

Umsetzungskonzept der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für das Hochleistungsrechnen

Vorgelegt von den Leitern der Rechen- bzw. Informationszentren der Universitäten des Landes Baden-Württemberg (ALWR-BW) in Abstimmung mit dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg

Zur Begutachtung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Revisionsverlauf:

12. März 2012, Originalversion eingereicht bei der DFG

9. Mai 2012, Mitteilung des positiven Votums durch die DFG im Zusammenhang mit der Beantragung des bwUniCluster-Systems

5. September 2012, Ergänzung des letzten Abschnitts bei „Zusammenfassung und zeitliche Planung“, Seite 10, auf Basis eines Hinweises der DFG

Inhalt

Zur Einordnung dieses Umsetzungskonzepts.....	3
Ausgangslage und Zielsetzung.....	4
Ebenen 0 und 1: Höchstleistungsrechnen mit HERMIT	6
Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung.....	6
Finanzierung	6
Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe.....	6
Technische Auslegung.....	6
Ebene 2: Der Forschungshochleistungsrechner ForHLR.....	7
Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung.....	7
Beantragungsverfahren.....	7
Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe.....	7
Technische Auslegung.....	7
Ebene 3: Die Forschungs-Cluster (bwForCluster) und das HPC-Versorgungssystem (bwUniCluster)	8
Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung.....	8
Beantragungsverfahren und Finanzierung	9
Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe.....	9
Technische Auslegung und Softwarebereitstellung	10
Zusammenfassung und zeitliche Planung.....	10
Referenzen	11

Autoren

Die Mitglieder des Arbeitskreises der Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren von Baden-Württemberg (ALWR-BW):

Prof. Dr. Gerhard Schneider, Universität Freiburg
Prof. Michael Hebgen, Universität Heidelberg
Karl-Wilhelm Horstmann, Universität Hohenheim
Prof. Dr. Hannes Hartenstein, Karlsruher Institut für Technologie
Prof. Dr. Marcel Waldvogel, Universität Konstanz
Dr. Peter Leinen, Universität Mannheim
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Michael Resch, HLRS, Stuttgart
Prof. Dr. Thomas Walter, Universität Tübingen
Prof. Dr. Hans Peter Großmann, Universität Ulm
Peter Castellaz, Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg

sowie Dr. Marek Dynowski (FR), Michael Janczyk (FR), Rolf Bogus (HD), Stefan Friedel (HD), Dr. Steffen Bücheler (SH), Dr. Sven Hermann (KA), Dr. Holger Marten (KA), Prof. Dr. Achim Streit (KA), Matthias Landwehr (KN), Dr. Heinz Kredel (MA), Dr. Stefan Wesner (S), Dr. Martin Hecht (S), Dr. Werner Dilling (TÜ), Christian Mosch (UL), Thomas Nau (UL)

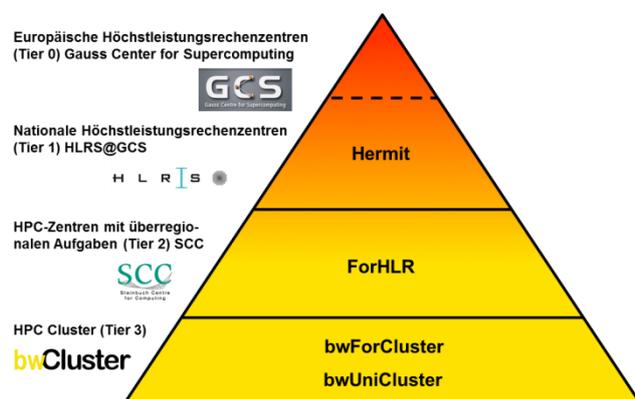
Zur Einordnung dieses Umsetzungskonzepts

Für das Hochleistungsrechnen an den Universitäten des Landes Baden-Württemberg wird die beabsichtigte Ausgestaltung der Ebenen bzw. Leistungsstufen 2 und 3 der „HPC-Leistungspyramide“ vorgestellt und im Zusammenhang mit den Höchstleistungsrechnensystemen (der höchsten Leistungsstufen) betrachtet. Die HPC-Leistungspyramide besteht entsprechend der Darstellung des Positionspapiers „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ des Wissenschaftsrats [1] in Deutschland heute aus folgenden vier Ebenen:

