

Ausgabe 02/2012 – ISSN 1436-753X

AkademieAktuell

ZEITSCHRIFT DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

Schwerpunkt

Ein Zuhause für den „SuperMUC“

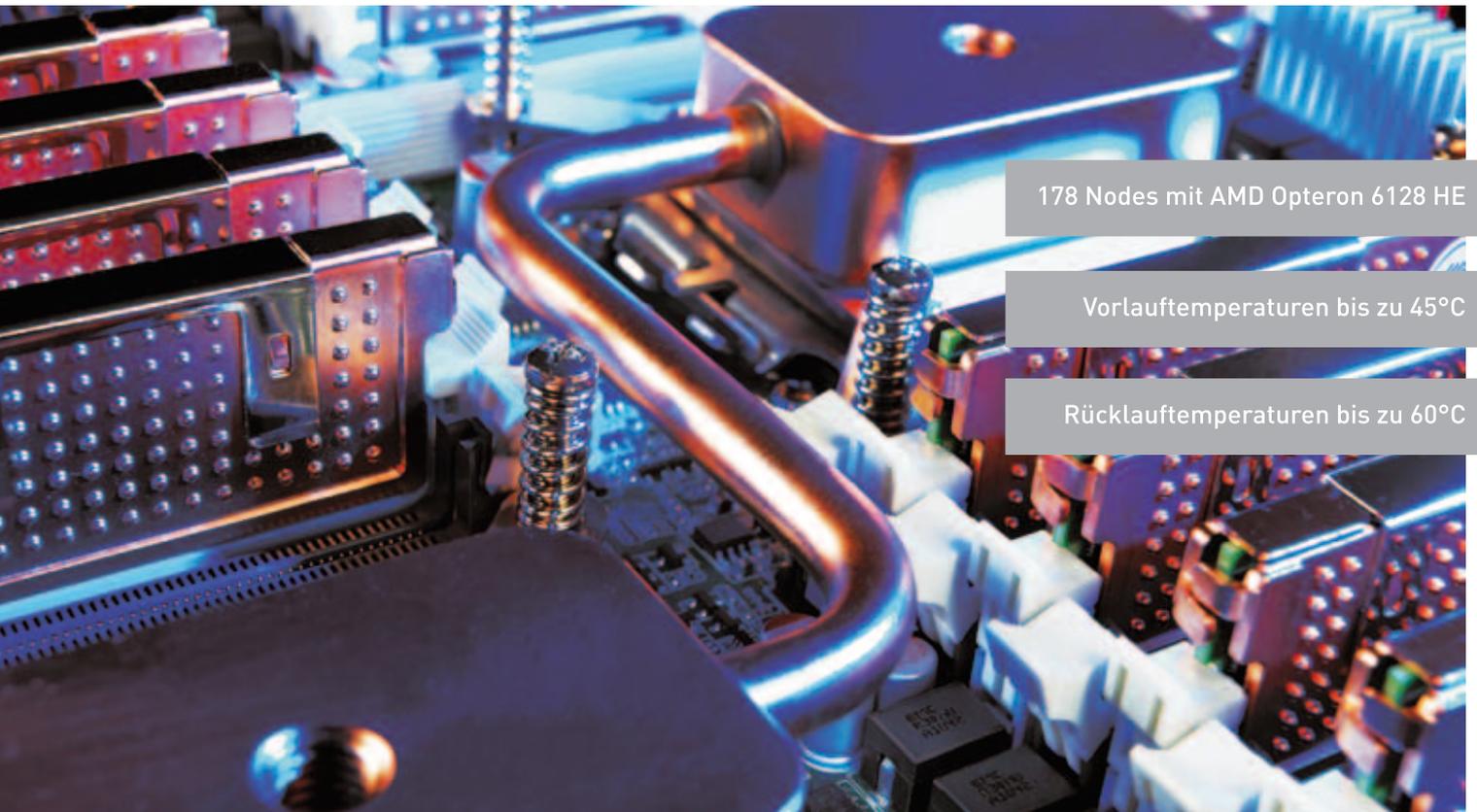
Europas schnellster Rechner geht am
Leibniz-Rechenzentrum in Betrieb



Bayerische
Akademie der Wissenschaften

MEGWARE `CooLMUC`

Der weltweit erste AMD-Cluster mit Warmwasser-Direktkühlung



178 Nodes mit AMD Opteron 6128 HE

Vorlauftemperaturen bis zu 45°C

Rücklauftemperaturen bis zu 60°C

Energie zweifach nutzen - LRZ geht mit MEGWARE neue Wege

Beim CooLMUC von MEGWARE werden Prozessoren und Chipsatz innerhalb der Compute-Knoten direkt und mit warmem Wasser gekühlt. Im Neubau des LRZ wird der Cluster nicht mehr wie in Rechenzentren üblich mit etwa 12°C gekühlt, sondern durch das neue Konzept sind Vorlauftemperaturen von 45°C möglich. Hohe Rücklauftemperaturen eröffnen dann sowohl die Möglichkeit der freien Kühlung als auch die Nachnutzung der entstehenden Abwärme. Das LRZ nutzt die Rücklauftemperaturen von 55°C bis 60°C zum Betreiben einer Adsorptionskältemaschine. Diese stellt 11 kW Kälte zur Verfügung, mit der wiederum konventionelle IT-Technik gekühlt wird. Durch diese zweifache Nutzung der Energie ist der neue LRZ-Cluster unglaublich effizient.

MEGWARE Supercomputing Technology - Made in Germany

MEGWARE Computer GmbH
Nordstraße 19
09247 Chemnitz-Röhrsdorf

Telefon: +49 3722 528-0
E-Mail: cluster@megware.com
www.megware.com

Liebe Leserinnen, liebe Leser!

FÜR DEN FC BAYERN München hat es 2012 ja leider nicht zum Gewinn der Champions League gereicht – umso mehr freut es mich, dass das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in der Champions League der Großrechner erneut ganz vorne mitspielt: Der neue Höchstleistungsrechner „SuperMUC“ ist derzeit der schnellste Rechner Europas und die Nummer 4 weltweit. Mit einem Festakt am 20. Juli 2012 wird SuperMUC offiziell in Betrieb gehen. Das wollen wir auch mit dieser Ausgabe von „Akademie Aktuell“ feiern.



ABB.: ARCHIV

Die Simulation auf Höchstleistungsrechnern ist heute, neben Experiment und Theorie, nicht mehr aus der Wissenschaft wegzudenken. Wozu SuperMUC dient, lesen Sie auf S. 44 bis 73, mit Beiträgen von der Intensivmedizin bis zur Strömungsmechanik, von der Erdbebenforschung bis zur Astrophysik. Und auch in Sachen „Green IT“ ist der neue SuperMUC vorbildlich. Mit der innovativen, bereits preisgekrönten Warmwasserkühlung übernimmt das Leibniz-Rechenzentrum weltweit eine führende Rolle im energie- und kühlungseffizienten Hochleistungsrechnen.

Es gibt aber noch einen zweiten Grund zum Feiern: Vor genau 50 Jahren, 1962, gründeten zwei Mitglieder der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Robert Sauer und Hans Piloty, die Kommission für Informatik. Sie betreibt das Leibniz-Rechenzentrum, das sich von bescheidenen Anfängen zu einem wahren Leuchtturm in der bayerischen Wissenschaftslandschaft entwickelt hat. Unter dem Kürzel „LRZ“ ist es auch national und international eine Marke. Zahlreiche IT-Dienstleistungen – vom Münchner Wissenschaftsnetz bis zur Langzeitarchivierung digitaler Daten – stehen Wissenschaft und Forschung am LRZ zur Verfügung. Auch dazu finden Sie mehrere Beiträge in dieser Ausgabe.

Für die in 50 Jahren geleistete großartige Arbeit gratuliere ich dem LRZ unter seinem Leiter Arndt Bode sowie allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern sehr herzlich. Die Bayerische Akademie der Wissenschaften ist stolz auf ihr Rechenzentrum und wird es weiterhin nach Kräften fördern. Es gehört ganz wesentlich zu den Aufgaben unserer Akademie. Mein Dank gilt schließlich allen Autorinnen und Autoren für ihre Beiträge. Ich hoffe, die Ausgabe zeigt Ihnen, was alles in unserem LRZ steckt!

Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann
Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften



ABB.: CHR. REHBACH

Unser Titel

Das Foto zeigt die Nahtstelle zwischen den beiden Teilen des neuen Doppelwürfels, in dem „SuperMUC“ untergebracht ist, der derzeit schnellste Rechner Europas. Er dient Wissenschaft und Forschung für numerische Simulationen und ist Teil der europäischen Supercomputing-Infrastruktur. Das Leibniz-Rechenzentrum auf dem Forschungscampus Garching erhielt im Zuge der Erweiterung durch das Büro Herzog + Partner auch ein zweites Institutsgebäude und ein Visualisierungszentrum.

INHALT

Heft 41

Ausgabe

02-2012

AKTUELL

- 5 **TOP500-Liste: das LRZ auf Platz 1 in Europa!**
Von Hans Werner Meuer

GRUSSWORTE

- 6 **Wettbewerbsfähigkeit des Innovationsstandortes Deutschland weiter stärken**
Von Annette Schavan
- 7 **Das Leibniz-Rechenzentrum setzt international Maßstäbe**
Von Horst Seehofer
- 8 **Bayern im wissenschaftlichen Wettbewerb vorn**
Von Wolfgang Heubisch
- 9 **Garching ist um eine Attraktion reicher**
Von Hannelore Gabor
- 10 **SuperMUC: an der Spitze der Leistungspyramide**
Von Wolfgang A. Herrmann
- 11 **Ein wichtiger, verlässlicher Partner der LMU München**
Von Bernd Huber

ÜBERBLICK

- 12 **50 Jahre IT-Dienstleistung am Leibniz-Rechenzentrum**
Von Arndt Bode

GESCHICHTE

- 17 **„Der Erfolg ist ein Kind vieler Eltern“**
Ein Gespräch mit Heinz-Gerd Hegering

GEBÄUDE

- 20 **Blickfang am Eingang zum Forschungscampus**
Von Thomas Herzog

- 24 **Green IT am Leibniz-Rechenzentrum**
Von Herbert Huber und Axel Auweter

- 27 **„Fliegende Holländer“**
Von Albert Hien

DIENSTLEISTUNGEN

- 28 **Große Datenmengen verständlich machen**
Von D. Kranzlmüller und Ch. Anthes
- 32 **(K)Ein Grund zum Feiern**
Von Werner Baur
- 36 **Grenzenlose Dienstvielfalt**
Von Wolfgang Hommel
- 38 **MWN, DFN, GÉANT – München weltweit vernetzt**
Von Helmut Reiser

FORSCHUNG

- 40 **Energieeffizienz für die Supercomputer von morgen**
Von Herbert Huber und Axel Auweter
- 42 **Wissenschaft verbinden – Forschungs Kooperationen am LRZ**
Von V. Apostolescu, A. Bode und A. C. Frank

HÖCHSTLEISTUNGSRECHNEN

- 44 **Höchstleistungsrechnen am LRZ**
Von Arndt Bode
- 46 **SuperMUC: ein neuer Höchstleistungsrechner für Europa**
Von Matthias Brehm und Reinhold Bader
- 51 **Ein fliegendes Teleskop in turbulenter Strömung**
Von Christian Engfer
- 54 **Die Evolution unseres Universums**
Von Volker Springel
- 58 **Die virtuelle Lunge**
Von L. Yoshihara, W. A. Wall und M. W. Gee
- 62 **Eines der größten ungelösten Probleme der modernen Teilchenphysik**
Von Gerrit Schierholz
- 66 **Dem Geheimnis einer „Supersäure“ auf der Spur**
Von A. Witt, S. D. Ivanov und D. Marx
- 70 **Erdbeben, die Dynamik des Erdinneren und Supercomputer**
Von B. Schuberth, St. Wenk, H. Igel und H.-P. Bunge

INFO

- 74 **Das LRZ in Kürze**
Von Ludger Palm
- 74 **Impressum**



Supercomputer-Ranking

TOP500-Liste: das LRZ auf Platz 1 in Europa!

Zweimal im Jahr benennt die TOP500-Liste die schnellsten Computer der Welt. Am 18. Juni 2012 landete das LRZ mit

dem SuperMUC auf Platz 1 in Europa und auf Position 4 weltweit.

VON HANS WERNER MEUER

DAS RANKING DER Supercomputer in der TOP500-Liste wird nach dem Leistungsmaß Linpack dadurch bestimmt, wie schnell die Rechner ein dichtbesetztes System von linearen Gleichungen lösen. Das Messergebnis wird in Gleitkommaoperationen pro Sekunde, sog. Flops, angegeben. Auch wenn dieses Leistungsmaß oft kritisiert wird, so zeigt sich nach fast 20 Jahren, dass es genau das war, was die TOP500-Liste so erfolgreich werden ließ. Es gibt für uns bislang noch keine sinnvolle Benchmark-Alternative zu Linpack.

Zum Erfolg der TOP500-Liste

Der Erfolg der Liste basiert auf der Tatsache, dass wir über das Leistungsmaß den Wettbewerb zwischen Herstellern bzw. Ländern und Supercomputing-Zentren fördern. Auch Politiker bedienen sich gerne der Werte, um z. B. Vergleiche zwischen einzelnen Ländern zu ziehen.

Kritik gegenüber Linpack begründet sich u. a. aus der Fehlinterpretation der TOP500-Liste, welche die Position eines Systems in dieser Liste fälschlicherweise als generelle Position auch für andere Applikationen ansieht. Daneben entwickeln Supercomputing-Zentren eigene Benchmarks, etwa den HPC Challenge Benchmark von Jack Dongarra und Kollegen oder GREEN500, das Supercomputer bezüglich ihrer Leistung pro Watt vergleicht.

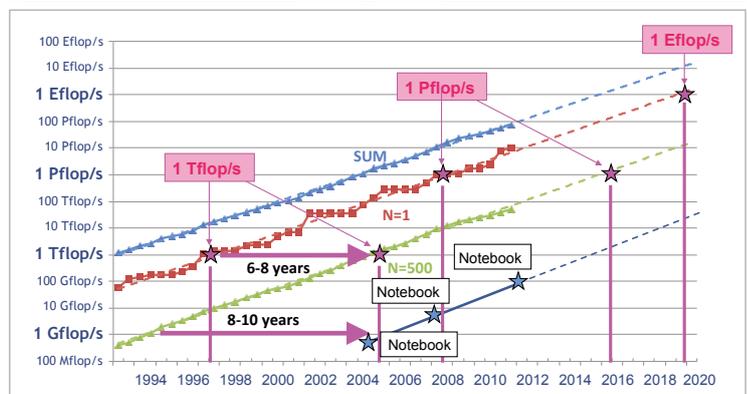
Die Zukunft des Supercomputing

Basierend auf 38 TOP500-Listen und der Annahme, dass sich die Leistungssteigerung wie bisher weiterentwickelt, können wir die Leistung zukünftiger Systeme durch lineare Regression extrapolieren. Alle Kurven (s. Graphik rechts) zeigen dabei exponentielles Wachstum. Nachdem 2008 der Rechner Roadrunner von IBM das erste Petaflop-System war (1 Petaflop = 1.000.000.000.000.000 floating point operations per second), werden 2016 nur noch Petaflop-Systeme in der Liste stehen. Das erste Exaflop-System erwarten wir 2019.

Vergleicht man die TOP500-Liste mit dem Mooreschen Gesetz für Chips, das eine Verdopplung der Leistung in 18 Monaten voraussagt, dann ergibt sich bei Supercomputing-Systemen ein stärkeres Wachstum: Eine Verdopplung der Leistung



H. W. Meuer, M. Koederitz (IBM) und LRZ-Leiter A. Bode (r.) am 18. Juni 2012 in Hamburg.



bei den Nummer 1-Systemen wird in 13,2 Monaten erreicht und in 13 Monaten bei den Systemen, die es noch gerade in die Liste schaffen.

Seit 1993 verteilen sich die Nummer 1-Systeme in Europa auf folgende Länder: 13 x Deutschland, 12 x UK, 9 x Frankreich und 4 x Spanien. Wir freuen uns, dass in der 39. TOP500-Liste der neue SuperMUC des Leibniz-Rechenzentrums das leistungsstärkste System in Europa ist und gleichzeitig die Nummer 4 in der Welt!

Vom Gigaflop zum Exaflop: die Zukunft des Supercomputing, berechnet im April 2012 auf der Basis des Mooreschen Gesetzes.

DER AUTOR

Prof. Dr. Hans Werner Meuer (Universität Mannheim) ist einer der beiden Gründungsautoren der TOP500-Liste (1993) und seit 1986 General Chair der jährlichen International Supercomputing Conference (ISC) in Deutschland.



ABB.: BMBF

Annette Schavan

Wettbewerbsfähigkeit des Innovationsstandortes Deutschland weiter stärken

DIE SIMULATION AUF leistungsstarken Supercomputern hat sich neben der Theorie und dem Experiment längst zu einer wichtigen Säule der Wissenschaft entwickelt. Das gilt für die Grundlagenforschung genauso wie für die unterschiedlichen Anwendungsbereiche. Viele der Forschungsergebnisse, die uns wichtige Hinweise zur Bewältigung gesellschaftlicher Herausforderungen und Ziele wie Klimaschutz, Energieeffizienz und Ausbau der Mobilität gegeben haben, wären ohne Simulationen nicht denkbar gewesen. Auch in Zukunft erwarten wir von der Simulation dafür wichtige Hinweise.

Gemeinsam mit den Ländern Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen hat der Bund bereits im Jahre 2008 damit begonnen, das nationale Höchstleistungsrechenzentrum Gauss Centre for Supercomputing (GCS) international konkurrenzfähig zu erweitern. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) fördert diesen Ausbau mit 200 Millionen Euro. Nach dem Startschuss für das GCS in Jülich und in Stuttgart nimmt jetzt der dritte Supercomputer, SuperMUC, seine Arbeit in Garching auf. Alle drei Zentren arbeiten gemeinsam daran, das Höchstleistungsrechnen in Deutschland voranzubringen und so die Wettbewerbsfähigkeit des Innovationsstandortes Deutschland weiter zu stärken. Dabei zeichnet sich eine spannende Entwicklung ab: Die Standorte des GCS entwickeln sich von reinen Rechenzentren hin zu Kompetenzzentren für das Höchstleistungsrechnen.

Für die Innovations- und Wettbewerbsfähigkeit ist dabei von großer Bedeutung, dass jedes Zentrum sein eigenes Profil hat und eigene Schwerpunkte setzt. In Garching steht beispielsweise die Energieeffizienz im Vordergrund. Durch innovative Kühltechnologie wird beim SuperMUC der Stromverbrauch um voraussichtlich 40 % niedriger sein. Diese Entwicklung weist in die richtige Richtung. Sprechen technische, finanzielle oder ethische Gründe für Simulationen anstelle von Experimenten, dann darf bei den dafür erforderlichen Supercomputern nicht jede Leistungssteigerung automatisch mit einer Steigerung des Energieverbrauchs in gleicher Höhe einhergehen. Fachleute erwarten, dass bereits in naher Zukunft Computer eingesetzt werden, die eine tausendmal so hohe Leistungsfähigkeit besitzen wie die heutigen an den Standorten des GCS. Schon jetzt ist also erkennbar, dass wir beim Höchstleistungsrechnen weiterhin vor großen technologischen Herausforderungen stehen werden.

Prof. Dr. Annette Schavan
Bundesministerin für Bildung und Forschung

Horst Seehofer

Das Leibniz-Rechenzentrum setzt international Maßstäbe



ABB.: BAYER, STK

IM BEREICH DER Computertechnik sind wir Zeugen atemberaubender Entwicklungen. Handelsübliche PCs arbeiten heute auf dem Niveau eines Supercomputers aus den frühen 1990er Jahren. Entsprechend umfangreich sind die Anwendungen, die heute möglich sind. Simulationen und Berechnungen bei chemischen oder physikalischen Problemen, in der Finanzwissenschaft oder bei der Wettervorhersage werden vor allem deshalb immer genauer, weil die Computer eine immer schnellere Verarbeitung von immer mehr Daten ermöglichen.

Für eine moderne Naturwissenschaft und Technik ist Rechnerleistung ein Lebenselixier geworden. Für ein Land, dessen internationales Ansehen und wirtschaftliche Erfolge auch auf seiner Spitzentechnologie und seiner naturwissenschaftlichen Exzellenz beruhen, ist der Bau eines Höchstleistungsrechners somit eine Infrastrukturmaßnahme von höchster Bedeutung.

Seit einem halben Jahrhundert setzt das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in diesem Bereich auch international Maßstäbe. Regional ist es mit seinem umfangreichen Dienstleistungsangebot eine wertvolle Stütze der Arbeit in den Münchner Hochschulen. Bundesweit stellt es im Verbund mit den beiden anderen Höchstleistungsrechenzentren in Jülich und Stuttgart Rechenkapazitäten zur Verfügung, die dazu beitragen, die Welt von heute besser zu verstehen und die von morgen zu gestalten.

Umso mehr freue ich mich, dass mit der Inbetriebnahme des neuen SuperMUC ein weiterer wichtiger Schritt bei der Entwicklung der Höchstleistungsrechner in unserem Land vollzogen wird. Dabei ist es nicht allein die immense Kapazität der Anlage, die beeindruckt, sondern auch ihr neuartiger Aufbau. Die Warmwasserkühlung ermöglicht eine höhere Leistung der Prozessoren – und sorgt zugleich durch die daran angeschlossene Heizung des Gebäudes für eine Energiebilanz, die weltweit vorbildlich ist.

Mit dem SuperMUC unterstreicht das Leibniz-Rechenzentrum seine Stellung als international herausragendes Forschungszentrum. Ermöglicht hat dies die erfolgreiche Zusammenarbeit zwischen dem Freistaat Bayern und dem Bund. Realisiert wurde dieses Großprojekt aber auch durch die Leidenschaft und das Engagement der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aller beteiligten Partner. Ihnen sei an dieser Stelle herzlich gedankt.



Horst Seehofer
Bayerischer Ministerpräsident



ABB.: STMWFK

Wolfgang Heubisch

Bayern im wissenschaftlichen Wettbewerb vorn

MIT 50 JAHREN SO ATTRAKTIV und leistungsfähig wie nie zuvor – dem Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ist dies in glänzender Weise gelungen. Mit dem eleganten Erweiterungsbau, dem beeindruckenden Visualisierungszentrum und dem SuperMUC-Rechner, der zur Weltspitze zählt, ist das LRZ im Jubiläumsjahr gerüstet für den Aufbruch in die virtuellen Welten der Zukunft. Bei alledem stehen stets die Herausforderungen der Gegenwart im Mittelpunkt. Das zeigt nicht zuletzt die beispielhafte Energie- und Ressourceneffizienz des SuperMUC, die heuer mit dem Deutschen Rechenzentrumspreis 2012 ausgezeichnet wurde.

Wissenschaftlicher und technologischer Wettbewerb entscheidet sich immer öfter an Rechenkapazitäten, Simulationssoftware und IT-Kompetenz. Zusammen mit Universitäten, außeruniversitären Forschungseinrichtungen und innovativen Unternehmen trägt das Leibniz-Rechenzentrum dazu bei, dass Bayern in diesem Wettbewerb vorne bleibt. Deshalb hat die Bayerische Staatsregierung den Ausbau des LRZ in das Investitionsprogramm „Bayern 2020“ aufgenommen. Auch für den laufenden Unterhalt werden beträchtliche Haushaltsmittel aufgewendet. Warum das richtig war und weiterhin wichtig ist, zeigen exemplarisch die Beiträge in diesem Heft.

In jüngster Zeit hat sich das LRZ als Teil des nationalen Gauss Centre for Supercomputing und des europäischen Rechenzentrums-Konsortiums PRACE sowie als Projektpartner hohes Ansehen im In- und Ausland erworben. Dazu gratuliere ich den Beteiligten sehr herzlich. Nicht vergessen werden soll darüber aber die Bedeutung des LRZ als IT-Dienstleister für die Wissenschaft in München und ganz Bayern, als Datenarchiv für Forschungseinrichtungen und wissenschaftliche Bibliotheken sowie als Kompetenzzentrum für Netz- und Kommunikationstechnologien.

All diese Leistungen wären nicht möglich ohne die zahlreichen fachkundigen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Ihnen wie auch dem Direktorium, den Partnern und allen Unterstützern und Förderern des Leibniz-Rechenzentrums gilt an dieser Stelle mein persönlicher Dank für ihr Engagement.

So wünsche ich dem „Best Ager“ LRZ alles Gute zum Geburtstag und viele weitere erfolgreiche Jahre.

Dr. Wolfgang Heubisch

Bayerischer Staatsminister für Wissenschaft, Forschung und Kunst

Hannelore Gabor

Garching ist um eine Attraktion reicher

HEUTE IST EIN GUTER TAG für die Wissenschaft hier in Garching. Der neue Höchstleistungsrechner SuperMUC, der nun offiziell in Betrieb geht, liefert eine unfassbar große Menge an Rechenleistung. Das übersteigt unser Verständnisvermögen, zumindest das eines Laien. Aber man bekommt eine Ahnung davon, dass es sich bei dem neuen Höchstleistungsrechner um etwas ganz Außergewöhnliches handelt. Und wieder ist die Universitätsstadt Garching um eine besondere Attraktion aus Wissenschaft und Forschung reicher.

Seit der Eröffnung des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften sind inzwischen sechs Jahre vergangen. Seitdem hat sich nicht nur in Garching, sondern auch am Hochschul- und Forschungscampus einiges verändert. Vor sechs Jahren wurde die U-Bahn an den Campus eröffnet, heute kann man sich die Universitätsstadt Garching ohne U-Bahn überhaupt nicht mehr vorstellen, denn nicht nur am Hochschul- und Forschungszentrum, sondern auch im Rest Garchings wird viel dafür getan, die Stadt zu einem einzigartigen Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort auszubauen. Mit fast 11.000 Studenten am Campus und den sonstigen Beschäftigten ist es für die Universitätsstadt Garching von großer Bedeutung, ihren Status als hervorragender Standort für Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft zu erhalten und zu fördern. Das Beste, was eine moderne Universitätsstadt für „ihre“ Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler tun kann, ist, dafür zu sorgen, dass sie in unserer Stadt beste Bedingungen zum Arbeiten und Leben haben.

Ohne langfristiges und nachhaltiges Handeln können sich auch Wirtschaftsunternehmen nicht erfolgreich weiterentwickeln. Neben diversen Neubauten für die verschiedensten Wissenschafts- und Forschungseinrichtungen wird sich in Zukunft daher auch forschungsnahes Gewerbe direkt am Campus ansiedeln können. Die planungsrechtlichen Voraussetzungen werden derzeit geschaffen.

Die Stadt unternimmt diese Anstrengungen, weil wir wollen, dass Garching ein international attraktiver Standort für Spitzenforscherinnen und Spitzenforscher ist. Es hat sich in den vergangenen Jahren immer wieder gezeigt, dass es ein großes Interesse am Wissenschafts- und Innovationsstandort Garching gibt – nicht nur im Blick auf den Hochschul- und Forschungscampus und auf das heutige große Projekt, sondern auch durch das Zusammenspiel interessanter Unternehmen mit den Hochschulen und Forschungseinrichtungen.

Zur Einweihung des SuperMUC hier in der Universitätsstadt Garching beglückwünsche ich das Direktorium und alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter und freue mich auf die weiterhin guten, fruchtbaren Beziehungen zwischen der Stadt Garching und dem Leibniz-Rechenzentrum.



Hannelore Gabor
Erste Bürgermeisterin
Stadt Garching bei München



ABB.: STADT GARCHING BEI MÜNCHEN



ABB.: A. HEDDERGOTT

Wolfgang A. Herrmann

SuperMUC: an der Spitze der Leistungspyramide

DER NEUE HÖCHSTLEISTUNGSRECHNER SuperMUC setzt neue Maßstäbe für das wissenschaftliche Rechnen weltweit. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ermöglicht Forscherinnen und Forschern mit der Inbetriebnahme von SuperMUC, mit einem der weltweit leistungsfähigsten und energieeffizientesten, preisgekrönten Universalrechner zu arbeiten.

Bereits im März wurde das LRZ mit dem Deutschen Rechenzentrumspreis 2012 in der Kategorie „Energie- und Ressourceneffiziente Rechenzentren“ für die weltweit einzigartige Energieeffizienz des neuen Systems ausgezeichnet.

High Performance Computing-Infrastrukturen sind für die wissenschaftliche Wettbewerbsfähigkeit Deutschlands unverzichtbar. Die Einbindung des LRZ in das Gauss Centre for Supercomputing hat sich bewährt. Sie stellt einen wichtigen Beitrag zur europäischen Höchstleistungsrechner-Infrastruktur PRACE dar.

Auch der Wissenschaftsrat bescheinigt dem LRZ in seinem Positionspapier „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ die richtige Strategie. Empfohlen wird für Deutschland eine aus verschiedenen Rechenleistungsstufen bestehende Pyramide mit wenigen Rechenzentren an der Spitze. An dieser Spitze stehen wir.

TUM und LRZ sind aufs Engste miteinander verbunden: personell, fachlich und räumlich. Das LRZ leistet einen elementaren Beitrag zum effizienten Forschen & Lehren an der TUM und zur schrittweisen Umsetzung der Vision einer „digitalen Hochschule“. Das Projekt IntegraTUM war dafür beispielgebend.

Ich gratuliere dem LRZ-Team zum neuen Meilenstein im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens auf dem Garching Campus. Gemeinsam setzen wir auf eine weiterhin fruchtbare Partnerschaft im Geiste des wissenschaftlich-technologischen Fortschritts. Einen persönlichen Glückwunsch übermittle ich meinem Kollegen und langjährigen Vizepräsidenten Arndt Bode, dem als Chef des Leibniz-Rechenzentrums alle Faszination und Tatkraft im Dienste einer international wirksamen Wissenschaft erhalten bleiben möge. Bund und Land verdienen unseren respektvollen Dank für die Bereitstellung eines Finanzvolumens, wie es in der Wissenschaft wahrlich nicht alle Tage vorkommt.

Prof. Dr. Wolfgang A. Herrmann
Präsident
Technische Universität München

Bernd Huber

Ein wichtiger, verlässlicher Partner der LMU München



DAS JAHR 2012 MARKIERT einen ganz besonderen Zeitpunkt für das Leibniz-Rechenzentrum. Zum einen jährt sich die Gründung der „Kommission für Informatik“ der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, auf die das Leibniz-Rechenzentrum zurückgeht, zum 50. Mal. Zum anderen wird am 20. Juli 2012 der neue Höchstleistungsrechner SuperMUC im eigens dafür errichteten Erweiterungsbau des Leibniz-Rechenzentrums in Garching in Betrieb genommen.

Die Inbetriebnahme von SuperMUC wird am Wissenschaftsstandort München und weit darüber hinaus mit großer Spannung erwartet – wird mit diesem System doch der derzeit leistungsfähigste Rechner Europas in den Dienst der Wissenschaft gestellt, der auch weltweit in der hart umkämpften Liga der Supercomputer ganz vorne mitspielt. Die Architektur von SuperMUC ist dabei darauf ausgerichtet, für ein breites Spektrum wissenschaftlicher Anwendungen exzellente Resultate zu erzielen. Über die enorme Rechenleistung hinaus setzt SuperMUC neue Maßstäbe bei der Energieeffizienz.

Mit dieser bahnbrechenden Entwicklung wird einmal mehr die herausragende Bedeutung des Leibniz-Rechenzentrums für Wissenschaft und Forschung in Deutschland und Europa, insbesondere aber auch an der Ludwig-Maximilians-Universität München unter Beweis gestellt. Hier sind es – neben vielen anderen – die Gebiete der Astrophysik, Biophysik, Quantenchemie, Kristallographie und Seismologie, die von der Rechenleistung und Vielseitigkeit des neuen Systems in Garching profitieren. Doch auch durch die Bereitstellung der Infrastruktur des Münchner Wissenschaftsnetzes sowie zentraler Informations- und Archivsysteme ist das Leibniz-Rechenzentrum seit vielen Jahren ein wichtiger und verlässlicher Partner für unsere Universität.

Im Namen der Ludwig-Maximilians-Universität München gratuliere ich dem Direktorium und allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Leibniz-Rechenzentrums sehr herzlich zum Jubiläum und zu der Einrichtung des neuen Höchstleistungsrechners SuperMUC, verbunden mit dem Wunsch auf eine weiterhin gute und erfolgreiche Zusammenarbeit in den kommenden 50 Jahren.



Prof. Dr. Bernd Huber
Präsident
Ludwig-Maximilians-Universität München



Einführung

50 Jahre IT-Dienstleistung am Leibniz-Rechenzentrum

Vom Münchner Rechenzentrum zum
international angesehenen Dienst-
leistungszentrum für die Wissenschaft.

VON ARNDT BODE



Das Leibniz-Rechenzentrum auf dem Forschungscampus in Garching: Links vorne der 2011 verdoppelte Rechnerwürfel, in dem der neue Höchstleistungsrechner SuperMUC untergebracht ist; rechts daneben die Instituts- und Hörsaaltrakte sowie der Quader des neuen Visualisierungszentrums; im Hintergrund das Gebäude der Fakultäten für Mathematik und Informatik der TU München.

FÜNFZIG JAHRE BESTEHT das Leibniz-Rechenzentrum als Einrichtung der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Im Vergleich zur über 250-jährigen Geschichte der Akademie ist das nur ein kurzer Zeitraum. Berücksichtigt man aber, dass Informatik und Informationstechnik im engeren Sinne als Wissenschaft erst eine knapp 80-jährige Geschichte haben und Informatik als Fach in Forschung und Lehre in Deutschland erst Ende der 1960er Jahre eingeführt wurde, dann wird ersichtlich, dass das LRZ wesentlicher Bestandteil der Geschichte der Informatik ist. In diesem Zeitraum hat sich die Technik der Rechner und ihrer Nutzung revolu-

tionär verändert und damit Wissenschaft, Wirtschaft und tägliches Leben stark beeinflusst.

Das LRZ wurde 1962 – zunächst unter anderem Namen – von Robert Sauer und Hans Piloty gegründet. Die beiden Professoren der damaligen Technischen Hochschule München waren nicht nur Lehrstuhlinhaber für Mathematik bzw. Nachrichtentechnik, sondern auch ordentliche Mitglieder der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Ihre Initiative, das Rechnen für die Wissenschaft aus den großen Münchner Universitäten als gemeinsame Dienstleistung in ein wegen seiner wissenschaftlichen Aufgabenstellung der Akademie zugeordnetes Rechenzentrum „outzusourcen“ – obgleich man diesen Begriff damals nicht kannte –, erwies sich als bahnbrechend.

ABB.: E. GRAF



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften



**Das
Leibniz-Rechenzentrum
IT-Dienstleistungen**



<p>Direktorat: Prof. Dr. A. Bode (Vorsitzender) Prof. Dr. J. Bangert Prof. Dr. H.-G. Hagemann Prof. Dr. D. Kowalewski</p>	<p>Leibniz-Rechenzentrum Rechenzentrum 1 85748 Garching UST-ID-Nr. DEK11059931</p>	<p>Telefon: (089) 5381-4000 Telefax: (089) 5381-9700 E-Mail: lrz@lrz.de Internet: http://www.lrz.de</p>	<p>Öffentliche Verkehrsmittel: U3 Garching-Forschungszentrum</p>
--	---	---	---

DLK LRZ
Überblick
2012-V1.0
01.12.2011

Kostenpflichtige Dienstleistungen des LRZ im Überblick

Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	2
2	Allgemeiner Leistungsumfang	4
3	Dienstleistungen im Bereich "Kommunikationsnetze"	5
3.1	Mitnutzung des MWN	5
3.2	Mithilfe bei der Planung von Netzen	5
3.3	Betreuung von Netzen	5
3.4	Nutzung virtueller Firewall	6
3.5	Registrierung von Domain-Namen	6
3.6	Internetzugang bei Tagungen	6
3.7	Videoübertragungen im MWN	6
4	Dienstleistungen im Bereich "Rechner und Speicher"	7
4.1	Attended Housing von Servern	7
4.2	Attended Housing von Cluster-Knoten	7
4.3	Hosting von virtuellen Maschinen	8
4.4	Bereitstellung von Online-Speicher	8
4.5	Datensicherung (Backup)	8
4.6	Archivierung von Daten	9
5	Dienstleistungen im Bereich "Applikationen"	10
5.1	Mailhosting	10
5.2	Webhosting und zugehörige MySQL-Datenbanken	10
5.3	Datenbanken	10
5.4	Desktop-Management	11
5.5	Microsoft Sharepoint	11
5.6	Mehrfach-, Campus- und Landes-Lizenzen	11
5.7	Serverzertifizierung in der DFN-PKI	11
5.8	Kurse und Schulungen	12
6	Dienstleistungen im Bereich "Gebäude/Infrastruktur"	13
6.1	Hörsaal- und Seminarraumnutzung	13
6.2	Kursraumnutzung	13
7	Nutzerklassen und Dienstleistungsmatrix	14
8	Serviceklassen und Service Parameter	18
8.1	Betriebszeit	18
8.2	Störungannahmezeit	18
8.3	Onlinezeit	18
8.4	Ausfallzeit	18
8.5	Verfügbarkeit	18
8.6	Reaktionszeit	19
8.7	Wiederherstellungszeit / Mean-time-to-repair (MTTR)	19
8.8	Wartungsfenster	19

Seite 1 von 19

**Dienstleistungskatalog des LRZ,
Ende 2011.**

International angesehenes Wissenschafts- und Dienstleistungszentrum

Aus dem LRZ, das in seinen Gründungsjahren zunächst die Wissenschaftler von numerischen Routineaufgaben entlastete, um ihnen mehr Freiraum für die Entwicklung grundsätzlich neuer Erkenntnisse zu geben, entstand dann im weiteren Verlauf ein international angesehenes Dienstleistungszentrum für die Wissenschaft, das neben dem Rechnen auch die Vernetzung der wissenschaftlichen Einrichtungen über verteilte Infrastrukturen und Internet, das Bearbeiten und Archivieren großer Datenmengen sowie viele administrative Aufgaben in Forschung und Lehre übernommen hat.

Die Anzahl der Dienste des LRZ ist kontinuierlich gewachsen. Ein Dienstleistungskatalog beachtlichen Umfangs beschreibt heute das Angebot des LRZ in den vier großen Abteilungen Hochleistungsrechnen, Server und Datenspeicher, Kommunikationssysteme, Benutzernahe Dienste und Systeme sowie Zentrale Infrastrukturdienste.

War das LRZ zunächst nur als Einrichtung für die Münchner Universitäten gedacht, so ist seine stark regional ausgerichtete Aufgabenstellung parallel zur Globalisierung der Informatik-Dienste schnell über München hinaus gewachsen:

- Als Betreiber des Münchner Wissenschaftsnetzes liefert das LRZ für weit mehr als 120.000 Benutzer und über 100.000 angeschlossene Rechner die Verbindung in das Deutsche Forschungsnetz DFN, das europäische Netz GÉANT und das weltweite Internet. Die Pilotierung neuer Netztechniken und Dienste erfolgt dabei oft im internationalen Zusammenhang.
- Die Langzeitarchivierung und Langzeitverfügbarkeit sind nationale Aufgaben, die das LRZ gemeinsam mit der Bayerischen Staatsbibliothek, dem Bibliotheksverbund Bayern und vielen Partnern außerhalb Bayerns angeht.
- Grid-Computing und wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen sind Aufgaben und Dienstleistungen, die sich schon wegen der hohen Investitionen in die Infrastruktur nur international lösen lassen. In beiden Bereichen ist das LRZ Teil der führenden europäischen Zentren. Für das wissenschaftliche Hochleistungsrechnen betreibt das LRZ inzwischen den dritten nationalen Hochleistungsrechner. SuperMUC, der als Beitrag des Gauss Centre

DER AUTOR

Prof. Dr. Arndt Bode leitet seit 2008 als Vorsitzender des Direktoriums das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Seit 1987 hat er den Lehrstuhl für Rechner-technik und Rechnerorganisation der TU München inne. Er ist ein international anerkannter Experte auf dem Gebiet der Rechnerarchitektur, insbesondere im Bereich des Entwurfs und der Programmierung Paralleler und Verteilter Systeme. Seit 2007 ist er Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

for Supercomputing (GCS) für Wissenschaftler über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) in ganz Europa nutzbar ist, zählt derzeit zu den zehn leistungsfähigsten Rechnern der Welt.

