

Einführung in das Hochleistungsrechnen – Vergangenheit, Gegenwart und Zukunft

F. Schmitz, HIK

Einleitung

Zur Entwicklung des ersten deutschen Eigenbau-Forschungsreaktors FR2 wurde 1959 als erster Rechner die Z22 im damaligen Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik (INR) installiert. Dies war die Keimzelle für den kontinuierlichen Rechnerausbau, und von hier aus begann 1968 die Gründung der DVZ (Datenverarbeitungszentrale). Diese stellte die damals leistungsfähigsten Rechner von IBM den Benutzern unterschiedlicher Fachrichtungen zur Verfügung. 1983 konnten durch eine gemeinsame Beschaffung mit der Universität Karlsruhe die Wissenschaftler im damaligen Kernforschungszentrum Karlsruhe einen Hochleistungsrechner nutzen. Dies war der Anfang einer bis heute fortgeführten Kooperation, die 1994 in der Bildung des Virtuellen Rechenzentrums mündete.

Hochleistungsrechnen – Höchstleistungsrechnen, was ist denn das?

Wird der eigene PC oder die Workstation zu klein für die Anwendung, so versucht man auf Rechner einer anderen Leistungsklasse auszuweichen. Dies sind in der Regel größere Compute-Server, die sowohl einen höheren Speicherbedarf als auch die Nachfrage nach stärkeren Prozessoren befriedigen können.

Übersteigt der Bedarf nun wiederum die gängigen Ausstattungen von Compute-Servern, besteht die Möglichkeit, bei den sogenannten Hochleistungsrechen-

zentren zu rechnen. Diese sind besser ausgestattet und bieten dem Benutzer State-of-the-art-Leistung in den Bereichen Compute-Leistung, Hauptspeicherbedarf, I/O-Leistung und Kommunikationsbandbreite. Darüber hinaus gibt es in Deutschland von einem Ausschuss des Wissenschaftsrates (dem „Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“) genehmigte und von Bund und dem jeweiligen Bundesland finanzierte Zentren, die zum Zeitpunkt der Installation die jeweilige Spitzentechnologie zur Verfügung stellen. Dies sind momentan das HLRS in Stuttgart, HLRB in München und das NIC in Jülich. Darüber hinaus existieren weitere Rechenzentren (DWD in Offenbach, HLRE in Hamburg, IPP in Garching und HRZN Hochleistungsrechner Nord), die erst kürzlich mit leistungsfähiger Hardware ausgestattet wurden.

In den Vereinigten Staaten von Amerika hat man verstärkt in die

ASCI-Projekte investiert um von den teureren Rechnern mit Spezialprozessoren auf preisgünstigere Plattformen umzuschwenken. Bei diesen Projekten wird Wert auf Commodity-Komponenten gelegt. Vektorprozessoren werden hier nicht mehr eingesetzt.

Um jetzt Hochleistungsrechnen gegen Höchstleistungsrechnen „sinnvoll“ abzugrenzen, kann man momentan (2002) bei etwa 15 Mio. € Hardware-Investition eine Art Trennlinie ziehen [4]. Zu bedenken ist, dass 1967 eine Telefunken-Digitalrechenanlage TR440 13 Mio. DM und 1985 eine IBM 3090/200 sogar 20 Mio. DM gekostet hat.

Vom Hochleistungsrechner zum Grid

Eine kurze Einführung

Konrad Zuse, John V. Atanasoff, Clifford Berry, Howard Aiken und Grace Hopper schufen ab 1936 die Voraussetzungen für die heutige Datenverarbeitung (Abb. 1).



Abb.1: ENIAC I, Electronical Numerical Integrator And Calculator (Gewicht: 30 Tonnen).

Mit der Erfindung des Transistors 1947 und der Entwicklung des ICs 1958 begann die Miniaturisierung, die Supercomputer aber auch PCs erst möglich gemacht hat.