- Als Systeme der Ebene 0 (Tier 0-Systeme) werden diejenigen Systeme bezeichnet, die von den „Hosting Members“ in PRACE als nationale Beiträge zur europäischen Infrastruktur vertragsgemäß im Zeitraum von 5 Jahren (2010-2015) Rechenzyklen im Wert von je 100 Millionen Euro einbringen.
- Systeme der Ebene 1 (Tier 1-Systeme) sind nationale Höchstleistungsrechner mit deutschlandweiten Zugangsverfahren.
- Systeme der Ebene 2 (Tier 2-Systeme) sind Landeshochleistungsrechner sowie fachspezifische Rechner (z.B. für die Klimaforschung) mit überregionaler Bedeutung und definierter Forschungsprogrammatur.
- Den Systemen der Ebene 3 (Tier 3-Systeme) sind typischerweise Rechencluster in Instituten und regionalen Rechenzentren an Hochschulen und Forschungseinrichtungen zuzuordnen.

Die im Gauss Centre for Supercomputing e. V. zusammengefassten nationalen Höchstleistungszentren in Garching (LRZ), Jülich (FZJ) und Stuttgart (HLRS) tragen zu dem europäischen Versorgungskonzept PRACE bei (Ebene 0). In Baden-Württemberg stellt das HLRS zusätzlich ein System der Ebene 1. Die Aktivitäten des Landes und des Bundes auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens (Ebenen 0 und 1) in Baden-Württemberg sind nicht Gegenstand dieses Umsetzungskonzepts, werden aber hinsichtlich der Verzahnung, der Abstimmung und des entstehenden Gesamtbilds mitbetrachtet.

In diesem Umsetzungskonzept werden die Vorhaben „Forschungshochleistungsrechner am KIT“ (ForHLR) als System der Ebene 2 sowie „Forschungs-Cluster“ (bwForCluster) und „HPC-Versorgungssystem des Landes Baden-Württemberg“ (bwUniCluster) auf der Ebene 3 beschrieben. Die Ausgestaltung der Ebene 3 unterscheidet sich von der „klassischen“ und oben genannten Ebenen-Definition insbesondere dadurch, dass diese Ebene-3-Systeme bezogen auf den Betriebsstandort in Baden-Württemberg zentralisiert und landesweit genutzt werden, entweder für ausgewiesene Fachwissenschaften im Falle der bwForCluster oder als Grundversorgungssystem im Falle des bwUniCluster.



Die Ausgestaltung der Ebene 3 unterscheidet sich von der „klassischen“ und oben genannten Ebenen-Definition insbesondere dadurch, dass diese Ebene-3-Systeme bezogen auf den Betriebsstandort in Baden-Württemberg zentralisiert und landesweit genutzt werden, entweder für ausgewiesene Fachwissenschaften im Falle der bwForCluster oder als Grundversorgungssystem im Falle des bwUniCluster. Für das Land Baden-Württemberg ergibt sich daraus die nebenstehend abgebildete HPC-Pyramide, die in den Jahren 2011 – 2016 stetig ausgebaut wird.

Ausgangslage und Zielsetzung

Für die Darstellung der Bedeutung von *Computational Science and Engineering* sowie damit verbunden von Hoch- und Höchstleistungsrechnen (High Performance Computing, HPC) in Forschung und Wissenschaft sowie für die Volkswirtschaft wird für die grundsätzliche Darstellung auf [1,2,3] verwiesen. Das Land Baden-Württemberg fördert aufgrund der immer weiter ansteigenden Bedeutung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens auf allen Ebenen und hat hierzu am 15. Juni 2010 eine Investitionsplanung für den Zeitraum bis in das Jahr 2016 verabschiedet [4]. Die Investitionsplanung umfasst den Ausbau des Höchstleistungsrechenzentrums der Universität Stuttgart (HLRS), den breiten Zugang der Landeshochschulen zum Hochleistungsrechnen – aufbauend auf dem organisatorischen Verbund bwGRiD – sowie die Bereitstellung von Mitteln für den Bedarf an Rechen- und Speicherkapazitäten unterhalb des Höchstleistungsrechnens am SCC des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT).

