



Neue Rechner im Hochschulrechenzentrum der Philipps-Universität: links im Bild die neue VAX 6000-420, die als zweiter zentraler Rechner betrie-

ben wird (bedient durch Ulrich Block, sitzend, und Alfred Jüngst); rechts der Mini-Supercomputer CONVEX C 230, den die Marburger Universität

als erste Hochschule in Hessen erhalten hat (mit Dr. Jutta Weisel und Dr. Axel Koch).

Fotos: Graßmann

Mini-Supercomputer und neue VAX im Hochschulrechenzentrum

Bereichsrechner und Workstations in den Fachbereichen / Hohe Leistungsfähigkeit

Als erste hessische Hochschule hat die Universität Marburg kürzlich einen Mini-Supercomputer erhalten; ausgewählt wurde ein System der amerikanischen Firma CONVEX, das unter dem Betriebssystem UNIX läuft; der Betrieb für Benutzer wurde am 20.12.1989 aufgenommen. Nachfolger des Graphik-Rechners ist wieder eine VAX unter dem Betriebssystem VAX/VMS der Firma DEC geworden; der Übergang für Benutzer auf die neue VAX, die nun als zentraler Rechner betrieben wird, erfolgte am 1.3.1990. Beschafft wurden die beiden Rechner im Rahmen von zwei in 1989 beantragten HBFG-Maßnahmen, die nach Begutachtung durch die DFG im Gesamtfumfang von ca. 8,3 Mio. DM bewilligt wurden. Im Rahmen dieser Maßnahmen wurde auch der Experiment-Rechner im Fachbereich Physik

durch eine MicroVAX abgelöst; und zusätzlich zu diesem Bereichsrechner wurden bzw. werden für naturwissenschaftliche Fachbereiche insgesamt ca. 20 Workstations unter UNIX bzw. VAX/VMS beschafft. Notwendige Voraussetzung für die Beschaffung all dieser Rechner ist ihre Vernetzung; sie erfolgt mit unterschiedlicher Kommunikations-Software, wobei als Übertragungsmedien erstmals auch Glasfaserverbindungen zum Einsatz kommen. Wissenschaftsrat und DFG empfehlen zur Ausstattung von Hochschulen mit DV-Kapazität ein mehrstufiges Versorgungskonzept - vom Arbeitsplatzrechner bis zum Supercomputer; die gegenwärtigen Maßnahmen haben damit auch Einfluß auf die geplanten PC-Beschaffungen.

PASCAL-Compiler sowie zusätzliche Hilfsmittel zur Verfügung; die Erweiterung der Anwender-Software steht noch aus.

Als Bereichsrechner im Fachbereich Physik wird ein Dual-Host-System MicroVAX 3800 eingesetzt; jeder der beiden selbständigen Rechner (mit jeweils einem Skalarprozessor) verfügt über die etwa fünffache Leistung der abgelösten VAX 11/750 sowie 32 MB Arbeitsspeicher; wie bei den großen VAXen erlaubt die virtuelle Speichertechnik bis zu 4 GB große Anwendungen; zusätzlich beschafft wurden sieben Plattenlaufwerke mit einer Gesamtkapazität von 3,6 GB. Betriebssystem VAX/VMS und Programmierumgebung entsprechen der Systemsoftware-Ausstattung der VAX im Hochschulrechenzentrum. In die Finanzierung dieses Bereichsrechners sind Mittel zur Förderung des Forschungsschwerpunkts Schwerionenphysik für die Arbeitsgruppe von Prof. Fick geflossen.

