

# Hohe Rechenleistung im Dienste der Wissenschaft

**Forschungseifer. Wissenschaftler des Instituts für Numerische Simulation der Uni Bonn haben ihre Rechenpower aufgerüstet. Seit einigen Monaten nutzen sie einen Linux-Cluster, der aus 128 Dell PowerEdge 1850-Servern besteht. Er ist 40 Mal schneller als der Vorgänger.**

Strömungsverläufe sind keine abstrakten Beschreibungen aus dem Physikbuch, sondern alltägliche Realität – die Skala reicht vom Wirbel im Wasserglas bis zum tropischen Hurrikan. Komplex sind Strömungsverläufe immer: Wirbelstürme zum Beispiel entstehen über dem Meer, wo die Wassertemperatur 27 bis 30 Grad Celsius beträgt. Wasser verdunstet, steigt auf und es bilden sich Gewitterwolken. Über der Meeresoberfläche erzeugen Winde Turbulenzwirbel, die im Zusammenspiel mit den Wellen Gischt und damit Salzpartikel in die Luft transportieren. Salzpartikel dienen als Kondensationskerne für Regentropfen des Wirbelsturmes. Die physikalischen Mechanismen der Sturmentstehung, -verstärkung und -aufrechterhaltung umfassen Abläufe auf Bewegungsskalen von wenigen Millimetern bis Hunderten von Kilometern. Die Zeitskala erstreckt sich vom Sekundenbereich (Kondensationsvorgänge) bis zu mehreren Tagen (der Lebensdauer eines Hurrikans).

Mit ähnlich komplexen Vorgängen haben es Wissenschaftler am Institut für Numerische Simulation sowie am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Bonn zu tun. Die Bonner Mathematiker befassen sich mit der Simulation und Modellierung von Strömungen mit freien Oberflächen wie sie in Gewässern, Schleusen und Wehren vorkommen sowie der Tröpfchen- und Spraybildung in den Brennkammern von Raketen. Ein weiterer Untersuchungsschwerpunkt am Bonner Institut sind Fragen der Materialwissenschaften.

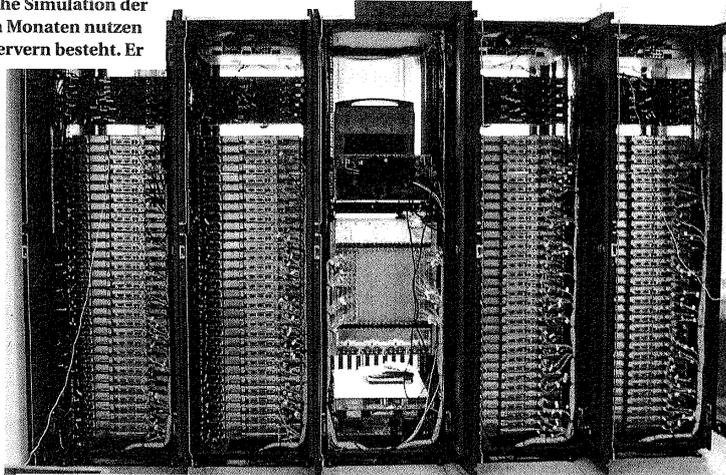
Hierbei werden moderne Werkstoffe wie Spezialkeramiken für den Fahrzeug- und Flugzeugbau sowie neue Verbundstoffe, die mittels so genannter Nanoröhren aufgebaut werden, am Rechner entworfen und ihre Eigenschaften auf der Mikroebene und sogar der Quantenskala analysiert. Neben diesen Fragestellungen der Ingenieur- und Naturwissenschaften werden von den Mathematikern aber auch Anwendungen der Finanz- und Wirtschaftswelt bearbeitet. So entwickeln die Bonner unter anderem parallele Verfahren für die Optionspreisbewertung und für Data-Mining-Techniken.