Die Universität Stuttgart und das Karlsruher Institut für Technologie haben sich abgestimmt, das Thema „Hochleistungsrechnen“ federführend durch das HLRS und das Thema „Hochleistungsrechnen, Verteilte Systeme und Behandlung großer Datenmengen“ federführend durch das SCC zu verfolgen. Für die Abstimmung sowie für die Verzahnung der Ebenen 1 und 2 wurde zum 1. Juli 2011 die Höchstleistungsrechner und Verteilte Systeme Verbund (HVV) GmbH gegründet [5]. Entsprechend dieser Abstimmung wird dieses Umsetzungskonzept für das Hochleistungsrechnen durch das SCC als Konsortialführer angeführt. Die Verzahnung der Ebenen 1 und 2 in Baden-Württemberg ist zudem durch einen gemeinsamen Lenkungsausschuss gegeben. Dies stellt sicher, dass Projekte auf beiden Ebenen geprüft werden und der Übergang zwischen den Ebenen aus wissenschaftlicher Sicht reibungsfrei erfolgen kann.

Das Strategiepapier „IT an den Universitäten Baden-Württembergs“ [6], herausgegeben im Jahr 2010 von dem Arbeitskreis der Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren von Baden-Württemberg (ALWR-BW, ein Ausschuss der Landesrektorenkonferenz), benennt ebenfalls die Fortentwicklung des bwGRiD von einer Rechenplattform zu einer Kooperations- und Kommunikationsplattform als strategisches Ziel, dessen Erreichung durch dieses Umsetzungskonzept unterstützt wird. Die seit dem 1. Juli 2011 mit einer Projektlaufzeit von 2 bzw. 2,5 Jahren laufenden Landesprojekte „Föderatives Identitätsmanagement in Baden-Württemberg“ (bwIDM), „Erweiterung der Large Scale Data Facility zur Datenspeicherung für die baden-württembergischen Hochschulen“ (bwLSDF) und „bwGRiD - Ergänzende Maßnahmen“ (bwGRiD-EM) flankieren die Fortentwicklung der Kooperation der Rechenzentren der Universitäten [7]. Die *Common Ulm Stuttgart Server* (CUSS Cluster) sind ein weiteres Beispiel bestehender kooperativer Betriebsmodelle im Land. Der CUSS-Cluster wird in dem hier vorgestellten HPC-Versorgungssystem bwUniCluster fortentwickelt und abgelöst.

Auf Basis der Planung der Landesregierung, der IT-Strategie für die Universitäten des Landes Baden-Württemberg sowie der aktuellen Betriebs- und Projektkooperationen der Rechenzentren der Universitäten in Baden-Württemberg sowie unter Berücksichtigung der Empfehlungen des Wissenschaftsrats und der DFG [8] beschreibt das hier vorgelegte Konzept die Fortentwicklung und Ausgestaltung der beabsichtigten HPC-Installationen für die Forschung sowie für die Versorgung mit HPC-Ressourcen. Kernelemente in diesem Umsetzungskonzept sind dabei der Forschungshochleistungsrechner am KIT (ForHLR, auf Ebene 2) sowie Forschungscluster (bwForCluster, auf Ebene 3) mit ausgewiesenem anwendungs- und methoden-

wissenschaftlichem Profil und ein HPC-Versorgungssystem (bwUniCluster, *Universal/University Cluster*, auf Ebene 3), welches ehemals lokal vorgehaltene HPC-Ressourcen der einzelnen Landesuniversitäten zur Grundversorgung bündelt und insbesondere auch in der Lehre Verwendung findet. Im Einklang mit den Empfehlungen des Wissenschaftsrats wird eine Neuordnung vorgeschlagen, welche auf Ausdifferenzierung der Rechenressourcen, sich ergänzende Strukturen und den Aufbau von Kompetenzzentren setzt.

