

WOLFGANG BAUMANN
HUBERT BUSCH
JÜRGEN GOTTSCHESKI
THOMAS STEINKE
HINNERK STÜBEN

Berliner Landeshöchstleistungsrechner

Parallelrechner Cray T3D/T3E:

**Betrieb, Nutzung, Projekte,
Perspektiven für den Ausbau**

Zusammenfassung

Seit fast drei Jahren betreibt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) Parallelrechner der höchsten Leistungsklasse im normalen Rechenzentrumsbetrieb. Bereits im Mai 1995 hat das ZIB über seine Erfahrungen mit dem damals leistungsstärksten Parallelrechner Deutschlands berichtet [1]. Das Gesamtkonzept des ZIB [3] sieht weiterhin einen Höchstleistungsrechner als unabdingbaren Bestandteil des High Performance Scientific Computing (HPSC) im ZIB vor. Der vorliegende Bericht beschreibt die aktuelle Konfiguration, Betriebserfahrungen und die Rechnernutzung sowie typische Rechenleistungen, die für einzelne Anwendungsprogramme erzielt wurden. Beschreibungen der Forschungsgebiete mit den Forschungsgruppen, die den Rechner nutzen und die Anforderungen an den Rechnerausbau, die sich aus deren Arbeiten herleiten, beschließen den Bericht.

Autoren:

- Dr. Wolfgang Baumann Fachberater des ZIB
für Anwendungen auf dem Gebiet der Ingenieurwissenschaften, insbesondere CFD
- Hubert Busch Leiter der Abteilung Höchstleistungsrechner im Bereich Rechenzentrum des ZIB
- Jürgen Gottschewski Leiter des Bereichs Rechenzentrum a.D.
- Dr. Thomas Steinke Fachberater des ZIB
für Anwendungen auf dem Gebiet der Computational Chemistry
- Dr. Hinnerk Stüben Fachberater des ZIB
für Anwendungen auf dem Gebiet der Physik, insbesondere QCD

Inhaltsverzeichnis

1. Vorbemerkung	1
2. Konfiguration und Betriebserfahrungen	3
3. Rechnernutzung	7
4. Erfahrungen und erreichte Rechenleistung des T3E bei aktuellen Projekten	8
4.1 QCD	8
4.2 CFD	8
4.3 Car-Parinello Code CPMD	10
5. Forschungsgebiete, Forschungsgruppen und Projekte	12
5.1 Physik	12
5.2 Chemie/Biologie.	13
5.3 Meteorologie und Umweltwissenschaften	15
5.4 Computational Fluid Dynamics	16
6. Anforderungen an den Rechnerausbau aus Sicht der Berliner Großprojekte ...	19
7. Liste der Großprojekte (Stand September 1997)	20
8. Literaturhinweise	22

1. Vorbemerkung

Im November 1994 wurde im Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin ein Parallelrechner Cray T3D mit zunächst 192 Prozessoren und 12 GB Hauptspeicher installiert. Dieses System war damals das leistungsstärkste in Deutschland und sein Einsatz als Produktionsrechner zu jener Zeit durchaus noch risikobehaftet. Dank der guten Zusammenarbeit zwischen dem Hersteller, dem Betreiber und den Nutzern wurde das System eine hervorragende Bereicherung der Forschung im Norddeutschen Raum. Hierüber haben wir im Mai 1995 einen ersten Bericht [1] gegeben, der auch der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft vorgelegt wurde.

Am 26. Oktober 1995 hat die Kommission für Rechenanlagen dem Wissenschaftsrat empfohlen, die vom ZIB beantragte Erweiterung des Parallelrechners um ein System Cray T3E zu realisieren. Am 20. Dezember 1995 konnte mit der Firma Cray Research der Kauf des Systems vereinbart werden, die Lieferung des Systems war zunächst für September/Oktober 1996 vorgesehen. Wegen technischer Probleme auf Seiten beider Vertragspartner konnte die neue Anlage erst am 11. Februar 1997 im Neubau des ZIB installiert werden.

Die Installation des Rechners erfolgte schnell und ohne bemerkenswerte Schwierigkeiten. Am 14. Februar liefen erste Anwendungen, der Beginn des Abnahmebetriebes wurde auf den 18. Februar 1997 festgelegt. Die Hardware des ausgelieferten Systems enthielt noch einen kritischen Fehler im „read ahead buffer“ („streams“), der bei Nichtbeachtung von Vorsichtsmaßnahmen seitens der Benutzer zu Systemzusammenbrüchen führen konnte. Während der Abnahmephase haben wir diese Funktion außer Kraft gesetzt und nicht in die Prüfung einbezogen. Am 27. März konnte die Abnahme des Systems (bei Ausklammerung der „stream“-Funktion) erklärt werden. Der erwähnte kritische Fehler wurde 6 Monate später, durch Austausch der Prozessoren gegen solche vom Typ DEC Alpha 21164-EV5.6, im Rahmen einer Systemerweiterung behoben.

Erfreulicherweise gelang es während der seit 1994 vergangenen drei Jahre, die gesamte Konfiguration parallel zu den großen Ausbaumaßnahmen ständig zu erweitern und zu verbessern, so daß das ZIB über etwa zwei Jahre der Betreiber des leistungsstärksten Rechners in Deutschland blieb. Die mit den Rechnern des ZIB arbeitenden Forschungsgruppen konnten daher kontinuierlich an der Verbesserung ihrer Codes arbeiten und ihre Forschung mittelfristig planen. Auch nach Installation der neuen Höchstleistungsrechner beim HLRZ (Jülich), dem HLRS (Stuttgart), dem RZG (MPG Garching), dem LRZ (München) und beim VRZ (Karlsruhe) belegt das ZIB in den einschlägigen Übersichten über installierte Höchstleistungsrechner immer noch einen eindrucksvollen vierten oder fünften Platz in Deutschland.

Die Organisation des Betriebes und die Kooperation zwischen Betreiber und Benutzern entsprechen von Anfang an den Empfehlungen des Wissenschaftsrates [2]. Insbesondere sorgt ein unabhängiges wissenschaftliches Gremium, der Ausschuß für die Begutachtung von Rechenzeitanträgen für den Berliner Landeshöchstleistungsrechner (Zulassungsausschuß), für eine sinnvolle Verteilung der Ressourcen. Das Gesamtkonzept des ZIB [3] fand weithin Zustimmung. So kann also das ZIB inzwischen auf drei Jahre Höchstleistungsrechnerbetrieb im Sinne der Empfehlungen des Wissenschaftsrates zurückblicken und aus den Erfahrungen dieser Periode eine konservative Schätzung für den Bedarf der nächsten Jahre herleiten.

Die den Parallelrechner des ZIB benutzenden Forschungsgruppen haben inzwischen gemeinsam mit den Fachberatern des ZIB hochskalierende parallele Programme entwickelt, die zum Teil bereits jetzt in der Lage wären, die nächste Generation von parallelen Höchstleistungsrechnern sinnvoll zu nutzen. Hierüber berichtet das Kapitel 5 des hier vorgelegten Berichtes. Im Kapitel 6 wird eine vorsichtige Abschätzung der erforderlichen Größenordnung des für 1999

angestrebten Systems versucht.

Seit 1984 praktizieren die Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein eine Verwaltungsvereinbarung, die die gemeinsame Nutzung und abgestimmte Neubeschaffung ihrer jeweiligen Landeshöchstleistungsrechner sicherstellt. Der dadurch begründete Norddeutsche Vektorrechnerverbund (NVV) hat in den vergangenen 13 Jahren bewirkt, daß zu jeder Zeit an mindestens einem der drei Standorte Berlin, Hannover oder Kiel, ein moderner Höchstleistungsrechner installiert war. Diese günstige Versorgungsstruktur in den drei Ländern ermöglichte die Bearbeitung immer komplexerer Probleme und ermutigte die Forschungsgruppen in der Region, Probleme in Angriff zu nehmen, für deren Bearbeitung die existierenden Landeshöchstleistungsrechner nicht mehr ausreichen. (Vgl. Kapitel 5)

Computersysteme zur Bearbeitung von Problemen höchster Komplexität (für solche Probleme wurde in den USA der Begriff „Grand Challenges“ geprägt) sind von einem einzelnen Bundesland auch bei 50prozentiger Beteiligung des Bundes kaum finanzierbar. Einzelne, herausragende Beschaffungen (z.B. die Cray 2 in Stuttgart 1984) konnten in den Folgejahren nicht auf dem erforderlichen Standard gehalten werden. Nur die gemeinsame Beschaffung und laufende technische Aktualisierung solch eines Höchstleistungssystems durch mehrere Bundesländer kann dieses Dilemma auflösen. Nach jahrelanger Vorbereitung haben jetzt die fünf „Küstenländer“ Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein zusammen mit Berlin die gemeinsame Beschaffung eines zur Bearbeitung von „Grand Challenges“ geeigneten Computersystems als Investitionsvorhaben beim Wissenschaftsrat angemeldet. (Zentrum für Höchstleistungsrechnen in Norddeutschland, HLRN). Auf die Realisierung dieses (verteilten) Zentrums setzen wir große Hoffnungen.