1964 begann mit der CDC 6600 die Ära der Supercomputer mit 1 Megaflop/s (millions floating point operations per second, 1 Megaflop/s entspricht 10^6 Gleitkomma-Operationen pro Sekunde, auch Megaflops), fünf Jahre später folgte der Nachfolgerechner CDC 7600 mit einer Spitzenleistung von 10 Megaflop/s. 1971 brachte Intel mit dem 4004 den ersten Mikroprozessor der Welt heraus. Zwei Jahre später erschien mit dem Intel 8080 der erste 8-Bit-Allzweckmikroprozessor und 1975 der erste PC (Name erst 1981 von IBM geprägt) auf den Markt: Der MITS Altair 8800. Hier sind auch Apple I (1976), Commodore Pet 2001 (1977), Sinclair ZX-80 (1980), IBM PC (1981) zu nennen (www.weller.to).

1974 wurde der erste „massiv parallele“ Rechner mit 64 PEs (processing elements) im NASA Ames Research Center installiert. Er fand Einsatz in den Bereichen Strömungssimulation, Bildverarbeitung und Wettervorhersage. Diese Array-Prozessoren, die noch in verschiedenen Rechnern (CM-2, MasPar) eingebaut wurden, werden nicht mehr hergestellt, da alle PEs zu einem Takt immer nur die gleiche Instruktion, jedoch auf anderen Daten ausführen. Mehr durchgesetzt haben sich seit 1969 die Vektorprozessoren, die nach dem Fließbandprinzip die Datenströme abarbeiten und dadurch nach einer start-up Zeit pro Takt und Pipeline ein Ergebnis liefern. 1976 startete Cray mit einem 133-Megaflop/s-Rechner (Abb. 2), der von Los Alamos National Laboratory für M\$ 8.8 gekauft wurde und über 8 Megabyte Hauptspeicher verfügte, eine erfolgreiche Firmen-

geschichte, die im März 1996 von der Übernahme durch SGI (Silicon Graphics Inc.) beendet wurde. Von diesem Rechner wurden weltweit 35 Exemplare verkauft, auch nach Deutschland. 1979 erhielt die Max-Planck-Gesellschaft IPP die erste Cray in Deutschland. Nach 1980 wurde von CDC die Cyber 205 und ab 1983 von Fujitsu die VP-Linie (in Deutschland von Siemens ab 1986 vermarktet) als Gegengewicht zu den Cray-Rechnern am Markt positioniert. Etwas später stiegen auch NEC und Hitachi in diesen Markt ein. Auch versuchte sich IBM mit einem Vektorzusatz zur IBM 3090 ein Stück vom Kuchen zu sichern. Dies war jedoch genauso erfolglos wie die Gründung der Tochterfirma ETA von CDC, die mit den Nachfolgerechner der Cyber 205, der ETA 10, im April 1989 wegen technischer Probleme scheiterte. Convex versuchte mit seinen Cray-kompatiblen Rechnern Kunden im Hochschulbereich anzusprechen. Letztendlich werden aber die Parallelrechner die durch die hohe CPU- und I/O-Leistung dominierenden Vektorrechner verdrängen können, da nur so der Leistungshunger vieler Anwendungen zu stillen ist. Die Applikationen müssen vom Anwender parallelisiert werden und dadurch steigt die Komplexität, da neben CPU-Leistung auch Bandbreite und start-up time des Kommunikationsnetzwerkes sowie die I/O-Leistung zu berücksichtigen sind. Jedoch war im Jahr 2002 der leistungsfähigste Rechner ein Vektor-Parallelrechner mit einer Spitzenleistung von 40 Tflop/s (Earth Simulator in Japan, SX-6 von NEC). Dieser Rechner ist leistungsfähiger (www.top500.org) als die 12

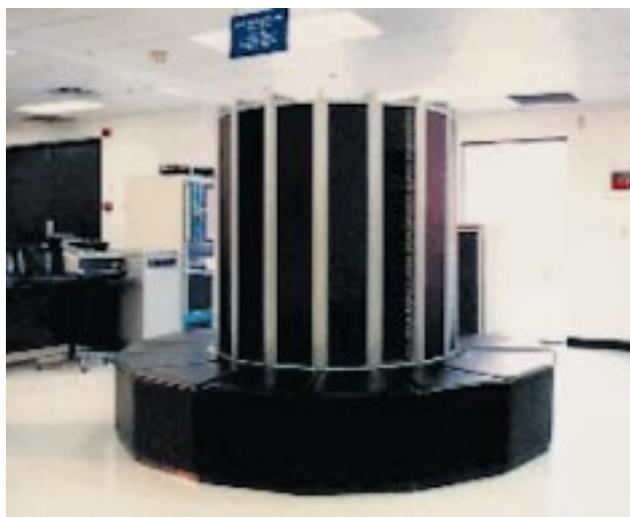


Abb. 2: 133-Megaflop/s-Rechner von Cray (1976).

nächstplatzierten Rechner, die überwiegend in den USA installiert sind.

