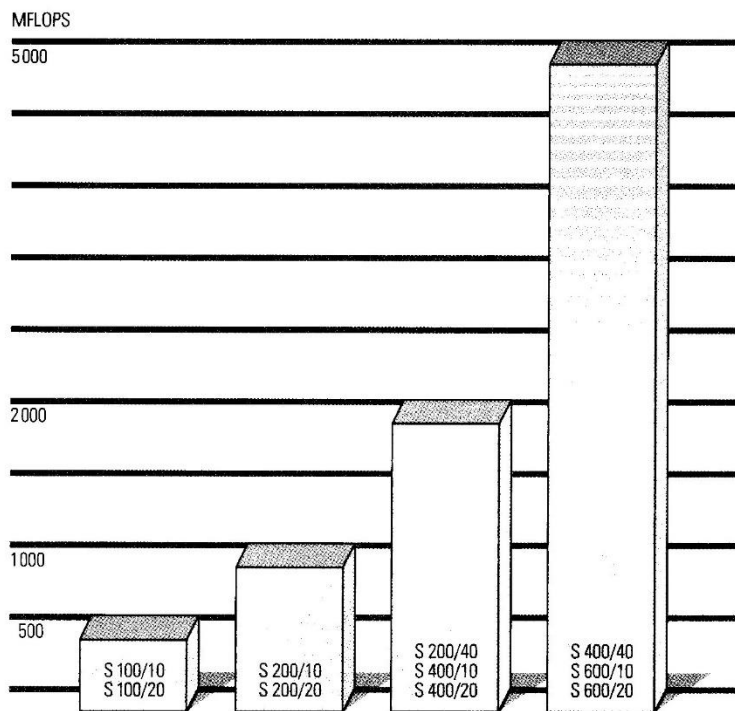


# Die Siemens/Fujitsu-Rechner S xxx



Supercomputing  
with peak performance

standards that have emerged in super-computing, e. g. for languages, channels and networks.

### The right interfaces

To integrate your vector processor into the existing environment you need interfaces with other computers. The S Series features the best possible selection and fits into any network of minis, superminis, mainframes and all kinds of networks.

### More software

Choose a vector processor of the S Series and you have immediate access to more than 200 applications.

### More support in Europe

Siemens Nixdorf is the European alternative in supercomputing. Support specialists are available in all major European countries.

*The stable configuration of 60 carbon atoms ("Soccer ball") was investigated using the molecular dynamics program MNDOVP on a Siemens Nixdorf vector processor.*

Siemens Nixdorf WS30 workstation offers appropriate input/output capabilities for users of the S Series to visualise their results.

### More main memory

Up to 2 GBytes of main memory and 32 GBytes of system memory are more than sufficient for storing extensive programs and quantities of data that have to be accessed fast.

### More throughput

Throughput is the key point in supercomputing.

High throughput calls for flawless hardware and software, like FORTRAN compilers that generate substantially faster code.

### Better hardware

Computers of the S Series are very-large-scale integrated, their cooling technology is optimal and their channels together with high-speed peripherals transfer data fast enough to keep the computer busy.

### The right standards

The S Series supports the most important

# The S Series: Ten models from 500 MFLOPS to 5 GFLOPS

## Structure

Model	S 100/10	S 100/20	S 200/10	S 200/20	S 200/40	S 400/10	S 400/20	S 400/40	S 600/10	S 600/20
Vector Units	1	1	1	1	2	1	1	2	1	1
Scalar Units	1	2	1	2	4	1	2	4	1	2

## Processing Units

Peak vector performance (GFLOPS)	0.5		1		2			5		
Sustained scalar performance (MFLOPS)	24	48	30	60	120	30	60	150	37.5	75
Cycle time Vector Unit	4 ns							3.2 ns		
Scalar Unit	8 ns							6.4 ns		
Vector register size	32 kByte/SU					64 kByte/SU			128 kByte/SU	

## Main Storage

Capacity (MByte)	64 - 1024	128 - 1024	256 - 2048	256 - 1024	512 - 2048
Bandwidth (GByte/s)	2	4	8		20

## System Storage

Capacity	1 - 32 GByte
Transfer rate	0.5 - 2 GByte/s

## Input / Output Processor

Number of channels per IOP	32 - 128
Max. I/O transfer rates per channel type	4.5 / 9 / 36 / 100 MByte/s
Total transfer rate per IOP	1 GByte/s

