

Drs. 4488-15  
Stuttgart 24 04 2015

---

---

# Empfehlungen zur Finanzierung des Nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland



## INHALT

---

<b>Vorbemerkung</b>	<b>5</b>
<b>Kurzfassung</b>	<b>7</b>
<b>A. Ausgangslage</b>	<b>8</b>
<b>A.I Forschungsinfrastrukturen</b>	<b>8</b>
<b>A.II Die HPC-Pyramide</b>	<b>9</b>
<b>A.III Empfehlungslage des Wissenschaftsrates</b>	<b>11</b>
<b>A.IV Herausforderungen</b>	<b>13</b>
IV.1 Wissenschaftliche Herausforderungen	13
IV.2 Technische Herausforderungen	14
IV.3 Organisatorische Herausforderungen	15
IV.4 Kostenwirksame Herausforderungen	15
<b>A.V Strukturen des HPC in Deutschland</b>	<b>17</b>
V.1 Übersicht über HPC in Deutschland	17
V.2 Strukturen der Ebene 1	18
V.3 Strukturen der Ebene 2	19
V.4 Strukturen der Ebene 3	21
V.5 Kooperationsstrukturen und Koordinationsmechanismen	21
<b>A.VI Finanzierung des HPC</b>	<b>23</b>
VI.1 Ebene 1	23
VI.2 Ebene 2	23
VI.3 Ebene 3	24
<b>B. Empfehlungen</b>	<b>25</b>
<b>B.I NHR: Nationales Hoch- und Höchstleistungsrechnen als Forschungsinfrastruktur</b>	<b>26</b>
I.1 Anforderungen an das NHR	26
I.2 Mehrwert des NHR	27
<b>B.II Aufgaben von NHR-Zentren</b>	<b>29</b>
<b>B.III Einrichtung des NHR</b>	<b>31</b>
III.1 Verfahren zur Einrichtung des NHR	32
III.2 Im NHR abzudeckende Kompetenzfelder	33
<b>B.IV Governance</b>	<b>34</b>
IV.1 Strategieausschuss	35
IV.2 Lenkungsausschuss der NHR-Zentren	35
IV.3 Nutzungsausschuss und Auswahlausschüsse der NHR-Zentren	36
IV.4 Geschäftsstelle	36
<b>B.V Qualitätssicherung</b>	<b>36</b>
<b>B.VI Finanzierung</b>	<b>37</b>
VI.1 Allgemeine Desiderate	38

VI.2 Finanzierung der Ebene 1	39
VI.3 Schaffung einer Finanzierungsgrundlage	39
<b>B.VII Alternative Organisationsmodelle zum NHR</b>	<b>40</b>
VII.1 Beibehaltung des Status Quo	40
VII.2 Verlagerung der Ebene 2 in die Ebene 1	40
VII.3 Verlagerung der Ebene 2 in die Ebene 3	41
<b>B.VIII Weitere Empfehlungen</b>	<b>41</b>
<b>Anhang</b>	<b>43</b>
Alternative Finanzierungsmodelle	44
Finanzierung über Gebühren	44
Integration in die Nationale Roadmap für Forschungsinfrastrukturen	44
Überblick über Hochleistungsrechenzentren in Deutschland (Mitgliedschaft in der Gauß-Allianz)	46
Abkürzungsverzeichnis	51
Glossar	53
Abbildungsverzeichnis	54
Tabellenverzeichnis	55

---

# Vorbemerkung

Im Jahr 2012 hat der Wissenschaftsrat in einem Positionspapier Wege zur „Strategischen Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ vorgezeichnet. |<sup>1</sup> Dieses Positionspapier nimmt Empfehlungen des Wissenschaftsrates von 1995 auf |<sup>2</sup> und identifiziert das Hoch- und Höchstleistungsrechnen als unverzichtbar für die Wettbewerbsfähigkeit Deutschlands in zahlreichen Wissenschaftsfeldern. 2012 stuft der Wissenschaftsrat die gegenwärtige Struktur der Förderung und Weiterentwicklung der Forschungsinfrastruktur im Bereich des Hoch- und Höchstleistungsrechnens als nicht ausreichend ein; dieser Aspekt steht daher im Mittelpunkt der vorliegenden Empfehlungen.

Hoch- und Höchstleistungsrechnen, zusammenfassend als *High Performance Computing* (HPC) bezeichnet, ist entsprechend der Komplexität der zu behandelnden Problemstellungen und der Leistungsfähigkeit von Rechnern in mehreren Ebenen strukturiert. Deutschland verfügt im Bereich des Höchstleistungsrechnens, der Ebene 1 der sog. HPC-Pyramide, über eine international hochgradig konkurrenzfähige und gut koordinierte Infrastruktur, die im *Gauss Centre for Supercomputing* (GCS) organisiert ist. Im Bereich des Hochleistungsrechnens, der Ebene 2 der HPC-Pyramide, ist eine vergleichbar leistungsfähige Infrastruktur für ganz Deutschland noch nicht entstanden. Auch auf dieser Ebene gibt es aber eine stark wachsende Nachfrage nach Rechenkapazität und gleichzeitig einen steigenden Kostendruck, insbesondere durch die wachsenden Energiekosten.

HPC steht in Deutschland somit vor einer Reihe von Herausforderungen, auf die mit adäquaten und langfristigen Finanzierungsstrategien reagiert werden muss. Ziel des Wissenschaftsrates ist es, mit den vorliegenden Empfehlungen die Grundlage für eine langfristig stabile und kosteneffiziente Weiterentwicklung und Finanzierung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens zu legen.

|<sup>1</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland. Positionspapier, Berlin Januar 2012 (Drs. 1838-12).

|<sup>2</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995, S. 51-70.

6 Zur Vorbereitung dieser Empfehlungen hat der Wissenschaftsrat eine Arbeitsgruppe eingesetzt. In ihr haben auch Sachverständige mitgewirkt, die nicht Mitglieder des Wissenschaftsrates sind. Ihnen weiß sich der Wissenschaftsrat zu besonderem Dank verpflichtet. Ebenso dankt der Wissenschaftsrat weiteren Sachverständigen, die den Beratungsprozess im Rahmen von Anhörungen und Gesprächen konstruktiv unterstützt haben, sowie den zahlreichen Institutionen, die an seiner schriftlichen Befragung zur Vorbereitung dieser Empfehlungen teilgenommen haben.

Der Wissenschaftsrat hat die vorliegenden Empfehlungen am 24. April 2015 in Stuttgart verabschiedet.

---

# Kurzfassung

In diesen Empfehlungen folgt der Wissenschaftsrat der bereits 2012 in seinem Positionspapier zur „Strategischen Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ erkannten Notwendigkeit, die Finanzierung, inhaltliche Weiterentwicklung und nationale Koordination der Infrastruktur im Bereich des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland auf eine neue, langfristige Basis zu stellen.

Im Zentrum steht das Ziel, die Zentren der Ebene 1 und der Ebene 2 in einer gemeinsamen Koordinationsstruktur, dem Nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechen (NHR), zusammenzufassen. Dabei bleiben die unterschiedlichen Leistungsprofile der Ebenen erhalten, die Koordination in Beschaffung und methodisch-inhaltlicher Ausrichtung wird aber vereinfacht, wodurch eine effizientere Verwendung der Mittel möglich wird. Die Zentren sollen im Rahmen ihres Budgets selbst darüber entscheiden können, wie sie in Hardwarebeschaffung, Energieeffizienz, Softwarepflege sowie Methodenkompetenz ihres Personals investieren.

Um die hierfür zentrale Planungssicherheit über einen Zeitraum von ca. zehn Jahren einerseits und die notwendigen Strukturen zur Steuerung, Koordination vor allem aber auch für Evaluation andererseits zu schaffen, empfiehlt der Wissenschaftsrat Bund und Ländern, ein Verwaltungsabkommen abzuschließen, das diese Rahmenbedingungen ermöglicht. Finanzielle und strategische Weichenstellungen für das NHR soll anschließend ein mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern sowie mit Vertreterinnen und Vertretern des Bundes und der Länder besetzter Strategieausschuss vorbereiten und der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz (GWK) zur Entscheidung vorlegen.

Hinsichtlich der Finanzierung der Ebene 1 schlägt der Wissenschaftsrat vor, diese bis zu einer späteren Einbindung auch in die Finanzierungsstrukturen des NHR über 2017 hinaus im bisherigen Umfang weiter zu fördern.

Insgesamt ist es Ziel der vorgeschlagenen Anpassungen, den Anwenderinnen und Anwendern des Hoch- und Höchstleistungsrechnens möglichst einfach Zugang zu den jeweils passenden Rechenressourcen zu ermöglichen und sie bei deren Auswahl sowie der Entwicklung und der Optimierung von Algorithmen und Software zu unterstützen. Der Wissenschaftsrat spricht sich in diesem Zusammenhang nachdrücklich dafür aus, alle Zentren des NHR – nicht nur jene der Ebene 1 – im Endausbau für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus ganz Deutschland, d. h. über die Trägerländer hinaus, zu öffnen.

---

# A. Ausgangslage

## A.1 FORSCHUNGSINFRASTRUKTUREN

---

In seinen „Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems“ hat der Wissenschaftsrat Infrastrukturleistungen als eine von vier Dimensionen wissenschaftlicher Leistung identifiziert (neben Forschung, Lehre und Transfer). Diese Infrastrukturleistungen sollten noch öfter als bislang von wissenschaftlichen Dienstleistungszentren und Forschungsinfrastrukturen erbracht werden, die von mehreren Hochschulen oder Wissenschaftseinrichtungen gemeinsam getragen werden. |<sup>3</sup>

Neben ihrer einrichtungsübergreifenden Funktion sind Forschungsinfrastrukturen auch dadurch gekennzeichnet, dass sie über die Investitionsphase hinaus über ihren gesamten Lebenszyklus für den Betrieb erhebliche Ressourcen erfordern. Zentral ist darüber hinaus, dass Forschungsinfrastrukturen strukturbildende oder strukturverändernde Wirkung entfalten können. Sie unterstützen z. B. eine Profilierung von Forschung und Lehre an ihren Standorten sowie die Ausdifferenzierung von Disziplinen. |<sup>4</sup> Sie fördern häufig aber auch interdisziplinäre Zusammenarbeit sowie Kooperationen zwischen Institutionen und wirken so einer Versäulung innerhalb des Wissenschaftssystems entgegen. |<sup>5</sup>

Gemäß der Definition des *European Strategy Forum on Research Infrastructures* stellen Hoch- und Höchstleistungsrechner Forschungsinfrastrukturen dar. |<sup>6</sup> Der Wissenschaftsrat teilt diese Sicht und verweist darauf, dass Hoch- und Höchstleistungsrechner (im Folgenden summarisch als *High Performance Computing* – HPC bezeichnet) für eine immer größer werdende Zahl von Forschungsfeldern

|<sup>3</sup> Wissenschaftsrat: Perspektiven des deutschen Wissenschaftssystems, Braunschweig 12.07.2013 (Drs. 3228-13), S. 92.

|<sup>4</sup> Beispielsweise setzte die Entstehung quantitativ arbeitender Disziplinen oder Subdisziplinen wie etwa der Epidemiologie oder der quantitativen Sozial- und Wirtschaftsforschung die Einrichtung von und den Zugang zu Datensammlungen voraus. Auch die Genese vieler experimenteller Fächer wie z. B. der Chemie und zahlreicher Technikwissenschaften ist eng an die stetige Weiterentwicklung von Forschungsinfrastrukturen und die mit ihrer Hilfe gewonnenen, gespeicherten und bearbeiteten Daten gekoppelt. Vgl. Wissenschaftsrat. Empfehlungen zur Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Informationsinfrastrukturen in Deutschland bis 2020, Berlin 13.07.2012 (Drs. 2359-12), S. 19.

|<sup>5</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen zu Forschungsinfrastrukturen, Köln 2011, S. 19.

|<sup>6</sup> Vgl. *European Strategy Forum on Research Infrastructures: European Roadmap for research infrastructures*. Report, Luxembourg 2006, S. 16.



in immer mehr Disziplinen an Bedeutung gewinnt. |<sup>7</sup> Durch die zunehmende Nachfrage nach HPC-Ressourcen bislang HPC-ferner Fächer und der gleichzeitig steigenden Komplexität der Anwendungen muss auch die Vermittlung von Methodenkompetenz durch die Zentren als relevante Aufgabe aufgefasst und damit eine umfassendere Sicht auf HPC eingenommen werden, die über die bisherige Betrachtung von Hardwareinvestitionen hinausgeht. Bewusst befassten sich diese Empfehlungen daher mit dem Hoch- und Höchstleistungsrechnen – im Sinne des durch Methodenkompetenz unterstützten Einsatzes der Hardware – als nationale Forschungsinfrastruktur.

## A.II DIE HPC-PYRAMIDE

---

Zumeist ist das Angebot im *High Performance Computing* (HPC) international wie auch in Deutschland als mehrstufige Hierarchie organisiert, der sog. HPC-Pyramide. |<sup>8</sup> Mit diesem Bild soll dargestellt werden, dass eine kleine Anzahl an Rechensystemen der obersten Leistungsklassen auf einer breiteren Basis von Rechensystemen der mittleren und unteren Leistungsklassen fußt.

Das Aufgabenspektrum des HPC umfasst vor allem die Bereiche *Capability Computing*, d. h. einzelne Rechenaufgaben (inkl. komplexer Simulationen), die besonders viele Prozessoren und Speicher benötigen und auch entsprechend skalieren, und *Capacity Computing*, d. h. das Lösen von Problemen, die man in viele parallele Rechenaufgaben mittlerer Komplexität (z. B. viele Simulationsläufe oder Parameterstudien) aufteilt, so dass sie zusammen genommen einen sehr hohen Rechenbedarf haben. Darüber hinaus spielen *Capability Test Computing* und *Real-Time Computing* (z. B. Echtzeit-Visualisierungen komplexer Simulationen) eine Rolle, sie sind quantitativ allerdings (noch) nachgeordnet. *Capability Test Computing* bezeichnet das systematische Testen und Optimieren komplexer Simulationsprogramme, v. a. hinsichtlich der Skalierbarkeit, bevor lange Rechnungen auf vielen Prozessoren der höchsten Leistungsklasse gestartet werden. Ein aktueller Trend ist der rasch zunehmende Einsatz von *Data Analytics*, dem Erkenntnisgewinn aus gemessenen oder anderweitig gewonnenen Daten. Die analytischen Aufgaben sind oft eng mit Experimenten oder Simulationen verzahnt, sind sehr rechenintensiv und erfordern eine leistungsfähige Verwaltung sehr großer Datenmengen.

In Deutschland ist die HPC-Pyramide dreistufig aufgebaut:

\_ Die Ebene 1 (engl. *Tier 1*) besteht aus Rechnern der höchsten Leistungsklasse, die notwendig sind, um die anspruchsvollsten Anwendungsaufgaben für *Cap-*

|<sup>7</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland. Positionspapier, Berlin Januar 2012 (Drs. 1838-12); zu Simulationswissenschaften als einem Anwendungsfeld vgl. Wissenschaftsrat: Positionspapier zu Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft, Dresden 11.07.2014 (Drs. 4032-14).

|<sup>8</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland. Positionspapier, Berlin Januar 2012 (Drs. 1838-12).