Ein Beispiel soll die Leistungsfähigkeit der unterschiedlichen Rechner erläutern. Betrachtet sei das Matrixprodukt $A = B * C$ für $(1024*1024)$ -Matrizen; die Speicherung der drei Matrizen erfordert bei einfach genauen Gleitpunktzahlen $3*1024*1024*4$ Bytes = 12 MB; insgesamt $1024*1024$ Vektorprodukte müssen berechnet werden, d. h. mehr als zwei Milliarden Gleitpunktoperationen. Die Ausführung dauert auf der CONVEX unter Ausnutzung eines Prozessors (inkl. Vektorverarbeitung) 53 s, auf der IBM (nur ein skalarer Prozessor) 1970 s und auf der VAX unter Ausnutzung eines skalaren Prozessors (der Vektorprozessor fehlt noch) 1424 s. Die doppelt genaue Version dauert auf der CONVEX 68 s und auf der VAX 2239 s, wäh-

rend sie auf der IBM wegen der zeitigen Begrenzung des virtuellen Speichers auf 16 MB gar nicht ausgeführt werden kann. Auf einem PC unter DOS setzt der geringe Arbeitsspeicher die Grenzen für das Beispiel; es können bestenfalls $(200*200)$ -Matrizen einfacher Genauigkeit multipliziert werden; hochgerechnet würde die Multiplikation auf einem PS/2 (mit 80386 Prozessor) etwa 19000 s dauern. Die Prozessorleistung ist allerdings nur eines von vielen Kriterien beim Rechnervergleich; der Einsatz der vielen unterschiedlichen Rechner resultiert aus dem riesigen Aufgabenspektrum von Forschung und Lehre.

Während in den frühen achtziger Jahren „dumme Terminals“ sternförmig an zentrale Rechner angeschlossen wurden, werden heute für die Vor- und Nachbearbeitung umfangreicher Berechnungen auf Supercomputern Workstations eingesetzt; an die Stelle der Datenübertragung über Telefonkabel sind LAN-Techniken (z. B. Ethernet) getreten, an die Stelle des zeichenorientierten Dialogs leistungsfähige Kommunikations-Funktionen wie z. B. fensterorientierter Dialog inkl. Graphik, Filetransfer oder Netzwerk-Filesysteme. Hauptaufgabe der Workstations ist die Visualisierung von Berechnungen, wie z. B. die Darstellung von Molekülstrukturen, von Oberflächen inkl. Druckverteilungen, von Strömungen in Flüssigkeiten und Gasen sowie von Temperatur- oder Dichteverteilungen im Raum, und das alles, wenn möglich, in Abhängigkeit von der Zeit. Die graphischen Eigenschaften der Workstations stehen damit im Vordergrund. Beschafft wurden bzw. werden acht UNIX-Workstations der Firma Silicon Graphics (Typ Personal Iris) für die Fachbereiche Chemie und Pharmazie sowie ca. zwölf VAX/VMS-Workstations der Firma DEC (Typ VAXstation VS 3100) für die Fachbereiche Mathematik, Physik, Physikalische Chemie und Humanmedizin. Dabei müssen die einzelnen Arbeitsgruppen wie bei der Beschaffung von PC's den jeweils notwendigen Landesanteil gemäß HBFG selbst aufbringen.

Die Architektur von Supercomputern basiert auf unterschiedlichen Techniken zur Leistungssteigerung, wie z. B. der Vektor- und der Parallelverarbeitung. Während bei einem Skalarrechner für jede Addition oder jede Multiplikation zweier Zahlen ein Befehl abgearbeitet werden muß, kann ein Vektorrechner mit einem einzigen Befehl ganze Vektoren (aus z. B. bis zu 128 Gleitpunktzahlen) addieren bzw. multiplizieren; dabei werden die einzelnen Operationen in mehrere Schritte unterteilt und von hintereinandergeschalteten Prozessor-komponenten wie am Fließband abgearbeitet (Pipelining). Für die Parallelverarbeitung wird eine Aufgabe (z. B. ein Prozeß) in mehrere unabhängige Teilaufgaben (z. B. Threads) zerlegt, die dann von mehreren Prozessoren gleichzeitig bearbeitet werden können.

