

# Rechnerische Spitzenleistung

High Performance Computing (HPC) hat sich in zahlreichen wissenschaftlichen Disziplinen zu einem Hauptmotor für Fortschritt und Innovation entwickelt. Vor allem im universitären Bereich spielt Österreich diesbezüglich eine Vorreiterrolle. Nun soll diese Kompetenz durch infrastrukturelle Investitionen weiter forciert werden.

Sonja Gerstl

Wer in technischen Disziplinen, naturwissenschaftlichen Belangen, aber auch in der Wirtschaft komplexe Vorgänge simulieren will, ist in den meisten Fällen auf Rechner mit höchster Leistungsfähigkeit angewiesen.

Das sogenannte High Performance Computing (HPC, sprich: Hochleistungsrechnen) ermöglicht es, hochkomplexe Modelle detailgenau und wirklichkeitsnah zu simulieren und dadurch wesentliche neue Erkenntnisse zu gewinnen. Somit stellt der Einsatz von Hochleistungsrechnern in weiterer Folge auch einen ganz wesentlichen Aspekt für die anwendungsorientierte

Wissenschaft und Forschung dar. Demnach kann etwa mittels HPC die zeitliche Entwicklung von Galaxien simuliert werden oder ein chemischer Prozess angeregt werden, dessen Ziel es ist, ein bestimmtes Molekül im Labor herzustellen.

An der Universität Wien wurde bereits vor geraumer Zeit der Forschungsschwerpunkt „Rechnergestützte Wissenschaften“ (Computational Sciences) geschaffen, an dem Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Fakultäten für Chemie, Informatik, Mathematik, Physik sowie für Geowissenschaften, Geografie und Astronomie beteiligt sind. In multidisziplinären Projekten versuchen

sie, die Ansätze der Mathematik, der Informatik und der Naturwissenschaften zu integrieren und neue HPC-Methoden zu entwickeln. So zum Beispiel werden an der Wiener Fakultät für Physik seit Jahren erfolgreich quantenmechanische sowie statistisch-mechanische Methoden für atomistische Simulationen entwickelt und vor allem für die Behandlung materialwissenschaftlicher Fragestellungen verwendet.

## Breitere Basis

Nunmehr laufen Bestrebungen, das vielschichtige Engagement der einzelnen Fakultäten in Sachen HPC auf eine breitere Basis zu stellen. Daniel Wesel-

ka, im Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung für Forschungsinfrastruktur zuständig: „High Performance Computing ist eine neue Initiative, die die Wettbewerbsfähigkeit der österreichischen Wissenschaft in verschiedenen Disziplinen sicherstellen soll. Ohne High Performance Computing wird in Zukunft in bestimmten Teilen der Wissenschaft nichts mehr laufen, zumindest nichts, was wirklich wichtig ist.“