## Application Software:

Sample of packages available with the S Series (more than 200 in total)

Category	Program Name	Supplier
Structural Analysis	ABAQUS	Hibbit, Karlsson and Sorensen, Inc.
	ADINA	ADINA R & D, Inc.
	ANSYS	Swanson Analysis Systems, Inc.
	DYNA 3D	Lawrence Livermore National Lab.
	MARC	MARC Analysis Research Corp.
	MSC/NASTRAN	MacNeal Schwendler Corp.
	NISAI	Engineering Mechanics Research Corp.
	PAM-CRASH	ESI GmbH
PERMAS	INTES GmbH	
Computational Fluid Dynamics	FIDAP	Fluid Dynamics, Inc.
	FLUENT	Creare, Inc.
	FIRE	AVL List, Graz
	PHOENICS	CHAM Ltd.
Chemistry	AMPAC	QCPE
	CHARMm	POLYGEN Europe Ltd.
	DISCOVER	BIOSYM Technologies, Inc.
	GAUSSIAN 88	GAUSSIAN, Inc.
	MOPAC	QCPE
Electronics	SPICE/VP	Siemens AG
	TEGAS 5	Calma Company
Mathematical Library	FIDISOL	University of Karlsruhe
	IMSL	IMSL, Inc.
	NAG	NAG Ltd.
Computational Graphics	MOVIE.BYU	H. N. Christiansen
	SCHAKAL 88	University of Freiburg
	VERA	University of Karlsruhe

## Der Vektorrechner S400/40 im RRZN

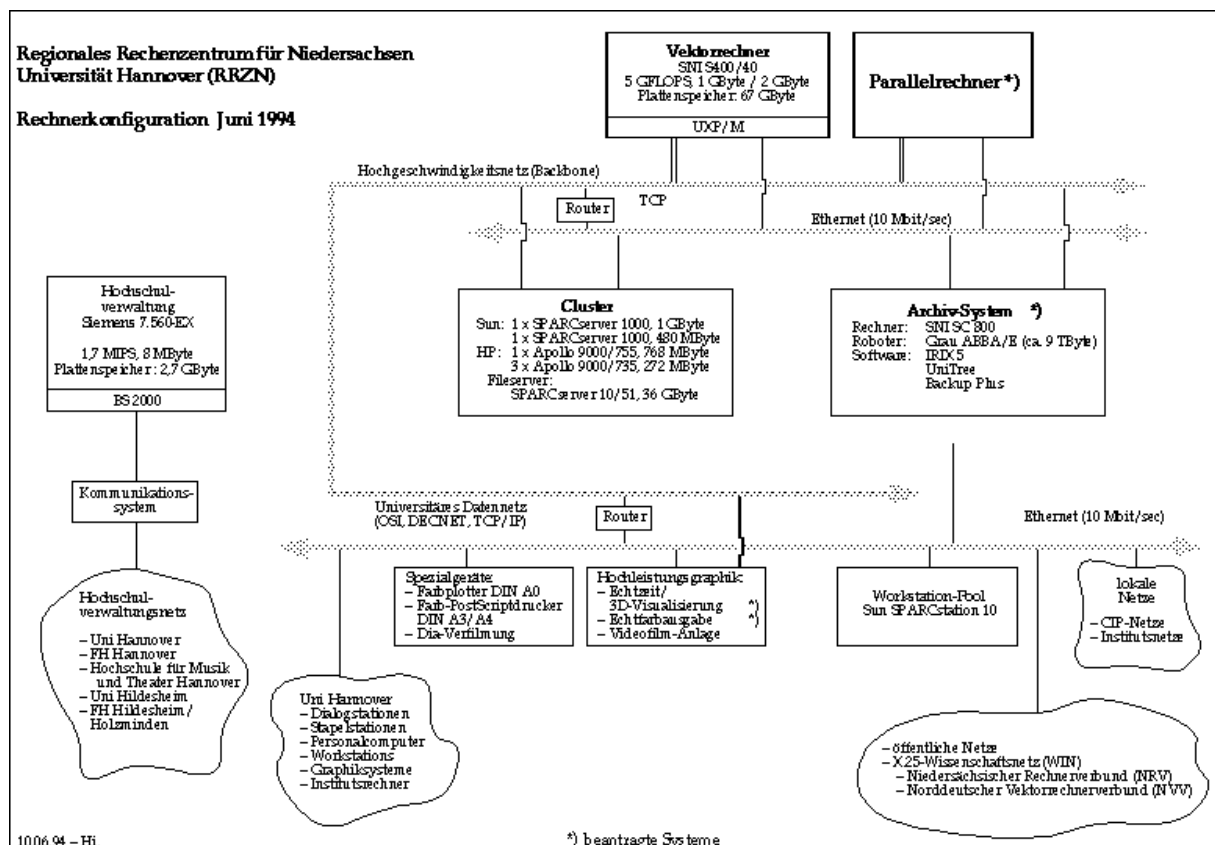
Unter den RRZN-Computern ist der "Niedersächsische Vektorrechner" (so die offizielle Bezeichnung durch DFG und Wissenschaftsrat) der deutlich leistungsfähigste und daher auch der eigentliche Regionalrechner: er wird nicht nur von der Uni Hannover benutzt, sondern auch von Instituten anderer Hochschulen aus Niedersachsen und - im Rahmen eines auf Gegenseitigkeit ausgerichteten Staatsvertrages - auch aus Berlin und Kiel.