Systeme von CONVEX ermöglichen Vektor- und Parallelverarbeitung. Die installierte CONVEX C 230 hat drei Prozessoren mit jeweils einer Skalar- und einer Vektoreinheit; entscheidendes Merkmal eines Prozessors ist die Spitzenleistung seiner Vektoreinheit, die in MFLOPS (Millionen Gleitpunktoperationen pro Sekunde) angegeben wird und 50 MFLOPS beträgt; je nach Vektorisierungsgrad der Anwendungen wird diese Spitzenleistung jedoch nur annähernd erreicht (der Hersteller garantiert nur, daß sie nicht überschritten werden kann). Die zu bearbeitenden Programme und Datenmengen sind im allgemeinen sehr groß; damit die Prozessoren bestmöglichst genutzt werden, ist ein großer Arbeitsspeicher erforderlich; er hat eine Kapazität von 256 MB, und mit Hilfe der virtuellen Speichertechnik können bis zu 4 GB große Programme (inkl. Daten) verarbeitet werden. Die fünf installierten Plattenlaufwerke haben eine Kapazität von insgesamt 4,7 GB. Der Maximalausbau eines CONVEX-Systems liegt übrigens bei vier Prozessoren, 2 GB Arbeitsspeicher und über 100 GB Platten-speicher. Die Programm-entwicklung erfolgt unter UNIX in FORTRAN; der Compiler vektorisiert und parallelisiert automatisch, oder er wird über entsprechende explizite Direktiven gesteuert.

Supercomputer (ab ca. 20 Mio. DM) gibt es schon an mehreren bundesdeutschen Universitäten oder bei Großforschungseinrichtungen. Für Hessen wird der Höchstleistungsrechner immer noch geplant; an der TH Darmstadt existiert lediglich ein Universalrechner IBM 3090 mit Vektoreinrichtung.

Mini-Supercomputer (für ca. 2 bis 4 Mio. DM) sind als kleinere, preiswertere Ausgaben der Supercomputer anzusehen, mit z. B. langsamer arbeitenden Schaltkreisen. In Marburg wird der Mini-Supercomputer gegenwärtig im wesentlichen für die Grundlagenforschung der Fachbereiche Chemie (z. B. für Molecular Modeling), Physik (z. B. für Simulationen) und Physi-

Zweiter zentraler Uni-Rechner

Nach dem Wegfall der SPERRY als zentraler Rechner wird die neu installierte VAX 6000-420 als zweiter zentraler Rechner neben der IBM betrieben; diese Systeme der Digital Equipment Corporation (DEC; Massachusetts, USA) sind im mittleren Leistungsbereich zwischen den MicroVAXen und den Spitzenmodellen der VAX-9000-Serie angesiedelt; es handelt sich um Universalrechner, die zusätzlich mit Vektorprozessoren ausgestattet werden können. Gegenwärtig hat die neue VAX zwei Skalarprozessoren, von denen jeder etwa die zehnfache Leistung der abgelösten VAX 11/750 hat; gleichzeitig sind die Arbeitsspeicher von 6 MB auf 64 MB gewachsen und vier neue Plattenlaufwerke mit einer Gesamtkapazität von 4,9 GB hinzugekommen; die virtuelle Speichertechnik stellt wie bisher für jede Anwendung bis zu 4 GB bereit. Die ersten Vektorprozessoren sollen im Mai verfügbar sein (DEC ist sehr spät in diese Technologie eingestiegen); ein solcher Vektorprozessor mit einer Spitzenleistung von 50 MFLOPS wird nachinstalliert werden. Der Maximalausbau eines VAX-6000-Systems liegt bei zwei Skalar- und zwei Vektorprozessoren (bzw. sechs Skalarprozessoren), 256 MB Arbeitsspeicher und weit über 100 GB Platten-speicher.

Während mit dem Betriebssystem UNIX Neuland betreten wurde, wird bei der VAX-Ab-

kalische Chemie (z. B. für Strukturanalysen) eingesetzt.

Finanziert wurde der Mini-Supercomputer etwa je zur Hälfte aus Mitteln zur Ablösung der SPERRY (stillgelegt am 30.10.1989) sowie aus Mitteln zur Förderung des Forschungsschwerpunkts Materialwissenschaften für die Arbeitsgruppe von Prof. Reetz (jeweils plus Bundesmittel gemäß HBFG). Entsprechend wird dieser Arbeitsgruppe im Fachbereich Chemie ein Nutzungskontingent garantiert; über die allgemeine Nutzung des Mini-Supercomputers zur Durchführung umfangreicher DV-Projekte wird ein einzurichtender Fachbeirat aus Vertretern verschiedener Fachbereiche entscheiden.