Bei den Parallelrechnern, deren beschleunigte Entwicklung mit dem Sinken der Preise für Hardware einhergeht, begann der kommerzielle Erfolg 1985 mit dem Aufkommen der Transputern von Inmos (T400, T800), welche sogar als Zusatzkarten für PCs erhältlich waren. Man fing an, bis auf Ausnahmen (CM-5, KSR-1, VPP-Linie, Cray, ...), preiswerte massiv parallele Systeme auf der Basis von Standardhardware zu fertigen. Viele Ansätze verschwanden (Supremum, iPSC/860, ip-Systems), weil sie im Hard- oder Softwarebereich ihre Schwächen hatten. Geblieben sind die großen Vektor-Parallel-Rechner, die SMP-Cluster (IBM, SGI, HP, SUN) und die PC-Cluster.

Vektorrechner haben heute schon die Einzelprozessorleistung, die man etwa 2005 von Intel-basierten Prozessoren erwarten kann. Die Applikationsperformance auf einem Prozessor wird aber erst 2006/2007 gleichziehen können. Dann wird auch die Ära der Vektorrechner nach fast 40 Jahren der Vergangenheit angehören, denn für ein Nischendasein als Spezialrechner dürften Vektor-Parallel-Rechner zu kostspielig sein.

Will man all die weltweit verfügbaren Ressourcen allgemein verfügbar machen (so wie „Strom aus der Steckdose“), dann bedarf es einer geeigneten Vernetzung und der Standardisierung von Schnittstellen. Dies sind die ersten Schritte zu einem weltweiten Netzwerk (Grid), in dem Datenspeicher (Daten-Grid), Rechenleistung (Com-

pute-Grid) und anderes angeboten werden.

Geschichtliche Entwicklung im Forschungszentrum

Im Umfeld der Reaktortechnik lassen sich wesentliche Grundlagen zunächst nur durch aufwendige numerische Rechenmodelle simulieren und erforschen. Zur Unterstützung der Wissenschaftler bei solchen numerischen Rechnungen wurde bereits 1959 mit dem Röhrenrechner Z22 (Abb. 3) ein für damalige Verhältnisse leistungsfähiger Rechner im Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik betrieben. 1968 wurde schließlich mit der Datenverarbeitungszentrale (DVZ) das zentrale Rechenzentrum des Forschungszentrums gegründet, das seither ohne Unterbrechung für die Wissenschaftler des Zentrums leistungsfähige Rechner betreibt. In Kooperation mit der Universität Karlsruhe konnte dann ab 1983 der Vektorrechner Cyber 205 für große rechenintensive Programme genutzt werden. Im Herbst

1987 begann dann die Ära der Fujitsu-Vektorrechner im Forschungszentrum. Der erste Rechner, Modell VP50 mit 7 ns Zykluszeit, hatte 64 Megabyte Hauptspeicher und erbrachte eine Rechenleistung von etwa 138 Megaflop/s für die Matrixmultiplikation. Auch mit der IBM 3090 wurde 1990 versucht, durch 6 Prozessoren und einer zusätzlichen Vektoreinheit pro Prozessor die Leistungsfähigkeit zu steigern. Jedoch ergab sich nur dann ein Vorteil gegenüber dem VP50, wenn man parallelisierte. Da die IBM 3090/600VF jedoch auch im interaktiven Betrieb genutzt wurde, konnte sie sich nie für das Hochleistungsrechnen etablieren. Im Mai 1991 erfolgte die Ablösung des VP50 durch das leistungsfähigere Modell VP400-EX (1988 wurde gemeinsam von Universität und Forschungszentrum ein S600/20 beschafft, jedoch ein VP400-EX als Interimslösung an der Universität installiert). Nach der Abschaltung des VP400-EX im Herbst 1994 wurde ein Rechner der Firma Cray, eine J916 mit

