

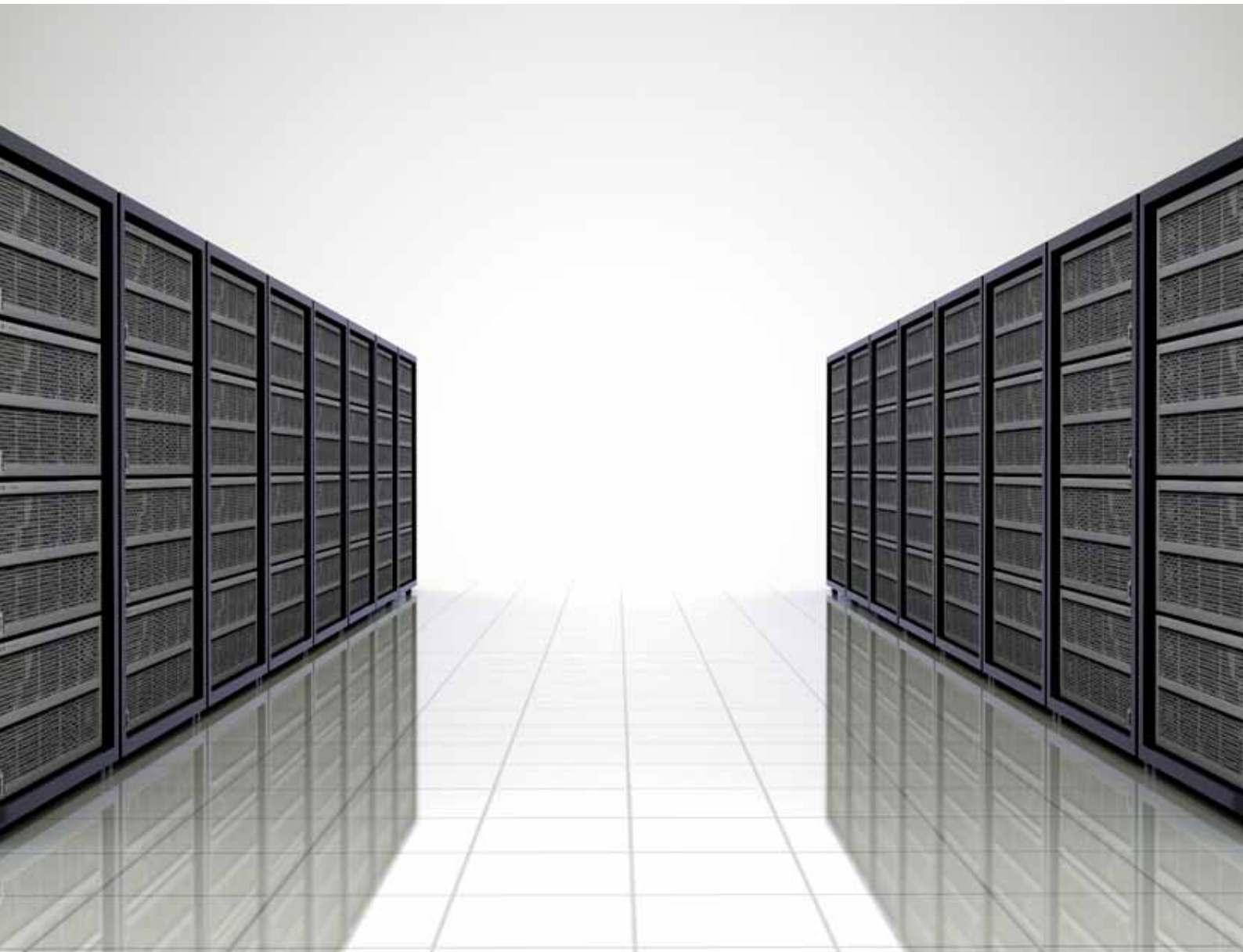


Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

iDEEN  
INNOVATION  
WACHSTUM  
Die Hightech-Strategie für Deutschland

# Die Säulen des Supercomputing

**Höchstleistungsrechnen gibt Antworten auf  
schwierigste Fragen unserer Zeit**



HIGHTECH-STRATEGIE

Ideen zünden!

## **Impressum**

### **Herausgeber**

### **Bestellungen**

schriftlich an den Herausgeber  
Postfach 30 02 35  
53182 Bonn

oder per

Tel.: 01805 - 262 302

Fax: 01805 - 262 303

(0,14 Euro/Min. aus dem deutschen Festnetz  
höchstens 0,42 Euro/Min. aus Mobilfunknetzen)

E-Mail: [books@bmbf.bund.de](mailto:books@bmbf.bund.de)

Internet: <http://www.bmbf.de>

### **Redaktion und Gestaltung**

Alexander Gerber, Denis Hartmann  
SGM Solutions & Global Media GmbH  
Friedrichstr. 60  
10117 Berlin

### **Druck**

Printservice J. Roewer

### **Bonn, Berlin 2011**

### **Bildnachweis**

istockphoto (Titelbild, 7, 8, 20, 25, 26, 28), BMBF (4), Forschungszentrum Jülich (9, 14), Privat (10, 14, 16, 17, 18, 19, 28), Christoph Rehbach (10), Kai Hamann/gsiCom (12), EADS (13), D-Grid gGmbH (14, 16), CERN (15), Bosch (21), STEDG / GRS (21), HLRS (23), CFX Berlin (27)



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

iDEEN  
INNOVATION  
WACHSTUM  
Die Hightech-Strategie für Deutschland

# Die Säulen des Supercomputing

**Höchstleistungsrechnen gibt Antworten auf  
schwierigste Fragen unserer Zeit**

## Vorwort



Veränderung des Klimas, demographischer Wandel, Ausbau der Mobilität, große Sicherheit – diese Begriffe stehen für die wichtigen gesellschaftlichen Herausforderungen unserer Zeit. Um sie zu meistern, brauchen wir auch in Zukunft gute Bildung und innovative Forschung. So kommen wir zu positiven Entwicklungen, so setzen wir unsere Ziele um, so sichern wir Wachstum und Wohlstand.

Um die gegenwärtigen Menschheitsaufgaben nachhaltig zu lösen, brauchen wir in der Forschung neben Theorien und Experimenten ausgefeilte Simulationen mit leistungsstarken Supercomputern. Sie ermöglichen Bahnbrechendes gerade in Bereichen, in denen Deutschland seine Stärken besitzt – im Automobilbau, in der Medizintechnik und in der Grundlagenforschung. Mit ihren Berechnungen legen die Computer die Grundlagen für neue Produkte, Verfahren und Dienstleistungen. Und sie sind Hightech-Werkzeuge, die beim Wettbewerb um Fachkräfte anziehend wirken. Wir brauchen das Know-how der Experten in Deutschland, damit wir auch in Zukunft weltweit konkurrenzfähig bleiben. Gleichzeitig müssen wir noch mehr berücksichtigen, worauf die Anwender Wert legen.

In unserer Forschungspolitik messen wir Supercomputern eine zentrale Bedeutung bei. Gemeinsam mit den Ländern Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen haben wir 2008 begonnen, das nationale Höchstleistungsrechenzentrum „Gauss Centre for Supercomputing“ international konkurrenzfähig zu erweitern. Dieser Ausbau wird in den nächsten Jahren kontinuierlich fortgeführt: Supercomputer werden für weitere Nutzer erschlossen – durch bessere Vernetzung, also durch „Grid- and Cloud-Computing“. Dabei haben wir sowohl die Spitzenforschung als auch die Anwender in der Industrie im Blick. Insbesondere Hightech-orientierten KMU wollen wir mit vernetzten Supercomputern den Zugang zu hoher Rechenleistung bahnen. Denn der Mittelstand ist unser Wachstumsmotor Nummer eins.

Diese Broschüre stellt die vielfältigen Fördermöglichkeiten vor, um neuen Fragen nachzugehen und weitere Anwendungen zu erschließen. Ich wünsche allen Leserinnen und Lesern eine spannende Lektüre und zahlreiche Anstöße für nutzbringende Ideen.

Prof. Dr. Annette Schavan, MdB  
Bundesministerin für Bildung und Forschung

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b> .....	4
<b>Einleitung: Nervensystem der Spitzenforschung</b> .....	6
<b>Supercomputing braucht Strukturen</b> .....	8
<b>Gauss Centre for Supercomputing (GCS): Koordination der höchsten Ebene</b> .....	9
<b>Gauß-Allianz: Mit vereinter (Rechen-)Kraft</b> .....	12
<b>D-Grid-Initiative: Wissenschaft und Industrie vernetzt</b> .....	15
<b>PRACE und EGI: Europa rechnet mit den Besten</b> .....	18
<b>Anwendungsbeispiele aus der Praxis</b> .....	20
<b>Software für High Performance Computing: Höchstleistung braucht smarte Steuerung</b> .....	21
<b>Kollaboration im Grid: Arbeit und Forschung im „Team Deutschland“</b> .....	25
<b>Cloud im Finanzwesen: Grid und Cloud reduzieren Finanzmarktrisiken</b> .....	28
<b>Ausblick: Erfolg ist erst der Anfang</b> .....	29

# Einleitung

## Nervensystem der Spitzenforschung

Was wäre, wenn man das menschliche Gehirn so gut verstünde, dass sich Volkskrankheiten wie Depression, Alzheimer oder Autismus endlich wirksam behandeln oder gar verhindern ließen? Die hierfür nötigen Antworten könnte ein Computermodell liefern, das zig Milliarden Neuronen und hunderte Trilliarden von Synapsen (eine Trilliarde ist eine Eins mit 21 Nullen) in unserem Kopf realitätsnah simuliert, ganz so wie es der wohl weltweit meistzitierte Zukunftsforscher Ray Kurzweil schon vor fünf Jahren in seinem Buch zur „Singularität“ skizzierte. Auch wenn die für eine solche Simulation nötige Rechenkapazität geradezu gigantisch wäre: Forscher halten einen solchen Supercomputer für möglich, vielleicht sogar noch in diesem Jahrzehnt.

Man muss aber gar nicht weit in die Zukunft blicken, um zu sehen, wie das so genannte Höchstleistungsrechnen schon heute Zukunft gestaltet. Mit unseren Schreibtisch-PCs hat dieses „High Performance Computing“ (HPC) nur noch wenig zu tun. Die Rechenleistung eines „Petaflop-Rechners“ zum Beispiel ist vergleichbar mit drei Fußballstadien voll fleißiger Menschen, die alle gleichzeitig mit untereinander vernetzten Laptops auf den Knien an ein und demselben Problem arbeiten. Ein Petaflop steht für eine Billiarde Rechenoperationen pro Sekunde. Tagtäglich finden Forschung und Industrie mit solchen Supercomputern Antworten auf die komplexesten Fragen – von der alles andere als trivialen Vorhersage unseres Wetters oder der noch weitaus komplexeren Simulation des gesamten Weltklimas über die Entwicklung neuer Wirkstoffe für Medikamente bis zur Förderung der Energieeffizienz durch Berechnung des geringsten Luftwiderstands bei einem neuen Flugzeugrumpf oder der Sauerstoffzufuhr in einem Kohlekraftwerk.

Es geht also um weit mehr als nur um den rein technischen Fortschritt. Ganz wie in der Hightech-Strategie der Bundesregierung formuliert, sind die größten Herausforderungen nicht allein technisch zu betrachten: Die großen Fragen zur Zukunft von Klima und Energie, Gesundheit und Ernährung, Mobilität, Sicherheit und Kommunikation zu beantworten, ist allem voran eine gesellschaftliche Aufgabe.