*ability Computing* lösen zu können. Rechner der Ebene 1 werden aber auch für *Capacity Computing* genutzt, wenn sehr viele Prozessoren benötigt werden. In Deutschland gibt es derzeit drei Zentren, die Systeme der Ebene 1 betreiben: das *Jülich Supercomputing Centre* (JSC), das Leibniz Rechenzentrum (LRZ) in München und das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), die sich zum *Gauss Center for Supercomputing* (GCS) zusammengeschlossen haben.

– Die Ebene 2 (engl. *Tier 2*) besteht aus Rechnern, die vorrangig dem *Capacity Computing* dienen und deren Rechenleistung ausreichend für hochkomplexe Anwendungsprobleme ist, die auf einem Rechner der typischen Leistungsklasse an Universitäten zumeist nicht zu lösen wären. Rechensysteme dieser Ebene werden auch für *Capability Computing* einfacher bis mittlerer Kapazität, vorrangig aber für *Capability Test Computing* eingesetzt. Sie dienen somit auch zur Vorbereitung auf umfassende Rechnungen auf einem System der Ebene 1. Insgesamt 15 HPC-Systeme der Ebene 2 sind in Deutschland in der Gauß-Allianz (GA) organisatorisch zusammengefasst. Einige dieser Systeme werden von außeruniversitären Forschungseinrichtungen betrieben.

– Die Ebene 3 (engl. *Tier 3*) besteht aus Rechnern für *Capacity Computing*, die in ihrer Leistungsfähigkeit auf das Gros der Rechenaufgaben im Wissenschaftsbereich ausgerichtet sind. Systeme der Ebene 3 stehen an den meisten Hochschulstandorten und darüber hinaus in vielen außeruniversitären Forschungseinrichtungen zur Verfügung und werden in der Regel von den Hochschulen selbst oder den lokalen Zentren betrieben.

Viele Anwendungsbereiche benötigen Rechenkapazität auf mehr als einer Ebene der HPC-Pyramide. So wird häufig die Vorbereitung und Entwicklung von Algorithmen und Software im Rahmen eines Projektes auf Rechnern einer niedrigen Leistungsklasse durchgeführt. In anderen Fällen bieten die niedrigeren Leistungsklassen bei einigen schlechter skalierbaren Algorithmen ein besseres Kosten-Leistungsverhältnis. Damit wird deutlich, dass die Durchlässigkeit zwischen den Ebenen wichtig ist, um z. B. Rechenmodelle, die sich auf Ebene 2 bewährt haben, mit höherer zeitlicher oder räumlicher Auflösung auf Ebene 1 hoch zu skalieren. Umgekehrt wird Software, die für bestimmte Aufgaben des *Capability Computing* entwickelt wird, später u. U. für viel breitere Anwendungsbereiche auch auf den unteren Ebenen genutzt. Mit den unterschiedlichen Anforderungen an die Rechenleistung gehen in zunehmendem Maße auch hohe Ansprüche an Lösungen zur Datenspeicherung und Datenanalyse einher, die heute untrennbarer Bestandteil aller HPC-Systeme sind.

Aus Anwendersicht ist es wichtig, möglichst einfach Zugang zu der jeweils passenden Ebene der HPC-Pyramide zu erhalten und bei deren Auswahl und der Entwicklung und Optimierung von Algorithmen und Software beraten zu werden. Daher sind vor allem die Zentren, die Rechner der Ebenen 1 und 2 betreiben, als Kompetenzzentren zu verstehen, deren Aufgaben weit über die eines traditionellen Rechenzentrums hinausgehen.

Aus Betreibersicht ergeben sich aus der Leistungsfähigkeit der Rechner und der Komplexität der Rechenaufgaben der jeweiligen Ebene besondere Anforder-

rungen, die den Betrieb der Rechensysteme betreffen: Systemadministration, Verwaltung der Rechenaufträge, Handhabung von Komponentenausfällen, Archivierungsaufgaben, Notstromversorgung usw. Die Komplexität und die Kosten des Betriebs steigen von Ebene zu Ebene an. Daher ist es für die Kosteneffizienz des Gesamtsystems wichtig, dass Anwendungen auf der optimal passenden Ebene gerechnet werden. Dies untermauert die Bedeutung der Koordination und Abstimmung zwischen den Kompetenzzentren der unterschiedlichen Ebenen.

Oberhalb der Ebene 1 gibt es zusätzliche eine Ebene 0 (engl. *Tier 0*): den europaweiten Verbund *Partnership for Advanced Computing in Europe* (PRACE). PRACE stellt allerdings ein rein virtuelles Organisationskonzept dar und sieht keine leistungsfähigeren oder dedizierten Rechner vor. Vielmehr stellen die Zentren des GCS, die in Deutschland die Ebene 1 bilden, Ressourcen im Rahmen von PRACE zur Verfügung. Das GCS stellt somit eine Schnittstelle zum europäischen Forschungsraum dar und gewährleistet die internationale Anschlussfähigkeit der nationalen HPC-Infrastruktur.

Den Schwerpunkt der vorliegenden Empfehlungen bildet die Betrachtung des Hochleistungsrechnens, das im Pyramidenmodell auf Ebene 2 angesiedelt ist. Im Unterschied zu Ebene 1 mit ihrem vergleichsweise hohen Organisationsgrad fehlen auf Ebene 2 noch Strukturen, mit denen die Kosteneffizienz der Beschaffung, des Betriebs und der Ressourcennutzung sowie eine übergreifende Abstimmung in der Weiterentwicklung von Kompetenzen sicher gestellt werden können. So erlaubt die derzeitige Finanzierung der an Universitäten angesiedelten Systeme über das Programm zur „gemeinsamen Förderung von Forschungsbauten an Hochschulen einschließlich Großgeräten“ von Bund und Ländern gemäß Art. 91b GG (Programm FuG, vgl. A.VI.2, S. 23) keine strategische Abstimmung und übergreifende Koordination im Sinne einer nationalen Infrastruktur.

### **A.III EMPFEHLUNGS-LAGE DES WISSENSCHAFTSRATES**

---

Bereits 1995 hat sich der Wissenschaftsrat grundlegend mit der Struktur und der Finanzierung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland befasst. |<sup>9</sup> Damals hat er unter anderem die Einrichtung von interdisziplinären „Kompetenznetzwerken“ (aktuelle Beispiele sind *Scientific Discovery through Advanced Computing* – SciDAC sowie *Extreme Science and Engineering Discovery Environment* – XSEDE) auch für Deutschland empfohlen. |<sup>10</sup> Diese stellen bis heute eine wesentliche Stärke der weltweit führenden U.S.-amerikanischen HPC-

|<sup>9</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Versorgung von Wissenschaft und Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zur Ausstattung der Wissenschaft mit moderner Rechner- und Kommunikationstechnologie, Köln 1995.

|<sup>10</sup> Wissenschaftsrat, a.a.O, S. 63.

Forschung dar. Aufbauend auf dieser grundlegenden Empfehlung hat sich der Wissenschaftsrat 2012 in einem Positionspapier zur strategischen Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland geäußert. Darin werden wesentliche Grundlagen für die vorliegenden Empfehlungen entwickelt. Die wichtigsten Bewertungen sind:

- \_ Im internationalen Wettbewerb verfügt Deutschland im HPC-Bereich über eine sehr gute Position vor allem auf dem Gebiet der methodischen Kompetenz. Da neben der zunehmenden Komplexität der Probleme bei den traditionellen HPC-Anwendungen sich auch zunehmend neue Anwendungsbereiche erschließen, wird der Bedarf an HPC-Kapazität weiter wachsen.
- \_ Die Organisation der HPC-Infrastruktur entlang der drei Ebenen der HPC-Pyramide hat sich in der Bedienung unterschiedlicher Anwendungsprofile bewährt und sollte beibehalten werden. Auf jeder Ebene ist eine gewisse Vielfalt an Rechnerarchitekturen und entsprechender Methodenkompetenz essentiell.
- \_ Das derzeitige System der Finanzierung für HPC-Ressourcen in Deutschland ist nicht optimal geeignet, um eine leistungsfähige und ausdifferenzierte Versorgung Forschender mit Rechenressourcen nachhaltig zu gewährleisten. Es bedarf eines langfristigen Finanzierungskonzeptes, das aus Sicht des Wissenschaftsrates mit der projektförmigen Finanzierung der Ebene 1-Zentren des GCS und der wettbewerblichen Förderung der Rechner der Ebene 2 derzeit nicht gegeben ist, u. a. da der Betrieb von Hoch- und Höchstleistungsrechnern technisches Know-how und Kompetenzen in der Anwenderberatung erfordert, deren Auf- und Ausbau langfristige Planungssicherheit voraussetzen.
- \_ Auf Ebene 1 gelingt die Koordination zwischen den drei Zentren bereits in besonderem Maße. Sie umfasst die Abstimmung von Beschaffungen, aber auch die Komplementarität der Methodenkompetenzen und die passgenaue Versorgung der Anwenderinnen und Anwender mit einheitlichem Zugang und Beratung.
- \_ Auf Ebene 2 sind hingegen Defizite im Bereich der Koordination festzustellen. Dies liegt aus Sicht des Wissenschaftsrates u. a. darin begründet, dass die hochschulischen Mitglieder der GA untereinander im Wettbewerb um Gelder aus dem Programm zur „gemeinsamen Förderung von Forschungsbauten an Hochschulen einschließlich Großgeräten“ gemäß Art. 91 b GG (Programm FuG) stehen.
- \_ Für Ebene 3, die breite Basis der Hochschul- und regionalen Rechenzentren, ist der derzeitige Mix aus einer Grundfinanzierung des jeweiligen Landes und Projekt- und DFG-Finanzierungen im nationalen Wettbewerb adäquat.
- \_ Für die nachhaltige Stärkung und den weiteren Ausbau der spezifischen deutschen und europäischen Stärken im Bereich der HPC-Methodik ist die Förderung mit öffentlichen Mitteln ein unerlässlicher Baustein. Beispiele für bestehende Förderprogramme sind die Schwerpunktprogramme für die För-

derung von Softwaremethoden für *Exascale-Computing* und *Algorithms for Big Data* der DFG sowie das Programm „Anwendungsorientierte HPC-Software für skalierbare Parallelrechner“ des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF). Diese Förderprogramme sind aufgrund ihrer Wichtigkeit zu begrüßen; die Methodenentwicklung für HPC sollte aber auch langfristig gefördert werden.

Ein neues Finanzierungsmodell muss gemäß der Bewertung des Wissenschaftsrates aus dem Jahr 2012 eine bedarfsgerechte Versorgung der Nutzerinnen und Nutzer mit HPC-Ressourcen sicherstellen und zudem den Aufbau untereinander koordinierter, interdisziplinärer Kompetenzzentren nachhaltig und langfristig fördern.

#### **A.IV HERAUSFORDERUNGEN**

---

HPC stellt als Infrastruktur spezifische Anforderungen, die sich von anderen Forschungsinfrastrukturen unterscheiden. Vor allem die vergleichsweise kurzen Reinvestitionszyklen von drei bis fünf Jahren stellen eine Besonderheit dar (vgl. IV.4, S. 16). Weiterhin lassen sich unterschiedliche Rechnerarchitekturen nur durch jeweils entsprechende Methodenkompetenz effizient nutzen. Aufgrund dieser Besonderheiten steht für den Wissenschaftsrat das Erfordernis, langfristige Planungssicherheit für das HPC zu gewährleisten, im Mittelpunkt dieser Empfehlungen. Damit sollen die für viele Anwendungen benötigten Infrastrukturleistungen der HPC-Zentren verlässlich und auf qualitativ beständig hohem Niveau zur Verfügung stehen.

##### IV.1 Wissenschaftliche Herausforderungen

Die Anwendungsfelder für HPC sind vielfältig, ihre Zahl wächst beständig. HPC findet insbesondere in natur- und ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen Anwendung. In Feldern wie der Strömungsdynamik oder der Klimaforschung dienen Simulationen mittels HPC als unverzichtbare Methode des Erkenntnisgewinns. Der Bedarf an Rechenkapazität ist dabei im Prinzip unbegrenzt. Denn höhere Rechenleistungen ermöglichen eine feinere Diskretisierung, höherdimensionale Daten und komplexere Parameterräume und versprechen somit immer weitere Fortschritte und neue Ergebnisse. Doch die ansteigende Datenmenge über immer detailliertere Modelle allein sorgt nicht für einen exponentiell wachsenden Rechenbedarf, die zunehmende Komplexität der Anwendungen ist ein weiterer wichtiger Faktor. Diese Anwendungen reichen von der reinen Berechnung spezifischer Probleme über umfassende Simulationen komplexer Phänomene wie Alterungsprozesse in der Materialforschung hin zur Kopplung unterschiedlicher Modelle auf verschiedenen Skalen. Aufbauend auf hinreichend genauen Modellen können z. B. auch Optimierungsaufgaben in komplexen Netzwerkstrukturen wie Verhaltensweisen im Internet oder inverse Probleme approximativ gelöst werden. Neben diesen etablierten Anwendungsfeldern erlangt HPC auch in anderen Wissenschaftsfeldern zunehmende Bedeutung. Zu nennen sind hier bspw. die Verwendung agentenbasierter Mo-

delle zur Simulation komplexer sozialer Phänomene in den Sozialwissenschaften, komplexe Simulationen im Bereich der Logistik, Optimierung und Simulation in den Lebenswissenschaften, Digitalisierung und Erschließung kulturwissenschaftlicher Güter z. B. im Rahmen der *Digital Humanities* sowie Probleme, die durch sehr große und komplexe Graphen beschrieben werden, etwa in der Bioinformatik, oder in der Analyse sehr großer Datenmengen. Für den Bereich der sog. HPDA-Anwendungen (*High Performance Data Analytics*) im *Capacity Computing* wird in einer Analyse ein substantielles Wachstum bis zum Jahr 2018 vorhergesagt, wodurch die Anforderungen an Modellierung und Programmierung und damit die Komplexität nochmals steigen werden. |<sup>11</sup> Weiterhin ist durch die Weiterentwicklung von interaktiv-explorativen und Echtzeit-Anwendungen mit einer Vielzahl neuer Anwendungsbereiche bspw. in der Medizin, der Logistik oder in der Verkehrssteuerung zu rechnen.

#### IV.2 Technische Herausforderungen

Eine Steigerung der Transistordichte wie sie durch „Moore’s Law“, |<sup>12</sup> beschrieben wird führt seit einigen Jahren nicht mehr automatisch zu höheren Taktraten und damit zu höherer Einzelprozessorleistung, da zunehmend nicht handhabbare Abwärme entsteht. Stattdessen steigt die Zahl der Prozessoren, sog. *Cores*, auf einem Chip, was zu massiver Parallelität der Rechner und verteilten Speicherorganisationen führt. Derartige Rechner stellen zunehmend höhere Anforderungen an die Skalierbarkeit der Software, d.h. ihre Anpassbarkeit an die massiv parallele Berechnung von Problemstellungen. Damit wächst auch die Bedeutung der Grundlagenforschung im Bereich der HPC-Methoden.