Sagen wir's ruhig deutlich: dies ist kein Rechner für jedermann! Der Vektorrechner entfaltet seine große Geschwindigkeit erst bei langrechnenden, hochvektorisierenden Programmen im Stapelbetrieb. Kleine Programme, große interaktive Arbeiten (insbesondere z. B. das Edieren von Dateien) gehören auf einen PC oder eine Workstation - aber nicht auf diesen Supercomputer. Das RRZN achtet sehr darauf, dass die Fähigkeiten dieses Rechners nicht "verplempert" werden.

Schließlich müssen wir noch erwähnen, dass Bürger aus gewissen Staaten - unabhängig davon, was sie auf dem Rechner machen wollen - diese Hochtechnologie nicht nutzen dürfen (Stichwort: Außenwirtschaftsgesetz. Näheres: siehe Antragsformular ORG.BEN 9 bzw. Dr. Luttermann, Tel. 3680).

### Hardware und Architektur

Die Einbettung des Vektorrechners in die RRZN-Rechnerkonfiguration entnehmen Sie bitte der Konfigurationsskizze:

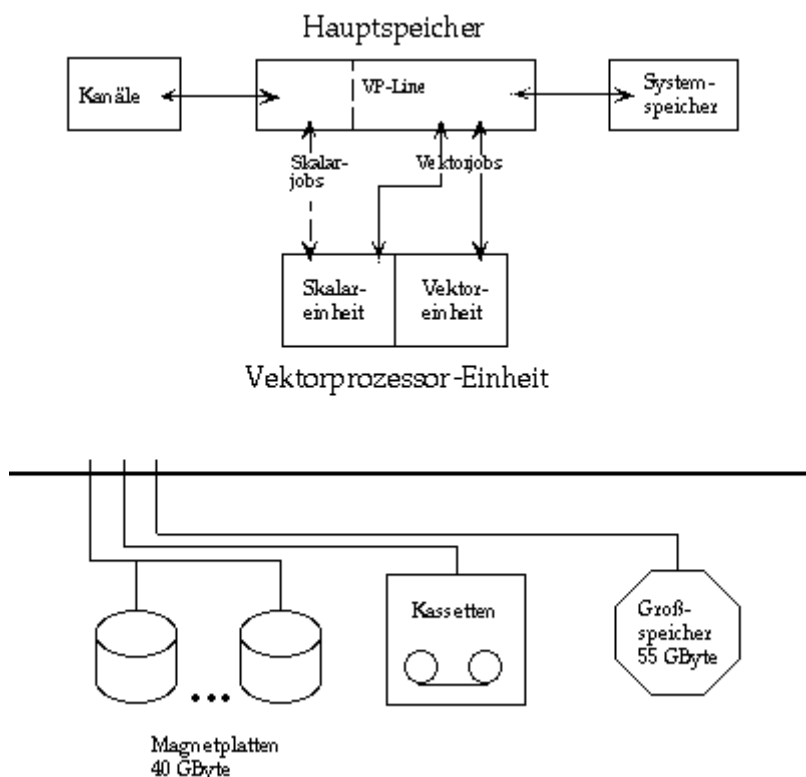


Der am RRZN installierte Vektorrechner ist ein von der japanischen Firma Fujitsu hergestellter und von der Firma Siemens-Nixdorf vertriebener Rechner der "S-Serie". Die S-

