



RFT-Projekt: Scientific Supercomputing an der TU Graz

Scientific Supercomputing at Graz University of Technology

Die in den vergangenen Jahren rapide gestiegenen Anforderungen an Rechenleistung übersteigen alle Erwartungen. Um ein Maximum an Rechenleistung im Sinne von *floating-point-performance* für parallelisierte Anwendungen zu erzielen, werden heutzutage möglichst schnelle Prozessoren oder Multiprozessor-Maschinen über sehr schnelle Verbindungen miteinander gekoppelt, um noch größere und komplexere Aufgaben in kürzester Zeit zu bewältigen. In derartigen Systemen verfügen die einzelnen Rechenknoten über leistungsfähige Komponenten wie Prozessor, Hauptspeicher, Netzwerk-Interface und evtl. eine Festplatte für lokale System-, Swap- u. temporäre Dateien sowie eine spezielle Busarchitektur. Man unterscheidet hier i. d. Regel 64bit-Systeme mit einem klassischen UNIX-Betriebssystem von 32bit-Linuxsystemen.

Mit *High Performance Computing* (HPC) ist meist eine Clustertechnologie gemeint, die sich gegenüber einem Mainframe bzw. monolithischen Großrechner durch Skalierbarkeit, Flexibilität, Verfügbarkeit, Verwaltungsfreundlichkeit und dem günstigeren Preis auszeichnet. Ein derartiger Cluster besteht aus vielen einzelnen Knoten mit identischer Hardware und einheitlichem Betriebssystem, die über eine schnelle Vernetzung und entsprechender Verwaltungssoftware

zusammengeschaltet sind und sich nach außen hin wie „ein“ echter Supercomputer verhalten.

Einige Master-Systeme solcher Cluster haben zudem noch ein internes RAID-Speichersystem, um größere Datenmengen zu speichern. In der Regel wird jedoch ein externes NAS (*Network Attached Storage*) oder SAN (*Storage Area Network*) verwendet, um den stark gestiegenen Anforderungen an Massenspeicher gerecht werden zu können. Diese Systeme zeichnen sich gegenüber konventionellen RAID-Systemen durch Skalierbarkeit, hohe

Bandbreite, flexible Integration in bestehende Netzwerke, schnelle Bereitstellung und Entlastung der Datei- und Anwendungsserver aus.

Seit einiger Zeit wird vermehrt über *Grid-Computing* (*real-application-cluster* Technologie) gesprochen. Hierunter versteht man einen Zusammenschluss mehrerer autonomer Rechner unterschiedlicher Hardware an verschiedenen Lokalisationen mit unterschiedlichen Betriebssystemen, auf welchen die *workloads* bei Verfügbarkeit der Ressourcen standardisiert übergeben und überwacht werden. So sollen Routine- und Verwaltungsaufgaben automatisiert und brachliegende Ressourcen einer besseren Verwendung zugeführt werden, um eine gleichmäßige Auslastung zu gewährleisten und um – ähnlich wie beim Supercomputing – schneller zu Rechenergebnissen zu kommen oder auch um ultragroße Datenbanken zu gestalten.

Anwendungsbereiche

Supercomputer dienen der Bewältigung komplexer Fragen der wissenschaftlichen Grundlagenforschung und der Erforschung aktueller gesellschaftsrelevanter Themen durch Lösung von Aufgaben numerischer Art oder der Mustererkennung bzw. der Realisierung fotorealistischer 3D-Darstellungen (Visualisierung), um die riesigen Datenmengen bzw. Ergebnisse der menschlichen Wahrnehmungsfähigkeit anzupassen. Sie ermöglichen dem Forscher durch Simulationen neben der Theorie und dem Experiment eine dritte Säule der Festigung von Ergebnissen zu etablieren. Typische Anwendungsbereiche finden sich in der Chemie, Crash-Simulationen, Geodäsie, Genomforschung, Finite Elemente, Strömungs-Analysen und Quantenmechanik, um nur einige Bereiche aktueller Forschungsvorhaben (s.u.) der TU Graz zu erwähnen.