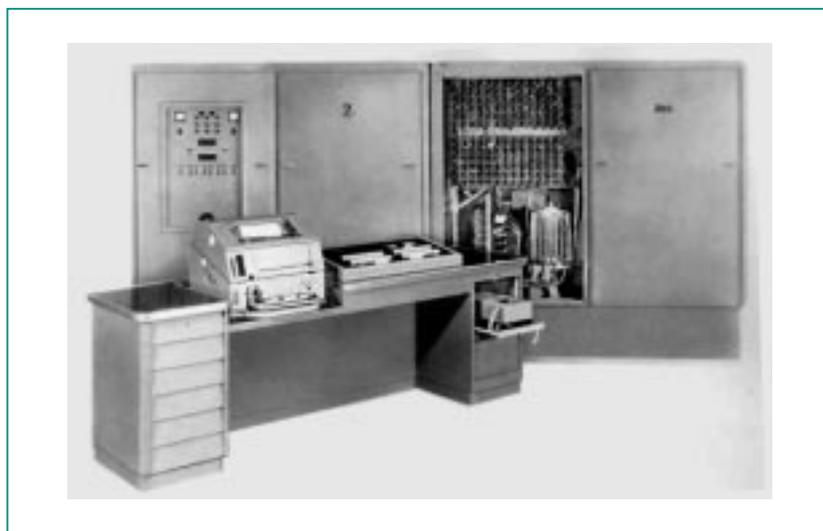


Abb. 3: Röhrenrechner Z22 von 1959.

16 Prozessoren und 4 Gigabyte Hauptspeicher als Ersatz beschafft. Nach anfänglichen Hardwareproblemen wurde der SMP-Rechner jedoch recht schnell von den Benutzern akzeptiert und musste erst im Herbst 1998 abgeschaltet werden, nachdem die

Auslastung des Rechners stark nachgelassen hatte. Seit Frühjahr 1996 befindet sich ein VPP300 im Forschungszentrum (Abb. 4), welcher, wie der IBM/RS6000 SP an der Universität, im Rahmen des Virtuellen Rechenzentrums (VRZ) betrieben wird. 1998 wurde das

erste kleine Linux-Cluster mit zwei Doppelprozessorknoten installiert und einem Institut zur Verfügung gestellt. Das Cluster wurde sukzessive ausgebaut und im Sommer 2000 durch eine hpclLine der Firma Siemens-Nixdorf ersetzt. Diese Aktivitäten sind die Keim-

