

HPC-Landeskonzept

der Hochschulen in Nordrhein-Westfalen

entwickelt und vorgelegt von der
Arbeitsgruppe HPC der Digitalen Hochschule NRW

Dezember 2018

in Zusammenarbeit mit

Ministerium für
Kultur und Wissenschaft
des Landes Nordrhein-Westfalen



Kurzzusammenfassung

Das hiermit vorgelegte HPC-Landeskonzept NRW verfolgt das Ziel der Weiterentwicklung des HPC-Ökosystems in Nordrhein-Westfalen innerhalb des nationalen HPC-Kontexts. Nordrhein-Westfalen will seine Rolle in diesem Bereich aktiv ausbauen, die nationale und internationale Sichtbarkeit im Bereich der HPC-Forschung und Anwendung erhöhen und somit die notwendige HPC-Entwicklung in Deutschland nachhaltig unterstützen.

Als Ziele innerhalb von Nordrhein-Westfalen werden die nachhaltige Sicherstellung der Versorgung der Wissenschaft und der in Hochschulkooperationen forschenden Industrie mit HPC-Ressourcen und -Fachkenntnissen, der effiziente und wissenschaftsgeleitete Einsatz sowie der strukturierte Zugang zu HPC-Ressourcen fokussiert. Als weiteres Ziel steht die gemeinsame Planung zu HPC-Ressourcen in Nordrhein-Westfalen im Zentrum.

Kernpunkte sind eine Verbesserung der Abstimmung der HPC-Aktivitäten in Nordrhein-Westfalen und im nationalen Kontext, die Förderung und Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses, die Verbesserung der Rahmenbedingungen und Möglichkeiten für Spitzenforschung sowie das Heranführen von neuen Nutzergruppen an das Hochleistungsrechnen. Ein weiterer Punkt ist eine zunehmende hochschulübergreifende Vernetzung der HPC-Ressourcen im Land, um die Qualität des Betriebes zu befördern und eine effiziente Nutzung durch die Nutzerinnen und Nutzer zu gewährleisten.

Das HPC-Landeskonzept NRW versteht sich als Bestandteil eines im Kontext der Digitalen Hochschule Nordrhein-Westfalen (DH-NRW) zu entwickelnden Rahmenprogramms hin zu einer digitalen Servicestruktur der Hochschulen in Nordrhein-Westfalen.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|----|
| Kurzzusammenfassung | 2 |
| 1 Präambel..... | 4 |
| 2 HPC in NRW..... | 4 |
| 2.1 HPC in Nordrhein-Westfalen - Bedeutung und Ausgangslage..... | 4 |
| 3 Das HPC-Landeskonzept NRW 2019 - 2023..... | 8 |
| 3.1 Rahmenbedingungen | 8 |
| 3.2 Hauptziele | 10 |
| 3.3 Maßnahmen | 11 |
| 3.4 Zusammenfassung und Ausblick..... | 14 |
| Literaturverzeichnis | 15 |
| Abbildungsverzeichnis..... | 17 |
| Autoren | 18 |
| Herausgeber | 18 |

1 Präambel

Das mit diesem Papier vorgelegte HPC-Landeskonzept NRW verfolgt das von Hochschulen und dem Ministerium für Kultur und Wissenschaft (MKW) gemeinsam getragene Ziel einer Weiterentwicklung des HPC-Ökosystems in Nordrhein-Westfalen. Dies beinhaltet die Förderung und Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses, die Verbesserung der Rahmenbedingungen und Möglichkeiten für Spitzenforschung, das Heranführen von neuen Nutzergruppen an das Hochleistungsrechnen sowie eine Verbesserung der Abstimmung der HPC-Aktivitäten in Nordrhein-Westfalen.

Das HPC-Landeskonzept NRW wurde dabei im Kontext der Digitalen Hochschule NRW (im Folgenden DH-NRW abgekürzt) entwickelt und versteht sich somit als Bestandteil eines Sets an Maßnahmen zum Aufbau einer digitalen Servicestruktur für die Hochschulen in NRW. Als Kooperationsgemeinschaft von 42 Universitäten, Fach-, Kunst- und Musikhochschulen aus NRW mit dem Ministerium für Kultur und Wissenschaft des Landes NRW steht die Digitale Hochschule NRW für einen diskursiven Ansatz zur Beantwortung der Herausforderungen im Kontext eines NRW-weiten Digitalisierungs- und Informationsmanagements an Hochschulen im Bereich der Handlungsfelder Studium & Lehre, Forschung, Kunst sowie Infrastruktur & Management. Das vorliegende Papier stellt zunächst kurz die wichtigsten Entwicklungen der letzten Jahre dar und umreißt die aktuelle Situation in Nordrhein-Westfalen. Auf Basis dieser Übersicht werden Ziele abgeleitet und ein Satz von Maßnahmen auf kurz-, mittel- und langfristiger Zeitskala entworfen. Der strategische Planungshorizont dieses Konzepts ist auf 5 Jahre (Periode 2019-2023) ausgerichtet. Vorgesehen ist eine Begutachtung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) sowie eine fortlaufende Evaluation und Weiterentwicklung des Maßnahmenkatalogs durch die HPC Arbeitsgruppe der DH-NRW sowie die Weiterentwicklung des Konzeptes für die Folgeperiode.

Das Landeskonzept soll sowohl als Entscheidungsgrundlage auf verschiedenen Ebenen als auch als Leitfaden für die beteiligten Akteure dienen. Es soll darüber hinaus die Grundlage einer konsistenten Abstimmung der HPC-Aktivitäten in NRW mit den HPC-Aktivitäten im Bund bilden.