Durch verteilte Speicherarchitekturen und die Verwendung neuer Prozessortypen, insbesondere sog. GPUs (*Graphics Processing Units*, optimiert für Grafikberechnungen und massiv parallelisierbare Aufgaben), wird die Architektur moderner HPC-Rechner zunehmend komplex und ihre Programmierung anspruchsvoller. Dieser Komplexität gilt es durch ausgewiesenes Personal mit einschlägiger Methodenkompetenz für die jeweiligen Rechnersysteme zu begegnen.

Weitere technische Herausforderungen resultieren unter anderem aus der in zunehmendem Maße hierarchisch-hybriden Struktur von HPC-Systemen, aus der Komplexität von Speichertechnologien und -hierarchien, aus dem langsa-

| <sup>11</sup> Vgl. International Data Corporation (IDC): Worldwide High-Performance Data Analysis 2014–2018 Forecast, <http://www.idc.com/getdoc.jsp?containerId=248789>, abgerufen am 25. September 2014. Bei HPDA werden Daten nicht mit einer vorgegebenen Fragestellung nach festen Mustern durchsucht, sondern es wird ohne feste Fragestellung nach Mustern in den Daten geforscht. Solche Aufgabenstellungen kommen außer in der Wirtschaft (z. B. *Smart Metering* oder *Connected Car*) beispielsweise bei der Analyse der Daten von Instrumenten (Teleskope, Satelliten, u. ä.) und den Lebenswissenschaften, beispielsweise bei der Analyse des Zusammenhangs zwischen bestimmten Krankheitsbildern und multiplen Gendefekten, zum Einsatz. Um diese Aufgaben rechentechnisch zu lösen bedarf es eng gekoppelter HPC-Systeme.

| <sup>12</sup> 1965 von Gordon Moore formuliert, besagt „Moore’s Law“ als empirische Regel, dass sich die Transistordichte auf einem Computerchip etwa alle 18 Monate verdoppelt.

meren Technologiefortschritt bei Datenkommunikation im Vergleich zum Rechnen sowie aus der erforderlichen Steigerung der Energieeffizienz von HPC-Systemen.

#### IV.3 Organisatorische Herausforderungen

Die derzeitige kompetitive Förderung der universitären Zentren der Ebene 2 im Rahmen des Programms FuG (vgl. A.VI.2, S. 23) ist nach Auffassung des Wissenschaftsrates wenig geeignet, um die bestehenden finanziellen Mittel effizient nutzen und die deutsche HPC-Infrastruktur übergreifend strategisch weiterentwickeln zu können. Das Verfahren sieht einerseits keine vergleichende Bewertung zwischen HPC-Anträgen vor, wenn diese in unterschiedlichen Jahren gestellt werden. Zudem setzt es kaum Anreize zur langfristigen Vorausplanung und Koordination zwischen den HPC-Zentren.

Aufgrund der bestehenden dezentralen Struktur des HPC in Deutschland ist heute außerdem nicht gewährleistet, dass alle beantragten Rechenprojekte auf Ebene 2 nach den gleichen wissenschaftlichen Kriterien bewertet und jeweils an den Zentren in Deutschland bearbeitet werden, die hierfür über die bestmögliche Rechnerarchitektur und entsprechende Methodenkompetenz und somit das beste Kosten-Nutzen-Verhältnis für die jeweilige Anwendung verfügen.

Es fehlen also nachhaltige Strukturen, die eine über kurzfristige Bedarfe hinausgehende Planung der HPC-Infrastruktur erlauben. Die zentrale Herausforderung besteht darin, mittels funktionaler Finanzierungsstrukturen und länderübergreifender Koordination einen wirkungsvolleren Einsatz der Mittel zu ermöglichen.

#### IV.4 Kostenwirksame Herausforderungen

Eine Reihe von Faktoren wirken sich in unterschiedlicher Weise auf den Investitionsbedarf in der HPC-Infrastruktur aus. Ein erster Faktor ist die steigende Nachfrage: Der Bedarf an HPC wird in den kommenden Jahren substantiell ansteigen. |<sup>13</sup> So ist damit zu rechnen, dass aus Kostengründen viele Laborexperimente flankiert bzw. ganz oder teilweise durch Simulationen ersetzt werden, insbesondere bei Systemen, die sich einer direkten Beobachtung entziehen. Etliche Experimente generieren zudem große Datenmengen, deren Bearbeitung und Auswertung nach HPC-Ressourcen verlangt. |<sup>14</sup> Außerdem ergibt sich, wie bereits erwähnt, in immer mehr Disziplinen sowohl in der Grundlagenforschung als auch in der anwendungsorientierten Forschung ein signifikanter Bedarf an und Nutzen durch die Anwendung von HPC.

| <sup>13</sup> Das Beispiel der *Digital Humanities* belegt dabei sicher am eindrucklichsten, dass der Kreis der potentiellen HPC-Nutzerinnen und -Nutzer keinesfalls eng begrenzt ist. In institutioneller Hinsicht melden auch Fachhochschulen einen größer werdenden Bedarf an HPC-Rechenleistung an.

| <sup>14</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Positionspapier zu Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft, Dresden 11.07.2014 (Drs. 4032-14), S. 14.

Ein zweiter Kostenfaktor ist die Notwendigkeit, vorhandene Algorithmen und Software ständig an neue Systeme anzupassen, um Leistung und Kosteneffizienz zu optimieren. Die Anpassung an massiv parallele Systeme mit komplexer Architektur ist insbesondere bei älteren Algorithmen und älterer Software eine Herausforderung. Für die langfristige Pflege und Verbesserung von Software sind die HPC-Strukturen in Deutschland jedoch nicht gerüstet, weil es an entsprechenden Zentren fehlt, die solche Kompetenzen langfristig aufbauen können. Die im Rahmen von Projekten entwickelten Softwarepakete sollten aber nach Projektende bei Bedarf weiter betreut, verbessert, erweitert, an neue Anwendungen und Rechnerarchitekturen angepasst und der wissenschaftlichen Gemeinschaft zur Verfügung gestellt werden können (entweder als *Open-Source-Software*, durch Gründung von *Startups* oder durch andere Formen wirtschaftlicher Verwertung). Auch unter diesem Aspekt ergibt sich also ein verstärkter Investitionsbedarf zur Ausbildung und langfristigen Bindung von hochqualifiziertem Personal an HPC-Zentren und in der Wissenschaft generell. |<sup>15</sup>

Energiekosten sind schließlich ein dritter wesentlicher Faktor, der eine Neubeschaffung von HPC-Systemen nach ca. drei bis spätestens fünf Jahren notwendig macht. Bei einem typischen Rechner der Ebene 2 haben die Energiekosten ungefähr dieselbe Höhe wie die über fünf Jahre amortisierten Investitionskosten. Da die Energieeffizienz (Rechenoperationen pro Watt) mit jeder Rechnergeneration deutlich stärker zunimmt als die Rechenleistung (Rechenoperationen pro Sekunde), kann es sich aufgrund der hohen Energiekosten (Euro pro Megawattstunde) wirtschaftlich lohnen, schon nach wenigen Jahren einen Rechner durch eine Neubeschaffung abzulösen. Aus dieser Entwicklung ergibt sich ein für Forschungsinfrastrukturen sehr kurzer Reinvestitionszyklus von drei bis fünf Jahren.

Die derzeitige Finanzierungsstruktur von Hochleistungsrechnern der Ebene 2 an Universitäten im Rahmen des Programms FuG erweist sich für eine Anpassung an diese Herausforderungen als Hindernis, da ausschließlich Infrastrukturen, |<sup>16</sup> aber weder die Personal- noch die Energiekosten als Bestandteile der Betriebskosten mitgefördert werden können. Sie verbleiben ausschließlich beim Betreiber bzw. beim Trägerland und mindern so den Anreiz, einen Hochleistungsrechner für Nutzergruppen außerhalb des Trägerlandes oder der Trägerländer zu öffnen.

|<sup>15</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Positionspapier zu Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft, Dresden 11.07.2014 (Drs. 4032-14), S. 29.

|<sup>16</sup> In der einschlägigen „Ausführungsvereinbarung über die gemeinsame Förderung von Forschungsbauten an Hochschulen einschließlich Großgeräten“ in der seit dem 1. Januar 2014 geltenden Fassung werden Infrastrukturen definiert als „Liegenschaften; Neu-, Um- und Erweiterungsbauten mit Erstausrüstung einschließlich Großgeräten“ (§3(1)), <http://www.gwk-bonn.de/fileadmin/Papers/AV-FuG.pdf>, abgerufen am 18. Dezember 2014.

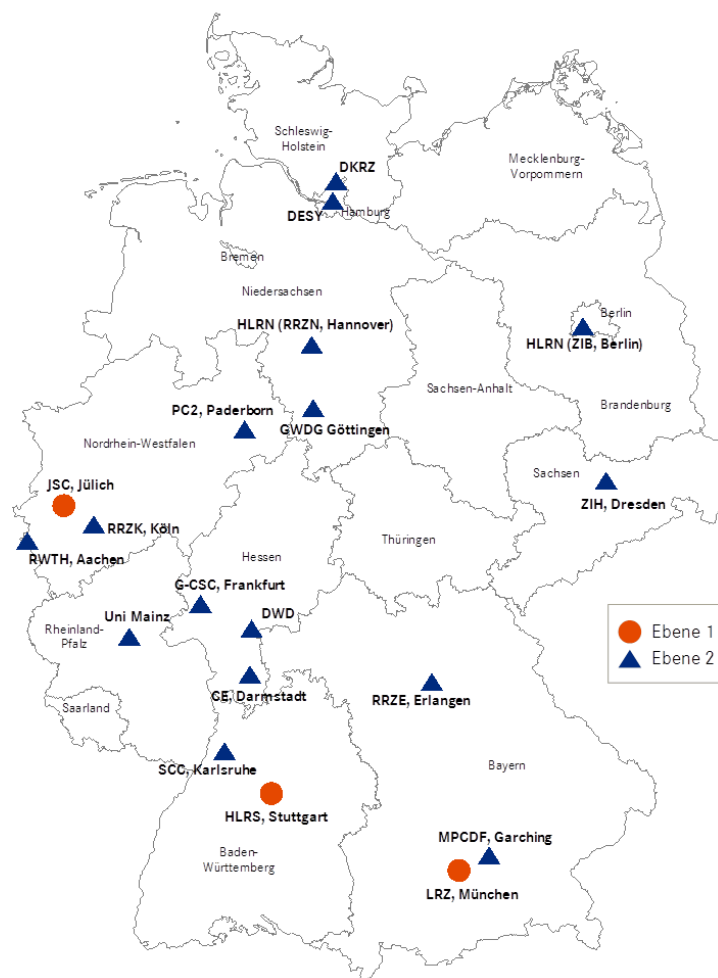


Zur Vorbereitung dieser Empfehlungen hat der Wissenschaftsrat eine schriftliche Befragung von Rechenzentren, deren Betreibern (Universitäten, außeruniversitären Forschungseinrichtungen, u. a.) sowie bei Bund und Ländern durchgeführt.

### V.1 Übersicht über HPC in Deutschland

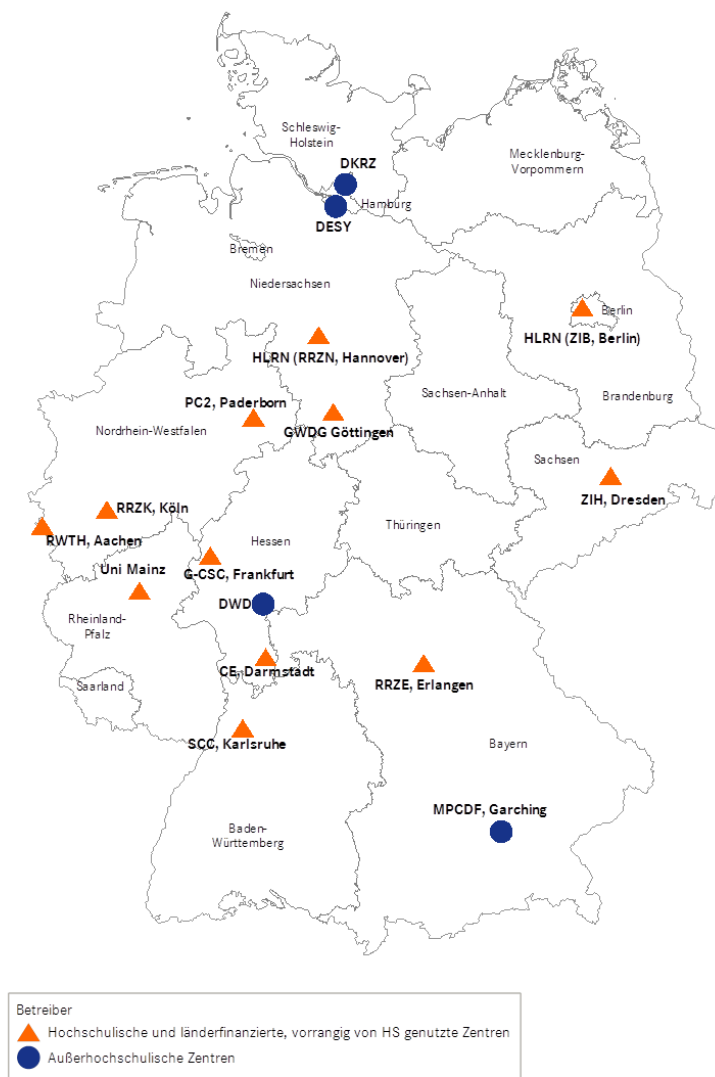
Die folgenden Abbildungen geben eine kompakte Übersicht über wichtige Merkmale des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland. Neben der geographischen Verteilung vermittelt Abbildung 1 Informationen dazu, welche Zentren der Ebene 1 respektive Ebene 2 zuzuordnen sind. |<sup>17</sup> Sie zeigt die drei Zentren des GCS auf der Ebene 1 ebenso wie die 16 Mitglieder der GA.

**Abbildung 1: Zentren der Ebenen 1 und 2**



Quelle. Wissenschaftsrat; Standorte wg. Lesbarkeit tw. angepasst. Kartengrundlage © Lutum+Tappert.

|<sup>17</sup> Einige Mitgliedszentren der GA beschreiben sich selbst als Ebene 3 Zentren am Übergang zu Ebene 2 (vgl. dazu die Überblicks-Tabelle im Anhang, S. 50).



Quelle. Wissenschaftsrat; Standorte wg. Lesbarkeit tw. angepasst. Kartengrundlage © Lutum+Tappert.

Abbildung 2 klassifiziert die Mitgliedszentren der GA nach ihrer Nutzung. |<sup>18</sup> Die Abbildungen zeigen, dass das Gros des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland heute an Hochschulen sowie an länderfinanzierten, vorrangig von Hochschulen genutzten, Zentren angesiedelt ist. Ebenso wird sichtbar, dass die HPC-Zentren physisch im südlichen und mittleren Deutschland konzentriert sind.