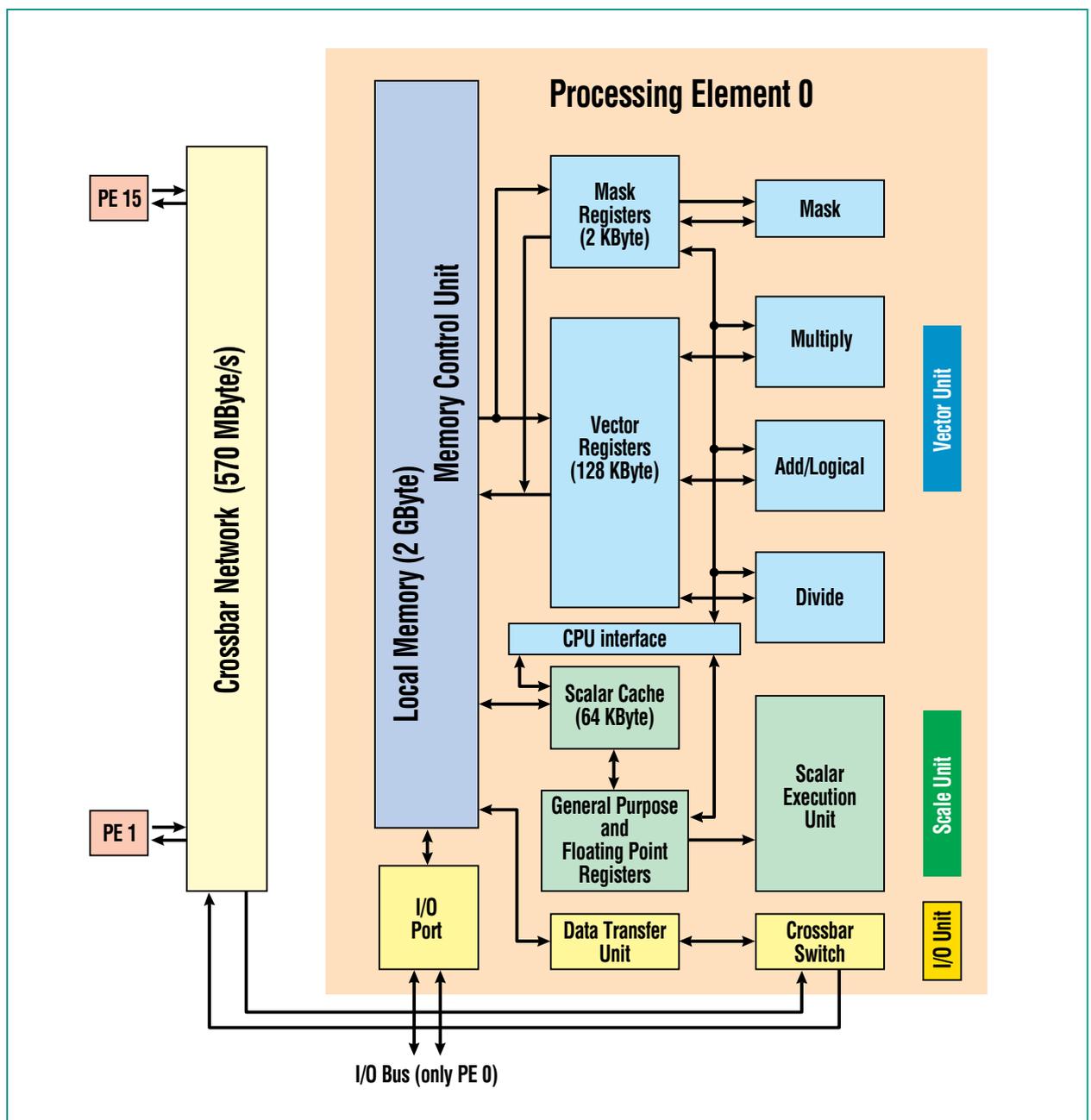


Abb. 4: Schaltbild des VPP300.

zelle des Grid-Computings im Forschungszentrum Karlsruhe. Außerdem wurde im Jahr 2002 ein Athlon-System 1800+ mit 10 Doppelprozessoren und Gigabit-Netzwerk in Betrieb genommen. Zusätzlich zum VPP300 wurde dessen Nachfolgerechner VPP5000 im Frühjahr 2000 mit vier Prozessoren installiert und ein Jahr später auf 8 Prozessoren – zwei davon mit 16 Gigabyte Hauptspeicher – aufgerüstet. Mit 9.6 Gigaflop/s Spitzenleistung verfügt dieser Rechner über den zweitschnellsten Prozessor weltweit.

Nur mit geringen Widerständen ging dann Ende 1999 im Forschungszentrum auch der letzte IBM kompatible Rechner mit dem Betriebssystem MVS in den Ruhestand. Seitdem sind ausschließlich Unix-Rechner im Einsatz. Die dadurch entstandenen Lücken wurden aber bereits vorsorglich durch AIX-Rechner (Unix-Computer der Firma IBM) geschlossen. 1993 stellte die damalige Hauptabteilung Datenverarbeitung und Instrumentierung (HDI) – heute Hauptabteilung Informations- und Kommunikationstechnik (HIK) – als zentraler Diensteanbieter drei AIX-Workstations zur Verfügung, die dann später durch ein Cluster mit vier Power2-Prozessoren abgelöst wurden. Dieses System wurde im Sommer 2002 stillgelegt. Ende 1999 beschaffte das damals neu gegründete Institut INT eine IBM Nighthawk (acht Power3-SP-Knoten mit jeweils acht 222-MHz-Prozessoren) welche von HIK betrieben wird. Dieser Rechner wurde durch zwei Vorrechner und zwei 4-Wege-Knoten als Compute-Server ergänzt.

Heutiger Stand

Nun, was hat das Rechenzentrum des Forschungszentrums Karlsruhe heute den Wissenschaftlern zu bieten?

