

Auszug  
aus dem

**Research Report**  
**High-Performance Computing in Hessen**  
**2007/2008**

12. Januar 2009



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Vorwort</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Einleitung</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Technik und Organisation</b>	<b>10</b>
3.1	Der HHLR am Forschungszentrum Computational Engineering (CE) in Darmstadt . . . . .	10
3.1.1	Systemaufbau . . . . .	10
3.1.2	Systemerneuerung im Herbst 2008 . . . . .	10
3.1.3	Auslastung des HHLR . . . . .	11
3.1.4	HPC-Ausbildung an der TU Darmstadt . . . . .	12
3.2	Linux Cluster am Center for Scientific Computing (CSC) der Uni Frankfurt	13
<b>4</b>	<b>Projektberichte</b>	<b>16</b>
4.1	Chemie . . . . .	16
4.1.1	Control of the Transmembrane Potential in K <sup>+</sup> Channel Simulations	16
4.1.2	Molecular Dynamics Simulation of the Kcv Potassium Channel . . .	18
4.1.3	Quantum Chemistry in Solution by Combining 3D Integral Equation Theory with a Cluster Embedding Approach . . . . .	20
4.1.4	Fast dynamics in coarse-grained polymer models:The effect of the hydrogen bonds . . . . .	22
4.1.5	Shear Viscosity of the Ionic Liquid 1-n-Butyl 3-Methylimidazolium Hexafluorophosphate [bmim][PF <sub>6</sub> ] Computed by Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics . . . . .	24
4.1.6	Thermal Conductivity and Thermal Rectification of Carbon Nanotubes by Reverse Non-equilibrium Molecular Dynamics Simulations	26
4.1.7	Quantum chemical studies on bioinorganic models for dinuclear copper proteins . . . . .	28
4.1.8	Investigation of molecular structure and dynamics in the gas-phase by ultrafast coherent spectroscopy . . . . .	30
4.1.9	Hydroxy Carbenes: Tunneling Marvels . . . . .	32
4.2	Physik . . . . .	35
4.2.1	Gittersimulationen von effektiven Modellen für SU(N) Eichtheorien bei hohen Temperaturen . . . . .	35
4.2.2	Parton dynamics and hadronization from the strongly-coupled QGP	36
4.2.3	Exotische hadronische Materie und Atomkerne . . . . .	38
4.2.4	Open and hidden charm in proton-nucleus and heavy-ion collisions. .	40
4.2.5	Self-consistent calculations of nuclear matter properties at nonzero temperature and density . . . . .	42
4.2.6	Fluctuations in A+A collisions within the HSD transport approach .	44