„Die rasante Entwicklung von Hard- und Software in den letzten zehn Jahren hat wesentlich dazu beigetragen, die numerische Simulation als dritten Weg zwischen den meist sehr aufwendigen und teuren Experimenten auf der einen Seite und der reinen mathematischen Theorie auf der anderen Seite zu etablieren“, erläutert Michael Griebel, Direktor des Instituts für Numerische Simulation der Universität Bonn. „Clustercomputer, wie wir sie seit mehreren Jahren im Institut nutzen, berechnen konkrete Vorhersagen eines realistischen Modells und damit Salzpartikel in die Luft transportieren. Salzpartikel dienen als Kondensationskerne für Regentropfen des Wirbelsturmes. Die physikalischen Mechanismen der Sturmentstehung, -verstärkung und -aufrechterhaltung umfassen Abläufe auf Bewegungsskalen von wenigen Millimetern bis Hunderten von Kilometern. Die Zeitskala erstreckt sich vom Sekundenbereich (Kondensationsvorgänge) bis zu mehreren Tagen (der Lebensdauer eines Hurrikans).“

Bereits seit Ende der 90er-Jahre nutzen die Wissenschaftler der Abteilung Wissenschaftliches Rechnen am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Bonn Clustercomputer für numerische Simulationen. Anfangs waren es Systeme von Spezialanbietern, dann folgte eine Phase „Cluster mit PC-Komponenten“. Dieser Rechner unter dem Namen „Parnass2“ bestand aus 72 No-Name-Standard-PCs mit Dual Pentium-II-Prozessoren (400 MHz, 1 GB RAM pro Clusterknoten), lief unter Linux (Red Hat) und war ab 1999 im Betrieb.

### Keine Anpassungen notwendig

Auf diesem Clustercomputer entwickelten die Bonner Mathematiker im Laufe der Zeit ihre parallelen Al-



### DIE CLUSTER-INFRASTRUKTUR

- **Cluster-Knoten**  
128 Dell PowerEdge 1850-Server (3,2 GHz Dual Intel Xeon EM64T, jeweils 2 GB Hauptspeicher, 36 GB Festplatte) als zusätzliche Netzwerkkarte Myrinet-2000; als Betriebssystem kommt das Red-Hat-Derivat Fedora Core 3 zum Einsatz; die Server sind in insgesamt vier Serverschränken mit je 32 Systemen untergebracht
- **Netzwerk**  
Die Cluster-Knoten kommunizieren über ein Gigabit-Ethernet mit acht Cisco 3750 Switches für TCP/IP-Dienste und über Myrinet mit einem Cios256-Switch für parallelen Datenaustausch unter MPI
- **Front-End**  
Als Front-End-System, an dem sich alle Benutzer einloggen, agiert ein Dell PowerEdge 2800-Server (3,2 GHz Dual Intel Xeon EM64T, 4 GB Hauptspeicher); als zentraler Plattenspeicher für Backup/Recovery ist daran ein Dell/EMC AX100 Storage Array mit insgesamt 3 TB Kapazität angeschlossen; die unterbrechungsfreie Stromversorgung erfolgt über ein APC 3000-System

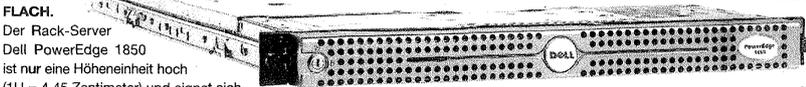
### FLACH.

Der Rack-Server Dell PowerEdge 1850 ist nur eine Höheneinheit hoch (1U = 4,45 Zentimeter) und eignet sich ideal für High Performance Clustering

gorithmen für die näherungsweise Lösung nichtlinearer Differenzialgleichungssysteme, beispielsweise aus Strömungsmechanik, Materialwissenschaften und Biotechnologie. „Da man von Anfang an auf die Einhaltung von Standards und die Portabilität der Programmcodes achtete, haben wir heute sehr zuverlässige und ausgereifte Algorithmen und Softwarepakete, die auf allen Großrechnerarten lauffähig sind“, sagt Dr. Marc Alexander Schweitzer, Assistent am Institut für Numerische Simulation der Universität

von Erfahrungen mit Dell-Workstations an den Arbeitsplätzen der Institutsmitarbeiter sowie einiger Dell-Server am Institut fiel die Wahl schließlich auf Dell“, erläutert Schweitzer. „Wichtige Aspekte dabei waren die Zuverlässigkeit, die Skalierbarkeit und das überzeugende Preis-Leistungs-Verhältnis.“

