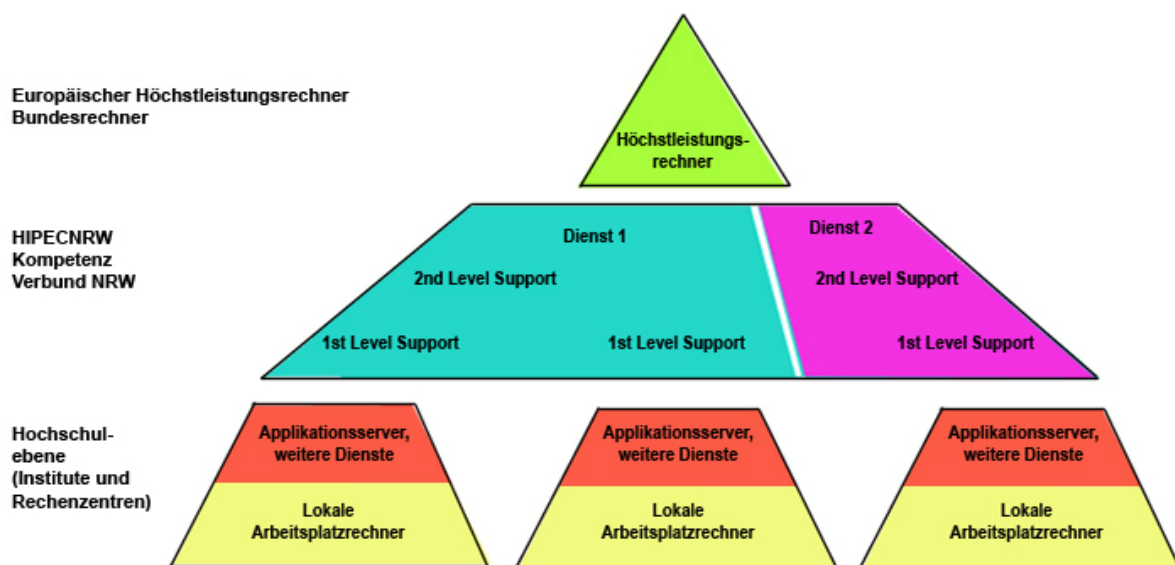


Wissenschaftliches Rechnen an der UDE

Das wissenschaftliche Rechnen hat eine große Bedeutung für die UDE. Lehrstühle aus den Bereichen Biologie, Chemie, Ingenieurwissenschaften, Mathematik und Physik haben erheblichen Bedarf an wissenschaftlichem Rechnen.

A Versorgungsramide der UDE

Die Versorgung mit Kapazitäten für wissenschaftliches Rechnen orientiert sich an der HIPEC Rechnerpyramide.



Der Bedarf der UDE erstreckt sich über alle 4 Ebenen der Rechnerpyramide.

Die Beschreibung des wissenschaftlichen Rechnens an der UDE ist in das IT-Versorgungskonzept der UDE integriert

(http://www.uni-due.de/imperia/md/content/zim/allg_informationen/it-versorgungskonzept-ude.pdf).

1. Stufe: Ressourcen der Arbeitsgruppe

Die einzelnen Arbeitsgruppen der Hochschule betreiben kleinere Computersysteme eigenverantwortlich für Forschung und Lehre in ihrem Bereich. Die Betreuung und Administration dieser Systeme liegt in diesem Fall beim Fachbereich bzw. der jeweiligen Arbeitsgruppe. Im Rahmen des Serverhousing und Serverhosting können die Systeme auch in den beiden zentralen Serverräumen des ZIM aufgestellt werden, um an der vorhandenen

technischen und personellen Infrastruktur wie z. B. Klimatisierung, unterbrechungsfreie Stromversorgung oder Betriebspersonal zu partizipieren.

2. Stufe: Ressourcen der Universität

Die UDE benötigt ein gemäß der HIPEC-Rechnerpyramide mittleres System. Dieses bietet den Anwendern Rechenmöglichkeiten an, die sehr flexibel für kurzfristige Bedarfe, Tests oder eine komplette Nutzung eingesetzt werden können und deshalb besonders für Entwicklungen gut geeignet sind.

Das mittlere System an der UDE hebt sich nicht nur quantitativ sondern auch qualitativ gegenüber Systemen der 1. Stufe durch eine dem Stand der Technik entsprechende massiv parallele Architektur ab.

Es bietet den Nutzern einen schnellen Zugriff und dient auch zur Vorbereitung größerer Produktionsläufe insbesondere auf Rechnern der Stufe 4 (Höchstleistungsrechner des Bundes und in Europa).

Es deckt aber auch den begrenzten Bedarf der Bereiche ab, die über keine eigenen Ressourcen verfügen.

Das mittlere System kommt auch in der Lehre zum Einsatz. Den Studierenden aus den Natur-, Ingenieurwissenschaften und aus der Mathematik werden in Lehrveranstaltungen und Praktika im Wissenschaftlichen Rechnen ausgebildet. Zudem sind entsprechende Ressourcen für forschungsbezogene Studien- und Diplomarbeiten notwendig.

