

## Presseinformation

zur Einweihung des Parallelrechners IBM RS/6000 SP  
am 15. Mai 1996

### Wissenschaftliches Rechnen (computation):

PCs und Workstations befinden sich praktisch überall in den Hochschulen im Einsatz. In den ingenieur- und naturwiss. Bereichen gibt es aber viele Probleme, die sich mit diesen Rechnern nicht bewältigen lassen; die Anforderungen an Speicherkapazität und Rechenleistung aus diesen Bereichen sind so hoch, daß sie nur mit Supercomputern bewältigt werden können.

Neben Theorie und Experiment hat sich seit langem als drittes Standbein der Wissenschaft die Computer-Simulation etabliert. Dabei wird die kontinuierliche Welt durch Modelle diskreter Elemente ersetzt (z.B. Volumenelemente mit Werten phys. Größen), mit denen numerische Berechnungen durchgeführt werden; je feiner diese Diskretisierung vorgenommen wird, desto mehr Daten fallen an und desto mehr muß gerechnet werden. Bekannte Beispiele sind Simulationen von Wetter und Klima (phys. Größen sind hier z.B. Luftdruck, Temperatur, Feuchtigkeit, Windrichtung und Windgeschwindigkeit), von Luftströmungen in und um Fahrzeuge (z.B. im Auto- und Flugzeugbau), von Meeresströmungen und vom Zerfall der Ozonschicht.

Computer-Simulationen erleichtern das Verständnis der physikalischen Welt; häufig sind sie sicherer, schneller und billiger als andere Untersuchungsmethoden. Es gibt Fälle, in denen die Simulationen auf wenige Resultate führen; meist liegen aber derartige Datenmengen vor, daß die Ergebnisse allenfalls graphisch dargestellt werden können.

Auf dem Parallelrechner der Universität Marburg sollen z.B. folgende Problem-Bereiche bearbeitet werden:

- Computational Chemistry (insb. Übergangsmetallverbindungen)
- Gittereichttheorie (insb. topologische Strukturen und Eichfixierung)
- Stark entwickelte Turbulenz (insb. Multiskalen-Auflösung)
- Entwurf und Implementierung deklarativer Sprachen
- Parallele Anfrage-Bearbeitung in Geo-Datenbanken

### Was ist ein Parallelrechner?

Computer (elektrisch arbeitend) gibt es seit Anfang der 40er Jahre; seitdem ist ihre Rechenleistung billionenfach angestiegen. Immer wieder neue Techniken sind entwickelt worden, um Speicherkapazität und Rechenleistung zu steigern. Seit Mitte der 80er Jahre werden Rechner gebaut, die über sehr viele Prozessoren verfügen; seit Anfang der 90er Jahre werden dafür leistungsfähige Standard-Mikroprozessoren gängiger Workstations verwendet. Dabei entstanden recht unterschiedliche Rechnerarchitekturen; so gibt es Rechner, bei denen alle Prozessoren auf den gesamten Speicher zugreifen können, während bei anderen Rechnern jeder Prozessor über seinen eigenen Speicher verfügt.

Neue Architekturen bedeuten allerdings, daß die alten Programme nicht weiterverwendet werden können (jedenfalls nicht effizient). Für einen Parallelrechner muß nämlich jedes große Problem in viele kleine aufgeteilt werden; die Daten zu den Teilproblemen müssen auf die einzelnen Prozessoren verteilt und dort bearbeitet werden; zur Bewältigung des Problems als Ganzes müssen die einzelnen Prozessoren i.a. mit-

einander kommunizieren. Bei Parallelrechnern, bei denen jeder Prozessor über seinen eigenen Speicher verfügt, müssen somit neben den Berechnungen auch die Kommunikationen explizit programmiert werden, und das ist keine leichte Aufgabe; d.h. die Wissenschaftler müssen neben den mathematischen Methoden und den Programmiersprachen auch noch Techniken des Parallel-Programmierens beherrschen.

#### **Bedeutung des Parallelrechners für die Universität:**

- Einstieg in eine neue Technologie:
  - Entwicklung paralleler Anwendungen, z.B. durch Physiker, Mathematiker und Informatiker.
  - Einsatz paralleler Anwendungen, z.B. durch Chemiker, Physiko-Chemiker und Pharmazeuten.
  - Ausbildungsmöglichkeit für Studenten.
- Hohe Speicherkapazität und Rechenleistung vor Ort, auch für serielle Anwendungen (bei dem Rechner handelt es sich um einen Supercomputer mittlerer Leistung, angesiedelt zwischen Workstations und Höchstleistungsrechnern).
- Entwicklung und Einsatz von Anwendungen mit höchsten Anforderungen, die auf Höchstleistungsrechnern zum Einsatz kommen sollen (z. B. an der Universität Stuttgart oder bei der KFA Jülich).
- Bereitstellung dieser Technologie für alle hess. Hochschulen (Integration in den hess. Hochleistungsrechner-Verbund; an den anderen hess. Universitäten gibt es Hochleistungsrechner mit anderen Eigenschaften, aber noch keinen derartigen Parallelrechner).