Insbesondere auf der Ebene 3 beruht die Neuordnung auf den Möglichkeiten eines föderativen Betriebs- und Nutzerunterstützungskonzepts, welches sich auf den Erfahrungen im Grid-Umfeld, insbesondere natürlich in Bezug auf bwGRiD und der zugehörigen Landesprojekte, abstützt. Die erzielten Errungenschaften für einen verlässlichen verteilten Betrieb werden dabei als Basis für die Neuordnung genutzt, eine Verteilung der Systeme alleine der Verteilung wegen erfolgt nicht. Stattdessen basiert die Neuordnung auf einer Reduktion der Anzahl der Betriebsstandorte sowie auf einer Aufteilung in Versorgungs- und Forschungscluster. Mit dieser Neuordnung wird der Bedeutung der Ebene 3 des HPC-Leistungsstufenmodells als Einstiegsebene für *Computational Science and Engineering* sowie als „HPC Enabler“ Rechnung getragen: der zu erwartende Leistungsanstieg auf den Ebenen 1 und 2 erfordert einen Anstieg der Leistungsfähigkeit auch auf Ebene 3 bei gleichzeitigem Angebot eines einfachen Zugangs und einer Anwendungsdomänen-bezogenen Unterstützung der Nutzer. Der notwendige Leistungszuwachs – bezogen nicht nur auf die Breite, die Zugangsmöglichkeiten, die Anwendungsunterstützung und die Methodenentwicklung – in Verbindung mit dem notwendigen ökonomischen Mitteleinsatz sowie dem notwendigen Energie-effizienten Betrieb führen zu dem in diesem Antrag dargestellten Umsetzungskonzept.

Das Land Baden-Württemberg sieht neben der unmittelbaren Unterstützung der Wissenschaft im Bereich der Computational Science auch den Know-how-Transfer und die Kooperation mit der heimischen Wirtschaft als wesentliche Aspekte einer HPC-Strategie. Für die engere Verzahnung von Forschung und Wirtschaft wurden daher *Solution Centers* aufgesetzt, die in Kooperation von Wirtschaftsunternehmen und Forschungseinrichtungen spezielle Themen der Simulation bearbeiten. Derzeit existieren dazu das Automotive Simulation Center (ASCS) in Stuttgart sowie das Energy Solution Center (EnSoC) in Karlsruhe. Weitere spezifische Zentren in Ulm und Heidelberg sind in der Realisierungsphase. Die Koordinierung dieser *Solution Centers* wird durch die HVV GmbH erfolgen, die gleichzeitig die Aufgabe übernimmt, Unternehmen des Mittelstandes an die Simulation heranzuführen. Die Nutzung der Rechnerressourcen durch die Industrie wird über die 1995 gegründete Public-Private-Partnership HWW GmbH (Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft GmbH) realisiert.

Ebenen 0 und 1: Höchstleistungsrechnen mit HERMIT

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung

Mit dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) befindet sich eines der drei deutschen Bundeshöchstleistungsrechenzentren im Land Baden-Württemberg. Das HLRS ist Mitglied im Gauss Center for Supercomputing (GCS). Gemeinsam mit den Zentren in Jülich (JSC) und Garching (LRZ) deckt das HLRS die europäische Ebene (Tier 0) der Leistungspyramide ab. Gleichzeitig versorgt das HLRS die Bundesrepublik mit einem Tier 1-System.

Die Abstimmung der Versorgungskonzepte und Rechnerarchitekturen erfolgt auf Bundesebene zwischen den drei Zentren des GCS. Die zeitliche Abstimmung sieht die Installation eines Tier 0/1-Systems in jedem Jahr vor. Das HLRS hat daher sein System 2011 installiert. Inhaltlich übernimmt das HLRS im Rahmen des GCS die schwerpunktmäßige Versorgung der ingenieurwissenschaftlichen Communities. Dies reicht vom Automotive Engineering über das Biomechanical Engineering bis zur Energietechnik. Aus der inhaltlichen Ausrichtung ergibt sich ein klares Anforderungsprofil für das Rechnersystem. Im Vordergrund stehen schnelle Speicheranbindung sowie hybride Architekturansätze für gekoppelte Simulationen.

Finanzierung

Die Finanzierung der Tier 0- und Tier 1-Ebene erfolgt über ein Projekt, das gemeinsam vom Bund und den drei Sitzländern der Bundeshöchstleistungsrechenzentren finanziert wird. Im Rahmen des PetaGCS-Projekts werden Beschaffungsmittel sowie Mittel für den Betrieb der Rechner in einem Schlüssel von 50% Bund und 50% Land bereitgestellt.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe

Die Vergabe von Nutzungsrechten erfolgt im europäischen Kontext durch das europäische Konsortium PRACE AISBL (Partnership for Advanced Computing in Europe). PRACE hat dazu ein Scientific Council eingerichtet, dem Wissenschaftler aus ganz Europa angehören. In Deutschland erfolgt die Vergabe von Nutzungsrechten durch die Lenkungsausschüsse der Mitgliedszentren von GCS. Projekte, die mehr als 5% der Maschine benötigen, werden von einem gemeinsamen Ausschuss begutachtet. Projekte mit einem geringeren Bedarf werden direkt vom Lenkungsausschuss des HLRS begutachtet. Dieser Lenkungsausschuss ist gleichzeitig verantwortlich für das Tier 2-System des Landes Baden-Württemberg und stellt damit eine weitere organisatorische und wissenschaftliche Klammer dar. Gleichzeitig ist damit für die Benutzer ein einfacher Übergang zwischen Tier 2 und Tier 1 gewährleistet.