2 HPC in NRW

2.1 HPC in Nordrhein-Westfalen - Bedeutung und Ausgangslage

Der Wissenschaftsrat stellt in seinen Empfehlungen zur „Strategischen Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ [WR:2012] das Thema HPC als entscheidenden Standortfaktor im internationalen wissenschaftlichen und industriellen Wettbewerb dar. In vielen Wissenschaftsbereichen haben sich in der Forschung die computer-gestützte Simulation und Datenanalyse als unverzichtbare Brücke zwischen Theorie und Experiment etabliert. Entwicklungen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen sind von entscheidender Bedeutung für eine Vielzahl von Wissenschaftsbereichen, die sich unter den Schlagwörtern Simulation Science und Data Intensive Science zusammenfassen lassen.

NRW verfügt über zahlreiche Hochschulen und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen. Hierzu zählen Institute der Max-Planck-Gesellschaft, das Deutsche Zentrum für Luft-

und Raumfahrt e.V. (DLR), Helmholtz-Einrichtungen, wie das Forschungszentrum Jülich und mehrere Fraunhofer- und Leibniz-Institute.

Für die vielfältige Wissenschaftslandschaft in Nordrhein-Westfalen sind Hochleistungsrechner bedeutende Instrumente einer leistungsfähigen Infrastruktur (siehe Abbildung 1).

Dies spiegelt sich in zahlreichen Aktivitäten wider. In NRW ist mit dem Jülich Supercomputing Centre (JSC) eines der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren etabliert. Als Teil des Gauss-Center for Supercomputing (GCS) engagiert sich das JSC auch auf europäischer Ebene z.B. in PRACE [GCS:2011]. Damit sind die Ebenen 0 und 1 der Versorgungspyramide abgedeckt. Auf Ebene 2 haben sich die RWTH Aachen University und die Universität Paderborn mit ihren – von Wissenschaftsrat und DFG positiv evaluierten – Forschungsbauanträgen zu Hochleistungsrechnern in der programmatisch-strukturellen Linie HPC etabliert. Im Herbst 2018 hat die Universität zu Köln durch die Einreichung einer Skizze im Forschungsbauverfahren ebenfalls eine Evaluation zum Aufbau eines Ebene 2 HPC-Zentrums angestoßen.

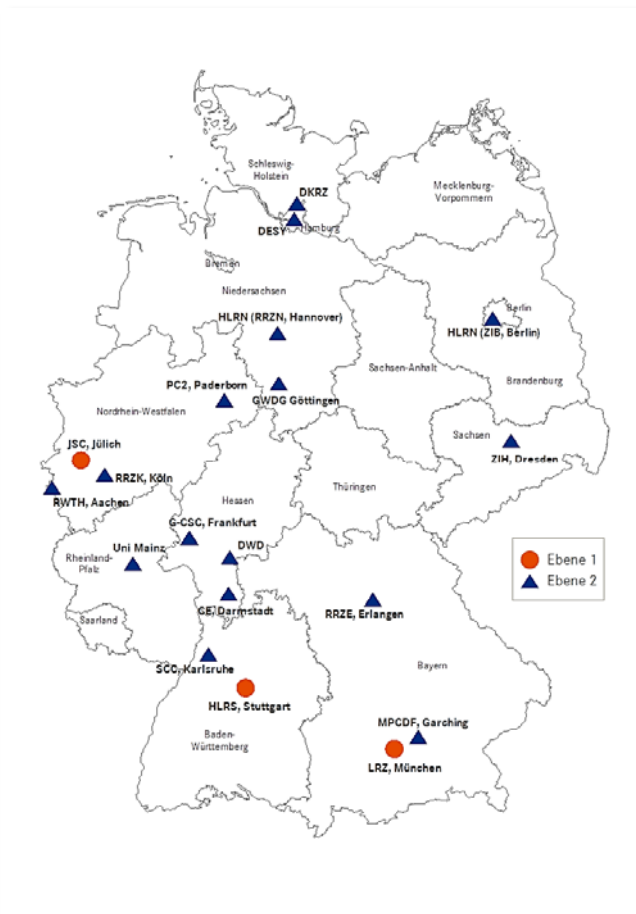


Abbildung 1: Zentren der Ebene 1 und 2
[Quelle: WR:2015, Abbildung 1, S. 17]

Auch auf Ebene 3 gibt es zahlreiche anerkannte Aktivitäten und etablierte Standorte. Dies zeigt sich unter anderem in den Mitgliedschaften in der Gauß-Allianz [GCS:2011] aber auch an der aktiven Teilnahme am Arbeitskreis Supercomputing des ZKI [<http://www.zki.de>]. Für die notwendigen effizienten Lösungen und Produktivitätssteigerungen sind Planungssicherheit, Kooperationen und eine Durchlässigkeit zwischen den verschiedenen Ebenen notwendig.

Um die gemeinsame Systemnutzung zu erleichtern wurden im Bereich kommerzieller Software verschiedene Landeslizenzen verhandelt und beschafft (z.B. TSM, IBM Spectrum Scale Konsortiallizenz, NAG Bibliotheken); bei nicht-kommerzieller Software entwickeln sich derzeit verschiedene Formen der Zusammenarbeit. Insbesondere die HPC-Kapazitäten der RWTH Aachen, der Universität Paderborn und der Universität zu Köln werden seit längerem in großer Breite von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern der anderen Universitäten in NRW genutzt.