Computing-Cluster an der TU Graz

Am Zentralen Informatikdienst der TU Graz stehen der Forschung folgende Hochleistungsrechnercluster, verbunden mit der notwendigen Infrastruktur (Datenspeicher u. -sicherung, Netzwerk, Software, Administration, Klima- u. ausfallsichere Stromversorgung), zur Verfügung:

Alpha-Cluster (ATHOS)

Im Rahmen der mit Mitteln des RFT getätigten Ausschreibung über ein 64bit-Rechensystem für Finite Elemente und Strömungsdynamik (FECFD) ist seit Herbst 2002 ein HP-Alpha SC45-Cluster mit Quadrics-Switch und einem SAN (HP StorageWorks Enterprise Virtual Array) in Betrieb.

SC45-AlphaCluster, 4x19" Rack						
	CPU [MHz]	RAM [GB]	HD [GB]			
			SCSI	IDE	RAID 5 extern	Storage extern
2 Master	Quad EV68	32	7 *	kein	7 * 18	22 * 73
8 Nodes	1250	16	36			

Linux-Cluster

Zwei 32bit-Cluster wurden im Rahmen einer weiteren Ausschreibung mit RFT-Mitteln angeschafft und sind seit Anfang 2003 in Betrieb.

Myrinet-Cluster: Dieser Cluster verwendet ein Myrinet-Netzwerk für die Interprozesskommunikation der Berechnungen sowie ein Gigabit-Kontrollnetzwerk, über welches auch das NAS (NetApp F820) angebunden ist, da hier sehr viele kleine Datenpakete mit hoher Geschwindigkeit übertragen werden müssen

Myrinet-Cluster, 1x19" Rack						
	CPU [MHz]	RAM [GB]	HD [GB]			
			SCSI	IDE	RAID 5 intern	Storage extern
1 Master	Dual Xeon 2600	4	2 * 18	kein	5 * 73	21 * 72
24 Nodes		1	kein	40	kein	

Gigabit-Cluster: Dieser Cluster verwendet ein Gigabit-Netzwerk für den Datentransfer bzw. das Datei-Sharing zwischen den Nodes und dem internen Storage sowie ein anwendungsoptimiertes 100MBit-Kontrollnetzwerk.

Gigabit-Cluster, 2x19" Rack						
	CPU [MHz]	RAM [GB]	HD [GB]			
			SCSI	IDE	RAID 5 intern	Storage extern
1 Master	Dual Xeon 2600	4	2 * 18	kein	5 * 73	kein
18 Nodes		2	kein	40	kein	
37 Nodes		1				



Ein Teil der Supercomputing-Ressourcen am ZID

Weitere Systeme

Hinzu kommen mehrere kleinere Rechen-Cluster an Instituten, auf denen meist verteiltes und nicht paralleles Rechnen stattfindet.

TUG Forschungsprojekte mit Supercomputing-Ressourcen

Alpha-Cluster am ZID

- Strukturanalysen von Stäben, Platten, Schalen (Inst. für Stahlbau und Flächentragwerke)
- Dreidimensionale Simulation von Abflussprozessen (Inst. für Wasserbau und Wasserwirtschaft)
- An augmented lagrange multiplier approach to continuum multislip single crystal thermo-elasto-viscoplasticity (Inst. für Festigkeitslehre)
- Großmotoren und Strömungen in Tunneln (Inst. für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik, LEC)
- Numerische Strömungssimulation von Pumpen, Turbinen, Ventilatoren, Windkraftwerke etc. (Inst. für Hydraulische Strömungsmaschinen)
- Transsonische Gasströmung durch Leit- u. Laufschaufelbereich von Gasturbinen; Numerische Simulation des laminarturbulenten Grenzschichtumschlages in thermischen Turbomaschinen (Inst. für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik)
- Large Eddy Simulation des Primärzerfalls eines Flüssigkeitsstrahles in einer gasförmigen Umgebung; Modellierung zweiphasiger Grenzschichtströmungen bei unterkühltem Strömungssieden an beheizten Oberflächen; Sportaerodynamische Untersuchungen quer angeströmter Körper; Numerische Simulation der Strömungen im Luftführungskanal von Lackdrahtmaschinen (Inst. für Strömungslehre und Wärmeübertragung, ViF)
- Streuung elektromagnetischer Wellen an Niederschlagspartikeln (Inst. für Breitbandkommunikation)
- GIMS - Genome Information Management System (Inst. für Genomik und Bioinformatik)
- Untersuchung der elektronischen und spektroskopischen Eigenschaften von organisch konjugierten Molekülen mittels quantenchemischer Methoden (Inst. für Festkörperphysik)
- Untersuchung der Strömungsdynamik, der Wandmechanik und der Fluid-Struktur-Interaktionen in Arterien; Untersuchung des Massetransportes in Arterien und in der Arterienwand (Inst. für Mathematik)
- Si-Gerüste mit SiP- u. SiAs-Doppelbindungen; Silanotricyclene und Silyladamantane; Silicium in ungewöhnlichen Koordinationszahlen; Anregungsspektren substituierter Cyclosilane (Inst. für Anorganische Chemie)
- Quantenchemische Berechnungen (Inst. für Physikalische und Theoretische Chemie)