Ende 2004 erwarb das Institut 128 Dell PowerEdge 1850-Server (3,2 GHz Dual Intel Xeon EM64T, jeweils 2 GB Hauptspeicher, 36 GB Festplatte). Jeder der 128 Clusterknoten verfügt über eigene Plattenkapazität, um Zwischenergebnisse der numerischen Simulation schnell lokal festzuhalten. Die eigentliche Daten-



Bonn. Parnass2 wurde nahezu fünf Jahre sehr erfolgreich genutzt. Im Verlauf der Zeit war aber die Rechenleistung von Parnass2 nicht mehr ausreichend, um die immer komplexer werdenden Fragestellungen zu bearbeiten, und es mehrten sich schließlich auch hardwarebedingte Ausfälle, die einen zuverlässigen Dauerbetrieb erschwerten. „Wo einzelne Berechnungen über mehrere Monate laufen, macht sich nicht nur die Performance des Clusters ganz entscheidend bemerkbar, sondern vielmehr auch die Stabilität“, erläutert Schweitzer.

Um ein neues, leistungsfähigeres Clustersystem beschaffen zu können, beantragte das Institut für Numerische Simulation zusammen mit dem Sonderforschungsbereich 611 („Singuläre Phänomene und Skalierung in mathematischen Modellen“, ein seit 2002 laufendes, langfristiges Projekt an der Universität Bonn) im Rahmen des Hochschulbauförderungsgesetzes Mittel bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Insgesamt ging es um einen mittleren sechsstelligen Betrag.

Der eigentlichen Beschaffung ging eine Analyse des Marktes voraus, wobei sowohl die großen international agierenden Computerhersteller als auch kleinere Spezialanbieter einbezogen wurden. „Aufgrund ausgiebiger und sehr positiver

Ergebnisse der Analyse wurde die Entscheidung für Dell als Lieferant bestätigt. Die Migration erfolgte auf einem Dell/EMC AX100 Storage Array mit insgesamt 3 TB Kapazität. Ebenso wie bei Parnass2 sind alle Server in ein Myrinet-Netzwerk integriert.

Als Zugangsrechner zum Cluster fungiert ein Dell PowerEdge 2800-Server (3,2 GHz Dual Intel Xeon EM64T, 4 GB Hauptspeicher). Dieser dient zur Authentifizierung der Benutzer, als zentraler Fileserver sowie als Compilerver. Bevor aber ein Wissenschaftler seinen Programmcode auf dem Cluster laufen lassen kann, muss eine erste Version des parallelen Programmcodes auf einem Netz von Workstations (Dell Precision 670) erstellt und validiert werden. Schließlich wird nach einer erfolgreichen Simulation auf dem Cluster der überwiegende Teil der grafischen Darstellung der Rechenergebnisse auf den Workstations durchgeführt.

Betriebsbereit installiert war der neue Clustercomputer mit dem internen Namen Himalaya im April dieses Jahres – gerade noch rechtzeitig, um Benchmarks für die Top-500-Liste der weltweit schnellsten Computer durchzuführen, die im Juni veröffentlicht wurde. Trotz der Kürze der Zeit erreichten die Wissenschaftler im Linpack-Test 1269 GFlops/sec und belegten damit den Rang 428. „Mit mehr Vorbereitungszeit wäre auch ein höherer Wert möglich gewesen“, kommentiert