#### **Ausstattung des Parallelrechners:**

- Die IBM RS/6000 SP hat 35 Knoten; jeder Knoten entspricht einer Workstation IBM RS/6000 (allerdings ohne Bildschirm, Tastatur) unter dem Betriebssystem UNIX (genauer AIX).
- Die Knoten verfügen über jeweils einen Prozessor, 128 bis 512 MegaByte Arbeitsspeicher, 2.2 bis 18 GigaByte Plattenspeicher und haben eine max. Rechenleistung von 266.6 MegaFLOP/s (Millionen Floatingpoint Operations per Second, das sind Multiplikationen oder Additionen 13-stelliger Zahlen mit Exponent).
- Für die Kommunikation der Knoten untereinander sind diese über einen Hochleistungs-Switch verbunden; und zwar jeder mit jedem mit einer max. Übertragungsleistung von 40 MB/s.
- Alle Knoten zusammen haben 35 Prozessoren, ca. 8 GB Arbeitsspeicher, ca. 240 GB Plattenspeicher und eine max. Rechenleistung von ca. 9 GigaFLOP/s (d.h. 9 Milliarden obiger Rechenoperationen pro Sekunde, und entsprechen damit mindestens 500 Pentium PCs). Über den Hochleistungs-Switch können sie max. 700 MB pro Sekunde austauschen.
- Der Rechner kann leicht auf 47 Knoten ausgebaut werden (die vorhandenen Gehäuse erlauben das), prinzipiell sogar auf 512 Knoten (Skalierbarkeit).

### **Einstufung des Parallelrechners:**

- Es gibt eine Liste der weltweit 500 leistungsfähigsten Supercomputer: TOP500; die Liste wird halbjährlich fortgeschrieben.
- Im Nov. '95 belegte der Marburger Parallelrechner weltweit Rang 172, in Deutschland den Rang 12.
- Laufende weltweite Beschaffungen sorgen für eine rapide Rangverschiebung.
- Alle Leistungsangaben bei Supercomputern sind Maximalwerte (z.B. MachoFLOP/s), die von wirklichen Anwendungen nur annähernd erreicht werden.

### **Beschaffung des Parallelrechners im Rahmen des HBFG:**

- Beim HBFG (Hochschulbauförderungsgesetz) tragen Bund und Land jeweils die Hälfte der Kosten.
- Die Planungen wurden Anfang '93 begonnen.
- Ausschreibung war im Frühjahr/Sommer '94, beteiligt waren 6 Firmen, alle aus USA (Convex, Cray Research, IBM, Intel, nCube, Kendall Square Research und Thinking Machines).
- Die Auswahl erfolgte durch eine Arbeitsgruppe innerhalb der Universität (Wissenschaftler aus 6 Fachbereichen und HRZ-Mitarbeiter).
- HBFG-Antrag vom 30.08.94 im Umfang von 3.23 Mio. DM, nach Zustimmung im Ständigen Ausschuß für Datenverarbeitung.
- Begutachtung durch die DFG, Empfehlung am 27.04.95; Empfehlung des Wissenschaftsrats am 21.06.95 und Bewilligung durch das Hess. Ministerium für Wissenschaft und Kunst am 13.07.95 (Empfehlungen und Bewilligung wie beantragt).
- Im Rahmen des Antrags wurden der Parallelrechner beschafft (für ca. 2.6 Mio DM) sowie ein Kassetten-Roboter für Backups und langfristige Archivierungen im Umfang von 5 TeraByte (d.h. 5 000 GByte; für den Rest der Bewilligung).

### **Installation und Betrieb des Parallelrechners:**

- Kaufvertrag zwischen Universität und IBM am 02.10.95.
- Lieferung und Installation im Oktober '95, anschließend Testbetrieb; Betrieb des Rechners rund um die Uhr (inkl. USV).
- Benutzer-Betrieb ab 15.12.95:
  - Marburger Benutzer greifen von ihren Workstations/PCs über das Kommunikationsnetz UMRnet der Universität auf den Parallelrechner zu.
  - Benutzer anderer hess. Hochschulen haben Zugang über das WiN (deutsches Wissenschaftsnetz; Teil des Internet).
- Dokumentation des Rechners im WWW:  
<http://www.uni-marburg.de/hrz/sp>
- Das HRZ bietet Schulung und Unterstützung der Benutzer an.

### **Anlagen**

Dr. Jürgen Radloff  
Geschäftsführender Direktor des HRZ