Darüber hinaus haben sich auch intensivere Formen der Zusammenarbeit im Rahmen von lokalen bzw. regionalen Kooperationen entwickelt:

- In der Universitätsallianz Ruhr (UA Ruhr) arbeiten die Technische Universität Dortmund, die Ruhr-Universität Bochum und die Universität Duisburg-Essen seit 2007 strategisch eng zusammen.
- Im Rahmen des Campus OWL Verbundes der Hochschulen in der Region Ostwestfalen/Lippe (Universitäten Bielefeld und Paderborn, Fachhochschule Bielefeld, Hochschule Ostwestfalen-Lippe und Hochschule für Musik Detmold) hat die Universität Paderborn die Rolle des HPC-Dienstleisters für Ostwestfalen/Lippe übernommen.
- Mit dem JARA Center for Simulation and Data Science (JARA-CSD) bündeln das Forschungszentrum Jülich und die RWTH Aachen ihre Expertisen und tragen dem wachsenden Bedarf an Forschung, Infrastruktur und Vernetzung auf den Gebieten der Simulations- und Datenwissenschaften Rechnung [<https://www.jara.org/de/forschung/center-for-simulation-and-data-sciences>]. Ziel ist es, einen Beitrag zur Forschungslandschaft zu leisten, der die Nutzung von Datenanalyse- und HPC-Systemen einem breiten wissenschaftlichen Anwenderspektrum zugänglich macht und dabei Spitzenforschung ermöglicht, die ohne gemeinsame Aktivitäten im Center for Simulation and Data Science und die Bündelung der Ressourcen so nicht möglich wäre. Die Vergabe der Rechenzeit an Jülicher und Aachener Forscher geschieht über ein wissenschaftsgeleitetes und exzellenzorientiertes Peer-Review-Verfahren. Das Angebot von Tier-1 und Tier-2 Ressourcen unter einem Dach erlaubt einen niederschweligen Übergang von der Ebene 2 in die Ebene 1.
- Mit der erfolgreichen Einwerbung des West German Genome Center (WGGC) im Rahmen der DFG-Ausschreibung „Kompetenzzentren Gensequenzierung“ durch die Universitäten Köln (Sprecher), Bonn, Düsseldorf, sowie Aachen und Duisburg-Essen wird die Zusammenarbeit der Standorte in den Lebenswissenschaften wesentlich gestärkt. Mit der Aufstellung von Hochdurchsatzsequenzierern wird die Infrastruktur für HPC-basierte Datenanalyse sowie weiterer Folgeforschung dazu ergänzend ausgebaut. Dies trägt wesentlich zur HPC-orientierten Profil- und Strukturbildung in den Lebenswissenschaften in NRW bei [<http://gepris.dfg.de/gepris/projekt/407493903>].

Die Forschungseinrichtungen und Hochschulen in NRW haben sich an zahlreichen HPC-Forschungsprojekten erfolgreich beteiligt (siehe Abbildung 2).