4.2.7	Electrohydrodynamic effects in polyelectrolyte solutions . . . . .	45
4.2.8	Simulations of magnetic fluids . . . . .	47
4.2.9	Thermodynamics of Polymer-Chain Stretching Ensembles . . . . .	49
4.2.10	Ultrakalte Atome in optischen Gittern & elektronische Nanostrukturen	51
4.2.11	Parton Cascade simulating ultrarelativistic heavy ion collisions . . .	54
4.2.12	Ab-initio relativistic density functional calculations for spectral line shifts of Alkali atoms in liquid helium . . . . .	58
4.2.13	Boltzmann/Hydrodynamik-Hybridmodell für Schwerionenkollisionen	60
4.2.14	The many-particle scattering system He++ on He: A complete unified description . . . . .	61
4.2.15	Solving the 3d Schrödinger Equation for Bound States in an Aniso- tropic Quark-Gluon Plasma . . . . .	63
4.2.16	Orbital-dependent exchange-correlation energy functionals . . . . .	65
4.2.17	Liquid surface model for carbon nanotube energetic . . . . .	68
4.2.18	Towards understanding of C60-based nanowire growth with anoma- lous anisotropy . . . . .	70
4.2.19	Phase transitions in fullerenes . . . . .	72
4.2.20	Phase transitions in polypeptide chains . . . . .	74
4.2.21	The dynamics of antigen-antibody binding . . . . .	77
4.2.22	Impurity effect on the melting of nickel clusters as seen via molecular dynamics simulations . . . . .	78
4.2.23	Probing the late stage of heavy ion reactions using resonances . . . .	80
4.3	Ingenieurwissenschaften . . . . .	81
4.3.1	Modelling and Development of new Methods for Large Eddy Simula- tion in order to Perform Analysis and Optimization of Reacting and Non-reacting Systems . . . . .	81
4.3.2	Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion using Steady Fla- melet and Progress Variable Methods . . . . .	83
4.3.3	Hybrid LES/TPDF Methods in Combustion . . . . .	85
4.3.4	Large-Eddy-Simulation of Multiphase Flows . . . . .	88
4.3.5	Hybrid LES/CAA Simulation of a Turbulent Nonpremixed Jet Flame	90
4.3.6	Geometrische Struktur kleinskaliger Turbulenz . . . . .	93
4.3.7	Wall Normal Rotating Channel Flow: Direct Numerical Simulation, Modeling and Lie Group Analysis . . . . .	95
4.3.8	Strömungsoptimierung durch parallelisierte Sensitivitätenberechnung	97
4.3.9	Numerische Strömungskontrolle und -optimierung . . . . .	99
4.3.10	A Local Adaptive Grid Refinement Strategy for Flow Computations	101
4.3.11	Numerical conditioning of non-linear phenomena during phase change processes in foundry engineering . . . . .	103
4.3.12	Parallel Computation of Fluid Structure Interaction in Labyrinth Seals	104
4.3.13	Fluid-Structure Interaction in Turbulent Flows . . . . .	106
4.3.14	Evolutionary Algorithms for Flow Shape Optimization . . . . .	107
4.3.15	Parallel Non-Linear Finite Elements for Micropolar Continua . . . .	109
4.3.16	Time dependent shape optimization with higher-order surfaces in consideration of FSI . . . . .	111
4.3.17	Algebraische Mehrgitterlöser zur Berechnung turbulenter Strömungen in komplexen Geometrien . . . . .	113

4.3.18	Strömungs-Akustik-Kopplung auf Basis der Grobstruktursimulation	115
4.3.19	Automated Aerodynamic Optimisation of a Transonic Compressor Stage by Application of non-axisymmetric Endwalls . . . . .	117
4.3.20	Drop impact onto a liquid layer: cavity shape and propagation of a solitary wave . . . . .	120
4.3.21	Experimental and computational investigations of flow and mixing in a single annular combustor configuration . . . . .	122
4.3.22	Swirl intensity influence on interaction between non-swirling and swirling co-axial jets in a combustor configuration: LES and modelling study . . . . .	124
4.3.23	Computational study of the separated flow in a 3D-diffuser . . . . .	126
4.3.24	Computational analysis of locally forced flow over a wall-mounted hump at high-Re number . . . . .	128
4.3.25	Solid nitrogen under pressure . . . . .	130
4.3.26	Defect chemistry of transparent conducting oxides: Oxygen interstitial defects in zinc oxide . . . . .	133
4.3.27	Structural stability of multiply twinned FePt nanoparticles . . . . .	136
4.3.28	Phase diagram of the Pt-Rh alloy studied with a refined BOS mixing model . . . . .	139
4.3.29	Molecular dynamics simulation of deformation mechanisms in nanocrystalline fcc metals . . . . .	142
4.4	Mathematik & Informatik . . . . .	145
4.4.1	Hierarchische Steuerung und gemischt-ganzzahlige Optimierung hybrider, diskret-kontinuierlicher nichtlinearer dynamischer Systeme .	145
4.4.2	Computer Vision with Probabilistic Methods . . . . .	146
4.5	Sonstige . . . . .	149
4.5.1	Epileptogenesis due to glia-mediated synaptic scaling . . . . .	149
4.5.2	Global water resources in a changing world . . . . .	150
4.5.3	Regional climate projections in different regions of the world . . . . .	153
4.5.4	Learning Efficient Representations in Low-Level Vision . . . . .	155
4.5.5	Weiterentwicklung und Implementation von Methoden der Kopplungsanalyse für die genetische Kartierung komplexer Krankheiten .	158
<b>5</b>	<b>Veröffentlichungen</b>	<b>161</b>