Auf all diesen Gebieten hat das Höchstleistungsrechnen nicht zuletzt auch die Art des Forschens selbst revolutioniert, denn neben die beiden klassischen Erkenntnismethoden des Experiments und der Theoriebildung ist längst die Simulation als dritte und oft sogar zentrale Säule der Wissenschaft hinzugekommen. Neue interdisziplinäre, virtuelle Forschungsstrukturen werden möglich durch die gemeinsame Nutzung von bundesweit verteilten Rechen- und Speicherkapazitäten „on demand“ im so genannten Grid, das die vielen einzelnen Systeme so miteinander verknüpft, dass diese von jedem Standort aus so einfach genutzt werden können wie Strom aus der Steckdose. Eines der anschaulichsten Beispiele für die globale Vernetzung von Forschungskapazitäten ist die Verknüpfung Hundertter Partner bei der weltweiten Klimasimulation des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), um Risiken der Erderwärmung mit belastbaren Modellen beschreiben zu können.

In der Industrie wird das „Grid-Computing“ (die Vernetzung geografisch verteilter Ressourcen, wie Rechner, Daten oder wissenschaftlicher Großgeräte) vor allem für technologieorientierte kleine und mittlere Unternehmen (KMU) immer relevanter, denn dort ist die hauseigene IT zunehmend seltener in der Lage, die rasant wachsenden Anforderungen der Simulationsprogramme schnell erfüllen zu können. Wo große Investitionen nicht möglich oder nicht wirtschaftlich sind, bietet das Grid den KMU die Chance, im Wettbewerb mit großen Konzernen auch in IT-Hinsicht auf Augenhöhe zu agieren. Im Vergleich zum viel zitierten „Cloud-Computing“ bietet das Grid keine Ressourcen „von der Stange“, sondern maßgeschneiderte, anwenderspezifische IT-Lösungen. Man könnte sagen, dass das Grid-Computing eine der Grundlagen oder zumindest Entwicklungslinie der „Cloud“ ist.

### Supercomputing in Deutschland

Die deutsche Führungsposition im europäischen Supercomputing basiert vor allem auf den vom BMBF in den vergangenen Jahren initiierten institutsübergreifenden Strukturen. Neben dem 2007 geschaffenen Zusammenschluss der drei deutschen Höchstleistungsrechenzentren zum „Gauss Centre for Supercomputing“ (GCS) in der höchsten Leistungsklasse ist dies im zweiten Schritt der 2008 gegründete und bis heute weltweit einzigartige Verbund aller führenden Zentren des Supercomputings in Deutschland zur „Gauß-Allianz“.

Bereits 2004 startete das BMBF mit dem „D-Grid“ eine Initiative, der heute neben fast 100 Forschungseinrichtungen auch mehr als 100 Unternehmen verschiedenster Branchen angehören, die sich für eine praktische Erprobung und Umsetzung von Grid-Technologien einsetzen. Die deutsche Grid-Initiative ist damit sogar zur Keimzelle europäischer Grid-Initiativen geworden. Gemeinsame europäische Aktivitäten sind allein deshalb schon von großer Bedeutung, um in einer Liga mit USA und Japan spielen zu können.

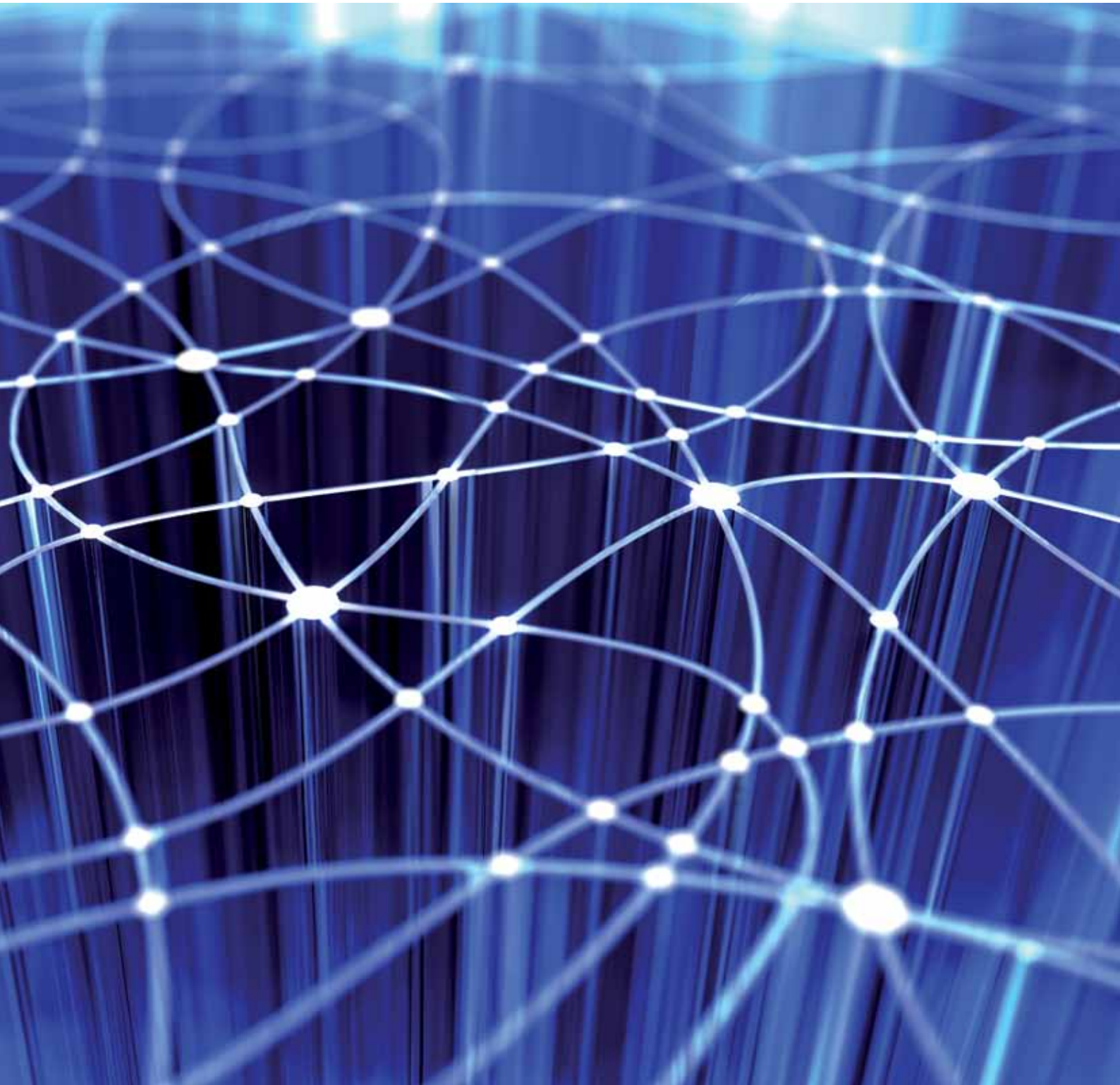
Obwohl die Rechenleistung kontinuierlich wächst, stoßen Wissenschaftler und Entwickler unterschiedlichster Disziplinen und Branchen immer wieder an die Grenzen der Technik. Der Teilchenbeschleuniger Large Hadron Collider (LHC) zum Beispiel liefert bis zu einem Gigabyte Daten pro Sekunde, die verteilt und verarbeitet werden müssen. Längst ist das Supercomputing daher eine Grundvoraussetzung dafür, dass der wissenschaftlich-technische Fortschritt nicht ins Stocken gerät. Weitere Leistungssteigerungen werden zudem künftig weniger durch immer schnellere Hardware, sondern mehr durch immer ausgefeiltere Software erfolgen. Das ist auch dringend nötig, denn die Architekturen künftiger Rechner werden weit aus komplizierter sein und ein umso „smarteres Handling“ durch Software erfordern. Gerade in diesen Bereich sieht das BMBF deshalb auch einen Schwerpunkt seiner Förderung.

Für die größten Herausforderungen – etwa die anfangs diskutierte Simulation des Gehirns – wird übrigens schon heute an der nächsten Generation der Supercomputer gebaut. Ein solcher „Exaflop“-Rechner, wie ihn die Forscher noch vor Ende dieses Jahrzehnts in Betrieb nehmen wollen, entspräche dann nicht mehr drei, sondern 3.000 voll besetzten Fußballstadien.



Ähnlich wie bei der Entstehung eines Gedankes im Gehirn durch das Zusammenspiel von Millionen von Synapsen lassen sich auch beim Supercomputing durch die Vernetzung unterschiedlichster Ressourcen die komplexesten Fragestellungen lösen, die einzelne Computer schon lange nicht mehr allein bewältigen können.

## Supercomputing braucht Strukturen



## Gauss Centre for Supercomputing (GCS) Koordination der höchsten Ebene

**Mit dem Zusammenschluss der drei deutschen Höchstleistungsrechenzentren zum Gauss Centre for Supercomputing (GCS) wurde die größte und leistungsfähigste Plattform für hochkomplexe Simulationen in Europa geschaffen. Oberstes Ziel des GCS ist die Versorgung der computergestützten Wissenschaften mit Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse. Zudem soll das wissenschaftliche Höchstleistungsrechnen in Deutschland und Europa vorangebracht werden.**

Neben Theorie und Experiment hat sich die Simulation längst zur dritten Säule der Wissenschaft entwickelt. Darüber hinaus trägt sie nicht nur dazu bei, die Wettbewerbs- und Innovationsfähigkeit Deutschlands zu erhalten, sondern ist zu einer wesentlichen Voraussetzung geworden, die großen gesellschaftlichen Herausforderungen zu meistern. Mit diesem Anspruch steigt allerdings auch die Zahl der so genannten „Grand Challenges“, also der Aufgaben, für die wegen der grossen Problem- und Modellanforderungen ein Einsatz von Rechen-systemen höchster Leistungsfähigkeit notwendig ist. Mit drei nationalen Höchstleistungszentren in Garching bei München, Stuttgart und Jülich können zwar bereits seit einigen Jahren entsprechende Kapazitäten zur Verfügung gestellt werden; Aufbau und Betrieb dieser Zentren erfordern allerdings ein hohes Maß an Wissen, Erfahrung und finanziellem Einsatz. Aus diesem Grund haben sich das High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS), das Jülich Supercomputing Centre (JSC) und das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ) im Jahr 2007 zum nationalen Gauss Centre for Supercomputing zusammengeschlossen.

### Forschung schafft Basis für Exzellenz

Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) hat die Struktur des Supercomputings in Deutschland maßgeblich mitgestaltet. Aktiv begleitete das Ministerium über Jahre hinweg den



Der Petaflop-Rechner JUGENE am Forschungszentrum Jülich zählt zu den leistungsstärksten in ganz Europa.

Prozess hin zu der heute weltweit anerkannten Exzellenz deutschen Höchstleistungsrechnens. Im Rahmen des Projekts PetaGCS finanziert das BMBF gemeinsam mit den Ländern Nordrhein-Westfalen, Baden-Württemberg und Bayern bis zum Jahr 2015 den schrittweisen Ausbau des GCS mit insgesamt bis zu 400 Millionen Euro.

Um alle wissenschaftlichen Forschungsbereiche zu unterstützen, lobt das Gauss Centre for Supercomputing mehrmals im Jahr einen offenen Wettbewerb um Rechenzeit aus. Ziel ist es, relevante Projekte unterschiedlicher Disziplinen möglichst optimal und abgestimmt durch die individuellen Fachkompetenzen an einem der drei Zentren durch angemessene Ressourcen zu unterstützen. Zusätzlich bietet das GCS ein spezielles Servicekonzept, um Anwendern durch Schulungen, Workshops und eine intensive Betreuung bei der Implementierung und Optimierung der jeweils eingesetzten Software behilflich zu sein.

Gerade im Hinblick auf künftige Computerarchitekturen dürfte das angebotene Know-how immer wichtiger werden. Denn vor allem die Implementierung der Simulationsmodelle auf Systemen der zukünftigen Exaflop-Klasse wird teilweise neue Ansätze für hoch skalierbare Algorithmen erfordern. Die Exaflop-Klasse wird bis zu 1.000 Mal schneller arbeiten als die heute eingesetzten Petaflop-Supercomputer.