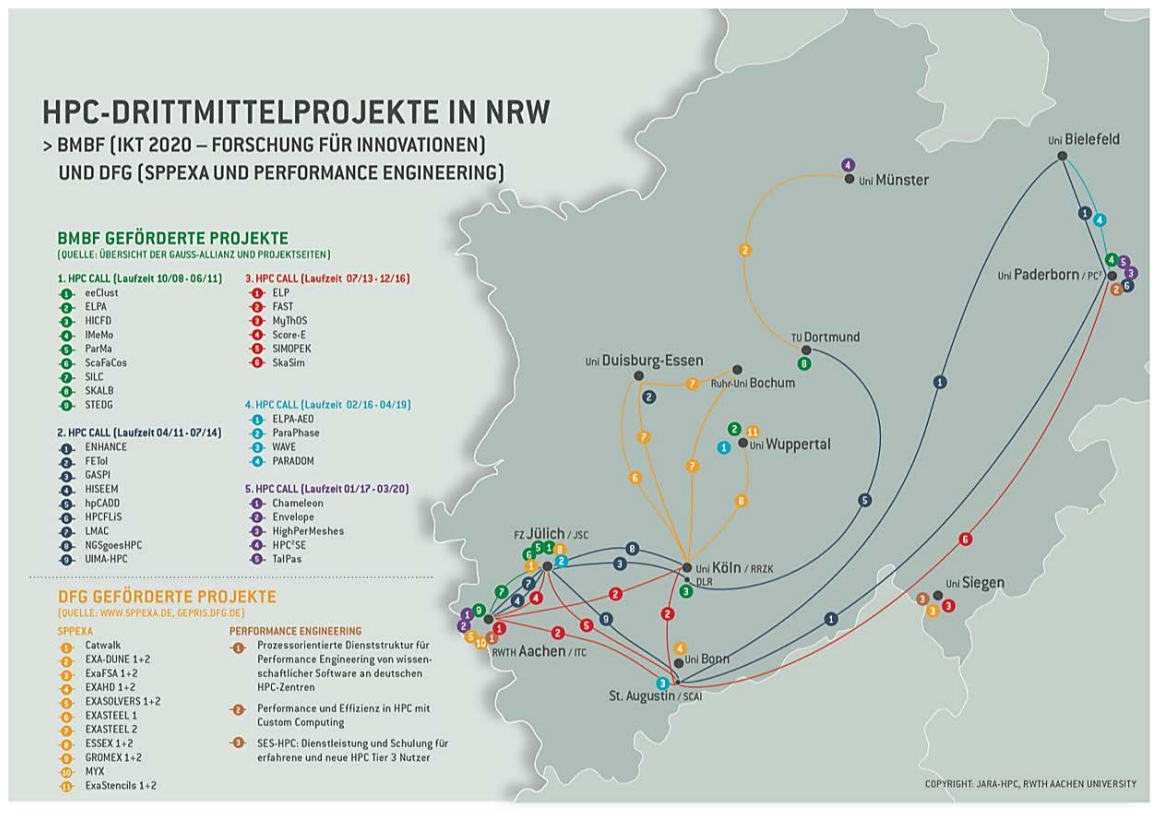


Abbildung 2: HPC-Drittmittelprojekte in NRW, © JARA-HPC, RWTH Aachen University

Im Rahmen des Programms „Anwendungsorientierte HPC-Software für skalierbare Parallelrechner“ waren Partner aus Nordrhein-Westfalen an 33 von insgesamt 51 Projekten beteiligt (Aachen, Bielefeld, Dortmund, Duisburg-Essen, Jülich, Köln, Paderborn, Siegen, Wuppertal). Eine intensive Beteiligung gibt es auch am Schwerpunktprogramm SPPEXA [<http://www.sppexa.de/>] der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) in 9 von 13 Projekten: Aachen, Bonn, Dortmund, Duisburg-Essen, Jülich, Köln, Münster, Siegen, Wuppertal. Im DFG Programm „Performance Engineering“ sind in drei von sechs geförderten Projekten Partner aus NRW beteiligt (Aachen, Paderborn, Siegen). Auch für zahlreiche, aktuell laufende Sonderforschungsbereiche in NRW sind Hochleistungsrechner eine unabdingbare Voraussetzung.

3 Das HPC-Landeskonzept NRW 2019 - 2023

Die zahlreichen und vielfältigen HPC-Aktivitäten sollen zukünftig in den Kontext eines HPC-Landeskonzepts NRW eingebunden werden. Dabei versteht sich das HPC-Landeskonzept NRW als Bestandteil des landesweiten Programms zur Digitalisierung der Hochschulen in NRW.

3.1 Rahmenbedingungen

Auf Initiative des damaligen DV-ISA wurde 2014 (über die IKM-Beauftragten der Hochschulen in NRW) eine Arbeitsgruppe konstituiert und mandatiert. Mitglieder dieser Arbeitsgruppe sind Spezialisten aus den drei für HPC wesentlichen Bereichen: nutzende Wissenschaft, Methodenwissenschaft und Betrieb. Diese Spezialisten erarbeiteten die vorliegende Version des Landeskonzepts, zunächst in Abstimmung mit dem Ministerium für Innovation, Wissenschaft und Forschung, später mit dem Ministerium für Kultur und Wissenschaft des Landes Nordrhein-Westfalen.

In Nordrhein-Westfalen soll das Ebenenkonzept mit den etablierten Zentren und beteiligten Partnern (siehe Kapitel [HPC in NRW](#)) fortgeführt, angepasst und ausgebaut werden. Die HPC-Zentren NRWs und deren Systeminstallationen mit unterschiedlicher Größe und inhaltlicher Ausrichtung ermöglichen eine nachhaltige und zugleich flexible Befriedigung der Anwenderbedürfnisse und schaffen damit bestmögliche Bedingungen für die simulationsgestützten und datenintensiven Wissenschaften. Um die Durchlässigkeit zwischen den Ebenen zu erhöhen und eine strukturierte Aufgabenverteilung zu erreichen, werden die verschiedenen Ebenen in NRW wie folgt klassifiziert.

| Ebene | Wiss. Bedarf und Konzept | Europaweite Öffnung | Bundesweite Öffnung | Landesweite Öffnung | Zugangsv erfahren | Accounting | Monitoring und Reporting | Personalkapazität für HPC | Beratungsprofil |
|-------|--------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|-------------------|------------|--------------------------|---------------------------|-----------------|
| 1 | X | X | X | X | PRACE, GCS | X | X | >20 | X |
| 2 | X | | X | X | WR, NHR, GA | X | X | 10-12 | X |
| 3 | X | | - | - | §Art 91b | | X | 2-4 | X |

Abbildung 3: Tabelle Charakteristika der verschiedenen Ebenen der HPC-Leistungspyramide

Die Indikatoren spiegeln dabei sowohl die Eigenschaften (z.B. Personalkapazität) als auch die spezifischen Pflichten (z.B. bundesweite Öffnung) wider.

Neben den in der Tabelle genannten Eigenschaften ist auch eine externe, wissenschaftliche Qualitätssicherung durch eine angemessene Begutachtung wesentlich für die Eingruppierung in die verschiedenen Kategorien.

1. Auf Ebene 2 wird die erfolgreiche Evaluierung eines Forschungsbau-Antrags in der programmatisch-strukturellen Line HPC (PSL-HPC) des Wissenschaftsrates als Kriterium angesehen. Die dort gestellten Anträge dokumentieren auch die anerkannten Schwerpunkte der jeweiligen Zentren:
 - a. Immersive Visualisierung sowie Parallele Programmiermodelle und -standards in Aachen
 - b. Anwendungsspezifisches Rechnen mit FPGAs und Ressourcenmanagement für heterogene Rechnersysteme in Paderborn
 - c. Effiziente Implementierung lebenswissenschaftlicher Algorithmen, sicherer Umgang mit lebenswissenschaftlichen Daten und visuelle Datenanalyse in Köln
2. Auf Ebene 3 wird analog die erfolgreiche Evaluierung eines Hochleistungsrechner-Antrags für ein Forschungsgrößgerät nach Art. 91b GG als Kriterium angesehen. Zusätzlich sollten die Systeme für eine breite, multidisziplinäre Nutzergruppe mit einem dynamischen Portfolio an Forschungsvorhaben zentral bereitgestellt werden.

Die Anforderungen auf Ebene 2 sind verglichen zu Ebene 3 deutlich höher. Ein Ebene 2 Zentrum hat auch die Aufgaben eines Ebene 3 Zentrums.