## V.2 Strukturen der Ebene 1

Organisatorisch ist die Ebene 1 im GCS zusammengefasst. Sie umfasst das Leibniz Rechenzentrum (LRZ) München, das Höchstleistungsrechenzentrum

|<sup>18</sup> Einige Mitgliedszentren der GA beschreiben sich selbst als Ebene 3 Zentren am Übergang zu Ebene 2 (vgl. dazu die Überblicks-Tabelle im Anhang, S. 50). Die GDWG Göttingen ist Rechenzentrum sowohl der Universität Göttingen als auch der Max-Planck-Gesellschaft.

Stuttgart (HLRS) und das *Jülich Supercomputing Centre* (JSC). Die Organisation und die wissenschaftliche Leistungsfähigkeit des GCS wurden in der Befragung des Wissenschaftsrates von allen Akteuren als hoch eingeschätzt. Der Erfolg des GCS lässt sich auch daran ablesen, dass sowohl in Frankreich als auch in Japan die Organisationsstrukturen im HPC-Bereich nach dem Vorbild des GCS adaptiert werden.

Auf dem Höchstleistungsrechner des LRZ München sind schwerpunktmäßig Nutzerinnen und Nutzer aus den Bereichen Astro- und Geophysik, Ingenieurwissenschaften, Lebenswissenschaften und Chemie vertreten. Das HLRS Stuttgart nimmt innerhalb des GCS den Schwerpunkt Ingenieurwissenschaften wahr, wobei das Spektrum von den Materialwissenschaften bis zur Strömungsmechanik reicht. Das Profil des JSC ist geprägt durch die Bereiche Klimaforschung, Hirnforschung sowie Energie und Materialien. Aus den Antworten auf die Umfrage des Wissenschaftsrates geht hervor, dass sich unter den jeweils fünf aufwändigsten Anwendungen der drei GCS-Zentren nahezu ausschließlich *Capability* Anwendungen finden.

Die Nachfrage nach Rechenkapazitäten im GCS ist sehr hoch. Die Zentren sind nach eigenen Angaben um das drei- bis vierfache überbucht (genehmigte im Verhältnis zu beantragter Rechenzeit). Zur Vergabe von Rechenzeit auf GCS Systemen wurde im Rahmen des sog. PetaGCS-Projektes ein abgestimmtes Zugangs- und *Review*-Verfahren entwickelt. Es sieht für Großprojekte einen halbjährlichen gemeinsamen *Call* vor. Die Anträge werden über ein gemeinsames Portal entgegengenommen, einer technischen Machbarkeitsprüfung unterzogen und anschließend von einem gemeinsamen Pool externer Gutachterinnen und Gutachter sowie Fachgebietsvertreterinnen und Fachgebietsvertreter evaluiert. Schließlich erfolgt die Entscheidung über den gemeinsamen GCS Lenkungsausschuss. Im Rahmen der über GCS finanzierten Systemkapazität bestehen keine Kontingente für die Trägerländer oder einzelne Fachgemeinschaften.

Schon heute können die Zentren des GCS als national etablierte multithematische Kompetenzzentren gelten. Aufgrund ihrer Finanzierungsstruktur (vgl. A.VI.1, S. 23) und ihrer Offenheit für alle Nutzerinnen und Nutzer in Deutschland stellen sie bereits eine nationale Forschungsinfrastruktur dar.

### V.3 Strukturen der Ebene 2

Die Zentren der Ebene 2 sowie einige Zentren, die sich selbst an der Schwelle von Ebene 3 zu Ebene 2 verorten, sind in der GA zusammengeschlossen, die elf ordentliche |<sup>19</sup> und weitere sechs assoziierte Mitglieder |<sup>20</sup> hat. |<sup>21</sup> Gefördert

| <sup>19</sup> *Gauss Centre for Supercomputing* (GCS), IT Center der RWTH Aachen, Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN), vertreten durch die beiden Betreiberrechenzentren Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Leibniz Universität IT Services (RRZN), Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH) der TU Dresden, *Max Planck Computing and Data Facility* (MPCDF), Deutscher Wetterdienst (DWD), Deutsches Klimarechenzentrum (DKRZ), *Steinbuch Centre for*

von mehreren Ländern baut die GA derzeit eine Geschäftsstelle auf und entwickelt eine Konzeption für ein überregionales und deutschlandweites Begutachtungsverfahren von Anträgen. Erklärte Ziele der GA sind die Förderung des Hochleistungsrechnens als eigenständige strategische Forschungsaktivität und die Verbesserung der internationalen Sichtbarkeit der deutschen Forschungsanstrengungen auf diesem Gebiet. Eine Besonderheit innerhalb der Ebene 2 ist der Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN), der als Rechnerverbund, an dem insgesamt sieben Länder beteiligt sind, eine Kooperationsstruktur mit enger Verzahnung zu mehreren Zentren der Ebene 3 darstellt. Der Verbund besitzt eine gemeinsame, prozessgesteuerte *Governance*-Struktur zur Verwaltung und technischen Lenkung und ist durch zwei mit einer schnellen Datenleitung verbundene und kooperativ betriebene Standorte technisch realisiert (vgl. A.V.5, S. 21). Mehrere Rechenzentren der Ebene 2 werden von außeruniversitären Forschungseinrichtungen getragen und finanziert, so beispielsweise die *Max Planck Computing and Data Facility* (MPCDF) als bundesweit tätiges Zentrum für alle Max-Planck-Institute mit Bedarf an HPC und Datenspeicherung.

Hinsichtlich der Art der Rechnungen, die an den Zentren durchgeführt wurden (für eine thematische Übersicht vgl. Anhang, S. 46), geben einzig das GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung und das Forschungszentrum *Computational Engineering* der TU Darmstadt unter den fünf aufwändigsten Anwendungen vorwiegend bzw. ausschließlich *Capacity Computing* an. Die Regel ist, dass bei den aufwändigsten Anwendungen sowohl *Capacity* als auch *Capability Computing* in unterschiedlicher Gewichtung eine Rolle spielen, meist mit einem stärkeren Gewicht auf *Capability* Anwendungen. Die GA erwartet allerdings, dass sich zukünftig ein Großteil der Anfragen im Bereich von *Capability Computing* bewegen wird. Schon heute dürfte in den genannten Zahlen zum Verhältnis von *Capability* und *Capacity Computing*, der Anteil von *Capacity Computing* eher unterrepräsentiert sein, da die Zahlen auf den jeweils „aufwändigsten“ Projekten basieren, wohingegen *Capacity Computing* sich durch den wiederholenden Charakter vergleichsweise einfacher Rechnungen definiert.

Die Vergabe von Rechenzeit erfolgt auf der Ebene 2 nicht einheitlich. Nahezu alle ordentlichen Mitglieder der GA aus dem Bereich der Universitäten und Forschungseinrichtungen haben einen eigenen Beirat oder Lenkungsausschuss,

*Computing* des KIT (SCC), Forschungszentrum *Computational Engineering*, Kompetenzgruppe Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen der Technischen Universität Darmstadt (CE), Zentrum für Datenverarbeitung (ZDV) der Johannes Gutenberg Universität Mainz (Stand: 17. Dezember 2014).

|<sup>20</sup> Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Goethe-Zentrum für Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen (G-CSC) der Goethe Universität Frankfurt am Main, Regionales Rechenzentrum Erlangen (RRZE), Regionales Rechenzentrum der Universität Köln, *Paderborn Center for Parallel Computing* (PC2), Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen mbH (GWDG). Das Deutsches Forschungsnetz (DFN) ist ebenfalls Mitglied der GA, in den Abbildungen aber nicht vertreten, da es Netzinfrastruktur zur Verfügung stellt und nicht im eigentlichen Sinne ein HPC-Zentrum ist (Stand: 17. Dezember 2014).

|<sup>21</sup> Eine Übersicht über diejenigen Zentren, die sich an der Umfrage des Wissenschaftsrates beteiligt haben, findet sich mit ihrer jeweiligen thematischen Ausrichtung im Anhang.

der üblicherweise aus Mitgliedern von Anwendungsbereichen zusammengesetzt ist. Diese entscheiden in Fachgutachten über die Vergabe der Rechenzeit. Die Handhabung der Begutachtungsverfahren ist allerdings unterschiedlich: Es existieren keine einheitlichen Kriterien für Anträge und mangels Abstimmungsmechanismen auch keine Möglichkeiten, Doppelanträge bei mehreren Zentren zu vermeiden.

Zu den Nutzerzahlen in Zentren der Ebene 2 lassen sich aus den Antworten auf die Umfrage des Wissenschaftsrates keine vergleichbaren Angaben ableiten. Grob lässt sich festhalten, dass pro Jahr an thematisch offenen, universitären Zentren der Ebene 2 zwischen 60 und 150 Projekte gerechnet werden. Die Auslastung der Zentren variiert nach Eigenangaben zwischen knapp 80 und 100 Prozent. |<sup>22</sup> Die genannten Zahlen beruhen allerdings nicht auf einer einheitlichen Definition von Projekten oder einem Konsens darüber, wie die Auslastung der Systeme bewertet wird. Die genannten Daten sollten daher als Näherungswerte verstanden werden. Ein Grund für die schwierige Datenlage sind unterschiedliche Berichts- und Monitoringsysteme.

#### V.4 Strukturen der Ebene 3

Auf Ebene 3 finden sich in die lokalen Forschungsaktivitäten eng integrierte Hochschulrechner. Die Rechenzentren der Ebene 3 werden allerdings auch in regionale Nutzungskonzepte mit eingebunden (vgl. A.V.5.b, S. 22). Die Hardware wird über die jeweiligen Trägerländer, aus den Budgets der betreffenden Forschungseinrichtungen sowie über den Programmteil Forschungsgroßgeräte des Programms FuG nach Art. 91b GG finanziert. Rechner der Ebene 3 sind i. d. R. nur für lokale Nutzergruppen wie bspw. die Forschenden der jeweiligen Sitzeinrichtung zugänglich.

#### V.5 Kooperationsstrukturen und Koordinationsmechanismen

##### V.5.a Kooperationsstrukturen im HLRN

Neben den Einzelzentren bildet der HLRN |<sup>23</sup> eine Ergänzung zu den Landes- oder thematischen HPC-Zentren in der GA. Die sieben Bundesländer, die dem Verbund heute angehören, |<sup>24</sup> betreiben auf der Grundlage eines Verwaltungsabkommens länderübergreifend ein gemeinsames HPC-System an den zwei Standorten Berlin und Hannover, das als einziges thematisch offenes System der Ebene 2 in den sieben beteiligten Ländern zur Versorgung eines breiten Anwendungsspektrums mit Methodenkompetenz und Rechenzeit dient.

|<sup>22</sup> Werte aus der Startphase neuer Rechnersysteme, in denen die Systeme noch nicht voll ausgelastet werden können, blieben unberücksichtigt.

|<sup>23</sup> Für weitere Informationen vgl. <http://www.hlrn.de>.

|<sup>24</sup> Berlin, Brandenburg, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein.

Das oberste Gremium des HLRN ist der Verwaltungsrat. Er entscheidet über alle Angelegenheiten von grundsätzlicher Bedeutung, insbesondere über die Finanzierung und die strategische Fortentwicklung des Verbundes. Ein wissenschaftlicher Ausschuss entscheidet vorrangig über die Zulassung von begutachteten Projekten sowie die Vergabe von Betriebsmitteln. Er berät den Verwaltungsrat und die Technische Kommission z. B. bei der Erweiterung oder dem Ersatz der Rechnersysteme. Die Technische Kommission besteht aus den Leitungen der federführenden Rechenzentren der beteiligten Bundesländer. Sie berät den Verwaltungsrat in allen technischen Fragen und ist für das Systemkonzept, den Betrieb und die HPC-Planung zuständig.

Für Nutzerinnen und Nutzer des HLRN, die Forscherinnen und Forscher aus den HLRN-Ländern sind, besteht auf Antrag Zugang mit flächendeckenden und fachbezogenen Beratungs- und Serviceangeboten. Diese decken Themen wie die Methodenwahl und algorithmische Fragen ebenso ab wie fachliche Belange der effizienten Systemnutzung und -optimierung. Länderübergreifende Schulungen und Workshops fördern dabei den Austausch. |<sup>25</sup>

#### V.5.b Koordination im Rahmen von HPC Konzepten

Neben der horizontalen Verbundstruktur im HLRN auf der Ebene 2 haben Baden-Württemberg mit bwHPC und Hessen |<sup>26</sup> Konzepte erarbeitet, die eine auch vertikale Koordination der Rechenzentren und ihrer Aktivitäten über verschiedene Ebenen der HPC-Pyramide ermöglichen.

Das bwHPC Konzept soll im Folgenden beispielhaft dargestellt werden. Seit 2012 verfügt Baden-Württemberg über eine HPC-Landesstrategie, die aus den koordinierten Aktivitäten von GCS und bwGRiD sowie einer HPC-Investitionsplanung entwickelt wurde. |<sup>27</sup> Hierbei stimmt sich das HLRS neben seiner Mitgliedschaft im GCS auf Landesebene eng mit dem *Steinbuch Centre for Computing* (SCC) in Karlsruhe ab. Diese Kooperation zielt auf eine klare Aufgabenverteilung zwischen dem HLRS und dem SCC ab, wobei das HLRS für das Höchstleistungsrechnen auf den Ebenen 0 (PRACE) und 1 verantwortlich zeichnet und das SCC für Ebene 2 zuständig ist sowie außerdem die Koordination von Ebene 3 übernommen hat. Beschaffungen am SCC sind abgestimmt auf die GCS-Beschaffungen und die Beschaffungen auf Ebene 3. Ein weiteres Kernelement der Landesstrategie ist die gemeinsame Bewirtschaftung und Vergabe von Rechenzeiten am HLRS und SCC über den extern besetzten Lenkungsausschuss des HLRS. Als eine Auswirkung dieses Konzepts beobachtet

|<sup>25</sup> Die Zahlung von Entgelten für die Inanspruchnahme des verteilten Rechnersystems des HLRN ist für Nutzerinnen und Nutzer außerhalb der Hochschulen in den HLRN-Ländern in der jeweils geltenden Entgeltordnung geregelt. Für Forscherinnen und Forscher an Hochschulen der HLRN-Länder ist die Nutzung kostenlos. Vgl. <https://www.hlrn.de/home/view/Organisation/EntgeltOrdnung>.

|<sup>26</sup> Vgl. <http://www.hpc-hessen.de>

|<sup>27</sup> Hartenstein, H.; Walter, T. und Castellaz, P.: Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste, in: PIK - Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation, 36(2), 2013. S. 99-108. DOI: 10.1515/pik-2013-0007.

man in Baden-Württemberg eine höhere Durchlässigkeit der Ebenen, die Nutzerinnen und Nutzern das *application scaling*, also die Portierung auf große Prozessor- bzw. Core-Zahlen, erleichtert.

## A.VI FINANZIERUNG DES HPC

---

Die gegenwärtige Finanzierung des HPC in Deutschland unterscheidet sich zwischen den Ebenen erheblich.