## Der Spitzenforschung den Weg ebnen

*Was ist das Ziel des GCS?*

Dafür zu sorgen, dass Wissenschaftlern, Forschern und Entwicklern in Deutschland und Europa Rechenkapazität der höchsten Leistungsklasse zur Verfügung steht. Um das zu gewährleisten, arbeiten wir in Bezug auf die Bundesrepublik sowohl nach „außen“ wie nach „innen“. Das GCS vertritt Deutschland also beispielsweise bei der Planung und Koordination europäischer Projekte wie dem Aufbau der europäischen Forschungsinfrastruktur PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Hier ist es unser Ziel, Europa konkurrenzfähig zu machen und Spitzenforschung methodisch und systemtechnisch in Deutschland zu unterstützen.

*Bei Ihrer Arbeit nach „innen“ steht die Koordination der deutschen Spitzen-HPC-Aktivitäten im Vordergrund?*

Dazu gehört vor allem ein organisatorischer Rahmen, damit Nutzer das je nach Bedarf bestgeeignete Rechenzentrum auswählen können. Zusätzlich unterstützen wir die drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren bei der Abstimmung der unterschiedlichen Architekturen oder im Ausbildungswesen.

*Welche Position hat die Bundesrepublik im internationalen Vergleich der Supercomputer und ihrer Serviceangebote?*

Im Bereich der drei nationalen Höchstleistungszentren gehört Deutschland zur Weltspitze. Allerdings dürfen wir dabei nicht vergessen, dass Forschung und Entwicklung mit langwierigen Prozessen verbunden ist und wir nicht nur in aktuelle Hochtechnologie investieren, sondern die Nachhaltigkeit des Angebots im Bereich des High Performance Computing auf allen Ebenen sichern müssen.

Prof. Heinz-Gerd Hegering  
ist Vorstandsvorsitzender  
des Gauss Centre for Super-  
computing (GCS)



Das Leibniz-Rechenzentrum in Garching bei München

## Nationale Höchstleistungszentren der Bundesrepublik Deutschland

Die nationalen Höchstleistungsrechenzentren haben unterschiedliche Schwerpunkte. Während das Jülich Supercomputing Centre eher auf die Grundlagenforschung ausgerichtet ist, orientieren sich die Zentren in Stuttgart sowie Garching bei München eher an den Ingenieurwissenschaften.

### Jülich Supercomputing Centre

Das Jülich Supercomputing Centre im Forschungszentrum Jülich (JSC) betreibt mit JUGENE einen der leistungsstärksten Rechner in Europa. Er verfügt über eine Rechenleistung von über einem PETAFLIPS, also einer Billion Rechenoperationen pro Sekunde. Die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten im JSC konzentrieren sich auf mathematische Modellierung und Algorithmen für weiche Materie, Plasma und Astrophysik, Quanteninformation und Elementarteilchenphysik. In der Informatik liegt der Schwerpunkt auf den Gebieten Cluster-Computing, Leistungsanalyse paralleler Programme, Visualisierung, Computational Steering und Grid-Computing. Im JSC arbeiten rund 140 Experten an allen Aspekten rund um Supercomputing und Simulationswissenschaften. Dazu gehört beispielsweise auch, gemeinsam mit namhaften Hardware- und Software-Herstellern wie IBM, Intel und ParTec Rechner der nächsten Supercomputer-Generation zu entwickeln.

### High Performance Computing Center Stuttgart

Auch das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) mit seinen rund 100 Mitarbeitern zählt zu den herausragenden Einrichtungen im Supercomputing weltweit. Schwerpunkt der Arbeiten sind die Ingenieurwissenschaften. Durch die enge Zusammenarbeit mit Unternehmen wie Porsche und Daimler hat sich das HLRS zum führenden

Zentrum für Industriekooperation entwickelt: Über die Public Private Partnership hww GmbH versorgt das HLRS die Industrie mit Zugriff zu Höchstleistungsrechnern. Und über das Automotive Simulation Center Stuttgart erarbeitet das HLRS gemeinsam mit Automobilherstellern, Softwarehäusern und Hardwareherstellern innovative Lösungen für die Zukunft. Da das HLRS Teil der Universität Stuttgart ist, können Forschung, Entwicklung, Produktion und Lehre auf einzigartige Weise miteinander verbunden werden. In einer Reihe nationaler und internationaler Projekte erforscht und entwickelt das HLRS zudem Methoden und Werkzeuge für die Nutzung und Programmierung von Höchstleistungsrechnern.

### Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften auf dem Forschungscampus in Garching bei München ist IT-Dienstleister für die bayerischen Hochschulen und Forschungseinrichtungen mit über 100.000 Kunden. Mitte 2012 wird der derzeitige Hochleistungsrechner abgelöst und ein neuer in Betrieb gehen. Der im Rahmen von PetaGCS finanzierte „SuperMUC“ wird mit über 110.000 Prozessorkernen ausgestattet, mit deren Hilfe eine Spitzenrechenleistung von 3 PETAFLIPS erreicht werden kann. Damit werden Simulationen etwa zur Entstehung des Universums, der Entwicklung von Modellen des heißen Erdinnern, der Ausbreitung von Erdbebenwellen oder der Berechnung von Strömungseigenschaften technischer und natürlicher Systeme sowie biologische und medizinische Untersuchungen möglich. Neben dem Betrieb der Rechensysteme in einem der modernsten Rechnergebäude der Welt unterstützt das LRZ die Forscher durch ein umfangreiches Schulungsangebot in den Bereichen paralleles Programmieren und Optimierung. Die enge Kooperation mit Einrichtungen der TU München und der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) in München führt zu Synergieeffekten, die eine besonders effiziente Nutzung des Höchstleistungsrechners ermöglichen.

## Gauß-Allianz

### Mit vereinter (Rechen-)Kraft

**14 deutsche Rechenzentren haben sich auf Initiative des BMBF zur Gauß-Allianz e.V. zusammengeschlossen. Ihre „Mission“: Voraussetzungen zu schaffen für die nachhaltige und effiziente Nutzung von Supercomputing-Ressourcen der obersten Leistungsklassen. Dafür sollen ihre unterschiedlichen Kompetenzen und Rechnerarchitekturen koordiniert und gebündelt werden.**

Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile: Zugesprochen wird diese Erkenntnis dem griechischen Philosophen Aristoteles. Er gilt als einer der ersten großen bekannten Systematiker der Menschheitsgeschichte und begründete die Logik der Wissenschaft, nach der bestimmte Voraussetzungen immer zu richtigen Schlüssen führen. In dieser Tradition steht auch der deutsche Carl Friedrich Gauß, der als einer der ersten Mathematiker mit seinen Formeln und Erkenntnissen Wissenschaft und Technik bis heute prägt. Beide Persönlichkeiten prägen wohl auch das Engagement bedeutender

deutscher Rechenzentren: Diese wollen nämlich ihre Kräfte bündeln, um Mehrwert zu schaffen. Und haben sich dafür den Namen Gauß-Allianz gegeben.

„Dieser Rechnerverbund ist weltweit einzigartig“, urteilt Prof. Wolfgang E. Nagel, Vorsitzender der Gauß-Allianz: „Landesrechenzentren für High Performance Computing (HPC), fachgebundene HPC-Zentren sowie das ‚Gauss Centre for Supercomputing‘ (GCS) arbeiten zusammen, um für Wissenschaft und Wirtschaft die Voraussetzungen für eine nachhaltige und effiziente Nutzung von Supercomputing-Ressourcen weiter zu verbessern.“ Weitere Ziele des im Jahr 2008 gegründeten Vereins sind Forschungsarbeiten und die Verbesserung der internationalen Sichtbarkeit der deutschen Ergebnisse auf dem Gebiet des Supercomputings. Erste Schritte auf diesem Weg sind neben wissenschaftlichen Veranstaltungen vor allem die Beratung von Wissenschaft, Wirtschaft und Politik sowie Trägerorganisationen auf Bundes- und Landesebene, die Hoch- und Höchstleistungsrechnen für sich nutzen wollen



Der Hochleistungsrechner am LRZ in Garching.

## Die besten Rechner der Welt

Besonders bemerkenswert: Sieben der in der Gauß-Allianz vertretenen Rechner gehören zu den 75 leistungsfähigsten der Welt. Mit „Jugene“ im Forschungszentrum Jülich gehört laut offizieller Liste der „Top 500“ ein Rechner zu den leistungsfähigsten zehn Rechenanlagen der Welt. Und im kommenden Jahr dürfte sich das Ranking deutscher Höchstleistungsrechner unter den besten Rechnern nochmals signifikant verbessern. Mit Inbetriebnahme des GCS-Rechners „SuperMUC“ in Garching bei München kann die Allianz mit einem Computer rechnen, der bis zu drei Milliarden Rechenvorgänge pro Sekunde ausführen kann.

„An Entwicklungen wie diesen lässt sich auch die Bedeutung der Gauß-Allianz illustrieren“, meint Nagel. Seit einem „Paradigmenwechsel“ vor rund sechs Jahren sei die Geschwindigkeit der Einzelprozessoren in einem Supercomputer kaum mehr gestiegen. Die hohe Leistungsfähigkeit wird erreicht, weil die Zahl der im Inneren zusammenarbeitenden Kerne extrem gestiegen ist. Damit sind die Höchstleistungsrechner aber immer schwerer zu beherrschen. „Wir rechnen damit, dass wir es in den nächsten acht Jahren mit Systemen in der Größenordnung von 50 Millionen Prozessoren zu tun haben werden, die gleichzeitig an einer Aufgabe rechnen.“ Umso entscheidender ist es, Erfahrungen und Kompetenzen auszutauschen und gemeinsame Strategien auszuarbeiten, wie und wo Nachwuchs in Deutschland ausgebildet werden kann.

Dr. Detlef Müller-Wiesner ist Chief Operating Officer Innovation & CTO Deputy bei der European Aeronautic Defence and Space Company (EADS)



## Die Entwicklung moderner Flugzeuge ist ohne HPC nicht vorstellbar

*Flugzeuge wurden schon vor dem Zeitalter des Supercomputings gebaut...*

... und das mit beeindruckendem Erfolg. Die Frage ist allerdings, wieviel Zeit, Arbeitskraft und Geld in die Entwicklung gesteckt werden musste. Denn letztlich mussten die Ingenieure ihre Konstruktionsannahmen mit einer grossen Zahl von Versuchen iterativ verifizieren. Ein modernes und komplexes Flugzeug wie beispielsweise der A380 lässt sich deshalb heute wirtschaftlich nur mit Hilfe von HPC entwickeln. Durch Simulationen in Hochleistungsrechnern können wir Auslegungsdaten mit einer Genauigkeit von konservativ über 95 Prozent ermitteln – und damit Versuchsreihen im Labor oder in Flugtests drastisch reduzieren.

*Welche Simulationen sind für die Luft- und Raumfahrt besonders wichtig?*

Wir simulieren mittlerweile praktisch alle physikalischen Bereiche wie unter anderem Aerodynamik, Fluglasten, Strukturmechanik, Thermodynamik und elektromagnetisches Verhalten. In der Raumfahrt sind beispielsweise die aerothermodynamischen Simulationen der Vorgänge beim Wiedereintritt in die Erdatmosphäre von immenser Bedeutung. Allerdings sind nicht nur die einzelnen Bereiche wichtig, sondern vor allem deren komplexes Zusammenspiel. In der „MDO – Multidisciplinary Design Optimization“ werden verschiedene physikalische Modelle in ihrer Interaktion gemeinsam untersucht.

*Ist es vorstellbar, dass HPC genutzt wird, um die neuen hohen Anforderungen an Leistung, Konstruktion, Umweltschutz und Preis komplett im Computer zu bewältigen?*

Wir sind auf dem Weg dahin. Mit allen positiven Konsequenzen für Sicherheit, Wirtschaftlichkeit und Ökologie.

**Supercomputer sichern die Existenz der Automobilindustrie**

*Das Automotive Simulation Center Stuttgart wurde unter anderem gegründet, um Entwicklungszeiten und -kosten zu senken. Wie wollen Sie dieses Ziel erreichen?*

Indem wir verstärkt und mit weiter verbesserten Simulationsverfahren arbeiten. Weil das mit enormen Kosten verbunden ist, werden Hersteller und Zulieferer auch künftig verstärkt fremde Höchstleistungscomputer wie den des Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) nutzen. Gemeinsam wollen wir die Simulationsmethoden zur Fahrzeugentwicklung auch durch Nutzung von Optimierungsverfahren und HPC weiter erforschen und für den industriellen Einsatz nutzbar machen.