Diese Kombination aus Kriterien, Eigenschaften und Pflichten mit einer externen, wissenschaftlichen Qualitätssicherung erlaubt die Kategorisierung der Zentren und die notwendige Stabilität und Transparenz. Die Durchlässigkeit zwischen den Ebenen (Auf- und Abstieg von Zentren) wird durch die externe Qualitätssicherung ebenfalls gewährleistet (erfolgreiche und abgelehnte Anträge).

Als unerlässliche Basis für den Erfolg dieses HPC-Landeskonzepts, insbesondere bei der Identifikation und Erschließung von Synergiepotenzialen, werden die Etablierung einer gemeinsamen Know-how-Basis, eines intensivierten Austausches, und die Vertiefung des Vertrauensverhältnisses unter den Akteuren im HPC-Bereich in Nordrhein-Westfalen gesehen.

Das HPC-Landeskonzept ist auf 5 Jahre ausgelegt, konkret die Periode 2019 - 2023. Die laufende Evaluation und Weiterentwicklung dieses Landeskonzepts soll durch die Arbeitsgruppe HPC der DH-NRW sichergestellt werden. Ein abschließender Evaluationsbericht in 2023 sowie die Fortschreibung für die Folgeperiode stellen die Nachhaltigkeit sicher.

Die aufzubauenden und zu etablierenden Abstimmungs- und ggf. Begutachtungsverfahren werden dabei natürlich die Entwicklungen beim geplanten Aufbau von NHR-Zentren, wie durch den Wissenschaftsrat empfohlen [WR:2015], stets berücksichtigen. Eine Übersicht der HPC-Ressourcen an den Hochschulen in Nordrhein-Westfalen wird unter: www.hpc.nrw aufgebaut und dargestellt.

3.2 Hauptziele

Konkret werden folgende Hauptziele für das HPC-Landeskonzept NRW für die Periode 2019 - 2023 gesehen:

1. Die **weitere Stärkung des Wissenschaftsstandortes Nordrhein-Westfalen** im nationalen und internationalen Kontext im Bereich der HPC-Bereitstellung, -Forschung und -Anwendung. Dazu wird auf der Ebene 0 und 1 das Jülich Supercomputing Center (JSC) als Teil des Gauss Center for Supercomputing (GCS) und auf Ebene 2 das IT Center der RWTH Aachen, das Paderborn Center for Parallel Computing der Universität Paderborn sowie das Regionale Rechenzentrum der Universität zu Köln konsequent weiterentwickelt. Insbesondere wird die Zusammenarbeit der Zentren weiter ausgebaut. Der Übergang zwischen den Systemen aller Ebenen des HPC-Versorgungssystems wird im Kontext von NHR weiter systematisiert und gestärkt werden. Für das Bundesland Nordrhein-Westfalen ist es auf Grund der Größe, der Heterogenität der Anforderungen, der notwendigen Versorgungskapazitäten sowie der Diversität der thematischen Ausrichtungen auf Dauer wünschenswert eine breite Unterstützung auf Ebene 2 zu etablieren. Folgende Schritte sind notwendig:
 - a. Evaluation von geeigneten Zentren (Aachen, Paderborn, Köln) durch Forschungsbau-Anträge in der PSL-HPC des Wissenschaftsrates (in Perspektive durch Teilhabe in Antragsverfahren des NHR-Systems) und bei erfolgreicher Evaluierung und Implementierung der bewilligten Systeme die Weiterentwicklung zu Zentren der Ebene 2 innerhalb der nationalen Versorgungspyramide des zukünftigen NHR-Systems.
 - b. Systematisierung der Übergänge innerhalb des HPC-Versorgungssystems.
2. Die **nachhaltige Sicherstellung der Versorgung** der Wissenschaft und der in Hochschulkooperationen forschenden Industrie mit HPC-Ressourcen und -Fachkenntnissen. Dazu bedarf es folgender Voraussetzungen:
 - a. einer kompetenten Beratung, die für jeden Wissenschaftler in Nordrhein-Westfalen zugänglich ist,
 - b. einer Versorgung mit HPC-Leistung, die auf allen Ebenen (1-3) die Bedarfe abdeckt, wobei
 - i. auf Ebene 3 lokale Systeme an verteilten Standorten durch
 - ii. Ebene 3 Systeme in Aachen, Paderborn und Köln für Nutzer von Hochschulen für angewandte Wissenschaft und Universitäten ohne Zugang zu eigenen Ebene 3 Ressourcen ergänzt werden.
3. **Wissenschaftsgeleitete und effiziente Planung, Bereitstellung und Einsatz von HPC-Ressourcen unter sukzessiver Berücksichtigung einer hochschulübergreifenden Perspektive.** Um dies zu erreichen, sind folgende Schritte (Good Practices) notwendig:

- a. Ein Diskussionsprozess und ein organisatorischer Rahmen für die hochschulübergreifende Abstimmung von HPC-Großgeräteanträgen und HPC-Beschaffungsprozessen sind zu initiieren.
- b. Die Ebene 2 und Ebene 3 Standorte implementieren einen hochschulzentralen Betrieb ihrer HPC-Ressourcen.
- c. Ein Verfahren zur Vergabe von Rechenzeit für die HPC-Ressourcen der Ebenen 2 und 3 soll an allen Hochschulen, die HPC in größerem Umfang (d.h. mit nach Art. 91b GG beschafften Forschungsgroßgeräten) betreiben, etabliert werden. Die Verfahren auf Ebene 2 werden dabei durch das geplante NHR-System geregelt.
- d. Öffentlichkeit und Transparenz bzgl. HPC-Ressourcen und ihrer Nutzung ist zu schaffen. Öffentlich zugängliche Informationsangebote (insbes. online/Web) zu allen nach Art. 91b GG beschafften HPC-Systemen, ihrer Nutzung und Auslastung sollen, falls noch nicht vorhanden, geschaffen und laufend aktualisiert werden.