Wir gehen in diesem Bericht nicht weiter auf den von hier aus zu beobachtenden Bedarf für parallele Vektorrechner ein. Der Vektorrechnerbedarf wird im Norddeutschen Vektorrechnerverbund vornehmlich an den Standorten Hannover und Kiel gedeckt. Eine Sonderrolle spielten in der Vergangenheit zwei Projekte, die nur in einer engen Kopplung zwischen Vektorrechner und Parallelrechner effektiv bearbeitet werden konnten. Eines der beiden Projekte stammte aus der Klimaforschung und wurde in enger Kopplung zwischen dem Vektorrechner Cray C90 des DKRZ Hamburg und dem T3D des ZIB bearbeitet. Die verteilte Verarbeitung über diese entfernten Standorte im Sinne des „Metacomputing“ litt unter der mangelnden Qualität der verfügbaren Netzdienste [1]. Daher wurde für das zweite Projekt (aus der Astrophysik) die Verteilung innerhalb des T3D zwischen Vektorprozessoren und RISC-Prozessoren vorgenommen. Auf dem T3E (mit der Funktion „stream“) kann nun aber das Projekt sehr effektiv ohne Zuhilfenahme weiterer Rechner bearbeitet werden. Die für die nächsten Jahre geplanten Gigabit-Verbindungen zwischen den Höchstleistungszentren werden durch verteilte Verarbeitung zwischen Vektorrechnern und Parallelrechnern der jeweils höchsten Leistungsklasse die Erschließung neuer Komplexitätsgrade bei den HPSC-Anwendungen und die Bewältigung echter „Grand Challenges“ ermöglichen.

Im Jahre 1996 bat der Präsident des ZIB, Prof. Deuffhard, die Präsidenten der drei Berliner Universitäten um Stellungnahmen zum beabsichtigten weiteren Ausbau des ZIB zu einem HPSC-Zentrum mit einem deutschlandweiten Nutzungsangebot. Die (durchweg positiven) Stellungnahmen wurden hinsichtlich der seitens der Universitäten geschilderten Projekte, die von einem Höchstleistungszentrum in der Region besonders profitieren würden, in den Kapiteln 5 und 6 dieses Berichtes berücksichtigt. Die positive Haltung der Berliner Hochschulen, der große regionale Bedarf und das Gesamtkonzept des ZIB [3] waren ausschlaggebend für die Bewerbung des ZIB als Standort für eine der beiden Hauptkomponenten des geplanten HLRN, nämlich für den massiv-parallelen Rechner.

2. Konfiguration und Betriebserfahrungen

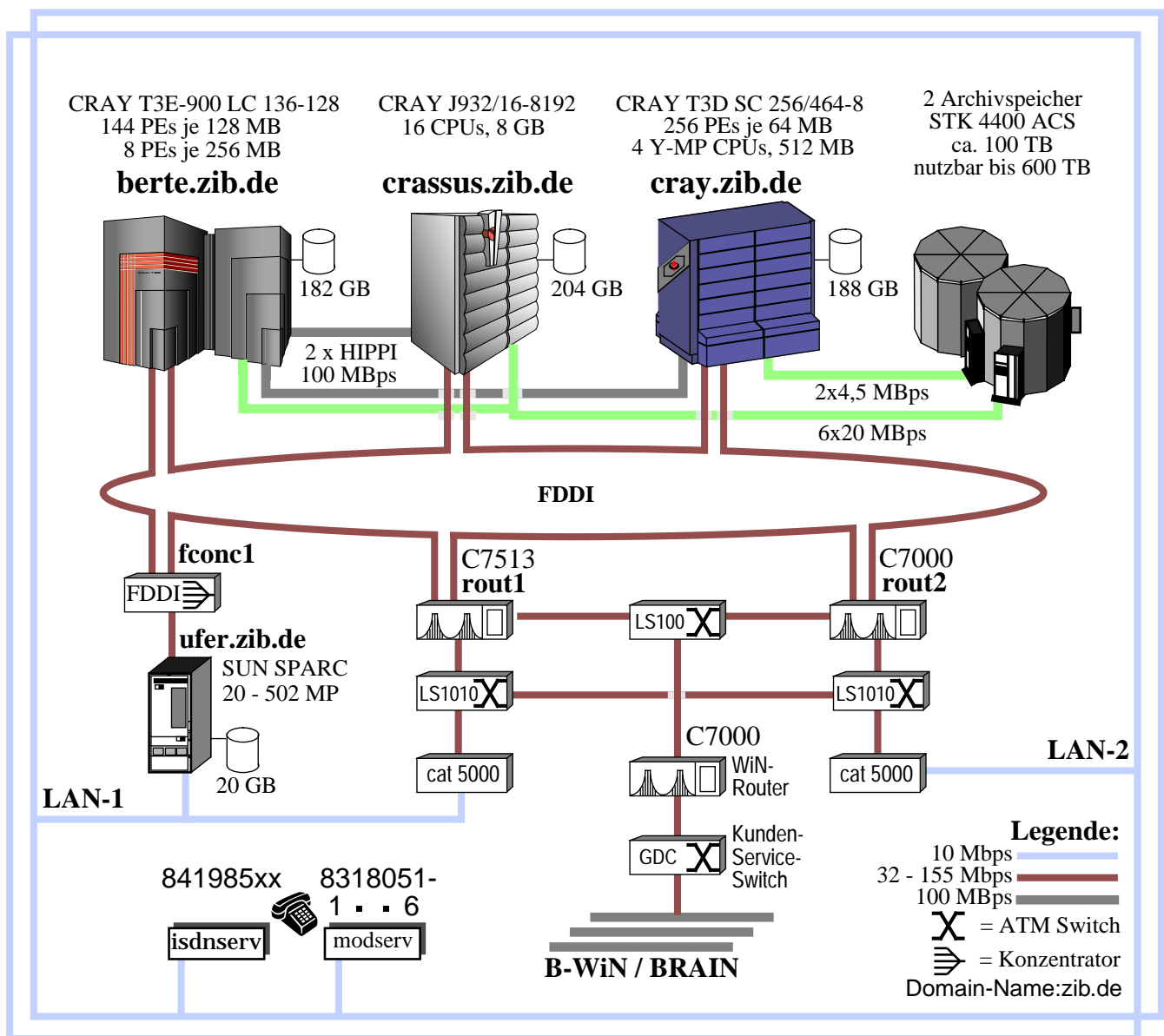
Das ZIB stellt seiner Benutzerschaft zwei leistungsfähige massiv-parallele Systeme zur Verfügung (Stand Ende September 1997): Einen Cray T3D SC mit 256 Prozessoreinheiten vom Typ DEC Alpha 21064-EV4, je 64 MB lokalem Hauptspeicher und integriertem Vektorrechner Cray Y-MP mit vier Vektorprozessoren und einen Cray T3E LC mit 152 Prozessoreinheiten DEC Alpha 21164-EV5.6, davon 136 Anwendungsprozessoren mit je 128 MB und 16 Systemprozessoren (8 PEs mit 256 MB, weitere 8 PEs mit 128 MB lokalem Hauptspeicher) für Ausfallsicherheit und betriebssystemnahe Aufgaben (alle Prozessoren mit 450 MHz getaktet, 900 MFLOPS Peak Performance). Insgesamt sind also im ZIB Computer mit einer Gesamtleistung von mehr als 160 GFLOPS mit zusammen mehr als 40 GB installiert.

Die Beschaffung und Installation dieser beiden Systeme wurde im vorigen Abschnitt beschrieben. Im folgenden gehen wir näher auf die Hardware- und Softwarekonfiguration des Rechners Cray T3E ein und schildern betriebliche Erfahrungen.

Konfiguration Stand Ende September 1997 (Hardware)

Zentraleinheit	Cray T3E-900 LC 136-128 152 Prozessorelemente DEC Alpha 21164-EV5.6, davon 136 Anwendungs-PEs mit je 128 MB für parallele Applikationen und 16 System-PEs (8 PEs mit 256 MB, weitere 8 PEs mit 128 MB lokalem Hauptspeicher)
Interne Zykluszeit	2,22 ns (450 MHz)
Verbindungsnetzwerk	3-dimensionaler Torus
Ein/Ausgabe-Subsystem	integrierte E/A-Steuereinheiten (eine für je vier Rechenknoten), Gigaring
20 Plattenlaufwerke DD-308	Kapazität je 9,1 GB, Transferrate je ca. 10 MB/s
2 HIPPI Interfaces	zum Anschluß an Cray Y-MP4E mit T3D (cray) und Cray J932 (crassus); Transferrate 100 MB/s
1 FDDI Adapter	zum Anschluß an FDDI, Transferrate 12,5 MB/s
4 SCSI-Anschlüsse	U.a. für den Anschluß der Magnetbandroboter STK 4400 ACS, Transferrate je 20 MB/s.
Gleitkommaleistung (Peak Performance)	900 MFLOPS je PE, dies entspricht ca. 120 GFLOPS Gesamtleistung für parallele Anwendungen

Das Zusammenspiel des T3E mit der sonstigen Geräteausrüstung des ZIB ist in der folgenden Konfigurationsskizze dargestellt:



Nach Abnahme des Systems am 27. März 1997 wurde die Funktion „stream“ ausgewählten Benutzerprojekten, die nachweislich fehlerfrei damit arbeiten können, zur Verfügung gestellt, damit konnten bei diesen Anwendungen Durchsatzverbesserungen bis zu 30 % (in der Regel 5 % bis 15 %) erreicht werden. Seit Installation der Prozessoren DEC Alpha 21164-EV5.6 (450 MHz) in der zweiten Hälfte des September 1997 können die Restriktionen für die Benutzung von „streams“ entfallen.