*Welchen Stellenwert haben komplexe Simulationen für die Entwicklung von Fahrzeugen?*

Ein gutes Beispiel für die Bedeutung sind Crashtests. Zwar bewegt sich die Zahl der realen Crashversuche für eine Fahrzeugbaureihe immer noch im niedrigen dreistelligen Bereich. Die fast ebenso wichtigen virtuellen Crashtests aber liegen um das etwa 30-fache höher. Also: Simulationen sind inzwischen existenziell für die Automobilindustrie geworden. Ohne sie könnten Fahrzeuge mit der heutigen Komplexität nicht mehr in der kurzen Zeit entwickelt werden und der Erfolg von Fahrzeugen „Made in Germany“ würde weltweit verebben.

Prof. Erich Schelkle ist Geschäftsführer des Automotive Simulation Center Stuttgart



Die Leistungsfähigkeit von Höchstleistungsrechnern wächst rasant. Allein schon technisch gesehen stellt dies höchste Anforderungen an die Einrichtung und Wartung der Supercomputer, wie hier in Jülich.



Supercomputing-Ressourcen nachhaltig und effizient im Verbund zu nutzen, ist Ziel der 2008 gegründeten Gauß-Allianz.

## D-Grid-Initiative

# Wissenschaft und Industrie vernetzt

**Mit der im Jahr 2004 gestarteten D-Grid Initiative wurden die technologischen und organisatorischen Grundlagen gelegt, um deutschlandweit die Möglichkeiten und Chancen des Grid-Computing in Forschung und Entwicklung auf breiter Basis nutzen zu können. Vom BMBF mit mehr als 100 Millionen Euro gefördert, waren oder sind 54 Universitäten, 42 Institute sowie über 100 Unternehmen verschiedenster Branchen beteiligt. Als gemeinsame Basis dient eine Kern-Infrastruktur mit derzeit 36.000 Rechenprozessoren.**

Für viele Forscher und Entwickler in aller Welt ist das Arbeiten im „Grid“ längst eine unverzichtbare Voraussetzung ihrer Arbeit. In Genf zum Beispiel liefern die vier Detektoren des Teilchenbeschleunigers LHC (Large Hadron Collider) einen kaum vorstellbaren Datenstrom von bis zu einem Gigabyte pro Sekunde. Pro Jahr kommen so 15 Millionen Gigabyte an Daten zusammen, die natürlich nicht nur zuverlässig gespeichert, sondern von gut 8.000 Wissenschaftlern in aller Welt aufwändig analysiert werden müssen. Sie hoffen dabei zum Beispiel, fehlende Schlüsselemente in der Teilchenphysik zu entdecken oder das Ungleichgewicht von Materie und Antimaterie bei der Entstehung des Universums erklären zu können. Um solch ein epochales wissenschaftliches Großvorhaben überhaupt datentechnisch möglich zu machen, startete parallel zum



Experimente des Teilchenbeschleunigers LHC in Genf liefern bis zu ein Gigabyte Daten pro Sekunde, die verteilt und verarbeitet werden müssen. Ohne ein leistungsstarkes Grid wären solche Experimente nicht zu bewältigen.

LHC auch das bisher weltgrößte Computer-Grid mit mehr als 100.000 Prozessorkernen.

### Grid fördert kooperatives Arbeiten

Ursprünglich sollten diese Analysen in einer hierarchischen Struktur durchgeführt werden; inzwischen ist die Vorgehensweise aber grundlegend anders. Die einzelnen Forschergruppen nutzen die Möglichkeiten der Grid-Infrastruktur, um sich je nach individuellen fachlichen Interessen mit Forschungspartnern auszutauschen und in teils weltweit verteilten Kooperationen an wissenschaftlichen Fragestellungen zu arbeiten. Diese Erfahrungen zeigen deutlich, dass eine virtuelle Forschungsumgebung nicht nur kooperatives Forschen unterstützen, sondern sogar initiieren kann. Inzwischen teilen Wissenschaftler nahezu aller Disziplinen über das globale Grid Laborgeräte, Analyseprogramme und Versuchsergebnisse sowie natürlich die Rechenleistung ihrer Systeme.

### Künftig größere Chancen für die Wirtschaft

Von den neuen Möglichkeiten der Zusammenarbeit profitiert längst nicht mehr nur die Forschung allein. Auch in der Industrie stellen Optimierungsoftware und Simulationsprogramme immer höhere Anforderungen, mit denen die hauseigene IT immer seltener mithalten kann. Gerade technologieorientierten, innovativen kleinen und mittleren Unternehmen droht somit ein Wettbewerbsnachteil, den sie künftig allerdings leichter als bisher über ein zeitweiliges „Anmieten“ von Ressourcen über das Grid ausgleichen können. Wo die Mittel für Aufbau und Betrieb eigener Infrastrukturen fehlen, bieten sich nun Chancen, im Wettbewerb mit großen Konzernen auf Augenhöhe zu agieren. Welches Potenzial im Grid-Computing steckt, zeigen nicht zuletzt die zahlreichen industriegetriebenen D-Grid-Projekte der vergangenen Jahre, an denen sich mehr als 100 Unternehmen beteiligt haben. Das Ziel dabei: Anhand einer breiten Palette von Praxisanwendungen die Möglichkeiten und Chancen des Einsatzes der Grid-Technologien im industriellen Umfeld aufzuzeigen und neue Kooperationsformen zwischen Wissenschaft und Industrie zu etablieren.

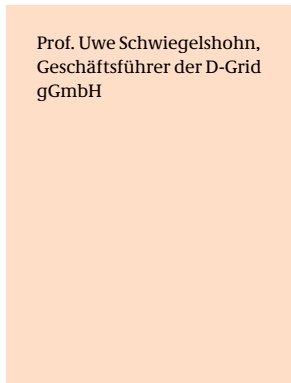
### Vorteile von Grid und Cloud vereinen

Verglichen mit kommerziellen Softwarediensten „on demand“ sind die in der Forschung bisher entwickelten Systeme deutlich komplexer. Die Wissenschaft wird sich deshalb weiter gegenüber einer kommerziellen und somit auch intuitiveren Nutzung ihrer Grid-Infrastrukturen öffnen, etwa indem sie verstärkt auf die durch Amazon als Quasi-Standard verbreitete Schnittstelle EC2 („Elastic Compute Cloud“) setzt.

Zwar ermöglichen Anbieter von Cloud-Computing schon heute einen vergleichsweise einfachen Zugriff auf eigene IT-Ressourcen gegen Bezahlung; den eigentlichen Mehrwert des Grids jedoch nutzen sie damit nicht, da kooperative Zusammenarbeit und gemeinsame Nutzung verschiedenster verteilter IT-Ressourcen nur sehr eingeschränkt möglich sind. Cloud-Services sind in der Regel beschränkt auf standardisierte Produkte wie Rechenleistung oder Speicherkapazität als „Infrastructure as a Service“ (IaaS) beziehungsweise auf Standardprogramme als „Software as a Service“ (SaaS). Dafür bietet das „Rechnen mit der Wolke“ allerdings auch vergleichsweise einfache Vertriebsmodelle.

Die Einbindung einer Vielzahl heterogener Systeme und Datenquellen ist allerdings weitaus komplexer als es die Analogie zum Stromnetz (englisch: grid) vermuten lässt. Nebeneinander laufen inzwischen verschiedene Middlewares (sozusagen die Zugangsprogramme für das Grid). Unterschiedlichste Funktionen und Dienste wenden sich an ebenso unterschiedliche Anforderungen ganz bestimmter Nutzergruppen. Auf dem „D-Grid“-Referenzsystem sind deshalb die drei gebräuchlichsten Middleware-Systeme parallel installiert: UNICORE, gLite und Globus Toolkit. Zusätzlich wurden Softwaremodule entwickelt, um die Unterschiede der Systeme sozusagen zu „verstecken“. Ein Monitoringsystem etwa ermöglicht die Statuskontrolle von Ressourcen, Diensten und Jobs für die gesamte Grid-Infrastruktur.

Die im akademischen Umfeld entstandenen Systeme gelten derzeit aber noch als nicht benutzerfreundlich genug, um als Produkte erfolgreich vermarktet werden zu können. Künftig sollen die



Prof. Uwe Schwiigelshohn, Geschäftsführer der D-Grid g GmbH



**„Der gesamten Wissenschaft eröffnet D-Grid gänzlich neue Möglichkeiten, unabhängig vom Ort oder einer Institution über Universitätsgrenzen hinweg gemeinsam an Forschungsfragen zu arbeiten“**



In der „D-Grid-Initiative“ wurde auch eine bundesweite Infrastruktur mit Mitteln des BMBF aufgebaut.

Vorteile von Grid- und Cloud-Computing auf der Infrastruktur des D-Grid vereint werden, etwa indem der Zugang zu Grid-Ressourcen ebenso einfach wird wie bei kommerziellen Cloud-Anbietern.

Im D-Grid gewährleisten Systemarchitektur und offene Schnittstellen die erforderliche Flexibilität, um auch technologische Weiterentwicklungen problemlos einzubinden zu können. Zudem schafft der flexible Systemaufbau die Voraussetzung für die Kopplung mit den Grid-Initiativen anderer europäischer Länder oder internationaler Forscher-Communities. Gleichzeitig konnte das deutsche Modell entscheidende Impulse für die europäische und internationale Weiterentwicklung der Grid-Technologien geben. So orientieren sich beispielsweise sowohl die European Grid Infrastructure (EGI) als auch die Standardisierungsgremien des internationalen Open Grid Forum (OGF) an den konzeptionellen und technologischen Lösungen aus Deutschland. So entstanden im D-Grid unter anderem Plattformen, auf denen Astrophysiker auf weltweit verteilte Radioteleskope zugreifen, Ingenieure aufwändige Simulationsläufe auf verteilten Ressourcen durchführen oder Geisteswissenschaftler gemeinschaftlich an Fragestellungen zu umfangreichen Textsammlungen arbeiten können.

HEP CG – Das Hochenergiephysik  
Community Grid  
Dr. Peter Malzacher  
p.malzacher@gsi.de  
Tel.: 06159 / 71 2551  
www.hepcg.org

D-Grid gGmbH  
Prof. Uwe Schwiegelshohn  
uwe.schwiegelshohn@tu-dortmund.de  
Tel.: 0231 / 755-2634  
www.d-grid-ggmbh.de

Dr. Peter Malzacher vom  
GSI, Helmholtzzentrum für  
Schwerionenforschung



### Das Grid als „fünftes“ LHC-Experiment

*Warum ist das LHC-Grid für die Experimente am CERN so wichtig?*

Ohne das Grid wären Speicherung und Analyse der Experimente nicht möglich. Denn am CERN selbst sind nur weniger als 20 Prozent der insgesamt benötigten Computerressourcen installiert und diese werden für die Sicherungskopien der Rohdaten gebraucht. Für alle Beteiligten war es daher spannend, ob das Konzept des LHC-Grid funktioniert. Das Grid ist sozusagen das fünfte Experiment des LHC-Projekts.

*Ist das „Arbeiten im Grid“ für die Forscher anders?*

Motivierend wirkt die durch das Grid entstehende Nähe: Da die eigenen Rechnerressourcen direkt an den laufenden Experimenten beteiligt sind,

werden auch Forscherteams, die viele hundert Kilometer vom CERN entfernt sind, unmittelbar ein Teil des Projekts. Zusätzlich macht das Grid die Forschung schneller: Zum Beispiel lagen weniger als einen Monat nach den ersten Schwerionennmessungen bereits eine Handvoll wissenschaftlicher Berichte mit Analyseergebnissen vor.