Technische Auslegung

Das Cray XE6-System basiert auf dem AMD Interlagos-Prozessor. Jeder Prozessor verfügt über 16 Prozessorkerne. Durch den zusätzlichen Einsatz von Graphikkarten können spezielle Anwendungen optimal abgearbeitet werden. Die insgesamt 3552 Knoten mit 7104 Prozessoren werden durch einen von Cray entwickelten Gemini Interconnect verbunden. Bei einem Hauptspeicher von rund 120 TB verfügt das System über eine Plattenkapazität von 2,7 PB. Die Daten sind durch ein entsprechend ausgelegtes HSM-System abgesichert.

Ebene 2: Der Forschungshochleistungsrechner ForHLR

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung

Der geplante Forschungshochleistungsrechner (ForHLR) mit Standort KIT soll es den Forschungsbereichen Umwelt, Energie, Nanostrukturen und -technologien sowie den Materialwissenschaften ermöglichen, komplexe Anwendungsprobleme in neuen Größenordnungen zu bearbeiten. Die wissenschaftliche Zielstellung liegt in einem vertieften Verständnis bei ausgewählten Fragestellungen aus den genannten Bereichen sowie in methodischen Fortschritten bei der Simulation und Visualisierung komplexer Systeme, die durch Verknüpfung unterschiedlicher physikalischer Modelle bzw. durch die Betrachtung der Systeme und Modelle auf verschiedenen Skalen entstehen.

Die die genannten Forschungsbereiche ergänzende etablierte Methodenforschung am KIT mit dem Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL), den Simulation Laboratories (SimLabs) für die Bereiche Klima und Umwelt, Energie und Nano-/Mikrostrukturen sowie den sich im Aufbau befindlichen Data Life Cycle Labs (DLCL) wird eine optimale Unterstützung der Anwendungswissenschaften für den effektiven und effizienten Einsatz des Systems bieten.

Beantragungsverfahren

Das ForHLR-System wird zusammen mit einer zugehörigen Visualisierungskomponente und einem Forschungsbau über die Förderung von Forschungsbauten und Großgeräten nach Art. 91 b Abs. 1 GG beantragt.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe

Die Nutzung des ForHLR-Systems unterliegt der Kontrolle des mit dem HLRS gemeinsamen wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (HLRS-Lenkungsausschuss), dem herausragende Wissenschaftler der genannten Forschungsbereiche angehören. Absprachen im nationalen Maßstab erfolgen durch die Mitwirkung in der Gauß-Allianz.