Viele weitere überregionale Dienste bietet das LRZ heute an, z. B. deutschlandweite Software-Lizenzen für Hochschulen oder das Hosting des Dialogorientierten Serviceverfahrens DoSV der Stiftung Hochschulzulassung für alle deutschen Universitäten.

Neben die funktionale Ausweitung der Dienste tritt heute aber auch die Professionalisierung des Angebots im Sinne der Verpflichtung zur Einhaltung von Qualitätsmerkmalen für den Benutzer. Wurden die Dienste früher nach „best effort“ angeboten, so spricht man heute von QoS: „Quality of Service“ in quantifizierbaren Größen. Das LRZ betreibt diese Professionalisierung durch interne Arbeitskreise, Schulung der Mitarbeiter und mit dem Ziel einer ISO-20000 Zertifizierung.

Zur Professionalisierung der Dienste des LRZ ist weiterhin die Bearbeitung von folgenden Querschnittsthemen notwendig:

- Die Sicherheit und Vertraulichkeit von Daten und ihrer Verarbeitung werden durch viele Maßnahmen unterstützt, von der Bereitstellung von Firewalls bis zur Zertifikaterteilung. Diese Sicherheit von IT-Dienstleistungen wird immer wichtiger, weil große Teile unseres privaten und beruflichen Lebens vom Computer abhängig sind.
- Der energieeffiziente Betrieb aller Rechenanlagen, die das LRZ betreibt, ist angesichts siebenstelliger jährlicher Stromrechnungen ökologisch sinnvoll und finanziell lebensnotwendig. Die Auszeichnung des LRZ mit dem Deutschen Rechenzentrumspreis 2012 in der Kategorie „Energie- und Ressourceneffiziente Rechenzentren“ zeigt, dass im LRZ durchgeführte Entwicklungen einer effizienten Infrastruktur für den Betrieb von Großrechenzentren Vorbildcharakter gerade für ein Strom-Hochpreisland wie Deutschland haben.

Dass das LRZ mit der technischen Entwicklung der Informatik und Informationstechnik nicht nur Schritt halten konnte, sondern diese auch nachhaltig beeinflusst, liegt an folgenden Umständen, die die Gründer Sauer und Piloty sicher noch nicht vorhersehen konnten:

- Die satzungsgemäßen „Kunden“ des LRZ, die beiden großen Münchner Universitäten Ludwig-Maximilians-Universität und Technische Universität München, haben sich prächtig entwickelt. Beide genießen den Status der Exzellenzuniversität und führen erfolgreiche Fakultäten für Mathematik und Informatik mit sich ergänzenden Schwerpunkten, die TU darüber hinaus für Elektro- und Informationstechnik, die in enger Kooperation mit dem LRZ bei zahlreichen nationalen und internationalen Forschungsprojekten und beim täglichen Betrieb stehen. Neben sachlichem Knowhow sind so auch der Nachwuchs des LRZ und die Weiterqualifikation seiner Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter sichergestellt.
- Die Mitglieder des Direktoriums des LRZ haben über die fachliche Ausrichtung ihrer Lehrstühle in den Informatik-Fakultäten die Weiterentwicklung der Dienstleistungen des LRZ vorangetrieben. Solche Themen sind: Betriebssysteme und Programmiersprachen, Rechnetze und Netzmanagement, Algorithmen und numerische Verfahren, parallele, verteilte und mobile Systemarchitekturen und ihr sicherer und energieeffizienter Einsatz.

Im März 2012 erhielt das LRZ für die weltweit einzigartige Energieeffizienz seines neuen Höchstleistungsrechners SuperMUC den Deutschen Rechenzentrumspreis 2012 in der Kategorie „Energie- und Ressourceneffiziente Rechenzentren“. Im Bild: Arndt Bode, Leiter des LRZ (r.), sein Stellvertreter Victor Apostolescu (l.) und Axel Auweter (Mitte) von der Gruppe HPC Server und Dienste.



ABB: LRZ



Der Doppelwürfel in der Abendsonne.

- Die Mitglieder der Kommission für Informatik, die aus unterschiedlichen Fachgebieten von TUM, LMU und Bayerischer Akademie der Wissenschaften sowie anderen bayerischen Universitäten gewählt oder entsandt werden und die Geschicke des LRZ im Sinne eines Aufsichtsgremiums überwachen, sorgen für weitere fachliche Expertise.
- Die Bayerische Staatsregierung hat die Bedeutung der IT-Infrastruktur für eine effiziente Wissenschaft stets anerkannt und deshalb – teilweise in Kofinanzierung mit dem Bund – das LRZ nachhaltig finanziert.

Künftig werden die Dienste des LRZ noch umfangreicher und heterogener: Während die Nutzer der Höchstleistungsrechner eher experimentelle Spitzensysteme mit eigenentwickelter, forschungsspezifischer Anwendungssoftware aus Effizienzgründen hardwarenah programmieren, werden die Nutzer der meisten IT-Dienstleistungen, etwa E-Mail, Archivierung, Bibliotheks-, Administrations- und mobile Dienste, auf vielfach geschichtete, integrierte Systeme mit Standardsoftware vertrauen. Die Welt des LRZ bleibt spannend: Soziale Netzwerke und ubiquitäre, teilweise autonome Systeme werden die Dienstleistungen für die Wissenschaft der Zukunft prägen.

Literatur

Eine ausführliche Beschreibung der Geschichte des LRZ findet sich im kürzlich erschienenen Buch von Heinz-Gerd Hegering: 50 Jahre LRZ. Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Chronik einer Erfolgsgeschichte (2012),

ISBN 978-3-00-038333-5.



Jubiläum

„Der Erfolg ist ein Kind vieler Eltern“

Das Leibniz-Rechenzentrum, heute eines der größten wissenschaftlichen Rechenzentren Europas, wird 50 Jahre alt. Wie aber fing alles an? Ein Gespräch mit Heinz-Gerd Hegering.

„Akademie Aktuell“: Wie kam es zur Gründung des Leibniz-Rechenzentrums?

HEINZ-GERD HEGERING: Die Gründung bahnte sich 1961 an. Damals hatten die Wissenschaftler von TH München, Universität München und Max-Planck-Gesellschaft das Gefühl, wir brauchen unbedingt einen Rechner in München. Die Frage war, wo soll er stehen? Man entschied sich für einen neutralen Ort. Johannes von Elmenau vom Kultusministerium war sehr für diese Sache zu gewinnen, und dann kam es zu dem Entschluss, die Akademie als Träger zu nehmen. Diese gründete 1962 die „Kommission für elektronisches Rechnen“, wie sie zunächst hieß.

Wer waren damals die führenden Köpfe?

Ganz entscheidend waren die Akademiemitglieder Hans Piloty und Robert Sauer, das waren diejenigen, die die Sache vorwärtsgetrieben haben. Man muss dazu wissen, dass der LRZ-Gründung

etwas vorausgegangen war: Die TU München hatte unter Piloty und Sauer bereits einen Rechner entwickelt, die PERM – insofern war die systemtechnische Kompetenz in München ganz klar gegeben.

Für Ihre Festschrift über die Geschichte des LRZ haben Sie im Archiv recherchiert. Was hat Sie beim Aktenstudium am meisten überrascht?

Ich bin 1968 zum LRZ gekommen, als wissenschaftlicher Mitarbeiter. Und was mir nach meinem Aktenstudium besonders imponiert, ist der persönliche Einsatz der damaligen Gründer. Piloty und Sauer habe ich genannt, F. L. Bauer muss ich noch nennen und im Ministerium Herrn von Elmenau.

Wie hat sich das Aufgabenspektrum entwickelt?

Rasant. Man muss dabei sehen, dass die Versorgungskonzepte für das LRZ eigentlich immer innovativ waren. Wir waren stets etwas eher dran als viele andere. Wir waren z. B. die Allerersten, die in Deutschland ein 10 Megabit/s-Ethernet installiert haben.

Auch in Bezug auf das Höchstleistungsrechnen waren wir ausgesprochen früh dran. Schon 1981 haben wir bei der DFG ein Projekt beantragt, um unsere Benutzer auf Vektorrechner – wie es damals hieß – vorzubereiten. Der erste Rechner kam 1987. Ich denke, ein wichtiger Vorteil war auch, dass die Leitung dieses Hauses mit einem Lehrstuhl verbunden war – und das war bei anderen Rechenzentren nicht so gegeben. So hat man es in München geschafft, dass die Forschung am LRZ bzw. die Entwicklung neuer Technologien ganz eng mit der universitären Forschung zusammenhing.

1971 beschloss die Kommission für elektronisches Rechnen eine „künstlerische Darstellung der Herren Piloty und Sauer in Form je eines Halbrelichs“. Die beiden Marmorplatten wurden in der Eingangshalle des LRZ an der Barer Straße angebracht. Zur Einweihung des Neubaus in Garching fanden sie 2006 ihren Platz im Durchgang vom Instituts- zum Hörsaaltrakt.

ABB.: LRZ





Links: Umgebautes Wohnhaus, Richard-Wagner-Straße 18, erste Heimat des LRZ.



Rechts: Der Neubau in der Barer Straße 21 südlich der Alten Pinakothek, um 1975.



Das Münchner Wissenschaftsnetz ist heute die „Hauptschlagader der Wissenschaftskommunikation“ in München. Wie kam es dazu?

Da die einzelnen Institute der Münchner Universitäten so weit über das große Stadtgebiet verstreut waren, war es unbequem, dass alle Kunden des LRZ mit ihren Lochkartenstapeln immer zum Rechenzentrum pilgern mussten. Sobald die technischen Gegebenheiten vorhanden waren, lag es nahe, von ferne etwas zu übertragen. Und das funktionierte zuerst ganz primitiv über Fernschreiber, das heißt, über Lochstreifen hat man die Programmeingaben gemacht, da musste man zumindest schon mal nicht mehr zum LRZ hinrennen. Später hat man Programme im Rechenzentrum auf Magnetbänder und Plattenbereiche gespeichert. Da musste man von der Ferne aus nur noch die Abarbeitung eines Programms anstoßen. Bei den Nutzern gab es ein richtiges Gerangel um die Zuteilung der damals knappen Ressourcen – wer bekommt einen Lochstreifenleser, wer kriegt eine Datenstation, bei der man auch Programmstapel abgeben konnte in Form von Lochkartenstapeln?

Der nächste große Schritt war das Aufkommen von PCs und später von kleinen Rechnern und Servern. Ungefähr zu der Zeit entstanden auch Netzkonzepte, die technisch nicht mehr an den Hersteller des Hauptsystems gebunden waren. Das war Mitte der 1980er Jahre. So entstand ganz langsam ein Netz, und das wurde dann so perfekt in der Übertragungsmöglichkeit, dass auch die Max-Planck-Gesellschaft, die anderen Hochschulen, die Ministerien, weitere Wissenschaftseinrichtungen kamen und fragten, können wir uns da nicht dranhängen?

Das LRZ ist ja zweimal umgezogen. Wie kam es zu den Standortentscheidungen?

Für den ersten Umzug, von der Richard-Wagner-Straße in die Barer Straße, ist das einfach gesagt. Als wir in die Richard-Wagner-Straße 18 eingezogen sind, war von vornherein klar, dass es ein Provisorium ist. Man hat ja dort Wohnungen für das Rechenzentrum umgebaut. Der Neubauplatz auf dem Nachbargrundstück ließ sich dann nicht realisieren, aber die TU hatte zur gleichen Zeit ein riesiges Neubaugebiet südlich der Alten Pinakothek erschlossen und fünf Neubauten hingestellt. Für das LRZ wurde 1970 kurzfristig ein sechster baugleicher Würfel errichtet.

Allerdings konnte man 30 Jahre später das LRZ an der Barer Straße nicht mehr ausbauen. Es gab es keine Flächen, aber man hatte auch keine Chance, den entsprechenden Stromanschluss dorthin zu bekommen und klimatechnische Infrastrukturen aufzubauen, um neue Superrechner aufzunehmen. Denn in der Endzeit der Barer Straße 21 hatten wir ja schon den ersten nationalen Supercomputer, die Hitachi. Aber das war nur möglich mit riesigen Anstrengungen baulicher Art. Wir mussten auf das Dach des LRZ Rückkühlwerke und Ähnliches bauen und kamen sofort in Konflikt mit dem Denkmalschutz, weil das Gelände um den Karolinenplatz unter Ensembleschutz stand. Man konnte aus ungünstiger Perspektive am Karolinenplatz den Aufbau sehen. Und dann ging es auch noch um Lärmentwicklung und Emissionsbefürchtungen in der Nachbarschaft.



In der ganzen Umgebung ließ sich nichts realisieren, wo das LRZ zukunftsorientiert unterkommen konnte. Also kam die Frage, wo sonst? Kurzzeitig standen Martinsried, Großhadern oder Garching zur Debatte. Wenn man sich das näher überlegt, dann war der Schwerpunkt der Kundschaft eher in Garching angesiedelt, also ist man 2006 hierher gegangen. Dass das bei den Mitarbeitern zunächst nicht beliebt war, ist ja ganz klar – ein Umzug von der Innenstadt nach Garching, damals ohne U-Bahn.

Aber ich muss sagen, das LRZ hat einen richtigen Sprung gemacht, als es hierher kam – interessanterweise! Der Neubau führte zu einer Rezentralisierungswelle: Man hatte in den 1980er und 1990er Jahren in Deutschland ein Konzept der „dezentralen kooperativen Grundversorgung“. Die Institute sollten ihren Normalbedarf an Rechnerkapazität selber abdecken können und nur für Anforderungen mit höheren Kapazitätsansprüchen zum jeweiligen Rechenzentrum gehen. Da die Rechner aber immer größer wurden und man immer mehr Infrastruktur brauchte, gerieten die Hochschulen überall in räumliche Schwierigkeiten. Wir hatten hier mit dem Neubau in Garching eine sehr gute Infrastruktur, so dass Institute, die viele lokale Rechner hatten, diese freiwillig – was vorher nie der Fall war! – abgeben wollten. Aus den genannten Gründen, aber auch wegen der Betriebssicherheit, denn das LRZ ist ja rund um die Uhr besetzt.

Daher hatten wir bereits zwei Jahre nach dem Einzug in einen Riesenneubau keinen Platz mehr. Ich kann mich erinnern, dass ich 1 1/2 Jahre nach der Einweihung einen Antrag auf Verdoppelung

des Hauses gestellt habe. Ich hatte dabei größte Hemmungen politischer und sonstiger Art, aber im Grunde war es eine Konsequenz unseres Erfolgs. Der zweite Grund für die Erweiterung war natürlich die immense Entwicklung im Höchstleistungsrechnen.

Der neue Rechner wird den schönen Namen „SuperMUC“ tragen. Wie kam es dazu?

Wir haben lange überlegt, wie das Ding heißen soll. „SuperMUC“ ist meine Idee gewesen. Dazu muss man wissen, die Jülicher hatten immer einen Namen, wo „JU“ vorkam, z. B. JUGENE. Arndt Bode und ich haben mehrfach auf Zugfahrten nach einem Namen gesucht. „MUC“ ist ja das Kürzel für den Münchner Flughafen, „Super“ steht für das Supercomputing – und daraus ist der Name entstanden.

Sie sind am Erfolg des LRZ maßgeblich beteiligt. Worauf sind Sie besonders stolz?

Ich denke, der Erfolg ist ein Kind vieler Eltern. Die Sonderrolle, die das LRZ organisatorisch hatte, war eine unglaublich gute Ausgangsbasis, das muss man ganz klar sehen. Wir standen rein formal nicht im direkten Konkurrenzkampf mit Hochschulrechenzentren. Und das zweite ist, wir hatten hier immer eine zahlenmäßig große, anspruchsvolle Nutzerschaft und wirklich gutes Personal. Und das zusammen mit einem wohlwollenden Ministerium und wohlwollenden Gremien hat alles ermöglicht. ■

Nach dem Umzug auf den Forschungscampus Garching im Jahr 2006 wurde das LRZ von 2009 bis 2011 bereits erweitert. Im Bild die Ostfassade mit dem Eingangsbereich, im Hintergrund der Doppelwürfel, August 2011.

Interview

Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering kam 1968 zum Leibniz-Rechenzentrum, wurde 1975 Abteilungsleiter für Netze und Systeme und leitete das LRZ von 1989 bis 2008. Bis 2008 war er zudem Ordinarius für Informatik an der LMU München. Unter seiner Leitung stieg das LRZ zu einem der größten wissenschaftlichen Rechenzentren Europas auf. Zum 50-jährigen Bestehen des LRZ hat er eine Chronik verfasst, die kürzlich erschien (H.-G. Hegering, 50 Jahre LRZ. Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Chronik einer Erfolgsgeschichte (2012), ISBN 978-3-00-038333-5).

Die Fragen stellte Dr. Ellen Latzin, Presse- und Öffentlichkeitsarbeit der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.



Architektur

Blickfang am Eingang zum Forschungscampus

2006 zog das Leibniz-Rechenzentrum aus der Münchner Innenstadt auf den Forschungscampus in Garching. Den Institutsbau mit dem markanten Rechnerwürfel entwarf das Büro Herzog + Partner. Auch die von 2009 bis 2011 realisierte Erweiterung mit dem zweiten Rechnerwürfel, einem zweiten Institutstrakt und einem Visualisierungszentrum wurde von Herzog + Partner geplant und geleitet.

VON THOMAS HERZOG

Die Nahtstelle zwischen altem und neuem Rechnerwürfel – eine besondere architektonische und künstlerische Herausforderung (mit Rainer Wittenborn).





Links: Blick in den neuen Innenhof des Leibniz-Rechenzentrums mit neuem und altem Institutsbau.

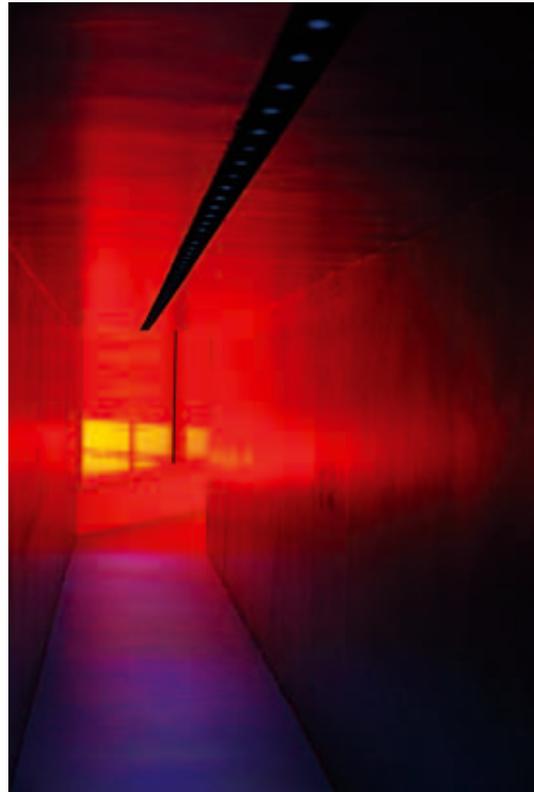


Rechts: Der neue Institutstrakt lässt sich auf der Südseite durch Holzlamellen verschatten.



Unten: Der Doppelwürfel mit der binären Symbolik auf der Fassade, die von einem je nach Lichteinfall changierenden Edeltstahlgewebe geschützt wird.





Das neue Visualisierungszentrum mit seinem abschirmenden „Kettenhemd“.

Die unterirdische Verbindung zwischen dem ersten und dem zweiten Bauabschnitt, gestaltet von Albert Hien (rechts).

DER AUTOR

Der international erfolgreiche Architekt Prof. Dr. Thomas Herzog studierte Architektur an der TH München und wurde an der Universität Rom, La Sapienza, promoviert. Im Büro Herzog + Partner entwickelt er u. a. Bau-systeme, Gebäudehüllen und Materialien unter Ausnutzung der jeweiligen klimatischen Bedingungen und der Sonneneinstrahlung. Seine Bauten zählen zu den Klassikern der neueren Architekturgeschichte, etwa die Glaskonstruktion des Design Centers in Linz oder das Expo-Dach der Weltausstellung in Hannover aus dem Jahr 2000.

DER ZWEITE BAUABSCHNITT des Leibniz-Rechenzentrums forderte eine räumliche Erweiterung in allen drei, die bauliche Komposition des LRZ kennzeichnenden Bereichen, und zwar in ganz unterschiedlicher Größenordnung: Zunächst war eine Verdopplung des Volumens beim Rechnergebäude selbst nötig, wobei es gelang, die in den einzelnen Geschossen jeweils vorhandene Aufteilung der Funktionen beizubehalten. Außerdem sollten die Institutsräume um ca. 40 % erweitert werden, um dringend benötigte zusätzliche wissenschaftliche Arbeitsplätze unterzubringen. Schließlich wurde ein Raum für große, dreidimensionale, virtuelle Visualisierungen als bauliches Gegenstück zum Rechnerwürfel konzipiert – diesem geometrisch verwandt, doch mit deutlich geringerem Volumen.

Veränderbarkeit als Hauptqualität einer „architecture durable“

Unser Ziel als Architekten war es zu verifizieren, was in unserem Grundentwurf von 2006 das zentrale Konzept der baulichen Gesamtanlage war, nämlich abweichend vom damals weltweit üblichen Typus für Rechenzentren den Bau in getrennte Volumina nach den genannten, diffe-

renten Einzelfunktionen aufzuteilen. Sie sollten jeweils nach entstehendem Bedarf veränderbar – speziell erweiterbar – sein, ohne dabei die grundlegenden baulichen Merkmale substantiell in Frage zu stellen, wie Geometrie, Dimension, modulare Ordnung, Material, baukonstruktive Ausführung, Farbgebung und Raumkonzeption. Veränderbarkeit zeigt sich als eine Hauptqualität einer „architecture durable“ – ohne dass dies materielle Zerstörung oder ästhetische Entstellung bedeuten würde.

Der Doppelwürfel: markanter Bau am Eingang zum Forschungscampus

Im konkreten Fall des zweiten Bauabschnitts des LRZ bedeutet dies: Der Rechnerwürfel wurde zum „Doppelwürfel“ erweitert. Er behält weiterhin seine städtebauliche Zeichenhaftigkeit am Eingang zum Garching Forschungsgelände: Mit seiner merkwürdigen, sich immer wieder ephemere zeigenden Hülle, die auf den Betrachter je nach witterungsbedingtem Lichteinfall abweisend geschlossen, semitransparent oder farbig kraftvoll in großformatigen Quadraten mit binärer Symbolik wirkt, ist er Ausdruck großer komplexer Ordnungen, doch für die Wahrnehmung nicht eindeutig greifbar. Der exponierte Doppelwürfel hat größte Bedeutung für heutiges wissenschaftliches Arbeiten, ist selbst physisch unzugänglich, abgeschirmt und gesichert, aber

dabei gleichzeitig zentrales, allseits verfügbares, interaktives Arbeitsmittel für Millionen von Nutzern zu jedweder Thematik und Fragestellung höchster Komplexität. Der Doppelwürfel ist ein neuer architektonischer Typus – unmittelbar am Zugang zum Campus.

Die Westfassade des ersten Würfels hatten wir 2006 anders als die übrigen Außenwände ausgebildet: mit einer Stahlkonstruktion mit de- und remontablem äußerem „masching“. Dadurch war die Erweiterung, die jetzt erfolgte, zerstörungsfrei möglich. Natürlich war die Nahtstelle zwischen beiden – dem „alten“ und dem „neuen“ Kubus – eine besondere Herausforderung. Wir haben sie gemeinsam mit dem Künstler Rainer Wittenborn, mit dem wir schon die Hülle des ersten Würfels realisiert hatten, gestalterisch entwickelt: Als Übergang zweier Teile, die sich kraftvoll und präzise miteinander verbinden. Gleichwohl vermitteln sie durch den Effekt der leicht geneigten Spiegel dieser optisch trennenden Verbindung die Illusion eines spannungsvollen Abstandes auf kurze Distanz.

Der neue Institutsteil

Viel einfacher war die Aufgabe bei dem neuen Institutsteil, bei dem wir nach dem Prinzip der Schichtung der Baukörper entsprechend ihren unterschiedlichen Funktionen ein zweites Volumen in verwandter Form ausbildeten, wodurch sich allerdings der Freibereich grundsätzlich veränderte. Es entstand ein ruhiger Innenhof, der den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern in beiden Institutsbaukörpern als Grünraum zugutekommt. Die speziell für das LRZ zur natürlichen Lüftung entwickelten Schwingfenster sind auch im Erweiterungsbau vorhanden. Hinzu kommen feine hölzerne Verschattungslamellen zwischen den Doppelscheiben auf der Südseite.

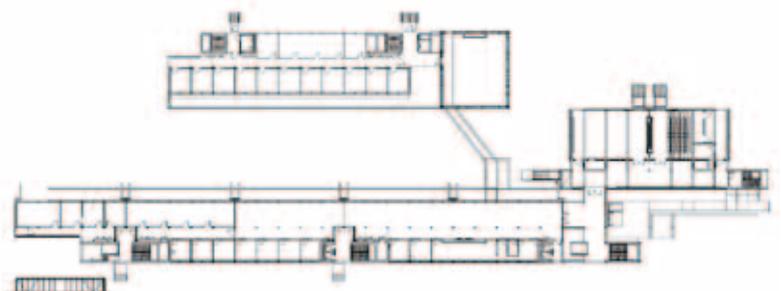
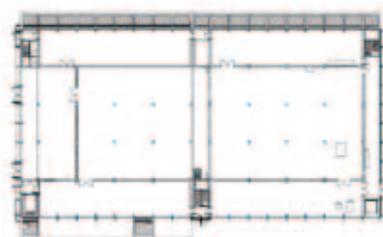
Das Visualisierungszentrum

Neu hinzu kam beim zweiten Bauabschnitt schließlich als drittes Volumen das Visualisierungszentrum als Gegenstück zum fast monumentalen Typus des Rechnergebäudes mit

seinem metallischen abschirmenden „Kettenhemd“. Der schwere Quader ist wie von einer inneren Sogkraft verdichtet – ein extrem auf sich selbst bezogener Ort, in dessen innerem Schauraum die Höchstleistungen des Großrechners dreidimensional präsentiert werden können. Seine äußere Hülle zeigt Verwandtschaft zur metallischen Feinstruktur der Fassade des Rechnergebäudes – allerdings quasi erstarrt in präziser Härte eines im Maßstab der Oberflächenstruktur ähnlichen geometrischen Musters. In einer Reihe von Versuchen konnten wir es in Zusammenarbeit mit dem Schalungsbauer der Betonfertigteile entwickeln.

Die abgesenkte, fußläufige Verbindung zwischen dem ersten und zweiten Bauabschnitt gestaltete der bildende Künstler Albert Hien als ein auf die Besonderheit des Gebäudes bezogenes transitorisches Erlebnis (siehe dazu auch S. 27).

■ Grundriss des Erdgeschosses (Architekten Herzog + Partner).



Information

Erweiterungsbauten des Leibniz-Rechenzentrums auf dem Forschungscampus Garching

Bauherr:	Freistaat Bayern, Bayerisches Staatsministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst
Projektleitung:	Staatliches Bauamt München 2
Planung:	Herzog + Partner Architekten BDA
Bauleitung:	Herzog + Partner Architekten BDA mit BLFP Frielinghaus Architekten BDA
Tragwerksplanung:	Sailer Stephan und Partner GmbH
Gebäudetechnik:	Climaplan GmbH
Elektrotechnik:	IEP Ingenieurbüro Elektroplanung
Freianlagen:	Lex-Kefers Landschaftsarchitekten BDLA
Kunst am Bau:	Albert Hien • Rainer Wittenborn
Planungsbeginn:	Oktober 2008
Bauzeit:	Oktober 2009 bis August 2011
Baukosten:	49,2 Mio. Euro



Green IT am Leibniz-Rechenzentrum

Spitzenrechner haben einen enormen Strombedarf. Beim neuen Höchstleistungsrechner SuperMUC wurde daher ganz besonders auf Energieeffizienz geachtet. Es entstand u. a. ein völlig neues, innovatives Kühlkonzept – das mit bis zu 55° C warmem Wasser funktioniert.

VON HERBERT HUBER UND AXEL AUWETER

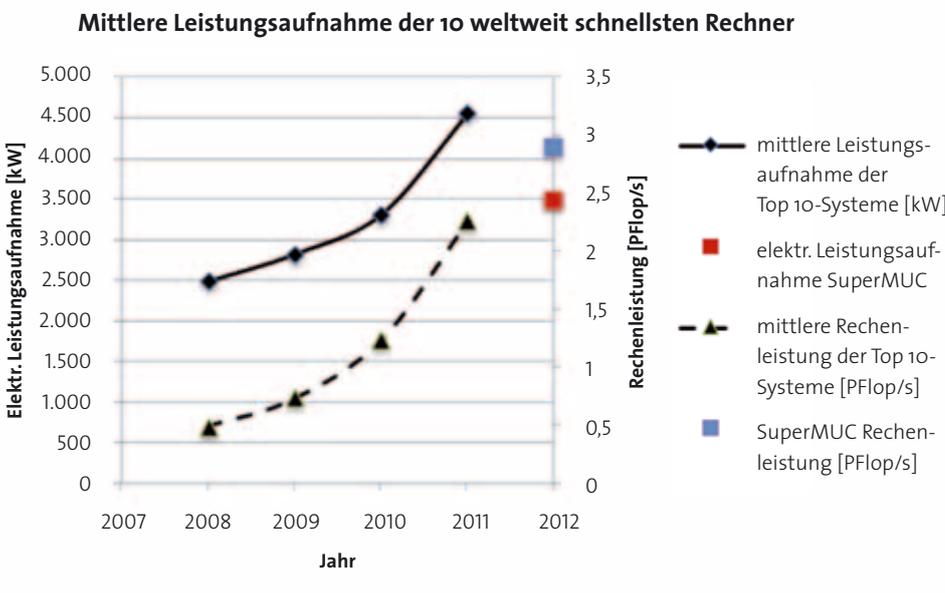
ABBILDUNG 1 ZEIGT den mittleren Strombedarf der zehn weltweit schnellsten Rechner laut TOP500-Liste (www.top500.org) seit dem Beginn der Aufzeichnung dieser Werte im Jahr 2008. Die Leistungsaufnahme von Hochleistungsrechnern der höchsten Leistungsklasse liegt derzeit im Bereich einiger Megawatt – mit stark steigender Tendenz. Bereits ab den Jahren 2018 bis 2020 sind Exascale-Rechner zu erwarten, also Hochleistungsrechner mit der Fähigkeit, jede Sekunde 10^{18} Fließkommaberechnungen durchzuführen. Eine vom U.S. Department of Defense finanzierte Untersuchung schätzt die Energieaufnahme solcher Rechner auf mindestens 180 Megawatt.

Zentrales Thema am Leibniz-Rechenzentrum: Green IT

Abb. 1: Mittlere Leistungsaufnahme und mittlere Rechenleistung der zehn weltweit schnellsten Rechner laut TOP500-Liste.

Aus Klimaschutzgründen und aufgrund steigender Energiepreise sind derartig hohe elektrische Anschlusswerte für zukünftige Hochleistungsrechner umweltpolitisch und wirtschaftlich

nicht mehr vertretbar. Ein zentrales Ziel der IT ist es daher seit einigen Jahren, die Energieeffizienz von Rechensystemen zu steigern. Diese Bestrebungen werden unter dem Begriff „Green IT“ zusammenfasst. Da neben den Rechner-, Datennetz- und Speicherkomponenten auch die Energieeffizienz der Kühlungs- und Klimatisierungsinfrastruktur den Energieverbrauch von Rechenzentren maßgeblich mitbestimmt, ist ein holistisches Verfahren nötig, um die Energieeffizienz der gesamten Rechenzentrumsinfrastruktur zu optimieren.



Green IT ist seit mehr als sechs Jahren ein wichtiges Thema am Leibniz-Rechenzentrum und wurde in den letzten Jahren zu einem der zentralen Forschungsschwerpunkte im Umfeld des IT-Betriebs.

Grundlagen für energieeffizientes Hochleistungsrechnen

Für energieeffizientes Hochleistungsrechnen sind die folgenden drei tragenden Säulen der energieeffizienten Datenverarbeitung zu berücksichtigen:





1. die Beschaffung von energieeffizienter Rechnerhardware,
2. die Verwendung von energieeffizienter Software,
3. der Betrieb des Datenverarbeitungssystems in einer energieeffizienten Rechenzentrumsinfrastruktur mit detaillierter Überwachung des Energieverbrauchs und der Anwendungsleistung.

Energieeffiziente Rechnerhardware

Im Zyklus von etwa 18 bis 20 Monaten verdoppelt sich die Leistung neuer Computerchips durch die Verdoppelung der Schaltkreiskomponenten auf dem Computerchip (Moo-

resches Gesetz). Neue Prozessoren können dadurch entweder bei gleicher Leistungsaufnahme doppelt so schnell oder bei halbem Energiebedarf gleich schnell rechnen. Dass dieser erstmals von Gordon Moore im Jahre 1965 formulierte Trend auch für aktuelle Prozessorchips, Hauptspeicherkomponenten und Hochleistungsrechner zutrifft, zeigen die in Abbildung 1 dargestellten Kurven für die mittlere Leistungsaufnahme und Rechenleistung der zehn weltweit schnellsten Rechner in den letzten Jahren. Während die Leistungsaufnahme dieser Systeme von 2008 bis 2011 im Mittel um den Faktor 1,8 angestiegen ist, hat sich ihre Rechenleistung im selben Zeitraum im Mittel um den Faktor 4,7 erhöht. Durch die weltweit steigende Nachfrage an besonders energieeffizienten Systemlösungen (beispielsweise für Smartphones, Laptops, kommerzielle Server-Farmen und Hochleistungsrechner) sind alle Prozessorhersteller dazu übergegangen, zusätzliche Energiesparmechanismen wie z. B. das automatische Abschalten nicht benutzter Rechenkerne in neue Prozessorgenerationen zu integrieren bzw. Taktfrequenzen der Prozessoren dynamisch gemäß der Rechenlast anzupassen.

Die Leistungsaufnahme des europäischen Höchstleistungsrechners SuperMUC am Leibniz-Rechenzentrum ist mit einem roten Quadrat in Abbildung 1 markiert. Durch die Verwendung neuester, höchst energieeffizienter Prozessor- und Hauptspeichertechnologien sowie einer neuen, besonders effizienten Kühltechnik wird

SuperMUC weltweit auch einen herausragenden Platz einnehmen, was die Energie- und Kühlungseffizienz angeht.

Energieeffiziente Softwareumgebung

Für einen höchst energieeffizienten Betrieb von Hochleistungsrechnern muss den in Hardware implementierten Energiesparmechanismen eine unter dem Gesichtspunkt Energieeffizienz optimierte Systemsoftwareumgebung zur Seite gestellt werden. Hierzu müssen z. B. in Parallelrechnern die in aktuellen Betriebssystemen mitgelieferten Energiesparmechanismen über viele Rechnerinstanzen und Rechenkerne hinweg koordiniert werden. Das Leibniz-Rechenzentrum entwickelt deshalb zusammen mit IBM eine Systemmanagement-Software, um diese neuen Energiesparmechanismen gezielt auf Hochleistungsrechnern einzusetzen. Abbildung 3 zeigt beispielsweise den Energieverbrauch eines 40-fach parallelen SeisSol-Simulationslaufes (www.geophysik.uni-muenchen.de/~kaeser/SeisSol/) zur Ausbreitung von seismischen Wellen in Abhängigkeit von der auf dem Rechenknoten eingestellten Prozessorfrequenz. Für dieses Beispiel ist klar zu erkennen, dass bei einer eingestellten Prozessorfrequenz von 2 GHz die für einen Simulationslauf – entsprechend einem Ergebnis – benötigte Energie minimiert wird.

Energie- und kühlungseffiziente Infrastruktur: innovative Warmwasserkühlung

Zum Energieverbrauch der Netzkomponenten, Rechen- und Speichersysteme addiert sich noch die elektrische Leistung, die man zur Kühlung

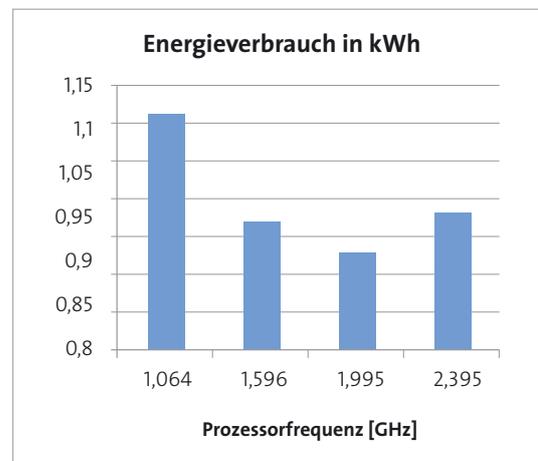
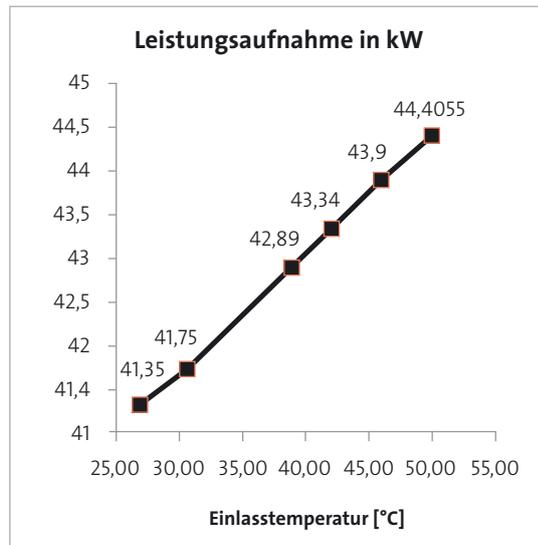


Abb. 2: Warmwasserkühlinfrastruktur (Pumpen, Sammler und Verteiler).

Abb. 3: Für einen 40-fach parallelen SeisSol-Erdbebensimulationslauf benötigte elektrische Energie in Abhängigkeit von der Prozessorfrequenz.

Abb. 4: Leistungsaufnahme des direkt mit warmem Wasser gekühlten CoolMUC-Clusters in Abhängigkeit von der Wasser-eingangstemperatur.



dieser Systeme benötigt. Für moderne Rechenzentren liegt dieser Kühlungsaufschlag derzeit bei etwa 30 % bis 50 % der Energieaufnahme der darin betriebenen IT-Geräte. Maßgebliches Ziel bei allen Infrastrukturplanungen zur LRZ-Erweiterung war es deshalb, den Kühlungsaufschlag für die IT-Systeme zu minimieren.

Im Zuge der Erweiterung wurde daher ein zusätzlicher Kühlkreislauf für die direkte Kühlung von CMOS-Rechnerkomponenten wie z. B. Prozessor, Hauptspeicher, Chipsatz usw. mit bis zu 55° C warmem Wasser installiert. Dieser so genannte Warmwasserkühlkreislauf besitzt eine Kühlleistung von 8 Megawatt und wird derzeit maßgeblich für die Kühlung der Hochleistungsrechner SuperMUC und CoolMUC verwendet. Die direkte Warmwasserkühlung von Rechensystemen bietet folgende wesentlichen Vorteile gegenüber herkömmlichen Kühltechniken:

- Die Rechner können ganzjährig mit rein freier Kühlung, d. h. ohne den Einsatz von Kältemaschinen, betrieben werden. Der Energieaufschlag für die Kühlung der Systeme liegt daher im Bereich von nur 10 %.
- Die Abwärme der IT-Systeme kann in der kalten Jahreszeit verwendet werden, um Gebäude zu heizen.

DIE AUTOREN

Axel Auweter ist wissenschaftlicher Mitarbeiter der Gruppe HPC Server und Dienste, Dr. Herbert Huber leitet die Abteilung Hochleistungssysteme am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

- Durch die hohe Kühlungseffizienz liegt die Leistungsaufnahme von Rechensystemen bis zu Wassereinlasstemperaturen von 60° C unter der Leistungsaufnahme von Systemen, die mit 20° C kühler Luft gekühlt werden. Das System hat also eine bessere Energieeffizienz.
- In der warmen Jahreszeit kann die Rechnerabwärme mittels so genannter Adsorptionskältemaschinen genutzt werden, um Prozesskälte zu erzeugen.