Die Verfügbarkeit des T3E war in den ersten sechs Monaten noch nicht zufriedenstellend. Insgesamt waren im Zeitraum April bis Juli 1997 42 außerplanmäßige Unterbrechungen des Rechenbetriebes zu verzeichnen:

Anzahl der Unterbrechungen	Ursache
11	Unzulänglichkeiten der Hardware, weitgehend CPU-Fehler und Hauptspeicher-Fehler einzelner Prozessorelemente
12	Fehler im Multi Purpose Node im Gigaring
6	weitgehend bei der Prüfung von Programmen auf Verträglichkeit mit der „streams“-Option
8	Unzulänglichkeiten der Software, weitgehend im Zusammenhang mit dem Einsatz unterschiedlicher aktueller Softwareversionen
5	außerhalb der Verantwortung des Rechnerherstellers

Die Gesamtausfallzeit, bezogen auf die ersten vier Ursachen, betrug 126,5 Stunden. Sowohl diese Gesamtzeit als auch die Anzahl der Ausfälle liegt erheblich über dem im ZIB von anderen Rechnern her gewohnten, wir erwarten in Zukunft eine deutliche Verbesserung.

Konfiguration (Software):

a) Betriebssystem UNICOS/mk

Im Unterschied zum Rechner Cray T3D benötigt der Rechner Cray T3E keinen Vorrechner mehr, die gesamte Funktionalität des Betriebssystems UNICOS/mk ist als verteiltes Betriebssystem im Rechner integriert. Einzelne Systemfunktionen und einzelne Kommandos können den einzelnen Prozessorelementen zugeordnet werden. Die 152 Prozessorelemente unseres Systems sind wie folgt aufgeteilt:

- 140 Prozessorelemente (je 128MB Hauptspeicher) für parallele Applikationen (maximal zulässige Größe einer Anwendung: 132 PEs), davon 4 PEs aus dem Bestand der Support-Nodes
- 7 Prozessorelemente (je 256 MB Hauptspeicher) für UNIX-Kommandos
- 5 Prozessorelemente (1 PE mit 256 MB, 4 PEs mit je 128 MB Hauptspeicher) für Betriebssystemfunktionen

Das ZIB setzt die zur Erhöhung der Ausfallsicherung seitens des Herstellers installierten „Hot Standby“ Prozessoren, die in der Konfiguration üblicherweise nicht mitgezählt werden, zusätzlich für parallele Applikationen ein. Das hierdurch mögliche höhere Ausfallrisiko wird nach unserer Überzeugung durch die höhere Systemleistung aufgewogen.

b) Anwendungs-Software

Die vom ZIB geprüfte und für Benutzer bereitgestellte Software-Ausstattung des Parallelrechners Cray T3E ist ähnlich wie beim Parallelrechner Cray T3D im Vergleich zu der reichen Software-Ausstattung unseres Vektorrechners noch sehr bescheiden. Das liegt an dem beträchtlichen Entwicklungs- und Portierungsaufwand für Anwendungs-Software auf Parallelrechnern und an dem hohen Aufwand, den der Test von Anwendungsprogrammen erfordert. Unterprogramm-bibliotheken für numerische Anwendungen und für Grafik und Visualisierung sind vorhanden. Mit GAMESS (UK) und (kürzlich) DGauss sind die ersten Chemie-Pakete einsetzbar; Fluent (für CFD) ist ebenfalls vorhanden und wird in nächster Zeit allgemein freigegeben werden. Das ZIB arbeitet mit Unterstützung nationaler und internationaler Partner an der Bereitstellung weiterer Anwendungs-Software und neuer Software-Konzepte und Werkzeuge für seine Parallelrechner.

c) Programmiersystem und -werkzeuge

Beim Parallelrechner Cray T3E handelt es sich (wie beim Vorgängermodell Cray T3D) um ein massiv-paralleles Rechnersystem mit physikalisch verteiltem Speicher und gemeinsamem logischen Adreßraum. Alle von einer Applikation belegten Prozessorelemente werden mit demselben Programm (Single Program Image, SPMD) geladen, der Datenaustausch erfolgt über Message Passing (MPI, PVM) oder über die Cray-spezifische Shared Memory Access Library. Mit High Performance Fortran ist eine Parallelisierung über Compiler-Direktiven möglich. Werkzeuge zur Fehlersuche und Programmoptimierung stehen ebenfalls zur Verfügung.

Die Tabelle bietet eine Übersicht über die derzeit für den Parallelrechner Cray T3E-900 vom ZIB angebotene Software.

Softwareangebot des ZIB für den Cray T3E:

Programmier-sprachen	Message Passing
Fortran 90 High Performance Fortran ANSI C C++	Cray Message Passing Toolkit (MPT) mit MPI PVM Cray Shared Memory Access Library MPICH
Programmierwerkzeuge	Bibliotheken
Xbrowse TotalView Debugger MPP Apprentice Performance Analysis Tool (PAT)	Cray Scientific Library mit BLAS, PBLAS, BLACS, FFT, RLAPACK, ScaLAPACK Aztec Library C++ MathPack C++ Tools Cray Benchlib NAG Fortran Library ZIB Library
Grafik/Visualisierung	Chemie
Cray Visualization Toolkit (CVT) mit: X11R6, OSF/Motif, OpenGL, Tcl, Tk	GAMESS (UK) DGauss
Computational Fluid Dynamics (CFD)	
Fluent	

3. Rechnernutzung

In der folgenden Tabelle ist die Entwicklung der Rechnernutzung dargestellt. Maß für die Nutzung ist im Gegensatz zum Rechner Cray T3D, bei dem die gesamte Prozessor-Belegungszeit (die Verweilzeit des Programms im Rechner, multipliziert mit der Anzahl der belegten Prozessoren) ausgewiesen wird, die tatsächliche CPU-Zeit. Auf diese CPU-Zeit beziehen sich auch die im nächsten Abschnitt aufgeführten MFLOP-Raten der einzelnen Projekte.

Genutzte CPU-Zeit in Stunden:

März	April	Mai	Juni	Juli	August
71.996	68.689	63.990	64.570	62.585	74.061

Es überrascht zunächst, daß im März und April mehr CPU-Zeit verbraucht wurde als in den Folgemonaten. Dafür sind im wesentlichen zwei Gründe maßgebend: Bereits vor Installation des T3E waren einige Programme vom T3D zum T3E umgestellt worden (teils bei Firma Cray Research Inc. in Eagan, teils am HLRZ in Jülich). Diese (wenigen) Programme nutzten den Rechner sehr intensiv und belegten jedes für sich zunächst eher eine geringe Zahl von Prozessoreinheiten, vornehmlich bis zu 32.

In den Folgemonaten ist infolge der Programmoptimierungsarbeiten des ZIB und der Benutzer die Zahl der Aufträge mit angeforderten Prozessorzahlen von 64 bis 128 erheblich gewachsen. Damit treten Verschnittprobleme auf, die sich auch in *Idle*-Zeiten äußern. Auch führen freizügig gewählte Prozessorzahlen zu Durchsatzverschlechterungen, die sich prinzipiell nicht ganz vermeiden lassen, es sei denn, daß man die Anwender Regelungen unterwürfe, die aus unserer Sicht unzumutbar wären. Schließlich mußten wir, um auf der damals noch mit „lediglich“ 136 Prozessoren bestückten Maschine weiterhin Programmentwicklung im Dialog zu ermöglichen, zu bestimmten Zeiten (zur Zeit während acht Stunden an den Werktagen) 32 Prozessoreinheiten für interaktive Arbeiten reservieren - dies senkte die Auslastung. Im August wurde die Maschine aufgrund der Urlaubszeit weniger für die interaktive Programmentwicklung genutzt, was zu einer besseren Auslastung führte, außerdem kamen hier zum ersten Male Verbesserungen am Scheduler zum Tragen.

Der größte Teil der Rechenzeit wurde von Projekten aus Berlin, Brandenburg und Niedersachsen aufgenommen. Davon wurde der überwiegende Teil von den im Abschnitt 5 beschriebenen Arbeitsgruppen und Großprojekten in Anspruch genommen.

In Zusammenarbeit mit den Benutzern und Fachberatern hat die Systemgruppe des ZIB mit den Job- und Prozeß-Scheduling-Tools experimentiert, um die Vergabe der Rechnerressourcen zu verbessern. Einige Forderungen sind gegensätzlich, zum Beispiel steht die Notwendigkeit der Bearbeitung von 128-PE-Jobs im Widerspruch zur Möglichkeit der sofortigen Bearbeitung von Entwicklungsjobs, sei es im Dialog oder im Batch. Zur Zeit wird der Rechner zu unterschiedlichen Zeiten unterschiedlich konfiguriert: Während der Hauptarbeitszeit an Werktagen sind 16 Prozessoreinheiten für Arbeiten im Dialog reserviert, daneben sind nur noch Aufträge mit bis zu 124 Prozessoreinheiten möglich. Zu den übrigen Zeiten wird das Arbeiten im Dialog unterbunden und dafür die Bearbeitung von 132-PE-Jobs gefördert. Ein generelles Ausrollen von vorhandenen Jobs verbietet sich wegen der benötigten großen Hintergrundspeicher und der langen Auslagerzeiten (bis zu 1 h!).