Das ZIM betreibt derzeit mehrere Computersysteme, die verbunden gemäß der HIPEC-Rechnerpyramide als ein System mittlerer Größe fungieren:

- Linux-Cluster (32 x DualXeon (64 Kerne) 2.4 GHz, 80 GB Hauptspeicher)(Installationsjahr 2003) sowie
- Linux-Cluster (71x DualOpteron (142 Kerne) 2.4 GHz DualCore, 624 GB Hauptspeicher) (Installationsjahr 2007).

Das Computersystem der UDE wird bedarfsbezogenen aus Budgetmitteln der Hochschule ausgebaut.

Auf Grund der rasanten technischen Entwicklung ist in einem Abstand von 3 Jahren eine Neuinstallation mit Investitionskosten von ca. 600.000 Euro notwendig, wie sie aktuell (2007) mit einem „HBFG“-Antrag realisiert werden soll.

3. Stufe: Ressourcenverbund NRW (RV-NRW) / Universitätsallianz Metropole Ruhr (UAMR)

Im Ressourcenverbund NRW (<http://www.rv-nrw.de/>) werden Computersysteme der gehobenen Leistungsklasse für alle Forschungseinrichtungen in NRW zur Verfügung gestellt und von den Forschern der UDE genutzt. Das ZIM stellt die Einbindung der Anwender aus der Universität in den RVNRW sicher und unterstützt die Anwender bei der Nutzung der Systeme.

Im Rahmen der UAMR unterstützt die Universität Duisburg – Essen den Aufbau eines Kompetenznetzwerkes Wissenschaftliches Rechnen und nutzt das LIDO-Computecluster der TU Dortmund.

Im Rahmen des RV-NRW werden Ressourcen an der Uni Köln und an der RWTH Aachen genutzt. Die UDE nutzt Systeme der Stufe 3 der HIPEC-Rechnerpyramide für Bedarfe, die vom Computecluster der UDE nicht gedeckt werden.

4. Stufe: Bundeshöchstleistungsrechner

Die Bundeshöchstleistungsrechner stehen Angehörigen der UDE auf Antrag für einzelne Forschungsprojekte zur Verfügung. Die Nutzung dieser Systeme ist nur bei hohem Rechenbedarf möglich, der in entsprechenden Projektanträgen nachgewiesen werden muss. Forscher der UDE nutzen insbesondere den Höchstleistungsrechner des FZ Jülich.

B Nutzerkreis für das Computersystem der UDE

Im Arbeitskreis wissenschaftliches Rechnen werden die betrieblichen Rahmenbedingungen für das Computersystem der UDE festgelegt und die Nutzung der Ressourcen koordiniert. Daneben dient der Arbeitskreis dem Erfahrungsaustausch und der Präsentation aktueller Entwicklungen auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens (<http://www.uni-due.de/zim/arbeitskreise.shtml>).

Im Vorstand für Information, Kommunikation und Medien wird das wissenschaftliche Rechnen durch einen Professor der UDE vertreten.

C Betriebskonzept für das Computersystem der UDE

Der Betrieb der Computerverserver im ZIM wird vor der Servicegruppe „Server/Dateninfrastruktur“ wahrgenommen. Der Betrieb erfolgt 7 x 24 Stunden in zwei zentralen Serverräumen, die mit entsprechender technischer

Infrastruktur ausgestattet sind. Ein nachgeschaltetes Backup/Archivsystem auf TSM-Basis steht zur Verfügung, ebenso eine ausreichende Betriebsmannschaft, die die vollständige Betreuung der Systemtechnik und der systemnahen Anwendungssoftware garantieren kann.

Derzeit gelten die folgenden betrieblichen Rahmenbedingungen für das Computecluster der UDE:

- Einheitliches Clustermanagement,
- Batchsystem Sun-Grid-Engine, IBM Loadleveler,
- Anbindung an das Identitätsmanagement der Hochschule,
- Zugriffssteuerung und Betreuung auch außerhalb der Dienstzeiten durch ausgewählte Mitarbeiter des Arbeitskreises.

Die Anwenderbetreuung erfolgt in der Servicegruppe „Anwendungen/wissenschaftliches Rechnen“ durch eine halbe wiss. Mitarbeiterstelle. Das ZIM unterstützt die Lehrstühle bei der Implementation der Anwendungsprogramme.

D Wissenschaftliches Rechnen in der UAMR

Die UDE unterstützt den Aufbau eines Kompetenznetzwerks „Wissenschaftliches Rechnen“ in der UAMR. Auf diesem Gebiet gilt es das in den Lehrstühlen und den zentralen Einrichtungen vorhandene Know-how zu bündeln und gegenseitig verfügbar zu machen.

Gegenwärtig wird in einer gemeinsamen Investition mehrerer Arbeitsgruppen aus verschiedenen Fachbereichen der UDE ein massiv paralleles Rechnersystem beschafft, das vom ZIM zentral betrieben wird. Dieses System repräsentiert die strategische Ausrichtung der UDE auf massiv parallele Systeme und ist die Basis für die Entwicklung hoch skalierbarer Algorithmen und deren technisch-naturwissenschaftliche Anwendungen in den Material-, Nano- und Biowissenschaften.

Im Rahmen zukünftiger Erweiterungen kann das System auch in der UAMR nutzbar gemacht werden.