Das etablierte Betriebssystem VAX/VMS beibehalten (analog der Weiterverwendung von VM/SP CMS bei der IBM-Rechner-Erweiterung in 1987); den Benutzern blieben damit Anpassungen ihrer Programme erspart. Für die Programm-entwicklung stehen wie bisher ein FORTRAN- und ein

Vernetzung als Herausforderung der Zukunft

Einige lokale Netze (LAN's) auf der Basis von Ethernet bzw. Token Ring gibt es bereits in der Philipps-Universität; der Ausbau der Ethernet-LAN's wurde begonnen, der Ausbau der Token-Ring-LAN's soll sich anschließen. An das Ethernet-LAN auf den Lahnbergen sind Rechner des Hochschulrechen-zentrums sowie der Fachbereiche Mathematik, Physikalische Chemie und Chemie angeschlossen; zu den Ethernet-LAN's in den Fachbereichen Physik, Pharmazie und Humanmedizin gibt es jedoch nur Verbindungen zwischen Rechnern auf der Basis von DECnet. Diese fachbereichsübergreifenden LAN's und speziellen Rechnerverbindungen werden entfallen; die Ethernet-LAN's einzelner Fachbereiche und des Hochschulrechenzentrums werden (mit Hilfe aktiver Sternkoppler der Firma Hirschmann) direkt untereinander verbunden, damit zwischen Rechnern unterschiedlicher Hersteller neben DECnet auch andere Kommunikations-Soft-

ware, wie z. B. TCP/IP, eingesetzt werden kann (für die Last-entkopplung und Zugriffskontrolle werden zwischen den LAN's Bridges eingesetzt). Kennzeichen für die LAN-Technik ist eine hohe Übertragungsrates (z. B. 4 oder 10 Mbit/s); damit diese auch zwischen entfernten LAN's bereitgestellt werden kann, wurde bei der Bundespost Telekom eine Glasfaserverbindung zwischen dem HRZ und dem Fachbereich Physik in Auftrag gegeben; diese Pilotverbindung wird voraussichtlich im Mai zustande kommen, der Anschluß anderer Fachbereiche soll folgen. Die Vernetzung der Rechner bedeutet für das HRZ die große Herausforderung der Zukunft.

Die Beschaffung von Rechnern hat sich für das Hochschulrechenzentrum zu einer Daueraufgabe entwickelt. Ein weiterer HBFG-Antrag „Pools mit Mikrocomputern“ für die Lehre ist in einem Umfang von ca. 2,4 Mio. DM seit Mitte Februar unterwegs; vorhandene

Pools sollen ausgebaut, und neue Pools mit insgesamt 110 PC's sollen eingerichtet werden, insbesondere in einem PC-Saal für die Geisteswissenschaften am Krumbogen. Darüber hinaus gibt es einen kontinuierlich steigenden Bedarf an Arbeitsplatzrechnern der PC-Klasse; hier ist ein HBFG-Antrag „Vernetzung und intelligente Terminals“ im Umfang von ca. 5 Mio. DM in Arbeit; im Rahmen dieser Maßnahme sollen weitere LAN's in den Fachbereichen auf- bzw. ausgebaut und mit den vorhandenen verbunden werden, so daß von den zu beschaffenden und anzuschließenden ca. 250 PC's wie von Terminals auf die zentralen Systeme im HRZ zugegriffen werden kann. Alle bewilligten und beantragten HBFG-Maßnahmen der Jahre 1987 bis 1990 summieren sich damit auf über 22 Mio. DM; diese Mittel verteilen sich voraussichtlich mit 32 % auf zentrale und 56 % auf dezentrale Systeme, während die Vernetzung 12% erfordert. (Ra)