Abbildung 4 zeigt die Leistungsaufnahme des direkt mit warmem Wasser gekühlten CoolMUC-Hochleistungsrechners bei unterschiedlichen Einlasswassertemperaturen. Im Bereich von 27° C bis 50°C steigt bei gleicher Last die Leistungsaufnahme des Systems um etwa 5 %. Dieser Leistungsanstieg wird durch mit der Betriebstemperatur anwachsende Leckströme der CMOS-Komponenten im Rechner verursacht. Für eine Maximierung der SuperMUC-Energieeffizienz und zur weiteren Reduktion der CO₂-Bilanz des Leibniz-Rechenzentrums wird das Rechensystem deshalb – wann immer durch rein freie Kühlung möglich – mit möglichst niedrigen Warmwassertemperaturen im Bereich von ca. 25° C auf der Einlassseite betrieben.

Durch den Einsatz der innovativen Warmwasserkühltechnologie im SuperMUC sowie der Nutzung der Rechnerabwärme zur Gebäudeheizung übernimmt das Leibniz-Rechenzentrum eine weltweit führende Rolle im Bereich des energie- und kühlungseffizienten Hochleistungsrechnens. Gleichzeitig wird dadurch die CO₂-Bilanz des LRZ erheblich verbessert, und pro Jahr lassen sich etwa 850.000 Euro an Energiekosten einsparen.



Kunst

„Fliegende Holländer“

Den Verbindungsweg zwischen dem alten und dem neuen Institutsgebäude des Leibniz-Rechenzentrums gestaltete der Münchner Künstler Albert Hien.

VON ALBERT HIEN



DAS INSTITUTSGEBÄUDE des LRZ ist mit dem Erweiterungsbau durch einen unterirdischen Gang verbunden. An beiden Enden dieses Tunnels gibt es im Außenbereich liegende Höfe. Von dort erhellt Tageslicht den Bereich an den Enden des Durchgangs. Jeder, der von dem einen in das andere Gebäude geht, nutzt diesen Tunnel. Dies ist auch der Weg, den man zum Visualisierungszentrum (CAVE) im Erweiterungsbau nimmt.

Die paradoxe Tatsache, dass man in das gegenüberliegende Gebäude nur gelangt, indem man auf unbekanntem unterirdischen Wege auf hiesiger Seite in das Untergeschoss absteigt, um – nach enger Passage und Zickzackkurs jenseits angekommen – wieder emporzusteigen, hat dazu inspiriert, diese Wanderung mit dem Abenteuer eines Forschers, Erfinders oder Entdeckers zu assoziieren. Die Metapher von der „Fahrt ins Ungewisse“ wird bildhaft durch leuchtende Segelschiffe in den Lichthöfen vorangetrieben.

Auf seinem Weg durchschreitet der Passant unterschiedliche Farbzonen. Sämtliche Fenster der Lichthöfe sind aus farbigem Glas. Das einfallende Licht schafft magische Lichtvolumina im Wechsel zwischen Rot und Blau. Dabei ist die Lichtfarbe an den Enden des Tunnels jeweils eine andere. Fortgeführt wird dieser Signalwechsel in der Erscheinung der Schiffe, welche man plötzlich um 180° gedreht auf dem Kopf stehend erblickt.

Die Kunstinstallation führt die Besucher auf einen Parcours, der in hintergründiger Weise auf die virtuelle Realität in der CAVE (übersetzt: „Höhle mit automatisierter, virtueller Umwelt“) anspielt. Während dort in Zukunft mit Hilfe komplexer Computerprogramme und enormer Rechnerkapazität virtuelle Illusionen generiert werden, werden die „Fliegenden Holländer“ mit völlig analogen „Tricks“ und „Tools“ hervorgebracht: Licht, Farbglass sowie Perspektivenwechsel und Imagination des Betrachters. ■

DER KÜNSTLER

Prof. Albert Hien lehrt seit 2001 an der Akademie der Bildenden Künste München. Er nahm u. a. mehrfach an der documenta in Kassel teil. Mit der hier vorgestellten Arbeit gewann er den Kunstwettbewerb des Staatlichen Bauamts München 2 für den Erweiterungsbau des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

Große Datenmengen verständlich machen

Viele Anwender des Leibniz-Rechenzentrums arbeiten mit großen oder sogar extrem großen Datenmengen, die u. a. im Hochleistungsrechnen verarbeitet werden. Die resultierenden Datensätze sind häufig sehr komplex und ohne weitere Aufbereitung nur schwer zu verstehen. Hier hilft die Visualisierung weiter.

VON DIETER KRANZLMÜLLER UND CHRISTOPH ANTHES

BEI DER Visualisierung werden verschiedenste Arten von Datensätzen, die abstrakter Natur sein oder eine Repräsentation komplexer realer Objekte darstellen können, so verändert, dass der Erkenntnisgewinn für den Betrachter möglichst hoch ist.

Potentiell interessante Elemente werden visuell herausgehoben. Die Datensätze können grundsätzlich auf konventionellen grafischen Ausgabegeräten dargestellt werden, aber die Virtual Reality (VR) Technologie trägt oftmals zu einem noch besseren Verständnis bei.

Virtuelle Realität

Der Begriff „Virtual Reality“ oder im Deutschen „Virtuelle Realität“ wurde in den späten 1980er Jahren von Jaron Lanier geprägt. Virtual Reality beschreibt eine Technologie, die den Benutzer in das Zentrum der Anwendungen stellt und es dadurch ermöglicht, Simulationen und virtuelle Welten zu „betreten“. Hierbei konzentriert man sich auf die Stimulation der Sinne des Benutzers, wobei der Fokus auf der optischen Wahrnehmung liegt. Man „täuscht“ den Anwender mit Hilfe stereoskopischer 3-D-Darstellung, wofür perspektivisch leicht unterschiedliche Bilder für das rechte und linke Auge dargestellt und im Gehirn des Betrachters zu einem dreidimensionalen Bild zusammengefügt werden.

Die Absicht ist dabei, den Anwender in seine Anwendung eintauchen zu lassen, ihn das Gefühl der Immersion erleben zu lassen. Analog zur natürlichen Darstellung der Szene versucht man, die Eingabe so intuitiv wie möglich zu halten. Die Interaktion mit einer Virtual Reality-Anwendung erfolgt typischerweise über ein Positionsermittlungssystem, das die Position und Orientierung des Kopfes und des Eingabegeräts des Anwenders ermittelt. Dieses Vorgehen kann einerseits eingesetzt werden, um eine intuitive Menüsteuerung durchzuführen oder es dem Benutzer zu erlauben, Szenen zu verändern, indem er in virtuelle Objekte hineingreift und diese positionieren kann. Andererseits dient die Verfolgung der Kopfposition zum intuitiven Wechseln der Perspektive, was einen weiteren Vorteil beim Begutachten dreidimensionaler Strukturen mit sich bringt.

Um eine solche stereoskopische Darstellung zu realisieren, verwendet man häufig Technologien, die in ihren Grundzügen auch im alltäglichen Leben zum Einsatz kommen. Hierzu hat die Unterhaltungsindustrie einen großen Teil beigetragen.

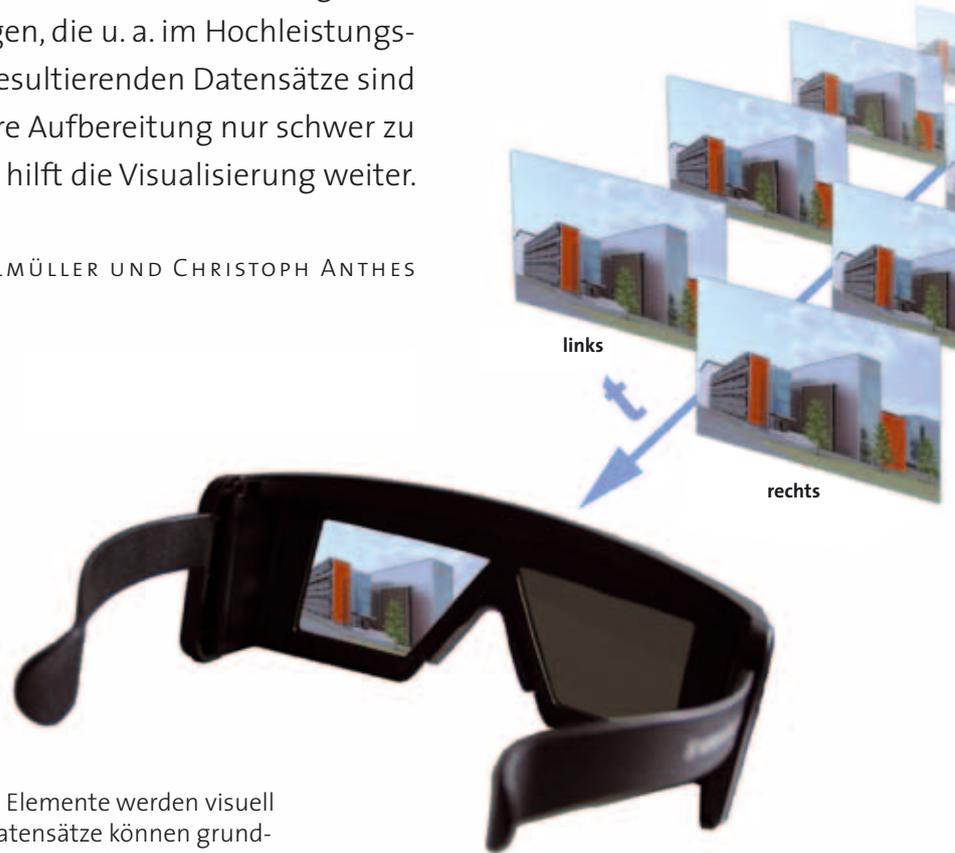




Abb. 1: Funktionsweise einer LCD Shutter Brille ...



t ... mit 60 Bildern pro Sekunde abwechselnd für linkes und rechtes Auge.

Stereoskopische Darstellung

Bei der stereoskopischen Darstellung werden zwei unterschiedliche Bilder, jeweils für das rechte und das linke Auge des Betrachters, erzeugt und diese getrennt den entsprechenden Augen vorgeführt. Die Trennung kann auf unterschiedliche Arten erfolgen, zum Beispiel mit Hilfe von Polarisationsfiltern, wo das Bild für das rechte und das linke Auge jeweils auf einem separaten Projektor generiert wird. Vor diesen Projektoren sind Filter angebracht, die das Licht polarisieren; analog dazu trägt der Betrachter eine Brille mit entsprechenden Filtern. Die Brillen benötigen keine Stromversorgung und besitzen keine aktiven Elemente, daher spricht man hier von einer passiven Stereodarstellung.

Alternativ besteht die Möglichkeit, die Abbildungen zeitlich versetzt darzustellen, wofür eine spezielle Brille benötigt wird. Bei einer Frequenz von 120 Hz werden abwechselnd die perspektivisch korrekten Bilder für die jeweiligen Augen dargestellt. Passend zur Abbildung werden bei einer speziellen Brille die Gläser durch ein LCD verdunkelt (Abb. 1). Diese batteriebetriebenen Brillen besitzen aktive Elemente, daher spricht man von einer aktiven Stereodarstellung.

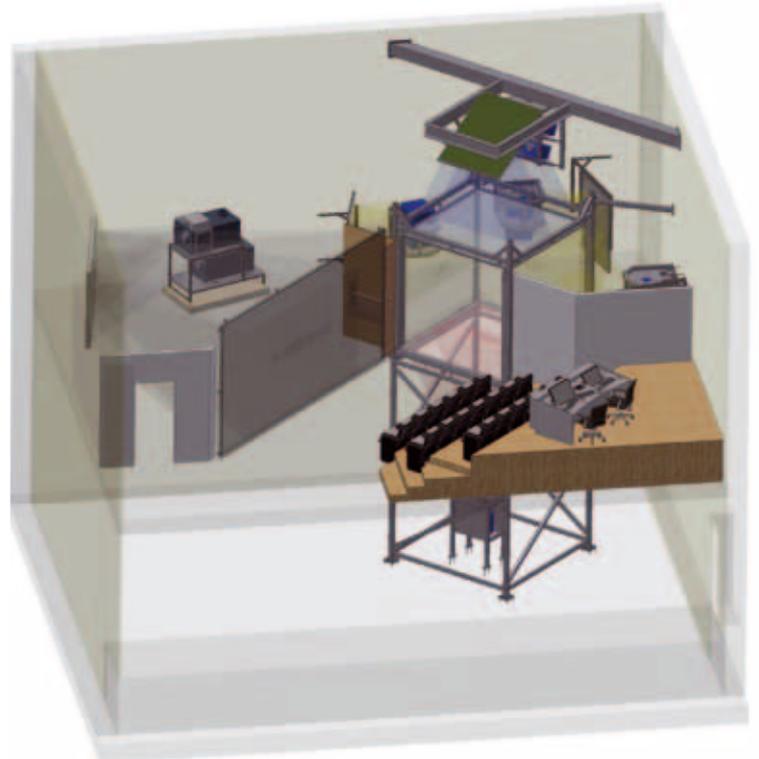
Positionsermittlungssysteme

Bei den Positionsermittlungssystemen existieren wie bei der stereoskopischen Darstellung auch mehrere Varianten, zum Beispiel über Ultraschall, Magnetfelder oder Bildverarbeitung. Die höchste Präzision erreicht man mit optischen Positionsermittlungssystemen, die mit Bildverarbeitungs-algorithmen arbeiten. Sie besitzen fast keine Verzögerungszeit und können die Position eines Ziels im Millimeterbereich ermitteln. Hierbei wird die reale Szene zeitgleich zur Aufnahme mit Licht im infraroten Bereich angeblitzt. An der Brille des Benutzers sowie an seinen Eingabegeräten sind Reflektoren angebracht, die von den Kameras aufgezeichnet werden. Die Reflektoren besitzen eine eindeutige geometrische Ausrichtung, woraus durch mathematische Verfahren Position und Orientierung errechnet werden. Für Spezialanwendungen kann man zum Beispiel auch Reflektoren an den Fingern anbringen, die es ermöglichen, Handgesten zu erkennen.

Wo wird Virtual Reality angewandt?

Virtual Reality wird sehr vielseitig in den unterschiedlichsten wissenschaftlichen Disziplinen eingesetzt. Grundsätzlich lassen sich zwei große Kategorien identifizieren: virtuelle Welten, die eine anwendungsspezifische Umgebung darstellen, und Visualisierungen von Datensätzen. Die virtuellen Welten werden beispielsweise zum Sicherheitstraining, in der Psychologie zur Bekämpfung von

Abb. 2: Aufbau des neuen Zentrums für Virtuelle Realität und Visualisierung am LRZ.



Phobien oder in der Architektur zur Veranschaulichung eines Gebäudes verwendet. Einige der prominentesten Anwendungsgebiete der Virtual Reality sind sicherlich die automatisierte oder computerunterstützte Segmentierung in medizinischen Datensätzen, das industrielle Design oder die Astrophysik.

Das neue Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung am Leibniz-Rechenzentrum

Um die diversen Anforderungen aus den unterschiedlichsten Anwendungsbereichen zu unterstützen und aufgrund des steigenden Bedarfs an moderner Visualisierungstechnologie, insbesondere auch im Zusammenhang mit der Beschaffung des SuperMUC, wurde 2010 beschlossen, am Leibniz-Rechenzentrum ein Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) einzurichten. Nach erfolgreicher Beantragung, Planungs- und Bauphase im Jahre 2011 begann Anfang 2012 die Innenausstattung des Zentrums.

Ausstattung: Powerwall und fünfseitige Projektionsinstallation

Das Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung beherbergt zwei immersive Projektionsinstallationen. Die Powerwall besitzt eine Projektionsfläche von 6 m x 3,15 m und wird von der Rückseite projiziert, um einen potentiellen Schattenwurf des Betrachters oder Präsentators zu vermeiden. Um eine hochwertige Darstellungsqualität in Stereo zu erreichen, wird sie mit zwei Sony 4K-Projektoren betrieben. Damit ist es möglich, lichtstarke 3-D-Graphik in einer 4-fachen HD-Auflösung (4.096 x 2.160 Pixel) in Echtzeit zu projizieren. Die Projektion erfolgt mittels passiver Stereodarstellung.

Die Ursprungsidee der fünfseitigen Projektionsinstallation basiert auf dem Konzept der CAVE von Carolina Cruz-Neira. Hierbei befindet sich der Benutzer in einem Würfel mit projizierten Seitenflächen, die sein Blickfeld vollständig abdecken. Bei der Installation im Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung wird jede der fünf 2,7 m x 2,7 m großen Würfelseiten mit zwei HD-Stereo-Projektoren bespielt, wobei ein Projektor die obere Seite der Projektionsfläche ansteuert

und ein weiterer die untere Seite der Projektionsfläche. Damit eine einheitliche Projektion entsteht, werden die Bilder beider Projektoren in einem mittleren Streifenbereich überlappt und zur Kante hin linear abgedunkelt. Die Projektion erfolgt im Falle der fünfseitigen Projektionsinstallation mit Hilfe aktiver Stereodarstellung.

Aufwändige Bauarbeiten

Um beim Bau des Zentrums für Virtuelle Realität und Visualisierung die bestmögliche Darstellungs- und Interaktionsqualität zu realisieren, mussten viele bauliche Aspekte berücksichtigt werden. In der Planungsphase wurden spezifi-



Abb. 3: Die Konstruktion der fünfseitigen Projektionsinstallation im Bau.

sche bau- und medientechnische Problemstellungen analysiert und wie folgt umgesetzt: Der Zugang in den fünfseitigen Projektionsraum sollte ebenerdig erfolgen, weswegen ein eigenes Zwischengeschoss eingezogen wurde. Damit teilt sich das Zentrum in einen Technikraum im Keller, der die Bodenprojektion sowie die notwendigen Rechnersysteme zum Betrieb der Anlagen beherbergt, und einen Betrachter- und Benutzerbereich im Erdgeschoss, welcher mit Kontrollterminals und einer Tribüne mit 21 Kinositzen ausgestattet ist (Abb. 2).

Eine wichtige Anforderung ist die vom Zwischenboden unabhängige Installation der Projektionstechnik. Hierbei werden die fünfseitige Projektionsinstallation sowie die Powerwall auf einem separaten Gerüst installiert und sind somit freistehend und nur mit flexiblen Schnittstellenelementen mit dem Zwischenboden verbunden, um Schwingungsübertragungen zu vermeiden (Abb. 3). Die Projektoren der fünfseitigen Projektionsinstallation sind an Wänden, Decke und



verschlossen bleiben. Zusätzlich ist geplant, eine Visualisierung des Ursprungszustandes der Grabkammer durchzuführen.

2 Vernetzte Welten – immersive, räumlich getrennte Architekturvisualisierung

Im Bereich der Architektur arbeitet das LRZ eng mit dem Institut für Architekturinformatik der TU München unter der Leitung von Frank Petzold zusammen. Hier werden beispielsweise Projekte realisiert, bei denen es darum geht, intuitive Interaktionsmöglichkeiten auf einem von der TU München entwickelten Rückprojektionstisch zu nutzen und die Darstellung der

Abb. 4: Die Grabkammer von Karaburun.

Fundament aufgehängt oder platziert. Aufgrund des Gewichts ist dies bei den 4k-Projektoren der Powerwall nicht möglich, sie sind auf einem Tisch platziert, der unabhängig vom Zwischenboden ist.

Damit Kühlung und Schallemission der Projektoren besser kontrolliert werden können, werden sie separat „eingehaust“. Die einzelnen Bereiche, in denen die Projektoren installiert sind, sind räumlich abgetrennt, um Streulicht zu vermeiden und den Einfluss auf andere Projektionsflächen zu reduzieren. Generell werden Spiegel eingesetzt, um die Projektionsdistanzen zu verkürzen und somit den Raumbedarf der Installationen zu verkleinern. Um eine Echtzeitvisualisierung rechenintensiver Datensätze durchzuführen, wird eine direkte 10 Gigabit-Ethernet-Verbindung zum SuperMUC installiert.

Projekte und Nutzer

Typisch bei Virtual Reality und Visualisierung ist eine sehr heterogene Anwendergruppe. Eine kurze Beschreibung von Beispielprojekten, die zurzeit am Leibniz-Rechenzentrum durchgeführt werden, zeigt eindrucksvoll den vielseitigen Nutzen der neuen Anlagen.

1 Virtuelle Rekonstruktion der Grabkammer von Karaburun

Die Rekonstruktion von archäologischen Stätten, z. B. der Grabkammer von Karaburun in der heutigen Türkei in Zusammenarbeit mit Latife Summerer und Andreas Hartmann (Institut für klassische Archäologie, LMU München), kann einem großen Publikum Zugang zu Orten gewähren, die der Öffentlichkeit normalerweise

Resultate in einer immersiven Umgebung wie der fünfseitigen Projektionsinstallation direkt zugänglich zu machen. Der Benutzer des Tisches kann Objekte, die Gebäudevolumen symbolisieren, auf diesem Tisch platzieren, sich beispielsweise den Schattenwurf errechnen lassen und die somit entstehenden Straßenzüge in der geplanten Größe betreten.

3 EnergyViz

Um einen besseren Einblick in die komplexen Zusammenhänge von Energieverbrauch, Kühlung und Auslastung im Bereich des Hochleistungsrechnens zu bekommen, arbeitet Christoph Anthes am LRZ an der Möglichkeit der immersiven Echtzeitvisualisierung von Sensordaten eines Supercomputers. Ein Teil des klassischen Monitorings kann hiermit in eine virtuelle Umgebung übertragen werden; auf der anderen Seite lassen sich Zusammenhänge zwischen Benutzer und Energieverbrauch einfacher in der 3-D-Darstellung erkennen. ■

DIE AUTOREN

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller ist Lehrstuhlinhaber am Institut für Informatik der LMU München, Mitglied des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften und Scientific Director des Center for Digital Technology & Management (CDTM). Er ist Mitgründer der EGI.eu-Organisation und deutscher Repräsentant im EGI Council (European Grid Initiative). Er leitet das MNM-Team (Munich Network Management Team), das sich mit Netzen und verteilten Systemen beschäftigt. Am LRZ verantwortet er die Bereiche Visualisierung und Virtual Reality sowie Grid Computing.

Dr. Christoph Anthes studierte in Trier Angewandte Informatik (Anwendungsfach Medizin) und an der University of Reading Computer Science (Network Centred Computing). 2009 wurde er an der Universität Linz im Bereich Virtual Reality promoviert. Seit September 2011 leitet er das Team für Virtuelle Realität und Visualisierung im Leibniz-Rechenzentrum. Im Sommer 2012 unterrichtet er das Fach Virtual Reality an der LMU München.



Abb. 1: Maschinensaal des LRZ, um 1980.

Langzeitarchivierung

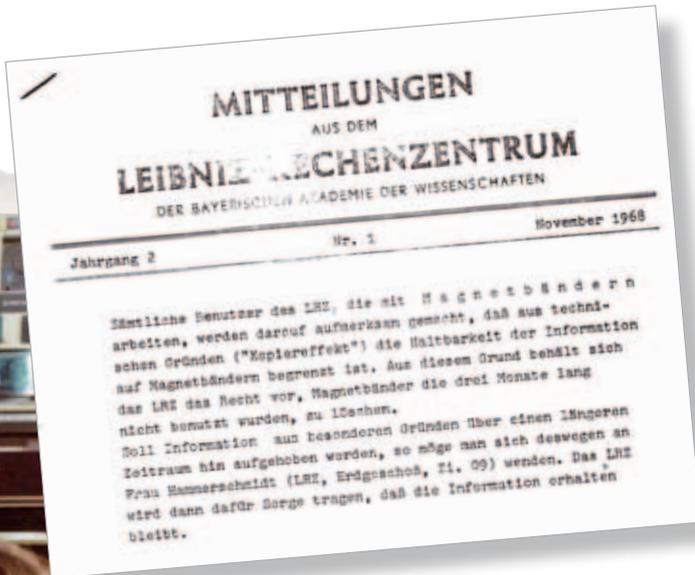
(K)Ein Grund zum Feiern

Die Geschichte des Leibniz-Rechenzentrums handelt nicht nur von Rechnern und Computern, sie belegt unter anderem auch die Geschichte von Daten und deren Speicherung: ein kurzer Rück- wie Ausblick auf die „unendliche“ Geschichte der langfristigen digitalen Archivierung von Daten im raschen technologischen Wandel der Zeit aus ungewohnter Perspektive.

VON WERNER BAUR

50 Jahre sind für ein Rechenzentrum eigentlich kein Grund zu feiern. 2, 4, 8, 16, 32 oder 64 sind runde Zahlen der Informationstechnologie. In solchen Einheiten werden auch die im Rechenzentrum gespeicherten Bytes gezählt. Apropos Bytes: Die ältesten Bytes im heutigen Archivsystem des LRZ sind genau 16 Jahre alt. Also doch ein Grund zum Feiern! Die Frage liegt nahe: Wie wurden Daten damals gespeichert, und wie ist es denn um die Archivierung in den nächsten 2, 4, 8 oder gar 16 Jahren bestellt? Eine Prognose für die nächsten 32 Jahre zu wagen, erscheint angesichts der rasanten Entwicklung der IT vermessen. Bleiben wir lieber bei 16, also im Jahr 2028, da ist der Autor hoffentlich in den Ruhestand gegangen und hat Zeit zurückzublicken.

Wir schreiben das Jahr 2028, Herr B. erinnert sich:



Robuster Datenträger der 1970er Jahre: die Lochkarte

Ende der 1970er Jahre hatte Herr B. in einer Informatik-Vorlesung an der TU München von der vor langer Zeit von Konrad Zuse entworfenen Rechenmaschine Z4 gehört, die die Nachkriegswirren im idyllischen Allgäu überstanden hatte und heute im Deutschen Museum in München steht. Die Z4 hatte einen mechanischen Speicher und konnte über einen Abtaster Lochstreifen lesen. Diese Maschine und ihre Zeit schienen Herrn B. unendlich weit weg von den modernen Computern am Leibniz-Rechenzentrum, der

Telefunken TR4, der TR440 oder gar den noch moderneren Cyber-Rechnern des Jahres 1979. Ihm wurde schnell klar, dass in der Informationstechnologie der Zeitbegriff „lang“ relativ „kurz“ zu verstehen ist, und da ihm diese Erkenntnis wichtig erschien, beschloss er, den Satz für die Nachwelt zu erhalten und zu archivieren. Zwar gab es schon seit über zehn Jahren Magnetbandspeicher an der Doppelprozessoranlage TR440 der Firma AEG-Telefunken und später dann an den Cyber-Rechnern am LRZ – als Erstsemesterstudent hatte Herr B. aber noch keinen Zugang zu den Magnetbandspeichern. Auch hatte er gehört, dass die Haltbarkeit von Magnetbändern seit Ende der 1960er Jahre zwar erheblich verbessert wurde, aber immer noch zu wünschen übrigließe (Abb. 2).

Das Mittel der Wahl war somit, den archivierungswürdigen Satz „Lang ist relativ kurz.“ binär zu kodieren und auf eine Lochkarte zu stanzen. Das hätte er am LRZ übrigens auch schon 15 Jahre vorher an der Telefunken TR4, die schon 1964 einen Lochkartenstanzer besaß, in der Richard-Wagner-Straße in München tun können (Abb. 3).

Die Lösung der 1980er Jahre: Magnetbandspeicher

Die Menge an Informationen, die eine Lochkarte speichern konnte, war mit 80 Byte recht begrenzt. Auch erwies sich die Lochkarte als keine dauerhafte Archivierungslösung. Zwar hätte das Medium selbst noch viele Jahre durchgehalten, aber die letzten Lochkartenleser wurden am LRZ 1985 abgeschafft. Herr B. musste sich um eine Ersatzlösung kümmern.

Abb. 2: Auszug aus den Benutzermittteilungen des Leibniz-Rechenzentrums, 1968.

Da Speicherplatz auf den Festplatten der Cyber-Großrechner immer noch sehr teuer war und andererseits die Zuverlässigkeit von Magnetbändern zwischenzeitlich deutlich gestiegen war, schien nun das 9-Spur-Magnetband mit einem Fassungsvermögen von 100 Megabyte die endgültige Lösung für das Archivierungsproblem des Herrn B. zu sein. So wurde das Zitat an den Cyber-Großrechnern des LRZ unter dem Betriebssystem NOS (Network Operating System), das die Magnetbandgeräte verwaltete, in einem speziellen Format auf ein Band geschrieben, wo es dann auch lange Jahre friedlich ruhte (Abb. 1 und 4).

Völlig neue Wege in den 1990ern: Bandroboter und Videokassetten

Anfang der 1990er Jahre wurde absehbar, dass auch die 9-Spur-Bänder keine endgültige Lösung waren. Die Großrechner sollten zugunsten von

Abb. 3: Lochkarte mit Stanzung „Lang ist relativ kurz“.



Abb. 4: 9-Spur-Bandgeräte und Magnetbandlager des LRZ.

Workstations und Vektorrechnern abgeschafft werden. Inzwischen war der Bedarf nach unabhängigen Archivsystemen erkannt worden. Mit der Installation des ersten Bandroboters am LRZ, betrieben unter Unitree, einer Software, die nach dem IEEE Mass Storage Reference Modell eigens für den Zweck der Archivierung von Massendaten entwickelt worden war, ging das LRZ völlig neue Wege. Zudem wurde ein neues Speichermedium eingesetzt: Videokassetten, wie sie auch in der Unterhaltungsindustrie genutzt wurden. Das Zitat des Herrn B. wurde vom 9-Spur-Band geholt und zusammen mit anderen Textfiles von den Datenträgern der sterbenden Großrechner auf eine Kassette des neuen Bandarchivs geschrieben.

1996 – Geburtsstunde des Archiv- und Backupsystems (ABS)

Auf den Videokassetten blieb den Bytes allerdings keine Zeit, um Staub anzusetzen. In der Theorie wohldurchdacht, erwies sich das System in der Praxis des täglichen Betriebs als äußerst fehleranfällig. Ein neuer Wechsel des Datenträgers und des gesamten Softwaresystems wurde notwendig. Diese so genannte Migration musste aber erstmalig nicht vom Nutzer des Archivs selbst durchgeführt werden. Den Job übernahmen die Betreiber des Systems im Rechenzentrum. Die Belegung im Archiv war inzwischen auf 1 Terabyte angewachsen, alle Daten der fehleranfälligen VHS-Videokassetten mussten mühselig ausgelesen und ins neue System geschrieben werden. Der Umzug der Daten zog sich über ein halbes Jahr hin. Dies war die Geburtsstunde des modernen Archiv- und Backupsystems (ABS), das auch 2012 noch am LRZ eingesetzt wurde. Anfang 1996 ging das neue System in Produktion. Als Datenträger wurden einspulige Kassetten in einem Bandarchiv der Firma IBM mit vier Bandlaufwerken eingesetzt. Eine völlig neue Semantik für den Begriff Bibliothek wurde geprägt. Zwar verstand der Programmierer am LRZ unter einer Bibliothek schon immer etwas anderes als etwa ein Bibliothekar an der Bayerischen Staatsbibliothek, nämlich eine Sammlung von Computer-Programmen und nicht eine Sammlung von Büchern. Aber dass eine Bibliothek auch eine Sammlung von Kassetten sein konnte, die von einem Roboter verwaltet wurde, war neu. Gesteuert wurde der Roboter von einem Softwarepaket, das damals noch ADSM



(Adstar Distributed Storage Manager) und später TSM (Tivoli Storage Manager) hieß und von IBM stammte. TSM führte genau Buch darüber, wo was in der Bandbibliothek lag. Außerdem übernahm TSM so lästige Arbeiten wie das Umkopieren der Daten im Archiv auf neue Datenträger. Dies war nicht etwa nötig, weil die Datenträger, also das Bandmaterial der Kassetten, schon nach wenigen Nutzungsjahren ermüdeten. Vielmehr erforderte der rasante Technologiefortschritt den Wechsel: Es gab wie einst bei den Lochkarten keine Lesegeräte mehr. So wanderte das Zitat von Herrn B. in den nächsten Jahren von den IBM 3590-Kassetten (Fassungsvermögen einer Kassette: 10 Gigabyte) auf STK Redwood Kassetten (50 Gigabyte) und von dort auf IBM LTO2-Kassetten (200 Gigabyte).

2004 – erste Archivdaten von der Bayerischen Staatsbibliothek

Neben dem regelmäßig notwendigen Umkopieren wurde ein anderes Problem immer präsenter. Es genügte nicht, dass eine Software namens TSM Buch darüber führte, auf welchem Band welche Datei lag. Auch Angaben über das Dateiformat, den Urheber, den Inhalt usw., also die so genannten Metainformationen, waren nötig, um die Information später wiederfinden zu können. Das Problem war nicht neu, die Archivare einer „richtigen“ Bibliothek kannten es schon lange. In jenen Jahren wurde die Zusammenarbeit des LRZ mit der Bayerischen Staatsbibliothek immer intensiver. TSM konnte die fehlenden Funktionalitäten auf der Anwenderseite nicht erbringen. Da-

für war es nicht gedacht. Neue Systeme wurden an TSM angebunden, die sich am in Bibliothekskreisen wohlbekannten OAIS-Referenzmodell (Open Archival Information System) orientierten. Nach einigen Jahren Ruhe auf LTO2-Kassetten war es 2010 wieder einmal Zeit für eine Verlagerung des Zitats auf neue Datenträger. Von den LTO2-Kassetten wanderte es auf die moderneren STK T10000-Kassetten (500 Gigabyte pro Kasette). Wie schon zuvor bekam auch diesmal der Autor davon nichts mit. Das erledigte TSM für ihn. Über 10.000 LTO2-Kassetten wurden nach Abschluss der Verlagerung am LRZ entsorgt. Aus Datenschutzgründen konnten die Kassetten nicht einfach weggeworfen werden. Sie wurden „zertifiziert“ verschrottet (Abb. 5).



2012 – ABS feiert 16. Geburtstag

Im Jahr 2012 hatte der Archivdatenbestand am LRZ beachtliche Ausmaße erreicht. Allein die Archivdaten der Bayerischen Staatsbibliothek umfassten 400 Terabyte, was übrigens mehreren Billionen Lochkarten entspricht. Absoluter Spitzenreiter waren aber die Massendaten der Supercomputer am LRZ mit 10.000 Terabyte. Anders als bei den Archivdaten der Staatsbibliothek, die über spezielle Frontends (ZEND, Digitool) ins Archiv gekommen waren, wurde für das Einbringen der Massendaten ins Archiv, den so genannten Ingest, TSM direkt genutzt.

2012 war auch das Jahr, in dem die Verbundzentrale des Bibliotheksverbands Bayern die Archivierungssoftware Rosetta 3.0 einführte. Rosetta war „a new way of preserving cultural heritage and cumulative knowledge“, so die Herstellerfirma ExLibris.

2020 – Energiekosten halten das Band am Leben

Im IT-Geschäft war inzwischen Energie zum Kostenfaktor Nummer 1 geworden, eine Tatsache, die das Band als Speichermedium nach wie vor

attraktiv machte, trotz der hohen Kapazitäten von Festplatten und der Geschwindigkeit von Solid State Speicher. Immer noch wurden Archivdaten am LRZ deswegen auf Bändern gespeichert. Die großen Hersteller hatten gerade die neueste Generation der LTO-Reihe, LTO8, mit einem Fassungsvermögen von 12 Terabyte pro Band angekündigt. Die Archivdatenmenge der Staatsbibliothek von 2012, für deren Speicherung damals noch viele hundert Kassetten notwendig waren, hätte 2020 auf ein paar Dutzend LTO8-Kassetten Platz gehabt, aber natürlich hatte sich der Datenbestand in den letzten Jahren weiter vervielfacht.

Die jüngst eingeführte neue Version 7.0 von Rosetta, die seit einigen Jahren landesweit die einheitliche Schnittstelle zu den Archiven des LRZ bildete, etablierte sich nun bundesweit. Auch die ungeheuren Mengen an Forschungsdaten wurden nun nicht mehr direkt nach TSM geschrieben, sondern nutzten ein Rosetta-Derivat, das speziell für große Datenmengen geeignet war.

2028 – die Ära der Bänder geht zu Ende

Ein letztes Mal war das Zitat vor einigen Jahren auf eine neue Kassettengeneration umkopiert worden. Nun werden auch die letzten Bandgeräte am LRZ abgeschafft, die Daten werden auf die neuen Nanospeicher transferiert. Datenspeicherbibliotheken gibt es aber immer noch. Sie werden nun für die Nanospeichereinheiten genutzt. Die Bibliotheken füllen inzwischen den ersten Stock aller drei Datenwürfel des LRZ. Der dritte Würfel wurde erst vor einigen Jahren gebaut, da der Platz für die Speichermengen des europäischen 3-D-Datenarchivs nicht mehr ausreichte.

Für Herrn B. wird es langsam Zeit, sich darum zu kümmern, wo sein schöner Satz nach seinem Ableben bleibt. Aus sentimentalen Gründen hatte er sowieso die Lochkarte von einst aufbewahrt. Auch hatte er längst die Datei mit Metadaten versehen, ein SIP (submission information package) geschnürt und das Ganze in Rosetta 14.0 gepackt. Nun war das Zitat zu jeder Zeit und von überall aus der European Archive Cloud abrufbar. Außerdem gab es mehrere Kopien der Archivdatei an verschiedenen Standorten in Europa. Trotzdem – hatte er genug vorgesorgt für eine wirkliche Langzeitarchivierung?

Sicherheitshalber meißelt er das Zitat noch auf einen Stein in seinem Garten. Die Archivierung für die nächsten 1.000 Jahre sollte damit gesichert sein, auch wenn das dann immer noch keine unendliche Geschichte ist.

Abb. 5: Zertifizierte Entsorgung von LTO2-Kassetten.

DER AUTOR

Werner Baur leitet die Gruppe Datei- und Speichersysteme am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

Grenzenlose Dienstvielfalt

Supercomputer, Wissenschaftsnetze und viele weitere IT-Dienste für Forschung und Lehre sind Sachwerte, die vor missbräuchlicher Verwendung geschützt werden müssen. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) gewährleistet als Betreiber einer hochwertigen IT-Infrastruktur die Sicherheit der ihm von Nutzern anvertrauten Daten – etwa mit Hilfe des Föderierten Identitäts-Managements.

VON WOLFGANG HOMMEL

EINE ESSENTIELLE Teilaufgabe des Sicherheitsmanagements ist es, nur bekannten und berechtigten Nutzern Zugriff auf Dienste und Daten zu gewähren. Um bei seinen über 120.000 Nutzern nicht den Überblick zu verlieren, betreibt das LRZ ein Identity & Access Management (I&AM) System, in dem alle Nutzer und deren Berechtigungen, LRZ-Dienste in Anspruch zu nehmen, verzeichnet sind. Bei jedem Versuch, z. B. E-Mails abzurufen, auf Speichersysteme zuzugreifen oder den SuperMUC zu verwenden, wird der Nutzer zunächst authentifiziert – üblicherweise, indem er seine LRZ-Kennung und sein Passwort eingeben muss. In einem zweiten Schritt prüft das I&AM-System, ob er für den gewünschten Dienst autorisiert ist. Den dafür notwendigen Datenbestand zu pflegen, ist überaus anspruchsvoll. Einige Abläufe werden aber nach und nach durch Datenaustauschsystemen der Studenten- und Personalverwaltungssystemen der Münchner Universitäten automatisiert. Zugleich wird so sichergestellt, dass Berechtigungen zeitnah zugewiesen und beim Verlassen der Hochschule wieder entzogen werden.

Überregionale Dienstangebote

Nutzer mit einer Münchner Alma Mater sind jedoch im Rahmen ihrer Arbeiten auch an Diensten interessiert, die nicht das LRZ erbringt. Hierzu gehören u. a. wissenschaftliche Datenbanken und Zeitschriften, E-Learning über das iTunes-University-Programm von Apple, Softwareangebote mit Sonderkonditionen für Hochschulangehörige und Dienste des Deutschen Forschungsnetzes (DFN) wie Videokonferenzen.

Auch diese Dienste sollen nur ausgewählten Nutzern zugänglich sein: Sonderkonditionen für Studenten beim Softwarekauf dürfen ausschließlich von Studenten, E-Book-Downloads bei Verlagen nur von Angehörigen von Hochschulen mit entsprechenden Lizenzen genutzt werden. Herkömmliche Autorisierungsnachweise wie das postalische Einsenden von Immatrikulationsbescheinigungen sind mit hohem Aufwand und langen Laufzeiten behaftet.

