

Hochleistungsrechner-Konzept der Goethe-Universität, Frankfurt

1 Vorbemerkungen

Bedingt durch die ungebremsste Steigerung der Leistungsfähigkeit moderner Prozessor Architekturen, werden zunehmend realistische Modellierungen komplexer Naturphänomene erreichbar. Neben den klassischen Anwendungen der theoretisch orientierten Naturwissenschaften, bilden Simulationen, die in einigen Bereichen bereits teure Experimente ersetzen können, einen neuen Schwerpunkt im wissenschaftlichen Rechnen. Darüber hinaus sind experimentelle Großprojekte, wie sie am *Large Hadron Collider* (LHC) am CERN oder im Rahmen der *Facility for Antiproton and Ion Research* (FAIR) bei der GSI geplant sind ohne eine rechenaufwändige aufbereitende Datenverarbeitung der Petabytes von Rohdaten undenkbar.

Dies hat die Entwicklung des wissenschaftlichen Rechnens als eine neue Schlüsselkompetenz, in der die Erfahrungen einer großen Zahl von Disziplinen zusammenfließen, stark befördert. Dieses Zusammenspiel zwischen Anwendung, ihrer Realisierung im Algorithmus und der Architektur des Rechners hat in den letzten Jahren immer größere Bedeutung erlangt, da sich nur mit einem Fach übergreifenden Wissen aktuelle Problemstellungen zunehmender Komplexität bearbeiten lassen.

Eine moderne Volluniversität kann ohne ein starkes Hochleistungsrechnen langfristig nicht konkurrenzfähig sein. Bis in die 1980er Jahre war das Hochleistungsrechnen eine Domäne der Theoretischen Physik. Das hat sich grundlegend geändert. Heute ist die mathematische Modellierung und die Simulation dynamischer Phänomene in allen Bereichen der Natur- Wirtschafts- und Sozialwissenschaften sowie in der Medizin und den Lebenswissenschaften unverzichtbar für ein quantitatives Verständnis komplexer Zusammenhänge. Der freie Zugang zu Rechenkapazität ist für diese Forschung unverzichtbar und ein hohes Gut im Rahmen der Forschungsinfrastruktur der Goethe-Universität. Damit ist verständlich, dass die Verfügbarkeit von Hochleistungsrechnern (HLR) stets ein zentraler Punkt bei Berufungsverhandlungen ist und zunehmend sein wird.

Verantwortlich für Planung, Mitteleinwerbung, Beschaffung und Betrieb der HLR ist das *Center for Scientific Computing* (CSC) der Goethe-Universität.

2 Die HLR-Infrastruktur der Goethe-Universität

Eine zentrale Aufgabe des CSC ist die Bereitstellung von HLR-Kapazität. Der stetig wachsende Bedarf an HLR-Kapazität an der Goethe-Universität ist eine Folge der zunehmenden Computer-basierten Modellierung und Simulation von Phänomenen in *allen* Naturwissenschaften. Mehr als 1000 Forscher aus 100 Arbeitsgruppen aus dem

Bereich der Naturwissenschaften, Mathematik und Informatik sowie Lebenswissenschaften nutzen die Systeme des CSC, die neben der Standortversorgung auch Wissenschaftlern anderer Hochschulen des Landes über den hessischen HLR-Verbund zur Verfügung stehen.

Die HLR-Infrastruktur ist hierarchisch gegliedert in die HLR-Grundversorgung (tier 3) mit den zwei kleineren Systemen *FUCHS-CSC* und *Scout-CSC* sowie dem Landeshochleistungsrechner *LOEWE-CSC* (tier 2). Die Grundversorgung erlaubt Prä- und Postprocessing, Programmentwicklung und die Produktion von Daten im Rahmen kleinerer Forschungsprojekte. *LOEWE-CSC* ist großen Projekten mit einem Umfang ab 1-2 Mio CPU-Stunden pro Jahr vorbehalten.