# 1 Vorwort

Der für das Jahr 2008 aktualisierte Forschungsbericht dokumentiert in beeindruckender Art und Weise, in welchem Ausmaß sich die hessischen Hochleistungsrechner zu einem unverzichtbaren Forschungswerkzeug in allen Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften an den hessischen Forschungsstandorten entwickelt haben. Neben der enormen Leistungssteigerung der verfügbaren Hardware haben auch die Anstrengungen im Bereich Softwareentwicklung dazu geführt, dass computergestützte Simulationen zur Lösung von chemischen, physikalischen oder technischen Fragestellungen einen exzellenten wissenschaftlichen Reifegrad erreicht haben, so dass die theoretischen Vorhersagen mittlerweile gleichberechtigt neben den Ergebnissen experimenteller Arbeit im Laboratorium oder Technikum stehen. In anderen Fällen liefern Simulationen detaillierte Einblicke in experimentell prinzipiell unzugängliche Zusammenhänge. Entsprechend erweist sich derzeit weltweit die enge Zusammenarbeit von Simulation und Experiment als außergewöhnlich erfolgreich und effizient in der Entwicklung der wichtigsten Forschungsthemen unserer Zeit. Der vorliegende Forschungsbericht liefert eine umfangreiche Darstellung der aktuell an den hessischen Hochleistungsrechnern bearbeiteten Fragestellungen, von denen viele zentrale Bausteine für prestigeträchtige, profilbildende Verbundprojekte mit internationaler Sichtbarkeit darstellen. Wie schon im vergangenen Jahr legen wir diesen Bericht als Beleg für die ausgezeichnete Qualität der computergestützten Forschung an den hessischen Forschungsstandorten vor. Und nicht ohne Stolz präsentieren wir mit der Liste der aus diesen Projekten entstandenen Publikationen das hervorragende Niveau der Forschungsleistungen der beteiligten hessischen Arbeitsgruppen.



Prof. Dr. Max Holthausen  
Vorsitzender des Hessischen Beirats für Hochleistungsrechnen  
Frankfurt am Main, den 10. Dezember 2008

## 2 Einleitung

Die Bedeutung des Wissenschaftlichen Rechnens als eine Schlüsseltechnologie für nahezu alle Bereiche von Wissenschaft und Technik ist heutzutage unumstritten. Trotz der enormen Fortschritte im Bereich der Rechnertechnologie ist hierbei in vielen Anwendungsfällen der Einsatz von Hochleistungsrechnern unerlässlich, nicht zuletzt auch aufgrund der stetig wachsenden Komplexität der Problemstellungen. Das Hochleistungsrechnen trägt entscheidend zur Reduktion von Entwicklungszeiten neuer Methoden und Technologien bei. So können Probleme angegangen werden, die aufgrund der hohen Anforderungen an die Rechenleistung anderweitig einer numerischen Simulation nicht zugänglich sind.

Der Verfügbarkeit einer adäquaten Hochleistungsrechnerkapazität kommt damit für den Wissenschaftsstandort Hessen eine große Bedeutung zu, da diese die Grundlage für eine national und international konkurrenzfähige Forschung im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens darstellt. Der Erfolg von Sonderforschungsbereichen, Forschergruppen, Graduiertenkollegs und einer Vielzahl unterschiedlicher Einzelprojekte hängt entscheidend davon ab.