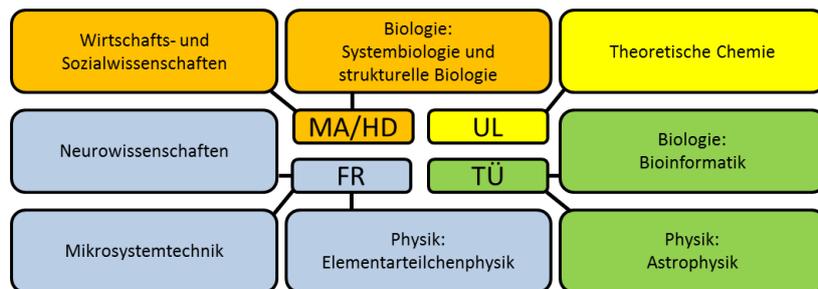
Technische Auslegung

Als Ebene-2-System ist der beantragte Rechner weder für extrem skalierende Anwendungen (>10000 Tasks) ausgelegt – hierfür sind die nationalen Höchstleistungsrechner vorgesehen – noch für Anwendungen aus dem schwächer parallelisierten Bereich – hierfür sind die Forschungscluster bwForCluster und das Versorgungssystem bwUniCluster auf Ebene 3 vorgesehen. Aus heutiger Sicht wird das System neben „klassischen“ HPC-Knoten auch SMP-Knoten mit mindestens vier Sockeln und entsprechend großem Hauptspeicher enthalten. Die abgeschätzten Anwendungsanforderungen summieren sich auf einen Bedarf von insgesamt etwa 100.000 Kernen mit einer Peak Performance von ca. 950 Teraflops, die zum Beschaffungszeitpunkt mit den beantragten Mitteln zu realisieren sein sollten. Um einen weiten Bereich von Anwendungen abzudecken, wird Standardtechnologie eingesetzt werden: Prozessoren der x86-64-Architektur, InfiniBand als internes Netz, sowie ein POSIX-kompatibles paralleles Dateisystem. Weiter wird mit der Ausrichtung auf datenintensives Rechnen neben einem hochperformanten parallelen Dateisystem besonderer Wert auf eine schnelle Anbindung und eine einfache Integration und Nutzung von groß-skaligen Forschungsdaten aus system-externen Datenquellen, etwa der Large Scale Data Facility (bwLSDF) am KIT, gelegt.

Ebene 3: Die Forschungs-Cluster (bwForCluster) und das HPC-Versorgungssystem (bwUniCluster)

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung

An den vier Standorten Freiburg, Mannheim/Heidelberg, Tübingen und Ulm werden Forschungsrechencluster (bwForCluster) errichtet, die jeweils von spezifischen Fach- und Forschungsdisziplinen *landesweit* für eine Forschungsprogrammatur genutzt werden. Die Zuordnung ist in der nachfolgenden Abbildung skizziert.



Die Zuordnungen folgen entsprechend der Wissenschaftsrat-Empfehlungen [1] dem Kriterium der an einem Standort vorliegenden anwendungs- und methodenwissenschaftlichen Kompetenz, der damit einhergehenden Anwenderbetreuung sowie Forschung und Lehre. Die nachstehende Tabelle stellt übersichtsartig die Fachkompetenzen der Standorte hinsichtlich der zugeordneten Forschungsdisziplinen und Anwendungsschwerpunkte der bwForCluster dar.

Anwendungsschwerpunkte Heidelberg/Mannheim	Anwendungsschwerpunkte Ulm
Lebenswissenschaften Wissenschaftliches Rechnen Volkswirtschaftslehre, Ökonometrie Betriebswirtschaftslehre, Banking, Finance and Insurance Sozialwissenschaften und Informatik, Wissensnetzwerke und Informationsextraktion	Theoretische Chemie und Biochemie Molekularmechanik im Chemiekontext Heterogene und Elektro-Katalyse Chemische Energiespeicherung und -wandlung
Anwendungsschwerpunkte Freiburg	Anwendungsschwerpunkte Tübingen
Simulation von Fluid- & Gasdynamik Modellierung neuronaler Netzwerke/Gehirnaktivitäten Datenanalyse phys. Messungen neuronaler Aktivität Modellierung von Gehirnerkrankungen Brain-Machine-Interfacing/Neuroprothesen Hochdimensionale Integration	Heiße Sterne (Hochenergieastrophysik) Planetenentstehung, Akkretion und Jets Neutronensterne und Gravitationswellen Next generation sequencing für personalisierte Medizin Drug design, high-throughput screening Machine learning in der Bioinformatik

Der vom Wissenschaftsrat hervorgehobenen Bedeutung des wissenschaftlichen Rechnens einerseits und den dort ausgesprochenen Empfehlungen zur Zusammenarbeit von Wissenschaftlern aus dieser Disziplin und den Anwendungsdisziplinen andererseits wird durch eine breite Vertretung des wissenschaftlichen Rechnens an den Standorten in Baden-Württemberg Ausdruck verliehen. In besonderer Weise tragen das Interdisziplinäre Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg (IWR), das Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL) in Karlsruhe, der Exzellenzcluster „Simulation Technology“ in Stuttgart aber auch andere Standorte in Form gebündelter Kompetenz dazu bei, womit in Baden-Württemberg die Methodenentwicklung im wissenschaftlichen Rechnen unterstützt und umgesetzt wird.

