supercomputer der Zukunft doch hunderttausende Rechenkerne enthalten, um das so genannte Petaflop-Computing, also das Rechnen mit Billionen statt Billionen Rechenoperationen pro Sekunde, zu ermöglichen. Diese große Zahl Rechenkerne sinnvoll gleichzeitig an großen Aufgaben rechnen zu lassen, ist eine Wissenschaft für sich. Um die Herausforderungen der Zukunft besser bewältigen zu können, haben sich die drei deutschen Höchstleis-



SGI

tungsrechenzentren in Garching, Jülich und Stuttgart zum „Gauss Centre for Supercomputing“ (www.gcfs.eu) zusammengeschlossen. Damit bringen sie ihre Rechen- und Netzkapazitäten sowie ihre langjährige Erfahrung in die entstehende europäische Infrastruktur für das Höchstleistungsrechnen ein und wirken an deren Aufbau maßgeblich mit.

Voraussetzung für die Nutzung des Rechners ist eine positive Begutachtung des jeweiligen Projektes durch einen wissenschaftlichen Lenkungsausschuss. Danach ist die Nutzung für die Forscher wie bisher kostenlos.

Der Autor ist wissenschaftlicher Mitarbeiter des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.



Internet:

Bilder und Kurzbeschreibungen (auf Englisch) der erwähnten Forschungsprojekte finden Sie unter www.gcfs.eu/earth/earthquakes

www.gcfs.eu/superconductivity/

www.gcfs.eu/universes/cosmological_structure_formation

Bilder des Rechners: www.sgi.com/global/de/newsroom/2006/0607-images-lrz-1.html