Der Hochleistungsrechenbedarf in Hessen wird durch zentrale Rechenkapazitäten auf Landesebene gedeckt. Aufgrund unterschiedlicher Anforderungen der Nutzer werden zwei größere Systeme mit unterschiedlichen Architekturen betrieben:

- Ein SMP-Cluster an der TU Darmstadt für Anwendungen mit feingranularer Parallelität mit vergleichsweise hohen Anforderungen an die Kommunikationsleistung, wie z.B. Strömungssimulationen oder Strukturrechnungen komplexer Quantensysteme.
- Ein MPP-Cluster an der Universität Frankfurt für Anwendungen mit grobgranularer Parallelität mit vergleichsweise geringen Anforderungen an die Kommunikationsleistung, wie z.B. Vielteilchendynamik in Stoßprozessen.

Dem Darmstädter Forschungszentrum CE und dem Frankfurter CSC kommt die Funktion von Kompetenzzentren im Bereich des Hochleistungsrechnens zu. Die notwendige fachübergreifende Kompetenz ist durch die interdisziplinäre Zusammensetzung der beiden Zentren, sowie durch entsprechende Aktivitäten der Mitglieder in Forschung und Lehre gewährleistet. Damit leisten beide Zentren einen Beitrag zu den folgenden Aufgaben:

- Entwicklung bzw. Weiterentwicklung von Anwendungssoftware für den Hochleistungsrechner in den verschiedenen Anwendungsbereichen
- Unterstützung von Nutzern bei der Portierung von Anwendungssoftware
- Ausbildung von wissenschaftlichem Nachwuchs im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens
- Technologietransfer in die Industrie im Rahmen von Kooperationsprojekten
- Organisation von regelmäßigen Benutzer-Kolloquien, die den Erfahrungsaustausch zwischen allen Nutzern des Rechners ermöglichen

- Kontaktpflege und Zusammenarbeit mit anderen im Bereich des Hochleistungsrechnens tätigen Arbeitsgruppen im In- und Ausland (z.B. Workshops, Forschungsprojekte)

Die Rechenzentren der hessischen Universitäten betreiben den Rechner gemeinsam unter Federführung der Rechenzentren der TU Darmstadt und der Universität Frankfurt, an denen die Rechner installiert sind. Zu den Aufgaben der Rechenzentren an den beiden Standorten gehören:

- Bereitstellung von Räumlichkeiten und der zugehörigen Infrastruktur
- Administration und Operating (24-Stunden-Betrieb)
- Betriebssteuerung und Überwachung der Betriebsvorgaben
- Fehlerverfolgung und -behebung
- Benutzerverwaltung
- Datensicherung

Die Rechner sind für Nutzer aller hessischen Universitäten zugänglich. Die einzelnen Rechenzeitkontingente richten sich nach den finanziellen Beteiligungen der Hochschulen, Fachbereiche bzw. Fachgebiete.

## 3 Technik und Organisation

### 3.1 Der HHLR am Forschungszentrum Computational Engineering (CE) in Darmstadt

#### 3.1.1 Systemaufbau

Im Jahren 2007/2008 (bis November 2008) bestand der Hessische Hochleistungsrechner in Darmstadt aus 65 Shared Memory Rechnern (SMP) unterschiedlicher Leistungsfähigkeit mit insgesamt 560 Power5-Prozessoren. Der Zugang erfolgt über einen speziellen Loginknoten. Auf diesem kann der Nutzer seine Programme vorbereiten, sowie Daten analysieren und abholen. Rechenknoten im Backend sind für den Nutzer nicht direkt zugänglich, sondern werden über ein Queuing-System angesprochen. 60 dieser Rechenknoten sind mit jeweils acht Power5 CPUs ausgestattet fünf weitere verfügen über je 16 Power5+ Prozessoren. Die Power5-Prozessoren sind in der Lage, vier Floatingpoint-Operationen pro Takt auszuführen und haben einen internen Cache von 36MB. Ausserdem verfügen diese für Computingaufgaben optimierten Maschinen über eine deutlich höhere Speicherbandbreite als Commodity-Hardware. Damit eignen sie sich besonders gut für HPC-Anwendungen.