In Folge der optimierten Koordination soll – auch im wirtschaftlichen Sinne – *eine Qualitätssteigerung* erreicht werden.

3.3 Maßnahmen

Zur Erreichung dieser Hauptziele wurden für die Planungsperiode Maßnahmen definiert.

1. Um die **Interessen des Landes Nordrhein-Westfalen auch auf Bundesebene** konsequent vertreten zu können, ist die Vertretung in Initiativen auf nationaler Ebene durch den **DV-Länderreferenten** von Seiten des MKW sehr wichtig. Dies gilt auch für die Vertretung durch Mitglieder der Universitäten in verschiedenen Initiativen oder Gremien. Eine enge Abstimmung und ein fachlicher Austausch mit der DH-NRW Arbeitsgruppe HPC wird etabliert.
2. **Fortführung der aktuellen DH-NRW Arbeitsgruppe HPC.** In der AG HPC soll die Breite der Profile ihrer Mitglieder in HPC-Anwendung, Methodenwissenschaft und Betriebsführung sowie die Mandatierung aus den Hochschulen berücksichtigt werden. Die weitere Ein- und Anbindung wird durch die DH-NRW realisiert, die ebenfalls die Betreuung der Gremien leistet. Aufgaben der AG HPC sind wie folgt:
 - a. Entwicklung eines Konzeptes für die zeitlich und inhaltlich abgestimmten Beschaffungen von HPC-Ressourcen, unter Berücksichtigung der jeweils lokalen Anforderungen. Hier ist insbesondere auch die Einbindung der Arbeitsebene (HPC- Administratoren und -Berater) von Bedeutung. Durch die Abstimmung und die damit verbundene Beratung soll eine hohe Qualität der Anträge sichergestellt werden. Dies dient der Sicherung entsprechender Bundesmittel, die mit diesen Anträgen eingeworben werden.
 - b. Unterstützung bei der Evaluation und Weiterentwicklung des Maßnahmenkatalogs und der Fortschreibung des HPC-Landeskonzeptes.
 - c. Beratung und Unterstützung bei der nachhaltigen Planung der HPC-Versorgung in NRW.

- d. Beratung des MKW in HPC-Fragen.
 - e. Erstellung einer NRW-Übersicht über HPC-Beschaffungen in Form eines 5-Jahres Ausblicks.
 - f. Förderung des Bewusstseins für Bedeutung und Nutzen von HPC auf Entscheidungsebene in der Politik und in den Hochschulen wie auch bei potenziellen zukünftigen Anwendern und in der breiten Öffentlichkeit. Erfolgsgeschichten und Leuchtturmprojekte sollen kontinuierlich identifiziert und präsentiert werden.
 - g. Hochschulübergreifende Bekanntmachung der HPC-spezifischen Studiengänge.
3. Das operative Know-how der HPC-Betriebsspezialisten soll durch die **Fortführung der HPC-Admin-Gruppe NRW** verbreitert und gestärkt werden. Die regelmäßigen Treffen dieser Gruppe sollen fortgeführt werden. Beispiele für Themen und Aufgaben sind:
- a. Erarbeitung von Lösungen zur Förderung der Durchlässigkeit im Ebenensystem und koordinierte, standortübergreifende Nutzung auf Ebene 3.
 - b. Erarbeitung von Vorschlägen zur technischen Unterstützung:
 - i. Vereinfachung der Portierung von Codes zwischen Standorten.
 - ii. Vereinfachung der Zugangsmodalitäten zu Ressourcen an anderen Hochschulen zur Intensivierung der Zusammenarbeit (Kennungsvergabe und Zugriffsrechteverwaltung).
4. **Etablierung eines Beratungsnetzwerks HPC.** Aufgaben dieses Netzwerks sind:
- a. Bereitstellung eines HPC-Beratungsangebotes an den Hochschulen.
 - b. Erstellung einer laufend zu aktualisierenden Kompetenz-Matrix für die Transparenz und zur Förderung des Austausches.
 - c. Dokumentation bestehender Möglichkeiten für die Anwender.
 - d. Entwicklung von abgestimmten, gemeinsam genutzten Trainings- und Schulungsangeboten.
5. **Strukturierte Bereitstellung von HPC-Ressourcen:** Die Bereitstellung von HPC-Leistungen (Rechenleistung, Beratung, allgemeiner Support) muss nach definierten Regeln erfolgen, niederschwellig sein und sich an bekannten Best Practices ausrichten. Im Rahmen der DH-NRW werden die Rahmenbedingungen hierfür erarbeitet. Die hochschulübergreifende Bereitstellung von HPC-Leistungen sollte sich demnach an diesen Regelungen orientieren. Ebene 2 und Ebene 3 Standorte mit HPC-Ressourcen, die für eine breite, multidisziplinäre Nutzergruppe mit einem dynamischen Portfolio an Forschungsvorhaben bereitgestellt werden, sollen folgende Good Practices umsetzen:
- a. Etablierung eines strukturierten Zugangs zu HPC-Ressourcen für Forschungsvorhaben auf den HPC-Ebenen 2 und 3. Diese Verfahren sollen insbesondere auch als Basis zur Legitimierung einer hochschulübergreifenden Nutzung von HPC-Ressourcen dienen. Auf Ebene 2 werden die Vorgaben

des NHR bzw. die Empfehlungen der Gauß-Allianz [GA:2017] umgesetzt. Auf Ebene 3 wird die wissenschaftliche Nutzung der HPC-Ressourcen dem jeweiligen §91b Antrag entsprechend sichergestellt. Dabei werden auch die Belange einer möglichst guten Beratung der Anwender und der Durchlässigkeit zwischen den Ebenen berücksichtigt.

