

Kurzvortrag

‘Höchstleistungsrechnen–Schlüsseltechnologie für das 21. Jahrhundert’

von

Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert,

Direktor des Bundeshöchstleistungsrechenzentrums

am Forschungszentrum Jülich,

anlässlich des Besuchs der

EU-Kommissarin für Informationsgesellschaft und Medien, Dr. Viviane Reding,

und der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Dr. Annette Schavan,

auf Einladung des stellvertretenden Ministerpräsidenten des Landes NRW,

Prof. Dr. Andreas Pinkwart,

am 31. Januar 2007

Als führende Wissenschafts- und Wirtschaftsstandorte nehmen Deutschland und Europa an einem außerordentlich spannenden Wettkampf teil: Universitäten, Forschungseinrichtungen, Firmen und Konzerne bis hin zu Regierungen bringen sich für ein „Jahrhundertrennen“ in Startposition. In diesem Rennen geht es darum, wer als erster oder überhaupt in der Lage ist, zumindest einige der komplexesten Probleme zu lösen, mit denen sich die Menschheit jemals befasst hat oder, sagen wir besser, befassen muss. Wer bei diesem Rennen vorne ist, wird sehr wahrscheinlich auch wissenschaftlich und ökonomisch einen Spitzenplatz einnehmen. Manche Länder wie die USA, Japan und neuerdings China gehen davon aus, dass möglicherweise sogar entschieden wird, wer überleben kann und wer nicht.

Es geht bei diesem Rennen um das Höchstleistungsrechnen, das man auch unter dem Begriff „Supercomputing“ kennt. Genauer gesagt, geht es darum, dass Supercomputer und damit die Methoden der „Simulation Science“ immer leistungsfähiger werden, sodass immer komplexere Probleme behandelt werden können, Probleme, die zum Teil außerordentlich dringlich werden und deren Lösung für Wissenschaft, Wirtschaft, Gesellschaft und Politik von entscheidender Bedeutung sein wird.

Die Wettervorhersage kann als Beispiel zur Verdeutlichung der Bedeutung des Supercomputing für Gesellschaft und Politik dienen: der Sturm von vor zwei Wochen ist uns allen noch gut in Erinnerung: die Präzision, mit der heute von unseren Superrechnern Unwetter vorausberechnet werden können, ist fantastisch. Auf diese Weise helfen Supercomputer, volkswirtschaftliche Schäden großen Ausmaßes zu vermei-

den. In Zukunft aber wird man im Detail und regional vorhersagen können, wie sich Stürme entwickeln. Die Evakuierung eines Küstenbereichs von einem Kilometer Länge kostet in den USA etwa eine Million Dollar. Man schätzt, dass die Evakuierungsräume bei einem Hurricane mittels genauerer Vorhersagen um etwa einen Faktor drei verkleinert werden können. Ähnliches gilt für Luftverschmutzungen, aber auch für langfristige Vorhersagen zu Ozonloch und Klimaentwicklung.

An diesen Beispielen erkennt man ganz prägnant die Bedeutung des Supercomputing für Politik und Gesellschaft, aber auch ein wichtiges Prinzip: wir müssen die Phänomene weit schneller antizipieren, als sie in der Realität ablaufen, um rechtzeitig die richtigen Entscheidungen zu treffen. Es ist sinnlos, 100 Jahre lang zu rechnen, um damit das Klima im Jahre 2100 vorherzusagen.

Ebenso deutlich wird die Bedeutung dieser Großgeräte-Technologie im Bereich der Biophysik und Strukturbiologie, die sich nur durch Rechnereinsatz zu mathematischen Wissenschaften wandeln konnten: Genom und Proteinfaltung werden mit Hilfe von Supercomputern enträtselt, und bald werden wir in der Lage sein, die Funktionsweise ganzer Zellen mit ihren komplexen biochemischen Netzwerken zu verstehen.