Das Institut für Numerische Simulation (INS) wurde im Oktober 2003 gegründet. Es gehört zur Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn. In kurzer Zeit hat sich das INS zu einer Forschungseinrichtung von internationalem Rang entwickelt. Auf europäischer Ebene arbeitet das INS im Rahmen von Forschungsvorhaben beispielsweise mit der Bundesanstalt für Wasserbau, dem Label Centre Technologico in Bilbao/ Spanien sowie der ESA (European Space Agency) zusammen. Darüber hinaus unterhält das INS Kooperationen mit renommierten Forschungszentren wie dem CASC (Center for Applied Scientific Computing) des Lawrence Livermore National Laboratory in Livermore/USA, IPAM (Institute for Pure and Applied Mathematics) in Los Angeles/USA und NICTA (National Information and Communications Technology Center Australia) in Canberra/Australien. Des Weiteren werden gemeinsame Forschungsprojekte mit verschiedenen deutschen Banken und Versicherungen am INS durchgeführt.

Schweitzer. Aussagekräftiger als der Eintrag in der Top-500-Liste ist eine Gegenüberstellung mit der Performance von Parnass2. Bei der Inbetriebnahme im Jahr 1999 erreichte der Cluster im Linpack-Benchmark eine Leistung von 30 GFlops/sec. Himalaya erzielte beim gleichen Benchmarktest also einen 40 Mal höheren Wert.

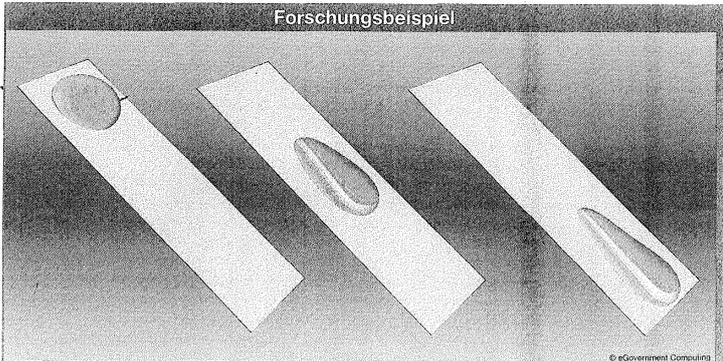
### Kein Hitzefrei im Serverraum

Die Planung und Optimierung des für Himalaya notwendigen Umbaus des Maschinenraums des Instituts einschließlich der gesamten Infrastruktur zur Kühlung und Lüftung wurde während des Aufbaus und der Inbetriebnahme des neuen Clustercomputers bereits auf diesem Rechner durchgeführt. „Mit Strömungsdynamik kennen wir uns aus“, sagt Schweitzer. „Da lag es nahe, die Klimatisierung des Raums und des Rechners modell-

mäßig zu analysieren und die optimalen Standorte für Kühlaggregate, aber auch die Aufstellung von Wärmesensoren zur Überwachung der Temperatur auf diesem Wege zu ermitteln.“ Somit konnte ein zuverlässiger und sicherer Betrieb des neuen Clusters gewährleistet werden, so dass den Forschern nun wieder umfangreiche Rechenkapazität dauerhaft zur Verfügung steht.

Einige der künftigen Forschungsschwerpunkte sind die Analyse strömungsdynamischer Vorgänge von Flüssigkeiten und Gasen, die Untersuchung von neuen Werkstoffen sowie die Simulation von Proteinen für die Biotechnologie. „Aufgrund der rapiden Entwicklung von Hochleistungsrechnern und dem Einsatz effizienter numerischer Algorithmen ist die numerische Simulation zu einer ergänzenden Alternative zum realen Experiment und der theoretischen Untersuchung herangereift und in manchen Fällen sogar der einzige Zugang zur wissenschaftlichen Analyse“, fasst Prof. Griebel zusammen. „Als Schlüsseltechnologie sorgt die numerische Simulation für eine realistische Berechnung komplexer dreidimensionaler und zeitabhängiger Vorgänge. Die Mathematik wird so zum Problemlöser für Fragestellungen der Ingenieur- und Naturwissenschaften und anderer Fachrichtungen.“ Jürgen Wasem-Gutensohn

### Forschungsbeispiel



SIMULATION. Der chronologische Verlauf eines gleitenden Wassertropfens entlang eines geneigten Substrates