Als SMP-Rechner sind die Maschinen prädestiniert für parallele Probleme mit hohem Kommunikationsbedarf. Innerhalb eines Knotens werden Kommunikationsleistungen erreicht, die mit denen der Bundeshöchstleistungsrechner vergleichbar sind. Um auch Programme, die mehr als einen SMP-Knoten benötigen, effektiv ausführen zu können, sind die Rechner untereinander mit einem schnellen, latenzarmen, internen Netzwerk verbunden (IBM High Performance Switch (HPS))

Das Hochschulrechenzentrum (HRZ) der TU Darmstadt betreibt das Rechnersystem im Auftrag des HHLR-Beirats sowie der Kompetenzgruppe wissenschaftliches Hochleistungsrechnen im Forschungszentrum Computational Engineering (CE).

#### 3.1.2 Systemerneuerung im Herbst 2008

Um mit den mit dem technischen Fortschritt wachsenden Anforderungen gerecht zu werden, wurde der Rechner im Oktober/November 2008 durch die TU Darmstadt modernisiert. Das neue System ist identisch mit dem Entwicklungscluster (JUMP) des Bundeshöchstleistungsrechners in Jülich. Auch am Höchstleistungsrechner in Garching (RZG

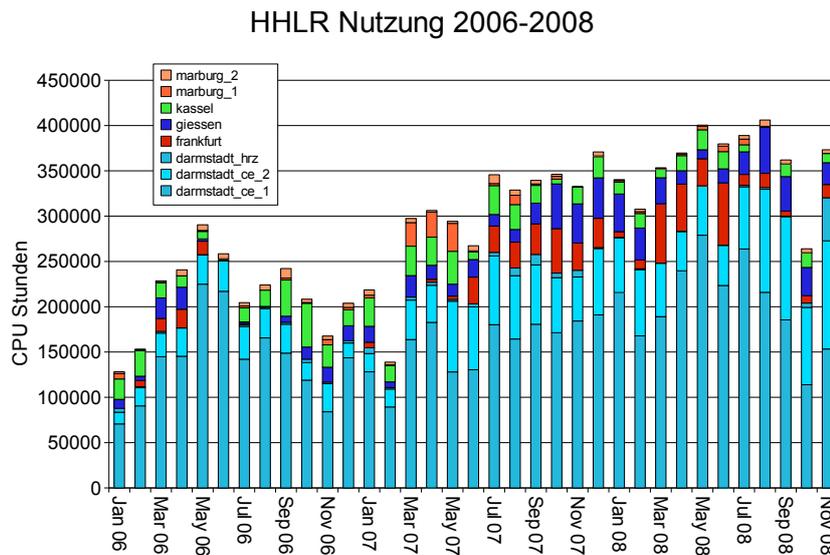
MPI/IPP) und am Deutsches Klimarechenzentrum (DKRZ) kommt die gleiche Technik zum Einsatz. Das System ist damit bestens geeignet, als Brücke zwischen den PC-Clustern eines Instituts und den deutschen Höchstleistungsrechnern zu fungieren.

Das neue System besteht aus einem Cluster von 14 Rechnerknoten mit jeweils 32 Power6-Prozessoren. Bei einer Taktfrequenz 4,7 GHz kommt das Cluster somit auf eine Peakperformance von 8,5 TFlop/s. Die Rechnerknoten sind mit einem Arbeitsspeicher von 128 GB (einer sogar mit 256 GB) ausgestattet. Auch wenn bei Weitem nicht alle Problemstellungen soviel Speicherplatz benötigen, ist es wichtig, dass gerade die zentralen Rechencluster diese Ressourcen vorhalten, da Problemstellungen, die diese Anforderungen haben, auf konventioneller Hardware nicht lauffähig sind.