Der Supercomputer ist ein virtuelles Nano-Labor, ein virtuelles Reagenzglas, ein Fusionsreaktor, Teleskop, Mikroskop und sogar ein virtueller menschlicher Körper. Die „Simulation Sciences“ erschließen uns die bislang verschlossenen Gebiete in Biologie, Physik und Kosmologie. Die Beherrschung von gigantischen Komplexitäten ist die eigentliche Aufgabe des Höchstleistungsrechnens. Wo Experimente aus finanziellen und ethischen Gründen, wegen Risiken oder aber prinzipiell, wie in der Kosmologie, nicht möglich sind, setzt die Simulation an.

Gerade auch das Ingenieurwesen und die Wirtschaft hängen immer entscheidender vom Höchstleistungsrechen ab. Dies gilt für das Virtual Prototyping in Auto- und Flugzeugbau oder das Design neuer magnetischer Materialien für Petabyte-Festplatten genauso wie für die Kassenschlager der modernen Filmindustrie: heute leben die Dinosaurier im Supercomputer und geben uns einen kleinen Vorgeschmack von der Leistung zukünftiger „Virtual Reality Generators“. Und vom amerikanischen ASCI-Programm, so nett umschrieben als „Stockpile Stewardship“, lernt man auf jeden Fall eines, nämlich dass man in der Zukunft die für unser aller Wohl wichtige Sicherheitstechnologie im Bereich der Kernkraftwerke ganz ohne die Gefahr neuer Kontamination voll und ganz im virtuellen Kernreaktor, dem „Superrechner“, vor allem auch äußerst kostengünstig weiterentwickeln kann. Ebenso würde ohne Superrechner auch der Bau des Fusionsreaktors ITER nicht – zumindest nicht im Rahmen des veranschlagten Budgets – gelingen.

Die Verfügbarkeit der schnellsten Rechner wird immer entscheidender für die Priorität bei der Veröffentlichung wissenschaftlicher Ergebnisse und damit die führende Stellung unserer Wissenschaftler, aber natürlich auch für Patente und damit für die Industrie und die wirtschaftliche Verwertbarkeit von Forschungsergebnissen.

In den Vereinigten Staaten ist Supercomputing ein Top-Thema: die USA führen die Weltrangliste der weltweit 500 schnellsten Superrechner mit sage und schreibe 63 % der Systeme an, und es ist erklärtes Ziel der US-Politik, einen nichteinholbaren Vorsprung im Supercomputing zu erreichen. Indes hat Deutschland hinsichtlich der An-

zahl der Systeme in der TOP500-Liste in den letzten vier Jahren mehrere Rangplätze eingebüßt, dennoch gibt es aber neuerdings – dank BMBF und der Unterstützung des Landes Nordrhein-Westfalen – auch wieder sehr starke Systeme bei uns in Deutschland, allen voran der Jülicher Supercomputer JUBL. Mit 46 Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde ist JUBL auf Platz 13 der Weltrangliste. Im letzten Jahr war er auf Platz 6 und war gleichzeitig der stärkste rein wissenschaftliche genutzte Rechner der Welt: damit steht der Wissenschaft in Nordrhein-Westfalen und Deutschland ein weltweit führendes Spitzengerät, ein so genanntes Leadership-System, zur Verfügung. Diesen Vorsprung wollen und müssen wir am Forschungszentrum Jülich für Nordrhein-Westfalen, Deutschland und Europa halten und ausbauen!