*Was verbindet die D-Grid Initiative mit dem Worldwide LHC Computing Grid?*

D-Grid Ressourcen werden direkt genutzt, um einen Teil der Daten aus Genf zu speichern und zu verarbeiten. Im Rahmen eines D-Grid Projekts wurden zudem wichtige Softwarebausteine für das Funktionieren des WLCG entwickelt: Zum Beispiel zur Überwachung und Steuerung von Jobs und Ressourcenverbrauch innerhalb des gesamten Grids.

## PRACE und EGI

# Europa rechnet mit den Besten

**Mit dem im Frühjahr 2010 gestarteten Verbund PRACE („Partnership for Advanced Computing in Europe“) bündeln Deutschland und 19 weitere europäische Staaten ihre Hochleistungsrechner zu einem gemeinsamen Supercomputerverbund. International wegweisend ist die Zusammenarbeit in Europa auch bei der Vernetzung der Forschungs- und Entwicklungszentren: In der European Grid Initiative (EGI) schließen 37 europäische Staaten ihre nationalen Grid-Ressourcen zu einem durchgängigen Forscher- und Ressourcennetzwerk zusammen.**

Um die größten Herausforderungen unserer Zeit zu lösen – von der nachhaltigen Entwicklung über den Klimaschutz bis zum medizinischen Fortschritt – kommen auch die fähigsten Köpfe oft nicht mehr ohne Schlüsseltechnologien wie Supercomputing und eine leistungsfähige Vernetzung von Forschungs- und Entwicklungszentren aus. In Deutschland werden diese deshalb seit Jahren mit Nachdruck durch das

Prof. Achim Bachem,  
Council-Vorsitzender von  
PRACE (AISBL)



**„Für die europäischen Staaten, aber auch für den weltweiten Wettbewerb in Wissenschaft und Industrie ist es unverzichtbar, dass Europa über herausragende Kompetenzen in Bau und Betrieb von Supercomputern verfügt und so einen unabhängigen Zugang zu dieser Schlüsseltechnologie besitzt.“**

Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert und ausgebaut. Zugleich konnten damit auch wichtige Grundlagen für eine europaweite Struktur gelegt werden. Mit Unterstützung der Europäischen Kommission entstand daraufhin die Initiative „PRACE“, mit dem Ziel, eine europäische Forschungsinfrastruktur für High Performance Computing (HPC) aufzubauen. Das Ziel wurde im Frühjahr 2010 mit der Gründung der „Partnership for Advanced Computing (PRACE)“ mit Sitz in Brüssel erreicht. PRACE bietet europäischen Forschern nicht nur Rechner-Ressourcen auf Weltniveau sondern insbesondere Ausbildung und Unterstützung beim Einsatz innovativer Rechnerarchitekturen. Als ersten Supercomputer im Dienste von PRACE schaltete Deutschland den Hochleistungsrechner JUGENE in Jülich frei.

Die vielfältigen, komplexen Aufgaben, auf internationaler Ebene zum Beispiel die Experimente am LHC in Genf, stellen unterschiedliche Anforderungen an die Rechensysteme. Zur Zeit beschaffen die PRACE-Partner unterschiedliche Rechnerarchitekturen. Damit wird erreicht, dass in Europa alle erforderlichen Rechnerarchitekturen angeboten werden können.

### Auf dem Weg zum Exaflop-Superrechner

Zur Zeit investieren die vier Staaten Deutschland, Frankreich, Italien und Spanien Rechenzeit im Gegenwert von je 100 Millionen Euro in die europäische HPC-Initiative. Bis 2015 werden sich Frankreich, Italien und Spanien mit jeweils einem und Deutschland sogar mit drei Rechnersystemen (neben JUGENE in Jülich die Rechner SuperMUC in Garching und HERMIT in Stuttgart) im Petaflop-Bereich an dem Supercomputerverbund beteiligen. Ihr wichtigstes Ziel aber will die europäische Supercomputing-Allianz bis 2019 erreicht haben: Bis dahin soll Europas Forschern ein Rechnersystem zur Verfügung stehen, das 1.000-mal schneller ist, als die aktuelle Supercomputergeneration. Die Leistung eines solchen Exaflop-Rechners könnte es Wissenschaftlern aus den Lebenswissenschaften zum Beispiel erstmals ermöglichen, sich einer bisher nur als Vision denkbaren Aufgabe zu stellen, nämlich der Simulation eines kompletten menschlichen Gehirns.

Höchstleistungen in der Wissenschaft erfordern allerdings nicht nur den Zugang zu immer leistungsfähigeren Supercomputern. Weitere unverzichtbare Bausteine für den Erfolg in Wissenschaft und Forschung sind der Zugang zu Wissensbeständen, Datenarchiven und Forschungsergebnissen sowie die intensive Zusammenarbeit mit Forschungspartnern in aller Welt. Deutschlandweit sind zahlreiche Universitäten und Forschungseinrichtungen deshalb über das „D-Grid“ entsprechend vernetzt. Wissenschaftlerteams an verschiedenen Standorten arbeiten damit ebenso intensiv zusammen, als befänden sie sich im gleichen Labor. Außerdem können über das Grid die verteilten Rechnerressourcen der beteiligten Partner bei Bedarf zu einem virtuellen Rechnerverbund vereint werden.

### Das Grid wird endlich transnational

Initiativen, die den Auf- und Ausbau von Grid-Infrastrukturen auf nationaler Ebene vorantreiben, gibt es auch in vielen anderen Ländern Europas und in einer Vielzahl von Staaten weltweit. Um den Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort Europa nachhaltig zu stärken, ist es daher nur der nächste logische Schritt, die nationalen Grid-Infrastrukturen zu einem europaweiten Forscherverbund zu verknüpfen. Aktuell beteiligen sich 37 Staaten aus ganz Europa am Aufbau der European Grid Infrastructure (EGI). Hauptaufgabe des Gemeinschaftsprojekts ist der Betrieb und die Koordinierung der verschiedenen nationalen Grid-Infrastrukturen, sodass eine auf Dauer verfügbare, europaweit durchgängige Forschungsumgebung realisiert werden kann. Die deutschen Grid-Entwickler konnten gerade in diesem Bereich mit den Erfahrungen und den technologischen Lösungen aus der nationalen D-Grid-Initiative einen wichtigen Beitrag leisten, um Ländergrenzen zu überwinden. Zum Beispiel ermöglicht eine im Rahmen von D-Grid entwickelte Monitoring-Software die Kontrolle und Steuerung von Grid-Ressourcen über verschiedene Middleware-Implementierungen hinweg.

Der Fokus der EGI-Aktivitäten aber richtet sich nicht nur auf Europa. Denn mit dem europäischen Forscherverbund werden auch die Voraussetzungen dafür

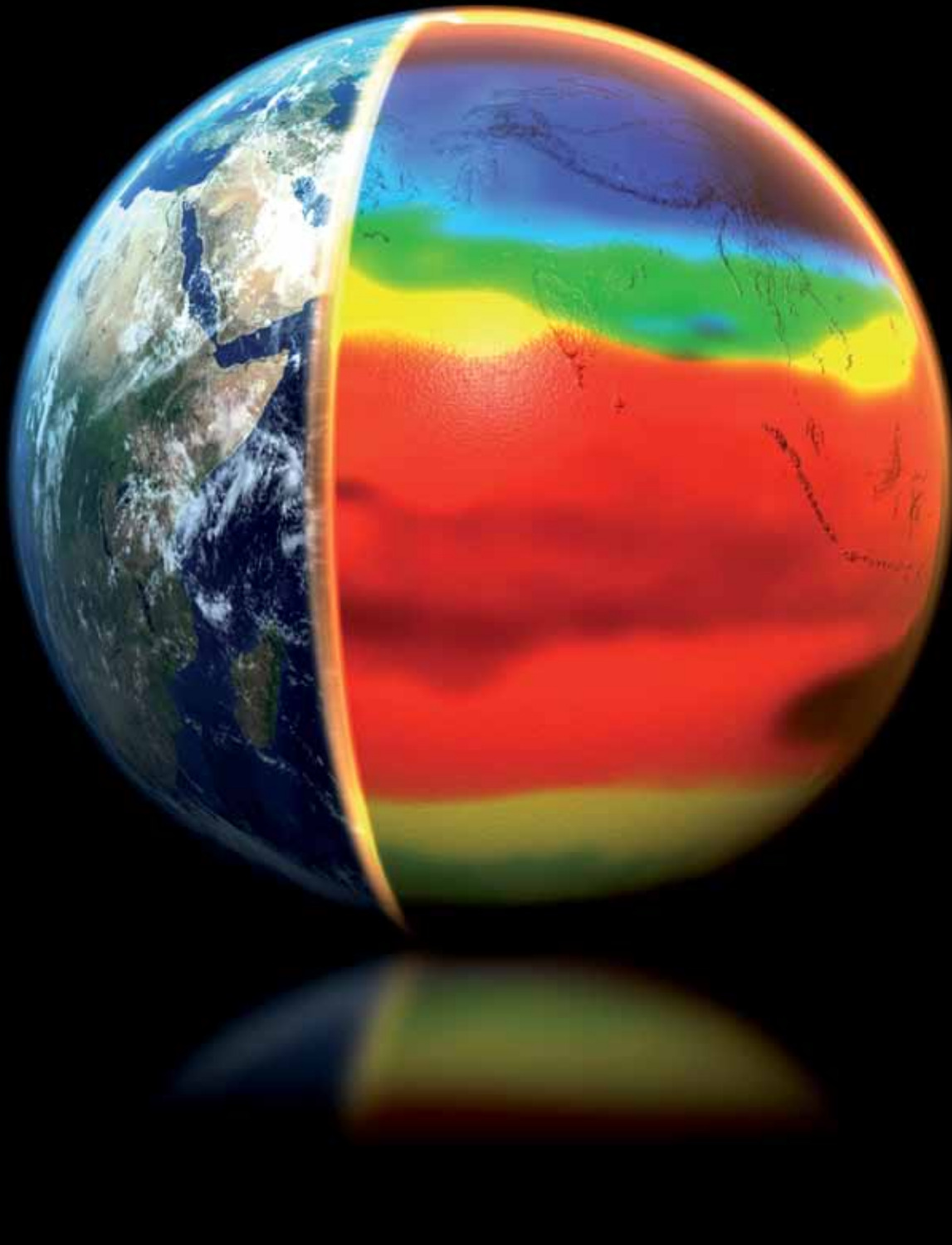
geschaffen, die Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern in aller Welt erheblich zu erleichtern. War es bisher notwendig, die datentechnische Basis für eine internationale Forschungskooperation mit jedem europäischen Partnerland einzeln abzustimmen und technisch umzusetzen, sind Europas Wissenschaftszentren nun über eine einheitliche Infrastruktur zu erreichen. Mehrere asiatische Staaten beteiligen sich sogar als Partner direkt an dem eigentlich europäischen EGI-Projekt. Sie wollen möglichst rasch eine leistungsfähige Grid-Vernetzung zwischen Europa und Asien initiieren, damit Wissenschaftler beider Kontinente eng und effektiv zusammenarbeiten können. Beispielsweise, um einen Impfstoff gegen die Vogelgrippe zu entwickeln. Davon profitiert auch die pharmazeutische Industrie in Deutschland.