Durch die 32 in einem System integrierten Prozessoren können auch sehr kommunikationslastige Programme bis zu 32 CPUs (bisher max. 16 CPUs) nutzen. Ausserdem sind jetzt alle Rechnerknoten latenzarm über Infiniband vernetzt. Aufgabenstellungen mit moderateren Anforderungen an die Kommunikationsleistung können also auch auf mehrere Knoten verteilt werden.

### 3.1.3 Auslastung des HHLR

Der Rechner wurde im November 2005 ausgebaut. Bereits im Januar 2006 wurde von den Nutzern mehr Rechenzeit abgerufen, als vor dem Ausbau verfügbar war. Seit März 2007 arbeitet das System mit einer Auslastung von über 80%. Auf vergleichbaren Systemen wird das üblicherweise als defakto vollständig ausgelastet bezeichnet.



**Abbildung 3.1:** Verteilung der Rechenzeit auf die einzelnen Universitäten

Daher sind wir durchaus stolz darauf, dass es uns im Jahr 2008 gelungen ist, das Scheduling und – in enger Zusammenarbeit mit den Nutzern – auch die Jobstruktur so zu

optimieren, dass seit April eine Auslastung von mehr als 90% erreicht wurde. In den Sommermonaten stieg die Auslastung auf anähernd 95%. Der Abfall im Herbst ist auf die beginnenden Umbauarbeiten zurückzuführen.

Die Zuweisung der Rechenzeit an die Wissenschaftler der einzelnen Standorte richtet sich nach der Beteiligung der jeweiligen Hochschule an den Investitionskosten. Die TU Darmstadt hat ein Kontingent von 67,5%, der Uni Giessen und Marburg stehen 11,3% bzw. 10,8% zu und die Univesitäten in Frankfurt und Kassel haben einen Anspruch auf 5,2% der Rechenzeit. Wenn ein Standort sein Kontingent nicht ausschöpft, so wird die Rechenzeit auf die anderen Standorte verteilt.

2008 wurde der Rechner durch die Uni Marburg kaum noch genutzt. Im Jahresdurchschnitt haben Marburger Wissenschaftler nur 1,4% der insgesamt verfügbaren Rechenzeit abgerufen. Von dieser Zurückhaltung profitiert haben die TU Darmstadt (70%) und die Uni Frankfurt (7,3%), die in 2008 deutlich mehr Rechenzeit in Anspruch nehmen konnten als das Kontingent vorsieht. Die Nutzung durch Wissenschaftler aus Giessen und Kassel liegt mit 8% bzw. 3,7% im Rahmen der Planungen.

### **3.1.4 HPC-Ausbildung an der TU Darmstadt**

Mit dem Bachelor- und Master-Studiengang Computational Engineering sowie der Graduiertenschule Computational Engineering wurde an der TU Darmstadt ein durchgängiges konsekutives Konzept zur interdisziplinären Ausbildung im Bereich des HPC etabliert. Der Bachelor-/Master-Studiengang wird vom fachbereichsübergreifenden Studienbereich Computational Engineering organisiert und betreut, der von den Fach- und Studienbereichen Mathematik, Mechanik, Bauingenieurwesen und Geodäsie, Maschinenbau, Elektrotechnik und Informationstechnik, Informatik und dem Forschungszentrum Computational Engineering getragen wird. Den Studierenden werden mathematische, informationswissenschaftliche und ingenieurwissenschaftliche Kenntnisse, mit denen sie physikalische und technische Systeme modellieren und simulieren können, vermittelt. Methoden des HPC sind hierbei ein wesentlicher Bestandteil. Das Ausbildungskonzept wird durch die Graduiertenschule Computational Engineering komplettiert, in welche die Studierenden bereits nach dem ersten Masterjahr eintreten können, und nach weiteren vier Jahren mit einer Promotion abschließen können. HPC ist ein zentrales Querschnittsthema der Forschungsarbeiten an der Graduiertenschule.