Verbesserungen der Auslastung ohne Beeinträchtigung der Arbeitsqualität für die Benutzer wurden mit dem im August 1997 bereitgestellten UNICOS/mk 1.6 erreicht. Es ist jetzt möglich, auf einzelnen Prozessoreinheiten auch mehrere Anwendungen gleichzeitig abzuarbeiten. Auch der von Fa. Cray angebotene Political Scheduler bietet noch weitere Steuerungsmöglichkeiten.

4. Erfahrungen und erreichte Rechenleistung des T3E bei aktuellen Projekten

4.1 QCD

Ein am ZIB stark vertretenes Anwendungsgebiet ist die QCD (siehe Kapitel 5). Auf dem T3E des ZIB laufen zur Zeit zwei QCD-Programme.

Das erste dieser Programme kommt aus der Gruppe von Prof. M. Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin, HUB) und ist in Zusammenarbeit mit der Bielefelder QCD-Gruppe entstanden. Es wurde zunächst auf dem T3D des ZIB entwickelt. Die Programmiersprache ist Fortran und die Message-Passing-Library ist MPI. Der Umstieg auf dem T3E verlief erwartungsgemäß problemlos.

Das zweite QCD-Programm kommt aus der Gruppe von Prof. V. Linke (Freie Universität Berlin, FUB). Es ist eine Portierung des Programms des Projektes „*QCD-Structure-Functions*“ (DESY-IfH Zeuthen) mit dem eine enge Zusammenarbeit besteht. Das ursprüngliche Programm ist für den Zeuthener QCD-Rechner Quadrics in der speziellen Programmiersprache Tao geschrieben worden. Die Portierung des etwa 10000 Zeilen langen Programms auf den T3E hat etwa drei Monate in Anspruch genommen. Die Portierung erfolgte in Fortran 90 unter Verwendung der Shared-Memory-Routinen.

Beide Programme laufen auch auf dem T3E des HLRZ Jülich in Produktion. Aufgrund ihres großen Speicherbedarfs können sie nicht auf den derzeitig installierten Quadrics-Rechnern laufen.

Im Verhältnis zur Peak-Performance kann die erzielte Performance der Programme lediglich als befriedigend angesehen werden. QCD-Programme haben zwei Kerne:

- (a) die Multiplikation von drei komplexen $SU(3)$ -Matrizen und
- (b) die Fermionmatrixmultiplikation,

wobei Fall (b) praktisch die Gesamt-Performance bestimmt.

Im Fall (a) konnte die Performance durch Wandlung des Fortran-Codes nach C mit dem Tool *f2c* erheblich gesteigert werden. Damit wurden bis zu 130 MFLOPS pro Prozessor erzielt. Es ist interessant, daß der C-Compiler hier, offenbar durch bessere Nutzung der Register, effizienteren Code erzeugen kann.

Im Fall (b) wurden maximal 70 MFLOPS pro Prozessor erreicht. Dies war nur durch Einschalten der Funktion „stream“ möglich, was die Performance um 30% verbesserte. Das Programm wurde „stream-sicher“ gemacht, so daß der Performance-Gewinn auch bereits auf dem anfänglich installierten T3E in der Produktion eingesetzt werden konnte, bei dem andernfalls diese Funktion noch zu Systemzusammenbrüchen hätte führen können.

Diese Angaben beziehen sich noch auf den T3E-750. Die Programme skalieren gut bis zu mindestens 512 Prozessoren.

Nach den hier gemachten Erfahrungen kann man sagen, daß beim Cray T3E das Zusammenspiel von Daten-Caches und Streams schwer zu durchschauen ist. Aufgrund der Speicherbandbreite ist es schwierig, mehr als 10% der Peak-Performance zu erzielen.

4.2 CFD

Der CFD-Code "MLET" wird von der Arbeitsgruppe Prof. F. Thiele (Technische Universität Berlin, TUB) für Large-Eddy-Simulationen eingesetzt. MLET gehörte zu den ersten Projekten, die auf den Parallelrechner Cray T3D portiert worden waren [1].

Die reine Portierung auf den T3E beschränkte sich auf die Übersetzung mit dem Fortran 90-Compiler. Der Code war sofort lauffähig. Anschließende Optimierungen wurden hauptsächlich zur Erhöhung der Einzel-PE-Performance und zur optimalen Nutzung der Funktion „stream“ durchgeführt.

MLET arbeitet auf einem orthogonalen kartesischen Gitter. Die Parallelisierung erfolgt durch Gebietszerlegung in X- und Y-Richtung, während die Z-Richtung lokal auf dem PE verbleibt. Der Austausch der Randinformation geschieht durch Message-Passing mit Hilfe der Shared-Memory-Routinen. Performance und Skalierung des Codes sind gut.

Der bei uns mit CFD-Codes erreichte Leistungsfaktor zwischen einem T3E-600 (ermittelt in Eagan, MN) und dem T3D des ZIB beträgt zwischen 2.5 und 4, wobei MLET mit 3.5 am oberen Ende liegt. Die erreichten MFLOPS-Raten betragen auf dem T3D etwa 13 und auf dem T3E-600 etwa 45 bis 50.

In den folgenden Tabellen werden die Daten von zwei Beispielen angeführt:

- Fall 1 mit ca. 11 Mio. Gitterpunkten
- Fall 2 mit ca. 100 Mio. Gitterpunkten.

	Fall 1	Fall 2
Anzahl der Gitterzellen:	11 Mio.	100 Mio.
Dimensionen des Problems:	516*132*64	1156*260*324
Anzahl Druckiterationen:	25	25
Anzahl der Zeitschritte:	100	20
Speicherbedarf:	2 GB	20 GB

Der Fall 2 benötigt auf dem T3E aus Speicherplatzgründen mehr als 128 PEs. Die Performance-daten wurden auf dem T3E-750 des ZIB (Stand August 1997) und einem T3E-900 mit 1268 PEs in Eagan ermittelt. Sie reflektieren weitere Optimierungsmaßnahmen gegenüber den oben erwähnten Performance-Daten.

Ergebnisse Fall 1:

Rechner-Typ	Anzahl PEs	Gesamt [sec]	Iteration [sec]	GFLOPS gesamt	MFLOPS /PE
T3E-750	32	635	6.26	2.56	80.2
T3E-750	64	346	3.39	4.71	73.6
T3E-900	32	624	6.16	2.70	84.3
T3E-900	64	330	3.25	5.00	78.2
T3E-900	128	203	1.98	8.03	62.8
T3E-900	256	113	1.08	13.98	54.6
T3E-900	512	82	0.702	22.82	44.6
T3E-900	1024	47	0.375	42.73	41.7

Ergebnisse Fall 2:

Rechner-Typ	Anzahl PEs	Gesamt [sec]	Iteration [sec]	GFLOPS gesamt	MFLOPS /PE
T3E-900	256	155	7.272	20.09	78.5
T3E-900	512	99	4.330	33.68	65.8
T3E-900	1024	67	2.280	64.07	62.6

Die Ergebnisse bestätigen, daß die Skalierung gut ist, solange die Arbeit eines PEs durch Rechnen dominiert ist. Fortlaufende Erhöhung der PE-Anzahl bedeutet Verringerung der Rechenarbeit, kürzere Schleifen und gleichzeitig Erhöhung der Kommunikationsarbeit pro PE, was sich in abnehmender Knotenleistung bemerkbar macht (Fall 1).

Erhöht man bei gleichbleibender PE-Zahl wieder die Problemgröße, so erhöht sich damit die Rechenarbeit pro PE und damit auch die Performance (Fall 2).

MLET gehört auch weiterhin zu den größten Abnehmern von Parallelrechner-Kapazität am ZIB. Eine grössere Anzahl von Produktionsläufen mit jeweils mehreren 100.000 Zeitschritten konnte erfolgreich durchgeführt werden.

4.3 Car-Parinello Code CPMD

Dank der Verfügbarkeit von *High Performance Supercomputing Ressourcen* können nichtempirische Modellierungen von katalytischen Prozessen erheblich zur Riskikominimierung bei Neuentwicklungen im Bereich der technischen Katalyse beitragen. Zur Zeit gilt es noch, die Eignung der *ab-initio*-Molekulardynamik als universelles Werkzeug für *de-novo* Entwicklungen anhand eindrucksvoller Pilotprojekte zu demonstrieren.

Exemplarisch seien hier die von der *Arbeitsgruppe Prof. J. Sauer (HUB)* durchgeführten Simulationsrechnungen von molekularen Wechselwirkungen in Festkörperkatalysatoren hervorgehoben.

Von den synthetischen AIPO Festkörperkatalysatoren vermutet man, daß sie in der Lage sind, Methanol oder Wasser direkt zu protonieren. Damit scheint diese Klasse von Katalysatoren zum Beispiel für den technisch äußerst interessanten Prozess der Treibstoffsynthese aus Methanol unter milden Bedingungen geeignet. Zur Aufklärung der Ursache für die im Vergleich zu den Zeolithen erhöhte Aktivität wurden erstmalig *first-principle* Simulationen der Dynamik der Wasseradsorption auf molekularem Niveau durchgeführt

Die Computersimulation des komplexen Systems, bestehend aus 84 Gitteratomen und 3 Wassermolekülen, basieren auf der Anwendung des Car-Parinello-Verfahrens, das Methoden der Moleküldynamik und der Dichtefunktionaltheorie miteinander vereinigt und die Berechnung atomarer Trajektorien auf der Grundlage nichtempirischer Wechselwirkungspotentiale gestattet. Benutzt wurde der CPMD-Code [10] aus Stuttgart. In der folgenden Tabelle findet man Zahlen zum Rechenzeitaufwand der Simulation bei einer Temperatur von 400 K. Für die Simulation der Dynamik in einer Picosekunde werden hier ca. 20000 MD-Schritte benötigt. Die Berechnung gemittelter Größen und Korrelationen erfordert eine Simulationsdauer von mind. 3 psec.