Ein wesentliches Merkmal der Qualitätssicherung von HLR-Systemen ist ein kontinuierliches Reinvestitionsmodell, das der technischen Entwicklung und den steigenden Anforderungen der wissenschaftlichen Anwendungen angepasst ist. Prozessoren und Speicherbausteine, die einem schnellen technologischen Innovationszyklus folgen, werden in einem Zyklus von 3-4 Jahren erneuert, während teure, langlebige Systemkomponenten (Netze, Kühlung, Stromversorgung, Server Schränke etc) erhalten bleiben. Diese Strategie des CSC garantiert eine stetige Zunahme an HLR-Kapazität bei nahezu konstanten Betriebskosten und schonendem Einsatz der knappen Investitionsmittel.

2.1 HLR-Grundversorgung

Die Finanzierung von Investitionen in Rechner-Systeme der Grundversorgung erfolgt über ein Eigenbeteiligungsmodell: Berufungsmittel interessierter Forscher und zweckgebundene Fördermittel des *Hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst* (HMWK) werden gebündelt und im Rahmen des Großgeräte-Programms durch Bundesmittel verdoppelt. So investierte das CSC im ersten Quartal 2010 mit einer Gesamtsumme von 1.4 Millionen Euro in seine HLR-Grundversorgung. Damit hat sich die angebotene HLR-Kapazität nahezu vervierfacht, und dies durch Einsatz modernster, Strom sparender Technologie bei *konstanten Betriebskosten*. Im Laufe seines Bestehens (Gründung des Zentrums 2001) hat das CSC damit rund 5 Millionen Euro Drittmittel für die kontinuierliche Verbesserung der HLR-Grundversorgung der Goethe-Universität aufgebracht.

Gegenwärtig betreibt das CSC in seinem System *FUCHS* insgesamt 4920 Prozessorkerne und 537 TB Massenspeicher, die mit Infiniband QDR verbunden sind und eine Rechenleistung von 46 TFlop/s erreichen. Trotz dieser erheblichen Steigerung der HLR-Kapazität im Rahmen der Grundversorgung, ist der neue Rechner seit seiner Übergabe an die Nutzer im April 2010 zu über 80% ausgelastet.

Das System *Scout* ist ein GPU-Cluster, der 2009 in Betrieb genommen wurde. Er besteht aus 18 Intel Quadcore Doppelprozessoren und 6 Tesla GPUs pro CPU-Server. Das System ist mit Gigabit Ethernet vernetzt und bietet eine Rechenleistung von 9 TFlop/s double precision oder 108 TFlop/s single precision. Der Cluster dient Schulungszwecken und der Bearbeitung kleiner Projekte, die auf die Entwicklungssprache CUDA angewiesen sind.

Beide Rechner sind in einem eigenen Rechnerraum am naturwissenschaftlichen Campus Riedberg der Goethe-Universität untergebracht und in den Universitätsweiten LWL Ring (Backbone) integriert.

2.2 Landeshochleistungsrechner *LOEWE-CSC*

Mit der Entwicklung des HLR *LOEWE-CSC* im Jahr 2010 und dem Beginn des Betriebs im Januar 2011 sind zwei unterschiedliche Ziele verknüpft worden: (i) der Rechner als Forschungsobjekt und (ii) der Rechner als Forschungsinfrastruktur für Großforschungsprojekte mit heterogenem Nutzerprofil.

LOEWE-CSC als Forschungsprojekt: Green-IT

Im November 2010 wurde in Frankfurt mit dem Rechner *LOEWE-CSC* einer der Energie effizientesten Großcomputer Europas in Betrieb genommen. Mit einer Rechenleistung von 299 TFlop/s war er zum Zeitpunkt der Inbetriebnahme der zweit-schnellste Supercomputer Deutschlands. Die Energie Effizienz beträgt 740 MFlop/s pro Watt. Damit verbraucht *LOEWE-CSC* bei Inbetriebnahme nur etwa ein Viertel der Energie von vergleichbar schnellen Computern, zu Investitionskosten, die mit knapp fünf Millionen Euro etwa bei einem Drittel liegen.