### VI.1 Ebene 1

Die Finanzierung des GCS (Ebene 1) beruht auf einem im Jahr 2008 geschlossenen Verwaltungsabkommen des Bundes mit den drei Sitzländern Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen. Den Ausbau der drei Standorte fördert der Bund mit ca. 200 Mio. Euro als Projektfördermittel für Beschaffung und Betrieb. Er übernimmt damit bis zu 50 Prozent der Kosten für die Investition sowie für eine Unterstützung des Betriebs. Die Sitzländer tragen jeweils die andere Hälfte der Kosten am jeweils eigenen Standort. Diese Finanzierung endet vier Jahre nach der dritten Ausbaustufe und ist bis 2017 vereinbart.

**Tabelle 1: Mittel des Bundes für die Projektförderung des Höchstleistungsrechnens der Ebene 1 (Tsd. €)**

	2008-12	2013	2014	2015	2016	2017	Gesamt
Bundesanteil	137.944	22.706	7.791	19.829	9.500	2.259	<b>200.029</b>

Quelle: Wissenschaftsrat nach Angaben des BMBF. Die Länderanteile von BW, BY und NRW summieren sich insgesamt ebenfalls auf 200 Mio. Euro.

### VI.2 Ebene 2

Die Personal- und Betriebskosten der Ebene-2-Rechenzentren werden wesentlich durch die Länder finanziert. Ausnahmen sind von den außeruniversitären Forschungseinrichtungen getragene und finanzierte Einrichtungen, beispielsweise die MPCDF in Garching.

Für eine gemeinsame Finanzierung durch Bund und Länder steht universitären Zentren der Ebene 2 das Förderinstrument der Forschungsbauten im Programm FuG offen; es handelt sich um eine Gemeinschaftsaufgabe nach Art. 91b GG. Im Rahmen einer „programmatisch-strukturellen Linie“ (PSL) besteht die Möglichkeit, Investitionen in HPC-Systeme hälftig zwischen Bund und Trägerland bzw. Trägerländern aufzuteilen. Die PSL zeichnet sich durch spezifisch auf HPC-Anträge zugeschnittene ergänzende Kriterien aus. Insbesondere wurde auf das für die sonstige Förderung in diesem Programm geltende Kriterium einer kohärenten Forschungsprogrammatik, die ansonsten der Beantragung eines Forschungsbaus bzw. der Infrastruktur zugrunde liegen soll, verzichtet.

Bei ihrer Einführung war die PSL sowohl zeitlich als auch finanziell begrenzt: Im Zeitraum von 2009 bis 2014 sollten insgesamt 100 Mio. Euro aus dem Fördervolumen für Bewilligungen von Rechneranträgen (einschließlich Baukosten) eingesetzt werden können. Bereits mit den im Juli 2011 ausgesprochenen Empfehlungen für die Förderung von Forschungsbauten beginnend im Jahr 2012 – und damit zwei Jahre vor Auslaufen der Befristung der PSL – waren diese Mittel nahezu verbraucht. Die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) beschloss zunächst, die Förderung von Vorhaben nach der PSL ohne zeitliche und finanzielle Begrenzung als Teil des Programms FuG fortzuführen. Im Anschluss an das Positionspapier des Wissenschaftsrates wurde für die Förderphasen 2014 und 2015 und bis zur Klärung der künftigen Finanzierung von Hochleistungsrechnern zusätzlich beschlossen, jeweils 25 Mio. Euro der insgesamt je Förderphase zur Verfügung stehenden Mittel nach Art. 91b GG vorzugsweise für Vorhaben der PSL „Hochleistungsrechner“ zu verwenden. Diese Vorhaben unterliegen weiterhin den gültigen Qualitätskriterien und müssen anhand dieser als förderwürdig eingestuft werden. Dieser Status Quo basiert mit Artikel 91b GG auf einer dauerhaften Grundlage.

In der Befragung durch den Wissenschaftsrat bewerteten die Länder ebenso wie die Betreiber von Rechenzentren der Ebene 2 die wettbewerbliche Finanzierung von Hochleistungsrechnern als Forschungsbauten nach Art. 91b GG als Hindernis für eine koordinierte Beschaffungs- und Ressourcenplanung.

**Tabelle 2: Mittel für Investitionen in Hochleistungsrechner nach Art. 91 b GG seit 2007 (Tsd. €)**

	bis 2010	2011	2012	2013	2014	2015	Gesamt
Gesamt	13.231	1.400	24.397	28.537	27.259	21.363	<b>116.187</b>
Bundesanteil	6.615	700	12.199	14.268	13.630	10.681	<b>58.093</b>

Quelle: Wissenschaftsrat nach Angaben des BMBF.

Die Zentren der Ebene 2 in außeruniversitärer Trägerschaft werden von den jeweiligen Forschungsorganisationen finanziert.

### VI.3 Ebene 3

Die Systeme der Ebene 3 stellen Rechencluster in Instituten und regionalen Rechenzentren an Hochschulen und Forschungseinrichtungen dar. Ebene-3-Systeme werden durch die jeweiligen Trägerländer oder aus den Budgets der betreffenden Forschungseinrichtungen finanziert. Zudem können Beschaffungsvorhaben mit Kosten bis zu 5 Mio. Euro im DFG-Programm „Forschungs-großgeräte nach Art. 91b GG“ – auf Grundlage einer Begutachtung – gefördert werden. Während es sich dabei bislang um Einzelbegutachtungen handelte, bietet die DFG nun auch die Begutachtung ortsübergreifender Infrastrukturkonzepte an.



---

## B. Empfehlungen

Mit den vorliegenden Empfehlungen legt der Wissenschaftsrat die Grundlagen für die langfristige Strukturentwicklung des HPC in Deutschland. Die Kernempfehlung besteht darin, einen Verbund von Kompetenzzentren für **Nationales Hoch- und Höchstleistungsrechnen (NHR)** im Sinne einer langfristig stabilen, gut koordinierten und deutschlandweit einfach zugänglichen Forschungsinfrastruktur einzurichten. Die strategische Steuerung des NHR sollte ein externer, koordinierender Ausschuss übernehmen. Operative und technische Fragestellungen sollten dagegen in einem gemeinsamen internen Lenkungsausschuss der Zentren behandelt und entschieden werden. Für die Auswahl von Anträgen sollte außerdem ein gemeinsamer Nutzungsausschuss gebildet werden, der die zentrenspezifischen Auswahlausschüsse koordiniert (vgl. B.IV, S. 34).

Auf Ebene 1 ist mit dem GCS eine solche NHR-Struktur in vielerlei Hinsicht bereits etabliert. Sie wird gemeinhin als sehr effektiv bewertet, einer Einschätzung, der sich der Wissenschaftsrat anschließt. Er empfiehlt daher, die GCS-Zentren in ihrer bestehenden Struktur und mit ihrem bestehenden Aufgabenzuschnitt in das NHR einzubinden. Die Differenzierung der HPC-Pyramide bleibt damit auch innerhalb des NHR erhalten.

Die folgenden Empfehlungen beziehen sich entsprechend vor allem auf Ebene 2:

Der Wissenschaftsrat bekräftigt seine Einschätzung, dass HPC-Systeme der Ebene 2 aufgrund ihrer technischen Leistungsfähigkeit als Teil der HPC-Pyramide einen essentiellen Beitrag für das deutsche Wissenschaftssystem leisten. Ein höheres Maß an Planungssicherheit sowie mehr Abstimmung bei Beschaffung und Kompetenzvermittlung ist zwingend erforderlich, um die Leistungsfähigkeit dieser Systeme voll auszuschöpfen und ihre Kosteneffizienz zu optimieren. Als Teil einer nationalen Infrastruktur sollten diese Systeme Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern im Endausbau des NHR auf Antrag bundesweit offen stehen.

Der Wissenschaftsrat betrachtet die vorgeschlagene NHR-Infrastruktur als Schlüssel, um bestehende Defizite in Organisation und Koordination auf Ebene 2 abzubauen, das Hochleistungsrechnen künftig verstärkt auf Kooperation und Koordination auszurichten, durch eine langfristig gesicherte Mittelbereitstellung zu stützen und damit ein optimales Kosten-Nutzen-Verhältnis für HPC in Deutschland zu erreichen. Als Verbund von Kompetenzzentren der Ebene 2

und den erfolgreichen Strukturen von Ebene 1 wäre damit eine flächendeckende und zwischen den Ebenen durchlässige Versorgung der Anwenderinnen und Anwender mit Rechenkapazitäten, Diensten und Methodenkompetenz im Bereich des HPC sichergestellt.

Aufgrund der Finanzierungsstruktur der Ebene 1 leisten die drei Sitzländer der GCS-Zentren und der Bund schon heute einen erheblichen Beitrag zur Bereitstellung der bestehenden nationalen Infrastruktur, den der Wissenschaftsrat nachdrücklich würdigt. Er ermutigt Bund und Länder, ihren Beitrag auch weiterhin zu leisten und ist überzeugt, dass die GCS-Zentren durch eine bessere Durchlässigkeit zwischen den Ebenen im NHR zukünftig ihre Leistungsfähigkeit den HPC-Nutzerinnen und -Nutzern noch verstärken können.

### **B.1 NHR: NATIONALES HOCH- UND HÖCHSTLEISTUNGSRECHNEN ALS FORSCHUNGSINFRASTRUKTUR**

---

Aufgrund hoher Erneuerungsraten der Infrastruktur, eines hohen Energieverbrauchs und anspruchsvollen Betriebs erfordert Hoch- und Höchstleistungsrechnen große Investitionen. HPC legt dem Wissenschaftssystem damit die Verantwortung auf, diese Ressourcen möglichst optimal zu nutzen. Den Schlüssel dafür sieht der Wissenschaftsrat in einer verstärkten Koordination und Kooperation, beginnend bei der Beschaffung bis hin zur Bereitstellung und Vermittlung von Kompetenz, ohne die eine kosteneffiziente Nutzung von HPC-Systemen nicht möglich sein kann.

Hierfür ist eine deutschlandweite Sichtweise notwendig. Auf nationaler Ebene lassen sich unterschiedliche Rechnerarchitekturen, verschiedene Methodenkompetenzen und diverse Anwenderbedürfnisse besser in Beziehung setzen als dies auf regionaler Ebene der Fall sein kann. Schon heute liefern die Zentren des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland international anerkannte Ergebnisse; diese Position ließe sich durch eine national abgestimmte Infrastruktur noch weiter stärken.

Sofern es inhaltlich oder regional stark fokussierte Forschungsvorhaben gibt, die einen hohen HPC-Rechenbedarf haben, hält es der Wissenschaftsrat für sinnvoll, dass an diesen Standorten auch außerhalb des NHR weitere HPC-Zentren der Ebene 2 bestehen, die derartige Anforderungen bedienen. Die Finanzierung kann dann wie bisher im Rahmen eines der Programmteile des Programms FuG – entweder Forschungsbauten (falls mehr als 5 Mio. Euro) oder Forschungsgroßgeräte (falls weniger als 5 Mio. Euro) über die Länder oder weitere Bund-Länder Finanzierungsmodelle erfolgen.

#### **I.1 Anforderungen an das NHR**

Das NHR sollte sich auszeichnen durch:

1 – eine kosteneffizientere **Bereitstellung** der Ressourcen durch **langfristige Planung und Koordination** zwischen NHR-Zentren, die Beschaffung, Betrieb (u. a. Energie) und Methodenkompetenz umfasst,

2 – einen im Endausbau **deutschlandweit offenen Zugang** für alle Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler nach einheitlichen, rein wissenschaftlichen Kriterien, wobei internationale Kooperationen Berücksichtigung finden sollten,

3 – eine Finanzierung, die Planungssicherheit für ein NHR-Zentrum über mehrere Reinvestitionszyklen, z. B. zehn Jahre, ermöglicht und den Zentren durch übertragbare Jahresbudgets Flexibilität zum Einsatz ihrer Mittel für Investitionen und Betriebskosten (Energie, bauliche Maßnahmen, essentielles Betriebspersonal, Methodenkompetenz) einräumt,

4 – eine **Organisationsstruktur**, die sowohl mit Blick auf die Beschaffung von Hardware und den Aufbau methodischer Kompetenz als auch hinsichtlich der Auswahl von Anträgen auf Rechnerressourcen eine reibungslose Koordination zwischen den Zentren – auch zwischen den beiden Ebenen – erlaubt.

## 1.2 Mehrwert des NHR

Gegenüber dem Status Quo hätte der Aufbau eines NHR wissenschaftlichen und finanziellen Mehrwert entlang folgender Dimensionen:

1 – **Höhere Nutzerfreundlichkeit**: NHR ermöglicht einen einfacheren, da einheitlichen Zugang zu HPC für alle Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in Deutschland, unabhängig vom Arbeitsort. Die über das gesamte NHR koordinierte Zuteilung von Projekten zu Rechensystemen erleichtert die HPC-Nutzung aus Sicht der Anwenderinnen und Anwender und optimiert die Passgenauigkeit von Hardware, Methodenkompetenz und Projekten.

2 – **Gestärkte Methodenkompetenz**: Koordination und langfristige Planungssicherheit ermöglichen eine klare Profilbildung der einzelnen HPC-Zentren, die für den Aufbau eines gut ausgebildeten Personalstamms und zur Stärkung seiner Karriereperspektiven genutzt werden kann. |<sup>28</sup> Damit steht eine national abgestimmte Methodenkompetenz zur Verfügung, um Anwendungen optimal an die technische Umgebung anzupassen und so ein möglichst gutes Kosten-Nutzen-Verhältnis zu erreichen. Nutzerinnen und Nutzer können ihre Rechenprojekte an den methodisch am besten geeigneten Zentren durchführen, anstatt primär regional-lokal zu agieren.

3 – **Verbesserte Aus- und Weiterbildung**: Eine verbesserte Methodenkompetenz in einer langfristig angelegten Infrastruktur kann direkt in die Aus- und Weiterbildung einfließen. Durch die Anbindung an Universitäten kann das verbesserte HPC-Know-How so z. B. auch der Wirtschaft zugänglich gemacht werden.

|<sup>28</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen zu Karrierezielen und -wegen an Universitäten, Dresden 11.07.2014 (Drs. 4009-14).

4 – **Verbesserte Kosteneffizienz:** Langfristige Planungssicherheit und Koordination ermöglichen aufeinander abgestimmte Beschaffungen, da Nutzeranforderungen und Technologietrends deutschlandweit und nicht nur regional-lokal berücksichtigt werden.

5 – **Verbesserte Energieeffizienz:** Durch koordinierte (d. h. gebündelte und / oder zeitlich geschickt gestaffelte) Beschaffungen lassen sich auch hinsichtlich der Stromversorgung und -kosten optimale technische Lösungen herbeiführen. Ebenso kann durch Koordination die Anzahl der HPC-Standorte zugunsten weniger Zentren mit besseren Skaleneffekten (*economy of scale*) erreicht werden. Durch eine größere Skalierung eines HPC-Zentrums entstehen oft deutlich geringere Kosten für Kühlung, Notstrom, etc. Auch steigt die relative Energieeffizienz (Rechenoperation pro Watt) in der Regel mit der Größe eines Rechners, so dass der Anteil der Energiekosten an den Gesamtkosten durch größere Skalierung sinkt.