Wall-clock-Zeit t für einen MD-Schritt bestehend aus Elektronenpropagation und Kräften, Speedup S , Effizienz E und relative. Leistung					
MPP	PEs	t/s	S	$E/\%$	T3E/T3D
T3D	32	78	1.00	-	-
	64	38	2.05	102	-
	128	22	3.55	89	-
T3E	32	22.3	1.00	-	3.5
	64	14.1	1.58	79	2.7
	128	11.2	1.99	50	2.0

Für die konkrete Problemstellung zeigt der CPMD-Code auf dem Cray T3D eine gute Skalierung auch für große Prozessorzahlen (superlinearer Speedup bei 64 PEs). Der Geschwindigkeitsfaktor des T3E in der Einzelprozessorleistung wird bei kleinen PE-Zahlen gut demonstriert (3.5 bei 32 PEs). Die relativen Zahlen T3E/T3D machen jedoch deutlich, daß für das vorliegende Problem das Leistungspotential des T3E bei weitem noch nicht ausgeschöpft wird und Anforderungen an die Behandlung größerer Problemstellungen (größeres molekulares System, längere Simulationsdauer von 10 psec) auf dem T3E-System durchaus realistisch sind und gewünscht werden.

5. Forschungsgebiete, Forschungsgruppen und Projekte

5.1 Physik

Quantenchromodynamik

An den Berliner Universitäten gibt es drei Gruppen von Forschern, die sich mit Simulationen der Quantenchromodynamik (QCD) und verwandten Themen der Gitterfeldtheorie beschäftigen. An der HUB arbeiten die *Arbeitsgruppe Prof. M. Müller-Preußker* und die *Arbeitsgruppe Prof. U. Wolff*, an der FUB arbeitet die *Arbeitsgruppe Prof. V. Linke*.

Es gibt vielfältige Zusammenarbeit sowohl zwischen diesen Gruppen als auch auf nationaler und internationaler Ebene. Besonders enge Verbindungen bestehen zum Kooperationspartner des ZIB, DESY-IfH Zeuthen. Darüber hinaus arbeiten Mitglieder folgender Institutionen auf dem Gebiet der QCD intensiv zusammen: CERN Genf, DESY Hamburg, JINR Dubna, MPI München, SCRI Tallahassee, Universität Leipzig, Universität Bielefeld, Universität Regensburg und ZIB Berlin.

Die Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Gitterfeldtheorie zielen auf ein besseres Verständnis des Standardmodells der Elementarteilchenphysik, insbesondere der Aspekte des Modells, die sich mit analytischen, störungstheoretischen Methoden nur schwer oder gar nicht erschließen lassen. Monte-Carlo-Simulationen sind bis heute das einzige Instrumentarium, mit dem man fundamentale Größen der elementaren Materie ausgehend von ersten Prinzipien berechnen bzw. vorhersagen kann.

Die Berliner Arbeiten beschäftigen sich neben der QCD, die seit einiger Zeit in den Mittelpunkt der Betrachtungen gerückt ist, mit Eich-Higgs-Theorien, der Quantenelektrodynamik sowie niedrig-dimensionalen Modelltheorien. Aktuelle Forschungsschwerpunkte sind die Bestimmung der laufenden Kopplungskonstanten der QCD, topologische Effekte, die Untersuchung des chiralen Limes bei der Verwendung von Wilson-Fermionen, die Verbesserung der Gittertheorien durch Minimierung von Diskretisierungsartefakten sowie die Suche nach effektiveren Simulationsalgorithmen.

Langfristig sollen Simulationen der vollen (näherungsfreien) QCD durchgeführt werden, unter Kontrolle sämtlicher auftretender Fehler, insbesondere der systematischen. Das Ziel ist, Resultate mit einer Genauigkeit zu bekommen, die der experimentellen Genauigkeit entspricht.

Selbst mit den heute zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten sind noch keine näherungsfreien Präzisionsrechnungen möglich. Man ist darauf angewiesen, unter Vernachlässigung dynamischer Quarks zu arbeiten. Für die Simulation der vollen QCD werden Rechenleistungen im TFLOP-Bereich benötigt. Mittelfristig müssen erheblich größere Datenmengen gehalten werden. Zur Zeit belegen QCD-Projekte „lediglich“ 1,5 TB im Archivspeicher des ZIB. Für dieses Forschungsgebiet ist der Zugang zu Rechnern der jeweils höchsten Leistungsklasse unerlässlich. Ein Ausbau des Höchstleistungsrechners im ZIB würde die Attraktivität des im Raum Berlin-Brandenburg in den letzten Jahren auf diesem Forschungsgebiet entstandenen Schwerpunktes weiter erhöhen. Zusätzlich wäre ein Ausbau des eher speziellen Rechners beim IfH Zeuthen hilfreich.

Astrophysik

Im Raum Berlin-Brandenburg ist die Astrophysik ein bedeutender Schwerpunkt im Bereich der computergestützten Physik. An der TUB erforscht die *Arbeitsgruppe Prof. E. Sedlmayr* mit numerischen Methoden die Physik zirkumstellarer Staubhüllen, wobei das Zusammenwirken von Hydrodynamik, Thermodynamik, Strahlungstransport und Chemie berücksichtigt wird.

An der Universität Potsdam beschäftigt sich die *Arbeitsgruppe Prof. W.-R. Hamann* mit der quantitativen Spektralanalyse heißer Sterne. Ein großer Teil dieser Gruppe ist erst vor kurzem von Kiel nach Potsdam gekommen, nutzt aber die Rechner des ZIB bereits seit Jahren im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes. Die beiden genannten Arbeitsgruppen benötigen Höchstleistungsrechnerkapazität in bedeutendem Umfang.

Ein mit den heutigen Rechnerkapazitäten noch nicht umfassend bearbeitbares Projekt aus dem Bereich der Astrophysik ist die numerische Untersuchung der allgemeinen Relativitätstheorie, wie sie am Albert-Einstein-Institut in Potsdam in der *Arbeitsgruppe von Prof. B. Schutz und Prof. E. Seidel* betrieben wird. Die Gruppe untersucht zur Zeit die Kollision schwarzer Löcher. Ein Ziel ihrer Forschung ist die Bestimmung der Signalform der bei derartigen Kollisionen abgestrahlten Gravitationswellen. Derartige Vorhersagen sind wichtig für die Messung von Gravitationswellen, wie sie in den nächsten Jahren in den Observatorien LIGO/VIRGO begonnen wird. Numerische Studien der allgemeinen Relativitätstheorie erfordern Rechenleistung im TFLOP-Bereich und haben Arbeitsspeicheranforderungen im TB-Bereich, wenn ohne Näherungen auf realistisch großen Gittern gerechnet werden soll. Die numerische Relativitätstheorie ist in vieler Hinsicht eine Herausforderung und hat auf mehreren Ebenen zu Zusammenarbeit zwischen dem Albert-Einstein-Institut und dem ZIB geführt. So war das Rechenzentrum des ZIB daran beteiligt, eine schnelle Version des Produktionsprogramms *cactus* auf dem Parallelrechner T3E zu erstellen. Weitere Zusammenarbeiten bestehen in der Visualisierung und im Bereich der adaptiven numerischen Verfahren.

5.2 Chemie/Biologie

Im Zusammenhang mit den verschiedenen HPSC-Initiativen der USA wurden sogenannte „Grand Challenges“ formuliert, Probleme von nationaler Bedeutung, die sich wegen ihrer Komplexität derzeit noch einer Lösung entziehen, die aber vorrangig in den nächsten Jahren mit künftigen Höchstleistungsrechnern bearbeitet werden sollen. Die in der einschlägigen Literatur [4] beschriebenen „Grand Challenges“ auf dem Gebiet der Chemie und Biologie lassen sich grob in zwei Anwendungsgebiete unterteilen:

- Vorhersage der Struktur und Eigenschaften von Makromolekülen
- Effiziente Generierung und Betreiben von Strukturdatenbanken

In [4] werden folgende Anwendungen explizit genannt:

- Protein und DNANA Sequenz Analyse (Datenbank)
- Vorhersage der Proteinfaltung und „de novo“ Design
- Strukturvorhersage von DNA und RNA
- Anwendung der Quantenchemie auf biologische Fragestellungen
- Struktur-Wirkungs-Analyse in der Enzymkatalyse

Aus Berliner Sicht möchten wir noch folgende Anwendungen hinzufügen:

- Heterogene Katalyse
- Zu letzterem gibt es ein vom BMBF gefördertes Vorhaben der Verbundforschung [5], das Projekte im Bereich der Grenzflächenforschung und Molekularbiologie zum Gegenstand hat.

Dazu ergänzend kann das von der EU geförderte Projekt im Bereich der Nanowissenschaften in die Reihe der „Grand Challenges“ eingeordnet werden. [6,7]

Aktivitäten im Raum Berlin-Brandenburg

Trotz der Vielzahl theoretisch orientierter Arbeitsgruppen im Berliner Raum fällt es schwer, erfolgversprechende Arbeiten an „Grand Challenges“ im Raum Berlin-Brandenburg zu diesem Zeitpunkt auch konkret zu belegen. Lediglich durch die *Arbeitsgruppe J. Sauer (HUB)* sind konkrete Anforderungen definiert worden.