Gigabit-Cluster am ZID

- Numerical Techniques in Geodesy (GOCE etc.); Satellitengeodäsie (Inst. für Navigation und Satellitengeodäsie)
- Stellarator Optimization; Quanten Monte Carlo Simulationen (Inst. für Theoretische Physik)
- Separationseigenschaften belebter Schlämme (Inst. für Apparatebau, Mechanische Verfahrenstechnik und Feuerungstechnik)

Myrinet-Cluster am ZID

- GIMS; Genomik und Bioinformatik für komplexe Krankheiten (Inst. für Genomik und Bioinformatik)

sonstige Linux-Cluster

- Brain Computer Interface; Biosignaldaten; Medizinische Bildverarbeitung (Inst. für Human Computer Interfaces)
- Stellarator Optimization (Inst. für Theoretische Physik)
- Silicium in ungewöhnlichen Koordinationszahlen; Anregungsspek-

- tren substituierter Cyclosilane (Inst. für Anorganische Chemie)
- Quantenchemische Berechnungen von biologisch aktiven Substanzen, Radikalen und Radikationen sowie deren magnetische Eigenschaften; ESR- und NMR-Spektren; Photochemie; Struktur-Aktivität-Reaktivitätsbeziehungen in kondensierter Phase (Inst. für Physikalische und Theoretische Chemie)
- Untersuchung kollinear Punktgitter (Inst. für Softwaretechnologie)

Zuständig für die Systembetreuung und Ansprechpartner der Abteilung Computing sind Uwe Chararas, Mario Lang sowie Erwin Rappel.

Einen Vergleich der Hardware für das an europäischen Universitäten verwendete Supercomputing bietet <http://www.arcade-eu.info/>, und bei <http://www.top500.org/> findet man die aktuelle Liste der Top-500 Superrechner auf dieser Welt.

Weitere Infos: <http://Supercomputing.TUGraz.at/>
Kontakt: supercomputing@TUGraz.at

Scientific Supercomputing at Graz University of Technology

The continuous increase in demand for large-scale computations has developed beyond all expectations. Modern high-performance computing is justified by its capability to solve greater and more complex problems as well as by the necessity to decrease the time of problem solution by the preparation of algorithms and codes, compiler capabilities, libraries and the analysis in data dependencies. Ever since the beginning of high-performance computing, fluid mechanics has played a leading role in the development of numerical simulation techniques. In a wide variety of scientific topics, supercomputers are used to solve problems in astrophysics, bio-informatics, chemistry, crash simulations, electronics, fluid dynamics, geodesy, informatics, structural dynamics, simulations of turbulent flow and for some other specific or nonlinear problems. After an invitation of tenders in 2002 for Finite Elements and Computational Fluid Dynamics, the Information and Communication Technology Center (ZID) at the University of Technology provides the capacity for a better throughput, and offers research groups one 64bit and two 32bit high-performance clusters to solve their numerical or pattern-matching problems. The main computing platforms are a HP-AlphaCluster (40 EV68 CPUs, each 1.25 GHz), represented by ten SC45-Nodes connected via Quadrics switch technology, a Myrinet-LinuxCluster (50 Xeon CPUs, each 2.6 GHz) and a Gigabit-LinuxCluster (112 Xeon CPUs, each 2.6 GHz). Further infrastructure is provided by a SAN (1.5 TB), NAS (1.1 TB) and a UNIX backup system.

Further information: <http://supercomputing.TUGraz.at>
Contact: supercomputing@TUGraz.at