- b. Schaffung von Öffentlichkeit und Transparenz bzgl. HPC-Ressourcen und ihrer Nutzung.
- c. Das Leistungsverhalten und die Auslastung des HPC-Ökosystems der Ebene 2 und 3 in Nordrhein-Westfalen sowie der einzelnen HPC-Anwendungen wird durch geeignete Software überwacht, gemessen und analysiert. Die Ergebnisse fließen in HPC-Geräteanträge (u.a. nach Artikel 91b GG) ein.
- d. Intensivierung des Austausches zur Gesamtkostenbetrachtung (TCO). Die Betreiber von HPC-Systemen verpflichten sich zur Erfassung der verschiedenen Kostenanteile und streben einen möglichst kosteneffizienten Betrieb an. Dies beinhaltet die Einigung auf zu erfassende Kostenarten, die Erfassung der Kosten z.B. für Klimatisierung nach etablierten Standard und die Etablierung von Maßnahmen zum kosteneffizienten Betrieb von HPC-Infrastrukturen (PUE-Monitoring).

Die Good Practices sollen auf Dauer weiterentwickelt und gepflegt werden.

6. **Intensivierung bestehender Kooperationen:** die bereits etablierten Kooperationen (z.B. JARA-CSD, UA Ruhr, Campus OWL (Universität Paderborn), Lebenswissenschaftliches Kompetenznetzwerk (BCD), Gauß-Allianz, ZKI AK-Supercomputing) werden bei dieser Neustrukturierung der HPC-Abstimmung auf Landesebene weiterhin als wichtiger Bestandteil verstanden. Technische Lösungen, die eine einfachere Registrierung zur Nutzung von Ressourcen an anderen Hochschulen erlauben und die Heimat-Rechenzentren dabei einbinden, sollen etabliert werden.
 - a. Mitwirkung bei der länderübergreifenden Abstimmung innerhalb von GCS und Gauß-Allianz, bzw. von Nachfolgestrukturen.
 - b. Präsenz auf Messen und Konferenzen und Mitarbeit in Arbeitskreis Supercomputing der ZKI.
 - c. Bidirektionaler Austausch mit Aktivitäten von Bundesländern, die ebenfalls ein HPC-Landeskonzept besitzen.
7. Schaffung von Anreizen durch das MKW durch **Förderung von hochschulübergreifenden HPC-Projekten**, orientiert an den von der DH-NRW AG HPC erarbeiteten Empfehlungen. Beispiel dafür wären:
 - a. Nachhaltige Sicherstellung der Lizenzversorgung für HPC-Software.
 - b. Bereitstellung von Personalmitteln für identifizierte Projekte zur Synergieförderung (Code-Pflege, Portierung, Durchgängigkeit, Anbindung an Identity-Management, Schulung, Kompetenzvermittlung).

3.4 Zusammenfassung und Ausblick

Die Etablierung und langfristige Weiterentwicklung des HPC-Landeskonzeptes wird die Wettbewerbsfähigkeit von Nordrhein-Westfalen im Vergleich zu den anderen Bundesländern verbessern. Die Transparenz bzgl. Bereitstellung und Nutzung der HPC-Ressourcen schafft die Voraussetzung für eine optimale Versorgung der Wissenschaftler. Die hochschulübergreifende Beratung und abgestimmte Betriebskonzepte unterstützen die Anwender und ermöglichen eine effiziente Nutzung. Die erhöhte Durchlässigkeit zwischen den Ebenen ermöglichen es die für die jeweilige Fragestellung optimalen Systeme zu nutzen.

Die Weiterentwicklung wird dabei geleitet von den etablierten Monitoring-Mechanismen, orientiert sich an den jeweils aktuellen Empfehlungen des Wissenschaftsrates und bezieht die Erfahrung anderer Bundesländer mit ein. Die laufende Aktualisierung der landesweiten Übersicht über HPC-Beschaffungen bietet die Basis für das Monitoring des Abschneidens bei DFG Art. 91b GG Großgeräteempfehlungen in Bezug zum Königsteiner Schlüssel. Damit ist eine nachhaltige positive Wirkung auf die Forschungslandschaft und die wirtschaftliche Wettbewerbsfähigkeit von Nordrhein-Westfalen sichergestellt.

Literaturverzeichnis

[Apon:2015] Amy W. Apon, Linh B. Ngo, Michael E. Payne, Paul W. Wilson: Assessing the effect of high performance computing capabilities on academic research output, *Empir Econ* (2015) 48:283–312 (DOI 10.1007/s00181-014-0833-7).

[ARNW:2005] Arbeitskreis der Leiter von Rechenzentren an wissenschaftlichen Hochschulen des Landes Nordrhein-Westfalen (ARNW): „HIPEC NRW II- High PErformance Computing Nordrhein-Westfalen. Kooperatives Versorgungskonzept für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in den Hochschulen des Landes.“ November 2005.

[Bischof:2012] Christian Bischof, Dieter an Mey, Christian Iwainsky: „Brainware for green HPC“ *Computer Science – Research and Development*, Volume 27, Issue 4, November 2012, Springer.

[Bischof:2013] Christian Bischof: „Das HPC Ökosystem in Darmstadt und Hessen“, 40. Treffen des ZKI-Arbeitskreises Supercomputing, 11.10.2013, Darmstadt.

[BMBF:2011] Bundesministerium für Bildung und Forschung: „Die Säulen des Super-Computing. Höchstleistungsrechnen gibt Antworten auf schwierigste Fragen unserer Zeit“. Berlin, Bonn 2011.