Der Frankfurter Rechner ist eine Eigenentwicklung der Goethe-Universität, des *Center for Scientific Computing (CSC)*, des *Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)* und des *Helmholtz International Center for FAIR (HIC for FAIR)*. Das System umfasst 832 Rechenknoten mit 20.928 AMD-Magny-Cours-Kernen sowie 778 GPU (AMD Radeon HD 5870), 56 TB Hauptspeicher und über 2.5PB Festplattenspeicher. Die Rechenknoten sind über ein Latenz armes QDR Infiniband Netzwerk (40 Gb/s) vernetzt. Der Anteil der Kühlung am Stromverbrauch des Rechners beträgt unter maximaler Last nur 7%. Die Architektur des *LOEWE-CSC* ist dem sehr heterogenen Anforderungsprofil unterschiedlicher Forschungsprojekte angepasst. U.a. arbeiten am *LOEWE-CSC* über 250 Wissenschaftler aus den Bereichen Physik der elementaren und komplexen Materie, Quantenchemie, Lebenswissenschaften und Klimaforschung. *LOEWE-CSC* bietet ebenfalls Rechenleistung für die *Frankfurt-Cloud Initiative*.

Die hohe Rechenleistung erzielt *LOEWE-CSC* durch den Einsatz von Grafikkarten. Dazu wurde in Frankfurt eine neue Softwarebibliothek entwickelt. Die DGEMM Bibliothek, das Kernstück des Linpack benchmarks, erreicht dabei eine Effizienz von 494 Gflop/s auf der Radeon 5870 – das entspricht 90,8% der peak Leistung der GPU. Das ist Weltrekord: es gibt keine Software für diese GPU Architektur, die leistungsfähiger wäre.

Den hervorragenden PUE Koeffizienten von 1,07 verdankt der Rechner einer mit der Firma Knürr gemeinsam entwickelten Wärmetauscher Technologie. Die heiße Luft wird mit Hilfe der Gehäuselüfter durch den in der Rücktür befindlichen Wärmetauscher geblasen. Dadurch sind keine zusätzlichen Ventilatoren in den Racks notwendig. Die Wasserkühlung wurde mit der Firma Infracore am Standort des Rechners, dem Industriepark Höchst realisiert. Über zwei Kühltürme wird Flusswasser verdampft und über einen Wärmetauscher das Wasser des inneren Kreislaufs gekühlt. Der Rechner wird mit CO₂ neutralem Strom der Fa Infracore betrieben.

LOEWE-CSC wurde im Jahr 2011 mit dem GreenIT Best Practice Award der Bundesregierung in der Kategorie *Visionäre Gesamtkonzepte* ausgezeichnet. Im

Jahr 2012 gehörte *LOEWE-CSC* zu den Preisträgern im Wettbewerb *365 Orte im Land der Ideen*. Darüber hinaus erreichte der Rechner Platz 3 der *Datacenter Dynamics Awards* im Dezember 2011 in der Kategorie *Green-IT*.

LOEWE-CSC wurde finanziert aus Berufungsmitteln, Forschungsmitteln verschiedener Großforschungsprojekte sowie dedizierten HLR-Landesmitteln. Diese Mittel wurden gebündelt und waren die Basis für einen Antrag im Rahmen des Großgeräteprogramms der DFG.

2.3 Das FAIR TeraNet

Der Standort von *LOEWE-CSC* ist im Industriepark Höchst, ca. 20 km entfernt vom naturwissenschaftlichen Campus Riedberg. Ursprünglich war der Rechner über eine gemietete Datenleitung mit dem Backbone der Goethe-Universität verbunden. Seit August 2012 ist *LOEWE-CSC* der zentrale Knoten in einem privaten Netzverbund zwischen der Goethe-Universität und der *Gesellschaft für Schwerionenforschung* (GSI), dem *FAIR TeraNet*. Dabei handelt es sich um eine erste Ausbaustufe zur Anbindung der hessischen Universitäten an das künftige internationale Beschleunigerzentrum *FAIR* (Facility for Antiproton and Ion Research).