6 – **Bessere Qualitätssicherung:** Das NHR erlaubt in zweierlei Hinsicht eine deutlich transparentere und bessere Qualitätssicherung als dies heute der Fall ist. Zum einen bedingt ein gemeinsames und einheitliches Antrags- und Vergabeverfahren der NHR-Zentren, dass alle Forschungsanträge an das NHR hinsichtlich ihrer Qualität verglichen werden. Ein gemeinsames Evaluationsregime der Zentren erlaubt zum anderen auch, die Qualität dieser Serviceangebote regelmäßig transparent zu beurteilen.

7 – **Gemeinsame Strukturen:** Eine nationale Koordination der Zentren auf Ebene 1 und 2 mit Strukturen für die gemeinsam anzugehenden Aufgaben ist der Schlüssel zu mehreren oben genannten Punkten. Durch ein koordiniertes NHR besteht damit auch ein Ansprechpartner für die internationale Zusammenarbeit.

Diese Argumente machen nach Meinung des Wissenschaftsrates deutlich, dass die Einrichtung eines NHR für das deutsche Wissenschaftssystem mit wesentlichen Vorteilen verbunden ist. Für die Standorte der Kompetenzzentren ergeben sich darüber hinaus vielfältige Möglichkeiten, die eigene Profilierung zu erweitern oder zu vertiefen. Serviceleistungen sowie Lehre und Weiterbildung verbreitern zudem den Wirkungskreis hochqualifizierter Spezialkräfte, die einen Standort wissenschaftlich wie auch aus Sicht der Wirtschaft attraktiv machen. Der Wissenschaftsrat betont aber auch, dass die Bereitstellung von Dienstleistungen im Rahmen einer nationalen Forschungsinfrastruktur auch Ressourcen bindet. Zuvorderst bedeutet eine nationale Öffnung und wettbewerbliche Vergabe von Rechenzeit, dass auch lokale Bewerberinnen und Bewerber sich dem Wettbewerb um Rechenzeit stellen müssen.

Dem Wissenschaftsrat ist an einem möglichst breiten Zugang zu HPC-Ressourcen in Deutschland gelegen, da sich nur auf diese Weise der volle Mehrwert einer nationalen Infrastruktur realisieren lässt. Der Wissenschaftsrat spricht sich daher nachdrücklich für eine vollständige Öffnung aller NHR-Zentren im Endausbau des NHR für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus ganz Deutschland aus. Um am *Nationalen* Hoch- und Höchstleistungsrech-

nen teilnehmen zu können, ist es erforderlich, dass ein NHR-Zentrum mit dem überwiegenden Teil seiner Kapazität deutschlandweit offen ist.

## **B.II AUFGABEN VON NHR-ZENTREN**

---

Die Entscheidung, ein Kompetenzzentrum für das NHR anzubieten, gewährleistet für Träger und Zentrum langfristige Planungssicherheit und für das NHR-Kompetenzzentrum ein hohes Maß an strategischer Handlungsfähigkeit. |<sup>29</sup> Dafür übernimmt ein NHR-Kompetenzzentrum auch die Aufgabe eines Dienstleisters für die Nutzerinnen und Nutzer von HPC-Ressourcen und HPC-Kompetenz aus ganz Deutschland. Die bewährte Differenzierung zwischen Zentren der Ebenen 1 und 2 innerhalb der HPC-Pyramide bleibt dabei auch innerhalb des NHR erhalten.

Der Wissenschaftsrat spricht sich aufgrund der Diagnose der bisherigen Situation im HPC dafür aus, die Kompetenzzentren des NHR folgendermaßen anzulegen:

**1 – Nationale Kompetenzzentren:** Zentren des NHR dienen dem gesamtstaatlichen Interesse an einem nachhaltigen und ressourceneffizienten Einsatz von Hoch- und Höchstleistungsrechnern im Dienste der gesamten Wissenschaft. Im Rahmen des nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnens gibt es weiterhin Kompetenzzentren der Ebenen 1 und 2.

**2 – Offener Zugang für alle Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in Deutschland:** Der Zugang zu den NHR-Zentren *beider* Ebenen ist mindestens überwiegend bundesweit offen und die gesamte Rechenzeit wird im Wettbewerb nach rein wissenschaftlichen Auswahlkriterien vergeben. Der Wissenschaftsrat empfiehlt, die Zentren der Ebene 1 in jedem Fall vollständig für die bundesweite Nutzung offen zu halten, da andernfalls die Funktionsfähigkeit der HPC-Pyramide gefährdet wäre. Dadurch, dass methodische Kompetenzen nicht redundant, sondern komplementär über verschiedene NHR-Zentren aufgebaut werden, gewinnt die nationale Offenheit der NHR-Zentren zusätzlich an Bedeutung. Diese Forderungen decken sich mit den allgemeinen Empfehlungen des Wissenschaftsrates zu Forschungsinfrastrukturen, wonach sichergestellt sein muss, dass Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler unabhängig von ihrem räumlichen Standort die gleichen Zugangschancen haben. |<sup>30</sup>

**3 – Einheitlicher Zugang:** Der Zugang zu Rechnerressourcen des NHR erfolgt über ein NHR-weites, allen Zentren gemeinsames Portal. Die Entscheidung darüber, welches System für die Bearbeitung eines Projektes am besten geeignet ist, wird durch einen gemeinsamen Nutzungsausschuss in Zusammenar-

|<sup>29</sup> Ein NHR-Zentrum kann auch von einer Trägergemeinschaft, z. B. mehreren Universitäten, betrieben werden.

|<sup>30</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen zu Forschungsinfrastrukturen, Köln 2011, S. 39.

beit mit den Auswahlausschüssen der NHR-Zentren getroffen. Anträge auf Rechenzeit werden anhand eines einheitlichen Standards im Rahmen einer vergleichenden Begutachtung von zentrenspezifischen Auswahlausschüssen zügig bearbeitet. Damit wird der Zugang zu HPC für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler so einfach wie möglich gestaltet.

**4 – Flächendeckende Bereitstellung von HPC-Ressourcen:** Gesamthaft stellen die NHR-Zentren eine nachhaltige Versorgung mit *Capacity Computing*, *Capability Computing* und *Capability Test Computing* für Nutzerinnen und Nutzern von HPC in Deutschland sicher. Im Rahmen des NHR sollte sichergestellt sein, dass auch regional differenzierte wissenschaftliche Bedarfe abgedeckt sind.

**5 – Koordination zwischen den Ebenen:** Durch Koordination innerhalb des NHR zwischen den Zentren der Ebene 1 und der Ebene 2 wird eine den Bedürfnissen der Nutzerinnen und Nutzer angemessene Zuteilung von Projekten zu den Kompetenzzentren mit ihrem jeweiligen Profil hinsichtlich Hardware und Methodenkompetenz erreicht.

**6 – Koordination zwischen Zentren:** Durch Koordination zwischen den NHR-Zentren wird eine technische Ausstattung bereitgestellt, die zum einen den Bedarfen der unterschiedlichen Anwendergruppen gerecht wird, zum anderen den jeweils bestmöglichen Einsatz der verfügbaren Finanzmittel sicherstellt.

**7 – Strukturen:** Zum Zwecke der Koordination und zur Sicherstellung ihrer Arbeitsfähigkeit als nationale Forschungsinfrastruktur nutzen die NHR-Zentren gemeinsame Strukturen und Organisationseinheiten (vgl. B.IV, S. 34).

**8 – Methodenkompetenz und Beratung:** NHR-Zentren bauen Methodenkompetenz zur Unterstützung von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf, die HPC anwenden, und entwickeln ihr inhaltliches Know-how kontinuierlich weiter (u. a. durch eigene Forschungsprojekte). Sie binden so entsprechend qualifiziertes Personal, das gemäß der ESFRI-Definition als Teil einer Forschungsinfrastruktur zu betrachten ist.<sup>|31</sup> Dieses Personal stärkt die Beratungskompetenz und kommt damit, verglichen mit dezentralem Kompetenzaufbau, einer deutlich größeren Anzahl von Nutzerinnen und Nutzern zugute. Gleichzeitig muss sichergestellt sein, dass der Zugang zu persönlicher Beratung niederschwellig möglich ist.

**9 – Pflege von Softwarecodes:** NHR-Zentren sind in der Pflege und bedarfsgerechten Weiterentwicklung wichtiger Softwarecodes aktiv, um deren fortgesetzte und ressourceneffiziente Einsatzfähigkeit auf neuen Systemen zu gewährleisten.

<sup>|31</sup> Vgl. European Strategy Forum on Research Infrastructures: European Roadmap for research infrastructures. Report, Luxembourg 2006, S.16.

### **B.III EINRICHTUNG DES NHR**

---

Der Wissenschaftsrat empfiehlt, die Strukturen für das NHR bis zum Jahr 2018 im Zuge eines wettbewerblichen Ausschreibungsverfahrens in mehreren Runden einzurichten. Da potentielle NHR-Zentren ihre Beschaffungen mit mehreren Jahren Vorlauf planen, braucht ein Start des NHR einen längeren Vorlauf. Daher ist 2018 der früheste Zeitpunkt, der allen Interessierten eine Vorbereitung auf die neuen Finanzierungsstrukturen ermöglicht.

Der Wissenschaftsrat weist darauf hin, dass sich ab der ersten Ausschreibungsrunde alle interessierten Zentren bewerben können. Die Eignung als NHR-Zentrum ist unabhängig vom Zeitpunkt der letzten Hardwarebeschaffung. Für die Finanzierungsmodalitäten von Zentren, die kurz vor dem Start des NHR noch Mittel aus der programmatisch-strukturellen Linie im Programm FuG erhalten, ist eine Übergangslösung vorzusehen.

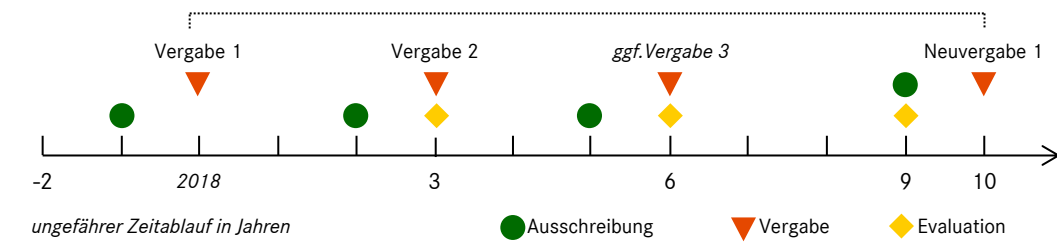
Der Wissenschaftsrat schlägt vor, ab der ersten Ausschreibungs- und Vergaberunde einen Strategieausschuss einzurichten (vgl. Kapitel B.IV.1, S. 35). Sowohl das initiale als auch alle weiteren Ausschreibungs- und Vergabeverfahren sollten sich an den genannten Kriterien (vgl. B.II, S. 29) ausrichten und sicherstellen, dass eine möglichst vollständige Abdeckung der Anforderungen entlang der unter B.III.2 (S. 33) genannten Kompetenzdimensionen gewährleistet ist.

Die folgende Abbildung präsentiert ein Szenario zum zeitlichen Ablauf einer Förderperiode im Rahmen des NHR – von der ersten Ausschreibung bis zur Neuausschreibung für die ersten Zentren nach neun Jahren und drei Evaluationen. Dabei sind die zeitlichen Abstände als ungefähre Angaben zu verstehen, sie sollten sich an der konkreten Taktung im Verfahren ausrichten.

Die Anzahl der erforderlichen Vergaberunden wird von der Qualität der Anträge abhängen und damit von der Frage, bis wann sich alle oben genannten Kompetenzdimensionen abdecken lassen. Eine komplette Vergabe im ersten Turnus ist nach Ansicht des Wissenschaftsrates nicht wünschenswert, da verschiedene Akteure voraussichtlich unterschiedlich viel Zeit zur Vorbereitung ihrer Anträge benötigen. Außerdem würde dies dazu führen, dass im Dekadenturnus alle Kompetenzzentren neu ausgeschrieben würden, was zu erheblicher und nicht wünschenswerter Instabilität im HPC-Bereich führen könnte. Nach jeweils neun Jahren und drei Evaluationen (vgl. B.V, S. 36) sollten die Profile eines Vergabeturnus neu ausgeschrieben werden.

|<sup>32</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Positionspapier zu Bedeutung und Weiterentwicklung von Simulation in der Wissenschaft, Dresden 11.07.2014 (Drs. 4032-14).

Abbildung 3: Zeitliches Szenario zur Einrichtung des NHR



### III.1 Verfahren zur Einrichtung des NHR

Nach Auffassung des Wissenschaftsrates liegt der Schlüssel zum Aufbau des NHR in der Einbindung von Zentren der Ebene 2 in das NHR. Diese ergänzen die Kompetenz der GCS-Zentren, die dem NHR in ihrer bisherigen Form und mit ihren bisherigen Aufgaben von Beginn an angehören sollten, da sie auf Ebene 1 bereits heute sehr erfolgreich eine nationale HPC-Infrastruktur zur Verfügung stellen.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt, interessierte Zentren der Ebene 2 über ein mehrstufiges wettbewerbliches Ausschreibungsverfahren für das NHR auszuwählen. |<sup>33</sup>

Die vorgeschlagene Finanzierung richtet sich an hochschulische sowie länderfinanzierte, vorrangig von Hochschulen genutzte Zentren. Darüber hinaus sollte die Struktur des NHR aber auch für außeruniversitäre Einrichtungen offen sein, die sich in geeigneter Form einbringen wollen.

Der Wissenschaftsrat empfiehlt, in einer ersten Ausschreibung zunächst die gesamte Breite des Feldes zu sondieren und Anträge für NHR-Zentren mit beliebigen Kompetenzprofilen zuzulassen. Dazu würde sich ein zweistufiges Verfahren in Anlehnung an das Programm Forschungsbauten anbieten. Dabei werden zunächst Skizzen eingereicht, die bei positiver Bewertung später zu Vollanträgen ausgearbeitet werden. Die insgesamt überzeugendsten Anträge sollten anschließend zur Förderung als NHR-Kompetenzzentren vorgeschlagen werden. Dabei sollte schon in dieser ersten Ausschreibung eine möglichst breite Abdeckung der Kompetenzfelder durch die NHR-Zentren angestrebt werden (vgl. B.III.2, S. 33). Die Förderung für die Kompetenzzentren sollte möglichst zeitnah nach der Ausschreibung beginnen.

Die folgenden Ausschreibungen sollten dann gezielt entlang der initial noch nicht abgedeckten Kompetenzfelder erfolgen. Sofern bereits existierende Einrichtungen diese in nicht hinreichender Breite abdecken, sollten auch Mittel in

|<sup>33</sup> Dieses Verfahren hat Ähnlichkeit zu dem Vorgehen, das die DFG 2001 bei der Einrichtung der DFG-Forschungszentren eingesetzt hat. Die ersten DFG-Forschungszentren wurden nach einer thematisch offenen Ausschreibung eingerichtet. Weitere Zentren folgten nach jeweils thematisch fokussierten Ausschreibungen teilweise mit einem Abstand von mehreren Jahren.



einem Umfang bereitstehen, die eine Neugründung eines NHR-Zentrums möglich machen.

