

HINTERGRUND

von Frank Wittenbrock

Der Hochleistungsrechner und seine Anwendung in der Chemie

Eifrigster Nutzer des neuen Rechners der Universität Marburg ist bislang die Forschungsgruppe von Professor Gernot Frenking. Die Wissenschaftler aus dem Fachgebiet Theoretische Chemie „füttern“ den Computer mit hochkomplizierten Berechnungen zur Bestimmung der Struktur von Molekülen.

„Wir betreiben keine Spiele-reien im Elfenbeinturm, sondern kommen zu Ergebnissen, die für die Gesellschaft nützlich sind“, betonte Frenking in seinem Vortrag am Mittwoch.

Bei vielen chemischen Reaktionen entstehen Zwischenprodukte (Intermediate), die sofort weiterreagieren. Deshalb ist ihre Struktur experimentell sehr schwierig zu ermitteln.

Mit quantenmechanischen Berechnungen können die Anordnung der Atome, ihre Abstände untereinander und sogar ihre Bindungsenergien bestimmt werden.

Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen belegen die Zuverlässigkeit dieser Methode.

Chemische Reaktionen würden durch die berechneten Strukturen verständlich, neue Reaktionen ließen sich vorhersagen, Experimente zielgerichteter planen. Die Forschungsergebnisse könnten dazu beitragen, Rohstoffnutzung und Abfallbeseitigung günstiger zu betreiben, so Frenking.

Die theoretischen Chemiker nutzen bislang nicht den „Clou“ des Parallelrechners, ein Problem durch Verteilung auf mehrere sogenannte Knoten schneller zu berechnen. Dazu fehlen noch Programme.

Die Frenking-Gruppe beschleunigt ihre Arbeit durch die serielle Nutzung des Rechners, das heißt, sie nutzt die bis zu 35 Knoten einzeln für verschiedene Aufgaben. Dank der Menge an leistungsstarken Rechnern kommen die Chemiker schneller voran als vorher.

2,6 Millionen Mark teurer Computer soll vielschichtige Probleme lösen

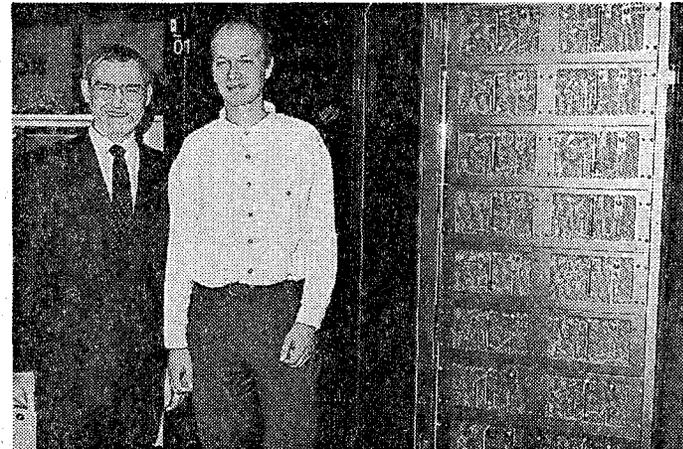
Informatiker und Naturwissenschaftler nutzen den Parallelrechner der Uni Marburg

Marburg. Die Philipps-Universität hat am Mittwoch ihren 2,6 Millionen Mark teuren Parallelrechner eingeweiht – den ersten an einer hessischen Hochschule.

von Jürgen Lauterbach und Frank Wittenbrock

Dr. Jürgen Radloff, Direktor der Hochschulrechenzentrum, hofft, daß Wissenschaftler mit dem Hochleistungscomputer fünf bis sechs Jahre lang auf modernem Stand arbeiten können. Der Parallelrechner ermöglicht zwei Anwendungswege:

1. Er kann benutzt werden wie ein handelsüblicher Computer, also „seriell“. Weil Speicherkapazität und Rechenleistung hoch sind, lassen sich aber auch komplizierte Aufgaben schneller lösen als mit anderen Geräten.
2. Manche Berechnungen



35 leistungsstarke „Workstation“ umfaßt der Parallelrechner IBM RS/6000 SP des Hochschulrechenzentrums. Für die Hardware ist System-Manager Heinz-Joachim Schröder (links) zuständig, die Anwender berät Thomas Gebhardt.

Foto: Frank Wittenbrock

sind so vielschichtig, daß ein Computer mit nur einer Recheneinheit sie nicht allein bewältigen kann. Der neue Computer der Philipps-Universität ermöglicht paralleles Rechnen: Eine große Aufgabe

wird in mehrere Teilaufgaben zerlegt. Die Daten dieser Teilaufgaben werden wiederum auf die einzelnen Prozessoren verteilt und dort bearbeitet.

Fast alle komplizierten Probleme lassen sich mit einem

Parallelrechner schneller lösen. Die Beschleunigung steigt aber nicht gleichmäßig mit der Zahl der parallel arbeitenden Rechner.

„Bei realen Simulationen ist es zufriedenstellend, wenn ein Parallelrechner etwa 70 Prozent der Zeit eines Rechners benötigt“, erläuterte Informatik-Professorin Rita Loogen. „Am besten wäre es, wenn konventionelle Programme auf Parallelrechnern einfach angewendet werden könnten. Das System müßte die Parallelisierung automatisch leisten.“

Außer von Informatikern wird das Gerät vorwiegend von Naturwissenschaftlern genutzt. In der Testphase lag seine Auslastung laut Jürgen Radloff bei 70 Prozent.

In einer alle sechs Monate aktualisierten Liste der weltweit leistungsfähigsten Supercomputer belegt der Marburger Parallelrechner derzeit Rang 172, in Deutschland Rang 12, berichtete Radloff.