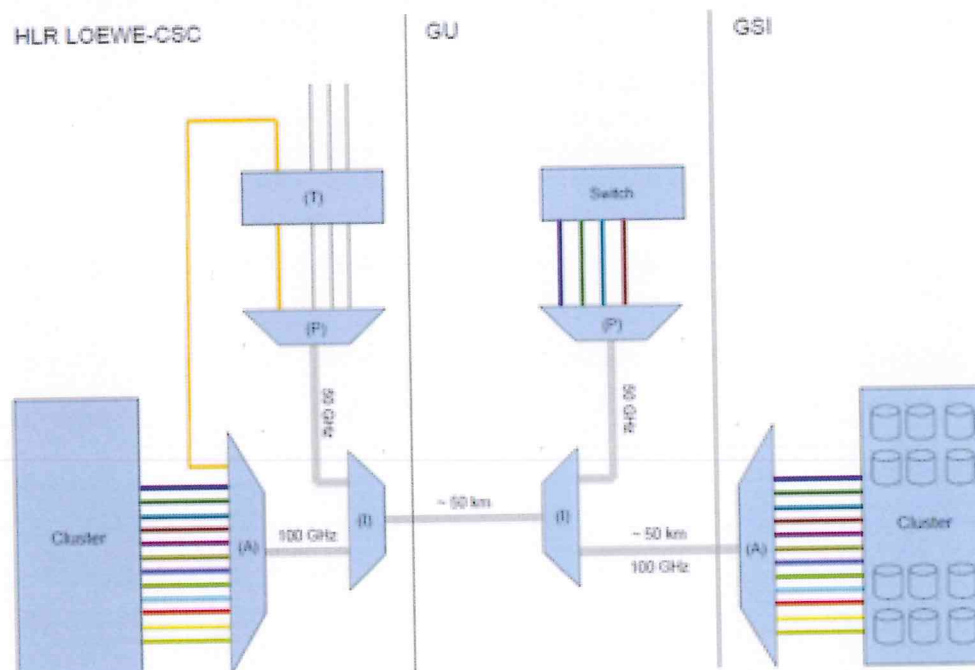


Abbildung 1: Das FAIR TeraNet

Im Erstausbau wurde eine Vernetzung der Standorte GSI (Darmstadt), *LOEWE-CSC* (Frankfurt-Höchst) über den Welt weit größten Internetknoten DE-CIX-Frankfurt mit einer Signaleinkopplung durch die Goethe-Universität am DE-CIX realisiert. Dabei handelt es sich um eine 100km lange single-mode Glasfaserstrecke von der GSI über DE-CIX zum HLR *LOEWE-CSC*, die Protokoll transparent im 100GHz ITU-Grid durch aktive WDM-Komponenten an den beiden Endpunkten beleuchtet wird. Parallel zu diesen 12 Kanälen im 100GHz-Grid werden am DE-CIX derzeit 4 Kanäle im 50GHz-Grid in die Strecke zum *LOEWE-CSC* über Interleaver eingekoppelt. Sie

dienen der Verbindung zum Backbone der Goethe-Universität, der ebenfalls am DE-CIX verschaltet ist.

Damit stehen in der derzeitigen Ausbaustufe insgesamt 4 mal 10Gbit/s für die Verbindung *LOEWE-CSC* und Goethe-Universität (GU) sowie 12 mal 10Gbit/s für die Verbindung *LOEWE-CSC* und GSI zur Verfügung. Alle Frankfurter Nutzer haben über den Backbone der GU, alle externen Nutzer über DE-CIX Zugang zum *LOEWE-CSC*. Durch das Breitbandnetz zur GSI, das künftig auf mindestens 1Terabit/s ausgebaut werden soll, besteht ein schneller Zugriff auf das Lustre-FS der GSI. Dort werden die Daten verschiedener an der GSI und am CERN laufender Experimente gespeichert. Künftig wird das Lustre-FS der zentrale Daten Server der FAIR-Experimente sein.