Dies sind die folgenden Systeme:

- Ein VPP5000 mit 8 Prozessoren und 80 Gigabyte verteiltem Speicher. Jeder Prozessor liefert die Spitzenleistung von 9.6 Gigaflop/s, die etwa für die Matrixmultiplikation fast erreicht wird. Der lokale RAID-5-Plattenplatz liegt bei netto 730 Gigabyte. Damit lassen sich Datenübertragungsraten von 100-140 Megabyte/s realisieren. Zusätzlich stehen über einen Fileserver 2 Terabyte RAID-5-Platten netto zur Verfügung.
- Ein SP-Cluster aus 64 Power3 Nighthawk-Knoten der Firma IBM mit entsprechendem Switch. Jeder Knoten verfügt über 8 Prozessoren, die über einen Crossbar auf einen gemeinsamen Hauptspeicher von 4 Gigabyte zugreifen. Die Gesamtleistung beträgt maximal 60 Gigaflop/s. Zusätzlich stehen zwei Vorrechner und weitere zwei Knoten mit jeweils vier Prozessoren, aber höherer Taktung, zur Verfügung. Dieser Rechner wurde vom Institut für Nanotechnologie gekauft und im Rechenzentrum aufgestellt.
- Das SP-Cluster der Universität Karlsruhe mit 256 Prozessoren (Winterhawk und Nighthawk Knoten) kann im Rahmen des Virtuellen Rechenzentrums (www.rz.uni-karlsruhe.de/Uni/RZ/VRZ) genutzt werden.

- Ein PC-Cluster der Firma FSC (Fujitsu Siemens Computers) mit 16 Doppelprozessorboards, Intel PII mit 700 MHz und jeweils 1 Gigabyte Hauptspeicher. Verbunden sind die Rechenknoten mit einem preiswerten Fast-Ethernet. Die Leistungsfähigkeit des Gesamtsystems liegt bei etwa 22 Gigaflop/s, wovon aber, anders als beim Vektorrechner VPP5000, nur 20% von normalen Anwendungen erreicht werden. Hier besteht noch erheblicher Entwicklungsbedarf.
- Ein lokaler Lieferant baute ein System mit 10 Athlon 1800+ Doppelprozessoren, Gigabit-Netzwerk und bis zu 3 Gigabyte Hauptspeicher. Dieses System ist seit Frühjahr 2002 in Betrieb.

Zukünftige Entwicklungen

Die momentan verfügbaren Hardwareressourcen im Forschungszentrum zeichnen sich sowohl durch ihre Vielfalt als auch durch die Exklusivität aus. Rechner mit einem Hauptspeicher von 16 Gigabyte für eine einzige nicht parallelisierte Anwendung sind selten, werden aber von den Benutzern nachgefragt. Auch Rechner mit großzügigen SMP-Fähigkeiten und einem schnellen Netzwerk sind für die großen Probleme der Physiker unabdingbar. Speziell auf dem Gebiet der preiswerten Komplettsysteme der Linux-Cluster versucht HIK die Bedürfnisse der Benutzer zu befriedigen. Neben Anwendungen aus der Neutronen-, Kern- und Reaktorphysik sowie Thermo- und Fluidodynamik, Strukturmechanik, Elektromagnetik werden die Rechner sehr stark durch Anwendungen aus der

Festkörperphysik und der Meteorologie genutzt.

Diese Anwendungen benötigen auch weiterhin starke Prozessoren mit den Zugriffsmöglichkeiten auf hochwertigen Speicher. Damit wird die Klasse der SMP-basier-

ten Systeme weiterhin im Forschungszentrum seine Berechtigung haben, ob darunter Vektorprozessoren zu finden sind, kann man bezweifeln. Eine Integration von Systemen des Rechenzentrums in ein mögliches HGF-weites „GRID“ wäre denkbar.

Danksagung

Der Autor dankt den Herren Sanitz und Schommers (HIK) für die Durchsicht des Manuskripts.

Literatur

- [1] H. Borgwaldt,
D. Sanitz,
E.G. Schlechtendahl,
KfK Nachrichten
Jahrgang 16 · 2/84
S. 109-116
- [2] W. Höbel, D. Sanitz
Nachrichten Jahrgang 28
2-3/96 S. 85-96
- [3] *Proceedings of the SC2001*
Denver
- [4] *Stellungnahme des Wissenschaftsrats zur Anmeldung des Landes Baden-Württemberg auf Errichtung eines Höchstleistungsrechner-Systems in Karlsruhe und Stuttgart zum 32. Rahmenplan Mannheim, 17.5.2002*