Serie besteht aus verschiedenen Vektorrechnermodellen, die zwar im wesentlichen einheitlich aufgebaut sind, sich jedoch in der Dimensionierung leistungsrelevanter Baugruppen (insbesondere für die Vektorverarbeitung) deutlich unterscheiden. Im RRZN wird einer der leistungsstärksten Rechner der S-Serie betrieben, die [S400/40](#). Die S400/40 verfügt über 4 Skalareinheiten, 2 Vektoreinheiten, einen Arbeitsspeicher von 1 GigaByte und einen Systemspeicher von 2 GigaByte. Die Grenzleistung der S400/40 liegt bei ca. 5 GigaFLOPS.

Wegen ihrer 4 Skalareinheiten wird die S400/40 auch als Quadroprozessor-Anlage bezeichnet. Die 4 Skalareinheiten und die 2 Vektoreinheiten sind dabei so angeordnet, daß jeweils zwei Skalareinheiten zusammen mit einer Vektoreinheit eine Vektorprozessor-Einheit bilden (dual scalar architecture). Beide Skalareinheiten können je nach Anforderung der rechnenden Jobs die gemeinsame Vektoreinheit wechselseitig nutzen.

Die wesentlichen Merkmale der Architektur des Vektorrechners lassen sich am einfachsten an Hand eines kleineren Rechners der S-Serie erklären, z. B. der S400/10, die im Gegensatz zur S400/40 nur eine Skalareinheit (Monoprozessor) und eine Vektoreinheit besitzt. Skalareinheit und Vektoreinheit bilden zusammen die Vektorprozessor-Einheit. Der obere Teil der [Abbildung](#) zeigt grob vereinfacht den prinzipiellen Aufbau einer solchen Monoprozessor-Anlage:



im unteren Teil sind die am Vektorrechner zur Verfügung stehenden Massenspeicher dargestellt.

Die Abbildung zeigt die wesentlichen Architekturmerkmale eines Vektorrechners der S-Serie am Beispiel einer Monoprozessor-Anlage S400/10. (Eine Quadroprozessor-Anlage S400/40 besitzt demgegenüber zwei Vektorprozessor-Einheiten, die jeweils aus zwei Skalareinheiten und einer Vektoreinheit bestehen.)

Die Skalareinheit (Taktzeit 6,4 nsec.) ist im wesentlichen ein hinsichtlich Instruktionssatz und Datenstruktur weitgehend IBM-kompatibler Rechnerkern. Die Vektoreinheit ist für die Bearbeitung der Vektorbefehle zuständig. In der Vektoreinheit können maximal 16 Operationen pro Zyklus (3,2 nsec) parallel durchgeführt werden.

Instruktionen für die Skalar- und Vektorverarbeitung unterscheiden sich auch in der Nutzung des Hauptspeichers. Bei einem Skalarprozeß erfolgt eine virtuelle Speicherverwaltung in der Art, daß ein virtueller Adreßraum von 2 GigaByte genutzt werden kann, unabhängig von der tatsächlichen Größe des zur Verfügung stehenden Hauptspeichers.

Für die Vektorverarbeitung wäre diese Art der virtuellen Speicherverwaltung aber zu ineffizient, da die schnelle Vektoreinheit u. U. auf Ladeoperationen warten müßte. Um dies zu verhindern, müssen bei der Vektorverarbeitung alle Daten vollständig im Speicher liegen. Dies hat zur Folge, daß die Größe von Vektorprogrammen bereits durch die Größe des realen Hauptspeichers beschränkt ist (1 GigaByte bei der S400/40; für Anwenderprogramme sind maximal 800 MB verfügbar).

Um die unterschiedlichen Zugriffstechniken von Skalar- und Vektorjobs auf den Hauptspeicher zu verwalten, wird der Hauptspeicher unterteilt. Für alle Datenfelder eines Vektorprozesses steht der größere Teil des Hauptspeichers zur Verfügung (VPLIMIT von 800 MB). Zur effektiven Ausnutzung des Rechners sind für einen einzelnen Prozeß jedoch normalerweise nur bis zu 400 MB erlaubt.