[DFG:2006] Deutsche Forschungsgemeinschaft: „Informationsverarbeitung an Hochschulen – Organisation, Dienste und Systeme. Empfehlungen der Kommission für IT- Infrastruktur für 2006-2010“, Bonn 2006.

[DFG:2010] Deutsche Forschungsgemeinschaft: „Informationsverarbeitung an Hochschulen – Organisation, Dienste und Systeme. Empfehlungen der Kommission für IT-Infrastruktur für 2011-2015“, Bonn 2010.

[DFG:2012] Deutsche Forschungsgemeinschaft: „Förderatlas 2012 – Kennzahlen zur öffentlich finanzierten Forschung in Deutschland“. ISBN 978-3-527-33378-3, Wiley- VCH, 2013.

[GCS:2011] Gauss Centre for Supercomputing: „High Performance Computing in Deutschland. Gedanken zur Fortschreibung eines nationalen HPC-Versorgungs- und Nutzungskonzeptes“. Berlin 15.09.2011.

[GA:2017] Gauß-Allianz e.V.: „Empfehlungen zur Etablierung national abgestimmter Beantragung- und Bewilligungsverfahren“, September 2017.

[Hartenstein:2013] Hannes Hartenstein, Thomas Walter, Peter Castellaz: „Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste“. PIK 2013; 36(2): 99-108.

[MIWF:1975] Ministerium für Wissenschaft und Forschung des Landes NRW: „ADV- Gesamtplan für die Hochschulen des Landes NRW bis 1980“. ADVGP-HS 1980, Dezember 1975.

[MIWF:1980] Ministerium für Wissenschaft und Forschung des Landes NRW: „ADV- Gesamtplan für die Hochschulen des Landes NRW“. ADVGP-HS, 2. Fassung, April 1980.

[MIWF:2002] Ministerium für Schule, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen: „HIPEC NRW - High Performance Computing Nordrhein-Westfalen. Kooperatives Versorgungskonzept für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in den Hochschulen des Landes.“ Januar 2002.

[MIWF:2013] Ministerium für Schule, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen: „Forschungsstrategie „Fortschritt NRW“ Forschung und Innovation für nachhaltige Entwicklung 2013 – 2020“. Stand Kabinetttbefassung 05. Juli 2013

[Olbrich:2013] Stephan Olbrich, Harald Ziegler: „Weiterentwicklung des Hochleistungsrechnens in Deutschland“, Positionspapier ZKI AK-Supercomputing. Stand 2.12.2013.

[REU:2006] High Performance Computing in Deutschland: Argumente zur Gründung einer strategischen Allianz. European Media Laboratory, Heidelberg 14./22. September 2006.

[TMWBK:2014] Thüringer Ministerium für Wissenschaft, Bildung und Kultur: „Hochschulstrategie 2020“, 2014.

[Wilms:2013] Marcus Wilms: „DFG-Förderung des Hochleistungsrechnens“, 40. Treffen des ZKI-Arbeitskreises Supercomputing, Darmstadt 11.10.2013.

[WR:2000] Wissenschaftsrat: „Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern“, Drs. 4558/00, Mainz, 12. Mai 2000.

[WR:2007] Wissenschaftsrat: „Bericht über die Tätigkeiten des Nationalen Koordinierungsausschusses zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern“, Drs. 8162-07, Köln 9.11.2007.

[WR:2012] Wissenschaftsrat: „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“. Positionspapier, 2012.

[WR:2014] Wissenschaftsrat: „Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft“, Positionspapier, 2014.

[WR:2015] Wissenschaftsrat: „Empfehlungen zur Finanzierung des Nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“, Positionspapier, 2015.

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|---|
| Abbildung 1: Zentren der Ebene 1 und 2 | 5 |
| Abbildung 2: HPC-Drittmittelprojekte in NRW | 7 |
| Abbildung 3: Tabelle Charakteristika der verschiedenen Ebenen der HPC- Leistungs pyramid e | 8 |

Autoren

Arbeitsgruppe HPC der Digitalen Hochschule NRW:

Norbert Attig (Forschungszentrum Jülich, Gast), Uwe Blotevogel (Universität Duisburg-Essen), Rainer Bockholt (Universität Bonn), Stefan Drees (MKW), Volker Hamer (MKW bis 15.08.2017), Torsten Harenberg (Universität Wuppertal), Dieter Huth (Universität Wuppertal), Holger Karl (Universität Paderborn), Andreas Kempf (Universität Duisburg-Essen), Martin Kötterheinrich (TU Dortmund), Ulrich Lang (Universität zu Köln), Matthias S. Müller (RWTH Aachen University, Sprecher), Gudrun Oevel (Universität Paderborn), Christian Plessl (Universität Paderborn), Sabine Roller (Universität Siegen), Martina Rothacker (Ruhr-Universität Bochum), Ali Reza Samanpour (Fachhochschule Südwestfalen), Christian Schröder (Fachhochschule Bielefeld), Stefan Turek (TU Dortmund), Carsten Urbach (Universität Bonn), Raimund Vogl (Universität Münster), Hans-Dieter Weckmann (Universität Düsseldorf), Christian Zeitnitz (Universität Wuppertal), Harald Ziegler (Universität Düsseldorf)

Herausgeber

Digitale Hochschule NRW

Vorstand:

Vorsitzende: Prof. Dr. A. Pellert
Stellvertreter: Prof. Dr. K. Zeppenfeld

Geschäftsstelle

Anschrift: Geschäftsstelle DH-NRW
c/o FernUniversität Hagen
Universitätsstrasse 47
58097 Hagen

Bereichsleitung
Infrastruktur &
Management: Astrid Seggewiß-Rode

c/o Universität Bonn/HRZ
Wegelerstraße 6
53115 Bonn

Homepage: www.dh-nrw.de