Prof. Dieter Kranzlmüller,  
Vorsitzender EGI  
Projektmanagement Board



**„Mit der europäischen Grid-Initiative EGI haben wir gezeigt, dass ein leistungsfähiger Forscherverbund auch über Staatsgrenzen hinweg funktioniert. Nun gilt es, gemeinsam die Systeme auszubauen und weiter zu verbessern, um möglichst vielen Forschern weltweit eine verlässliche Infrastruktur zu bieten.“**

## Anwendungsbeispiele aus der Praxis



# Software für High Performance Computing

## Höchstleistung braucht smarte Steuerung

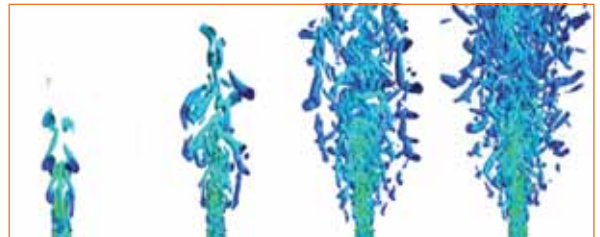
**Mehr Effizienz, mehr Qualität, mehr Zuverlässigkeit: Die meisten Leistungssteigerungen bei Höchstleistungsrechnern werden nicht mehr durch die Weiterentwicklung der Hardware erreicht, sondern vor allem mit Hilfe intelligenterer Software. Ein wesentlicher Teil der vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten HPC-Projekte dreht sich deshalb um neue Algorithmen, Softwareinfrastrukturen und die programmtechnische Umsetzung.**

Die Entwicklung der Rechentechnik wird in den kommenden Jahren sowohl im Bereich des Hochleistungsrechners als auch im Massenmarkt von zwei Trends geprägt werden: zum einen von so genannten „Multicore-Architekturen“, die heute bereits als Vier-, Sechs- oder Acht-Kern-Chips zur Verfügung stehen und künftig wohl mehr als 100 Kerne auf einem Chip zusammenfassen. Zum anderen werden Systeme wie etwa Grafikkarten verstärkt als eigenständige Recheneinheiten agieren. Beides erhöht die Leistungsfähigkeit der Hardware immens, macht auf der anderen Seite aber das „Handling“ der Rechensysteme deutlich komplizierter.

„Letztlich sind Kerne nichts anderes als Recheneinheiten, die sich verhalten wie Arbeiter, die beispielsweise eine Kreuzung mit Pflastersteinen auslegen sollen“, erklärt Prof. Sabine Roller von der German Research School for Simulation Sciences in Aachen. Natürlich ist die Straße schneller fertig, wenn an jedem Ende ein Arbeiter mit dem Pflastern beginnt.

**„Moderner Triebwerksbau ist ohne Supercomputer nicht konkurrenzfähig. Ohne ihre Simulationsleistung könnten wir den heutigen Anforderungen in Richtung Leistung, Verbrauch und Lärm nicht entsprechen.“**

Jörg Hunger,  
Bereich Aerodynamik, Methoden, MTU Aero Engines GmbH



Im Projekt „STEDG“ wird an Anwendungsfällen gezeigt, wie sich komplexe Strömungen auf der Hardware von morgen simulieren lassen, wie hier ein so genannter Freistrahls mit verschiedenen Parametern.

**Aber:** Sie müssen sich absprechen, damit die Platten in der Mitte auch zusammenpassen. Doch was passiert, wenn 50 Arbeiter oder (wie in den Rechenzentren) tausende Rechenkerne ihre Arbeit aufnehmen? Ohne eine entsprechende Organisation über die Software würden sie sich eher blockieren als die Arbeit beschleunigen. Im Projekt „STEDG – Hocheffiziente und skalierbare Software für die Simulation turbulenter Strömungen in komplexen Geometrien“ werden deshalb auch vier Fragen berücksichtigt, die als „typisch“ für den Bereich HPC angesehen werden können:

**Parallele Effizienz:** Schaffen doppelt so viele Arbeiter dieselbe Kreuzung wirklich in der halben Zeit oder müssen sie dauernd aufeinander „warten“?

**Skalierbarkeit:** Wie lassen sich immer mehr Arbeiter sinnvoll einsetzen (freie Ressourcen nutzen)?

**Memory-Zugriffe:** Wie lässt sich verhindern, dass Arbeiter auf ihr Material (Daten) warten müssen?

**Heterogene Hardware:** Welche Arbeitstrupps können was am besten?

Werden diese vier Punkte berücksichtigt, können Höchstleistungsrechner deutlich effizienter eingesetzt werden. Und das ist auch nötig, denn die Simulationsverfahren, die im Rahmen von STEDG entwickelt und später auch auf „normalen“ Rechnersystemen eingesetzt werden sollen, können künftig bei komplexen Geometrien wie einer Laserschneiddüse, einem Einspritzventil für Erdgas oder bei Tragflügeln klären, warum ein bestimmtes Bauteil „besser“ ist als ein vergleichbares.

## Datenkommunikation als limitierender Faktor

Generell gehört die Simulation von Strömungen zu den derzeit wohl wichtigsten, aber auch komplexesten Aufgaben von Höchstleistungsrechnern. Um ganze Flugzeuge im Rechner nachzubauen zu können, arbeiten die Forscher mit immer feineren dreidimensionalen Rechengittern, die das Flugzeug virtuell abbilden. Allein um die komplexen Außenströmungen zu erfassen, berechnet ein Supercomputer die Strömungssituation an aktuell bis zu 100 Millionen Gitterpunkten. Die Masse an Punkten ist dabei allerdings weniger das Problem als die dabei auftretenden Interdependenzen. „Die Strömung an einem Punkt hängt prinzipiell von der Strömung an allen anderen Punkten ab“, erklärt Dr. Jens Jägersküpper. Für das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) arbeitet er im Rahmen des Projekts „HI-CFD – Hocheffiziente Implementierung von CFD-Codes für HPC-Many-Core-Architekturen“ daran, möglichst viele Ressourcen eines Supercomputers effizient für die komplexen Strömungsberechnungen einsetzen zu können. Dabei wird üblicherweise das Rechengitter in einzelne Teilbereiche untergliedert, die zunächst unabhängig voneinander betrachtet werden. Im Laufe der Rechnung müssen die Lösungen für die Teilbereiche jedoch immer wieder per Datenaustausch abgeglichen werden.

„Diese Form des Parallelrechnens ist effizient, solange wir mit großen Teilbereichen arbeiten. Durch die explosionsartige Erhöhung der zur Verfügung stehenden Rechenkerne im Bereich des HPC können immer mehr Teilgebiete parallel gerechnet werden – welche allerdings immer kleiner werden“, betont Jägersküpper. Das Abgleichen der Teilgebiete werde dabei zum Engpass, die Skalierbarkeit der Verfahren wird beschränkt. Um zu verhindern, dass sozusagen ein „Bauarbeiter“ auf die Ergebnisse vieler anderer warten muss, forschen die IT-Fachleute an Methoden, wie jeder einzelne Arbeiter (beziehungsweise Mehrkernprozessor) effektiver Aufgaben erledigen kann. „Wir veranlassen die Prozessoren sozusagen dazu, nicht nur mit dem rechten, sondern auch dem linken oder sogar einer Vielzahl von Armen an einer Aufgabe zu arbeiten“, erklärt

Jägersküpper. Denn – um im Bild zu bleiben – die Rechte weiß was die Linke macht, ohne dass ein Austausch mit anderen nötig ist. Unternehmen wie Airbus oder die deutsche MTU Aero Engines seien damit in der Lage, Durchlaufzeiten für Simulationen deutlich zu verkürzen.

## Warum haben Herdplatten Mulden?

Mit vergleichbaren Komplexitäten, aber auf einem vollkommen anderen Gebiet, versuchen Wissenschaftler im Projekt „ASIL – Schnelle, hoch skalierbare Löser für komplexe Systeme“ unter anderem, die Wirkung von Kosmetika auf der Haut zu simulieren oder zukünftige Formen unserer Herdplatten mit zu entwickeln. „Herdplatten mit einer kleinen Mulde in der Mitte existieren in dieser Form seit 1932“, erklärt Prof. Gabriel Wittum. In Zusammenarbeit mit dem Haushaltsgerätehersteller E.G.O. konnten die Forscher berechnen, dass und wie sich eine Herdplatte ohne Mulde verhalten würde (sie dehnt sich aus wie ein Ballon). Um Geometrie und Struktur der Herdplatte sowie die Übertragung der Energie zwischen Platte und Topf weiter zu optimieren, müssen komplexe Gleichungssysteme mit Millionen Unbekannten gelöst werden.

Um dies schnell und effizient zu erreichen, verknüpfen die IT-Experten im Projekt ASIL mehrere mathematische Verfahren, die sich mit der Digitalfotografie vergleichen lassen. Hier werden Objekte nicht eins zu eins fotografiert, sondern durch ein (je nach Auflösung) unterschiedlich feines Gitter abgebildet. Zusätzlich können einzelne Pixel „zusammengefasst“ werden. Etwa, indem ganze Bereiche mit gleichmäßig blauem Himmel als „himmelblau“ definiert werden. Auf diese Weise entstehen (je nach Gitter) unterschiedliche Ergebnisse beziehungsweise Fotos ein und desselben Objekts. Diese können später „übereinander“ gelegt werden, um eine möglichst große Annäherung an die Realität zu gewährleisten. Ähnlich lassen sich durch dieses „Mehrgitterverfahren“ auch die Ergebnisse von komplexen Gleichungen erfassen, um möglichst exakte Simulationen realer Vorgänge zu gewährleisten.

### Green-IT ist Höchstleistung

Riesen-Rechner verbrauchen auch eine Riesen-Energie. Und der Verbrauch wird weiter deutlich steigen. Gemessen an heutigen Maßstäben würde ein Rechner mit Exaflop-Kapazität, wie er in zehn Jahren gebaut werden könnte, rund fünf Gigawatt verbrauchen – die Leistung von einem halben Dutzend Kraftwerken. Allein deshalb findet die „grüne IT“ Einzug auch in den Bereich des Höchstleistungsrechnens in Deutschland. So arbeitet beispielsweise ein Team um Professor Thomas Ludwig, Geschäftsführer des Deutschen Klimarechenzentrums (DKRZ) in Hamburg, am BMBF-Projekt „eeClust – Energieeffizientes Cluster-Computing“. Die Zielsetzung: Weil während laufender Programme nicht alle Komponenten des Rechners gleichzeitig agieren, werden Steuermechanismen entwickelt, die während des Ablaufs von Anwenderprogrammen den Rechner regelrecht „konditionieren“: Teile, die nicht im Einsatz sind, werden abgeschaltet und rechtzeitig, bevor sie gebraucht werden, wieder hochgefahren. Derzeit arbeiten die Forscher noch mit einem Versuchsrechner im DKRZ, um geeignete Steuersysteme zu testen. Danach könnten die Rechenzentren in Deutschland bis zu zehn Prozent ihrer Energiekosten einsparen.

### Architektur wird rundum planbar

An klassischen Modellen können Architekten zwar vieles planen und abschätzen, andere Aspekte jedoch sind im Modell schwierig zu beurteilen, etwa die Licht- und Windverhältnisse. Dies mit dem Computer realitätsnah und trotzdem schnell zu simulieren, bedarf einer enormen Rechenleistung, so dass auch hier Superrechner ins Spiel kommen. Dafür wird die Positionierung der Objekte abfotografiert und per Datenleitung an das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) gesendet. Innerhalb weniger Sekunden entstehen dort Grafiken, um beispielsweise die Ausbreitung von Schadstoffen oder Lärm zu visualisieren. „Ohne den Einsatz von Supercomputern wären unsere hohen Ansprüche an Statik, Energieverbrauch und wirtschaftliches Bauen von Hochhäusern kaum zu erfüllen“, betont Uwe Wössner vom HLRS.



Am High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) werden vor allem ingenieurwissenschaftliche Fragestellungen behandelt. Im Bild: Die Reihe NEC SX-9.

### Produktentwicklung wird beschleunigt

Die Automobilindustrie geht zunehmend dazu über, teure Windkanalexperimente durch detailgenaue Simulationen zu ersetzen. Wurde der Strömungsverlauf bisher mit einem künstlichen Nebelstrahl an einzelnen Fahrzeugteilen sichtbar, lassen sich in der Simulation auch kleinste Verwirbelungen und unterschiedliche Druckbelastungen detailliert darstellen, wie etwa im Forschungsprojekt „Irmos“ gezeigt. Die Daten werden außerdem virtualisiert und durch Augmented Reality (AR) über das Monitorbild eines realen, laufenden Experiments gelegt. Die Fahrzeugentwickler sehen also auf ihrem Monitor sowohl die realen Verwirbelungen als auch zusätzliche kritische Informationen. Nun können am Fahrzeug immer wieder auch kleinste Teständerungen vorgenommen werden, deren Auswirkungen sofort analysiert und virtuell sichtbar werden.

### Simulationen können Leben retten

In der Medizin sind Supercomputer allein schon deshalb ein wichtiger Faktor, weil dort reale Experimente oft gar nicht möglich sind. Frauke Gräter beispielsweise, Chemikerin am Heidelberger Institut für Theoretische Studien der Klaus Tschira Stiftung, untersucht mithilfe des Supercomputers am Leibniz-Rechenzentrum in Garching (LRZ) bei München molekulare Mechanismen von Proteinen und gewinnt dabei Erkenntnisse, die bei der Entwicklung von Krebstherapien bedeutend sein könnten. Mithilfe des Computers kann sie die Dynamik von bestimmten Eiweißbausteinen simulieren, die für Krebszellen eine wichtige Rolle spielen.

Prof. Marek Behr von der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen (RWTH) erforscht Blutpumpen, die möglichst genau auf bestimmte Patientengruppen passen. „Allein in Europa gibt es ungefähr 50.000 Menschen, die dringend ein Spenderherz benötigen, weltweit aber sind nur rund 3.500 dieser Herzen verfügbar“, erklärt Behr. Eine große Herausforderung bei der Verbesserung von Kunstherzen ist der Rotor, der in der Pumpe mit rund 10.000 Umdrehungen pro Minute arbeitet. Die Strömungen des Blutes müssen dabei an bis zu 100 Millionen Punkten gleichzeitig analysiert werden.

Möglich wird dies durch Simulationen am Supercomputer in Jülich. In ein bis zwei Jahren, so schätzt Behr, könnten die so gewonnenen Erkenntnisse in die Konstruktion einer neuen Generation von Blutpumpen einfließen.

### Kraftwerke werden umweltfreundlicher

Kohlekraftwerke stehen mehr denn je in der öffentlichen Kritik. Um sie weiter zu verbessern, setzt die Industrie deshalb zunehmend auf Supercomputer. Ein Ansatzpunkt ist die optimale Mischung von Brennstoff und Luft in dem bis zu 1.900 Grad heißen Kesselinnenraum. „Allein für die Luftdüsen an den Wänden gibt es mehr als 300.000 mögliche Betriebseinstellungen. Ohne Supercomputer wäre es nicht möglich eine optimale Luftverteilung zu gewährleisten“, erklärt Dr. Benedetto Risio von der RECOM Services GmbH. Risio und seinem Team ist es im Rahmen eines vom BMBF initiierten Projekts gelungen, bei einem Referenzkraftwerk allein durch aufwendige Berechnungen Brennstoff im Wert von 125.000 Euro pro Jahr einzusparen und den jährlichen Ausstoß von 16.000 Tonnen CO<sub>2</sub> zu vermeiden.

STEDG  
Prof. Sabine Roller  
s.roller@grs-sim.de  
Tel.: 0241 / 8099741  
www.stedg.de

HI-CFD  
Dr. Thomas Gerhold  
thomas.gerhold@dlr.de  
Tel.: 0551 / 7092425  
www.dlr.de/as/hicfd

ASIL  
Prof. Garbiel Wittum  
wittum@gcsc.uni-frankfurt.de  
Tel.: 069 / 79825258  
www.asil-project.org

eeClust  
Prof. T. Ludwig  
ludwig@dkrz.de  
Tel.: 040 / 41173-334  
www.eeclust.de

## Kollaboration im Grid

# Arbeit und Forschung im „Team Deutschland“

**Mit der „D-Grid-Initiative“ initiierte das Bundesministerium für Bildung und Forschung den Aufbau einer deutschlandweiten Infrastruktur, die Wissenschaft und Unternehmen einen direkten Mehrwert für deren tägliche Arbeit bieten soll. Seit ihrem Start wurden in 35 Einzelprojekten nicht nur prototypische Grid-Dienste erarbeitet, sondern für unterschiedliche Forscher-Communities vielfach bereits funktionsfähige virtuelle Forschungs-umgebungen eingerichtet und in Zusammenarbeit mit Unternehmen praxisreife Anwendungen entwickelt. In vielen Wissenschaftsbereichen zeichnet sich bereits ab, dass das „neue Netz“ in Deutschland und darüber hinaus auf dem besten Weg ist, sich als grundlegendes und effizientes Werkzeug von Forschern und Entwicklern fest zu etablieren.**

Der Patient atmet schwer und leidet unter heftigen Hustenanfällen. Symptome wie diese sind bei einer chronisch obstruktiven Lungenerkrankung (COPD), die mit einer dauerhaften Verengung der Bronchien einhergeht, leider üblich. Um die Beschwerden seines Patienten objektiv einschätzen zu können, ist der Arzt auf eine möglichst detaillierte Analyse der Lungenfunktionen angewiesen. Zur Unterstützung von Diagnose und Therapie werden deshalb neuartige bildgebende Verfahren entwickelt, die es erstmals ermöglichen, die Lungenbelüftung dynamisch während einiger Atemzüge zu analysieren. In einer 3D-Darstellung der Patientenlunge kann der Arzt die Aufzeichnungen der Magnetresonanztomographie oder von Lungengeräuschmessungen am Bildschirm sichtbar machen. Solche dynamischen Diagnosesysteme können bislang allerdings nur in ganz wenigen Kliniken eingesetzt werden. Denn um die dafür erforderlichen Daten zu erfassen und zu verarbeiten, sind leistungsfähige Rechencluster erforderlich, wie sie nur an wenigen Groß- oder Spezialkliniken zur Verfügung stehen.

Um dies zu ändern, entwickeln acht Partner aus Wissenschaft und Wirtschaft im Projekt „Pneumo-Grid“ Methoden und Softwaretools, die die rechenintensiven Technologien über die D-Grid-Infrastruktur zur Verfügung zu stellen. „In der einzelnen Klinik oder der Praxis des Lungenspezialisten sind keine leistungsfähigen Rechnersysteme mehr erforderlich“, so Dr. Sebastian Canisius von der Philipps-Universität Marburg. „Die bildgebenden Verfahren nutzt die einzelne Klinik über das Grid als Service on demand.“ Zusätzlich nutzen die Projektpartner die Vernetzung über das Grid für eine effizientere Zusammenarbeit von Kliniken, Wissenschaftlern, Medizintechnik- und Pharmaunternehmen bei der Durchführung klinischer Studien. Die einzelnen Grid-Lösungen werden dabei möglichst universell einsetzbar konzipiert, so dass sie auch in weiteren medizinischen Bereichen anwendbar sind.



Um chronische Lungenerkrankungen besser diagnostizieren zu können, sind die Ärzte auf dynamische 3D-Darstellungen angewiesen, die nur mit Hilfe von Grid-Computing wirklich flächendeckend angeboten werden könnten.

## Simulationen in der Automobilproduktion

Immer aufwendigere Berechnungen und Computersimulationen kennzeichnen auch den Fortschritt in der Industrie. Etwa wenn es darum geht, Sicherheit von Produkten zu gewährleisten und Produktionsprozesse zu optimieren, werden die Ingenieure immer häufiger von rechenintensiven Programmen unterstützt. In der Automobilindustrie rechnet „Kollege Computer“ bei virtuellen Crashtests ebenso mit, wie bei der Arbeit an kleinen Details. Um Karosseriebauteile beispielsweise passgenau auszuschneiden und sicher miteinander zu verbinden, werden die Schweiß- und Schneidvorgänge zuerst mit aufwendigen Berechnungen simuliert und optimiert. Im D-Grid Projekt „PT-Grid“ (Plasma-Technologie-Grid) entwickeln Industrie- und Wissenschaftspartner gemeinsam Lösungen, die diese Optimierungsaufgaben erheblich beschleunigen und auch kleineren Zulieferbetrieben den Einsatz modernster Simulationslösungen der Plasma-Technologie ermöglichen.



Höchstleistungsrechner finden nicht nur bei naturwissenschaftlichen Fragestellungen Anwendung. Das „TextGrid“ zum Beispiel bietet Werkzeuge und Dienste, um umfangreiche Textsammlungen schnell bearbeiten zu können.

Entsprechende Softwarelösungen vertreibt unter anderem das mittelständische Unternehmen CFX Berlin. Bisher werden dessen Programme für die numerische Strömungssimulation auf Rechenclustern mit durchschnittlich etwa 40 Prozessoren eingesetzt. Darauf dauert der Simulationslauf eines einzelnen Parametersatzes mehrere Stunden oder sogar mehrere Wochen. Werden für eine Prozessoptimierung 20 Parametersets benötigt, multipliziert sich entsprechend auch die Rechenzeit. In Zukunft soll für die Simulationsberechnungen die Rechenleistung der Grid-Infrastruktur eingesetzt werden. Damit können auch KMU ohne eigenen Rechnerpark von der Technologie profitieren. „Zusätzlich haben wir im Grid die Möglichkeit, auf so viele Rechenressourcen gleichzeitig zugreifen zu können, dass alle Varianten einer Optimierungsrechnung nicht mehr nacheinander, sondern gleichzeitig simuliert werden können“, erklärt Dr. Spille-Kohoff, Leiter von Forschung und Entwicklung bei CFX Berlin.

## Vernetzung von Bibliotheken

Der gleichzeitige und gemeinsame Zugriff auf die über das Grid vernetzten Ressourcen macht auch die akademische Forschung in den Geistes- und Kulturwissenschaften erheblich schneller und effizienter. Die Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen (SUB) koordiniert und leitet den Aufbau der umfassenden virtuellen Forschungsumgebung „TextGrid“. „Gerade die technologische Vernetzung über Universitäts- und Ländergrenzen hinweg ermöglicht es, das Angebot an neuen digitalen Wissensdienstleistungen und Methoden zur Unterstützung der Forschungsprozesse zu vergrößern“, so Dr. Heike Neuroth von der SUB. Das „TextGrid Repository“ zum Beispiel garantiert als fachwissenschaftliches Langzeitarchiv, dass die geisteswissenschaftlichen Forschungsdaten auch wirklich langfristig verfügbar, zitierbar und zugänglich sind. Zusätzlich stellt das „TextGrid Laboratory“ eine Plattform mit Werkzeugen und Services für die Bearbeitung auch umfangreicher Textsammlungen zur Verfügung. Automatisierte Analysen erlauben beispielsweise die Untersuchung von Erzählstrukturen in Millionen von Romanen. Aber nicht nur die „textorientierten“ Fachrichtungen forschen inzwischen gemeinsam im Grid: Musikwissenschaftler etwa wollen auf der Grid-

Plattform in den kommenden Jahren den Aufbau digitaler Musikeditionen mit kodierter Notation vorantreiben.

### Klima von morgen

Regelmäßig genutzt wird die im Rahmen von D-Grid entstandene Infrastruktur inzwischen auch von zahlreichen Forschern aus dem Ausland. Insbesondere mit Geisteswissenschaftlern aus den USA hat sich ein intensiver Austausch von Arbeitsgrundlagen und Forschungsergebnissen entwickelt, durch den teils vollkommen neue Fragestellungen in den Blickwinkel der Wissenschaften rücken. Geradezu zwingend sind Klimaforscher auf eine weltweite Vernetzung angewiesen. Belastbare Abschätzungen von Klimaveränderungen sind nur dann möglich, wenn eine Vielzahl unterschiedlichster Messdaten von Forschungsstationen in aller Welt zur Verfügung steht. Der Aufbau der Grid-Community für die Erdsystemforschung im Rahmen des D-Grid-Projekts „Collaborative Climate Community Data and Processing Grid“ (C3Grid) und dessen Fortführung im Projekt „C3Grid-INAD“ (Infrastructure for general access to climate data) ist daher eng mit den Datennetzwerken der internationalen Gemeinschaft der Klimaforscher verzahnt.

An den weltweiten Simulationsrechnungen für den Bericht des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) beteiligen sich rund um den Globus etwa 1.000 Experten, um Risiken der globalen Erwärmung zu beurteilen und Vermeidungsstrategien aufzuzeigen. Die dabei entstehenden Datenmengen werden auf insgesamt etwa 30 Milliarden Megabyte geschätzt. Innerhalb des internationalen Datenpools werden allerdings nur wenige Grundfunktionen wie Suchen, Finden oder Selektieren zur Verfügung gestellt. „Mit der Erschließung der verteilten Datenarchive über das C3Grid lassen sich dagegen auch komplexere Funktionen bereitstellen, die den Forschern einen echten Mehrwert bieten“, erklärt Dr. Bernadette Fritsch vom Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (AWI). Über das Grid angebotene Tools ermöglichen den Wissenschaftlern beispielsweise, aus den Basisdaten gezielt die Informationen eines bestimmten geographischen Gebietes auszuschneiden und sie in ein für die weitere Bearbeitung notwendiges Datenformat zu transferieren.



Wissenschaft und Wirtschaft arbeiten gemeinsam daran, dass künftig auch kleine Zulieferbetriebe ihre Schweißprozesse über Supercomputer simulieren können.

PneumoGrid  
Dr. Sebastian Canisius  
canisius@staff.uni-marburg.de  
Tel.: 06421 / 5864986  
www.pneumogrid.de

PT-Grid / Plasma-Technologie-Grid  
Dr. Detlef Loffhagen  
pt-grid@inp-greifswald.de  
Tel.: 03834 / 554 300  
www.pt-grid.de

TextGrid  
Dr. Heike Neuroth  
neuroth@sub.uni-goettingen.de  
Tel.: 0551 / 393866  
www.textgrid.de

C3Grid-INAD  
Dr. Bernadette Fritsch  
bernadette.fritsch@awi.de  
Tel.: 0471 / 4831 1481  
www.c3grid.de

alle Projekte der D-Grid Initiative  
www.d-grid.de

## Cloud im Finanzwesen

# Grid und Cloud reduzieren Finanzmarktrisiken

**In der Finanzwelt sind nicht nur die Anforderungen an Prozess- und Datensicherheit hoch, sondern es werden gleichzeitig auch enorme Rechenkapazitäten und umfangreiche Datenbanken benötigt. Hierfür sollen in Frankfurt Methoden von Cloud- und Grid-Computing miteinander verknüpft werden: Die „Financial Service Cloud“ könnte dabei helfen, systembedingte Risiken in der Branche zu verringern.**

Die aktuelle Wertentwicklung oder potenzielle Verlustrisiken eines Kundenportfolios lassen sich in der Regel nicht am Bankschalter abrufen. Obwohl Finanzdienstleister von allen Branchen am stärksten in modernste IT investieren, sind aufwendige Berechnungen nach wie vor noch nicht auf Knopfdruck möglich. Ändern ließe sich dies durch eine Parallelisierung der erforderlichen Rechenschritte auf einer Vielzahl von Rechnern. Dass Grid-Technologien dafür ein erhebliches Potenzial bieten, zeigen die in dem vom BMBF geförderten Projekt „Financial Business Grid“ entwickelten prototypischen Anwendungen. Derzeit sprechen allerdings zwei Gründe dafür, dass die Finanzdienstleister auch für gemeinschaftlich genutzte Daten und Anwendungen bis auf weiteres noch ihre eigenen IT-Ressourcen verwenden: Erstens ist die IT-Ausstattung der Banken dafür ausreichend. Zweitens werden damit gesetzliche Vorgaben, die zum Beispiel verbieten, dass Bankdaten auch nur zur Bearbeitung das Land verlassen, nachweislich eingehalten.



Trotz der im Branchenvergleich sehr hohen Investitionen in neue IT-Infrastrukturen, stoßen auch Finanzdienstleister bei den immer aufwendigeren Berechnungen an technische Grenzen. Die Ergebnisse sollen möglichst sofort vorliegen, denn gerade in diesem Fall ist Zeit buchstäblich Geld. Eine Lösung liegt darin, die Berechnungen im Grid zu parallelisieren.

**„Wichtige Grundlagen für Cloud-Computing im Finanzwesen wurden mit der Grid-Forschung im Rahmen der D-Grid Initiative gelegt.“**

Prof. Roman Beck, Goethe-Universität Frankfurt

Für die Projektidee der „Financial Service Cloud“ sollen daher die Vorteile einer Private Cloud genutzt werden. Als Ressourcenbasis hat die Deutsche Bank die „Frankfurt Cloud“ initiiert, die der Goethe-Universität Frankfurt als Testumgebung für Cloud-Anwendungen und -Dienste zur Verfügung steht. Unter anderem soll darauf die „Financial Service Cloud“ eingerichtet und betrieben werden.

Dabei werden grundlegende Ansätze des Grid-Computing verwendet: Der Zugriff auf gemeinsame Datenbestände durch viele verteilte Partner gehört ebenso dazu wie das gemeinschaftliche Bearbeiten der Dateninhalte. Ziel ist es, für die Finanzbranche eine Art Wikipedia für Referenzdaten mit den unterschiedlichen Bezeichnungen der einzelnen Banken, ihrer Tochterunternehmen und all ihrer Finanzprodukte zu erstellen. Denn während sich im Zahlungsverkehr mit SWIFT jede Transaktion eindeutig einer Bank zuordnen lässt, sind bei Finanzprodukten die Angaben zur jeweiligen Ausgabebank nicht standardisiert. So können die Produkte der Deutschen Bank in fremden Systemen sowohl mit „Deutsche Bank AG“ als auch mit „DB AG“ oder mit spezifischen Produktnamen gekennzeichnet sein. Die Idee der Financial Service Cloud ist es deshalb, dass die Finanzdienstleister diese Zuordnungsdaten gemeinsam erstellen, pflegen und nutzen. Gelingt es, die Service Cloud in der Finanzwelt zu etablieren, könnten die systemischen Marktrisiken damit besser aufgedeckt und dadurch verringert werden.

Financial Business Grid / Financial Service Cloud  
 Prof. Roman Beck  
 rbeck@wiwi.uni-frankfurt.de  
 Tel.: 069 / 798 33878  
 www.fingrid.de, www.efinancelab.de

# Ausblick

## Erfolg ist erst der Anfang

**Forschung, Wirtschaft und Politik sind sich einig: Bei aller Zufriedenheit über die deutsche Spitzenposition im Höchstleistungsrechnen stehen jetzt neue Herausforderungen an – insbesondere Komplexität, Anwendbarkeit, Nachhaltigkeit und Infrastruktur.**

### Komplexität: die „softe“ Lösung

Schon in den kommenden Jahren werden die Superrechner mit einer Größenordnung von 50 Millionen Prozessoren aufwarten, die alle parallel an ein und derselben Aufgabe rechnen. Ein einziger „Multicore“-Chip wird schon bald nicht mehr aus vier, sondern aus weit über 100 Kernen bestehen. Auch durch immer mehr eigenständige Recheneinheiten wird die Hardware immer komplexer. Solche Systeme auch künftig noch softwaretechnisch zu beherrschen, wird eine der größten Herausforderungen sein. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert deshalb schwerpunktmäßig HPC-Projekte zur Entwicklung und Anwendung neuer Algorithmen und Softwarearchitekturen. So ist es ein vorrangiges Ziel der jüngsten Bekanntmachung zu „HPC-Software für skalierbare Parallelrechner“, innovative Konzepte aus dem HPC-Bereich für eine Umsetzung in hochparallele Systeme auch für den Massenmarkt nutzbar zu machen. Die ersten Konsortien nehmen gerade ihre Arbeit auf.

### Anwendbarkeit: das Stecker-Prinzip

Die unzähligen Einsatzmöglichkeiten des Hochleistungsrechnens stehen nach wie vor in einem gewissen Widerspruch zur komplizierten Nutzung dieser Ressourcen. Beim Grid beispielsweise ist die ursprüngliche Vision von der „Rechenleistung aus der Steckdose“ bei weitem noch nicht erreicht. Intuitive, standardisierte Schnittstellen werden benötigt, um gerade auch mittelständischen Unternehmen einen leichten Zugang zu den Ressourcen zu verschaffen. Sie könnten dadurch mit überschaubarem, kalkulierbarem Aufwand technisch mit großen Konzernen gleichziehen und konkurrieren. Außerdem sind bei der Vielzahl der Anbieter flexible Abrechnungssysteme erforderlich, und auch bei den rechtlichen Rahmenbedingungen herrscht noch Klärungsbedarf, etwa für eine kommerzielle

Nutzung von Anwendungen auf „öffentlichen“ Ressourcen. Vor allem die D-Grid-Initiative hat in den vergangenen Jahren entscheidende Impulse für die Entwicklung des derzeit viel diskutierten Cloud-Computing gegeben. Umgekehrt erhofft man sich nun Antworten auf wichtige Fragen des Grid-Computings durch Erfahrungen aus der Cloud.

### Nachhaltigkeit: das grüne Super-Grid

Geradezu epochale Forschungsvorhaben wie der Teilchenbeschleuniger in Genf oder auch die Vision einer Simulation des menschlichen Gehirns drängen die Wissenschaft, in neuen Dimensionen zu denken. Noch vor Ende dieses Jahrzehnts soll sich die Leistungsfähigkeit der Superrechner vertausendfachen, Stichwort „Exaflop“. Nach heutigem Stand der Technik jedoch würde ein solches System ein halbes Dutzend eigener Kraftwerke zur Stromversorgung brauchen – hier sind völlig neue Ideen gefragt. Smartere softwareseitige Steuerungen der Ressourcen werden benötigt, um die Supercomputer besser auslasten zu können.

### Infrastruktur: stark im Verbund

2011 wird in vielerlei Hinsicht ein „Jahr des Supercomputing“. So werden gleich zwei neue PetaFlop-Rechner in Garching (LRZ) und Stuttgart (HLRS) in Betrieb genommen, gefördert durch das Projekt PetaGCS des BMBF. Die führende Position Deutschlands auf den Gebieten HPC und Grid wird durch die aktive Rolle in den europäischen Initiativen PRACE und EGI weiter ausgebaut.

Grundsätzlich stehen bei all diesen Projekten weniger die entwickelten Technologien, Methoden und Infrastrukturen im Vordergrund, sondern deren Anwendung. Keines der Werkzeuge verfolgt nur einen Selbstzweck, sondern trägt vielmehr zur Lösung der großen gesellschaftlichen Fragen unserer Zeit bei, angefangen bei Klima und Energie über Gesundheit und Ernährung bis zur Mobilität, Sicherheit und der Kommunikation der Bürger. Wenn Supercomputing und Forschung zusätzlich auch volkswirtschaftlich als Hebel wirken, etwa durch die beschriebene nachhaltige wettbewerbliche Stärkung des Mittelstands, dann kann man buchstäblich von „High-Performance“-Forschung sprechen.



Diese Druckschrift wird im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit vom Bundesministerium für Bildung und Forschung unentgeltlich abgegeben. Sie ist nicht zum gewerblichen Vertrieb bestimmt. Sie darf weder von Parteien noch von Wahlwerberinnen/Wahlwerbern oder Wahlhelferinnen/Wahlhelfern während eines Wahlkampfes zum Zweck der Wahlwerbung verwendet werden. Dies gilt für Bundestags-, Landtags- und Kommunalwahlen sowie für Wahlen zum Europäischen Parlament.

Missbräuchlich ist insbesondere die Verteilung auf Wahlveranstaltungen und an Informationsständen der Parteien sowie das Einlegen, Aufdrucken oder Aufkleben parteipolitischer Informationen oder Werbemittel. Untersagt ist gleichfalls die Weitergabe an Dritte zum Zwecke der Wahlwerbung. Unabhängig davon, wann, auf welchem Weg und in welcher Anzahl diese Schrift der Empfängerin/dem Empfänger zugegangen ist, darf sie auch ohne zeitlichen Bezug zu einer bevorstehenden Wahl nicht in einer Weise verwendet werden, die als Parteinahme der Bundesregierung zugunsten einzelner politischer Gruppen verstanden werden könnte.



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