Zum Betrieb des FAIR TeraNet arbeitet das CSC eng mit dem *Hochschulrechenzentrum* (HRZ) zusammen. Die Netzabteilung des HRZ hat die Netztopologie geplant, die Ausschreibung betreut und überwacht den Betrieb.

3 Die Rolle des CSC

Das CSC wurde im Jahr 2001 als wissenschaftliches Zentrum der Goethe-Universität gemäß § 54 (3) HHG gegründet. Zu den Gründungsmitgliedern zählen die Fachbereiche Physik, Chemie, Geowissenschaften, Informatik und Mathematik sowie das *Frankfurt Institute for Advanced Studies* (FIAS). Das CSC unterstützt Forschung und Lehre im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens.

3.1 Aufgaben und Finanzierung des CSC

Zu den Aufgaben des CSC zählen

- Planung, Beschaffung und Betrieb der Hochleistungsrechner der Goethe-Universität
- Koordination von Studiengängen sowie Organisation von Fachbereich übergreifenden wissenschaftlichen Veranstaltungen zu Themen des Hochleistungsrechnens

Das CSC hat das Ziel in einem 3-4 Jahres Zyklus die HLR-Infrastruktur der Goethe-Universität den Entwicklungen des IT-Marktes anzupassen. Dabei werden insbesondere Rechenknoten und Hardware Beschleuniger ausgetauscht, um zunehmend wachsende Rechenleistung bei gleichem Energieverbrauch zu gewährleisten. Durch die kontinuierliche Investition in seine Rechner will das CSC seinen Nutzern eine moderne HLR-Umgebung bieten.

Mit der Organisation von Veranstaltungen zu Themen des wissenschaftlichen Rechnens in Forschung und Lehre strebt das CSC einerseits den Austausch unter Forschungsgruppen der verschiedensten Disziplinen an, andererseits im Rahmen des Master Studiengangs *Computational Physics* (ab 2014) die Ausbildung von Studenten in der Querschnittswissenschaft des wissenschaftlichen Rechnens.

Das CSC wird finanziert aus Berufungsmitteln am Hochleistungsrechnen interessierter Professuren und aus zentralen Mitteln der Universität. 95% dieser Mittel

werden gebündelt und durch Bundesmittel im Rahmen des Großgeräte Programms der DFG ergänzt, um regelmäßig die HLR-Infrastruktur zu erneuern. Die restlichen 5% dienen Allgemerkosten des CSC, wie z.B. Kosten für die Fortbildung der Mitarbeiter, Reisekosten und Verbrauchsmaterial.

3.2 CSC und HRZ

Das HRZ ist ein moderner Dienstleister mit einem umfangreichen Angebot an verschiedenen Diensten im Bereich der medialen Infrastruktur und der Informationsverarbeitung für *alle* Mitglieder der Universität. Entsprechend seiner zentralen Bedeutung wird das HRZ zentral finanziert. Hochleistungsrechnen ist hingegen ein *spezieller Dienst* für einen zunehmend wachsenden Bereich der Forschung, der aufgrund der rasanten technologischen Entwicklung einen im Vergleich hohen und flexiblen Kapitaleinsatz erfordert.

Aus dieser Erkenntnis heraus haben die naturwissenschaftlichen Fachbereiche das CSC gegründet. Aufgabe des Zentrums ist es, u.a. Forschungsmittel für das Hochleistungsrechnen zu bündeln und über regelmäßige Großgeräteanträge durch Bundesmittel zu ergänzen. Das CSC beschafft und betreibt in enger Absprache mit den Nutzern (Geldgebern) und in enger Zusammenarbeit mit dem HRZ die HLR-Systeme der Universität. Dadurch wird einerseits die Universität von einem speziellen Dienst entlastet, andererseits erlaubt die Autonomie des Zentrums ein flexibles und Nutzer bezogenes Handeln.