Für die Unterstützung der nicht durch die oben stehenden Forschungsprogrammaturen erfassten Wissenschaftler in Baden-Württemberg sowie zur Bereitstellung von einfach zugänglichen HPC-Ressourcen für gering parallelisierte Anwendungen, z.B. für den Einsatz in der Lehre,

wird das HPC-Versorgungssystem namens bwUniCluster am Standort KIT errichtet. Das bwUniCluster-System ersetzt bzw. ergänzt Universitäts-lokale HPC-Ressourcen. Somit können bislang typischerweise lokal gehaltenen HPC-Ressourcen der Ebene 3 zentralisiert werden. Eine Grundvoraussetzung hierfür ist der einfache Zugang der entfernten Ressource aus dem Benutzer-lokalen Kontext, der durch die Fortschritte des föderativen Identitätsmanagements gegeben ist.

Beantragungsverfahren und Finanzierung

Die vier Forschungscluster (bwForCluster) werden in vier separaten Anträgen im Förderprogramm Forschungsgroßgeräte nach Artikel 91b GG beantragt. Die Beantragungen erfolgen zeitversetzt (siehe Zusammenfassung und zeitliche Planung). Für die Förderphase 2013 sind die Anträge für die bwForCluster in Heidelberg/Mannheim und Ulm vorgesehen, für die Förderphase 2014 die Anträge der bwForCluster in Freiburg und Tübingen.

Das Versorgungs-HPC-System bwUniCluster wird hälftig aus Mitteln der neun Landesuniversitäten und Mitteln des Landes finanziert und im Programm Großgeräte der Länder nach Artikel 143c GG beantragt. Eine Antragstellung erfolgt in 2012, die Inbetriebnahme ist für Anfang 2013 vorgesehen.

Die Anforderung einer sehr weitreichenden Homogenität der Cluster über die Standorte hinweg wird zugunsten der zeitversetzten Beschaffungen sowie zur fachspezifischen Auslegung des jeweiligen Forschungs-Clusters zum Teil aufgegeben. Zur Wahrung einer Mindestkompatibilität wird jede Ausschreibung und Beschaffung im ALWR-BW abgestimmt.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe

Die Nutzung der vier bwForCluster erfolgt jeweils landesweit für die entsprechenden „scientific communities“ der benannten Forschungsthemen. Die Nutzungsberechtigungen werden durch Attribute von dem jeweiligen Heimatstandort mitgeteilt. Die Nutzungsanteile an dem Versorgungssystem bwUniCluster orientieren sich an den Finanzierungsanteilen der verschiedenen Standorte an dem bwUniCluster-System.

Die Steuerungsaufgaben für den Betrieb, den Support und ggf. für Priorisierungsentscheidungen im Falle einer Mangelbewirtschaftung sind wie folgt vereinbart. Entscheidungen für die Fortentwicklung von Betrieb und Support in Zusammenhang mit dem bwUniCluster-System sowie mit den bwForClustern werden vom ALWR-BW gefällt. Hierbei hat die Stimme jedes Standorts gleiches Gewicht. Die Nutzerunterstützung wird föderativ erbracht, wobei der „Operations Support“ hauptverantwortlich durch den jeweiligen Betriebsstandort erbracht wird und der „User Support“ immer auch an jedem Nutzerstandort lokal ansprechbar ist. Die Aussteuerung der Nutzung unter den bereits genannten Festlegungen obliegt einem landesweiten Nutzerausschuss, in den die Prorektoren/Vizepräsidenten für Forschung pro Standort ein Mitglied entsenden.

Auch an der Investition nicht beteiligte Hochschulen des Landes können – soweit Kapazität vorhanden ist – gegen Kostenersatz das bwUniCluster-System nutzen. Das MWK beabsichtigt hierzu ebenfalls eine Förderung. Für Industriekooperationen steht das bwUniCluster-System grundsätzlich zur Verfügung. Die HWW GmbH und die HVV GmbH übernehmen hierbei Betriebs- und Koordinationsaufgaben.

Die Betriebskosten für das bwUniCluster-System werden auf die Anteilseigner entsprechend der Anteilssätze umgelegt. Das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg beabsichtigt, die föderative Nutzerunterstützung und -gewinnung durch ein Begleitprojekt zu fördern.

Technische Auslegung und Softwarebereitstellung

Die vier ForCluster sowie das bwUniCluster-System setzen grundsätzlich auf Standardarchitekturen, insbesondere auch wegen des verbreiteten Einsatzes von ISV-Codes. Ein konservatives „Minimal-Setup“ aus heutiger Sicht umfasst pro Knoten mindestens eine Ausstattung von 2 x86-64-kompatiblen CPUs, 12 Prozessorkernen, 48 GB Hauptspeicher, 1 Gigabit Ethernet sowie 250 GB lokaler Plattenplatz (SAS oder SATA).