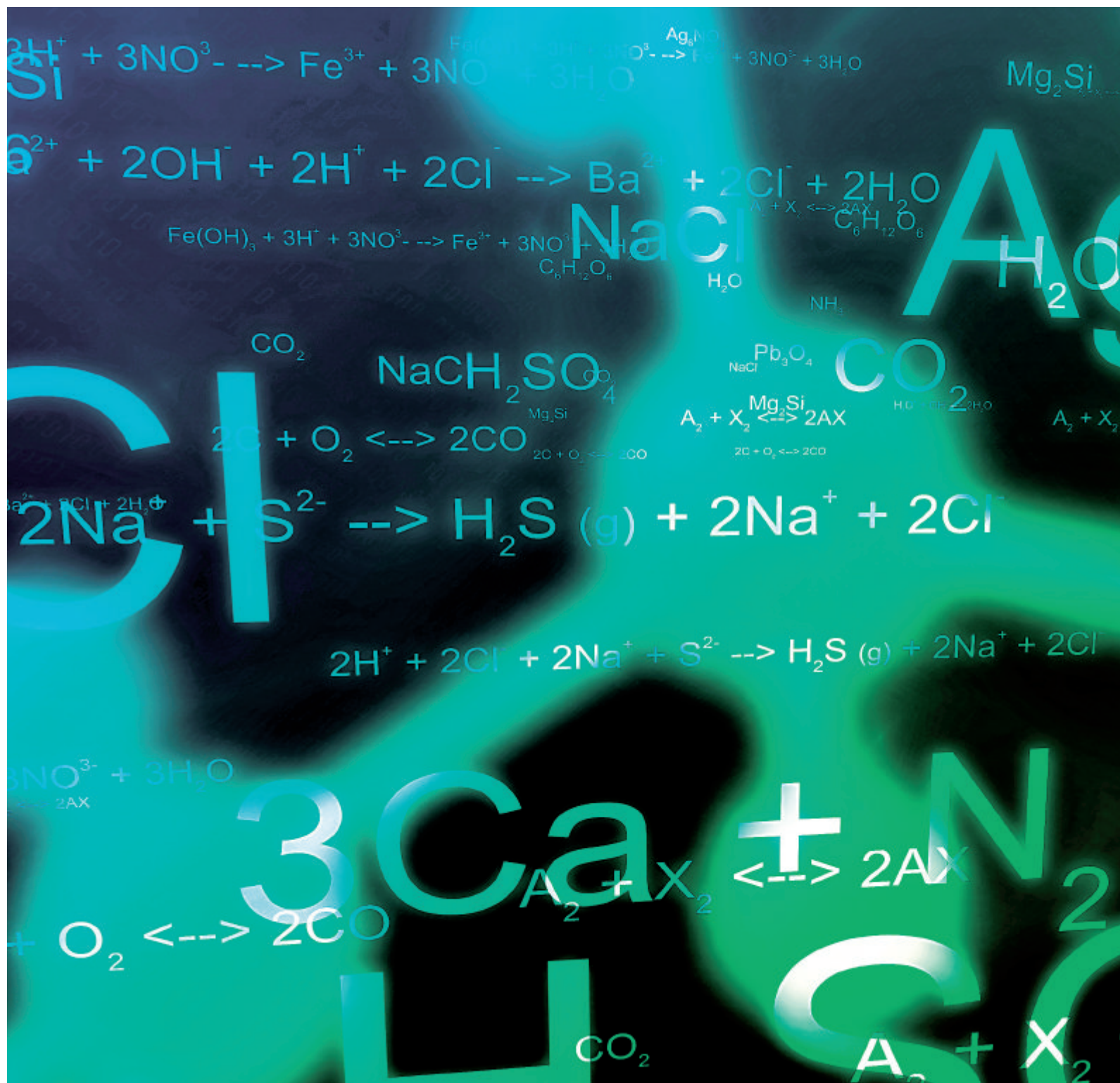
Entsprechende Konzepte für die beiden Universitätsstandorte Wien und Graz gibt es bereits, Schützenhilfe – vor allem was eine rasche Umsetzung dieser Pläne betrifft – kommt

darüber hinaus von der Europäischen Union. Schließlich ist HPC auch eines der Projekte auf der europäischen Roadmap für Forschungsinfrastruktur (Esfri).

„Bereits jetzt ist es so, dass zahlreiche österreichische Forscherinnen und Forscher unterschiedlichster Disziplinen im Bereich der Computational Sciences international Spitzenplätze einnehmen. Um dieses hohe Niveau zu halten und auch längerfristig erfolgreich sein zu können, bedarf es jedoch mittelfristig einiger Investitionen. Notwendig ist ein breiterer Zugang zu modernen Höchstleistungsrechnern, der derzeit in Österreich leider nur in beschränktem Maß gegeben ist“, erklärt Weselka. Die Universität Wien strebe daher – als Basis eines international sichtbaren Zentrums für Scientific Computing – den Ausbau der Ressourcen im Bereich des High Performance Computings an. Um eine optimale Ausnutzung der Investitionen zu garantieren, sollen zentrale und lokale Rechnerressourcen kombiniert und aufeinander abgestimmt werden. Weselka: „Unser Ziel ist es, im guten internationalen Mittelfeld dabei zu sein. Das ist nämlich, wenn die richtigen Ideen auf diesen Computern zum Laufen kommen, für Spitzenresultate durchaus ausreichend. Eben, weil es hier nicht nur auf die Hardware, sondern auch auf kluge Köpfe – die haben wir – und die richtigen, sprich: besseren und schnelleren Algorithmen ankommt. Hier ist insbesondere die Mathematik gefordert, und diese ist in Österreich ausgezeichnet vertreten.“

## Praktischer Nutzen

Dass High Performance Computing nicht bloß etwas für die akademische Forschung ist, sondern darüber hinaus auch massive wirtschaftliche Auswirkungen bis in die industrielle Produktion hat, dokumentieren anschaulich Turborechner wie etwa jener, der seit Mai dieses Jahres im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt das Verhalten von Flugzeugen simuliert. Der Supercomputer zählt zu den weltweit schnellsten industriell genutzten Rechnern für die Luftfahrtforschung. Er bewältigt 46,6 Billionen Rechenoperationen mit sogenannten Fließkommazahlen pro Sekunde. Die innerhalb einer Sekunde berechneten Zahlen könnten einen CD-Stapel von 640 Metern Höhe mit Daten füllen.



Zahlenwerk mit praktischem Potenzial: Der Einsatz von Hochleistungsrechnern ermöglicht es, hochkomplexe Modelle detailgenau und wirklichkeitsnah zu simulieren und dadurch wesentliche neue Erkenntnisse zu gewinnen. Foto: Fotolla.com