Föderiertes Identitäts-Management

Als Lösung bietet sich deshalb eine selektive, organisationsübergreifende Kopplung von I&AM-Systemen an. Beim Föderierten Identitäts-Management (Federated Identity Management, FIM) fungiert die Heimateinrichtung eines Nutzers als Identity Provider (IDP). Dieser stellt dem Dienst die erforderlichen Nutzerinformationen zur Verfügung. Für alle im I&AM-System erfassten Angehörigen der Münchner Universitäten betreibt das LRZ den Identity Provider. Zur deutschlandweit vom Deutschen Forschungsnetz aufgebauten Authentifizierungs- und Autorisierungsinfrastruktur (DFN-AAI) haben sich schon mehr als 80 IDPs zusammengeschlossen, die eine hochschulübergreifende Nutzung von bereits rund 100 Diensten ermöglichen. Zu

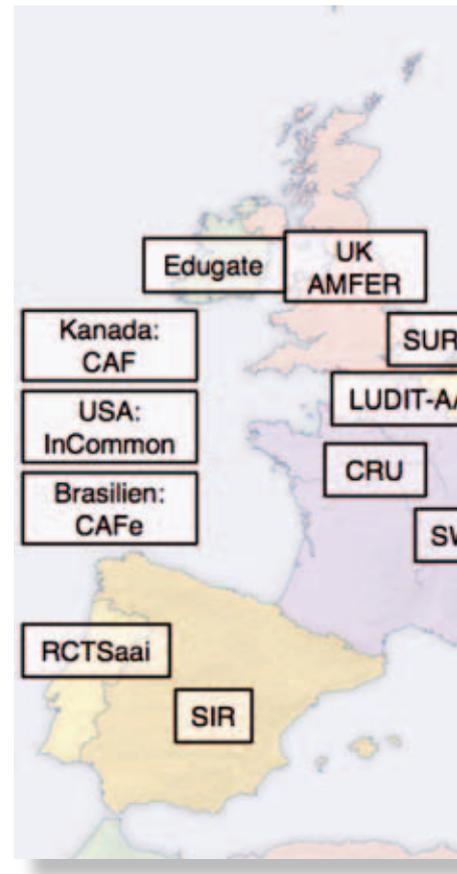
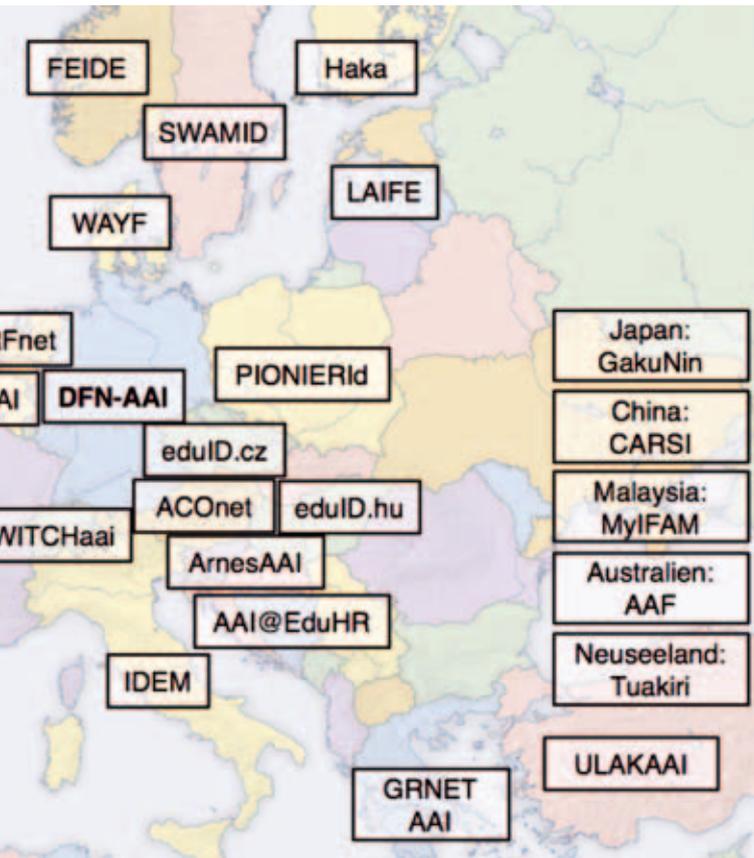


Abb. 1: Nationale Hochschul-föderationen im Überblick.



diesen gehören auch die vom LRZ betriebenen E-Learning-Systeme der Münchner Universitäten, die über Kurse der Virtuellen Hochschule Bayern auch von Studenten anderer bayerischer Universitäten genutzt werden können.

Datenschutz

Ein großer Vorteil beim Einsatz von FIM ist die einfache Möglichkeit zur Umsetzung von Datenschutzprinzipien wie der Datensparsamkeit: Falls die Berechtigung zur Dienstnutzung nur von der Hochschulzugehörigkeit oder der Eigenschaft des Nutzers, Mitarbeiter einer bestimmten Fakultät zu sein, abhängt, übermittelt der Identity Provider nur genau diese Information an den Dienst. Weiterführende Auskünfte wie Name oder E-Mail-Adresse werden in diesem Fall nicht erteilt.

Welche personenbezogenen Daten der Identity Provider jeweils herausgeben würde, wird dem Nutzer vorab in Form einer Visitenkarte angezeigt (Abb. 2). Nur wenn er damit einverstanden ist, werden die Daten tatsächlich zum Dienst übertragen.

Benutzerfreundlichkeit

Die zu beobachtende große Beliebtheit des FIM-basierten Zugangs zu Diensten geht auch mit dessen Benutzerfreundlichkeit einher. Neben intuitiver Bedienung und transparenten Datenflüssen ist das vom Identity Provider realisierte Single Sign-On ausschlaggebend: Nutzer müssen ihr Passwort nur bei ihrem Identity Provider eingeben und sich keine separaten Zugangsdaten pro Dienst merken. Zudem hält der Identity Provider einige Zeit Informationen darüber vor, welcher Nutzer sich bereits angemeldet hat. Dadurch können verschiedenste Dienste genutzt werden, ohne dass die Arbeit immer wieder durch Passwortabfragen unterbrochen wird.

Zukünftige Entwicklung

Der europäische Forschungsnetzverbund GÉANT schafft unter dem Namen eduGAIN derzeit die organisatorischen und technischen Randbedingungen für länderübergreifendes FIM. Nutzern und Diensteanbietern aus Deutschland erschließen sich so mit der DFN-AAI vergleichbare Föderationen in über einem Dutzend anderer europäischer Länder (Abb. 1). Seit Anfang 2012 werden auch interkontinentale Verbünde aufgebaut, um entsprechende Forschungsvorhaben zu unterstützen.

DER AUTOR

Dr. Wolfgang Hommel ist Informationssicherheitsbeauftragter des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften und leitet die Gruppe Planung Kommunikationsnetze. Seit 2004 hält er Lehrveranstaltungen zur IT-Sicherheit an der LMU München.

■ Abb. 2: Anmeldung bei Diensten über den Identity Provider.



Infrastruktur

MWN, DFN, GÉANT – München weltweit vernetzt

Das „Netz“ ist heute unverzichtbar für Wissenschaftler und Studierende. Und genau so wird es auch wahrgenommen: Es ist einfach da, es funktioniert immer und (am besten) überall. Dass dafür hochkomplexe kooperative Infrastrukturen etabliert, betrieben und ausgebaut werden müssen, erschließt sich oft erst auf den zweiten Blick.

Und ja – der Wissenschaftsstandort München ist nicht nur fachlich, sondern auch technisch weltweit hervorragend vernetzt. Grundlage dieser Vernetzung ist das Münchner Wissenschaftsnetz.

VON HELMUT REISER

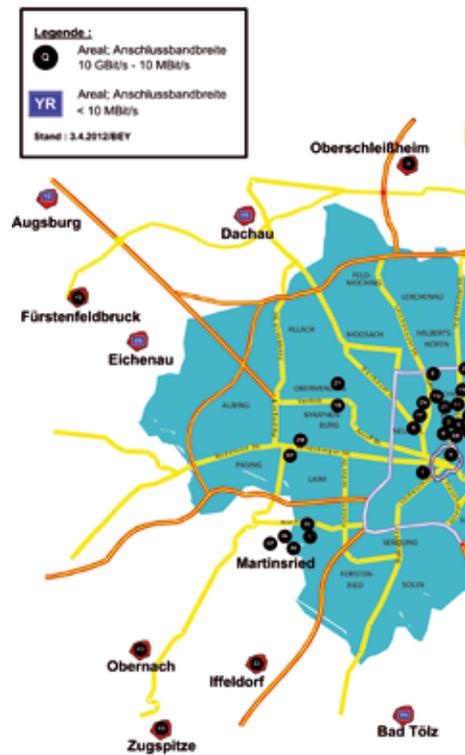


Abb. 1: Von Ingolstadt bis zur Zugspitze, von Augsburg bis zum Wendelstein: das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN).

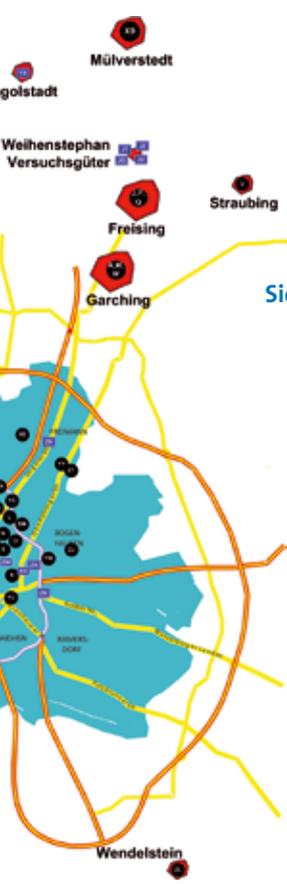
DAS MÜNCHNER Wissenschaftsnetz (MWN) hat nur wenig mit Universitätsnetzen in anderen Städten gemein. Es versorgt nicht nur eine Universität, sondern alle Münchner Universitäten, Hochschulen und viele Forschungseinrichtungen; es wird nicht von einer Uni für die Uni, sondern vom Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften für alle diese Einrichtungen betrieben. Dadurch lassen sich Synergie- und Skaleneffekte nutzen, gleichzeitig stehen modernste und fortschrittlichste Technologien zur Verfügung.

Das Netz wird zwar als Münchner Wissenschaftsnetz bezeichnet, geht aber weit über die Stadt München hinaus (Abb. 1). Derzeit werden gut 120.000 Nutzer in mehr als 540 Gebäudekomplexen über das MWN erschlossen. Es bildet die Grundlage für die verschiedensten Dienste wie VPNs, Koppelung von Telefonanlagen, Voice over IP, WLAN usw. Neben einer hohen Bandbreite (derzeit 10 Gbit/s im Backbone und zum DFN/Internet) und einer flächendeckenden Versorgung wird der ausfallsichere Betrieb immer wichtiger. Dies spiegelt sich auch in Redundanzmechanismen bei den Netzkomponenten sowie in der Backbone-Struktur wider (Abb. 2). Große Standorte sind über mehrere Leitungen erschlossen; innerhalb des Backbones gibt es mehrere Ringe, damit es selbst bei Ausfall einer Backbone-Leitung alternative Wege gibt. Neben dem primären Internetzugang über das Deutsche Forschungsnetz (DFN) gibt es einen redundanten Anschluss an den lokalen Provider M-net mit

reduzierter Bandbreite und volumenabhängiger Tarifierung. Auch auf Seiten der Netzdienste werden große Anstrengungen unternommen, um wichtige Dienste ausfallsicher betreiben zu können. Der DNS-Dienst zur Namensauflösung wird z. B. durch vier Server an verschiedenen Standorten im MWN erbracht. Die Server sind alle über die gleiche IP-Adresse (Anycast) erreichbar und können so zur Lastverteilung genutzt werden. Selbst beim Ausfall von drei Servern ist der Dienst noch verfügbar.

Mobile Nutzung

Das Backbone-Netz wird von zwölf Routern gebildet, an denen die Nutzer über kaskadierte Switches und über eine strukturierte Verkabelung angebunden sind. Gegenwärtig betreibt das LRZ 1.250 Switches mit rund 77.000 Ports. Daneben wird die mobile Internetnutzung immer wichtiger, die das LRZ derzeit mehr als 1.900 WLAN Access Points in gut 350 Gebäuden gewährleistet. Während des Semesters sind auf den Access Points mehr als 7.000 Nutzer gleichzeitig aktiv (zum Vergleich: 2009 waren es nur 3.000). Auch bei den Geräten zeigt sich ein massiver Zuwachs: Während des Semesters sind innerhalb einer Woche mehr als 40.000 verschiedene Geräte im WLAN aktiv. Damit auch reisende Wissenschaftler und Studenten das MWN nutzen können, unterstützt das LRZ flächendeckend die europäische Roaming-Infrastruktur eduroam. So können sich Gäste in München mit ihrer Heimatkennung am Netz anmelden und dieses nutzen. Das gilt auch für Münchner Nutzer, die andere Universitäten im In- und Ausland besuchen.



Sicherheit

Das LRZ ist für den Betrieb des MWN bis zur Dose verantwortlich. Die Art des Gerätes, das dort angeschlossen wird, liegt in der Verantwortung der entsprechenden Einrichtung. Daher ist das MWN im Hinblick auf die versorgten Systeme sehr heterogen.

Ein derart großes, heterogenes Netz erfordert umfangreiche Sicherheitsmechanismen. So betreibt das LRZ u. a. mandantenfähige Firewalls, Monitoring-, Intrusion Detection- und Intrusion Prevention-Systeme (IDS/IPS). Im Gegensatz z. B. zu Firmennetzen sind im MWN auch Verfahren im Einsatz, die Angriffe aus dem MWN heraus verhindern können. Hier ist das vom LRZ entwickelte System Secomat zu nennen: Es ist in der Lage, auf Basis verschiedener Heuristiken Angriffe zu erkennen. Verkehr aus privaten Netzen (z. B. WLAN, Wohnheime usw.) wird über den Secomat geleitet und dort analysiert. Werden Angriffe erkannt, wird das verursachende System vollautomatisch gesperrt und der Nutzer informiert. In den meisten Fällen ist das betroffene System ohne Wissen des Nutzers mit Schadsoftware infiziert worden.

Entwicklung

Das MWN hat sich seit den 1980er Jahren von einem Datenfernverarbeitungsnetz zu einer universellen Kommunikations-, Basis- und damit auch kritischen Infrastruktur entwickelt, die für die tägliche Arbeit von Wissenschaftlern und Studierenden unverzichtbar ist. Es bedarf daher einer konstanten Weiter- und Fortentwicklung sowie kontinuierlicher Innovation. Durch die Skaleneffekte können modernste Kommunikationstechniken genutzt und allen versorgten Einrichtungen modernste Netzdienste zur Verfügung gestellt werden. Derzeit wird z. B. die Ersetzung der Router-Plattform geplant, um das Backbone zukunftsfähig für die nächsten Bandbreitenklassen von 40 Gbit/s bzw. sogar 100 Gbit/s zu machen.

DFN und GÉANT

Das MWN ist über das Deutsche Forschungsnetz (DFN) deutschlandweit mit allen Universitäten, Hochschulen, Forschungseinrichtungen, aber auch mit kommerziellen Providern vernetzt. Das DFN wird in der Rechtsform eines Vereins aller angeschlossenen Universitäten und Forschungseinrichtungen betrieben. Das LRZ bringt sich als Mitglied in diversen Gremien ein. Das DFN als nationales Forschungsnetz ist selbst wieder in den Verbund von europäischen Forschungsnetzen (GÉANT) eingebunden und bietet über den GÉANT-Backbone die Verbindungen nach Europa. Ein international wichtiger Austauschpunkt, genutzt sowohl vom DFN als auch GÉANT, ist Frankfurt. Dort befinden sich auch viele Übergänge in internationale Netze.

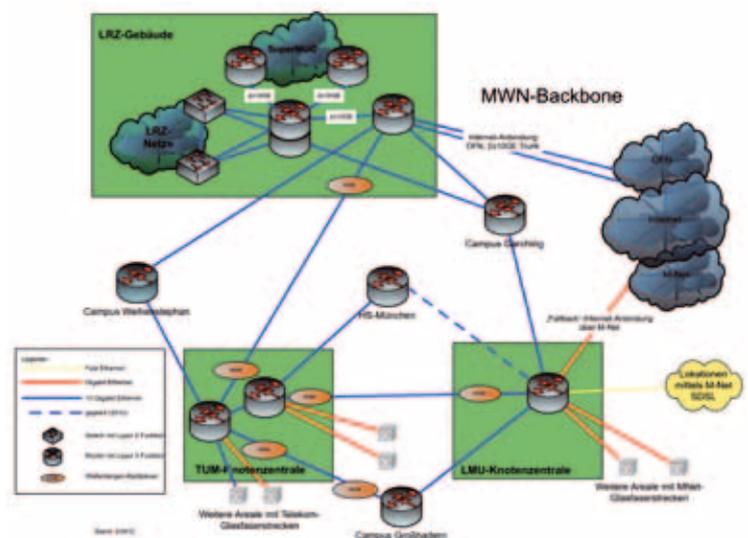
Die kooperative Infrastruktur aus MWN, DFN und GÉANT bietet viele sehr innovative Möglichkeiten, damit Wissenschaftler auch international kooperieren können. Exemplarisch seien hier nur sog. Optical Private Networks (OPN) genannt, die relativ schnell europaweit oder auch international aufgebaut werden können. OPN sind private Hochgeschwindigkeitsnetze, die etwa für einen Forschungsverbund wie das Large Hadron Collider Grid (LHCG) genutzt werden, um die Daten, die am Beschleuniger am CERN anfallen, an Physiker weltweit zu verteilen. Ein weiteres OPN ist ein Verbund der größten europäischen Zentren im Rahmen der „Partnership for Advanced Computing in Europe“ (PRACE) zur engen Kopplung ihrer Höchstleistungsrechner.

Ohne die sehr gute und enge Zusammenarbeit zwischen MWN, DFN und GÉANT wären solche speziellen Dienste für die Münchner Wissenschaft, wenn überhaupt, nur äußerst schwer zu realisieren, aber vermutlich nicht zu bezahlen.

DER AUTOR

PD Dr. Helmut Reiser leitet die *Abteilung Kommunikationsnetze am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.*

Abb. 2: Das Münchner Wissenschaftsnetz ist mehrfach gegen Ausfälle gesichert.



Energieeffizienz für die Supercomputer von morgen

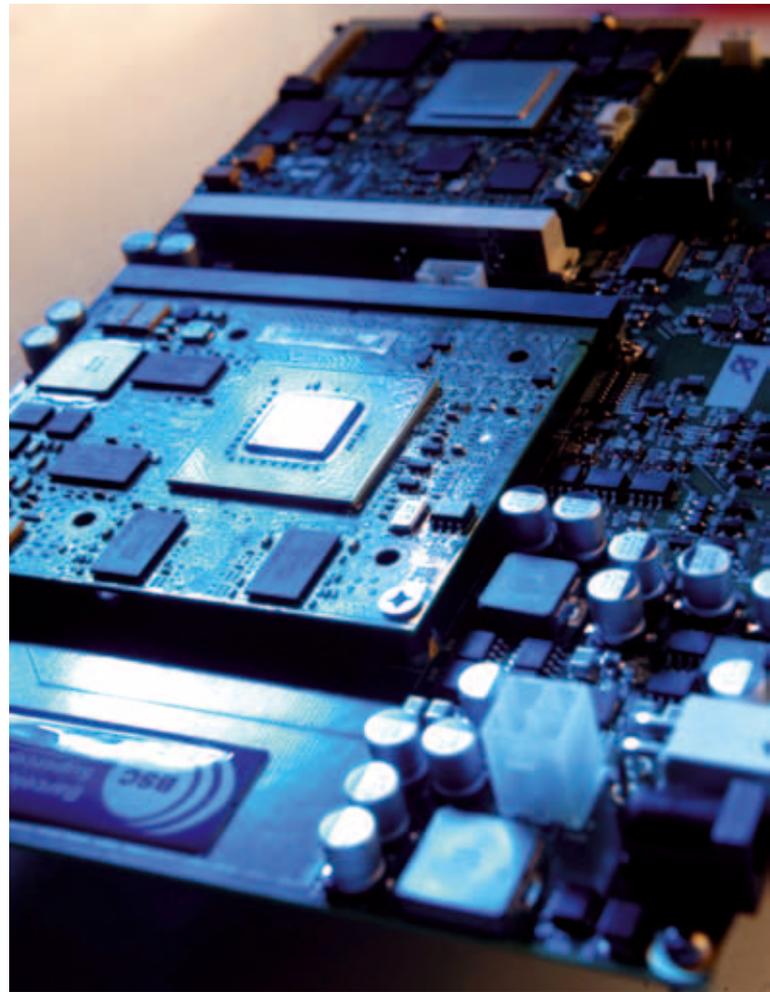
Heute gehört SuperMUC zu den schnellsten Rechnern der Welt. Trotzdem arbeitet man am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) in zwei von der EU geförderten Forschungsprojekten bereits jetzt an den Grundlagen für die Supercomputer der nächsten Generation.

VON HERBERT HUBER UND AXEL AUWETER

BIS ZU 1.000-MAL schneller als heutige Rechner sollen sie sein und spätestens ab 2018 auch tatsächlich zum Einsatz kommen: Supercomputer der Exascale-Klasse. Mit einer Geschwindigkeit von 10^{18} Rechenschritten pro Sekunde werden Exascale-Rechner die heutigen wissenschaftlichen Simulationen nicht nur weiter beschleunigen, sondern in vielen Disziplinen auch mit neuen Algorithmen für gänzlich neue Erkenntnisse sorgen.

Auf dem Weg zum ersten Exascale-Rechner gibt es jedoch noch einige Herausforderungen zu meistern. Würde man versuchen, mit der heutigen Technologie einen solchen Rechner zu bauen, wäre dieser unvorstellbar groß. Sein Betreiber wäre mehrmals täglich damit beschäftigt, defekte Komponenten zu tauschen, und der Stromverbrauch wäre mit über 1.000 Megawatt nur durch ein eigens aufgestelltes Großkraftwerk zu meistern. Auch bei der Software gibt es viele Herausforderungen, denn die meisten Programme, die auf heutigen Supercomputern laufen, lassen sich nicht ohne weiteres auf die mehreren Millionen Rechenkerne eines Exascale-Rechners skalieren.

Im September 2010 hat die EU-Kommission daher eine Förderung für Forschungsvorhaben ausgeschrieben, die mit neuen Hard- und Softwarearchitekturen bis zum Jahr 2016 die Marke von 100 Petaflops und bis 2018 dann den ersten Exaflops-Rechner ermöglichen sollen. Mit seiner



Vorläufer-Hardware des Mont-Blanc-Prototypen am Barcelona Supercomputing Center.

Expertise auf dem Gebiet der Energieeffizienz und seiner Erfahrung auf dem Gebiet der Anwendungsskalierung war das LRZ für die Bildung der europäischen Bewerberkonsortien von Beginn an als Projektpartner gefragt. Inzwischen ist das LRZ in den Projekten DEEP und Mont-Blanc an zwei von insgesamt drei mit je acht Millionen Euro geförderten Projekten beteiligt.

Mobile Geräte als Vorbild

Im Mont-Blanc-Projekt (www.montblanc-project.eu) erarbeitet ein rein europäisches Konsortium unter der Leitung des Barcelona Supercomputing Centers ein Prototypsystem, in dem anstelle der üblichen leistungsstarken Prozessoren heutiger Supercomputer genau die Technologie zum Einsatz kommt, die auch für den Betrieb von Smartphones und Tablet-Computern verwendet wird. Durch ihren typischen Einsatz in mobilen Geräten sind die entsprechenden Prozessoren zwar um ein Vielfaches stromsparender, erbringen einzeln gesehen aber auch nur eine deutlich geringere Rechenleistung. Erst durch einen viel größeren Grad an Parallelität lässt sich die Leistung wieder auf das Niveau aktueller Systeme anheben, um am Ende nicht nur der Exascale-Vision näherzukommen, sondern auch eine positive Bilanz der Energieeffizienz zu ziehen. Das LRZ beteiligt sich am Mont-Blanc-Projekt mit einer detaillierten Analyse und der Optimierung des Energieverbrauchs und portiert einen wissenschaftlichen Simulationscode aus dem Bereich der Quantenchromodynamik auf die Prototypenplattform.

Für den Bau des Mont-Blanc-Prototypen greift man zunächst auf bestehende Mobil-Prozessoren zurück. Diese enthalten allerdings viele Funktionen, zum Beispiel für Multimedia-Anwendungen, die im Supercomputer nicht benötigt werden. Daher beschäftigt sich ein

Teil des Projekts auch mit der Planung für einen stromsparenden Prozessor speziell für künftige Supercomputer. Dieser könnte dann zum Beispiel mehrere normale Rechenkerne und spezielle Hardwarebeschleunigungseinheiten in einem Chip vereinen.

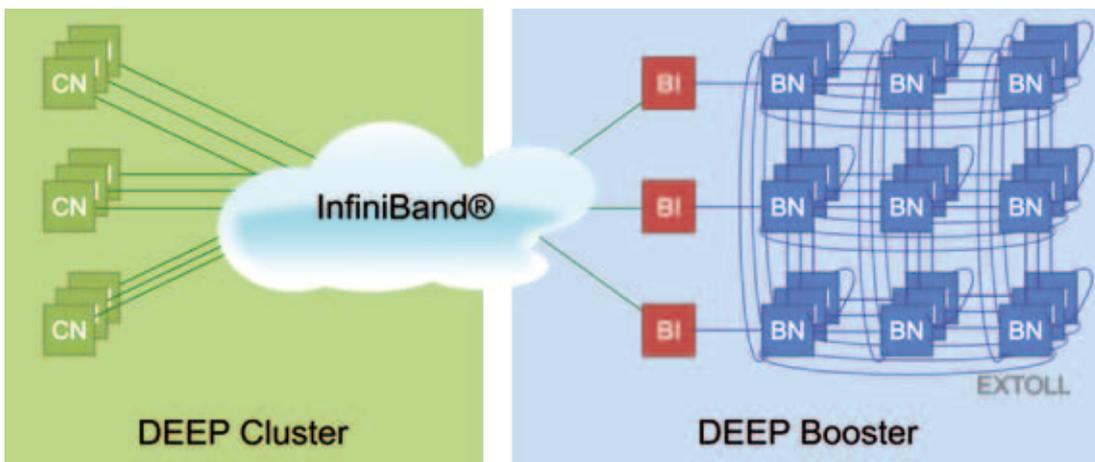
DEEP: ein Booster-Netz für hochskalierbare Codes

In den vergangenen Jahren hat die Verbreitung von Hardwarebeschleunigern im Supercomputing stark zugenommen. Hardwarebeschleuniger bedienen sich meist der Technologien von Grafikkarten und können bestimmte Berechnungen um ein Vielfaches schneller ausführen als herkömmliche Prozessoren. Bislang sind Hardwarebeschleuniger aber nicht autonom und somit immer auf das Vorhandensein eines normalen Prozessors angewiesen. In hochparallelen Systemen erfolgt dann auch der Datenaustausch zwischen mehreren Beschleuniger-Chips immer über die Standardprozessoren und deren Verbindungsnetzwerk. Dadurch wird die interne Kommunikation verzögert. Das DEEP-Projekt (www.deep-project.eu) unter der Leitung des Forschungszentrums Jülich hat sich zum Ziel gesetzt, die neueste Beschleunigertechnologie von Intel so zu vernetzen, dass die Beschleunigerchips direkt über ein eigenes Netzwerk kommunizieren können. Wissenschaftliche Anwendungen lassen sich somit zerteilen: Während komplexe Teile der Algorithmen auf einer Standard-Cluster-Architektur laufen, werden die einfachen, hochparallelen Teile in das unabhängige Booster-Netz der Beschleuniger ausgelagert. Der DEEP-Prototyp wird zudem über eine direkte Wasserkühlung für höchste Kühlungseffizienz verfügen. Auch im DEEP-Projekt beteiligt sich das LRZ mit Arbeiten zur Energieverbrauchsüberwachung und -optimierung und verantwortet darüber hinaus die Öffentlichkeitsarbeit des Projekts.

DIE AUTOREN

Axel Auweter ist wissenschaftlicher Mitarbeiter der Gruppe HPC Server und Dienste, Dr. Herbert Huber leitet die Abteilung Hochleistungssysteme am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

ABB.: BARCELONA SUPERCOMPUTING CENTER (BSC); JÜLICH SUPERCOMPUTING CENTRE (JSC)



Cluster-Booster-Architektur des DEEP-Prototypen.

Überblick

Wissenschaft verbinden – Forschungsk Kooperationen am LRZ



Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) beteiligt sich an diversen regionalen, nationalen, europäischen und internationalen Forschungsprojekten rund um Aufbau, Betrieb und Unterstützung von e-Infrastrukturen für die Wissenschaft.

VON VICTOR APOSTOLESCU, ARNDT BODE UND ANTON C. FRANK

- **Höchstleistungsrechnen (High Performance Computing, HPC)**

Ein zentrales Forschungsthema ist der energieeffiziente Betrieb eines Höchstleistungsrechenzentrums. Dies umfasst nicht nur die Entwicklung energieeffizienter Rechnerarchitekturen, sondern auch die Verbesserung der Klimatechnik oder die Entwicklung von Programmierwerkzeugen, die dazu beitragen, den Stromverbrauch von Simulationsanwendungen zu reduzieren. Außerdem befasst sich das LRZ mit der Optimierung hochskalierbarer Anwendungen für massiv-parallele Supercomputer wie den SuperMUC am LRZ.

- **Grid-Infrastrukturen**

Die Verbindung dezentraler Rechnerstrukturen erfordert neue Methoden für den Betrieb. Das LRZ beteiligt sich an der Entwicklung und Bereitstellung der dazu notwendigen Middleware sowie an Untersuchungen zur Verbesserung der Dienstgüte.

- **Anwendungsgebiete**

Ein weiterer zentraler Aspekt ist der Aufbau von verteilten Wissenschaftsplattformen. Momentan existieren Kooperationen mit den Wissenschaftsbereichen Lebenswissenschaften, Seismologie, Hydrologie, Physiologie, Fusionsforschung, Computer-Biologie und Nano-Materialien, die das LRZ bei der Bearbeitung ihrer wissenschaftlichen Fragestellungen auf Höchstleistungsrechnern unterstützt.

- **Daten-Infrastrukturen**

Die Forschungsaktivitäten im Bereich der Datenhaltung konzentrieren sich auf die Langzeitarchivierung und Langzeitverfügbarkeit. Unter anderem wird in Zusammenarbeit mit der Bayerischen Staatsbibliothek ein

vertrauenswürdigen und skalierbares digitales Langzeitarchiv als Teil eines Netzwerks für den Erhalt digitaler Information aufgebaut.

- **Hochgeschwindigkeitsnetzwerke**

Heutige Hochgeschwindigkeitsnetzwerke erfordern ausgefeilte Methoden und Werkzeuge für den reibungslosen Betrieb. Das LRZ forscht dazu an der Qualitätsverbesserung von Ethernet-Diensten sowie modernen Betriebs- und Überwachungswerkzeugen. Ein weiterer Schwerpunkt sind Infrastrukturtechniken zur IT-Sicherheit und die Erkennung von Eindringlingen in verteilte IT-Infrastrukturen.

Im Rahmen diverser Forschungsk Kooperationen sind am LRZ zahlreiche Habilitationen, Doktor- und Studienarbeiten entstanden. Weitere Projekte zur IT-Sicherheit, zur IT-Unterstützung der Atmosphärenforschung im Alpenraum, zu verschiedenen Themen im Cloud-Computing und der Langzeitverfügbarkeit befinden sich derzeit in Vorbereitung.

DIE AUTOREN

Prof. Dr. Arndt Bode leitet das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Dr. Victor Apostolescu ist sein Stellvertreter.

Dr. Anton C. Frank ist stellvertretender Leiter der Gruppe Verteilte Ressourcen am LRZ.

e-Infrastrukturen mit LRZ-Beteiligung				
				
HPC				MCSC
Grid				
Daten				BVB
Netz			X-WIN	MWN

Forschungskooperationen

AutoTune – Automatic Online Tuning, www.autotune-project.eu

BABS₂ – Ausbau des Bibliothekarischen Archivierungs- und Bereitstellungssystems BABS zu einem vertrauenswürdigen und skalierbaren digitalen Langzeitarchiv, www.babs-muenchen.de

BSB-Google – Massendigitalisierung im Rahmen einer Public-Private-Partnership zwischen der Bayerischen Staatsbibliothek und Google, www.bsb-muenchen.de/Massendigitalisierung_im_Rahmen.1842.o.html

CNM – Customer Network Management, www.cnm.dfn.de

DEEP – Dynamical Exascale Entry Platform, www.deep-project.eu

DGI-2 – D-Grid Integrationsprojekt 2, dgi-2.d-grid.de

DGSI – D-Grid Scheduler Interoperability, dgsi.d-grid.de

EGI-InSPIRE – European Grid Initiative: Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe, www.egi.eu

e-IRGSP₃ – e-Infrastructure Reflection Group Support Programme 3, www.e-irg.eu

GIDS – Grid-basiertes, föderiertes Intrusion Detection System zur Sicherung der D-Grid Infrastruktur, www.grid-ids.de

GN₃ – GÉANT 3, www.geant.net

gSLM – Service Delivery and Service Level Management in Grid Infrastructures, www.gslm.eu

IGE – Initiative for Globus in Europe, www.ige-project.eu

ISAR – Integrierte System- und Anwendungsanalyse für Massivparallele Rechner, www.in.tum.de/index.php?id=isar

I-SHARe – Information Sharing Across Heterogeneous Administrative Regions, www.lrz.de/projekte/I-SHARe

KONWIHR – Kompetenznetzwerk für Wissenschaftliches Höchstleistungsrechnen in Bayern, www.konwihr.uni-erlangen.de

MAC – Munich Centre of Advanced Computing, www.mac.tum.de

MAPPER – Multiscale Applications on European e-Infrastructure, www.mapper-project.eu

Mont-Blanc – European scalable and power efficient HPC platform based on low-power embedded technology, www.montblanc-project.eu

PetaGCS – Gauss Centre for Supercomputing Petascale Initiative, www.gauss-centre.eu

PRACE-1IP/-2IP/-3IP – Partnership for Advanced Computing in Europe – First/Second/Third Implementation Phase Project, www.prace-project.eu

SaSER – Secure and Safe European Routing

ScalaLife – Scalable Software Services for Life Science, www.scalalife.eu

SLA_{4D-Grid} – Service Level Agreements für das D-Grid, www.sla4d-grid.de

VERCE – Virtual Earthquake and Seismology Research Community e-Science Environment in Europe, www.verce.eu

WLCG – Worldwide Large Hadron Collider Computing Grid, lcg.web.cern.ch

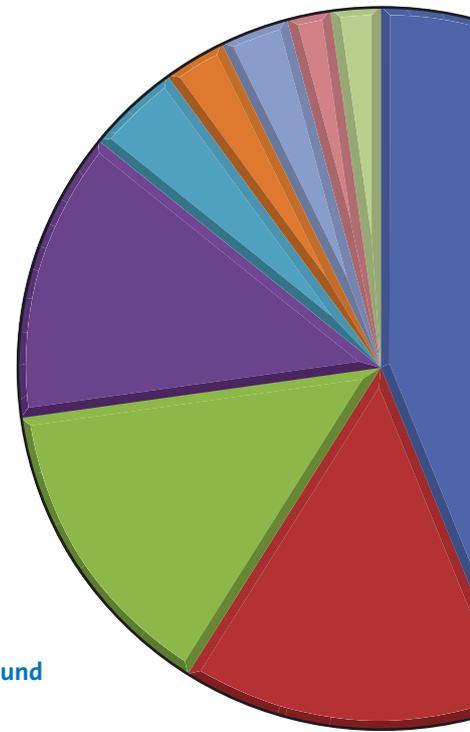
100GET-E₃ – End-to-End Ethernet, projects.celtic-initiative.org/100get-e3

Überblick

Höchstleistungsrechnen am LRZ

Warum sind numerische Simulationen aus der heutigen Forschung nicht mehr wegzudenken und was muss alles berücksichtigt werden, bis ein Höchstleistungsrechner wie der neue SuperMUC tatsächlich in Betrieb geht?

VON ARNDT BODE



Höchstleistungsrechnen für die Wissenschaft

Höchstleistungsrechnen beschreibt die schwierige interdisziplinäre Aufgabe, reale Gegenstände oder Ereignisse auf einem Höchstleistungsrechner durch ein geeignetes Programm numerisch zu simulieren.

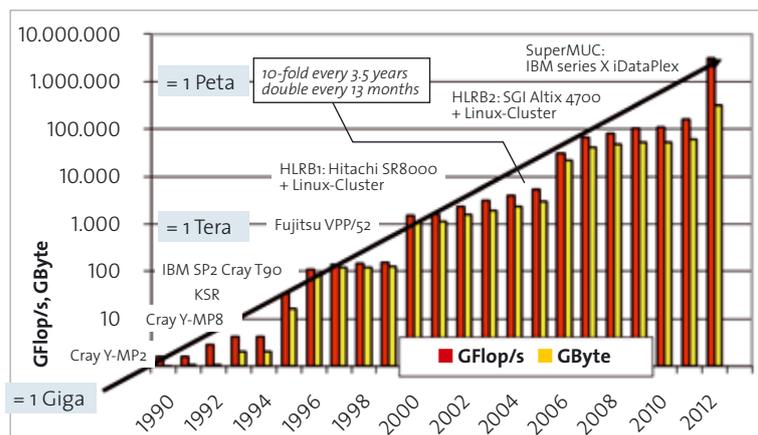
Ziel ist es dabei, Erkenntnisse über Gegenstände und ihr Verhalten zu gewinnen, die durch Experiment und Theorie nicht oder nicht vergleichbar günstig zu gewinnen sind. Diese Erkenntnisse können sich dabei auf Grundlagenwissenschaften beziehen wie die Entstehung des Universums oder die Vorhersage von Erdbeben, sie können aber auch unmittelbar zur Herstellung von neuen Produkten und Dienstleistungen dienen, z. B. die Simulation von Flugzeugtragflächen mit minimalem Kerosinverbrauch und Fluglärm oder der Ausbreitung von Schadstoffen im Grundwasser. Höchstleistungsrechnen ist also in gleichem Maße bedeutend für neue Erkenntnisse in der Wissenschaft wie auch für konkurrenzfähige Produkte in der Wirtschaft. Die Bayerische Staatsregierung hat diese Tatsache erkannt und – teilweise in Ko-finanzierung mit dem Bund – die Beschaffung von Höchstleistungsrechnern im Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ebenso großzügig gefördert wie die Wissenschaftsdisziplin des Höchstleistungsrechnens. Denn die Programme zur numerischen Simulation haben nicht nur einen fast unbegrenzten Bedarf an Rechenleistung, sondern sie erfordern auch die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Fachwissenschaften, Mathematikern und Informatikern, um den Gegenstand der Betrachtung algorithmisch effizient zu beschreiben und diese Beschreibung dann effizient auf dem meist hochparallelen Rechner zu implementieren.

Anwendungen und Ausbildung

Seit über 20 Jahren betreibt das LRZ deshalb Höchstleistungsrechner für die Wissenschaft und beschäftigt eine wachsende Anzahl von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die die Anwender der Rechner fachspezifisch unterstützen und betreuen. Weit über 100 unterschiedliche Anwendungen von Wissenschaftlern aus Bayern und Deutschland, künftig auch aus Europa, nutzen die Rechner im LRZ. Dabei sind fast alle Wissenschaftsgebiete vertreten, wie die Übersicht zur relativen Nutzung des Rechners SuperMIG zeigt.

Die Anwendungen der Höchstleistungsrechner und der geförderten Projekte im Bayerischen Kompetenznetzwerk für wissenschaftlich-technisches Höchstleistungsrechnen (KONWIHR) werden regelmäßig auf Tagungen präsentiert und in Buchform dokumentiert. Diese Aktivitäten sind Teil der umfangreichen Weiterbildungsmaßnahmen für Anwender des Höchstleistungsrechnens wie die themenspezifischen Kurse des Leibniz-Rechenzentrums und des Regionalen Rechenzentrums der Universität Erlangen-Nürnberg (RRZE) sowie entsprechen-

Übersicht über die Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum seit 1990.