Es gibt gute Gründe, optimistisch zu sein, dass die Simulation Sciences als dritte Säule der Erkenntnis in Deutschland und Europa bald einen starken Aufschwung nehmen werden: allem voran wird diese Entwicklung von der europäischen Kommission gefördert. Die Generaldirektion Informationsgesellschaft unter der Leitung von Frau Kommissarin Viviane Reding hat jüngst die Empfehlung der ESFRI-Kommission in einen Call zur Vorbereitung neuer Forschungs-Infrastrukturen aufgenommen: ab dem Jahr 2009 soll eine permanente europäische Supercomputerinfrastruktur entstehen, mit bis zu vier so genannten Tier-0-Zentren mit Petaflop-Leistung. Dazu kommen vorhandene nationale Tier-1-Zentren, die zusammen mit den neuen Tier-0-Zentren das Rückgrat der europäischen e-Infrastruktur bilden werden. 10 europäische Länder – Deutschland, Spanien, Frankreich, Großbritannien, Italien, Schweden, Finnland, die Niederlande, Irland und die Schweiz – haben sich zu einem stabilen Konsortium namens HET zusammengeschlossen und bereiten gemeinsam einen Antrag vor. HET, die High Performance Computing for Europe Task Force, besteht seit Juni 2006 und hat eine Serie von White Papers publiziert, die im Detail das Programm zur Schaffung europäischer Supercomputerzentren und des wissenschaftlichen Ökosystems in Europa beschreiben. Die Antragstellung auf europäischer Ebene leitet Prof. Achim Bachem, Sprecher des deutschen „Gauß Centre for Supercomputing“.

Das Gauß Centre wurde im Juni 2006 auf Initiative von Frau Ministerin Dr. Schavan ins Leben gerufen. Mit dem Gauß Centre wurde der stärkste nationale Supercomputerkomplex in Europa geschaffen. Mitglieder sind die drei deutschen Höchstleistungsrechenzentren am Forschungszentrum Jülich, an der Universität Stuttgart und in Garching. Ich freue mich sehr, hier mitteilen zu können, dass ein „Memorandum of Understanding“ im kommenden Monat unterzeichnet werden soll. Es wird eine schnelle Vereinsgründung angestrebt sowie die Rechtsstellung als „Legal Entity“, um in Europa rechtsfähig zu werden. Mit Hilfe eines weiteren Förderprojektes des BMBF, dem Ex@Grid-Projekt, soll die ultraschnelle, optisch-dynamisch geschaltete Vernetzung der Gauß-Mitglieder untereinander und mit den deutschen Hochleistungszentren gewährleistet werden. Dazu stellt das BMBF 30 Millionen Euro zur Verfügung.

Europa und Deutschland bereiten sich strategisch auf das Jahrhundertrennen vor. Einen dritten Grund gerade in Nordrhein-Westfalen und bei uns in Jülich mit Optimismus in dieses Rennen zu gehen, dürfen wir in der Förderung des Supercomputing durch das Ministerium für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes Nordrhein-Westfalen sehen, namentlich durch Prof. Pinkwart. Mit der kürzlich erfolgten Ankündigung der neuen „German Research School for Simulation

Sciences“ Jülich-Aachen durch Frau Dr. Schavan, Ministerpräsident Dr. Rüttgers und Prof. Mlynek von der Helmholtz-Gemeinschaft wird eine ganz neue Art der Zusammenarbeit zwischen den Partnern Universität und außeruniversitäre Forschungseinrichtung geschaffen, mit dem Ziel, Lehre und Spitzenforschung auf dem Gebiet der Simulationen Sciences ganz eng zu verbinden.

Nicht zuletzt vor dem Hintergrund dieser neuen Entwicklung darf ich als Leiter des Jülicher John von Neumann-Instituts für Computing meiner Hoffnung Ausdruck verleihen, dass unser universelles Großgerät – der „Supercomputer“ – in Verbindung mit unseren weltweit führenden Simulation Sciences die Gesamtausrichtung des Forschungszentrums Jülich unter Führung von Prof. Bachem fokussieren und im strategischen Sinne prägen wird. Jülich will im Jahre 2009 Standort eines europäischen Petaflop-Supercomputerzentrums werden. Mit Jülich werden Deutschland und Europa im Jahrhundertrennen des Höchstleistungsrechnens ganz weit vorne liegen.