## 3.2 Linux Cluster am Center for Scientific Computing (CSC) der Uni Frankfurt

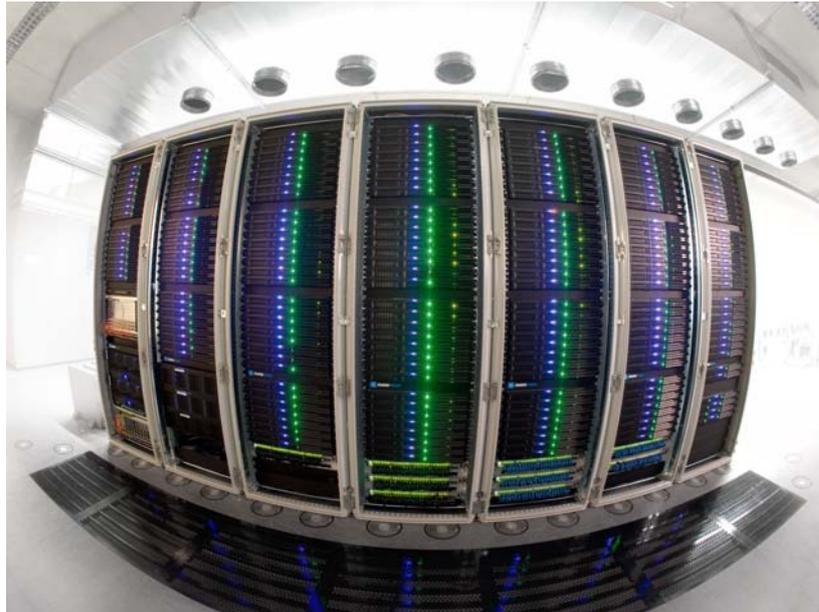
Das Center for Scientific Computing (CSC) der Goethe-Universität betreibt einen der beiden hessischen Hochleistungsrechner. Das CSC wurde im Jahr 2002 als gemeinsame Initiative von 15 Forschungsgruppen der naturwissenschaftlichen Fachbereiche der Universität Frankfurt ins Leben gerufen. Ausgangspunkt für seine Gründung war die Erkenntnis, dass in den modernen Naturwissenschaften die Bewältigung komplexer numerischer Aufgaben eine zentrale Rolle einnimmt.

Das CSC bietet daher neben der Bereitstellung einer umfangreichen Rechenkapazität für die Projekte der beteiligten Forschergruppen ein fachübergreifendes Forum auf dem Gebiet Computational Science in Form von interdisziplinären Vorträgen. Darüber hinaus bietet das CSC einen zweijährigen englischsprachigen Masterstudiengang in Computational Science an. Der Studiengang ist in modularer Form konzipiert, so dass alle Studienleistungen in Form von international anerkannten Credit Points gemäß dem European Credit Transfer System bewertet werden. Die durchweg in englischer Sprache gehaltenen Kurse eröffnen auch ausländischen Studierenden eine interdisziplinäre Ausbildung in allen Bereichen der Computer Simulation.

Die Forschungsaktivitäten der am CSC arbeitenden Wissenschaftlern umfassen eine große Zahl von Projekten mit hohem numerischen Aufwand. Die Projekte, die auf dem CSC-Cluster bearbeitet werden, umfassen eine weite Spanne aktueller Themenbereiche. Sie erstrecken sich über so unterschiedliche Gebiete wie die Untersuchung der Strukturen von Proteinen in der Biochemie und die Eigenschaften von Kristallen unter höchstem Druck in der Geophysik. Die Dynamik der Grundbausteine der Materie, der Quarks, und Gluonen, im Urknall und bei Hochenergieexperimenten werden in der theoretischen Physik auf dem CSC simuliert. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies modellieren komplexe atomare Strukturen und untersuchen die Möglichkeiten der Krebstherapie mit Schwerionenstrahlen.

Der Hochleistungsrechner des CSC besteht aus 2 Linux MPP-Clustern (CSCII und CSCIII), die über das schnelle universitätsweite Netz (10Gbit/s) verbunden sind.