ALLE ABB.: LRZ

Die auf dem SuperMIG vertretene-
nen Wissenschaftsdisziplinen:

- Engineering & Computational Fluid Dynamics: 44 %
- Astrophysics: 15 %
- High Energy Physics: 14 %
- Chemistry: 13 %
- Life Sciences: 4 %
- Physics: 3 %
- Earth Sciences: 3 %
- Grid Computing: 2 %
- Support: 2 %

de nationale und internationale Ausbildungen durch GCS e. V. und PRACE.

Zu diesen Maßnahmen zählt auch das Angebot an einschlägigen Master-Studiengängen der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (www.bgsce.de) für Computational Engineering, Computational Mechanics sowie Computational Science and Engineering, die im Rahmen des Elitenetzwerks Bayern durchgeführt werden.

Höchstleistungsrechner am LRZ

Über die Zeit gemittelt, verdoppeln sich die Rechenleistung und die Speicherkapazität der Systeme alle 13 Monate. 1990 rechnete die CRAY Y-MP2 etwa eine Milliarde Operationen pro Sekunde, 2012 ist SuperMUC 3-millionenfach leistungsfähiger (3×10^{15} Operationen pro Sekunde, PFlop/s). Die Leistungssteigerung vollzieht sich bei Höchstleistungsrechnern rascher als bei klassischen Mikroprozessoren, bei denen die Leistungsverdopplung „erst“ etwa alle 18 Monate stattfindet.

Die „Treppenkurve“ der betrachteten Systeme beschreibt die Beschaffungszyklen von fünf bis sechs Jahren, mit jeweils leicht ansteigender Leistung in jeder Stufe durch den zwischenzeitlichen Ausbau der Systeme.

Die im LRZ beschafften Systeme und ihre Hersteller zeigen die große Volatilität der weltweit leistungsfähigsten Rechnerarchitekturen. Bei der Beschaffung der Systeme CRAY Y-MP2 bzw. Y-MP8, KSR, IBM SP2, Fujitsu, Hitachi SR8000, SGI Altix 4700 und SuperMUC stellte sich jeweils das Produkt eines neuen Herstellers als dasjenige mit dem besten Preis-Leistungs-Verhältnis heraus. Aber auch die Rechnerarchitekturen und Programmiermodelle wechselten vom klassischen

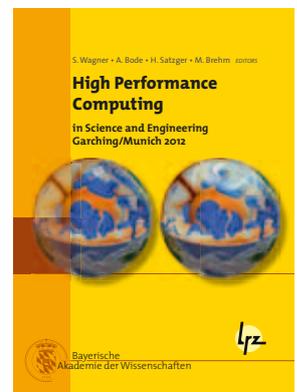
Vektorrechner mit wenigen Prozessoren über eine Cache-only-Architektur zum ersten Cluster-Rechner, dann zu einer parallelen Vektorarchitektur, über einen Cluster-Rechner mit verteilten Speichern zu einem Cluster mit gemeinsamem Speicher bis schließlich zum neuen SuperMUC mit höchster Parallelität von über 150.000 Prozessoren.

Wie wird ein solcher Rechner ausgewählt?

Die Auswahl dieser Systeme ist inzwischen europaweit über PRACE abgestimmt, ebenso in Deutschland über das Gauss Centre for Supercomputing GCS e.V., so dass sichergestellt ist, dass für die Wissenschaft jeweils neueste Hardware und unterschiedliche Architekturen zur Verfügung stehen. Der Auswahlprozess speziell für das LRZ zieht sich mindestens über zwei Jahre hin: Auf technische Evaluationen und Vorgespräche zu Prozessor- und Systemplanungen mit den einschlägigen Herstellern erfolgt eine offizielle Ausschreibung, die in einen neun Monate dauernden wettbewerblichen Dialog mit den Anbietern mündet, bei dem schrittweise die Anzahl der Bieter durch intensive ganztägige Verhandlungsrunden reduziert wird. Hauptkriterium der Entscheidung sind ca. 25 Benchmarks, die die wichtigsten Anwendungsgebiete der LRZ-Kunden repräsentieren, aber auch solche aus Europa (die so genannten PRACE-Benchmarks) sowie synthetische Programme, die ganz spezielle Architektureigenschaften bewerten. Die Leistungseigenschaften, die die Hersteller zusagen, müssen auf Basis von Simulationen ermittelt werden, denn die Systeme – bis hin zu den Prozessoren – existieren ja zum Zeitpunkt der Auswahl noch nicht. Bis zum Gewinn einer Supercomputer-Beschaffung fallen auf diese Weise nicht nur erhebliche Kosten im LRZ für die Bewertung, sondern auch bei den Herstellern für ihr Angebot an.

Der Beitrag von Hans Werner Meuer in diesem Heft (S. 5) zeigt, dass die Investitionen der Hersteller in neue Rechnerarchitekturen und Programmiermodelle sowie der Anwender in neue Programme für Supercomputer schon nach drei bis sieben Jahren Eingang in Standardrechner finden. Supercomputing ist für hochentwickelte Nationen also auch deshalb wichtig, weil hier Computertechnologien für Massen Anwendungen erprobt und bewertet werden und Know-how für den Massenmarkt entsteht.

Die folgenden Beiträge dieser Ausgabe von „Akademie Aktuell“ erläutern die Architektur des SuperMUC und schildern sechs exemplarische Anwendungen.



Publikationen über das wissenschaftliche Höchstleistungsrechnen informieren über die rasante Entwicklung auf diesem Gebiet.

DER AUTOR

Prof. Dr. Arndt Bode ist seit 2008 Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften und hat den Lehrstuhl für Rechnerarchitektur und Rechnerorganisation an der TU München inne. Sein zentrales Forschungsgebiet ist die Rechnerarchitektur, insbesondere der Entwurf und die Programmierung Paralleler und Verteilter Systeme. Er ist Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

Technischer Überblick

SuperMUC: ein neuer Höchstleistungsrechner für Europa

Mit mehr als 3 Petaflops Rechenleistung ist SuperMUC, der neue Rechner des Leibniz-Rechenzentrums, einer der leistungsfähigsten und universell nutzbarsten Computer in Europa und weltweit. Aber wie funktioniert eigentlich ein solcher Rechner?

VON MATTHIAS BREHM UND REINHOLD BADER

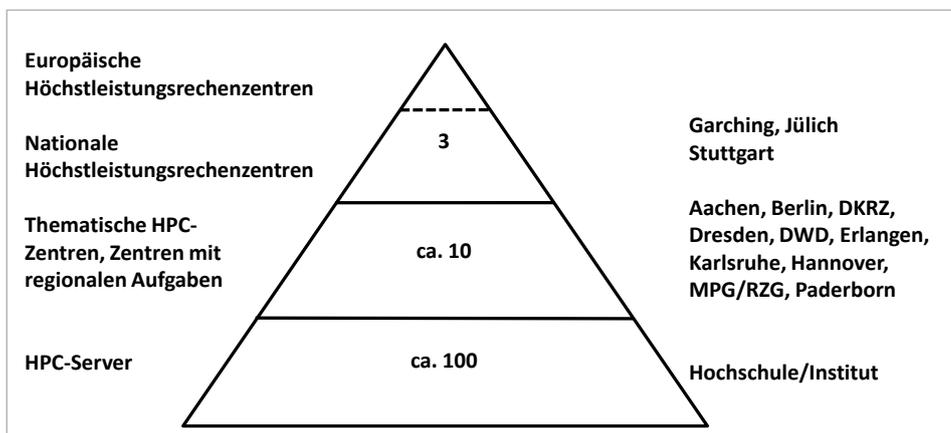


Abb. 1: Computergeneriertes Bild des neuen Höchstleistungsrechners SuperMUC, Juni 2012.

NACH EINER BETRIEBSZEIT von fünf Jahren wurde der Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB II), eine SGI Altix 4700, Ende Oktober 2011 außer Betrieb genommen und durch ein wesentlich leistungsfähigeres System mit dem Namen SuperMUC ersetzt (Abb. 1). Bei SuperMUC handelt es sich um die erste Ausbaustufe eines Clustersystems der Firma IBM, das aus 19 miteinander gekoppelten Rechnerinseln besteht. Das System wurde im obersten Stockwerk des erweiterten Rechnerkubus des LRZ installiert. Die für 2014 geplante zweite Installationsstufe wird dann zusätzlich den Platz des bisherigen Rechners einnehmen.

Die Leistungsdaten des neuen Systems sind bereits in der ersten Ausbaustufe imposant: Mit einer Spitzenrechenleistung von etwas mehr als 3 Petaflops (also drei Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde oder eine 3 mit 15 Nullen), mehr als 150.000 Prozessorkernen und 300 Terabyte Arbeitsspeicher wird es zum Beschaffungszeitpunkt einer der leistungsfähigsten Rechner in

Abb. 2: Die Versorgungspyramide des High Performance Computing (HPC) in Deutschland.



Europa und der Welt sein, der auf Grund der Art der Prozessoren zudem universell nutzbar ist. Während der bisherige Rechner vor allem für Projekte aus Wissenschaft und Forschung innerhalb Deutschlands genutzt wurde, ist der neue Rechner auch Teil des deutschen Beitrags zur europäischen Höchstleistungsrechner-Infrastruktur innerhalb von PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Der deutsche Betrag wird vom Gauss Centre for Supercomputing e.V. (GCS) erbracht.

Auf dem Weg nach Europa: das Gauss Centre for Supercomputing

Die drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren, das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), das Jülich Supercomputing Centre der Forschungszentrum Jülich GmbH (JSC) und das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ), haben ihrer langjährigen Zusammenarbeit im Jahr 2007 mit der Gründung des Gauss Centre for Supercomputing eine organisatorische Basis gegeben. Das GCS stellt die nachhaltige Versorgung der computergestützten Wissenschaften in Deutschland und Europa mit Höchstleistungs-Rechenkapazität der obersten Leistungsklasse (Capability Computing) sicher (Abb. 2).

Bereits im Sommer 2008 begannen innerhalb des GCS umfangreiche Aktivitäten zur Koordinierung der



Beschaffung, insbesondere zur Auswahl der jeweiligen Rechnerarchitektur, des Beschaffungszeitpunktes und der Finanzierung. Gleichfalls wurden die Koordinierung der Nutzerbetreuung, die Definition gemeinsamer Nutzungsrichtlinien und eines abgestimmten Zugangs- und Review-Verfahrens sowie gemeinsame Schulungs- und Trainingsmaßnahmen vorangetrieben. Der daraus entstandene Förderantrag führte schließlich dazu, dass der Bund (50 %) und die Länder Baden-Württemberg, Nordrhein-Westfalen und Bayern (jeweils 16,6 %) insgesamt 400 Millionen Euro für die Beschaffung und den Betrieb von Höchstleistungsrechnern bis zum Jahr 2017 bereitstellten. Der für SuperMUC verfügbare Anteil beträgt ein Drittel des Gesamtbetrags.

Zur Architektur des Rechners

Bei der Beschaffung des Rechners SuperMUC standen drei Aspekte im Vordergrund: eine breite und einfache Nutzbarkeit des Systems für verschiedene Wissenschaftsdisziplinen, hohe Zuverlässigkeit sowie eine möglichst hohe Energieeffizienz. Diese Ziele diskutierte das LRZ ab Mai 2009 mit Herstellern im Rahmen einer Markterkundung. Nach dem europaweiten Teilnahmewettbewerb wurde ab März 2010 in einem Wettbewerblichen Dialog mit vier Firmen intensiv verhandelt und eine umfangreiche Leistungsbeschreibung erstellt, die auch Benchmark-Programme beinhaltete. Die Entscheidung fiel im November 2010 zugunsten von IBM mit dem System X iDataPlex, das auf 64 Bit Intel Standard-Prozessoren der neuesten Generation basiert. Die wichtigsten Charakteristika des neuen Rechners sind:

	Thin Node-Insel	Fat Node-Insel (zugleich Migrations- system SuperMIG)
Anzahl Inseln	18	1
Anzahl Cores	147.456	8.200
Anzahl Knoten	9.216	205
Prozessor	Intel Sandy Bridge-EP	Intel Westmere-EX
Peak-Rechenleistung (PFlop/s)	2,94	0,078
Gesamter Hauptspeicher (TByte)	288	51
Gemeinsamer Hauptspeicher pro Knoten (GByte)	32	256
Bandbreite zum Hauptspeicher pro Core (GByte/s)	6,4	4,3
Verbindung innerhalb einer Insel	FDR10	QDR
InfiniBand-Verbindungstopologie innerhalb der Inseln	Non-blocking Fat Tree	Non-blocking Fat Tree
Verbindung zwischen den Inseln	FDR10	
Verbindungstopologie zwischen Inseln	Ausgedünnter (4:1) Fat Tree	
Bisektionsbandbreite des Verbindungsnetzwerkes	35,6 TByte/s	
Größe und Bandbreite des parallelen Dateisystems GPFS	10 PByte mit 200 Gbyte/s	
Größe und Bandbreite des Home Dateisystems	1,5 PByte mit 10 GByte/s	
Stromverbrauch des Systems (MW)	<3	

Das Systemkonzept des SuperMUC

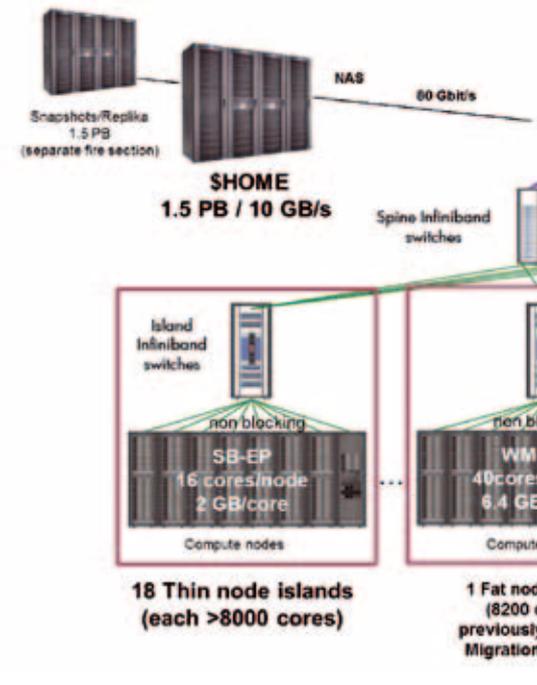
Das Gesamtsystem ist in 19 Compute-Inseln mit jeweils etwa 8.200 Rechenkernen unterteilt (Abb. 3). Eine dieser Inseln ist mit Knoten mit besonders viel Hauptspeicher ausgestattet (eine sog. Fat Node-Insel mit 205 Rechenknoten). Die hierbei verwendete Prozessortechnologie ist Intel Westmere-EX. Ein Rechenknoten besteht aus 40 Cores, die auf einen gemeinsamen Hauptspeicher von 256 Gigabyte zugreifen. Diese Insel wurde schon 2011 vorab als Migrations-system („SuperMIG“) geliefert; sie soll nach der Integration ins Gesamtsystem durch Programme benutzt werden, die extrem viel gemeinsamen Hauptspeicher benötigen, etwa für Pre- oder Postprocessing.

Abb. 3: Die Architektur des SuperMUC.

Der Großteil des Systems besteht aus deutlich schlankeren Rechenknoten mit je 16 Rechenkernen und 32 GByte Hauptspeicher (sog. Thin Node-Inseln); hoch skalierbare Programme sind in der Lage, ihre Daten über eine Vielzahl solcher Knoten zu verteilen und dennoch effizient auf diesen Daten zu operieren. Jede Insel besteht aus 512 Knoten (zuzüglich Ausfallreserve und Serviceknoten). Die Besonderheit hierbei ist, dass alle Knoten wassergekühlt sind, sowohl für die Prozessoren als auch die Speicherbausteine (Abb. 4). Ein Knoten besteht aus jeweils zwei 8-Core Sandy Bridge-EP Sockeln, deren Eigenschaften besonders für das Hochleistungsrechnen geeignet sind.

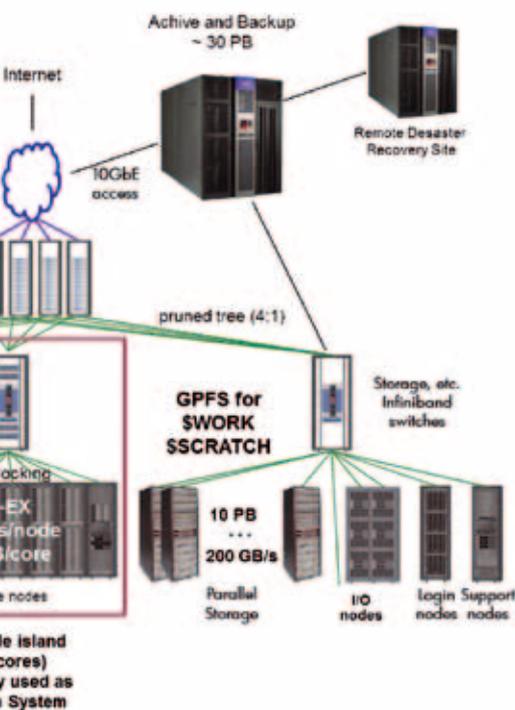
Jeder Sandy-Bridge Sockel besitzt einen für die acht Cores gemeinsamen Level 3-Cache von 20 Megabyte, die L1- und L2-Caches sind dagegen jedem Core dediziert zugeordnet. Die theoretische Bandbreite zum Hauptspeicher liegt bei 6,4 Gigabyte/s pro Core. Ein entscheidendes Architekturmerkmal der Prozessoren ist ihr erweiterter Befehlssatz (Nachfolge der SSE4-Befehle) mit der Bezeichnung Advanced Vector Extension (AVX). Für rechenintensive Aufgaben erlaubt AVX, pro Takt acht Gleitkommaoperationen mit 64 Bit Genauigkeit auszuführen, was einer Verdopplung der Leistung pro Takt gegenüber bisherigen Intel-Architekturen bedeutet. Eine weitere Besonderheit der Sandy-Bridge Prozessoren ist die Hochgeschwindigkeitsverbindung zwischen den Cores und den L3-Caches. Hiermit wird die Skalierbarkeit von Applikationen im gemeinsamen Hauptspeicher deutlich verbessert und zusammen mit der Quickpath-Technologie, die Zugriffe von einem Sockel auf den anderen ermöglicht, auch das bekannte NUMA-Problem (non-uniform memory access, d. h. ungleiche Speicherzugriffszeit je nach Lage der Daten) abgemildert, das für bestimmte Anwendungsklassen erhebliche Leistungseinbußen nach sich ziehen konnte. Schließlich gibt es für die Hyperthreading-Technologie zwei vollständige Registersätze, die eine Trennung von Betriebssystem und Rechenaufgaben ermöglichen oder eine bessere Auslastung der Rechenwerke gestatten.

Die Knoten einer Insel sind in Form eines sog. Fat Trees mit einem nicht-blockierenden InfiniBand-Netzwerk in FDR10-Technologie (QDR bei der Fat Node-Insel) miteinander verbunden. Die Latenz für den Nachrichtenaustausch zwischen Knoten beträgt weniger als zwei Mikrosekunden. Da erwartet wird, dass die meisten Applikationen nur eine oder wenige Inseln benutzen werden bzw. sich durch das Volumen-/Oberflächenverhältnis bei Gebietsaufteilung auch der Datentransfer über Inselgrenzen hinweg reduziert, ist aus Kos-



tengründen zwischen den Inseln nur ein um den Faktor 1:4 ausgedünntes Netzwerk vorgesehen. Im Prinzip ermöglicht dies einer Applikation, das gesamte System zu nutzen, vorausgesetzt die Bandbreitenanforderungen sind nicht extrem hoch. Applikationen bis zu einer Größe von ca. 37.000 Rechenkernen können prinzipiell sogar die volle Bandbreite nutzen.

Hohe Bandbreite, hohe Zugriffsraten und Datensicherheit sind für heutige Hochleistungsrechner entscheidend, denn seit Jahren wird ein Trend zum datenintensiven Rechnen beobachtet. Um die erwarteten enormen Datenmengen effizient speichern und verarbeiten zu können, wurde ein 10 Petabyte großes paralleles Speichersystem beschafft, das mit dem IBM General Parallel File System (GPFS) als bewährter und bekannter Software betrieben wird. Als Hardware wird ein System von DDN eingesetzt. Die aggregierte Bandbreite beträgt 200 Gigabyte/s. GPFS dient vor allem für die Speicherung von großen Ergebnisdatensätzen. Für die Speicherung der Benutzerdaten wie Programmquellen, Eingabedatensätze und Daten zur Jobsteuerung dient ein anderes Network Attached Storage (NAS) System von NETApp, das eher für viele



kleine Dateien optimiert ist und ein hohes Maß an Zuverlässigkeit bereitstellt. RAID, End-to-End Data Integrity, Snapshots und asynchrones Mirroring auf ein zweites System in einem anderen Brandabschnitt des Rechnergebäudes ermöglichen ein hohes Maß an Sicherheit, nicht nur gegen Plattendefekte oder physische Zerstörung, sondern auch gegen unbeabsichtigtes Löschen oder Überschreiben von Daten durch den Benutzer selbst, was in der Praxis durchaus häufig vorkommt. Die Größe des Plattenplatzes für den NAS-Speicher beträgt 1,5 Petabyte (plus 1,5 Petabyte für die gespiegelten Daten) bei einer aggregierten Bandbreite von 10 Gigabyte/s.

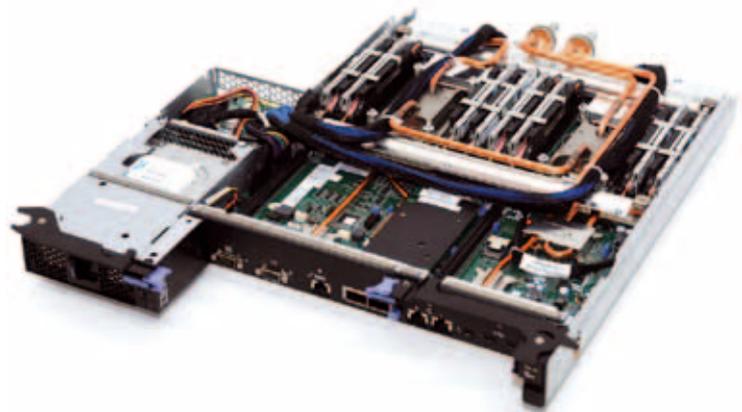
Neben der Speicherung auf Platten können die wertvollen Ergebnisdaten auch auf Bändern archiviert werden. Hierfür hat das LRZ in einer ersten Ausbaustufe zwei Bandroboter in zwei räumlich getrennten Rechenzentren vorgesehen. Insgesamt steht auf 11.000 Bändern eine Speicherkapazität von 16,5 Petabyte zur Verfügung. 22 LTO-5 Laufwerke und vier Hochleistungsserver ermöglichen einen Gesamtdurchsatz von 3 Gigabyte/s. Um das Archivieren zu beschleunigen, wird zusätzlich ein 8 Terabyte großer SSD-Speicher für die Metadaten und ein 2 Petabyte großer Plattenspeicher als Cache verwendet. In einer zweiten Ausbaustufe soll die Gesamtkapazität auf 44 Petabyte und der Durchsatz auf 6 Gigabyte/s erhöht werden.

Zusätzlich zu den Rechenknoten gibt es noch zahlreiche Service- und Managementknoten, z. B. für das Login zum interaktiven Arbeiten, Archivieren und Backup oder Monitoring.

Energieeffizienz durch völlig neue Warmwasserkühlung

Der Energieverbrauch des neuen Rechners von etwa drei Megawatt unter Volllast, zu dem noch der Aufwand für die Kühlung hinzukommt, stellte das LRZ vor hohe finanzielle und technische Probleme und prägte ganz entscheidend die Verhandlungen mit den Herstellern. So wurde beschlossen, bei der Kühlung des Rechners einen völlig neuen Weg zu beschreiten. Die meisten Knoten des SuperMUC nutzen eine Warmwasserkühlung, die aufgrund hoher Vorlaufemperaturen gleich mehrere Vorteile verbindet: Etwa 10 % Energie werden so gespart, da auf den Knoten weniger bis gar keine aktiven Lüftungskomponenten mehr benötigt und Leckströme verringert werden. Außerdem braucht das Rechenzentrum keine energieintensiven Kältemaschinen, was den Energieverbrauch des Gesamtsystems erheblich reduziert. Die Wasserkühlung bringt zudem wertvolle Wärmeenergie zurück, die sich vielfältig verwenden lässt. Im Vergleich zu konventionellen, mit Kaltluft gekühlten Systemen reduzieren sich die CO₂-Bilanz und auch der Lärmpegel im Rechnerraum signifikant. Die Warmwasserkühlung, die die Chips des Systems direkt kühlt, wurde eigens durch IBM entworfen und implementiert. Der SuperMUC kombiniert diese Kühlung mit den energieeffizienten Intel Xeon Prozessoren und einer anwendungsorientierten arbeitenden Systemsoftware. Durch all diese Maßnahmen soll der gesamte Energieverbrauch um 30 bis 40 % gesenkt und ein wesentlicher Beitrag zum Klimaschutz geleistet werden (s. auch S. 24–26).

Abb. 4: Ein Knoten des Rechner-systems mit der innovativen Warmwasserkühlung.



Die Software-Umgebung des SuperMUC

SuperMUC wird mit dem Betriebssystem SUSE Linux Enterprise Server (SLES 11) betrieben. Zusätzlich werden die folgenden Softwarekomponenten verwendet:

- IBM Tivoli Workload Scheduler LoadLeveler als Batchsystem, um Jobs, Jobklassen und Computerressourcen zu verwalten,
- IBM General Parallel File System, um die vielen Einzelplatten zu einem parallelen Filesystem zu koppeln,
- IBM Parallel Environment mit einer hochoptimierten MPI-Implementierung und Tools für die Performanceanalyse,
- Mellanox Unified Fabric Manager (UFM), um die InfiniBand-Infrastruktur zu managen und zu überwachen und
- Extreme Cluster Administration Toolkit (xCAT), mit dem die Installation, die Softwareprovisionierung und das Management eines solchen großen und komplexen Rechensystems vereinfacht werden.

Um optimalen Code aus Fortran, C- oder C++ Quellen zu generieren, kommen die Produkte von Intel zum Einsatz, die in der Lage sind, die besonderen Eigenschaften der Prozessoren (z. B. AVX) optimal auszunutzen. Darüber hinaus wird auch die OpenMP-basierte parallele Programmierung innerhalb eines Knotens von diesen Compilern bereitgestellt. Obwohl die C/C++ Compiler von Intel mit den GNU-Compilern weitgehend kompatibel sind, sind auf dem System auch alle GNU-Compiler vorhanden. Der Intel VTune Amplifier liefert Angaben über das Performanceverhalten und Schwachstellen von Applikationen aufgrund von Countermessungen innerhalb der Prozessoren, der Intel Inspector kann Fehler bei der Speicherverwaltung oder beim Threading herausfinden. Der Intel Trace Analyzer and Collector oder Vampir NG der Technischen Universität Dresden ermöglichen es, das Skalierungsverhalten von MPI-Programmen besser zu verstehen und zu optimieren. Schließlich steht mit Intel MPI eine zweite MPI-Implementierung zur Verfügung, die es erlaubt, Applikationen zu entwickeln, die auch außerhalb einer IBM-Umgebung ablauffähig sind bzw. von Drittherstellern gelieferte Programme auf dem SuperMUC auszuführen. Die Produkte von Intel werden durch eine Vielzahl von Open-Source Tools zur Performanceanalyse ergänzt (PAPI, Likwid, Scalasca, IPM u. v. a. m.). Für die Fehlersuche steht der DDT Debugger mit einer graphischen Benutzerschnittstelle bereit.

Das LRZ arbeitet im Rahmen diverser Drittmittelprojekte an der Weiterentwicklung und Anpassung von Programmierwerkzeugen für den SuperMUC.

Um eine hohe Applikationsleistung zu erreichen, sind speziell optimierte mathematische Bibliotheken für die Lineare Algebra oder Fouriertransformationen entscheidend. Hierzu werden unter anderem die Intel Math Kernel Library (MKL), das Portable Extensible Toolkit for Scientific Computations (Petsc), FFTW, die NAG Bibliotheken sowie die GNU Scientific Library bereitgestellt. Zahlreiche Applikationen aus den Bereichen Strömungsdynamik, Strukturmechanik, Elektromagnetik, Chemie und Festkörperforschung stehen Anwendern, die keine eigene Programmentwicklung betreiben, für anspruchsvolle Simulationen zur Verfügung.

Rechenbetrieb

Der größte Teil des SuperMUC wird über das Batch-System LoadLeveler zugänglich sein, jedoch wird eine Thin Node-Insel vorrangig für den interaktiven Zugriff bereitgestellt. Damit sollen die Programmentwicklung und die Fehlersuche in hochskalierbaren Anwendungen beschleunigt werden. Die Maximallaufzeit großer paralleler Programme wird im Normalfall auf zwei Tage begrenzt sein; der Anwender muss daher selber dafür sorgen, dass die für den Neustart des Programmes notwendigen Daten in regelmäßigen Abständen auf das parallele Dateisystem hinausgeschrieben werden.

Das LRZ ermöglichte den Nutzern einen nahtlosen Übergang auf das neue System, indem es eine zum bisherigen Höchstleistungsrechner äquivalente Softwareausstattung auf dem Migrationssystem SuperMIG bereitstellte. Von nun an steht am LRZ eine durchgängige und weitgehend binär-kompatible Softwareumgebung zur Verfügung, beginnend beim Linux-Desktop über das Linux-Cluster bis hin zur höchsten Leistungsklasse des SuperMUC. Die Herausforderung der nächsten Jahre wird es sein, für ein so großes System die Parallelität der Applikationen weiter zu erhöhen und das System effizient zu nutzen. ■

DIE AUTOREN

Dr. Matthias Brehm leitet die Gruppe Applikationsunterstützung am Leibniz-Rechenzentrum, Dr. Reinhold Bader die Gruppe HPC Server und Dienste.



Numerische Strömungssimulation

Ein fliegendes Teleskop in turbulenter Strömung

Abb. 1: Die fliegende Sternwarte SOFIA während eines Testflugs mit offener Tür über der Mojave Wüste im Westen der USA.

Die fliegende Sternwarte SOFIA beweist, dass Astronomie auch von Flugzeugen aus erfolgreich betrieben werden kann. Numerische Strömungssimulationen auf dem Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums leisten hierzu einen wichtigen Beitrag.

VON CHRISTIAN ENGFER

DAS VERSTÄNDNIS UND DIE korrekte Berechnung turbulenter Strömungen ist eine Schlüsseldisziplin in der Entwicklung und Optimierung von Transportsystemen, aber auch bei vielen anderen Industrieanwendungen. Turbulente Strömungen sind im Gegensatz zu laminaren Strömungen durch das Auftreten von stochastischen Fluktuationen der Strömungsgeschwindigkeit charakterisiert – diese zu erfassen, ist eine Herausforderung für die rechnerische Vorhersage. Alle modernen Flugzeuge operieren während des Reiseflugs bei hohen so genannten Reynoldszahlen, was zur Folge hat, dass die Grenzschicht schon im vorderen Bereich des Flugzeugs von einem laminaren in einen turbulenten Zustand übergeht. Folglich ist der größte Teil des Flugzeugs von einer turbulenten Strömung umgeben.

Numerische Strömungssimulation in der Flugzeugentwicklung

Während sich die Flugzeugentwicklung früher fast ausschließlich auf Windkanaltests stützte, ist heutzutage die numerische Strömungssimulation (CFD) ein wichtiges Hilfsmittel während der Entwicklungsphase. Um turbulente Flugzeugumströmungen zu berechnen, kommt dabei in der Regel das RANS-Verfahren zum Einsatz. Hier werden die Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)-Gleichungen unter Verwendung eines geeigneten Turbulenzmodells gelöst, um stationäre anliegende Grenzschichten zu simulieren. Das RANS-Verfahren betrachtet hierbei nur gemittelte Größen, und die turbulenten Fluidbewegungen werden statistisch durch empirische Gleichungen erfasst. Diese Methodik ist hinreichend genau bei der Simulation von Flugzeugen, die um ihren Designpunkt operieren und somit keine Strömungsablösung auftritt.

DER AUTOR

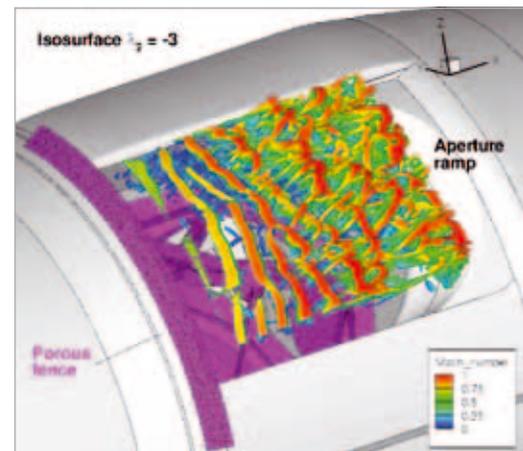
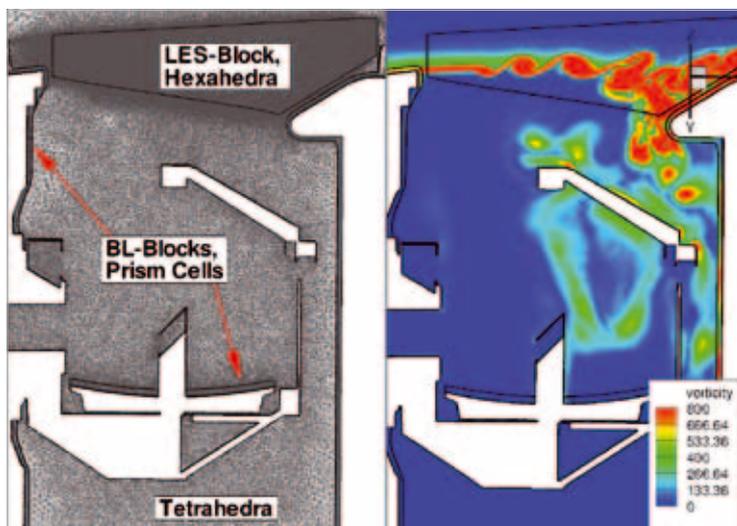
Dipl.-Ing. Christian Engfer ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Deutschen SOFIA Institut in Palmdale, Kalifornien. Seine Forschungsschwerpunkte sind Cavity Aero-Akustik und Aero-Optik. Das Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy (SOFIA) ist ein Gemeinschaftsprojekt der National Aeronautics and Space Administration (NASA) und des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V.

Bei SOFIA, dem Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy, einer von der National Aeronautics and Space Administration (NASA) und dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) betriebenen Boeing 747SP zur Beobachtung des Universums im infraroten Wellenlängenbereich, ist das RANS-Verfahren zur Beschreibung der Flugzeugaerodynamik ebenfalls anwendbar, solange die im hinteren Rumpfteil integrierte Tür geschlossen ist. Während der nächtlichen Beobachtungsflüge, die in 13 km Höhe bei Mach 0,85 stattfinden, wird diese Tür jedoch geöffnet, um dem sich dahinter befindlichen 2,7 m Spiegelteleskop einen Blick auf den Sternenhimmel zu ermöglichen (Abb. 1). Die Flugzeugumströmung ändert sich dadurch abrupt, da die turbulente Strömung beim Überschreiten der Hohlraumvorderkante massiv ablöst und sich über dem Hohlraum, auch Cavity genannt, in eine hochgradig instationäre Scherschicht entwickelt.

Numerische Verfahren zur Beschreibung der Strömung um SOFIA

Die korrekte numerische Strömungssimulation von SOFIA inklusive Cavityströmung wird dadurch viel aufwändiger und komplizierter, da das RANS-Verfahren auf Grund der Ablösung und der Instationarität nicht mehr anwendbar ist. In Fällen großskaliger instationärer Strömungsphänomene, bei denen die Zeitskalen viel größer sind als die der turbulenten Strömungsbewegungen, kommt in der Regel der instationäre RANS-Ansatz, auch URANS genannt, zum Einsatz. Die große Differenz zwischen den Zeitskalen turbulenter und großskaliger Strömungsbewegungen impliziert dabei eine spektrale Lücke, wodurch die Turbulenz als quasi-stationär betrachtet werden kann. Cavityströmungen wie die von SOFIA besitzen aber keine spektrale Lücke, da große Wirbel zu kleineren zerfallen,

Abb. 2: Darstellung der DES-Gittertopologie (links) und der Wirbelstärke (rechts) in einem Schnitt durch die Cavity bei 40° Elevation.

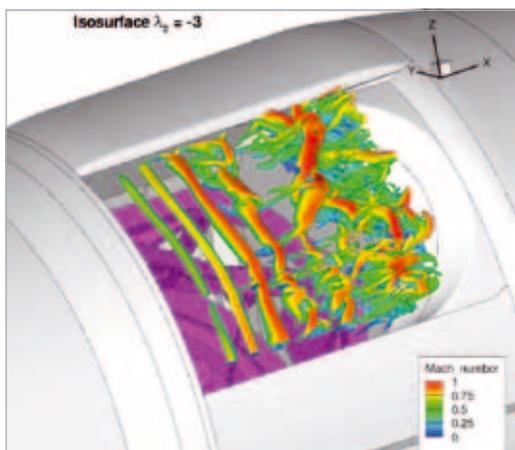


so dass der Einsatz von URANS-Verfahren bei der Simulation von SOFIA fragwürdig ist. Für eine akurade Strömungssimulation von SOFIA bedarf es daher aufwändigerer Verfahren wie LES (Large Eddy Simulation) oder DES (Detached Eddy Simulation).

Die DES-Simulation bietet dabei den besten Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit. Sie kombiniert die Vorteile einer RANS, um anliegende Grenzschichten effizient zu simulieren, mit denen einer weitaus aufwändigeren LES, um die großen Skalen in der Scherschicht direkt aufzulösen und dabei die kleinen Skalen über ein „Subgrid“-Modell zu erfassen. Nachteilig wirkt sich aber die starke Abhängigkeit der Rechenergebnisse von der räumlichen und zeitlichen Auflösung aus.

Rechenmodell und Simulationsanforderungen

Basierend auf diesen Verfahrensgrundlagen werden am Deutschen SOFIA Institut (DSI) in Zusammenarbeit mit dem Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart 3-D-CFD-Simulationen der SOFIA-Konfiguration unter Anwendung des finiten Volumen-Lösers TAU (ein vom DLR entwickelter Strömungslöser) in Verbindung mit URANS- und DES-Methoden durchgeführt. Der Rechenaufwand solcher instationären CFD-Simulationen ist dabei immens und erfordert den Einsatz des Höchstleistungsrechners des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). Das Rechengitter einer DES ist, wie Abbildung 2 zeigt, charakterisiert durch einen isotropen Hexaederblock über der Cavity zur Auflösung der Scherschicht, wodurch sich die Gittergröße auf 46 Millionen Zellen aufbläht. Auf dem Höchstleistungsrechner des LRZ wird dieses Gitternetz auf Grund des großen Arbeitsspeicherbedarfs massiv parallelisiert und zur Rechnungsbeschleunigung auf 1.020 Rechenkernen berechnet. Mit einer zeitlichen Auflösung von 5 μ s und 80 Iterationen pro Zeitschritt benötigt eine DES zur Berechnung von 1,1 Sekunden Umströmung ca. 200.000 CPU-Stunden.



Passive Strömungsbeeinflussung bei SOFIA

Ziel der numerischen Simulationen ist es, die komplexe Cavityströmung zu verstehen, ihren Einfluss auf das SOFIA-Teleskop zu beschreiben und Möglichkeiten aufzuzeigen, die aero-akustische Anregung des Teleskops zu minimieren und damit seine Positioniergenauigkeit zu verbessern. Im Allgemeinen zeichnen sich Cavityströmungen durch markante Druckfluktuationen aus, die durch akustische Resonanzen in der Cavity verstärkt werden. Im Fall von SOFIA würden diese unerwünschte Vibrationen der Teleskopstruktur hervorrufen, welche die Bildstabilität beeinträchtigen. Dank der am LRZ durchgeführten Simulationen ist eine detaillierte räumliche und zeitliche Vorhersage des Strömungsfeldes im Teleskopschacht möglich.

