

## REFERENZ-STORY

Datum: 23.09.2005

Version: 1.0



Universität Rostock

### Physikalische und Theoretische Chemie: transtec Cluster nonstop im Einsatz

**Die Situation:** Für die enorm speicherintensiven Simulationsberechnungen im Bereich der Theoretischen und Physikalischen Chemie ist der Grundlagenforscher an der Universität Rostock, Prof. Dr. Ralf Ludwig, darauf angewiesen, Rechenleistung exklusiv nutzen zu können. Ein Zugriff auf die universitätsweit genutzten Kapazitäten des Rechenzentrums würde die Berechnungen zeitlich verzögern, ein aus Desktop-PCs zusammen gesetzter Cluster wäre zu störanfällig und wartungsintensiv.

**Die Herausforderung:** Wichtig sind die hohe Stabilität des Systems, das auch CPU-Betriebszeiten von mehreren Monaten bewältigen kann sowie eine gute Skalierbarkeit, um jederzeit auch komplizierte Simulationen ohne vorherige zeit- und kostenintensive Erweiterungen durchführen zu müssen.

**Die Lösung:** Installation eines HPC-Clusters auf Dual Opteron-Basis mit voller 64-Bit-Implementierung und einer möglichen Peak-Performance von 230 GFlops.

Für Prof. Dr. Ralf Ludwig und seine vier Mitarbeiter erwies sich die Berufung im April 2004 an die Universität Rostock im Gebiet der Theoretischen und Physikalischen Chemie als günstige Gelegenheit für die Neuanschaffung eines High Performance Computing Clusters. Als Grundlagenforscher interessiert sich Prof. Ludwig für die Struktur und Zusammensetzung von Flüssigkeiten, die er mit Hilfe von wasserstoffbrückengebundenen Clustern zu beschreiben versucht. Prof. Ludwig und sein Team nutzen das Programmpaket GAUSSIAN, das die Clusterstrukturen auf so genannter ab initio-Basis berechnen kann. Solche Berechnungen sind extrem speicherintensiv und langwierig, sodass sie von gemeinsam genutzten und allgemein zugänglichen Einrichtungen wie dem Hochschulrechenzentrum nicht allein abgedeckt werden können. Ein alternativer Cluster aus Desktop PCs dagegen wäre zu wartungsanfällig und somit mit Blick auf Kosten und notwendigen Personaleinsatz zu ineffektiv. Vor diesem Hintergrund entschied sich Prof. Ludwig für die Investition in einen transtec HPC-Cluster.

Im Vorfeld der Anschaffung stand eine umfassende Beratung durch transtec, mit deren Hilfe die Rostocker Wissenschaftler von Beginn an auf eine system- und anwenderfreundliche Zusammenstellung von Hardwarekomponenten bauen konnten. Entscheidend für die Wahl eines Dual Opteron Clusters war die Gewährleistung einer prozessorseitig vollständigen 64-Bit-Implementierung. Durch die 64-Bit-Architektur konnte das Team zudem die Berechnungen auf größere, relevante Systeme ausdehnen, ohne dabei auf zusätzliche Parallelisierungsprogramme wie Linda zurückgreifen zu müssen. Auf diese Weise gelang es Prof. Ludwig, selbst Frequenzen für einen buckyball (Fußball-)ähnlichen (H<sub>2</sub>O)<sub>60</sub>-Cluster zu berechnen. Bei einer benötigten CPU-Zeit von ungefähr drei Monaten hätte kein Hochleistungsrechnerverbund ausreichend freie Kapazitäten für diese Berechnung freimachen können. Auch klassische molekulardynamische Simulationen konnten unproblematisch durchgeführt werden. Gerade für diese Berechnungen erwies sich das fast 1 TB umfassende RAID als vorteilhaft, da auf ihm die erheblichen Datenmengen für die Auswertung in Form von MPEG kodierten Filmen sicher ausgelagert werden konnten.

## REFERENZ-STORY

Datum: 23.09.2005

Version: 1.0



Zurzeit verfügt der HPC-Cluster in der Physikalischen und Theoretischen Chemie an der Universität Rostock – der auf den Namen „König Ludwig“ getauft wurde – über 32 Nodes (23 Dual-Opteron 242 und 9 Dual-Opteron 246) mit einem Hauptarbeitspeicher von 108 GB. Jedes Node kann dabei seine Daten zudem noch einmal lokal auf Festplatten mit einer Größe zwischen 80 GB und 120 GB schreiben. Die geschätzte Peak Performance des „König Ludwig“-Clusters liegt bei etwa 230 GFlops und übertrifft damit in der Rechenleistung einen ebenfalls im Arbeitskreis betriebenen Cluster aus 40 Desktop PCs um den Faktor 5. Durch den Einsatz der transtec Management Software CluTo, die auf openSource Modulen basiert, konnten die Kosten gesenkt werden. Die Ersparnis wurde in zusätzliche Knoten investiert.

Bei dieser Investitionsentscheidung zugunsten von transtec war das Preis/Leistungsverhältnis des Tübinger Unternehmens ausschlaggebend; keiner der direkten Mitbewerber konnte das Angebot unterbieten. Auch bei der Verfügbarkeit der gewünschten Komponenten und beim Serviceangebot konnte sich transtec gegenüber dem Wettbewerb positiv absetzen, sodass die Rostocker Theoretiker einen entscheidenden Zeitvorteil bei der Inbetriebnahme erzielen konnten. Inzwischen läuft der HPC-Cluster nonstop fast ein Jahr lang reibungslos. In dieser Zeit stand dem Kunden das Experten-Team von transtec um Leonardo Lapeira, Dr. Andreas Koch und Anastassios Kazakidis jederzeit zur Verfügung.

**„In unserer Arbeitsgruppe konnten wir feststellen, dass Qualität und Kundennähe bei transtec immer in den Vordergrund gestellt wird.“**

Prof. Dr. Ralf Ludwig  
Universität Rostock