3.3 Organisationsstruktur des CSC

Zentrales Organ des CSC ist der Zentrumsrat, der die/den geschäftsführenden Direktor/in wählt. Dem Zentrumsrat gehören die Mitglieder des CSC an. Dabei handelt es sich um die Gründungsmitglieder aller im Einrichtungsantrag aufgeführten Projektleiter/innen sowie Leiter/innen von Organisationseinheiten, die auf Vorschlag des Zentrumsrates und der entsendenden Organisationseinheiten zu Mitgliedern bestellt werden. Weitere Mitglieder sind die Mitarbeiter/innen des CSC. Der Zentrumsrat entscheidet über alle Angelegenheiten des CSC von grundsätzlicher Bedeutung.

Der/Die technische Leiter/in ist verantwortlich für Planung, Beschaffung und Betrieb der HLR-Infrastruktur des CSC. Er/Sie wird unterstützt durch das Support Team, das für den technischen Betrieb der HLR sorgt und durch das Beratungsteam, das für die Beratung und Schulung der Nutzer zuständig ist. Das Beratungsteam besteht aus zwei FTE, die vom Hessischen HPC-Kompetenzzentrum (siehe 3.4) an das CSC delegiert sind.

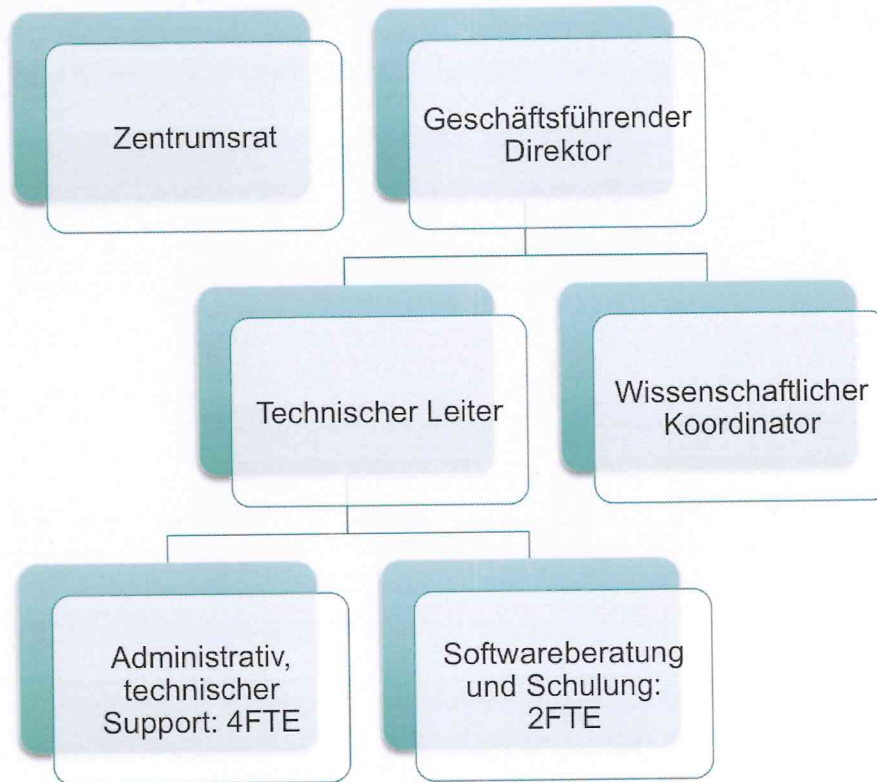


Abbildung 2: Organigramm des CSC

Der/Die wissenschaftliche Koordinator/in ist für die Koordinierung des Studiengangs *Computational Physics* verantwortlich. Darüberhinaus organisiert und betreut er/sie wissenschaftliche Veranstaltungen zum Thema Hochleistungsrechnen.

3.4 Zusammenarbeit mit anderen Einrichtungen

Das CSC arbeitet eng mit dem HRZ der Goethe-Universität zusammen, insbesondere an den Schnittstellen Netze und Backup-Systeme. Über die Mitgliedschaft des HRZ im Zentrumsrat des CSC entscheidet das HRZ über alle Maßnahmen des CSC mit.