Die rechte Graphik in Abbildung 3 zeigt die Scherschichtcharakteristik über der Cavity, so wie sie von einer DES-Simulation berechnet wird. Sie zeichnet sich durch großskalige Strukturen, so genannte Kelvin-Helmholtz-Wirbel aus, die sich bei der Grenzschichtablösung bilden, weiter stromab zerfallen und dabei auf eine halbmondförmige dreidimensional geformte Aperturrampe treffen. Letztere bildet das Herzstück der passiven Strömungsbeeinflussung bei SOFIA. Durch sie wird die Scherschicht stabilisiert und nach außen hin abgeleitet. Dadurch wird vermieden, dass hochenergetische Strömung in die Cavity gelangt, auf das Teleskop trifft und dieses zum Schwingen anregt. Zum anderen unterdrückt die Aperturrampe damit auch akustische Resonanzen im Teleskopschacht, wodurch instationäre Druckschwankungen minimiert werden. Mit anderen Worten ist sie der Garant dafür, dass SOFIA erfolgreich Infrarotastronomie betreiben kann.

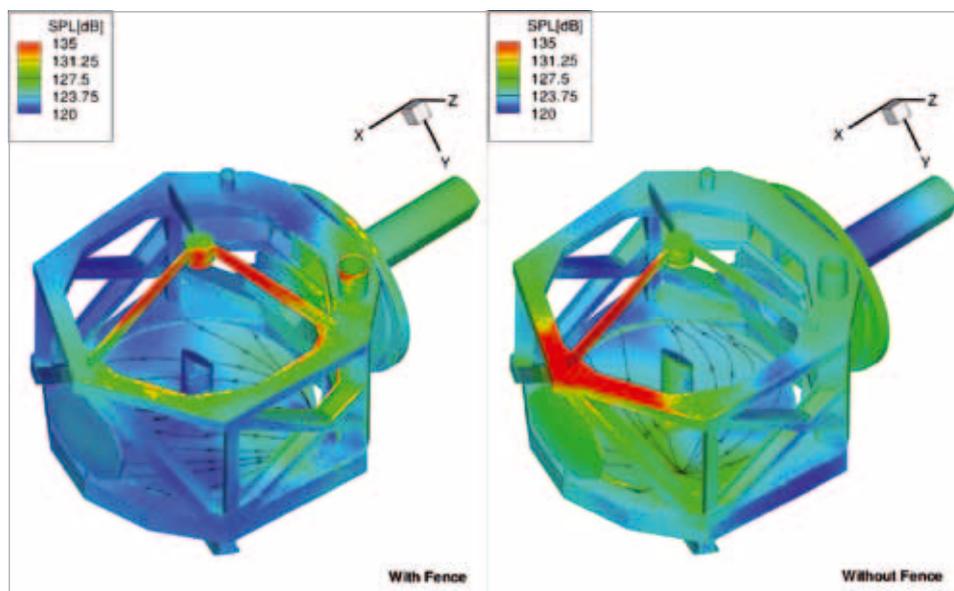
Im Rahmen der Simulationen für SOFIA wurden mehrere Ansätze zur passiven Strömungskontrolle untersucht. Das Hauptziel war dabei, die strömungsinduzierten Druckschwankungen innerhalb der Cavity zu minimieren, um damit die Positioniergenauigkeit des Teleskops zu verbessern. Ein viel versprechender Ansatz ist die Installation eines porösen „Zauns“ stromauf der Cavity (Abb. 3 links). Der Vergleich beider Graphiken in Abbildung 3 zeigt, dass mit Hilfe dieses Zauns die Kelvin-Helmholtz-Strukturen schneller aufbrechen und somit schon zu einem früheren Zeitpunkt zerfallen. Der indirekte Einfluss dieses Zauns auf die Druckfluktuationen am Teleskop ist in Abbildung 4 visualisiert. Die Druckschwankungen auf der Teleskopoberfläche, hier angegeben in Sound Pressure Levels (SPL), sind in weiten Bereichen reduziert.

Aktuelle Simulationen für SOFIA

Die mittlerweile abgeschlossenen Testflüge von SOFIA ermöglichten es, die durchgeführten numerischen Simulationen umfassend zu validieren. Trotz vieler Übereinstimmungen gibt es auch Diskrepanzen bei der Abbildung der Cavity-Akustik und der Reproduktion der aero-optischen Eigenschaften der Scherschicht. Der letztgenannte Aspekt hat entscheidende Bedeutung bei der Bewertung der aufgenommenen infraroten Bilder. Zum besseren Verständnis dieser Unterschiede werden derzeit auf SuperMUC, dem neuen Höchstleistungsrechner des LRZ, weitere Simulationen auf noch feineren Rechengittern und unter Anwendung verbesserter DES-Verfahren (IDDES) durchgeführt.

Abb. 3: Scherschichtcharakteristik, links mit und rechts ohne Installation eines porösen „Zauns“ stromauf der Cavity.

Abb. 4: Konturplot der Druckfluktuationen auf der Teleskopoberfläche, links mit und rechts ohne „Zaun“ stromauf der Cavity.



Die Evolution unseres Universums

Supercomputer wie der neue SuperMUC des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) sind ein unverzichtbares Werkzeug astrophysikalischer Forschung.

VON VOLKER SPRINGEL

Abb. 1: Kosmische Großraumstruktur in beobachteten Galaxienkatalogen (blau), verglichen mit der simulierten Galaxienpopulation in der Millennium-Simulation (rot).

WIE KAUM EIN ANDERES Forschungsgebiet beschäftigen sich Astronomie und Astrophysik mit einer enormen Vielfalt an höchst exotischen Vorgängen in der Natur. Das Spektrum reicht von ultradichten kompakten Objekten wie Neutronensternen über energetische Prozesse wie Supernova-Explosionen bis hin zu den äonenlangen Vorgängen der Entstehung des Weltalls und seiner größten Strukturen, den Galaxien und Galaxienhaufen.

All diesen Phänomenen gemeinsam ist, dass sie sich einem experimentellen Zugang auf der Erde fast vollständig entziehen. Simulationsrechnungen auf leistungsfähigen Computern erlauben es aber, dieses fundamentale Problem zumindest teilweise zu umgehen, denn Simulationen gestatten „virtuelle“ Experimente, die eine immer größere Treue gegenüber den betrachteten physikalischen Vorgängen erreichen. Die „Zahlenfresser“ des High Performance Computing erlauben es dabei, die komplizierten Differentialgleichungssysteme der Astrophysik mit all ihren Nichtlinearitäten zu lösen und damit neue wissenschaftliche Erkenntnisse zu gewinnen sowie Theorien zu überprüfen. Daher sind Computersimulationen heute zur wichtigen dritten Säule der astrophysikalischen Forschung geworden, neben der Beobachtung und der theoretischen Modellbildung.

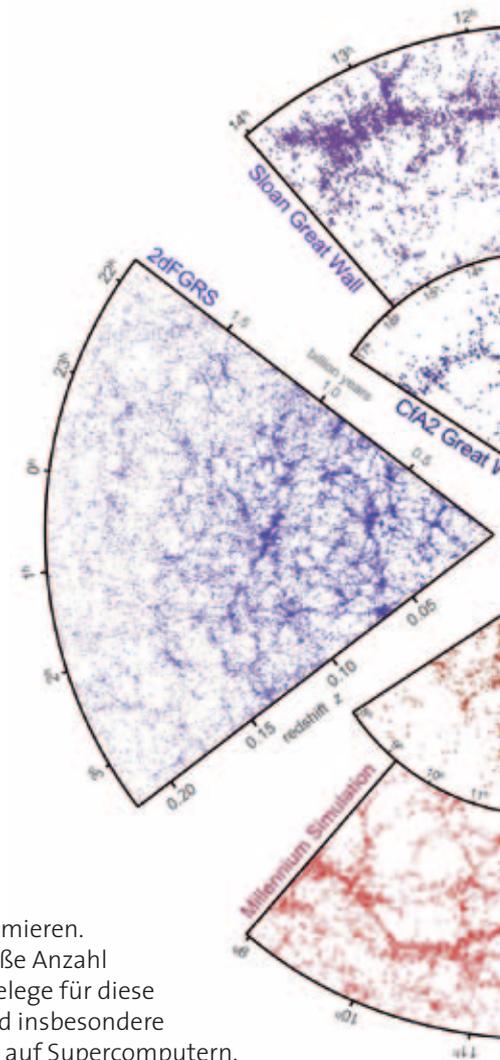
Besonders deutlich wird das in der Kosmologie. Eine der frappierendsten astronomischen Erkenntnisse der letzten beiden Dekaden ist, dass der Materieinhalt des Universums offenbar zum großen Teil aus nicht-baryonischer dunkler Materie besteht und zusätzlich eine dunkle Energie für eine beschleunigte Expansion des Raumes im heutigen All sorgt. Es ist Astrophysikern keineswegs leicht gefallen, die Existenz der rätselhaften dunklen Materie und dunklen Ener-

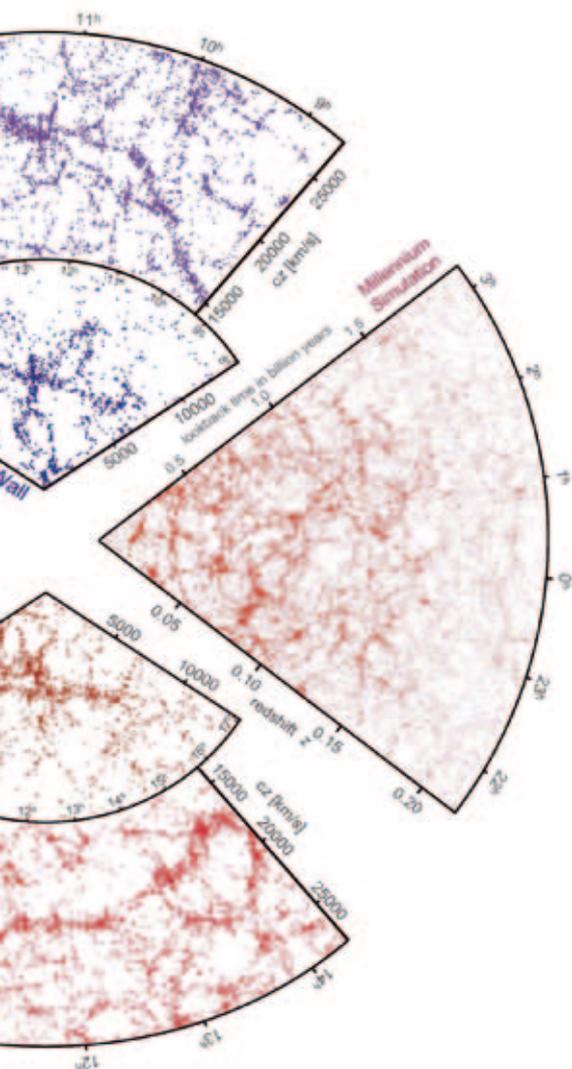
gie zu proklamieren. Erst eine große Anzahl sehr guter Belege für diese Theorie – und insbesondere Rechnungen auf Supercomputern, etwa am Leibniz-Rechenzentrum – haben diese so phantastisch anmutende Hypothese in eine belastbare Theorie verwandelt, in Form des kosmologischen Standardmodells „ Λ CDM“.

Die kosmische Großraumstruktur

2005 publizierte das Virgo-Consortium (ein internationales Team von Astrophysikern aus Deutschland, England und Kanada) die „Millennium-Simulation“, eine bahnbrechende Berechnung dieses Λ CDM-Universums. Sie wurde auf dem PSI-Supercomputer des Rechenzentrums Garching der Max-Planck-Gesellschaft durchgeführt und setzte die gewaltige Zahl von zehn Milliarden Massenteilchen ein, um den Materieinhalt des Universums in einer Region von mehr als zwei Milliarden Lichtjahren Kantenlänge zu repräsentieren. Die Simulation verfolgte die Entstehung von mehr als 20 Millionen Galaxien und machte Voraussagen für ihre räumliche Verteilung, ihre Entstehungsgeschichte und ihre physikalischen Eigenschaften.

Interessanterweise stimmten die Voraussagen des Λ CDM-Modells mit vielen Beobachtungsdaten überein, vor allem auf großräumigen Skalen. Abbildung 1 zeigt z. B. einen Vergleich





virtueller Himmelsdurchmusterungen in der Millennium-Simulation mit echten Daten großer Galaxien-Beobachtungsprogramme, die das kosmische Netz vermessen haben. Die Millennium-Simulation führte den bisher mächtigsten Nachweis, dass die nichtlinearen Strukturen aus dunkler Materie des Λ CDM-Modells tatsächlich ein erfolgreiches Gerüst für die Entstehung von realistischen Galaxien liefern.

Dunkle Materie in der Milchstraße

Die Suche vieler Physiker nach der dunklen Materie ist mit diesem Erfolg nur weiter befeuert worden. Denn um die Hypothese der Existenz der dunklen Materie zweifelsfrei nachzuweisen, wird ein direkter Nachweis der konkreten physikalischen Natur dieser Teilchen benötigt. Besonders wichtig ist dabei die Milchstraße selbst, in deren Halo aus dunkler Materie das Sonnensystem eingebettet ist. Detektionsexperimente in abgeschirmten unterirdischen Laboren auf der Erde erfordern Voraussagen für die erwartete Dichte der dunklen Materie an der Position der

Sonne sowie für die Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen, die die Erde durchströmen. Nur bei genauer Kenntnis dieser Parameter lassen sich die erwarteten Detektionsraten zuverlässig voraussagen und mithin die Messungen korrekt interpretieren.

Um die erwartete Verteilung der dunklen Materie in der Milchstraße im Rahmen des kosmologischen Standardmodells präzise zu berechnen, hat ein internationales Wissenschaftlerteam unter Leitung von Simon White vom Max-Planck-Institut für Astrophysik 2008 die weltweit bestaufgelöste Simulation der Milchstraße erstellt. Das sog. Aquarius-Projekt wurde auf dem Supercomputer HLRB II des Leibniz-Rechenzentrums durchgeführt. In der Hauptrechnung auf 1.000 Prozessoren und mit einem Hauptspeicherbedarf von mehr als 3 Terabyte wurden fast 5 Milliarden Teilchen eingesetzt, um einen einzelnen Milchstraßen-Kandidaten und seine unmittelbare Umgebung zu untersuchen. Die erreichte Auflösung war dabei fast eine Million Mal besser als in der Millennium-Simulation. Die hochaufgelöste Region wurde sorgfältig in eine großräumige Simulation des umgebenden Universums eingebaut, so dass die Rechnung die Entstehung der Milchstraße konsistent aus den vom Urknall hinterlassenen kosmologischen Anfangsbedingungen verfolgte, und zwar über einen Zeitraum von mehr als 13 Milliarden Jahren. Die entstandene Milchstraße enthielt am Ende etwa 1,5 Milliarden Auflösungselemente, und der erreichte dynamische Bereich pro Raumdimension betrug fast 10^7 . Alle diese Werte sind Rekordzahlen für das Forschungsgebiet, die auch heute noch unübertroffen sind.

Eines der wichtigsten Ergebnisse des Aquarius-Projekts war die genaue Bestimmung der Häu-

Abb. 2: Verteilung dunkler Materie im Halo der Aquarius-Simulation. Der virialisierte Bereich dieses Modells der Milchstraße enthält eine riesige Zahl von Substrukturen.

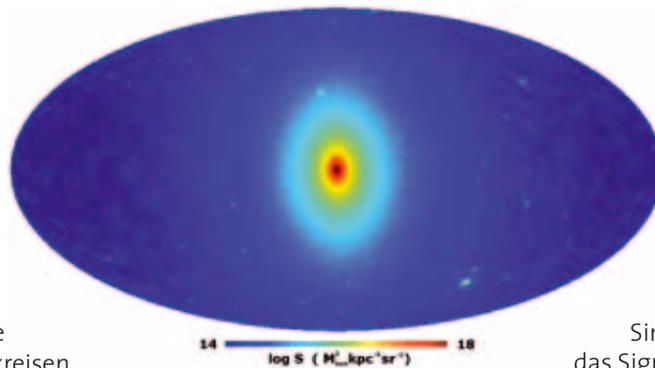


Abb. 3: Eine Himmelskarte der erwarteten Intensität von Vernichtungsstrahlung der dunklen Materie auf Basis der Aquarius-Simulation, von der Position der Sonne aus. Der helle zentrale Bereich markiert das galaktische Zentrum.

figkeit sowie erstmalig auch der inneren Struktur von so genannten Subhalos aus dunkler Materie, die in der Milchstraße kreisen. Diese Satellitensysteme sind überaus zahlreich (über 300.000 konnten in Aquarius gefunden werden, s. Abb. 2) und bestehen aus den dichten Zentren von Strukturen, die bei der hierarchischen Entstehung des Systems in die simulierte Milchstraße eingefallen sind. Dabei wurde ihre äußere Massenhülle teilweise durch Gezeitenkräfte abgestreift, aber ihre Kerne konnten länger überleben und in der Galaxie ihre Bahnen ziehen. Der Phasenraum des Halos der Milchstraße ist deshalb nicht einfach glatt und strukturlos, sondern im Gegenteil durch eine große Komplexität und einen Reichtum an kleinskaliger Substruktur gekennzeichnet.

Besonders interessant an den Subhalos ist ihre Verbindung zu den beobachteten leuchtenden Satellitengalaxien in der Milchstraße. Diese besitzt nämlich einige Dutzend Zwerggalaxien in ihrem Halo – etwa die beiden Magellanschen Wolken –, und es liegt nahe, diese Satelliten mit den Substrukturen aus dunkler Materie zu identifizieren. Allerdings gibt es von den Letzteren augenscheinlich wesentlich mehr als Zwerggalaxien. Ob dieses Problem einen Widerspruch zur Λ CDM-Theorie darstellt oder durch physikalische Prozesse der Galaxienentstehung erklärt werden kann, ist aktuell hoch umstritten.

Eine andere wichtige Implikation der dunklen Substrukturen betrifft das erwartete Signal so genannter Vernichtungsstrahlung der dunklen Materie. Zwar wissen die Teilchenphysiker noch nicht genau, woraus die dunkle Materie wirklich besteht, sie haben aber einen Favoriten, der sich in der gängigsten Erweiterung des Standardmodells der Elementarteilchen-Physik recht natürlich ergibt. Diese Teilchen werden als Neutralinos bezeichnet und sind ihr eigenes Antiteilchen. Insbesondere können sie sich in dichten Regionen mit ihresgleichen zu reiner Energie zerstrahlen, was sich am Ende in der Ausstrahlung harter Gamma-Strahlung manifestieren sollte. Eine Detektion solcher Gamma-Photonen könnte damit einen indirekten Nachweis der dunklen Materie liefern. Derzeit wird mit dem FERMI-Satelliten intensiv nach diesem Glimmen der dunklen Materie gefahndet. Da die Rate solcher Vernichtungsereignisse quadratisch mit der Dichte ansteigt, verändern die Substruktur-Klumpen in



dem galaktischen Halo das erwartete Gamma-Signal entscheidend. Mit der Aquarius-Simulation konnte das Signal dieser Vernichtungsstrahlung, das man durch die Myriaden von dichten Subhalo-Zentren im Halo der Milchstraße erwartet, zum ersten Mal sehr präzise bestimmt werden (Abb. 3).

Aktuelle Trends

Trotz dieser beeindruckenden Fortschritte bei der Aufklärung der Strukturen aus dunkler Materie steckt unser Verständnis der baryonischen Prozesse der Galaxienentstehung noch in den Kinderschuhen. In so genannten hydrodynamischen Simulationen wird neben der dunklen Materie auch das Helium- und Wasserstoffgas simuliert, das durch Strahlungskühlung in den Halos auskondensiert und im Zentrum schließlich so dicht wird, dass Sterne entstehen können. Die schwereren Sterne wiederum explodieren nach einiger Zeit als Supernova und setzen lokal gewaltige Energiemengen frei, ferner schwere Elemente, mit denen sie das interstellare Gas chemisch anreichern. Es ist eine große Herausforderung der aktuellen Forschung, die Regulierung der Sternentstehung durch Überschall-Turbulenz, Magnetfelder und Energieeinspeisung durch Supernovae und akkretierende Schwarze Löcher mit Hilfe von Supercomputer-Simulationen besser zu verstehen. Die Anforderungen an die Rechenleistung sind für solche Simulationen noch erheblich höher als für Berechnungen nur der dunklen Materie.

Daneben erfordern sie auch besondere numerische Methoden für die Hydrodynamik, die hochgradig adaptiv und genau arbeiten müssen, weshalb sie ständig weiterentwickelt werden. Ein aktuelles Beispiel ist in Abbildung 4 zu sehen. Hierbei wurde ein neues numerisches Verfahren, das mit einem dynamisch bewegten Voronoi-Gitter arbeitet, erstmals auf das Problem der Galaxienentstehung angewandt. Verglichen mit einer korrespondierenden Simulation, die mit dem Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Verfahren durchgeführt wurde, sieht man, dass die neue Methode eine wesentlich besser ausgeformte Spiralgalaxie bildet. Diese beiden Modelle

DER AUTOR

Prof. Dr. Volker Springel ist Professor für Theoretische Astrophysik an der Universität Heidelberg. Er leitet eine Arbeitsgruppe am Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS), die mit Hilfe von Computersimulationen erforscht, wie sich das Weltall nach dem Urknall entwickelt hat und welche Rolle die dunkle Materie spielt. Seine Forschungsergebnisse basieren u. a. auf Simulationsrechnungen am Leibniz-Rechenzentrum.

wurden auf Ranger, einem Supercomputer des Texas Advanced Computing Centers, berechnet. Wir planen, die nächste Generation dieser Simulationen auf SuperMUC mit wesentlich besserer Auflösung und einer vollständigeren Abbildung der relevanten Physik durchzuführen.

Ein anderer wichtiger Trend bei kosmologischen Simulationen liegt in einer weiteren massiven Erhöhung der Teilchenzahlen der N-Körper-Simulationen. Es werden Rechnungen ähnlich zur Millennium-Simulation angestrebt, nur noch viel größer, mit bis zu 1.000 Milliarden Teilchen und mehr. Der wesentliche Antrieb für dieses Ziel ergibt sich aus großen und sehr teuren Beobachtungsprojekten, die auf eine Vermessung von Eigenschaften der dunklen Energie abzielen. Etliche dieser Projekte sind unlängst auf den Weg gebracht worden. Das ambitionierteste ist der europäische EUCLID-Satellit, der ab 2019 eine sechsjährige Kartierung des Weltraums beginnen und unter anderem die so genannten baryonischen Oszillationen vermessen soll. Diese prägen der Materieverteilung des Universums gewissermaßen eine Standardlänge auf, deren genaue Bestimmung zu verschiedenen Epochen eine Rekonstruktion der kosmischen Ausdehnungsgeschichte und damit der Entwicklung der dunklen Energie erlaubt. Allerdings erfordern die Messungen von EUCLID sehr präzise Kalib-

rierungen, die sich nur mit extrem großen und genauen numerischen N-Körper-Simulationen erreichen lassen.

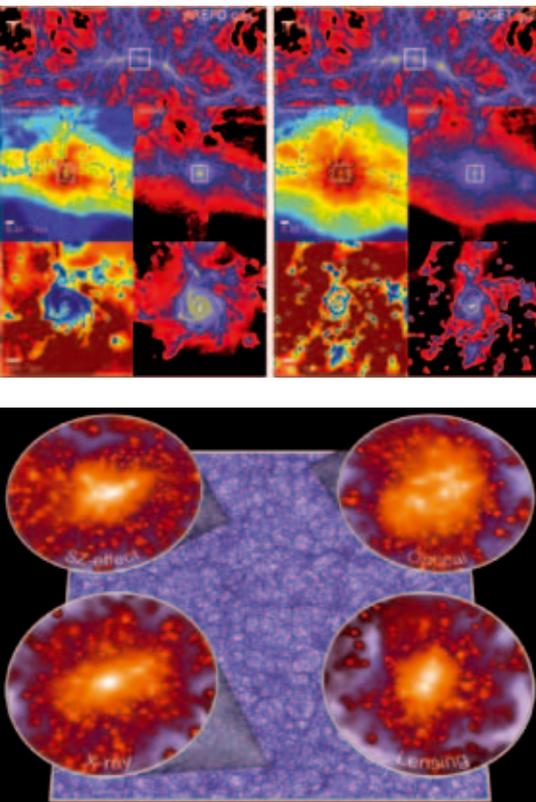
Die Millennium-XXL-Simulation

Ein aktuelles Beispiel für eine erste solche kosmologische Simulation ist das Millennium-XXL-Projekt, das das Virgo-Konsortium unlängst auf dem Supercomputer JUROPA am Forschungszentrum Jülich durchgeführt hat. Diese Rechnung repräsentiert die dunkle Materie mit 303 Milliarden Teilchen (6.720^3) in einer würfelförmigen Region mit einer Kantenlänge von 4,2 Gigaparsec, was einer Strecke entspricht, für die selbst Licht mehr als 10 Milliarden Jahre benötigt. Insgesamt 12.288 Prozessoren des Supercomputers arbeiteten gemeinsam an der Rechnung, für zusammengenommen etwa 3 Millionen CPU-Stunden. Auch der Speicherverbrauch der Millennium-XXL-Simulation war immens. Am Ende benötigte die Rechnung fast 30 Terabyte Hauptspeicher, was genau dem gesamten verfügbaren Speicher auf dem eingesetzten Teil des Superrechners (70 % des Gesamtsystems) entsprach. Um diese große Simulation überhaupt möglich zu machen und die Analyse der mehr als 100 Terabyte erzeugten Daten einigermaßen praktikabel zu halten, mussten ganz neue Strategien für den Umgang mit extrem großen Datenmengen und den daraus extrahierten Galaxienmodellen entwickelt werden.

Ein interessanter Aspekt des riesigen Volumens der Millennium-XXL-Simulation ist, dass man dadurch nach extrem seltenen Ereignissen und Objekten suchen kann. Sehr massereiche Galaxienhaufen, die einige 10^{15} Sonnenmassen enthalten, gehören zu dieser Kategorie (Abb. 5). In jüngster Zeit hat der PLANCK-Satellit ein neues Rätsel über Galaxienhaufen entdeckt, und zwar in Form einer systematischen relativen Verschiebung zwischen zwei beobachteten Skalenrelationen von Galaxienhaufen. Diese Abweichung widerstand zunächst allen einfachen Erklärungsversuchen, so dass selbst exotische Vermutungen, wie etwa die mögliche Existenz einer Population von Haufen ohne Gasinhalt, in Betracht gezogen wurden. Mit den Daten der Millennium-XXL-Simulation konnte nun aber gezeigt werden, dass die Abweichung in den Skalenrelationen vollständig durch statistische Auswahlereffekte erklärt werden kann. Dies zeigt einmal mehr, wie wichtig Supercomputer für die Theoriebildung und die Interpretation umfangreicher Beobachtungsdaten in der Astronomie und Astrophysik sind.

Abb. 4: Projizierte Temperatur- und Gasdichteverteilungen in zwei hydrodynamischen Simulationen der Galaxienentstehung, ausgeführt mit dem neuen bewegten Gittercode AREPO (links) oder mit dem traditionellen SPH-code GADGET (rechts).

Abb. 5: Kosmische Großraumstruktur in einem dünnen Schnitt durch einen kleinen Teil der Millennium-XXL-Simulation. Die Vergrößerungen zeigen einzelne Galaxienhaufen, die jeweils das stärkste Signal in unterschiedlichen Beobachtungstechniken im gesamten Volumen der Simulation liefern.



Die virtuelle Lunge

Die künstliche Beatmung lungenkranker Patienten führt immer wieder zu Folgeschäden, von Entzündungen bis hin zu multiplen Organversagen. Computersimulationen auf Höchstleistungsrechnern wie dem SuperMUC helfen, die Funktionsweise der Lunge besser zu verstehen und Maßnahmen gegen derartige Schädigungen zu ergreifen, wie ein Projekt am Lehrstuhl für Numerische Mechanik der Technischen Universität München zeigt.

VON LENA YOSHIHARA, WOLFGANG A. WALL UND MICHAEL W. GEE

DIE KÜNSTLICHE BEATMUNG ist die wichtigste lebenserhaltende therapeutische Maßnahme in der Intensivmedizin. Doch trotz ihres großen Nutzens stellt die mechanische Beatmung für den Patienten immer auch ein Risiko dar, da die dabei auf die Lunge ausgeübte Beanspruchung in hohem Maße unnatürlich ist. Während bei der Spontanatmung die Luftströmung durch einen durch Muskelkontraktion hervorgerufenen Unterdruck induziert wird, wird die Luft bei der künstlichen Beatmung mit hohem Überdruck in das Organ gepresst. Auch wenn die Lunge darauf eigentlich nicht ausgelegt ist, verkraftet ein ansonsten gesunder Mensch die künstliche Beatmung im Allgemeinen gut. Ganz anders sieht die Situation bei Patienten aus, die an einer Lungenerkrankung wie dem Atemnot-Syndrom leiden. Da in diesem Fall Teile der Lunge kollabiert sind, verteilt sich die zugeführte Luftmenge auf den verbliebenen kleineren Teil, so dass die ursprünglich gesunden Bereiche überdehnt werden. Diese Überbeanspruchung kann sowohl mechanische Schädigungen als auch schwere Entzündungsreaktionen im Gewebe bewirken und bis hin zum multiplen Organversagen führen. Dementsprechend ist die Sterblichkeitsrate dieser Patienten erschreckend hoch.

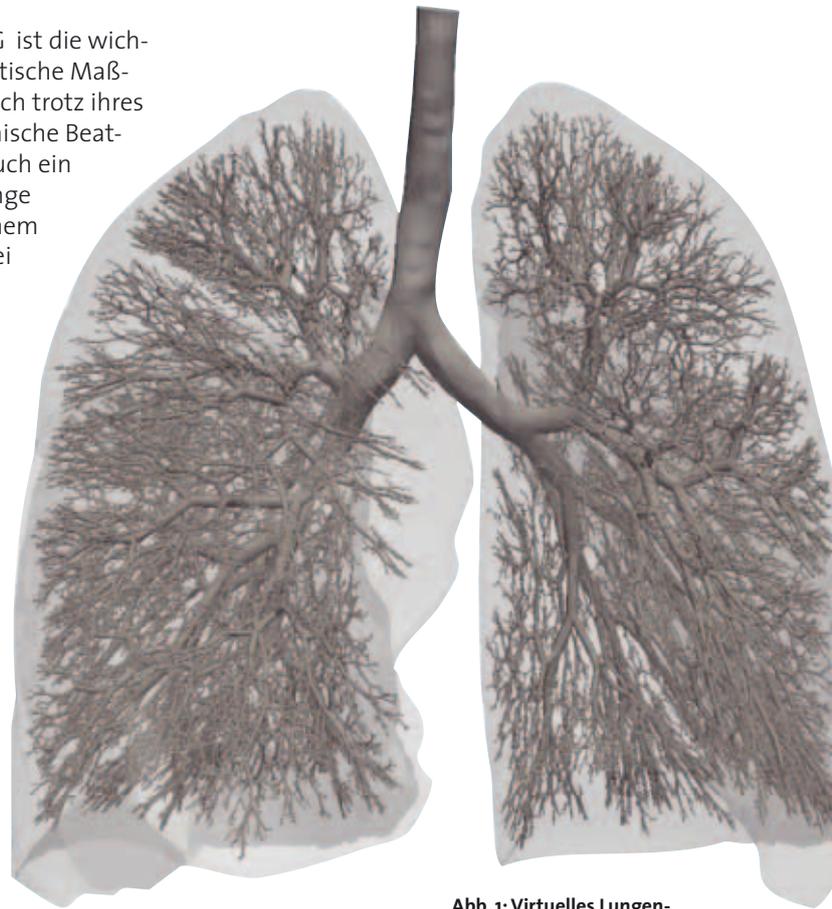


Abb. 1: Virtuelles Lungenmodell, bestehend aus detaillierten Atemwegs- und Gewebsmodellen.

Die Lunge: ein komplexes Organ

Die Frage, wie schwerkranke Patienten am besten beatmet werden sollten, beschäftigt Mediziner seit langem. Leider weiß man jedoch immer noch viel zu wenig über die Lunge, um sinnvolle Richtlinien für die Beatmung zu formulieren. Dieses mangelnde Verständnis der Lungenmechanik ist zurückzuführen auf die Komplexität des Organs und die Unmöglichkeit, relevante Größen zu messen. Aus morphologischen Untersuchungen an post mortem entnommenen Lungen weiß man, dass die Luft in der Lunge durch mehr als 20 Generationen von verzweigenden Atemwegen in etwa 500 Millionen Lungenbläschen, die so genannten Alveolen, transportiert wird. Am lebenden Patienten lassen sich jedoch mit bildgebenden Verfahren wie der Computertomographie (CT) nur etwa die obersten sechs Generationen darstellen. Dementsprechend können Deformationen im Alveolarbereich mit Bildgebung nicht erfasst werden. Ebenso unmöglich ist es, den Druck in den Alveolen zu messen, um die lokale mechanische Beanspruchung des Gewebes daraus abzuleiten. Die einzigen Informationen, die dem Intensivmediziner zur Verfügung stehen, sind daher meist nur die am Beatmungsgerät gemessenen globalen Werte für aufgebrachten Überdruck und zugeführtes Luftvolumen. Die Auswirkungen dieser Parameter auf den individuellen Zustand eines Patienten lassen sich jedoch kaum abschätzen.

Auf dem Weg zur „virtuellen Lunge“

Computersimulationen können dazu beitragen, unser Verständnis der Lungenmechanik im Allgemeinen sowie beatmungsinduzierter Lungenschäden im Speziellen zu verbessern. Mit Hilfe von detaillierten Modellen können Größen, die sich jeglicher Messung entziehen, erstmals ermittelt werden. So kann beispielsweise im Rahmen von „virtuellen Experimenten“ die mechanische Beanspruchung des Gewebes für verschiedene Beatmungsformen ermittelt werden. Zu diesem Zweck wird am Lehrstuhl für Numerische Mechanik der Technischen Universität München unter der Leitung von Wolfgang Wall und Lena Yoshihara ein umfassendes Computermodell der Lunge entwickelt (Abb. 1). Dabei müssen ganz unterschiedliche physikalische Phänomene wie die Luftströmung in den Atemwegen, die Dynamik von Flüssigkeitsfilmen in den Alveolen und die Deformation des Lungengewebes berücksichtigt werden. Weitere Schwierigkeiten ergeben sich aus den verschiedenen relevanten Längenskalen, die von cm im Bereich der Luftröhre bis zu μm im Alveolarbereich reichen. Aus diesem Grund

wurden innovative Mehrfeld- und Mehrskalensätze entwickelt, die alle wesentlichen Effekte berücksichtigen.

Ein zentraler Baustein der „virtuellen Lunge“ ist ein dreidimensionales Modell der oberen Generationen des Atemwegsbaums, das die Simulation der Interaktion von Luftströmung und Atemwegswanddeformation erlaubt. Dieses Fluid-Struktur-Interaktionsmodell berücksichtigt außerdem die Einbettung des Atemwegsbaums in das umgebende Gewebe. Um den Effekt der mittels CT nicht auflösbaren kleineren Atemwege berücksichtigen zu können, werden reduzierte Modelle von künstlich generierten Atemwegsbäumen an das 3-D-Modell angeschlossen. Auf diese Weise können realistische Druckverteilungen in der gesamten Lunge ermittelt werden. Mit Hilfe eines neuartigen Ansatzes wird die

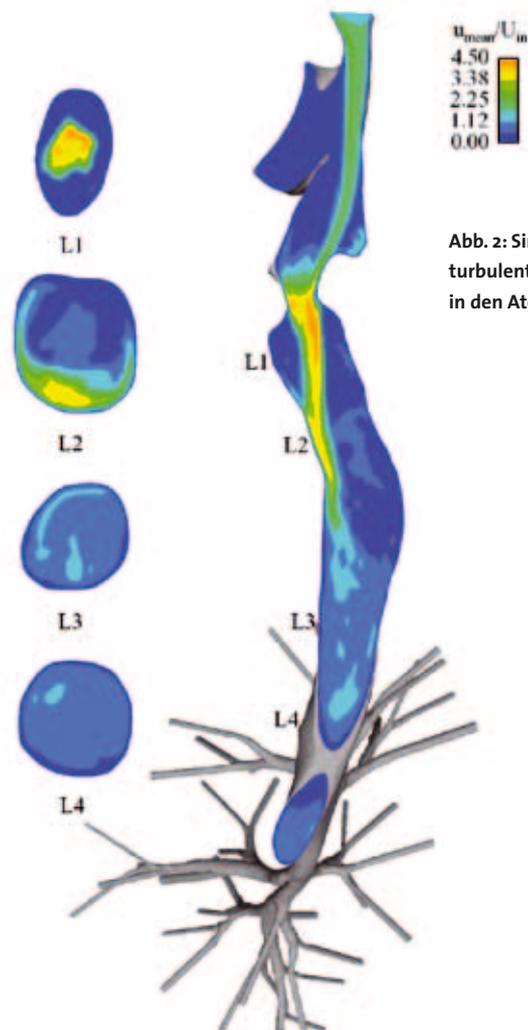


Abb. 2: Simulation der turbulenten Luftströmung in den Atemwegen.

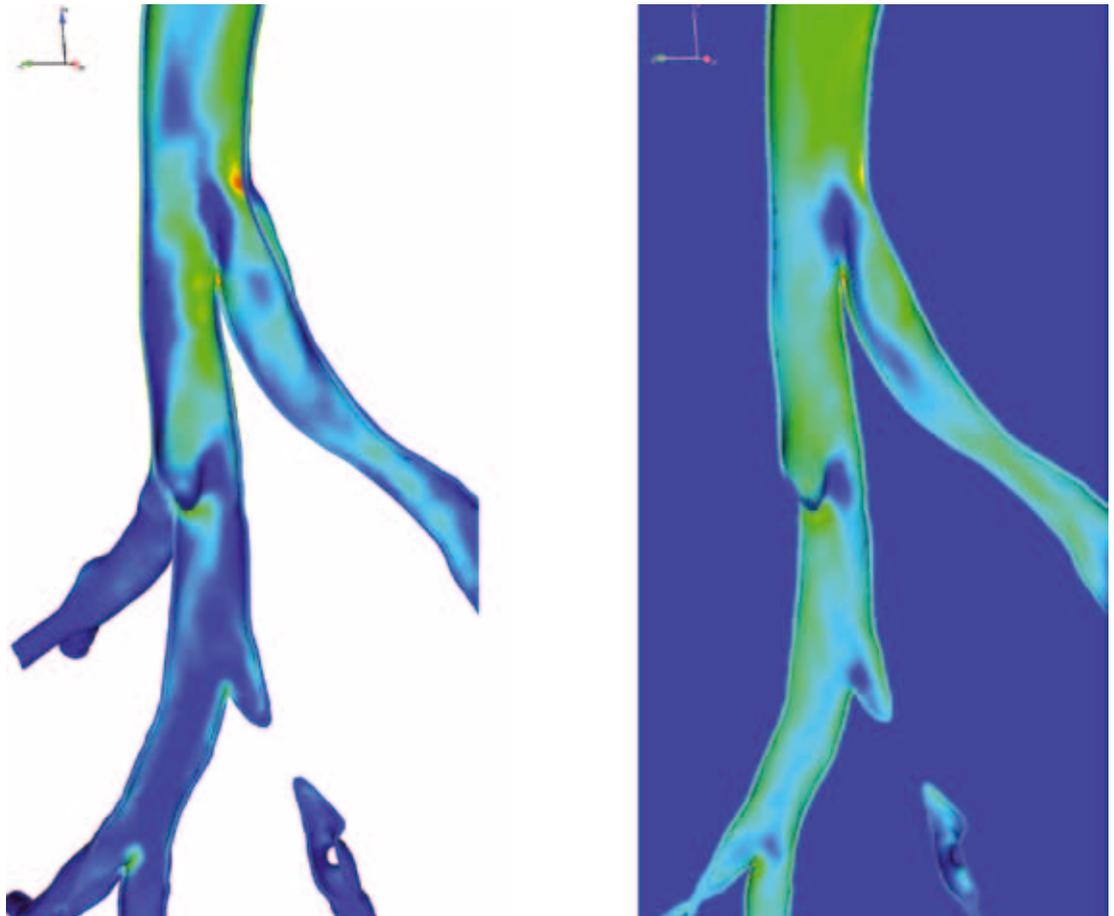


Abb. 3: Visualisierung der Spannungen in einem Schnitt durch den Atemwegsbaum, links ohne und rechts mit Berücksichtigung des umgebenden Lungengewebes.

regionale Luftströmung in den terminalen Atemwegen mit der Volumenänderung des umgebenden Lungengewebes gekoppelt. Um von dieser makroskopischen Gewebsdehnung auf die lokale Beanspruchung in den Alveolen schließen zu können, kommt ein spezieller Mehrskalenansatz zum Einsatz. Dieses Verfahren ermöglicht es, lokal einzelne Alveolen heranzuzoomen, für die wiederum ein detailliertes 3-D-Modell entwickelt wurde. Dieses Alveolarmodell berücksichtigt das Verhalten des Gewebes und des auskleidenden Flüssigkeitsfilmes sowie die komplexe schwammartige Geometrie von Alveolen.