Systemnahe Software wird im üblichen Umfang mit den Systemen beschafft. Für weit verbreitete Anwendungssoftware stellt das MWK anteilige Mittel für Landeslizenzen bzw. Standort-unabhängige Lizenzen in Aussicht. Erste Erfolge bei der Vereinbarung von Lizenzen für Standort-unabhängige Nutzung konnten bereits erzielt werden. Lizenzen von Anwendungssoftware, die nicht in die vorgenannten Klassen fallen, werden vom Nutzer bzw. Nutzerstandort eingebracht und selbst verwaltet. Das Identitäts- und Zugriffsmanagement erhält grundsätzlich ein Attribut zur Ausweisung des Nutzerstandorts. Somit kann ein entsprechend verteiltes Lizenzmanagement erfolgen.

Zusammenfassung und zeitliche Planung

Das vorgelegte Umsetzungskonzept der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für das Hochleistungsrechnen führt zu einem durchlässigen HPC-Ökosystem in Baden-Württemberg mit unterschiedlichen Leistungsklassen und wohldifferenzierten Kompetenzzentren, die der weiter ansteigenden Bedeutung von *Computational Science and Engineering* Rechnung tragen. Die unterschiedlichen Leistungsklassen der HPC-Systeme werden im Jahr 2015 etwa von 200 Teraflops der einzelnen bwForCluster und des bwUniClusters über ein Petaflops des ForHLR-Systems bis zu etwa 5 Petaflops des Hermit-Systems reichen. Für jeden Wissenschaftsbereich stehen mit diesem Konzept HPC-Ressourcen zur Verfügung: auf der Ebene 3 decken die vier bwForCluster mit ihren thematischen Schwerpunkten sowie das Universal-Cluster bwUniCluster das gesamte Spektrum ab, auf den Ebenen 1 und 2 kann über den gemeinsamen HLRS-Lenkungsausschuss die Ressourcennutzung beantragt werden. Die zeitliche Abfolge der Beschaffungen der Ebenen 2 und 3 stellt sich wie folgt dar, wobei als Jahr der Zeitpunkt der Finanzwirksamkeit der Maßnahmen angegeben wird: bwUniCluster (2012), bwForCluster an den Standorten Heidelberg/Mannheim und Ulm (2013), ForHLR Phase 1 (2013), bwForCluster an den Standorten Freiburg und Tübingen (2014), ForHLR Phase 2 (2014).

Hinsichtlich des bwUniCluster-Systems wird angestrebt, bei Bedarf im Jahr 2015 einen Ausbau des Systems vorzunehmen. Mit dieser Ausnahme sind weitere Beschaffungen für zentral vorgehaltene HPC-Ressourcen der Tier 3-Ebene über die in diesem Konzept dargestellten vier bwForCluster hinaus seitens Land und Universitäten bis einschließlich 2016 nicht vorgesehen.

Referenzen

- [1] Wissenschaftsrat, Positionspapier „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“, Drs. 1838-12, Januar 2012
- [2] Wissenschaftsrat, Hintergrundinformation zu Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland, Januar 2012
- [3] Bundesministerium für Bildung und Forschung, „Die Säulen des Supercomputing – Höchstleistungsrechnen gibt Antworten auf schwierigste Fragen unserer Zeit“, 2011
- [4] Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, Pressemitteilung „236 Millionen Euro für Ausbau der Höchstleistungsrechnerinfrastrukturen – Kabinett beschließt Ausbauplanung bis 2016“, 15. Juni 2010
- [5] Höchstleistungsrechner und Verteilte Systeme Verbund GmbH, <http://www.hvv-bw.de/>
- [6] Arbeitskreis der Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren von Baden-Württemberg (ALWR-BW), Strategiepapier „IT an den Universitäten Baden-Württembergs“, August 2010
- [7] Übersicht zu bwGRiD und den laufenden Landesprojekten unter <http://www.bw-grid.de/bwservices/>
- [8] Deutsche Forschungsgemeinschaft, Kommission für IT-Infrastruktur (KfR), „Informationsverarbeitung an Hochschulen – Organisation, Dienste und Systeme – Empfehlungen der Kommission für IT-Infrastruktur für 2011-2015“, 2010, insbesondere Seiten 39-41