Um von der technologischen Entwicklung bei Rechnerarchitekturen zu profitieren, besteht eine enge Kooperation mit dem Lehrstuhl *Architektur von Hochleistungsrechnern* (Prof. Lindenstruth) des Fachbereichs Informatik und Mathematik. Generell sind die Fachbereiche über die Leiter der Großforschungsprojekte im Zentrumsrat an allen Entscheidungen des CSC beteiligt.

Mit dem Ziel eine intensivere Betreuung hinsichtlich Software- Entwicklung und Pflege anbieten zu können, wird im 4.Quartal 2013 das *Hessische HPC-Kompetenzzentrum* gegründet. Das CSC vertritt die Interessen der Goethe-Universität im Kompetenzzentrum. Ziel des Kompetenzzentrums ist u.a.

- die Beratung bei der Programmentwicklung und Optimierung
- die Schulung der Nutzer (e.g. GPU Programmierung)
- die Darstellung des Hochleistungsrechnens in Hessen in Gremien und Veranstaltungen.

Insgesamt stehen Stellen für 8 Wissenschaftliche Mitarbeiter bereit, die eng vernetzt an den hessischen HLR-Standorten die Nutzer beraten und schulen. Darüber hinaus vertritt das CSC die Interessen der Goethe-Universität im ständigen Landesbeirat für Hochleistungsrechnen.

4 HLR-Entwicklungsstrategie

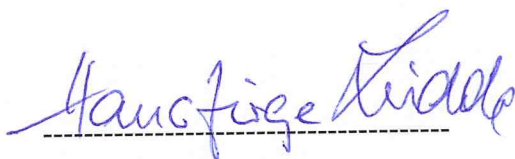
Ein wesentliches Merkmal der Qualitätssicherung von HLR-Systemen ist ein *kontinuierliches Reinvestitionsmodell*, das der technischen Entwicklung und den steigenden Anforderungen der wissenschaftlichen Anwendungen angepasst ist. Dabei wird das technologische Innovationspotential im Bereich der Strom sparenden Prozessorentwicklung ausgenutzt: Die Rechenleistung von Prozessoren verdoppelt sich innerhalb eines Innovationszyklus von 18 Monaten bei nahezu *konstanten Betriebskosten* durch die zunehmende Integration von Prozessorkernen (Multi-core Technologie).

Dieser technologische Fortschritt wird im Rahmen eines 3-4 jährigen Erneuerungszyklus des Landeshochleistungsrechners *LOEWE-CSC* konsequent berücksichtigt. Dabei arbeitet das CSC eng mit dem Lehrstuhl *Architektur von Hochleistungsrechnern* des Fachbereichs Informatik und Mathematik zusammen.

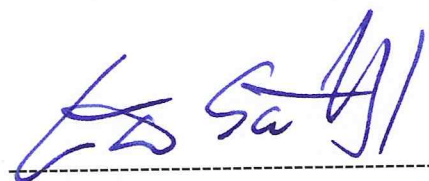
Die bei der Erneuerung der Systemkomponenten frei werdenden Rechenknoten werden im CSC aufbereitet und im Rahmen der HLR-Grundversorgung im System *FUCHS-CSC* weiterhin genutzt.

Investitionsmittel zur Erneuerung von Systemkomponenten oder zum Ausbau der HLR-Infrastruktur werden über das Selbstbeteiligungsmodell des CSC, ergänzt um direkte HLR-Fördermittel des Landes eingeworben. Dieser Landeshalbanteil ist dann die Basis für Anträge im Rahmen der Großgeräteförderung der DFG.

Ziel ist, mittelfristig eine Etatisierung des Hochleistungsrechnens im hessischen Landeshaushalt zu erreichen. Ein derart finanziertes hessisches HLR-Gesamtkonzept würde die durch die Betriebskosten stark belasteten Universitätshaushalte entlasten und die Nachhaltigkeit der HLR-Infrastruktur in Hessen stabilisieren.



Prof Dr H.J. Lüdde (Leiter des CSC)



Prof Dr Enrico Schleiff (Vizepräsident)