Die entwickelten Modelle werden mit mathematischen Gleichungen beschrieben, die die Grundlage für die numerische Simulation bilden. Wegen der hohen Komplexität des Problems eignen sich hierfür jedoch keine kommerziellen Computerprogramme. Aus diesem Grund wurden alle entwickelten Methoden und Modelle in

die eigens am Lehrstuhl entwickelte Finite-Elemente-basierte Software-Plattform BACI implementiert. Neben der klassischen Festkörper- und Fluidmechanik bietet BACI insbesondere neueste Methoden zur Kopplung von verschiedenen physikalischen Feldern. Außer der bereits erwähnten Fluid-Struktur-Interaktion ermöglicht BACI u. a. auch die Simulation von thermomechanisch oder elektro-chemisch gekoppelten Problemen.

3-D-Simulationen der Lungenmechanik sind mit einem erheblichen Aufwand verbunden. So werden etwa für die Ermittlung der Luftströmung in den oberen Atemwegen oder die Berechnung der lokalen Beanspruchung von Alveolen zwischen 10.000 und 50.000 CPU-Stunden benötigt. Um die hochkomplexen Vorgänge in der Lunge sinnvoll simulieren zu können, ist folglich der Einsatz von Höchstleistungsrechnern unverzichtbar. Aus diesem Grund wurden am Lehrstuhl unter der Leitung von Michael Gee neueste Techniken zur Lösung von nichtlinearen und linearen Gleichungssystemen in BACI integriert. Das Gesamt-

problem wird unter Verwendung von Gebietszerlegungsmethoden und MPI parallelisiert, so dass es auf vielen Prozessoren gleichzeitig bearbeitet werden kann. Für die effiziente parallele Lösung von dünn besetzten linearen Gleichungssystemen greift BACI auf Open-Source Bibliotheken von Trilinos (Sandia National Laboratories) zurück, an deren Weiterentwicklung der Lehrstuhl ebenfalls beteiligt ist. Besonders im Bereich der algebraischen Mehrgittermethoden sind Michael Gee und seine Mitarbeiter seit langem aktiv. Diese speziellen Gleichungslöser zählen zu den effizientesten iterativen Algorithmen für die Lösung von aus partiellen Differentialgleichungen resultierenden Gleichungssystemen.

Neue Einblicke in die Mechanik der Lunge

Die in den letzten Jahren mit BACI am Leibniz-Rechenzentrum durchgeführten Lungensimulationen haben bereits interessante neue Einblicke in die Lungenmechanik ermöglicht. So wird beispielsweise seit langem darüber diskutiert, ob Turbulenzeffekte in den oberen Atemwegen die Strömungsverhältnisse in den peripheren Regionen beeinflussen. In detaillierten Simulationen

wurden nun im Gegensatz zu vorherigen Arbeiten erstmals physiologisch sinnvolle Einströmbedingungen berücksichtigt. Die Ergebnisse dieser Simulationen zeigen, dass Turbulenzeffekte in den Bronchien eher schwach ausgeprägt sind und je nach Geometrie und Strömungsverteilung bereits bis etwa zur dritten Generation komplett abklingen (Abb. 2).

Eine weitere wichtige Erkenntnis betrifft den Einfluss der peripheren Strukturen, die in anderen existierenden Simulationsmodellen stets vernachlässigt werden. Mit Hilfe unseres Lungenmodells konnte jedoch gezeigt werden, dass der maximal auftretende Druck in der Luftröhre um 44 % höher ist, wenn kleinere Atemwege und der Alveolarbereich in die Berechnung miteinbezogen werden. Durch die Berücksichtigung der Interaktion von Strömung und Deformation konnten darüber hinaus Informationen über die Beanspruchungen in den Atemwegswänden gewonnen werden. Dabei zeigte sich, dass diese sich bei Einbettung des Atemwegmodells in das umgebende Lungengewebe drastisch reduzieren (Abb. 3). Dieser Effekt wird bisher ebenfalls von keinem anderen Lungenmodell berücksichtigt. Um schließlich Aussagen über die lokale Beanspruchung des Alveolargewebes treffen zu können, wurde außerdem das Deformationsverhalten von einzelnen

Lungenbläschen simuliert (Abb. 4).

Das zu Grunde liegende geometrische Modell wurde in diesem Fall erstmals aus hochauflösenden Mikro-CT-Datensätzen von isolierten Rattenlungen gewonnen. Es zeigte sich, dass die Dehnungen in einzelnen Alveolarwänden vier Mal größer sind als makroskopische, gemittelte Dehnungen. Diese Erkenntnis bestätigt die These, dass mit rein globalen Messwerten keine Aussagen über die tatsächliche lokale Beanspruchung des Gewebes getroffen werden kann.

Laufende Arbeiten beschäftigen sich mit der vollständig gekoppelten Simulation der Lungenmechanik unter Einbeziehung aller bisher entwickelten Teilmodelle. Unser langfristiges Ziel ist es, zuverlässige Vorhersagen zu treffen, wie sich Lungenerkrankungen entwickeln und wie sich eine bestimmte Intervention auswirkt. Diese Informationen sollen den Ärzten helfen, ihre schwerkranken Patienten in Zukunft individuell besser versorgen zu können. ■

DIE AUTOREN

Dr.-Ing. Lena Yoshihara ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Numerische Mechanik der Technischen Universität München und leitet dort die Gruppe für Lungenmechanik. Prof. Dr.-Ing. Wolfgang A. Wall ist Inhaber des Lehrstuhls für Numerische Mechanik und Direktor der Munich School of Engineering an der Technischen Universität München. Prof. Dr.-Ing. Michael W. Gee leitet die Gruppe für Mechanik auf Höchstleistungsrechnern an der Technischen Universität München. Mithilfe des Höchstleistungsrechners am Leibniz-Rechenzentrum entwickeln die Autoren ein umfassendes Computermodell der menschlichen Lunge.

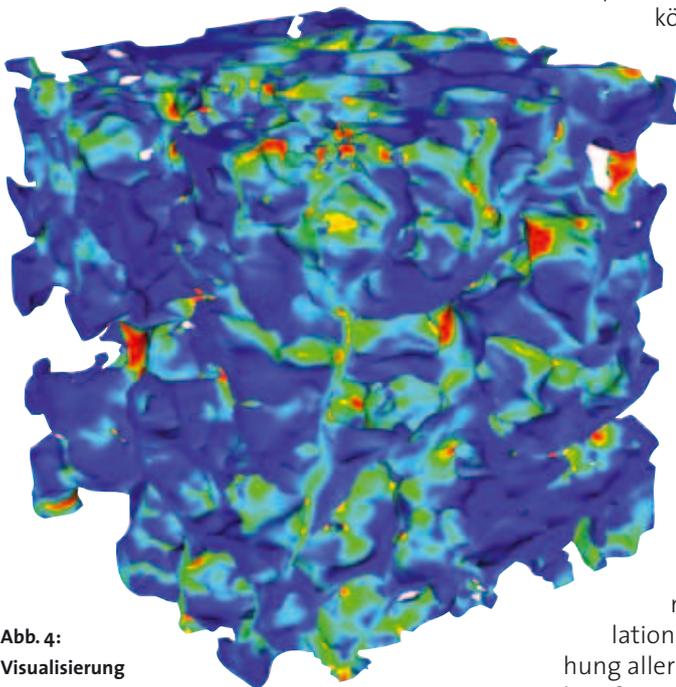


Abb. 4:
Visualisierung
der Dehnungen
im Alveolargewebe.
Rote Bereiche kennzeichnen
gefährdete „hot spots“.

Eines der größten ungelösten Probleme der modernen Teilchenphysik

Im Inneren des Atomkerns: Mit Hilfe von Theorie, Experiment und Simulation an Höchstleistungsrechnern, wie etwa am Leibniz-Rechenzentrum, sind Physiker dem Geheimnis der Quarks auf der Spur.

VON GERRIT SCHIERHOLZ

Abb. 1: Dreidimensionaler Querschnitt des (Raum-Zeit-) QCD Vakuums. Zu sehen sind Isoflächen positiver (rot) und negativer Polarisation (grün) der Quark-Antiquark-Paare.

NACH HEUTIGEM Wissensstand lassen sich nahezu alle beobachteten Elementarteilchen und deren Wechselwirkungen durch das Standardmodell der Teilchenphysik beschreiben. Bei genauerer Betrachtung zeigt sich allerdings, dass mehr als die Hälfte seiner 19 Parameter nicht sehr gut bestimmt sind. Das Standardmodell ist daher mit einer gewissen Willkür behaftet und kann sich in einem gewissen Rahmen den experimentellen Beobachtungen anpassen.

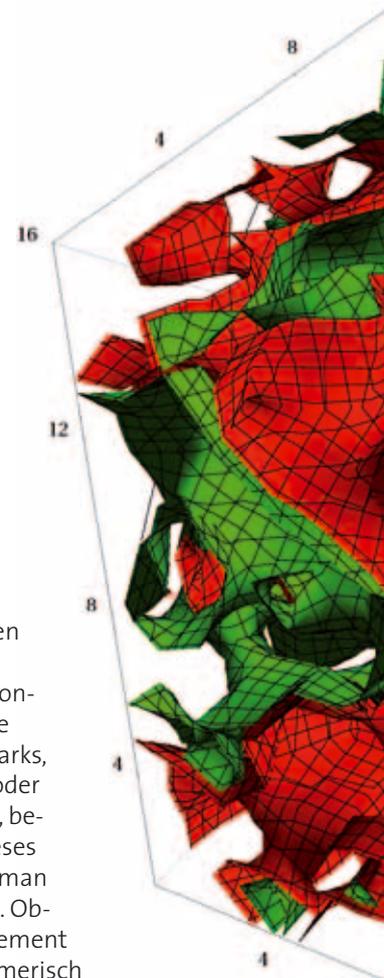
Von Quarks, Gluonen und Hadronen: die Quantenchromodynamik

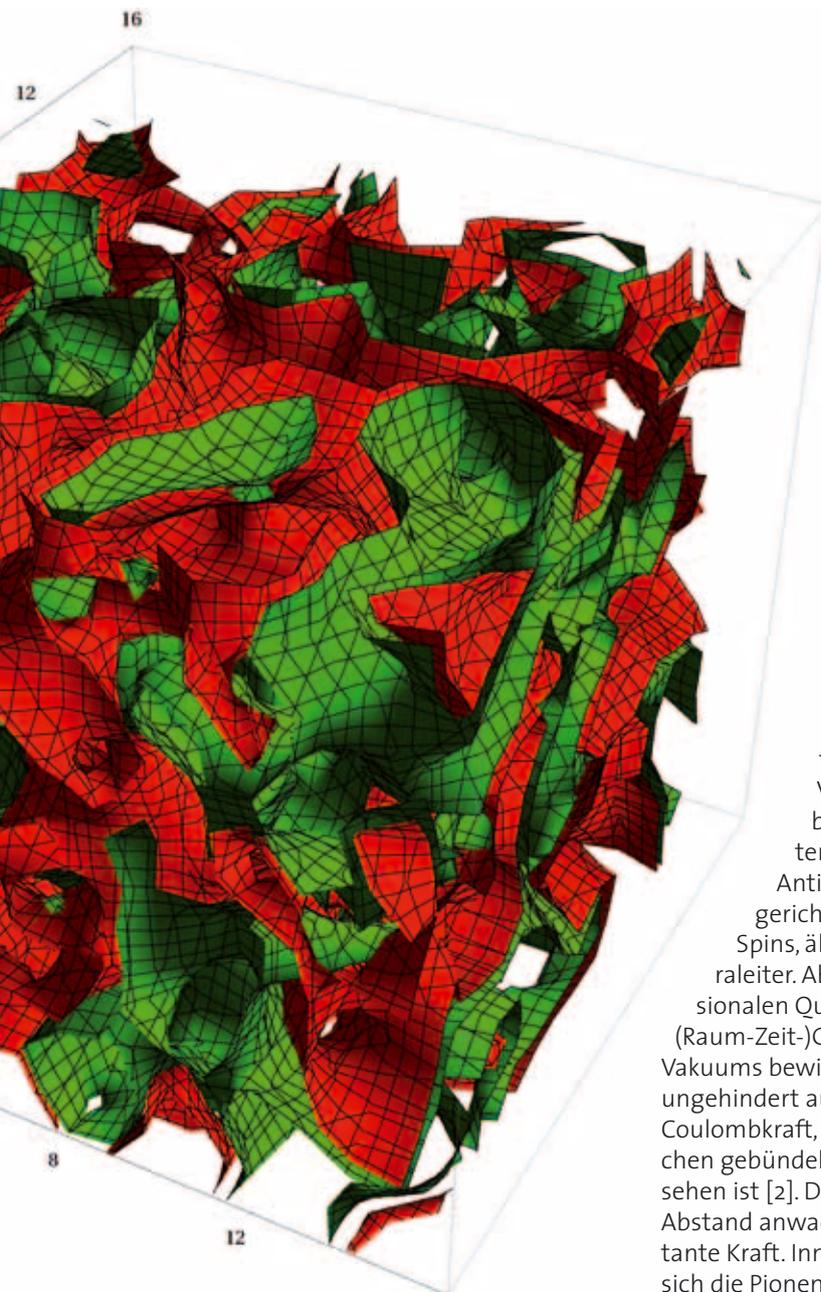
Alle diese Parameter beinhalten Quarks. Sie sind schlecht bestimmt, da die Experimente nicht die Eigenschaften von Quarks und Gluonen – den Bausteinen der Materie – messen, sondern von Hadronen, in denen sie eingeschlossen sind. Die moderne Theorie der starken Wechselwirkung, d. h. der Wechselwirkung zwischen Quarks und Gluonen, ist die Quantenchromodynamik (QCD). Sie beschreibt eine der drei im Standardmodell zusammengefassten Kräfte. Die beiden anderen Kräfte sind die elektromagnetische und die schwache Kraft. Um das Standardmodell zweifelsfrei zu testen und eventuelle Hinweise auf neue Physik außerhalb dieses Modells zu erhalten, ist es daher eine der dringendsten Aufgaben der Teilchenphysik, die Quantenchromodynamik mit einer Genauigkeit jenseits der experimentellen Fehler zu lösen.

Im Gegensatz zur Coulombkraft der elektromagnetischen Wechselwirkung verschwindet die Kraft, mit der sich Quarks gegenseitig anziehen, nicht bei großen Abständen, sondern nimmt den

unvorstellbar großen Wert von 15.000 Newton an, was einem Gewicht von 15 Tonnen entspricht. Quarks treten daher nie als freie Teilchen in der Natur auf, sondern entweder als Paare von Quarks und Antiquarks, bekannt als Mesonen, oder als Triplets von Quarks, bekannt als Baryonen. Dieses Phänomen bezeichnet man als Quark Confinement. Obwohl das Quark Confinement mittlerweile zu den numerisch gesicherten Eigenschaften der Quantenchromodynamik zählt, ist sein dynamischer Ursprung nach wie vor ein großes Rätsel. Es ist zweifelsfrei eines der größten ungelösten Probleme der modernen Teilchenphysik. Antworten darauf, wie genau Quarks und Gluonen miteinander wechselwirken, wie sie sich in Gefangenschaft der Hadronen verhalten und wie sie mit wenigen Parametern den „Zoo“ von Hunderten von Teilchen und Kernen beschreiben können, lassen sich daher nur durch Untersuchungen des Spektrums und der Struktur der Hadronen gewinnen. Die Erforschung der inneren Freiheitsgrade der Hadronen und ihre Abbildung auf die fundamentalen Felder der Quantenchromodynamik ist eines der vorrangigen Ziele der weltweit führenden Forschungslabors Brookhaven National Lab, CERN, DESY, FZ Jülich, GSI, Jefferson Lab, J-PARC und LNF Frascati, um nur einige zu nennen, im Verbund mit theoretischen Untersuchungen.

Um die Quantenchromodynamik bei makroskopischen Abständen zu lösen, bedient man sich der Formulierung auf dem Gitter und numerischer Simulationen. Gegenwärtig ist die Gitter-





auf ≤ 3 GeV begrenzt sind.

Wünschenswert sind Gitter mit einer Ausdehnung von 7 Fermi und Frequenzen bis hinauf zu 10 GeV, um ebenfalls das bottom Quark zu beherbergen. Dafür sind nach heutigem Kenntnisstand Rechenressourcen im Bereich von > 1 Exaflop-Jahr erforderlich.

Die Besonderheiten des QCD-Vakuums

Der grundlegende Unterschied der Quantenchromodynamik zu den anderen Wechselwirkungen liegt in der Natur des Vakuums. Simulationen mit chiralen Fermionen haben gezeigt ([1] s. Literaturverzeichnis auf S. 65), dass das Vakuum eine laminare Struktur besitzt, bestehend aus kohärenten Schichten virtueller Quark-Antiquark-Paare mit entgegengesetzt gerichteten Impulsen und antiparallelen Spins, ähnlich den Cooper-Paaren im Supraleiter. Abbildung 1 zeigt einen 3-dimensionalen Querschnitt des 4-dimensionalen (Raum-Zeit-)Gitters. Die spezielle Struktur des Vakuums bewirkt, dass sich die Kraftlinien nicht ungehindert ausbreiten können wie im Falle der Coulombkraft, sondern zu engen Flussschläuchen gebündelt werden, wie in Abbildung 2 zu sehen ist [2]. Das Resultat ist ein linear mit dem Abstand anwachsendes Potential und eine konstante Kraft. Innerhalb dieser Schichten können sich die Pionen, die Träger der Kernkraft, nahezu frei bewegen, was die spontane Brechung der chiralen Symmetrie und der damit verbundenen kleinen Masse des Pions erklärt. Ob sich aus diesen Beobachtungen ein Modell zum Verständnis des Quark Confinements ableiten lässt, bedarf weiterer Untersuchungen.

QCD (LQCD) die einzige bekannte Methode, um verlässliche Aussagen der Quantenchromodynamik bei allen Skalen (von den höchsten Energien bis hinunter zu makroskopischen Abständen) zu gewinnen. Dabei kommen Monte-Carlo-Verfahren, wie sie aus der statistischen Mechanik bekannt sind, zum Einsatz. Die Genauigkeit der Rechnungen ist einzig durch die Rechenkapazität beschränkt. Gegenwärtig sind Simulationen auf Gittern der räumlichen Ausdehnung von wenigen Fermi (1 Fermi = 1.015 m) und nahezu physikalischen Quarkmassen möglich, wobei die Frequenzen der dynamischen Freiheitsgrade

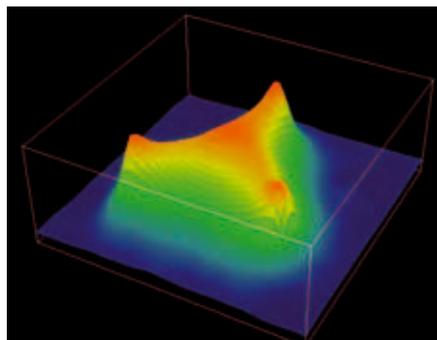


Abb. 2: Energieverteilung des Nukleons. Deutlich zu erkennen sind die Flussschläuche, die die Quarks zusammenhalten.

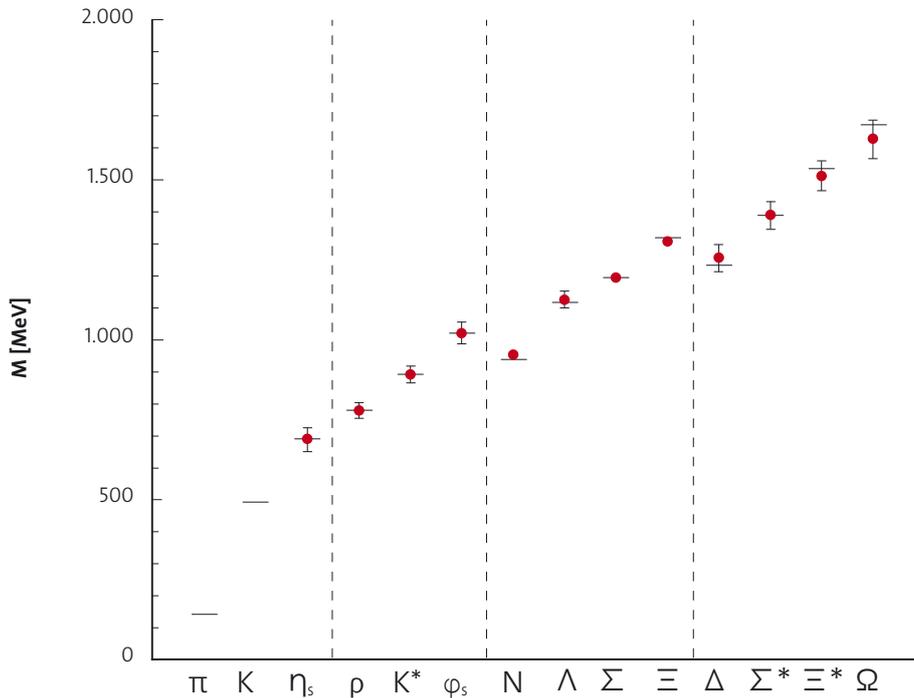
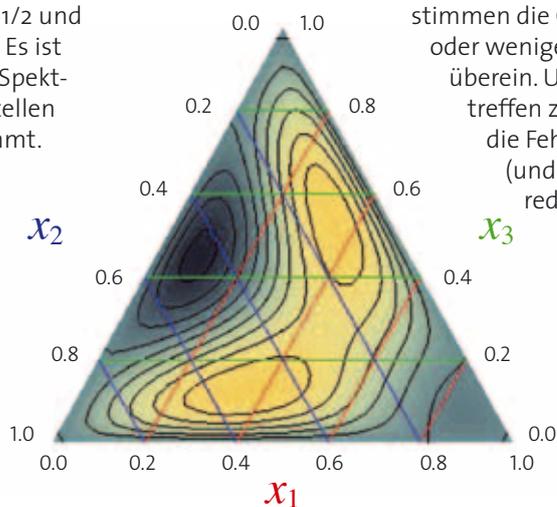


Abb. 3: Das Spektrum der Hadronen (horizontale Linien), verglichen mit dem Experiment (rote Kreise). Die Massen der π und K Mesonen dienen der Bestimmung der leichten up, down und strange Quarkmassen.

Das Spektrum der Hadronen

Die Berechnung der Massen der Hadronen verfolgt zwei Ziele: erstens den quantitativen Vergleich der Quantenchromodynamik mit der Natur und zweitens zu verstehen, wie die Massen zustandekommen. Die Masse des Nukleons, also aller Bausteine eines Atomkerns, ist z. B. etwa hundertmal schwerer als die Summe der darin enthaltenen Quarkmassen, und selbst für verschwindende Quarkmassen würde sich an der Masse des Nukleons nicht viel ändern. Abbildung 3 zeigt das Spektrum der pseudoskalaren und Vektormesonen sowie der isospin-1/2 und isospin-3/2 Baryonen [3]. Es ist erstaunlich, wie gut das Spektrum mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmt.

Abb. 4: Die Distributionsamplitude (Bethe-Salpeter Wellenfunktion) des Protons. Helle Flächen bedeuten große Dichte, dunkle Flächen kleine Dichte.



Die Massen der Hadronen haben ihren Ursprung zum allergrößten Teil in der kinetischen Energie E , mittels $m=E/c^2$, die in den Flussschläuchen gespeichert ist, die die Quarks zusammenhalten (Abb. 2). Die Masse der Nukleonen macht insgesamt ca. 95 % der beobachteten Masse des Universums aus.

Auf der Suche nach Erweiterungen des Standardmodells

Auskunft über die schwache Wechselwirkung erhält man vornehmlich aus den elektroschwachen Zerfällen der Hadronen. Zu den bestimmenden Faktoren zählen die Kopplung α_s der Quarks und Gluonen, die Massen der Quarks und die Elemente der Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM)-Matrix. Die CKM-Matrix verknüpft die QCD-Basiszustände mit den Basiszuständen der schwachen Wechselwirkung. Neben dem Quark

Confinement sind Ursprung und Massen der Quarks, die ihren Ursprung außerhalb der Quantenchromodynamik haben, eines der großen Rätsel der Teilchenphysik. Sie bilden eine starke Motivation, nach Erweiterungen des Standardmodells zu suchen, die eine einfache Erklärung bieten. Die Berechnungen von α_s und der Quarkmassen nähern sich der notwendigen Genauigkeit. Die CKM-Matrix ist unitär. Neue Physik außerhalb des Standardmodells könnte dieses Bild zerstören. Die Untersuchungen konzentrieren sich daher auf die Unitarität der CKM-Matrix. Innerhalb der heutigen Genauigkeit und systematischer Unwägbarkeiten stimmen die Gitterrechnungen mehr oder weniger mit dem Experiment überein. Um endgültige Aussagen treffen zu können, ist es nötig, die Fehler auf wenige Prozent (und möglichst darunter) zu reduzieren.

Die Struktur der Hadronen

Die Bedeutung von Gittersimulationen für das Verständnis der Struktur der Hadronen kann nicht überschätzt werden. Die LQCD ist unbestritten ein unersetzliches Werkzeug, um die neueren Experimente an den führenden Forschungslabors zu interpretieren und zukünftige Experimente vorzubereiten.

Von primärem Interesse sind die Partonverteilungen (Parton: generischer Begriff für Quark und Gluon) im Nukleon. Um z. B. die Produktionsrate des Higgs-Bosons am Teilchenbeschleuniger LHC zu bestimmen, wird die Impulsverteilung der Partonen (relativ zum Gesamtimpuls des Protons) $q(x)$ benötigt. Experimentell lässt sich $q(x)$ nur in einem engeren Bereich $x_{\min} < x < x_{\max}$ experimentell bestimmen, bedingt durch kinematische Grenzen. LQCD dagegen kann Momente $\langle x^n \rangle = \int_0^1 dx x^n q(x)$ berechnen. Beide Informationen sind komplementär.

Eine weitere fundamentale Größe ist die Distributionsamplitude $\Phi(x_1, x_2, x_3, \mu^2)$ des Nukleons, eine Art Bethe-Salpeter Wellenfunktion. Mit ihrer Hilfe lässt sich eine Fülle von exklusiven Prozessen beschreiben. Darüber hinaus gibt $\Phi(x_1, x_2, x_3, \mu^2)$ Auskunft über die Verteilung der Gesamtenergie (Masse) auf die drei Valenzquarks, woraus sich Rückschlüsse auf die Dynamik der Quarks ziehen lassen. Abbildung 4 zeigt die Distributionsamplitude des Protons bei einer Auflösung von $\mu=0.1$ Fermi als Funktion der relativen Energien der Quarks [4], worin x_1 die Energie des konstituierenden up Quarks bezeichnet und x_2, x_3 die Energien der up und down Zuschauer-Quarks ($x_1+x_2+x_3=1$). Es zeigt sich, dass praktisch die Hälfte der Energie auf das konstituierende up Quark entfällt ($x_1 \approx 0.5$), während die Zuschauer-Quarks stark gebunden sind und jeweils nur ein Viertel der Gesamtenergie ausmachen ($x_2 \approx x_3 \approx 0.25$).

Trotz einiger Teilerfolge ist die innere Struktur der Hadronen, insbesondere der Ursprung des Spins des Nukleons, weitgehend unerforscht. Neuere theoretische Konzepte ermöglichen es,

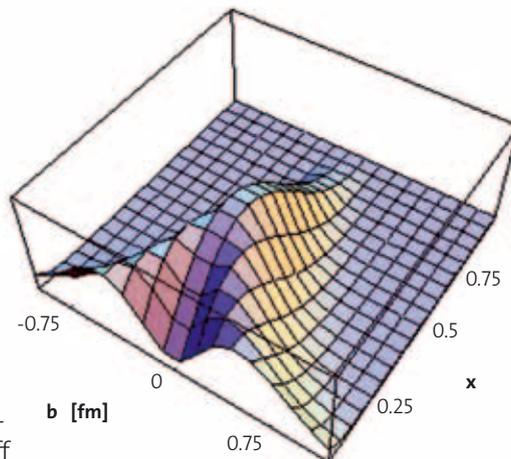


Abb. 5: Die Partonverteilung des up Quarks im Proton als Funktion der relativen Energie x und des Abstandes b vom Schwerpunkt des Protons (in Fermi).

die Verteilung von Ladung und Spin im Nukleon dreidimensional darzustellen [5], in Form von verallgemeinerten Partonverteilungen. Abbildung 5 zeigt die Wahrscheinlichkeit, ein up Quark mit Relativenergie x im Abstand b vom Zentrum des Protons zu finden bei einer Auflösung von 0.1 Fermi. Während die energieschwachen Quarks ($x \rightarrow 0$) breit über die gesamte Ausdehnung des Protons verteilt sind, halten sich die energiereichen Quarks ($x \rightarrow 1$) vornehmlich im Zentrum des Protons auf. Verallgemeinerte Partonverteilungen (wie in Abb. 5 gezeigt) sind nicht direkt experimentell zugänglich. Hier sind Gittersimulationen ein besonders gesuchtes Werkzeug, um zu verstehen, wie die Quantenchromodynamik letztendlich funktioniert.

Simulationen zur Erforschung der Struktur der Hadronen gehören zu den schwierigsten Aufgaben der LQCD. Als Gegenleistung erhält man jedoch Einsichten von unschätzbarem Wert in die Dynamik der Bausteine der Materie. Untersuchungen der Struktur der Hadronen werden uns noch über Jahre hinaus beschäftigen.

DER AUTOR

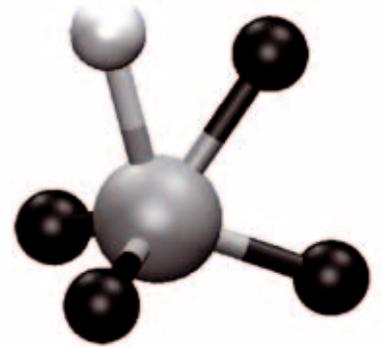
Der Teilchenphysiker Prof. Dr. Gerrit Schierholz forscht am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) der Helmholtz-Gemeinschaft. Die Ergebnisse seiner Arbeiten basieren u. a. auf Berechnungen am Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums.

Literatur

- [1] E.-M. Ilgenfritz et al., Physical Review D76 (2007), 034506; V. Weinberg, DESY-THESIS-2008-055
- [2] H. Ishie et al., Nuclear Physics A721 (2003), 899
- [3] W. Bietenholz et al., Physical Review D84 (2011), 054509
- [4] V. Braun et al., Physical Review D79 (2009), 034504; PoS LATTICE2011 (2011), 175
- [5] A. Sternbeck et al., PoS LATTICE2011 (2011), 177

Dem Geheimnis einer „Supersäure“ auf der Spur

Moleküle haben in der Regel eine definierte Struktur. Beim protonierten Methanmolekül CH_5^+ , einer so genannten Supersäure, war dies jahrzehntelang umstritten, es schien fast, dass dieses Molekül möglicherweise gar keine Struktur hat. Forscher der Ruhr-Universität Bochum fanden u. a. mit Hilfe von aufwändigen Simulationen auf dem Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums heraus, wie das Infrarotspektrum des Moleküls von ultraschnellen Prozessen im sub-Picosekundenbereich geprägt wird.



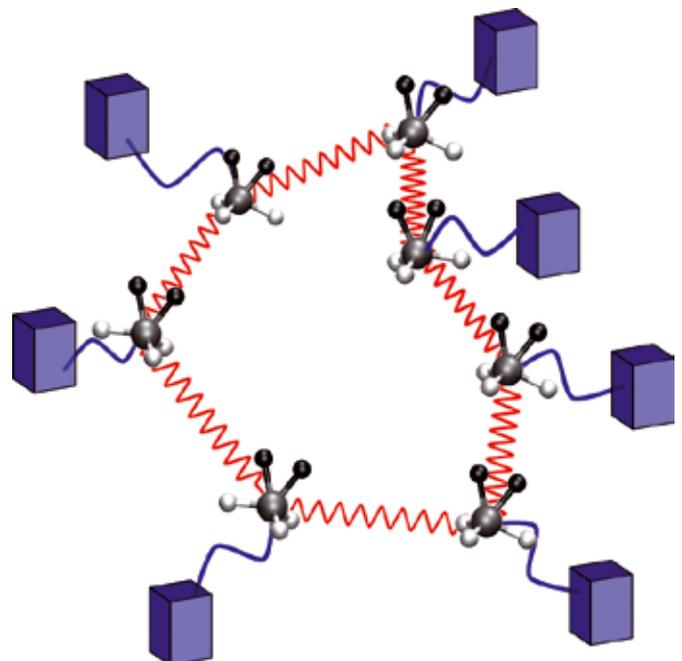
VON ALEXANDER WITT, SERGEI D. IVANOV UND DOMINIK MARX

Abb. 1: Das CH_5^+ -Molekül mit Hervorhebung der „ H_2 -Einheit“ in Schwarz.

Moleküle und ihre Struktur

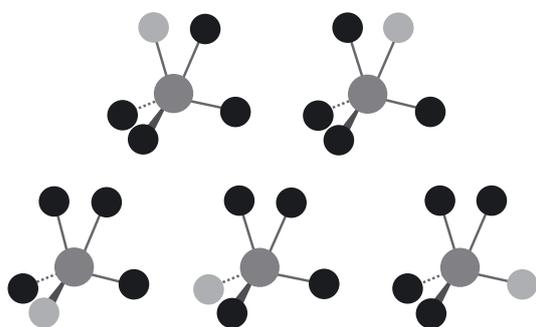
Die meisten Moleküle sind fast starr, und alle Atome, bzw. genauer ihre Atomkerne, „kennen“ ihre jeweilige Position im Molekül. Diese Positionen sowie die Verteilung von Elektronen auf chemische Bindungen können daher durch Anwendung elementarer Regeln (z. B. Lewis-Regeln, VSEPR-Modell) gut vorhergesagt werden. Basierend auf diesen Regeln lassen sich chemische Formeln, die sog. „Valenzstrukturen“, zeichnen, die im Wesentlichen die Gleichgewichtsstruktur der Moleküle widerspiegeln. Dies sei anhand von Methan (CH_4) kurz anschaulich verdeutlicht: Der Kohlenstoff ist in der Mitte eines Tetraeders zentriert, an dessen Ecken jeweils eines der vier Wasserstoffatome gefunden werden kann. Jedes Wasserstoffatom ist mit einem Valenzstrich, der für zwei gepaarte Elektronen steht, mit dem Kohlenstoffatom verbunden. Moleküle sind natürlich nicht völlig starr, sondern führen kleine Schwingungen um die Gleichgewichtsstruktur aus. Bei CH_4 sind die Auslenkungen weg von der Gleichgewichtsstruktur sehr gering. Damit ist diese rein statische Strukturbeschreibung eine extrem gute Näherung für die Molekülstruktur von CH_4 , und die Verwendung der einfachen „Valenzstrichstruktur“ ist ein hervorragendes Abbild der wahren Verhältnisse.

Abb. 2: Schematische Darstellung der Quantisierung von CH_5^+ im *ab initio* Pfadintegralformalismus. Jede Kopie des Systems (symbolisiert durch eine Strukturformel) kann jeweils auf einem Computerknoten (blaue Kästen) simuliert werden. Aufgrund der Art der Kopplung der Kopien (rote Zickzacklinien) parallelisiert dieser Algorithmus sehr effizient.



Dynamik der Atomkerne und damit der Molekülstruktur haben.

Was passiert nun, wenn man einen fünften H-Atomkern, also ein Proton H^+ , an den Kohlenstoff bindet und somit CH_5^+ (Abb. 1) bildet? Denkbar wäre, dass diese „Protonierung“, wie bei anderen Molekülen, nur einen geringen Einfluss hat. Bei CH_5^+ allerdings zeigt sie dramatische Effekte: Das Verhalten von CH_5^+ ist *völlig anders* als das von CH_4 ! Dies zu verstehen war die Motivation der im Folgenden dargestellten fundamentalen Untersuchungen.



Warum gerade CH_5^+ ?

CH_5^+ ist eine „Supersäure“ und wurde bereits in Regionen im Weltall nachgewiesen, in denen sich neue Sterne bilden. Obwohl bereits in den 1950er Jahren entdeckt, hat es bis zum heutigen Tage gedauert, bis man diesen kleinsten Vertreter der sog. Karbokationen oder nicht-klassischen Carbonium-Ionen im Wesentlichen verstanden hat. Der Grund dafür ist, dass eine Protonierung des Methans zu einem Molekül führt, das eine extrem flache Potentialfläche hat, auf der sich die Atomkerne bewegen. Daher sind große Abweichungen von der Gleichgewichtsstruktur leicht möglich – selbst bei sehr tiefen Temperaturen. Auf der Grundlage wohletablierter quantenchemischer Rechnungen spekulierten führende Wissenschaftler zu Beginn der 1990er Jahre sogar, dass CH_5^+ daher keine eigentliche Struktur haben sollte. Zudem war zu diesem Zeitpunkt das Infrarotspektrum, das heute wichtige Strukturinformationen liefern kann, noch unbekannt.

Klar ist, dass die herkömmlichen quantenchemischen Methoden bei der Strukturbeschreibung von CH_5^+ versagen und quantenmechanische Effekte auf die Kerndynamik explizit berücksich-

tigt werden müssen. Die in Abbildung 1 gezeigte Gleichgewichtsstruktur von CH_5^+ kann man sich aus zwei strukturellen Untereinheiten bestehend denken: aus einem CH_3 -Dreibein, das über drei übliche (zwei-Zentren zwei-Elektronen) Bindungen gebildet wird, und aus einer H_2 -Einheit, die an den Kohlenstoff mittels einer Elektronenmangelbindung (drei-Zentren zwei-Elektronen) gebunden ist (schwarze H-Atome in Abb. 1). Damit ist das C-Atom hier fünffach koordiniert (aber nicht fünfbindig!). Im CH_5^+ können nun aber alle Protonen aufgrund der flachen Potentialfläche leicht miteinander vertauscht werden. Dieser Effekt wird „Scrambling“ genannt, was die gleiche Bedeutung wie in „scrambled eggs“ (Rührei) hat, in denen alle Komponenten, hier also die fünf Protonen um das C-Atom, kräftig durchgemixt werden. Aus diesem Grund wird CH_5^+ auch als ein fluktuierendes oder fluxionales Molekül bezeichnet ([1–3] s. Literaturverzeichnis auf S. 69). Dieses Bild erhielt man Mitte der 1990er Jahre mit den ersten voll quantenmechanischen Simulationen dieses Systems, wobei auch gezeigt wurde, dass die fluktuierende Struktur selbst bei sehr tiefen Temperaturen erhalten bleibt [1, 2].

Deutlich komplizierter wird es, wenn man die Strukturfrage klären möchte für den Fall, dass ein oder mehrere H-Atome durch das schwere Isotop Deuterium (D) ersetzt werden. Die Infrarotspektren dieser sog. H/D-Isotopologe konnten erstmals mit einem komplexen Experiment am freien Elektronenlaser für Infrarotspektroskopie FELIX durch die Gruppe um Stephan Schlemmer gemessen werden [4]. Im Allgemeinen ist in der Theoretischen Chemie eine quantenmechanische Beschreibung der Elektronenstruktur Standard (z. B. im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie), jedoch nicht der Atomkerne.