Alle Instruktionen für die Vektorverarbeitung werden von der Skalareinheit erkannt, die dann die Vektoreinheit initialisiert. Die Vektoreinheit kann also immer nur im Zusammenhang mit der Skalareinheit tätig werden.

Neben dem Hauptspeicher verfügt die S400/40 noch über einen Systemspeicher (Sekundärspeicher). Der Systemspeicher ist nicht direkt adressierbar; er dient im wesentlichen dazu, Benutzerdateien, Datenfelder und Systembereiche temporär auszulagern, um auf diese Weise die Zahl der sehr viel langsameren Zugriffe auf die Magnetplatten zu begrenzen und so die Rechenleistung zu erhöhen.

Als Massenspeicher stehen am Vektorrechner Magnetplatten mit einer Gesamtkapazität von ca. 67 GigaByte zur Verfügung.

Für 1994 ist die Installation eines robotergesteuerten Archiv-Systems vorgesehen, welches auch den S400-Benutzern für die Auslagerung und/oder längerfristige Sicherung von Dateien zur Verfügung stehen wird.

Damit wird die Verarbeitung von Magnetbandkassetten nur noch in Ausnahmefällen erforderlich (z. B. "Fremdkassetten")

## Betriebssystem und Systemsoftware

Auf dem Vektorrechner können grundsätzlich mehrere Betriebssysteme parallel eingesetzt werden, derzeit ist dies für Benutzer ausschließlich UXP/M.

UXP/M ist ein Betriebssystem, das auf dem Unix-Standard nach System V, Release 4 basiert und um Komponenten für den Betrieb auf dem Vektorrechner erweitert worden ist. Eine ausführliche Beschreibung finden Sie in unserem Unix-Handbuch mit dem Schlüssel UNX 4.

Für Benutzer mit Unix-Kenntnissen dürfte der Umgang mit UXP/M weitgehend problemlos sein. Die lokalen Modifikationen sind im Umdruck NVR 1 beschrieben. Dort ist auch das für die Stapelverarbeitung eingesetzte NQS (Network Queueing System ) im einzelnen erläutert. Ebenso ist die Abarbeitungsreihenfolge von Stapeljobs mit dem Prinzip der Jobklassen-Definition in NVR 1 nachzulesen. Die Einzelheiten der Prioritätenregelung konkurrierender Prozesse werden dabei allerdings stets aktuellen Erfordernissen und der Maschinenauslastung angepaßt.

Für die Vektorrechnernutzung unter UXP/M ist die wichtigste Programmiersprache FORTRAN mit dem Compiler:

### **frt**

frt ist ein Compiler für Standard-FORTRAN 77 mit Spracherweiterungen. Durch Compileroptionen kann bei der Übersetzung eine sehr effiziente, automatische Vektorisierung der FORTRAN-Programme erreicht werden.

Ausführlichere Hinweise zur Nutzung von FORTRAN unter UXP/M enthalten die beiden Umdrucke NVR 3 "FORTRAN 77 unter UXP/M" und NVR 4 "Vektorisieren von FORTRAN-Programmen unter UXP/M".

Neben dem FORTRAN -Compiler steht auch ein vektorisierender C -Compiler zur Verfügung (vcc), mit dem die ersten praktischen Erfahrungen zur Zeit gesammelt werden.

### Anwendersoftware

Aktuelle Informationen zur Anwendersoftware auf dem Vektorrechner erhalten Sie online unter UXP/M mit dem Kommando

```
man aws
```

Die wichtigsten Anwenderpakete und Bibliotheken sind im folgenden kurz beschrieben.

### ***FEM -Analysen***

#### **ABAQUS**

Programmpaket, mit dem Aufgaben aus den Bereichen der Strukturanalyse, Dynamik, Wärmeleitung und Akustik behandelt werden können.

Betreuer: Fischer (Tel. 5132), Dr. Brand (Tel. 5131)

#### **ADINA**

Allgemeines FE-System für die lineare und nichtlineare Strukturanalyse, Wärmeleitung und Fluidmechanik.