Der Cluster CSCII wurde im Jahr 2004 in Betrieb genommen. Die Anlage besteht aus 10 wassergekühlten Racks, die 282 Rechenknoten enthalten, welche jeweils mit 2 64bit Opteron CPUs mit einer Taktrate von 1,8 GHz bestückt sind. Die Knoten sind standardmäßig mit 4 GByte Hauptspeicher ausgerüstet. 15 Knoten wurden auf 8 GByte, weitere 15 auf 16 GByte Speicher aufgerüstet. 64 Knoten sind mit Myrinet schnell vernetzt, die übrigen Knoten mit Gigabit Ethernet verbunden. Das RAID-System verfügt über 10 TByte Plattenplatz.



Das Clustersystem CSCIII wurde in 2006 zur Benutzung freigegeben und Anfang 2007 ausgebaut. Es besteht aus 251 Knoten, die jeweils mit 2 DualCore 2GHz Opteron CPUs ausgestattet sind. Jeder Knoten verfügt über 8 GByte Hauptspeicher, zusätzlich sind 44 Knoten auf 16 GByte aufgerüstet worden. 64 der Knoten (und damit 256 Prozessorkerne) sind über Myrinet schnell vernetzt. Ein Raid-System stellt 25 TByte Speicherplatz zur Verfügung.

Durch den stetigen Ausbau verfügt das CSC damit über ein MPP-System aus insgesamt 1568 Prozessoren mit einer theoretischen Rechenleistung von 6 TFlop/s. Der anstehende Ausbau des CSCIII, der bis Mitte 2009 abgeschlossen sein wird, wird die bestehende Rechenkapazität verdoppeln.

Ab Januar 2009 steht allen Mitgliedern des CSC im Rahmen ihrer jeweiligen Rechenkongingente ein kleiner GPGPU-Cluster (Scout) als experimentelles System zur Verfügung. Das System besteht aus 9 Recheneinheiten, wobei jede Einheit aus zwei CPU- und drei GPU- Knoten besteht. Die CPU-Systeme bestehen aus zwei QuadCore Xeon CPUs mit 16 Gbyte Hauptspeicher. Die GPU-Knoten sind Tesla S1070 Systeme von Nvidia. Jeder GPU-Knoten leistet 4 Tflop/s single precision (sp), bzw 345GFlop/s double precision (dp), so dass das Gesamtsystem eine Spitzenleistung von 108 TFlop/s sp, bzw 9.3 Tflop/s dp erreicht. Die Kommunikation innerhalb einer Recheneinheit erfolgt über PCI Express, die Kommunikation zwischen den Recheneinheiten wird ab 2009 durch ein Infiniband-Netzwerk erweitert. Ziel des Scout ist es, allen interessierten Arbeitsgruppen Erfahrungen im Einsatz von GPGPU-Systemen zu ermöglichen.

Den Nutzern wird eine Vielzahl von Softwarepaketen und Compilern zur Verfügung gestellt. Die Datensicherung aller Systeme erfolgt über das Backup-System des Hochschulrechenzentrums der Universität.

Mehr als 450 Wissenschaftler aus über 90 Arbeitsgruppen aus dem Bereich der Naturwissenschaften, Mathematik und Informatik sorgen für eine vollständige Auslastung des Rechners über das ganze Jahr. Etwa ein Viertel der verfügbaren Rechenzeit wird von Gruppen aus Darmstadt, Marburg, Gießen und Kassel verbraucht.

Die Finanzierung der Anlage erfolgte überwiegend durch Beiträge Frankfurter Hochschullehrer und -Institutionen, sowie Zuschüsse des Landes Hessen und des Bundes (im Rahmen des HBFG und Forschungsgroßgeräte-Programms). Über den Verbund der Hessischen Hochleistungsrechner (HHLR) haben Wissenschaftler aller hessischen Hochschulen Zugang zu den Computersystemen des CSC.