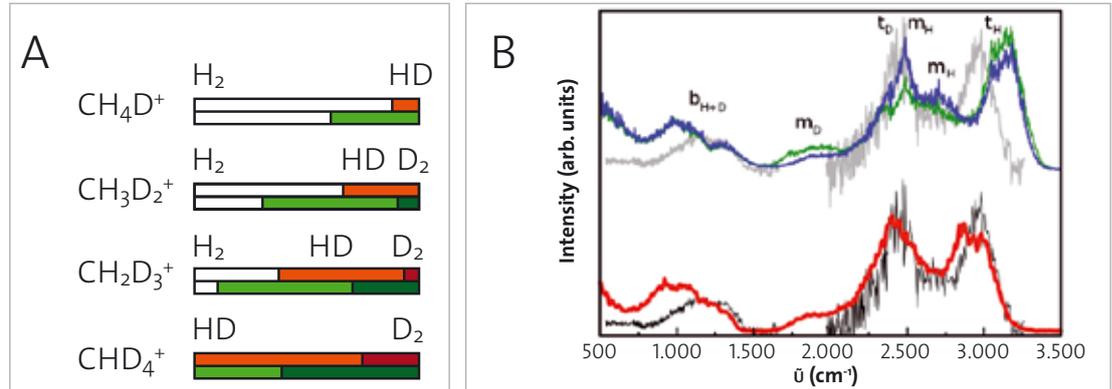
Die Lösung: so genannte ab initio Pfadintegrale

Wie ist es also möglich, sowohl die Quantennatur der Kerne als auch die Elektronenstruktur des Moleküls bei endlichen Temperaturen unter einen Hut zu bringen? Die Antwort darauf liefert die sog. ab initio Pfadintegralmethode [5]. Die Schrödingergleichung zur Beschreibung der Kerne direkt zu lösen (wie es üblicherweise für die Elektronen näherungsweise gemacht wird), ist zu aufwändig und schon für Systeme dieser Größe fast unmöglich. Der Pfadintegralformalismus basiert hingegen auf der Darstellung der quantenmechanischen Zustandssumme als („Wick-rotiertem“) Feynmansches Pfadintegral und liefert eine sehr elegante und effiziente Möglichkeit, Kernfreiheitsgrade quantenmechanisch zu beschreiben. Der Haken an dieser Methode ist jedoch, dass es der Formalismus

Abb. 3: Schema aller fünf Isotopomere des Isotopologs CHD_4^+ . Wasserstoff ist hellgrau dargestellt, Kohlenstoff dunkelgrau und Deuterium schwarz.

Abb. 4a: Wahrscheinlichkeit der Verteilung von Wasserstoff und Deuterium in der H₂-Einheit.

Abb. 4b: Infrarotspektren von CH₃D₂⁺. Schwarz/grau: Experiment, grün: klassische Kernbewegung, blau: klassische Kernbewegung mit quantenmechanischer Umgewichtung, rot: approximative Quantendynamik der Kerne.



nicht einfach ermöglicht, zeitabhängige Phänomene, wie man sie zur Berechnung von Infrarotspektren braucht, zu simulieren. Trotzdem sind statische Eigenschaften wie z. B. Bindungslängen und damit Strukturen im Sinne von statistischen Mittelwerten zugänglich.

Vereinfachend gesprochen wird in diesem Formalismus das quantenmechanische System durch ein höherdimensionales, aber klassisches System exakt (!) beschrieben. Dieses besteht aus leicht unterschiedlichen Kopien des Moleküls (auch „beads“, „replica“ oder „Trotter slices“ genannt), die untereinander mit einem Potential wechselwirken, dessen Stärke durch Temperatur, Masse der Atome und Anzahl der Kopien bestimmt wird. Dies ist rein schematisch in Abbildung 2 für CH₅⁺ dargestellt.

Ab initio Pfadintegralsimulationen eignen sich hervorragend für Supercomputer wie den HLRB II oder den SuperMUC des Leibniz-Rechenzentrums, da jede Kopie des Systems zunächst unabhängig von allen anderen berechnet werden kann. Da die Kommunikation gering ist, führt dies zu einer linearen Parallelisierung. Es kann aber nicht nur ein Knoten an einer Kopie arbeiten, sondern auch viele Knoten. Dies führt zu einer hocheffizienten hierarchischen Parallelisierungsstrategie, wie sie in dem von uns mitentwickelten Programmpaket CPMD (www.cpmc.org) realisiert ist. Somit führt dieser Algorithmus zu den effizientesten Methoden in der Theoretischen Chemie bezüglich seiner Recheneffizienz auf massiv parallelen Architekturen.

Deuterium macht den Unterschied!

Nach diesem nötigen Ausflug in die Methodik nun zurück zum Problem: Im CH₅⁺ können aufgrund des Scramblings alle Protonen alle möglichen Positionen im Molekül besetzen. Werden jetzt aber einige Wasserstoffe durch das schwe-

tere Isotop Deuterium ausgetauscht, erhält man die sog. H/D-Isotopologe von CH₅⁺, nämlich CH₄D⁺, CH₃D₂⁺, CH₂D₃⁺, CHD₄⁺, und schließlich CD₅⁺. Bei den gemischten Isotopologen können nun die Deuteronen verschiedene Plätze besetzen, was zu *unterscheidbaren Strukturmustern* führt. Dies wurde in Experimenten von der Gruppe um Stephan Schlemmer untersucht, die zur Charakterisierung die Infrarotspektren aller Isotopologe gemessen hat. In enger Zusammenarbeit wurden diese Spektren im Rahmen der Doktorarbeit von Alexander Witt, für die er den Ruth-Massenberg-Preis 2012 erhielt, mit der ab initio Pfadintegraltechnik simuliert und theoretisch untersucht [2]. Man kann nun in der Simulation verfolgen, welche Plätze die beiden Isotope in dem Molekül bevorzugt einnehmen (s. Abb. 3). Gemäß der klassischen statistischen Mechanik würde man erwarten, dass sich die beiden Isotope H und D rein kombinatorisch auf die fünf Plätze im CH₃-Dreieck und in der H₂-Einheit verteilen, da sich ja lediglich ihre Masse unterscheidet. Beispielsweise beträgt bei CHD₄⁺ (s. Abb. 3 und 4a) die klassische Wahrscheinlichkeit, das Proton in der H₂-Einheit zu finden, exakt 40 %, was durch ab initio Simulationen mit klassischer Kerndynamik auch genau so gefunden wird (40,2 %). Bei voll quantenmechanischen ab initio Pfadintegralsimulationen stellt sich jedoch heraus, dass Wasserstoff im Allgemeinen *bevorzugt* Positionen in der H₂-Einheit einnimmt, wohingegen Deuterium Positionen im Dreieck favorisiert. Für CHD₄⁺ finden wir also das Proton zu mehr als 70 % in der H₂-Einheit. Dieser Effekt, der wie hier die klassischen Trends sogar völlig umkehren kann, tritt bei allen Isotopologen auf und wird von uns als „quanteninduzierte Symmetriebrechung“ (QISB) bezeichnet. Die QISB hat auch Einfluss auf die Infrarotspektren. So unter-

scheiden sich die Spektren von CH_5^+ und CD_5^+ nur moderat (aufgrund der Massenänderung werden die Schwingungsmoden grob mit $1/\sqrt{2}$ skaliert) und können mit klassischer Kerndynamik korrekt simuliert werden.

Dieser Ansatz versagt jedoch für alle anderen Isotopologe aufgrund der „falschen“ zu Grunde liegenden Statistik (s. das grüne Spektrum in Abb. 4b). Diese Erkenntnis macht es nun notwendig, explizit die quantenmechanische Natur der Kerne in die Berechnung der Spektren einzubeziehen. In einem ersten Schritt werden die Spektren der Isotopomere mit klassischer Kerndynamik berechnet und sodann mit den korrekten quantenmechanischen (statt den klassischen kombinatorischen) Gewichten versehen, um so das Gesamtspektrum des Isotopologs quasi zu synthetisieren. So können alle gemessenen Spektren mit sehr guter Übereinstimmung reproduziert werden (s. blaue Kurve in Abb. 4b).

Trotz dieser ermutigenden Ergebnisse ist es aber wünschenswert, Spektren von gleicher Qualität direkt zu simulieren. Dazu haben wir zunächst die sog. centroid molecular dynamics (CMD)-Methode auf ihre Eignung zur Berechnung von Infrarotspektren eingehend untersucht [6, 7]. Diese Methode generiert näherungsweise eine Echtzeitquantendynamik von Vielteilchensystemen und beruht ebenfalls auf der Pfadintegraldarstellung der Quantenmechanik. Mit ab initio CMD ist es möglich, die Infrarotspektren auch der gemischten Isotopologe direkt zu simulieren [8]. Die erhaltenen Ergebnisse in Abbildung 4b (s. rote Kurve) sind sehr ermutigend und machen den Umgewichtungsprozess obsolet. Damit haben wir eine allgemeine Quantensimulationsmethode in der Hand, um Infrarotspektren, insbesondere auch von stark fluktuierenden Molekülen, zu berechnen.

Die Infrarotspektren verstehen

Der letzte Schritt besteht darin, die Infrarotspektren im Detail im Sinne von intramolekularen Schwingungsmoden (Zuweisung oder „assignment“ genannt) und damit die zu Grunde liegende Dynamik genau zu verstehen. Aufgrund der Fluxionalität von CH_5^+ und seinen Isotopologen kann man die üblichen Standardmethoden, die auf einer harmonischen Entwicklung der Auslenkungen um die Gleichgewichtsstruktur beruhen, hier nicht sinnvoll einsetzen. Deshalb haben wir eine Methode entwickelt [9], in der diese Annahmen nicht gemacht werden, so dass man auch die Spektren fluktuierender Moleküle

zuweisen kann. Diese Technik verwendeten wir, um die einzelnen Molekülschwingungen aus der Dynamik heraus zu projizieren, was eine zuverlässige Zuweisung von Absorptionsbanden im Infrarotspektrum im Sinne von „Moden“ (s. Symbole in Abb. 4b) ermöglicht [4, 9]. Nach Durchführung der Zuweisung erkennt man klar, dass man die Spektren von CH_5^+ und all seiner Isotopologe näherungsweise im Sinne von Strukturen wie in Abbildung 1 beschreiben kann, also bestehend aus einer H_2 -Einheit und einem CH_3 -Dreibein, welche aber aufgrund der ausgeprägten Fluxionalität nur im Sinne gemittelter Strukturvorstellungen betrachtet werden dürfen. Damit ist das „ CH_5^+ -Rätsel“ gelöst.

Ist dies das Ende der Geschichte?

Für CH_5^+ und seine Isotopologe schon, aber man kann nun die interessante Frage stellen, was passiert, wenn man z. B. sukzessive H_2 -Moleküle an das CH_5^+ bindet. Wird dadurch das Scrambling vollständig oder teilweise eingefroren? Auch hierzu gibt es Experimente, deren Interpretation wiederum kontrovers ist. Dies untersuchen wir zurzeit, basierend auf viel versprechenden Vorarbeiten [10], mit Aussicht auf neue Überraschungen. ■

DIE AUTOREN

Dr. Alexander Witt ist nach seiner Promotion am Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum derzeit am PULSE Institute and Department of Chemistry der Stanford University beschäftigt. **Dr. Sergei D. Ivanov** war bis 2011 am Bochumer Lehrstuhl tätig und forscht nun als Senior Researcher am Institut für Physik der Universität Rostock. **Prof. Dr. Dominik Marx** ist Inhaber des Lehrstuhls für Theoretische Chemie an der Ruhr-Universität Bochum.

Literatur

- [1] D. Marx und M. Parrinello, *Nature* 375 (1995), 216
- [2] O. Asvany, P. Kumar, B. Redlich et al., *Science* 309 (2005), 1219
- [3] P. Kumar und D. Marx, *Physical Chemistry Chemical Physics* 8 (2006), 573
- [4] *S. D. Ivanov, O. Asvany, A. Witt et al., *Nature Chemistry* 2 (2010), 298
- [5] D. Marx, *Lecture Notes in Physics* 704 (2006), 507
- [6] *A. Witt, S. D. Ivanov, M. Shiga et al., *Journal of Chemical Physics* 130 (2009), 194510
- [7] *S. D. Ivanov, A. Witt, M. Shiga et al., *Journal of Chemical Physics* 132 (2010), 031101
- [8] *A. Witt, S. D. Ivanov, G. Mathias et al., *Journal of Physical Chemistry Letters* 2 (2011), 1377
- [9] *G. Mathias, S. D. Ivanov, A. Witt et al., *Journal of Chemical Theory and Computation* 8 (2012), 224
- [10] *A. Witt, S. D. Ivanov, H. Forbert und D. Marx, *Journal of Physical Chemistry A* 112 (2008), 12510

Die mit * gekennzeichneten Arbeiten entstanden unter Verwendung der am HLRB II des Leibniz-Rechenzentrums durchgeführten Simulationen.



Abb. 1: Darstellung des dreidimensionalen Wellenfeldes (grün und magenta) in einem unserer geodynamischen Modelle zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Für diese Simulation eines Erdbebens in der Region der Fidschi-Inseln wurde das sog. Spektrale Elemente-Verfahren verwendet und die Wellenausbreitung auf 486 Prozessoren des Höchstleistungsrechners HLRB II am Leibniz-Rechenzentrum berechnet. Blaue und braunrote Regionen zeigen die schnellen bzw. langsamen Bereiche der aus dem geodynamischen Modell vorhergesagten Scherwellengeschwindigkeiten. Die Topographie ist zur geografischen Orientierung ebenfalls farblich gekennzeichnet.

Geophysik

Erdbeben, die Dynamik des Erdinneren und Supercomputer

Fortschritte im Verständnis der internen Dynamik unseres Planeten und der Physik von Erdbeben sind heute vor allem durch aufwändige Rechnungen möglich, die auf parallelen Supercomputern, etwa am Leibniz-Rechenzentrum, durchgeführt werden.

VON BERNHARD SCHUBERTH, STEFAN WENK, HEINER ISEL
UND HANS-PETER BUNGE

Die Dynamik des Erdinneren

Geowissenschaftler rätseln bis heute, wie sich das tiefe Erdinnere bewegt und was die so genannten seismischen Heterogenitäten (Änderungen der Geschwindigkeiten seismischer Wellen im Erdinneren) verursacht. Eine genaue Kenntnis des dynamischen Verhaltens des Mantels ist wichtig, da die Strömungen in der Tiefe die Plattentektonik antreiben und steuern, auf welche Art und Weise die Erde abkühlt. Dies sind entscheidende Faktoren bei Modellierungen tektonischer Prozesse oder in Simulationen des Geodynamos und des damit verbundenen Erdmagnetfelds sowie für die thermische Entwicklung der Erde. Ein besseres Verständnis dieser Aspekte ist von großer gesellschaftlicher Bedeutung. So führt z. B. die kontinuierliche Drift der tektonischen Platten relativ zueinander zu einem Aufbau von Spannungen an den Plattengrenzen, die regelmäßig durch Bruch des Krustengesteins abgebaut wird: Es kommt zu – oft katastrophalen – Erdbeben.

Der Großteil unserer Kenntnisse über die Struktur und das dynamische Verhalten des tiefen Erdinneren stammt aus der Analyse der Aufzeichnungen von seismischen Wellen, die bei mittelstarken und starken Beben durch den gesamten Erdkörper laufen. Ähnlich wie bei der medizinischen Tomographie erlaubt uns die seismische Tomographie, ein dreidimensionales Bild des jetzigen Zustands (geologisch gesehen) der elastischen Struktur des Erdmantels zu „sehen“. In den letzten zwei Jahrzehnten wurde eine Vielzahl solcher 3-D-Modelle erzeugt. Allerdings liefert die seismische Tomographie nur eine begrenzte Auflösung, das heißt, man erhält nur ein unscharfes und verzerrtes Bild der Erdstruktur. Dies ist unter anderem eine Folge der von der Natur vorgegebenen ungleichmäßigen Verteilung von Erdbeben sowie seismischen Empfängern, die überwiegend auf Kontinentregionen beschränkt sind.

Trotz erheblicher Verbesserungen in den seismologischen Methoden und eines dramatischen Anstiegs in der Menge und Qualität der verfügbaren Daten werden Interpretationen von tomographischen Bildern dadurch erschwert, dass die sichtbaren Strukturen sowohl durch thermische wie auch durch chemische Effekte verursacht werden können. Dies erklärt, warum die Verteilung chemischer Heterogenitäten und deren Rolle für die Dynamik des Mantels bisher kaum verstanden sind (Abb. 1).

Eine synthetische Erde

Moderne Methoden für die Berechnung seismischer Wellenausbreitung erlauben es uns heutzutage, eine Vielzahl von physikalischen

Phänomenen zu simulieren und synthetische Datensätze mit einer Komplexität zu produzieren, die der realer Beobachtungen vergleichbar ist. Die routinemäßige Berechnung synthetischer Seismogramme mit realistischem Frequenzgehalt ist in den letzten Jahren dank der rasant wachsenden Rechenleistung möglich geworden. Bisher war aber unklar, wie geodynamische Überlegungen in seismologischen Simulationen in effizienter und konsistenter Art und Weise eingebaut werden können und wie man von den rechenstechnisch höchst anspruchsvollen Simulationen bestmöglich für unser Verständnis der Struktur und Dynamik der tiefen Erde profitiert. Dies war die Motivation, ein neues Verfahren zu entwickeln, um synthetische dreidimensionale seismische Strukturen zu generieren, also basierend auf theoretischen Überlegungen der Strömungsmechanik des Mantels, die in Simulationen der globalen Wellenausbreitung verwendet werden können.

Hier präsentieren wir die Ergebnisse unseres neuen multidisziplinären Ansatzes, der Simulationen aus den Bereichen Geodynamik, Mineralphysik und Seismologie kombiniert. Die Temperaturverteilung im Erdmantel wird durch hochauflösende dreidimensionale Mantelzirkulationsmodelle mit einer Finite-Elemente-Methode vorhergesagt (s. z. B. Bunge 2002 im Literaturverzeichnis auf S. 73). Anschließend werden den Temperaturen entsprechende seismische Geschwindigkeiten zugeordnet. Dies wird durch die jüngsten Fortschritte in der Mineralphysik und Petrologie ermöglicht, wo man nun in der Lage ist, thermodynamisch selbst-konsistente Modelle der Mantelmineralogie für die Umrechnung des dynamisch-thermischen Zustandes der Erde in elastische Parameter zur Verfügung zu stellen. Die so vorhergesagten Modelle seismischer Heterogenitäten würden dann in einen Spektralelemente-Algorithmus für die Simulation der 3-D-globalen Wellenausbreitung eingebaut (Abb. 1).

Beide Simulationstypen, die geodynamische wie auch die seismische, benötigen sehr große Rechenressourcen und parallele Computerarchitekturen. Die Bereitstellung der Supercomputing-Plattform HLRB II am Leibniz-Rechenzentrum war ein entscheidender Faktor für unsere Forschung, und wir können nun zum weltweit ersten Mal Ergebnisse der Simulation 3-D-seismischer Wellenausbreitung durch synthetische geodynamische Erdmodelle präsentieren. Das heißt, wir sind jetzt in der Lage, synthetische Seismogramme völlig unabhängig von seismischen Beobachtungen vorherzusagen. Dies ist der Schlüssel, um geodynamische Hypothesen direkt gegen seismische

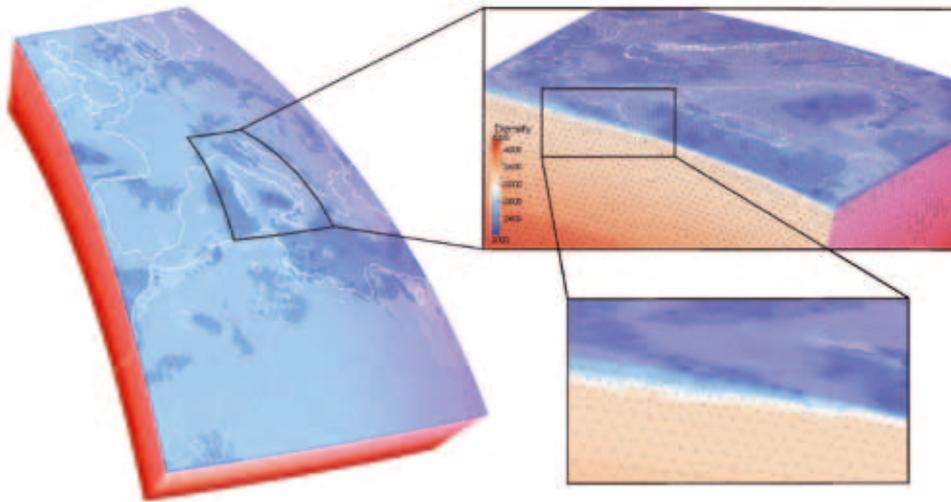


Abb. 2: Tetraedergitter für ein europäisches Erdmodell, mit dem das L'Aquila-Erdbeben von 2009 simuliert wurde. Das dreidimensionale Modell folgt mit dem Gitter der komplizierten Geometrie des Übergangs zwischen Erdkruste und Erdmantel in ca. 30 bis 50 km Tiefe (s. Detailausschnitt rechts unten).

Beobachtungen zu testen, was in Zukunft als ergänzendes Analyseinstrument zu tomographischen Inversionen benutzt werden kann.

Wellenausbreitung in komplexen Erdmodellen

Für die Simulationen durch die oben beschriebenen geodynamischen Modelle wurde das so genannte Spektrale Elemente (SE)-Verfahren verwendet. Am Lehrstuhl für Geophysik der LMU München wurde in den letzten Jahren ein alternatives Verfahren zur Wellen- und Bruchsimulation entwickelt, welches für bestimmte Modellklassen Vorteile hat (z. B. Modelle mit stark variierenden seismischen Geschwindigkeiten oder starker Topographie, wie etwa bei Vulkanen). Während SE die Wellengleichungen auf deformierten Hexaedergittern berechnet, wird bei dem Diskontinuierlichen Galerkin (DG)-Verfahren das Erdmodell mittels Tetraeder diskretisiert (Abb. 2). Dies ist bei der Gittererstellung vorteilhaft, wenn das Gitter zum Beispiel komplizierten Flächen folgen muss.

Abb. 3: Vergleich beobachteter Bodenbewegungen (schwarze Seismogramme) nach dem Erdbeben von L'Aquila in Italien (Epizentrum mit gelbem Stern markiert) mit synthetischen Seismogrammen (rote Seismogramme), die auf dem Supercomputer des LRZ berechnet wurden. Die Übereinstimmung (und Differenzen) sind ein Maß dafür, wie gut die Struktur unter dem europäischen Kontinent bekannt ist. Ziel ist es, die Diskrepanz zu minimieren, indem man das Erdmodell verbessert.

Die Wahl des numerischen Verfahrens zur Lösung der physikalischen Gleichungen spielt für die Implementierung auf parallelen Supercomputern – wie SuperMUC – eine große Rolle. Die Vorteile des DG-Verfahrens bei der Gittererzeugung werden relativiert durch die erhöhte Komplexität des Algorithmus und die größere Schwierigkeit, eine entsprechende Lastbalancierung für eine große Zahl von Prozessoren zu erreichen. Dies ist vor allem im Zeitalter der Multicore-Architekturen eine große Herausforderung.

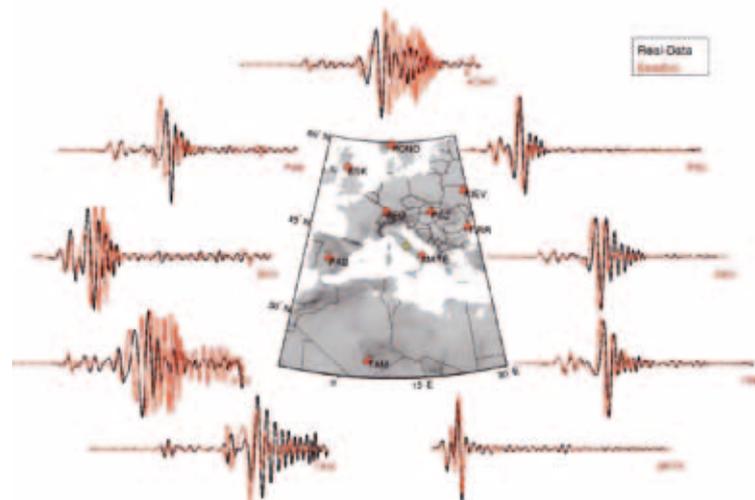
Vergleich mit Beobachtungen

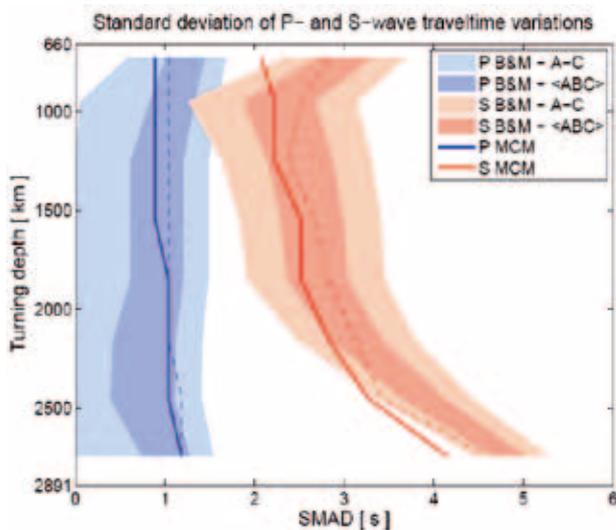
Das DG-Verfahren wurde im Rahmen eines KONWIHR-Projekts auf regionale Erdmodelle erweitert und getestet. Dies schließt den Vergleich mit bekannten Rechenverfahren (z. B. SE) und den Vergleich mit Beobachtungen ein. Abbildung 3 zeigt die Ergebnisse einer Simulation, die für das verheerende L'Aquila-Erdbeben im April 2009 in Italien berechnet wurden. Die auf dem Supercomputer des LRZ berechneten Ergebnisse werden direkt mit den Beobachtungen verglichen. Man erkennt, dass zumindest die Wellenformen am Anfang der seismischen Spuren sehr gut übereinstimmen. Dies ist ein

Maß für die derzeitige Genauigkeit des tomographischen Erdmodells unter Europa. Die Diskrepanz der Seismogramme ist allerdings auch ein Indiz dafür, dass das Erdmodell noch recht weit von einem Modell entfernt ist, welches die Daten perfekt erklärt. Nur die kontinuierliche Verbesserung der Erdmodelle mittels Inversion der gesamten Wellenfelder wird in den nächsten Jahren zu wesentlich besseren Ergebnissen führen. Dazu sind enorm große Rechenkapazitäten erforderlich.

Hat der untere Erdmantel eine einheitliche chemische Zusammensetzung?

Eine spezifische Frage, die wir mit unserem zu Beginn erwähnten Joint-Forward-Modeling-Ansatz beantworten wollten, ist der Ursprung zweier großer Regionen stark reduzierter seismischer Geschwindigkeiten im untersten Erdmantel (die sog. „superplumes“ genannt). Einige seismologische Beobachtungen werden als Indiz dafür gewertet,





dass die superplumes durch unterschiedliche chemische Zusammensetzung hervorgerufen werden, und dass sie Ansammlungen von Material mit gegenüber normalem Mantelgestein erhöhter Dichte darstellen. Neuere geodynamische, mineralogische und auch seismologische Studien verweisen aber auf einen starken thermischen Gradienten zwischen dem Erdkern und dem Mantel, der eine alternative Erklärung durch die daraus resultierenden großen lateralen Temperaturschwankungen liefern könnte. In der vorliegende Studie testeten wir die Hypothese, ob die Existenz eines solchen starken thermischen Gradienten über die Kern-Mantel-Grenze hinweg in iso-chemischen Mantelzirkulationsmodellen (also ohne chemische Variationen) mit geophysikalischen Beobachtungen in Einklang gebracht werden kann.

Die Laufzeiten der beobachteten seismischen Wellen, mit denen wir unseren synthetischen Datensatz verglichen haben, zeigen ein eigenartiges Verhalten in ihren Statistiken in Abhängigkeit von der Eintauchtiefe der Wellen im unteren Erdmantel [Bolton & Masters 2001]: Die Standardabweichung der Laufzeitvariationen der P-Wellen bleibt nahezu konstant mit der Tiefe, während die der S-Wellenlaufzeiten stark in Richtung der Kern-Mantel-Grenze zunimmt. Dieser Anstieg im Falle von S-Wellen ist besonders unterhalb einer Tiefe von rund 2.000 km ausgeprägt (Abb. 4). Ein solcher Unterschied in der Statistik zwischen P- und S-Wellen ist in einem iso-chemischen Mantel im Rahmen der Strahlentheorie, die das Rückgrat der Seismologie bildet, nicht zu erklären.

Berücksichtigt man aber, wie in unserem Fall, das volle Wellenfeld, so findet man, dass die Standardabweichungen der Laufzeitvariationen von P- und S-Wellen in unserem geodynamischen Modell das gleiche unterschiedliche Verhalten wie die Beobachtungen zeigen. Dies ist ein bemerkenswertes Ergebnis angesichts der iso-chemischen Natur unseres Mantelzirkulationsmodells und unterstreicht die Wichtigkeit, die korrekte Physik der Wellenausbreitung bei der Interpretation langperiodischer seismischer Daten zu berücksichtigen. Besonders hervorzuheben ist auch, dass unser Vergleich synthetischer Daten mit Beobachtungen zeigt, dass ein einfaches iso-chemisches Modell der Mantelströmung, mit der Annahme eines hohen Wärmeflusses aus dem Kern, die Statistik der seismischen Beobachtungen nicht nur qualitativ, sondern auch quantitativ erklären kann. Während dieser Befund nicht zwangsläufig bedeutet, dass es keine chemischen Heterogenitäten im unteren Mantel gibt, so zeigt unsere Studie doch, dass komplexe großräumige Variationen in der chemischen Zusammensetzung nicht erforderlich sind, um den hier untersuchten beobachteten seismischen Datensatz zu erklären.

Geowissenschaften und Supercomputing

Geophysikalische Datenmengen wachsen rasant. In der vorgestellten Studie haben wir uns auf ein einziges Frequenzband konzentriert. In Zukunft wird es aber wichtig werden, die neuen Multi-Frequenz-Datensätze aus der Perspektive der Vorwärtssimulationen ergänzend zu tomographischen Studien zu verstehen. Eine technische Hürde ist hierbei, dass der Speicherbedarf sehr groß ist, um die seismische Wellenausbreitung bis zu den höchsten, tele-seismisch beobachteten Frequenzen zu simulieren (ca. 1 Hz). SuperMUC, der Nachfolger des HLRB II, wird sicher dazu beitragen, uns dem Ziel näher zu bringen, das gesamte, für Studien über die tiefe Erde relevante Frequenzspektrum abzudecken.

Abb. 4: Vergleich der Standardabweichung (SMAD = skalierte mittlere durchschnittliche Abweichung) von Laufzeit-Variationen in unserem geodynamischen Modell mit Beobachtungen. Unterlegte Flächen zeigen den Bereich der aus Beobachtungen abgeleiteten Werte. Blaue Linien stehen für die Laufzeit-Variationen simulierter P-Wellen, rote Linien für die Laufzeit-Variationen von S-Wellen. Durchgezogene und gestrichelte Linien zeigen SMAD-Kurven für zwei verschiedene Messtechniken.

DIE AUTOREN

Dr. Bernhard Schuberth ist als Geophysiker im Bereich Geodynamik der LMU München tätig, Stefan Wenk ist Doktorand im Bereich Seismologie der LMU München, den Prof. Dr. Heiner Igel leitet. Prof. Dr. Hans-Peter Bunge hat den Lehrstuhl für Geophysik, Schwerpunkt Geodynamik, an der LMU inne.

Literatur

- H. Bolton, G. Masters, *Journal of Geophysical Research* 106 (B7) (2001), 13,527–13,540
- H.-P. Bunge, M. Richards und J. Baumgardner, *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 360 (2002), 2545–2567
- M. Käser, C. Pelties, E. C. Castro, H. Djikpesse und M. Prange, *The Leading Edge* 29 (2010), 76–85
- B. S. A. Schuberth, C. Zanolli und G. Nolet, *Geophysical Journal International* 188 (3) (2012), 1393–1412

Das LRZ in Kürze

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften auf dem Forschungscampus in Garching, gegründet 1962, hat sich in 50 Jahren zu einem der größten wissenschaftlichen Rechenzentren in Europa entwickelt. Es ist bedeutender IT-Dienstleister, betreibt u. a. das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) und umfangreiche Datensicherungssysteme und ist eines von drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren.

- Internet-Dienste wie E-Mail, Web-Dienste, Nameserver
 - Datensicherung durch Archivierung und Backup, Langzeitarchivierung
 - Softwarebeschaffung
 - Hosting, Housing, Remote Management
 - Grid Computing
 - Cloud Services
 - Visualisierung
- Die IT-Service Management Zertifizierung nach ISO 20000 ist geplant.

DER AUTOR

Dr. Ludger Palm ist für die Presse- und Öffentlichkeitsarbeit des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften zuständig.



Systeme

- Arbeitsplatzrechner für Studenten
- Videoschnitt, Großplotter
- Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C)
- Rechensysteme vom PC bis zum Höchstleistungsrechner

Schulung und Beratung

- Servicedesk
- Schriftenverkauf
- Kurse zur PC-Nutzung
- Linux-Schulungen
- System- und Netz-Sicherheit
- Workshops
- Höchstleistungsrechnen

Forschung

- IT-Management
- Pilotierung innovativer IT-Lösungen
- Energieeffizienz im Hochleistungsrechnen
- Architekturen für das Exascale Computing
- Computational Science

Menschen

- Über 180 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter am Leibniz-Rechenzentrum versorgen
- 90.000 Studierende und
- 25.000 Beschäftigte der Münchner Hochschulen mit IT-Dienstleistungen

Dienste

- Rechenkapazität in allen Größenordnungen
- Betrieb des Münchner Wissenschaftsnetzes und Übergang ins Internet

Sie interessieren sich für die Zeitschrift „Akademie Aktuell“? Gerne nehmen wir Sie in den Verteiler auf.

KONTAKT

Dr. Ellen Latzin
Tel. 089-23031-1141
presse@badw.de

Impressum

HERAUSGEBER

Prof. Dr. rer. nat. Karl-Heinz Hoffmann
Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAW)

KONZEPT UND CHEFREDAKTION

Dr. Ellen Latzin
Presse- und Öffentlichkeitsarbeit der BAW

ART DIRECTION

Tausendblauwerk, Michael Berwanger
info@tausendblauwerk.de
www.tausendblauwerk.de

VERLAG UND ANSCHRIFT

Bayerische Akademie der Wissenschaften
Alfons-Goppel-Straße 11, 80539 München
Tel. 089-23031-0
info@badw.de

ISSN 1436-753X

ANZEIGEN

Presse- und Öffentlichkeitsarbeit der BAW

HERSTELLUNG

Landesamt für Vermessung und Geoinformation
Alexandrastraße 4, 80538 München

REDAKTIONSSCHLUSS DIESER AUSGABE

18. Juni 2012

Erscheinungsweise: 4 Hefte pro Jahr. Der Bezugspreis ist im Mitgliedsbeitrag der Freunde der BAW enthalten. Die Texte dürfen nur mit Genehmigung der BAW reproduziert werden, um ein Belegexemplar wird gebeten. Die Wiedergabe der Abbildungen ist mit den Inhabern der Bildrechte abzuklären. Namentlich gekennzeichnete Beiträge geben die Meinung der Autoren wieder. Sie finden das Magazin auch unter www.badw.de.



microstaxx

Beratung, Konzeption, Realisation

microstaxx® – Ihr IT-Systemhaus

microstaxx ist seit 1990 eines der führenden Systemhäuser für individuelle IT-Lösungen mit deutschlandweiter Ausrichtung. **microstaxx** betreut öffentliche Auftraggeber, vorwiegend aus den Bereichen Bildung, Wissenschaft, Forschung und Lehre.

Über 20 Jahre ist **microstaxx** zuverlässiger Partner des LRZ, der bayerischen Universitäten und Hochschulen sowie vieler weiterer wissenschaftlicher Institutionen und Forschungseinrichtungen deutschlandweit.

2012 
Advanced Networking



Specialist

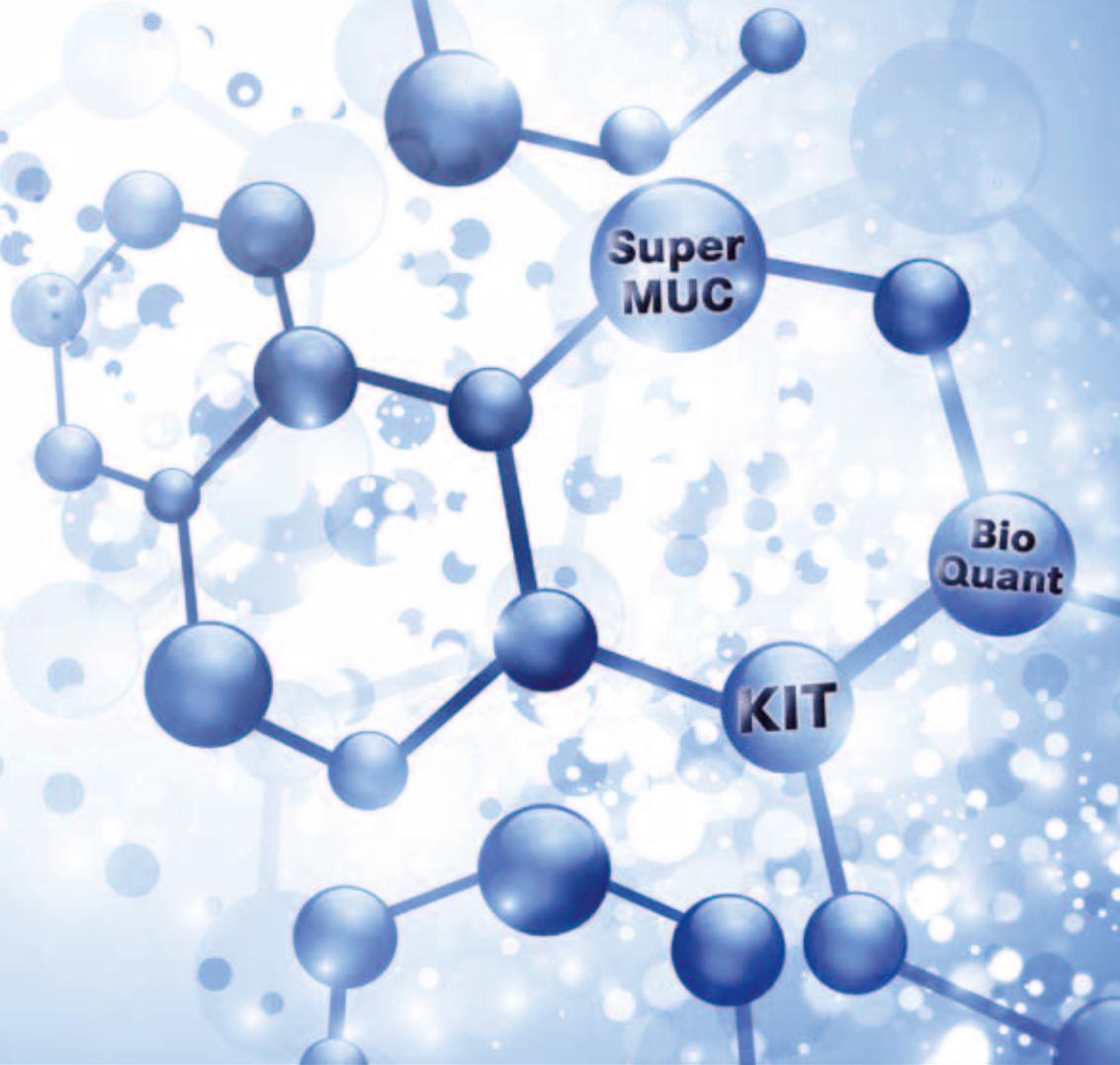
microstaxx® GmbH

Wilhelm-Kuhnert-Str. 26 · 81543 München
info@microstaxx.de · Fon +49-89-489075-0

www.microstaxx.de



TEIL DES GANZEN.



SVA IT-EXPERTISE FÜR WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG:

- > Führendes IT-Systemhaus in Deutschland
- > High Performance Computing
- > Bestes Mainframe Know-how
- > Hochverfügbare Server- und Storage-Lösungen
- > Langzeitarchivierungs- und Backup-Lösungen auf Basis Tivoli
- > IT-Asset-Management und IT-Security-Lösungen

KONTAKTIEREN SIE UNS – IN MÜNCHEN ODER DEUTSCHLANDWEIT IN 12 LOKATIONEN!