Die Förderung eines NHR-Kompetenzzentrums sollte schon bei der Einrichtung des NHR nicht mehr an einzelne Beschaffungen gekoppelt werden, sondern in Form eines jährlichen Budgets erfolgen. Dieses Budget soll vom NHR-Zentrum selbst flexibel für Investitionen, Energiesparmaßnahmen oder Verbesserungen im Bereich Algorithmen und Software sowie Weiterentwicklung von Methodenkompetenzen eingesetzt werden können, unter der Maxime, die benötigte Rechenleistung für das jeweilige Anwendungsprofil mit möglichst niedrigen Gesamtkosten zu realisieren.

Für das NHR sollte ein Finanzvolumen vorgesehen werden, das es zulässt, dass Investitionen und Betriebskosten (Energie, bauliche Anpassungen, essentielles Betriebspersonal, Methodenkompetenz) komplett finanziert werden. Das Volumen müsste für die Zentren der Ebene 2 innerhalb des NHR damit ungefähr um den Faktor 2,5 größer sein als die heute im Rahmen der PSL im Programm FuG zur Verfügung stehende Summe (vgl. B.VI, S. 37). Dieser Faktor ergibt sich als Aufschlag auf die Investitionskosten für Betriebskosten (Energie, Kühlung und Umbauten) in etwa gleicher Höhe pro Jahr sowie Kosten für essentielles Personal (Service, Pflege von Systemsoftware, Leistungsoptimierung) in etwa halber Höhe der Investitionskosten.

### III.2 Im NHR abzudeckende Kompetenzfelder

Im Rahmen der Vergabeverfahren muss darauf geachtet werden, dass die Kompetenzzentren für das NHR gesamthaft eine Reihe von Kompetenzfeldern abdecken:

– **Anwendungskompetenz:** Hier lassen sich aus dem heutigen Anwenderprofil des HPC mehrere disziplinäre Schwerpunktbereiche identifizieren: die Lebenswissenschaften inklusive der Neurowissenschaften, die Ingenieurwissenschaften, die Physik, insbesondere Teilchen- und Astrophysik, die Chemie und Materialwissenschaften, die Erdsystemwissenschaften, *Digital Humanities*, Anwendungen in den Sozialwissenschaften sowie *High Performance Data Analytics* (vgl. A.IV.1, S. 13). Ein NHR-Kompetenzzentrum sollte über ausgewiesene Expertise in den für seinen Tätigkeitsbereich einschlägigen Wissenschaften verfügen. Der Wissenschaftsrat versteht diese Aufzählung als zukunfts offen und regt an, ggf. weitere zukünftig nötige Anwendungskompetenzen im Zuge der weiteren Ausschreibungen aufzunehmen.

– **Hardwarekompetenz:** Rechnerarchitekturen lassen sich grob in drei verschiedene Typen unterteilen: *distributed-memory parallelism*, *shared-memory parallelism* sowie *single-instruction-multiple-data (SIMD) parallelism*. Zwar existiert eine Vielzahl weiterer Architekturen, diese sind jedoch Hybridarchitekturen aus den genannten Typen. Diese Architekturen eignen sich jeweils besonders für spezifische Typen von Rechenaufgaben. Es muss sichergestellt werden, dass es für jeden dieser grundlegenden Architekturtypen mindestens ein führendes Kompetenzzentrum im NHR gibt. Darüber hinaus spielen große ex-

terne Datenspeicher aufgrund exponentiell wachsender Daten und des enormen Interesses an *Big-Data*-Analysen eine zunehmend wichtige Rolle. Auch aus diesem Bereich muss es mindestens ein Zentrum mit Spitzenkompetenz geben.

– **Softwarekompetenz:** Auch im Softwarebereich können verschiedene Kompetenzfelder unterschieden werden, darunter z. B. Betriebssystemsoftware, Compilertechnologie, Instrumentierung und Performanzanalyse, Simulationsnumerik, mathematische Softwarebibliotheken für numerische Rechnungen, etc. Das NHR muss so aufgestellt sein, dass es zu jedem Thema mindestens ein Zentrum gibt, das dazu Spitzenexpertise vorhält.

– **Algorithmenkompetenz:** Von zentraler Bedeutung für eine effiziente Nutzung von HPC-Systemen ist die Effizienz der eingesetzten Algorithmen. Dies umfasst Algorithmen für die im Kern vieler Simulationsverfahren liegenden numerischen Berechnungen, aber auch Verfahren zur Gittergenerierung, zum Lastausgleich oder zur Datenanalyse. Die algorithmische Ebene liegt gewissermaßen zwischen Anwendungen und Systemsoftware und nimmt somit eine Schlüsselstellung ein. Mindestens ein Zentrum im NHR sollte daher auf diesem Gebiet herausragende Expertise aufbauen; in gewissem Umfang sollte Algorithmenkompetenz aber an allen Zentren vorhanden sein.

Die genannten Kompetenzfelder greifen ineinander. Es wird daher erwartet, dass ein Zentrum mehrere Felder abdecken kann. Die Kompetenzprofile verschiedener NHR-Zentren können sich aber auch überlappen. Dennoch sollte jedes NHR-Zentrum über einen genuinen Fokus verfügen.

Eine genaue Festlegung auf eine Anzahl notwendiger Zentren erscheint dem Wissenschaftsrat ohne Kenntnis der konkreten Angebotsportfolios der Kandidaten-Zentren nicht sinnvoll. Er empfiehlt daher, die Beantwortung dieser Frage einem Ausschreibungs- und Entwicklungsprozess, wie im folgenden Abschnitt beschrieben, zu überlassen.

#### **B.IV GOVERNANCE**

---

Die Anlage des NHR als nationale Forschungsinfrastruktur muss sich auch in den Strukturen seiner *Governance* widerspiegeln. Diese umfasst die koordinierte Planung von Rechenkapazitäten, von Hardwarebeschaffung sowie die Koordination bei der Zuteilung von Rechenzeiten auf den jeweils geeignetsten Systemen nach einheitlichen und transparenten Kriterien.

Für die strategische Steuerung des NHR soll ab dem ersten Vergabeturnus ein Strategiausschuss als externes Gremium eingerichtet werden, das die langfristige-strategische Steuerung des NHR übernimmt. Zusätzlich soll es folgende Gremien der NHR-Zentren geben: der Lenkungsausschuss ist für die technische Planung und Koordination zwischen den NHR-Zentren zuständig, zentrenspezifische Auswahlausschüsse übernehmen, koordiniert durch einen NHR-weiten Nutzungsausschuss, die Begutachtung von Anträgen und die Vergabe von Re-

chenzeit. Entsprechende Strukturen bestehen schon heute im Rahmen des GCS und werden derzeit auch für die Ebene 2 aufgebaut. Der Wissenschaftsrat geht davon aus, dass auf bestehende erfolgreiche Modelle zurückgegriffen wird und die gemachten Erfahrungen im Rahmen des NHR genutzt werden.

#### IV.1 Strategieausschuss

Ab der von ihm durchgeführten initialen Ausschreibung erarbeitet der Strategieausschuss Empfehlungen zur Finanzierung und zur strategischen Weiterentwicklung des NHR. Seine Empfehlungen legt der Strategieausschuss der GWK zur Entscheidung vor. In seiner Verantwortung liegen auch Folgeausschreibungen sowie die Auswahl zukünftiger NHR-Zentren. Der Strategieausschuss beauftragt außerdem die regelmäßigen Evaluationen der Zentren und wertet sie aus. Eine Möglichkeit zur institutionellen Verankerung des Strategieausschusses wäre beispielsweise der Wissenschaftsrat.

Es wurde auch erwogen, den Strategieausschuss an den kürzlich etablierten Rat für Informationsinfrastrukturen anzugliedern, der die bestehenden Aktivitäten in Bereichen wie z. B. (Daten-)Sammlungen, Archiven und Fachinformationszentren besser aufeinander abstimmen soll. Dieser ist jedoch seinem ursprünglichen Aufgabenfeld gemäß für die Begleitung einer Vielzahl von Informationsinfrastrukturen ausgelegt und verfügt kaum über eine Schnittstelle zum HPC-Bereich oder zu strukturpolitischen Entscheidungen in diesem Feld. Durch die derzeit auf vier Jahre begrenzte Projektfinanzierung würde sich der Rat zudem kaum in die längerfristige Struktur des NHR einpassen.

Um seiner strategischen Lenkungsfunktion nachkommen zu können, sollte der Strategieausschuss paritätisch mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern und Vertreterinnen und Vertretern von Bund und Ländern besetzt sein. Dabei erscheint es dem Wissenschaftsrat geboten, dass die Ländervertreterinnen und -vertreter zumindest zur Hälfte aus Trägerländern von NHR-Zentren stammen.

Von den Vertreterinnen und Vertretern der Wissenschaft sollten zumindest zwei aus dem Ausland stammen. Der Wissenschaftsrat empfiehlt, neben einigen Nutzerinnen und Nutzern von HPC-Systemen (Fachwissenschaftlerinnen und Fachwissenschaftler) auch Expertinnen und Experten mit Kompetenz in der Algorithmen- und Methodenentwicklung in den Strategieausschuss zu berufen. Ebenso muss im Ausschuss Betreiberkompetenz für HPC-Systeme sowie Hardwarekompetenz vertreten sein.

Vertreterinnen und Vertreter von NHR-Zentren sollten von der Mitgliedschaft im Strategieausschuss ausgeschlossen sein, jedoch als Gäste zu den Sitzungen hinzugezogen werden können. Es empfiehlt sich daher, die Betreiberkompetenz über internationale Expertinnen und Experten in den Strategieausschuss einzubinden.

#### IV.2 Lenkungsausschuss der NHR-Zentren

NHR-Zentren erhalten finanzielle Planungssicherheit über ca. zehn Jahre und damit über zwei bis drei (Re-)Investitionszyklen. Um den Mehrwert des NHR

optimal ausnutzen zu können, sollten Art, Umfang und Zeitpunkt von Beschaffungen zwischen den NHR-Zentren koordiniert werden. Neben dieser Aufgabe obliegt dem gemeinsamen Lenkungsausschuss des NHR auch die weitere Koordination hinsichtlich der technischen und operativen Ausrichtung der NHR-Zentren. Im Rahmen des Lenkungsausschusses sollte ebenfalls die Verständigung auf standardisierte Definitionen von Daten liegen, die als Grundlage für Datenberichte die Evaluationen der NHR-Zentren aussagekräftig und vergleichbar machen.

Im Lenkungsausschuss sollten alle NHR-Zentren vertreten sein.

#### IV.3 Nutzungsausschuss und Auswahlausschüsse der NHR-Zentren

Die zeitnahe Auswahl der Anträge auf Rechenzeit an das NHR – allein auf Basis wissenschaftlicher Kriterien – ist die Hauptaufgabe eines gemeinsamen Nutzungsausschusses in Zusammenarbeit mit zentrenspezifischen Auswahlausschüssen. Der aus Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern zusammengesetzte Nutzungsausschuss setzt die Standards für das wissenschaftsgeleitete Auswahlverfahren. Er betreibt ein NHR-weites Zugangportal und koordiniert die Auswahlausschüsse an den NHR-Zentren. Außerdem nimmt dieser Ausschuss – in Absprache mit den einzelnen Zentren – die Zuweisung von Rechenprojekten zum jeweils geeignetsten Zentrum vor. Die Auswahlausschüsse sind für die wissenschaftliche Begutachtung und Auswahl der Anträge auf Rechenzeit zuständig. Die Auswahl und Zuteilung erfolgt auf Basis einheitlicher Standards sowohl nach fachlichen als auch nach methodischen Gesichtspunkten. Das gemeinsame Zugangportal stellt Transparenz über alle NHR-Ressourcen her.

Kernpunkte des Auswahl- und Zuweisungsprozesses sollten in einer Statistik dokumentiert werden, die dem Lenkungsausschuss und dem Strategieausschuss für die langfristige Planung zugänglich gemacht wird.

#### IV.4 Geschäftsstelle

Zur Unterstützung der Ausschüsse sollte das NHR wie heute schon das GCS und die GA über eine Geschäftsstelle verfügen.

### **B.V QUALITÄTSSICHERUNG**

---

Dem Wissenschaftsrat ist es ein Anliegen, dass mit der Einführung des NHR auch ein hohes Maß an interner Qualitätssicherung einhergeht, die sicherstellt, dass die erwarteten Verbesserungen für die HPC-Versorgung auch erreicht werden. Er empfiehlt darüber hinaus für die einzelnen NHR-Zentren ein regelmäßiges – allerdings vom Aufwand her überschaubares – Evaluationsregime im Abstand von drei bis fünf Jahren. Durch diese Taktung wird deutlich, dass Qualitätssicherung ein integrales Element des NHR ist.

Dieser Turnus erlaubt zudem eine personelle Kontinuität sowohl in den Kompetenzzentren als auch auf Seiten der Gutachterinnen und Gutachter, wodurch

eine engere inhaltliche Begleitung und Nachverfolgung vorangegangener Evaluationen möglich wird. Ein solcher Turnus reduziert ferner den Aufwand jeder einzelnen Evaluation, da größere Teile z. B. der Berichte weiterhin Gültigkeit behalten und sich das Verfahren für die Zentren insgesamt besser standardisieren lässt.

Wichtiges Ziel der Evaluationen ist es, kontinuierlich zu prüfen, ob ein Zentrum seine Kompetenzfelder hinreichend abdeckt und die hier formulierten Aufgaben (vgl. B.II) eines NHR-Zentrums erfüllt.

Angesichts der Schwierigkeiten, die bei der schriftlichen Befragung im Vorfeld dieser Empfehlungen zu Tage getreten sind (vgl. A.V.3, S. 19), vergleichbare Auslastungs- und Nutzungsdaten zu erhalten, hält es der Wissenschaftsrat für unabdingbar, dass sich alle beteiligten Zentren im Zuge des Evaluationsprozesses auf eine Reihe von Daten und deren Definitionen verständigen, die auch eine Vergleichbarkeit der erbrachten Leistungen zwischen den Zentren zulassen und geeignet sind, die Aktivitäten der NHR-Zentren adäquat zu beschreiben. Aus standardisierten Daten lassen sich wertvolle Ansatzpunkte für Evaluationen gewinnen, die gleichzeitig dazu beitragen, den Aufwand der Berichtslegung zu reduzieren. |<sup>34</sup> Im Rahmen eines Nationalen Hoch- und Höchstleistungsrechnens sind die Kompetenzzentren Dienstleister für ihre Nutzerinnen und Nutzer. Auch die Erfassung der Nutzereinschätzungen zu den erbrachten Dienstleistungen sollte daher kontinuierlich erfolgen und ihre Auswertung Gegenstand der Evaluationen sein.

Nach dem angestrebten Förderhorizont von etwa zehn Jahren liegt eine solide Datenbasis vor, die eine Entscheidung über den Verbleib eines Kompetenzzentrums in der Nationalen HPC Infrastruktur ermöglicht. Sollten in den ersten beiden Evaluationen die Leistungen eines NHR-Zentrums kritisch beurteilt werden, so wäre die dritte Evaluation im Rahmen der Ausschreibung zur Neuvergabe von entscheidender Bedeutung für einen Verbleib dieses Zentrums als Teil der nationalen Infrastruktur NHR.