So spiegelt die Vielzahl der Professuren mit theoretischer Ausprägung an der HUB (Biologie, Chemie, Physik) die Menge der zur Zeit am ZIB bearbeiteten Großprojekte nur teilweise wider. Die in der in den Vorbemerkungen erwähnten Stellungnahme der HUB zur Weiterentwicklung des ZIB zum HPSC-Zentrum geäußerte Erwartung, daß nach Installation eines Höchstleistungsrechners der nächsthöheren Leistungsklasse im ZIB die Zahl der Großprojekte aus der HUB zunehmen wird, scheint zu optimistisch. Erwähnenswert ist die Tatsache, daß im gesamten Berliner Raum das Gebiet der theoretischen Biologie (Molekularbiologie, Biochemie, Biophysik), insbesondere nach dem Weggang der *Arbeitsgruppe Höltje (FUB)*, nicht ernsthaft durch Projekte am ZIB repräsentiert ist.

An einer Verbesserung dieser Situation wird gearbeitet, z. B. im Zusammenhang mit dem Projekt „ICM“ mit dem *Institut für Immunologie der Charité, HUB*.

Zur Zeit lassen sind folgende Projekte, die im Zusammenhang mit den oben beschriebenen „Grand Challenges“ stehen, belegen:

Neue Materialien und Katalyse

Arbeitsgruppe Prof. J. Sauer (HUB): Molekulardynamik von Adsorptionsprozessen an Festkörpern.

Bei 150-300 Atomen liegen die Hardware-Anforderungen bei mind. 5 GByte Hauptspeicher und 5000 * 128 PE*h Cray T3E pro Jahr. Benutzt wird der Car-Parinello Code CPMD des MPI für Festkörperforschung Stuttgart, der sehr effizient auf MPPs läuft.

Arbeitsgruppe Prof. W. Koch (TUB): Mechanismus von Übergangsmetallvermittelten Reaktionen.

Die Problemstellung verlangt den Einsatz von aufwendigen Rechenmethoden der Quantenchemie (Ansätze mit korrelierten Zustandsfunktionen, Berücksichtigung relativistischer Effekte), so daß gegenwärtig nur kleine Modellsysteme berechnet werden können. Praxisnähere Modelle benötigen eine Steigerung der CPU- und I/O-Leistung um eine Größenordnung gegenüber den derzeit im ZIB vorhandenen Systemen. Der Erfolg weitergehender Simulationen hängt empfindlich von der Verfügbarkeit effizienter Quantenchemie-Codes mit ausreichender Funktionalität auf MPP-Systemen ab.

Quantenchemische Modellierung in Biosystemen

Arbeitsgruppe Prof. Ch. Dreismann (TUB): Protonenübertragung in DNA-Helixfragmenten

Die Bearbeitung dieses Projektes erfordert die Anwendung sehr genauer Rechenmethoden (besser als Hartree-Fock-Niveau) auf große molekulare Systeme (mindestens eine Umdrehung der DNA-Doppelhelix). Die Durchführung ist z. Z. in Frage gestellt, da die aktuelle Installation im ZIB (Cray T3E, Quantenchemie-Code auf T3E) diese Problemgröße noch nicht bewältigen kann.

Die Projekte der oben erwähnten *Arbeitsgruppen Prof. J. Sauer und Prof. W. Koch* verwenden nicht nur Rechenzeit auf den Rechnern des ZIB sondern auch auf den Supercomputern am HLRS (Stuttgart).

Weitere Großprojekte aus den Anmeldungen der Berliner Universitäten und aus Potsdam

Die Aufgabenstellungen der *Arbeitsgruppe Prof. V. Bonacic-Koutecky (HUB)* lassen sich in das Gebiet „Neue Materialien und Heterogene Katalyse“ einordnen, jedoch zeigen frühere Projekte, daß die allgemein formulierten Anforderungen nicht unbedingt zur Bewältigung einer „Grand Challenge“ führen müssen.

Die in der *Arbeitsgruppe Prof. J. Manz (FUB)* behandelten Themen zur Molekularen Quantendynamik in Festkörpern, in Lösung und an Oberflächen stellen potentiell Projekte mit dem Anspruch von Grand Challenges dar, jedoch scheint es gegenwärtig Engpässe in der Umsetzung der seit drei Jahren mit dem ZIB entwickelten neuen Algorithmen [8] auf große Problemklassen zu geben, denn bisher zeigen sich diese Projekte eher bescheiden in der Gesamtstatistik aller Großprojekte im ZIB.

Es ist unverständlich, daß bisher keine Großprojekte aus dem *Graduiertenkolleg der DFG „Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse“* erwachsen sind [9], obwohl einige der bearbeiteten Themen sehr wohl mit „Grand Challenge“-Projekten in den USA konkurrieren können. Desgleichen gibt es nur zaghafte Kontakte der *Arbeitsgruppe „Makromolekül- und Vielteilchenphysik“ (Institut für Physik, HUB)*, obwohl dort bearbeitete Themen wie „*Physik von Makromolekülen*“ in das Umfeld der „Grand Challenges“ gehören.

Einzelne der an der Universität Potsdam in der Chemie bearbeiteten Themenschwerpunkte könnten bei intensiver personeller Unterstützung durch das ZIB durchaus die Komplexität eines „Grand Challenge“-Projektes erreichen.

5.3 Meteorologie und Umweltwissenschaften

Die Bereiche Geowissenschaften, speziell Meteorologie, und Umweltwissenschaften sind in Berlin zwar an allen drei Universitäten vertreten, jedoch werden Großprojekte in der Größenordnung von „Grand-Challenges“ nur am Institut für Meteorologie der FUB durchgeführt.

Die *Arbeitsgruppe Stratosphärenforschung* von Prof. K. Labitzke untersucht Fragestellungen, die im Bereich der Klimaforschung angesiedelt sind.

Mit Hilfe von globalen 3-dimensionalen numerischen Prognosemodellen, in denen durch zeitliche Integration der diskretisierten Grundgleichungen die meteorologischen Variablen Wind, Temperatur, Feuchte, Bodendruck und Wolkenwasser prognostiziert werden, sollen Teilaspekte des heutigen Klimas und der zukünftigen Klimaentwicklung simuliert werden.

Je nach Art der Diskretisierung ergeben sich die aufwendigen Allgemeinen Zirkulationsmodelle, die als Klimamodelle eingesetzt werden, oder die einfacheren mechanistischen Modelle, die für Fallstudien verwendet werden. Die gegenwärtig eingesetzten Modelle sind das am Meteorologischen Institut der Freien Universität entwickelte Berliner Troposphären-Stratosphären-Mesosphären Zirkulationsmodell (engl. general circulation model, TSM GCM) und das Hamburger ECHAM4-Klimamodell sowie das mechanistische Modell STRATO.

Das im Rahmen des BMBF-Schwerpunktprogramms „Klimavariabilität und Signalanalyse“ geförderte Projekt „*Analyse der Klimavariabilität in der Stratosphäre und deren Auswirkungen auf die Troposphäre in Modellsimulationen und Beobachtungen*“ untersucht die natürliche und anthropogen verursachte Variabilität der Troposphäre und Stratosphäre.

In systematischen, vieljährigen Modellintegrationen soll herausgefunden werden, welcher Anteil einer möglichen Klimaveränderung auf einen anthropogenen Einfluß zurückgeführt und wieviel durch die natürliche Variabilität der Atmosphäre erklärt werden kann. Die besondere Rolle des stratosphärischen Ozons für das Klima ist Gegenstand des Vorhabens „*Modellierung*“

der Ozonvariabilität und ihres Einflusses auf die Struktur der Troposphäre und Stratosphäre (NOVA/MOVIES)“ im BMBF-Ozonforschungsprogramm. In Langzeitsimulationen soll untersucht werden, welche Faktoren für die beobachtete zeitliche und räumliche Variabilität des Ozons von Bedeutung sind, um so Rückschlüsse auf die zukünftige Entwicklung der Ozonschicht und die Auswirkungen von Ozonänderungen auf die Stratosphäre und Troposphäre treffen zu können. Ein Teil der aktuellen Modellsimulationen ist Bestandteil des von der EU geförderten Vorhabens *EuroGRIPS*. Ziele dieses Programms sind eine Bestandsaufnahme der gegenwärtigen Fähigkeiten von TSM GCM, bestimmte Aspekte der Zirkulation der mittleren Atmosphäre zu simulieren, ihre Sensitivität bezüglich physikalischer Parametrisierungen zu durchleuchten und die Bedeutung stratosphärischer Prozesse für die Klimatologie und Variabilität der Troposphäre zu untersuchen. In einem internationalen Modellvergleich, an dem die Arbeitsgruppe mit dem Berliner TSM GCM teilnimmt, sollen koordinierte Modellexperimente durchgeführt und gemeinsam ausgewertet werden.

Langzeitsimulationen erfordern bereits bei den jetzt verwendeten relativ groben Gitterauflösungen Rechnerressourcen und Speicherkapazitäten der höchsten Leistungsklasse. Die für genauere und verlässlichere Untersuchungen notwendigen feiner aufgelösten Modelle lassen sich mit den heute vorhandenen Rechnerressourcen nicht einsetzen.

Umfassende *Klimamodellierung* erfordert auch die verbesserte Modellierung der beteiligten physikalischen Prozesse und ihrer nichtlinearen Wechselwirkung untereinander. So müssen der Strahlungsaustausch und die chemischen Prozesse deutlich detaillierter berücksichtigt werden. Längerfristig müssen die reinen Atmosphärenmodelle zur umfassenderen Berücksichtigung der verschiedenen klimarelevanten Komponenten mit Ozean-, Eis und Vegetationsmodellen verknüpft werden. Dies erhöht aber die Rechneranforderungen um mehr als eine Größenordnung.

Der Bereich Meteorologie nimmt eine Spitzenstellung bei der Inanspruchnahme von Höchstleistungs-Rechenkapazität am ZIB ein. Mit den derzeit verfügbaren Rechnerkapazitäten können Simulationen nur mit Modellen durchgeführt werden, die viele Kompromisse bezüglich der atmosphärischen Physik enthalten. Die Grundlagen für Modelle der nächsten Generation sind jedoch vorhanden.

Der Ausbau des Standortes zu einem HPSC-Zentrum würde den Einsatz solcher Modelle ermöglichen und somit die Wettbewerbsfähigkeit der Klimaforschung in Berlin und ihre Zusammenarbeit mit Partneereinrichtungen (DKRZ Hamburg, PIK Potsdam, ECMWF Reading) fördern.

5.4 Computational Fluid Dynamics

In Berlin ist der Bereich Numerische Strömungsmechanik (CFD) an der TUB durch mehrere Arbeitsgruppen vertreten.

Die *Arbeitsgruppe Prof. F. Thiele* (Numerische Methoden der Thermofluidodynamik) ist in allen Bereichen der CFD aktiv. Schwerpunkte bilden u.a. die Entwicklung von modernen Finite-Volumen-Verfahren sowie die fortschrittliche Turbulenzmodellierung und ihre Anwendung auf komplexe Strömungen wie die um Flugzeuge.

Die *Arbeitsgruppe Prof. H. Nowacki* arbeitet in Verbindung mit der Versuchsanstalt für Wasserbau und Schiffbau der TUB an schiffs- und meerestechnischen Simulationen.

Die *Arbeitsgruppe Prof. G. Jegg* (Numerische Mathematik) ist beteiligt an der Entwicklung und Anwendung von Verfahren für Large-Eddy- und Direkte Numerische Simulation von turbulenten Strömungen.

Die drei Gruppen arbeiten u.a. in verschiedenen Schwerpunkten zusammen wie den universitären Forschungsschwerpunkten „*Steuerung und Kontrolle turbulenter Scherströmungen*“ und „*Fluid-Systemtechnik*“ und einer DFG Forschergruppe. Sie sind federführend beteiligt am beantragten DFG-Sonderforschungsbereich „*Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen*“. Daneben bestehen vielfältige Kooperationen mit Hochschulen, Forschungseinrichtungen und auch Industrien in und außerhalb Berlins.

Aus den Arbeiten kristallisieren sich zwei „Grand-Challenge-Projekte“ heraus: „*Grundlagenorientierte turbulente Strömungen*“ und „*Anwendungsorientierte technische Simulationen*“.

Turbulente Strömungen

Im Bereich der turbulenten Strömungen werden im Rahmen von Grundlagenuntersuchungen Grobstruktursimulationen (Large-Eddy-Simulationen, LES) oder Direkte Numerische Simulationen (DNS) von Innen- und Außenströmungen durchgeführt. Dazu werden die Navier-Stokes-Gleichungen (NaSt) in Raum und Zeit auf hochfeinen Gittern numerisch gelöst. Das Ziel der Untersuchungen sind möglichst genaue Simulationen mit wenig (LES) oder ganz ohne physikalische Turbulenzmodellierung (DNS). Je besser das Gitter die mikroskopisch kleinen physikalischen Strukturen auflösen kann, desto weniger Modellierung ist notwendig. Die Ergebnisse dienen unter anderem als Grundlage für die Arbeiten zur verbesserten Turbulenzmodellierung, mit deren Hilfe dann technisch/praktisch interessierende Strömungen ohne den enormen numerischen Aufwand von LES und DNS berechnet werden können.

Dieser Aufwand reicht bereits für einfachere Strömungen bei mittleren Reynolds-Zahlen weit in den Bereich von TFLOPS und TB hinein. Praktisch interessante Probleme, wie sie auch im beantragten SFB bearbeitet werden sollen, erfordern als Grand-Challenge-Probleme jedoch drastisch größere Leistungen, die nur mit zukünftigen Höchstleistungsrechnern der höchsten Ausbaustufe hinsichtlich Rechenleistung und Speicherkapazität erfolgreich angegangen werden können. Hierzu zählen Strömungen in komplexeren Geometrien mit aktiver oder passiver Strömungsbeeinflussung (Steuerung und Kontrolle der Strömung), z.B. für Widerstandsverminderung oder im Mischungsbereich von Verbrennungsströmungen.

Technische Simulationen

Im Anwendungsbereich wird CFD bereits als Arbeitsmittel für Problemlösungen eingesetzt.

Die Berechnung der Umströmung von Flugzeugen in verschiedenen Flugphasen und von Schiffen mit nichtlinearer Wellenbildung an der freien Oberfläche bei realistischen Strömungsbedingungen mit Hilfe der Reynolds-gemittelten NaSt-Gleichungen als Ersatz von Modellversuchen stellt allerdings Anforderungen an die Rechenleistung, die einen industriellen Einsatz für Entwurf und Produktion noch nicht zulassen. Dieser wird erst durch verbesserte Modellierungen und Fortschritte in der Algorithmenentwicklung, insbesondere für Parallelrechner ermöglicht werden.

Die Arbeitsgruppe Thiele ist hier im Verbundvorhaben „MEGAFLOW“ an der Entwicklung parallelisierter NaSt-Löser für zukünftige industrielle Strömungsberechnungen um Flugzeugkomponenten maßgeblich beteiligt, wobei der leichte Zugang zu Höchstleistungsrechenkapazität Voraussetzung für eine erfolgreiche Antragstellung war. MEGAFLOW ist ein Projekt des BMBF mit Beteiligung der Industrie (DASA-Airbus), der DLR und der Hochschulen in Berlin, Braunschweig, Darmstadt und München.

Der dort entwickelte nationale Strömungscode „FLOWer“ ist in den letzten Monaten am ZIB erfolgreich auf die T3E-Architektur portiert und optimiert worden. FLOWer ist gegenwärtig in der Validierungsphase zur Berechnung von einzelnen Flugzeugkomponenten (Tragflügel/

Rumpf/Triebwerk) im Reiseflug. Der erfolgreiche Einsatz für Entwurfs- und Optimierungsarbeiten an größeren Flugzeugkomponenten oder ganzen Flugzeugen auch bei schwierigen Flugbedingungen erfordert auch weiterhin den Zugang zu Rechenleistung der jeweils höchsten Leistungsklasse. Dies gilt auch für die Prognosen für die Großausführung von Schiffen bei realistischen Reynoldszahlen mit Hilfe von CFD-Verfahren, für die zunächst noch systematische Validierungsrechnungen erforderlich sind.

Der Bereich CFD nimmt bereits jetzt eine Spitzenstellung bei der Inanspruchnahme von Höchstleistungs-Rechenkapazität am ZIB ein. Der Ausbau des Rechners im ZIB zu einem Parallelrechner der Spitzenklasse würde die Attraktivität der Region sowohl für die Forschung als auch für die Industrie erhöhen und deutlich mehr gemeinsame Entwicklungsprojekte ermöglichen. Erste Anfragen industrieller Unternehmen (BMW/Rolls Royce) liegen vor, die Chancen für eine wissenschaftlich und wirtschaftlich relevante Zusammenarbeit sind zur Zeit noch nicht abschätzbar.

6. Anforderungen an den Rechnerausbau aus Sicht der Berliner Großprojekte

Das ZIB hat über einen Zeitraum von etwa zwei Jahren den leistungsstärksten Parallelrechner in Deutschland betrieben und dabei eine hervorragende Benutzerakzeptanz [1] gefunden. Nicht zuletzt Dank der finanziellen Hilfe durch den Bund und das Land Berlin wurde seitdem die Gesamtkapazität der Konfiguration erheblich ausgebaut:

	Konfiguration 1994	Konfiguration 1997
Peak-Performance	etwa 30 GLOPS	etwa 160 GFLOPS
Hauptspeicher	etwa 20 GB	etwa 40 GB
Hintergrundspeicher	etwa 200 GB	etwa 500 GB
Archivspeicher	etwa 18 TB Gesamtkapazität	etwa 100 TB (nutzbar bis etwa 600 TB)

Nach Installation der Höchstleistungsrechner in Jülich, Stuttgart, Garching (MPG) und München (LRZ) hat die Konfiguration im ZIB ihre Spitzenstellung in Deutschland verloren und rangiert jetzt in den einschlägigen Tabellen auf Platz vier oder fünf. Die derzeit stärksten Einzelmaschinen in Deutschland (Cray T3E in Jülich und Stuttgart) übertreffen den (dazu kompatiblen) Parallelrechner im ZIB allerdings um weniger als einen Faktor vier hinsichtlich Speicherausbau und CPU-Leistung. Für die gegenwärtig auf den Rechnern des ZIB bearbeiteten Probleme existieren also inzwischen mehrere Ausweichmöglichkeiten für Benutzer mit aus ihrer Sicht unzureichenden Rechenkottingenten. Die neu hinzugekommenen Höchstleistungsrechner sind somit eine wichtige *quantitative* Verbesserung der Versorgungsstruktur, können aber wohl kaum als neue technische *Qualität* bezeichnet werden. Zwar übertrifft der bezüglich des Hauptspeicherausbaus größte Rechner Deutschlands (in Karlsruhe) mit etwa 130 GB den T3E des ZIB erheblich und stellt damit eine neue Qualität zur Bearbeitung komplexer Probleme dar, aber dieser Rechner ist in der Regel nicht für die Benutzer des ZIB verfügbar.

Alle beschriebenen großen Anwendungsgebiete benötigen in der nahen Zukunft Rechensysteme zu ihrer Bearbeitung, deren Leistung - bezogen auf die vom einzelnen Programm nutzbare Rechenleistung - um einen Faktor 20 bis 40 über der des im ZIB installierten Parallelrechners Cray T3E-900 mit 152 Prozessoren liegt. Nach dem heutigen Stand der Hardware- und Softwaretechnik und ihrer für die nächsten zwei Jahre zu erwartenden Fortschritte entspräche dies einem System mit einer *Spitzenleistung (Peak-Performance)* von etwa zwei TFLOPS und einem *Hauptspeicher* von etwa zwei TB. Die Schätzung des durch die Verfeinerung der Modelle höheren Speicherbedarfs ist dabei besonders unsicher. Aus Sicht der Informationstechnik betrachtet man Systeme mit einem Hauptspeicher von je einem GB für jeweils ein GFLOP Peak-Performance als ausgewogen. Es versteht sich von selbst, daß die I/O-Leistung ebenfalls in einem ausgewogenen Verhältnis zur Rechenleistung stehen muß.

Es sei ausdrücklich betont, daß diese Einschätzung aus Sicht der derzeit am Parallelrechner des ZIB laufenden Projekte und der erwähnten Arbeitsgruppen gegeben ist. Nach wie vor wird man für zahlreiche Probleme sinnvollerweise Vektorrechner der höchsten Leistungskategorie einsetzen müssen. Hierfür hat sich in der Vergangenheit die Zusammenarbeit im Norddeutschen Vektorrechnerverbund bewährt. Der künftige verteilte Höchstleistungsrechner Nord (HLRN) soll sowohl eine Vektorrechnerkomponente als auch eine Parallelrechnerkomponente der jeweils höchsten Leistungsstufe enthalten. Am ZIB wird auch künftig ein kleinerer Vektorrechner betrieben werden.

7. Liste der Großprojekte (Stand September 1997)

Die in der folgenden Tabelle aufgeführten Projekte wurden vom Zulassungsausschuß positiv begutachtet und für die Parallelrechner des ZIB zugelassen. Ein Teil dieser Projekte benutzt zusätzlich Vektorrechnerkapazität im ZIB oder in den Rechenzentren der Partner des ZIB im Norddeutschen Vektorrechnerverbund. Auf den Parallelrechnern des ZIB nehmen die aufgeführten Projekte mehr als 93 % der Gesamtkapazität in Anspruch. Die restliche Kapazität der Parallelrechner (weniger als 7 %) wird von Projekten aus Niedersachsen und Schleswig-Holstein bzw. zur Vorbereitung von Großprojekten verbraucht.

Kennung	Projektleiter	Institution	Projekttitle
bvbf01	Dr. Werner Backhaus	Theoretische und Experimentelle Biologie der Freien Universität Berlin	Physiologische Simulation der Koevolution von Farbsehsystemen von Insekten und Reflexionseigenschaften von Blüten.
bvcf02	Prof. Dr. Jörn Manz	Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Freien Universität Berlin	Theorie der Dynamik und Spektroskopie kleiner atomarer und molekularer Aggregate.
bvch03	Prof. Dr. V. Bonacic-Koutecky	Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin	Eigenschaften von Element-Clustern.
bvch05	Prof. Dr. Joachim Sauer	Arbeitsgruppe Quantenchemie an der Humboldt-Universität zu Berlin	Ab-initio Molekulardynamik.
bvct13	Dr. Hendrik Zipse	Institut für Organische Chemie der Technischen Universität Berlin	Reaktive Solvation von Radikal-Ionen.
bvit03	Prof. Dr. F. Thiele	Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik der Technischen Universität Berlin	Beeinflussung stark gestörter Grenzschichten durch die Turbulenzstruktur der Außenströmung. (Simulation mit LES und DNS)
bvit05	Prof. Dr. F. Thiele	Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik der Technischen Universität Berlin	Large Eddy Simulation abgelöster Stufenströmungen mit dreidimensionaler Anregung.
bvit06	Prof. Dr. Hansgeorg Jeggle	Institut für Mathematik der Technischen Universität Berlin	Beeinflussung der turbulenten Strömung hinter einer Stufe: Berechnung der Strukturen mittels Large-Eddy-Simulation.
bvkf01	Prof. Dr. Karin Labitzke	Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin	Diagnose der Stratosphäre im Winter.
bvkf05	Dr. E. Reimer	Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin	Entwicklung und Evaluierung eines fortschrittlichen Ausbreitungsmodells.
bvkf07	Dipl.-Met. Bernhard Scherer	Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin	Ozonprognosen für BERLIOZ.
bvpf01	Dr. Christian Holm	Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin	Spin Modelle auf Regge Gittern.

Kennung	Projektleiter	Institution	Projekttitle
bvpf09	Prof. Dr. Volkhard Linke	Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin	Untersuchung der QCD mit verbesserten Wirkungen.
bvpf11	Dipl.-Phys. Axel Thimm	Institut für Physik der Freien Universität Berlin	Vorbereitende Untersuchungen chiraler Eichtheorien.
bvpf12	Dr. Martin Garcia	Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin	Lagerinduzierte strukturelle Transformationen in Halbleitern.
bvph03	Prof. Dr. M. Müller-Preußker	Institut für Theoretische Physik der Humboldt-Universität zu Berlin	The Study of the Chiral Limit in the Compact Lattice QED with dynamical and quenched Wilson Fermions.
bvph04	Prof. Dr. M. Müller-Preußker	Institut für Theoretische Physik der Humboldt-Universität zu Berlin	Gitter-QCD mit Wilson-Fermionen auf dem T3D.
bvpm01	Dr. Wolfhard Janke	Institut für Physik der Universität Mainz (früher FU Berlin)	Dynamisches Verhalten von Spingläsern.
bvpp03	Prof. Dr. Edward Seidel	Albert Einstein Institut für Gravitationsphysik der Max-Planck-Gesellschaft	Computational Relativity and Relativistic Astrophysics.
bvpt01	Prof. Dr. Erwin Sedlmayr	Institut für Astronomie und Astrophysik der Technischen Universität Berlin	Staubbildung in langperiodischen Veränderlichen und Mira-Variablen.
bvpt04	Prof. Dr. Siegfried Hess	Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin	Nichtgleichgewichtseigenschaften von Fluiden (NEMD Simulationen).
bvpt07	Prof. Dr. Siegfried Hess	Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin	Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik-Computersimulationen zur Untersuchung von Dehnströmungen von Polymeren.
bvpt10	Prof. Dr. Udo Scherz	Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin	Berechnung von Störstellen in Breitbandhalbleitern.
bvpz01	Prof. Dr. F. Jegerlehner	DESY-IfH Zeuthen	Quantenchromodynamik auf dem Gitter mit dynamischen Fermionen: Flavorabhängigkeit des QCD Phasendiagramms.

8. Literaturhinweise

- [1] Berliner Landeshöchstleistungsrechner: Erfahrungen mit dem Parallelrechner Cray T3D SC192/464-8; Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin. 1995
- [2] Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität; Wissenschaftsrat, Drs.2104/95, Kiel, 7.7.1995
- [3] Peter Deuffhard, Jürgen Gottschewski: Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB). Struktur, wissenschaftliches Konzept und Einbettung in die Region. TR 95-12, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin 1995. URL: <http://www.zib.de/PaperWeb/abstracts/TR-95-12/>
- [4] „High Performance Computing and Communications: Foundation for America's Information Future“, High Performance Computing, Communications and Information Technology. (HPCCIT) Subcommittee of the National Science and Technology Council's Committee on Information and Communications (CIC), Supplement to the President's FY 1996 Budget. URL: <http://www.ccic.gov/pubs/blue96/index.html>
- [5] Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie: „Richtlinien über die Förderung von Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der naturwissenschaftlichen Grundlagenforschung: Erforschung der kondensierten Materie“; 11.2.1997.
URL: <http://www.bmbf.de/foerderprog/foerder97/materie.htm>
- [6] COST: Europäische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der wissenschaftlichen und technischen Forschung. URL: <http://www.kp.dlr.de/COST/cost.html>
- [7] European Science Foundation. URL: <http://www.esf.c-strasbourg.fr/>
- [8] J. Manz, G. K. Paramonov, M. Polasek, C. Schütte: Isr. J. Chem. 34 (1994) 115
- [9] HUB, FUB, Max-Delbrück-Centrum (MDC, Berlin-Buch), MPI für Molekulare Genetik (Dahlem): Graduiertenkolleg der DFG „Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse“
- [10] CPMD Version 3.0: J. Hutter, P. Ballone, M. Bernasconi, P. Focher, E. Fois, St. Goedecker, M. Parinello, M. Tuckerman; MPI für Festkörperforschung Stuttgart und IBM Research 1990-1996