Betreuer: Fischer (Tel. 5132), Dr. Brand (Tel. 5131)

#### **FIDAP**

Programmsystem zur Behandlung von Problemen der Strömungsmechanik mit inkompressiblen Flüssigkeiten.

Betreuer: Dr. Brand (Tel. 5131), Fischer (Tel. 5132)

#### **MSC/NASTRAN**

Programmpaket, mit dem Aufgaben aus den Bereichen Strukturmechanik, Wärmeleitung und Akustik behandelt werden können.

Betreuer: Dr. Brand (Tel. 5131), Fischer (Tel. 5132)

Ferner ist die Bereitstellung von **ANSYS** geplant.

## *Theoretische Chemie*

### **GAUSSIAN92**

Programmsystem für ab-initio-Rechnungen Betreuer: Zocher (Tel. 3684)

Folgende FORTRAN-Programmbibliotheken für numerische Probleme sind verfügbar:

### **NAG -Bibliothek**

mit ca. 1000 Routinen für verschiedene Problemstellungen,

### **IMSL -Bibliothek**

mit ca. 900 Routinen,

### **FIDISOL**

Unterprogrammsammlung für die numerische Lösung von zwei- oder drei-dimensionalen elliptischen oder parabo-lischen partiellen Differential-gleichungen

### **BLAS**

Unterprogrammsammlung mit Basisroutinen für lineare Algebra

### **LAPACK**

Unterprogrammsammlung für die Lösung von Problemen der linearen Algebra

### **SSL II/VP**

eine von Fujitsu erstellte Unterprogrammsammlung mit ca. 250 zum Teil speziell für die S400 optimierten Routinen.

### **Graphik**

Nachfolgend listen wir die Graphik-Software auf dem Vektorrechner auf, wobei wir die Beschreibung hier bewußt kurz halten, da eine ausführliche Charakterisierung schon im Kapitel [9.2](#) vorhanden ist.

### **UNIRAS**

Umfangreiches Graphiksystem für die Visualisierung technisch-wissenschaftlicher Rechenergebnisse.

### **HAPS/SIMPLEPLOT (Calcomp HCBS)**

Calcomp -kompatibles Plottsystem, das auch Ausgaben auf graphische Farbgeräte ermöglicht.

Näheres über die graphischen Ausgabegeräte entnehmen Interessenten bitte dem Kapitel [9.3](#), wobei wir Vektorrechnerbenutzer insbesondere auf die dort auch beschriebene Möglichkeit der Visualisierung von Rechenergebnissen durch Video-Verfilmung hinweisen möchten.

### [Zugriff auf die S400](#)

Ein Zugriff auf die S400 kann prinzipiell über jeden an das Internet angeschlossenen Rechner (Unix-Workstations, PC oder Großrechner) erfolgen, auf dem entsprechende Software installiert ist. Für den Dialog-Zugriff wird dies i. a. Telnet sein. Voraussetzung für das Login zur S400 ist allerdings, daß die Internetadresse der Domain des rufenden Rechners vom RRZN für den Zugriff validiert ist.

Neben Telnet kann auch mit anderen Programmen wie FTP für den Dateitransfer oder rlogin als weiteres Dialog-Programm zugegriffen werden. Eine detaillierte Beschreibung der verschiedenen Zugriffsmöglichkeiten finden Sie im Umdruck NVR 1. Dort werden auch die Möglichkeiten eines reinen Transfers von Stapeljobs zur S400 erläutert.

## Rechenbetrieb

Der Vektorrechner steht bis auf die Systemarbeitszeit (dienstags ca. 17.00 - 24.00 Uhr) 24 Stunden pro Tag an 7 Tagen in der Woche zur Verfügung.

## Ausbildung

Wir bieten einen eintägigen Kursus über die Benutzung des Vektorrechners an: über das Betriebssystem und über die Vektorisierung von FORTRAN-Programmen. Voraussetzung für die Teilnahme sind - neben einer erteilten Rechengenehmigung (Anträge ORG.BEN 4 und 9) - gute Unix-Kenntnisse und langjährige Programmiererfahrung in FORTRAN.

## Dokumentation

Die Benutzung des Vektorrechners beschreiben wir in vier Umdrucken, die den Klassifikationsschlüssel NVR (Niedersächsischer Vektorrechner) tragen und das "Benutzerhandbuch/ Vektorrechner" bilden.