## **B.VI FINANZIERUNG**

---

Die bisher vorgelegten Empfehlungen haben sich bewusst auf inhaltliche und strukturelle Aspekte eines künftigen NHR beschränkt. Der Wissenschaftsrat hat diese Darstellung gewählt, um aus den inhaltlichen Desideraten einen geeigneten Finanzierungsvorschlag ableiten zu können. Der Wissenschaftsrat bittet Bund und Länder, sich auf eine geeignete Ausgestaltung der Finanzierung zu verständigen, die die vorgeschlagene, leistungsfähige Form eines NHR in einer dem nationalen Anspruch entsprechenden gemeinschaftlichen Finan-

| <sup>34</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen für einen Kerndatensatz Forschung, Berlin 25.01.2013 (Drs. 2855-13).

zierung nachhaltig absichert. Als Beginn für das NHR schlägt der Wissenschaftsrat das Jahr 2018 vor.

Der Wissenschaftsrat bekräftigt seine Empfehlung, dass für die Finanzierung von Infrastrukturen die Gesamtkosten (*total cost of ownership*) heranzuziehen sind. |<sup>35</sup> Um die oben identifizierten Herausforderungen (vgl. A.IV, S. 13) anzugehen, sollten die nachfolgenden Kostenarten bei der Finanzierung eines NHR berücksichtigt werden: Neben den Investitionskosten, die auch heute schon Gegenstand der Förderung sind, sollten angesichts der zunehmenden Bedeutung von Betriebskosten auch die Kosten für Energie und essentielles Betriebspersonal unbedingt mit abgedeckt sein. Ferner erfordert die Umrüstung von HPC-Systemen häufig bauliche Maßnahmen (z. B. ein neues Kühlsystem), weswegen diese auch weiterhin von der Förderung abgedeckt sein sollten. Schließlich sollten Mittel für die Bereitstellung von Methodenkompetenz gefördert werden, um die mit diesen Kompetenzen einhergehenden Effizienzgewinne nachhaltig nutzbar zu machen.

Die identifizierten Finanzierungsbedarfe erfordern eine institutionelle Förderung der einzurichtenden NHR-Zentren, die durch die zu Beginn des Jahres 2015 erfolgte Änderung des Art. 91b GG ermöglicht wird.

Das für die Zentren der Ebene 2 innerhalb des NHR zur Verfügung stehende Finanzvolumen sollte – im Hinblick auf diese genannten abzudeckenden Kostenarten – um den Faktor 2,5 höher sein als die heute für die Hochleistungsrechner im Programm FuG zur Verfügung stehenden Mittel.

#### VI.1 Allgemeine Desiderate

Der Wissenschaftsrat erachtet es für elementar, dass die Hochschulen sowie länderfinanzierte und vorrangig von Hochschulen genutzte Zentren weiterhin wichtige Akteure beim Betrieb und der Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland bleiben. Deshalb müssen sie an den zu etablierenden Kompetenzzentren beteiligt sein. Nur auf diese Weise können die aufgebauten Kompetenzen, insbesondere in der Methodik, auch in die Aus- und Weiterbildung einfließen. Ebenso ist es wünschenswert, dass ihre Träger, die Länder, in die Finanzierung der HPC-Infrastruktur mit eingebunden bleiben.

Schon heute ist erkennbar, dass eine zunehmende Zahl von Wissenschaftsbereichen rechnergestützte Anwendungen nutzen wird. Dabei werden zwar keinesfalls alle auf die Unterstützung durch HPC angewiesen sein, dennoch werden die Anforderungen an das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland in den kommenden zehn Jahren weiter steigen. Der Wissenschaftsrat geht davon aus, dass die für die Finanzierung bereitstehenden Mittel sich diesen Entwicklungen anpassen.

| <sup>35</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Empfehlungen zu Forschungsinfrastrukturen, Köln 2011, S. 43.

Angesichts der Leistungen des GCS in den letzten Jahren sollten die für das GCS bereitstehenden Mittel auch über 2017 hinaus im bisherigen Umfang verlängert werden. Die gegenwärtigen Aufgaben und die finanzielle Ausstattung des GCS sollen nach Auffassung des Wissenschaftsrates zunächst auch im Rahmen des NHR fortbestehen. Sobald eine stabile Finanzierung des NHR gefunden ist und das oben vorgeschlagene Auswahlverfahren für mindestens eine Förderperiode von zwei bis drei (Re-)Investitionszyklen (also ca. zehn Jahre) etabliert wurde, empfiehlt der Wissenschaftsrat, aus Gründen der Systematik und der Gleichbehandlung, alle Zentren des NHR – und damit auch das GCS – auf eine gemeinsame Finanzierungsgrundlage zu stellen.

### VI.3 Schaffung einer Finanzierungsgrundlage

Der Wissenschaftsrat empfiehlt Bund und Ländern, für die Schaffung der finanziellen Grundlagen des NHR ein Verwaltungsabkommen zu schließen.

Im Rahmen dieses Verwaltungsabkommens sollte eine Finanzierung durch Bund und Trägerländer bzw. auch mit Beteiligung anderer Länder angestrebt werden.

Für die heute schon bestehenden Zentren der Ebene 1 empfiehlt der Wissenschaftsrat, die bewährten Finanzierungsschlüssel weiterhin beizubehalten.

Der Wissenschaftsrat würdigt das Engagement der Trägerländer von HPC-Zentren nachdrücklich und appelliert an die Gemeinschaft der Länder, den nationalen Anspruch des NHR auch in der Finanzierung Niederschlag finden zu lassen.

Als zentrale Infrastrukturen sollten HPC-Zentren auch aufgrund der Einheit von Forschung und Lehre sowie ihrer fachlichen Breite schwerpunktmäßig an hochschulischen sowie länderfinanzierten und vorrangig von Hochschulen genutzten Zentren angesiedelt sein.

Die Mittel für das NHR sollten nach Einschätzung des Wissenschaftsrates getrennt von jenen für das Programm FuG bereitgestellt werden.

Neben der Finanzierung über ein Verwaltungsabkommen hat der Wissenschaftsrat auch die Möglichkeiten erörtert, das NHR über ein Gebührenmodell oder im Zuge der „Nationalen Roadmap“ zu finanzieren. Beide Lösungen mussten allerdings verworfen werden, da ein Gebührenmodell erheblichen Mehraufwand bei der Begutachtung und substantielle finanzielle Unwägbarkeiten mit sich bringt. Die Nationale Roadmap andererseits ist nicht für Infrastrukturen angelegt, die einen so kurzen Investitionszyklus haben, wie dies bei HPC-Systemen der Fall ist (ausführlicher vgl. S. 44).

Der Wissenschaftsrat empfiehlt in den vorliegenden Empfehlungen, ein Nationales Hoch- und Höchstleistungsrechnen aufzubauen, das aus den bestehenden Zentren der Ebene 1 und einigen Zentren der Ebene 2 besteht. Es sind aber auch andere Optionen denkbar, die der Wissenschaftsrat im Zuge seiner Beratungen geprüft, aber als ungeeignet verworfen hat. Sie werden im Folgenden kurz dargestellt.

#### VII.1 Beibehaltung des Status Quo

Angesichts der Erfolge, die in den vergangenen Jahren im Rahmen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens erreicht werden konnten – vor allem der Aufbau des GCS – könnte erwogen werden, den Status Quo fortzuführen. Inhaltliche Gründe ließen sich dafür jedoch, angesichts der in Teil A dargelegten Kritikpunkte, nicht benennen. Insbesondere spricht dagegen, dass durch die derzeitige Vergabe im Rahmen des Programms FuG Möglichkeiten zu einer kosteneffizienten Nutzung der Infrastruktur durch Koordination bei Beschaffung und der Zuteilung von Anträgen zwischen Zentren ungenutzt bleiben und keine nachhaltige Methodenkompetenz aufgebaut werden kann. Angesichts der zunehmenden finanziellen Belastungen durch steigende Betriebskosten, der Notwendigkeit, attraktive Strukturen für qualifiziertes Personal zu schaffen und der Notwendigkeit, HPC-Kompetenzen einem beständig wachsenden Nutzerkreis zugänglich zu machen, erscheint es daher sachlich geboten, andere Lösungswege zu suchen. Auch die übergreifende nationale Koordination und damit verbesserte internationale Anschlussfähigkeit sind wichtige Gründe für eine eigene Förderung.

#### VII.2 Verlagerung der Ebene 2 in die Ebene 1

Eine weitere Option wäre die Integration der Ebene 2 in die Ebene 1. Dabei würden die Zentren des GCS weiter ausgebaut, um auch die Bedarfe der Anwenderinnen und Anwender der Ebene 2 bedienen zu können. Nationaler Zugang und ein kompetitives Auswahlverfahren wären gewährleistet. Die Zentren der Ebene 1 könnten zudem erhebliche Skaleneffekte erzielen, da sie bei der Beschaffung von Hardware größere Investitionen auf einmal tätigen könnten. Auch die Betriebskosten ließen sich reduzieren, da in größeren Rechenzentren u. a. eine energieeffizientere Kühlung möglich ist. Die *total-cost-of-ownership*, die derzeit auf Ebene 1 schon berücksichtigt ist, ließe sich bei einem derartigen Vorgehen möglicherweise auch auf die Ebene-2-Kapazitäten übertragen.

Methodische Kompetenz wäre in diesem Szenario allerdings in der geographischen Breite nicht mehr verfügbar. Ebenso ist für die Unterstützung von Anwenderinnen und Anwendern der Ebene 2 zum Teil andere Kompetenz nötig (z. B. in der *Balance Capability vs. Capacity Computing*) als diese auf Ebene 1 vorhanden ist. Zudem stünde zu befürchten, dass die derzeit auf Ebene 2 schon vorhandene Kompetenz durch die geographische Umstrukturierung verloren



ginge. Auch darf die Bereitschaft der Länder nicht überbewertet werden, sich an einem System von Mischfinanzierungen zu beteiligen, das für den Aufbau weniger nationaler Zentren des Hoch- und Höchstleistungsrechnens Voraussetzung wäre. Aus inhaltlicher Sicht wäre schließlich die Kompetenzkluft, die zwischen Ebene 1 und Ebene 3 entstünde, vorhersehbar ein Hemmnis für wissenschaftlichen Fortschritt.

### VII.3 Verlagerung der Ebene 2 in die Ebene 3

HPC-Beschaffungen im Programm FuG erfolgen oft in mehreren Stufen, die z. T. unter 5 Mio. Euro liegen - wie bei Großgeräten der DFG - oder wenig darüber. Dies könnte als Hinweis darauf gewertet werden, dass leistungsfähigere Rechensysteme der Ebene 2 auf dieselbe Art gefördert werden könnten wie bislang die Ebene 3. Gegebenenfalls müsste für diese Option erwogen werden, das Finanzierungsvolumen pro HPC Investition über 5 Mio. Euro hinaus auszuweiten.

Auch diese Option brächte gegenüber dem Status Quo kaum Vorteile, da Methodenkompetenz, Beschaffungskoordination und nationaler Zugang nicht gewährleistet werden könnten. Auch bei diesem Modell entstünde das Problem einer Kompetenzkluft: Ohne eine überbrückende Ebene 2 würde die Übertragung von Projekten der Ebene 3 zu Ebene 1 erschwert und somit die Entwicklung neuer bzw. die Verbesserung bestehender Anwendungen verhindert. Der Wissenschaftsstandort Deutschland kann auf einen Wissens- und Methodentransfer zwischen den Ebenen nicht verzichten. Auch eine Mitfinanzierung der Betriebskosten im Sinne eines *total cost of ownership*-Ansatzes wäre in diesem Modell unmöglich. Ebenso wäre nicht sichergestellt, dass – angesichts der notwendigen Einzelanträge für jede Ausbaustufe – tatsächlich der gesamte Hochleistungsrechner in vollem Umfang gefördert würde.

## **B.VIII WEITERE EMPFEHLUNGEN**

---

Jenseits der bereits genannten spricht der Wissenschaftsrat folgende Empfehlungen aus:

Hinsichtlich der Rolle der Rechenzentren der außeruniversitären Forschungseinrichtungen befürwortet der Wissenschaftsrat eine Fortschreibung der bestehenden Finanzierungsstrukturen. Er wiederholt aber auch, dass eine Einbindung von themenoffenen Zentren |<sup>36</sup> der außeruniversitären Forschungseinrichtungen in das NHR wünschenswert wäre.

Auch die Zentren der Ebene 3 sollten neben anderen Aufgaben eine geeignete Basis für den Test von Anwendungen bieten, die gegebenenfalls auf Rechensysteme höherer Leistungsklassen skaliert werden können. Aus diesem Grund

| <sup>36</sup> Zentren, die nicht thematisch dediziert sind.

ist eine Integration der Hochschulrechner in die jeweilige regionale HPC-Infrastruktur auch mit höheren Leistungsklassen sinnvoll. Der Wissenschaftsrat verweist darauf, dass Konzepte, wie beispielsweise bwHPC in Baden-Württemberg, ein geeigneter Weg sind, um die Ebene 3 besser zu integrieren. Er regt zudem an, vergleichbare Mechanismen der Koordination auch in andere regionale Kontexte zu übertragen. |<sup>37</sup> Das Ziel sollte dabei sein, dass für Nutzerinnen und Nutzer die Schwelle zwischen Zentren der Ebene 3 und den NHR-Zentren einfach zu überqueren ist.

Keinen Anpassungsbedarf sieht der Wissenschaftsrat hinsichtlich der rein wettbewerblichen Finanzierung der Ebene 3, insbesondere des Programmteils Großgeräte im Programm FuG der DFG. Allerdings stellen steigende Betriebskosten auch für die Betreiberinnen und Betreiber von kleineren Rechnern eine Herausforderung dar. Die Länder als Zuwendungsgeber sollten daher prüfen, wie auch hier Entlastungen der Trägereinrichtungen ermöglicht werden können.

Nach Auffassung des Wissenschaftsrates ist eine weitere Öffnung der NHR-Zentren für die HPC-Nutzung durch die Industrie anzustreben. Dies betrifft insbesondere die Ausdehnung der bei Zentren der Ebenen 0 und 1 gängigen Praxis, auch Anträge aus der Industrie bzw. Anträge unter Beteiligung industrieller Partner zuzulassen. Sie unterliegen damit denselben Qualitäts- und Auswahlkriterien wie die Anträge wissenschaftlicher Nutzerinnen und Nutzer. Eine darüber hinausgehende kommerzielle Nutzung der NHR-Zentren auch für Forschung und Entwicklung im wettbewerblichen Bereich unter Anwendung marktüblicher Gebühren (Beauftragung anstelle von Beantragung) wäre als wichtiger Standortfaktor für die nationale und europäische Industrie zu begrüßen, ist aber mit dem geltenden Haushaltsrecht der Länder nur eingeschränkt umzusetzen. Der Wissenschaftsrat empfiehlt, dies bei der Abstimmung des unter VI.3 vorgeschlagenen Verwaltungsabkommens einzubeziehen.

|<sup>37</sup> Hartenstein, H.; Walter, T. und Castellaz, P.: Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste, in: PIK - