



Hintergrundinformation: Supercomputer (Stand Juni 2007)

Simulationen mit Supercomputern haben sich zum dritten Standbein der Forschung entwickelt – neben Theorie und Experiment – und sind unverzichtbar geworden für Forschung und Entwicklung und insbesondere fachübergreifende Fragestellungen.

Supercomputer ergänzen die Grundlagenforschung auf ideale Weise.

In Deutschland und Europa wird der Bedarf an Rechenzeit in den kommenden fünf Jahren mehr als tausendfach ansteigen. Deshalb müssen die Kapazitäten der Supercomputer weiterhin massiv ausgebaut werden.

Supercomputer wie zum Beispiel JUBL (Jülicher Blue Gene /L) gelten als Schlüssel zu grundlegenden Erkenntnissen in Biologie, Chemie, Physik und Klimaforschung und werden Materialwissenschaftlern, Nanotechnologen und Energieforschern Wege zu völlig neuen Anwendungen eröffnen.

In Jülich wird ein duales Zukunftskonzept verfolgt. Neben der Höchstleistungsmaschine JUBL steht der Supercomputer JUMP zur Verfügung. Da Programme und Anwendungen mit größtem Rechenbedarf auf JUBL gerechnet werden, haben die Nutzer mehr Platz, um mit JUMP ihre datenintensiven Probleme zu rechnen.

Viel Wert wird in Jülich auf die Ausbildung an den für den Erkenntnisgewinn wertvollen, aber auch anspruchsvollen Maschinen gelegt. Fort- und Weiterbildungen werden ebenso angeboten wie ab 2007 ein Master-Studiengang „Simulation Science“. Des Weiteren steht dem Nutzer ein Team aus Technikern, Programmierexperten sowie Wissenschaftlern als Ansprechpartner zur Verfügung.

Mehr als 200 europäische Forschergruppen nutzen die Rechenkapazität im Forschungszentrum Jülich. Ob Klimaforschung oder Biophysik, ob Materialwissenschaften oder Bioinformatik: Viele Rechnungen und Softwarewerkzeuge für Wissenschaft und Anwendung sind „made in Jülich“.

Beispiele für Rechnungen auf dem Jülicher Supercomputer:

- **Strömungen/Transporte/Bewegung in großen Systemen:**
Schadstoffe im Boden, Magma im Erdinneren (Plattentektonik und Erdmagnetfeld), Atmosphäre (Ozonloch, Schadstofftransport)
- **Komplexe Kräfte zwischen vielen Teilchen:**
Astrophysik (Supernova, Galaxien- und Sternbildung,...), Materialwissenschaften (Polymere in Lösung, Laserbeschuss von Proben – wichtig für die Entwicklung von kompakten Teilchenbeschleunigern für Fusion oder Tumorbehandlung)
- **Biologische Vorgänge:**
Proteinfaltung (wichtig für das Verständnis von biologischen Prozessen und die Medikamentenentwicklung)



Durch sein einmaliges Profil bietet sich das Forschungszentrum Jülich als idealer Standort eines europäischen Höchstleistungsrechenzentrums an, wie es im 7. Forschungs-Rahmenprogramm der EU ab 2009 eingerichtet werden soll.

JUBL ist (am 27. Juni 2007)...

... der zweitschnellste Rechner Deutschlands

... der 4. schnellste Rechner Europas

... der 18. schnellste Rechner der Welt

... steht der freien Forschung zur Verfügung. Viele andere Supercomputer sind hingegen an Militärforschung oder Universitäten gebunden. Bei JUBL kann prinzipiell jeder Wissenschaftler über ein peer-review-Verfahren Rechenzeit bekommen.

Im Herbst 2007 soll der Nachfolger von JUBL mit rund 220 Teraflops installiert werden und die Spitzenposition in Europa übernehmen.

John von Neumann-Institut für Computing im Forschungszentrum Jülich (NIC)

Das NIC betreibt Großgeräte für Supercomputing an der Spitze des technisch Möglichen. Es stellt Supercomputerkapazität für Wissenschaft und Forschung sowie für Industrie- und Dienstleistungsbereiche in Deutschland und Europa bereit. 1998 vom Forschungszentrum Jülich und dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren gegründet, fußt es auf der Erfahrung des ersten nationalen Rechenzentrums, das 1987 in Jülich entstand. Seine Aufgaben sind nicht nur das Höchstleistungsrechnen und die bedarfsorientierte Evaluierung künftiger Computerarchitekturen. Besonderer Wert liegt auf der Unterstützung von Anwendern und auf der Aus- und Weiterbildung im wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnen – ein deutschlandweit einmaliges Angebot.

Im **Gauss Centre for Supercomputing** bündeln die drei deutschen Höchstleistungszentren in Garching, Jülich und Stuttgart seit diesem Jahr ihre Kompetenzen. Sie versorgen die computergestützten Wissenschaften in Deutschland mit ausreichender Rechenzeit. Insbesondere auf internationaler Ebene und in PACE vertritt GAUSS die deutschen Interessen. Die Computer des Gauss Centre stellen über 90 Teraflops Rechenleistung bereit und machen es zu Europas größtem Rechenzentrum. Bis zum Jahr 2009 soll die Gesamtleistung des Gauss Centre auf weit über 1000 Teraflops (1 Petaflops) anwachsen. Daneben schreiben die rund 250 Mitarbeiter die methodisch orientierte Benutzerunterstützung beim Gauss Centre groß. Abgestimmte Schulungen und Tagungen für Simulationstechniken sollen die Fachwissenschaftler in ihrer Arbeit unterstützen und ihre Forschung beschleunigen

Rechenzentren aus 16 europäischen Staaten haben sich im Verbund **PACE - Partnership for Advanced Computing in Europe** organisiert. PACE wird aufbauend auf bisheriger Zusammenarbeit innerhalb der kommenden zweieinhalb Jahre konkrete Vorschläge machen und diese auch sukzessive umsetzen. Die



Vorbereitungsphase soll transparente, Grenzen überschreitende und weltweit wettbewerbsfähige Organisationsstrukturen für das wissenschaftliche Rechnen in Europa schaffen und klare Vorgaben für die benötigte Hardware an verschiedenen Standorten machen. Im Anschluss will PACE Forschern in Europa als zentraler Ansprechpartner für ihren Rechenbedarf dienen. Ein möglichst einfacher Zugang über ein peer-review Verfahren soll wissenschaftliche Exzellenz fördern.

Zunächst (2. Mai 07) wird sich PACE als Konsortium um die Durchführung der Vorbereitungsphase bewerben und im Erfolgsfall einen *conceptual design report* erarbeiten. Konkrete Anschaffungen folgen aus diesen Test- und Vorarbeiten. Deutschland übernimmt die Rolle des Konsortialführers.

Vorstufen der Zusammenarbeit der Europäischen Rechenzentren, die nun zu PACE führt, waren HPCEUR, DEISA und HET.

Der Expertenrate **ESFRI - European Strategy Forum for Research**

Infrastructures, berät die Europäische Kommission bei wichtigen europäischen Forschungsinvestitionen. In seinem im Herbst 2006 übergebenen Bericht schlägt er vor, eine ganze Infrastruktur von Supercomputern der höchsten Leistungsstufe zu bauen, und die notwendigen finanziellen Mittel im Bereich von mehrerer hundert Millionen Euro bereitzustellen. Der Expertenrat rechnet mit Investitionskosten von bis zu 400 Millionen Euro und jährlichen laufenden Kosten von 100 bis 200 Millionen Euro. ESFRI warnt davor eine Querschnittstechnologie wie das wissenschaftliche Rechnen mit Supercomputern zu vernachlässigen. Die europäische Forschungslandschaft müsse an den schnell wachsenden Möglichkeiten der Computerwissenschaften teilhaben, um eine Spitzenposition zu halten.

Um den Plänen von ESFRI und der Europäischen Kommission gerecht zu werden, werden Rechenkapazitäten auf allen Ebenen gebraucht, die zusammen eine **Leistungs-Pyramide** bilden. An der Spitze sollen vier Hochleistungsrechner der Petaflops-Klasse stehen, die teilweise durch die Europäische Gemeinschaft innerhalb des 7. Forschungsrahmenprogrammes finanziert werden. In der Mitte der Pyramide soll es einige nationale und regionale Supercomputer geben, die die Rechenlast unterhalb der Petaflops-Schwelle aufnehmen. Die Basis der Pyramide bilden lokale Supercomputer auf die den Wissenschaftlern direkt zur Verfügung stehen, unter anderem auch für Lehre und Ausbildung.

Kontakt:

Kosta Schinarakis, Wissenschaftsjournalist, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

Tel. 02461 61-4771, Fax 02461 61-4666, E-Mail: k.schinarakis@fz-juelich.de

Dr. Angela Lindner, Leiterin Öffentlichkeitsarbeit, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

Tel. 02461 61-4661, Fax 02461 61-4666, E-Mail: a.lindner@fz-juelich.de