NVR 1

Vektorrechner-Handbuch (36 A4-Seiten)

NVR 2

Unix - Eine Einführung (*identisch mit UNX 4*) (186)

NVR 3

FORTRAN 77 unter UXP/M (56)

NVR 4

Vektorisierung von FORTRAN 77-Programmen unter UXP/M (124)

Diese Umdrucke betreffen ausschließlich den Vektorrechner. Darüber hinaus sind einige der im Umdruck [ORG.BEN.2](#) aufgelisteten Umdrucke für Vektorrechner-Benutzer von Bedeutung, z. B. der allgemeine RRZN-Benutzungsantrag [ORG.BEN 4](#) und der spezielle Vektorrechner-Benutzungsantrag [ORG.BEN 9](#).

## Beratung im RRZN

Beratung zur Hilfestellung bei der Fehlersuche und -korrektur in Programmen bieten wir an in der

Schloßwender Str. 5, Tel. 4737 (email: [beratung@rrzn.uni-hannover.de](mailto:beratung@rrzn.uni-hannover.de))

Mo: 13.00 bis 16.00 Uhr

Di - Fr: 9.30 bis 12.00 Uhr und 13.00 bis 16.00 Uhr

Diese Beratung ist auch gedacht als erste Anlaufstelle bei der Programmprojektierung.

Bereits *vor* der Nutzung des Vektorrechners sollten Sie die Beratung (Tel. 4735) oder Herrn Endebrock (Tel. 4666) konsultieren!



## Beratung im NRV und im NVV

Die Universitätsrechenzentren Braunschweig, Clausthal, Göttingen (GWDG), Oldenburg, Osnabrück und das RRZN betreiben über das Wissenschaftsnetz einen Rechnerverbund (NRV - Niedersächsischer Rechnerverbund ).

Im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes (NVV ) können die im wissenschaftlichen Bereich der drei beteiligten Bundesländer installierten Supercomputer gegenseitig genutzt werden. Es sind dies die Vektorrechner am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin (ZIB), am Universitätsrechenzentrum in Kiel und am RRZN in Hannover.

Die S400-Benutzer im NRV und NVV werden von folgenden Damen und Herren betreut:

### **Berlin, FU**

Dr. Manfred Stolle, Tel. (030) 838-3239

email: stolle@sc.zib-berlin.de *oder* stolle@zedat.fu-berlin.de

### **Berlin, HU**

Dr. Hinnerk Stueben, Tel. (030) 89604-214

email: stueben@sc.zib-berlin.de

Dr. Thomas Steinke, Tel. (030) 89604-144

email: steinke@sc.zib-berlin.de

### **Berlin, TU**

Detlef Kehl, Tel. (030) 314-25044

email: kehl@zib-berlin.de

### **Berlin, ZIB**

Dipl.-Math. Hans-Hermann Frese, Tel. (030) 89604-145

email: frese@sc.zib-berlin.de

Dipl.-Math. Wilhelm Vortisch, Tel. (030) 89604-140

email: vortisch@sc.zib.berlin.de

### **Braunschweig, TU**

Dr. Schüle, Tel. (0531) 391-5542

email: j.schuele@tu-bs.de

### **Clausthal-Zellerfeld, TU**

Dr. Peter Klein, Tel. (05323) 72-2100

email: klein@rz.tu-clausthal.de

### **Göttingen, GWDG**

Dr. K. Heuer, Tel. (0551) 201-540

email: kheuer@gwdg.de

### **Kiel, Uni**

Dr. Eva-Maria Zeidler, Tel. (0431) 880-4659

email: zeidler@rz.uni-kiel.d400.de

Dr. Gerd Heßler, Tel. (0431) 880-1430

email: hessler@rz.uni-kiel.d400.de

**Oldenburg, Uni**

Dipl.-Math. Benno Hubert, Tel. (0441) 798-4807  
email: hubert@hrz.uni-oldenburg.de

**Osnabrück, Uni**

Dipl.-Math. Frank Elsner, Tel. (0541) 969-2343  
email: elsner@titan.rz.uni-osnabrueck.de *oder* elsner@dosuni1.bitnet

Einige RZ bieten Informationen über den NRV bzw. NVV auch auf ihren Gopher-Servern an  
- schauen Sie mal rein!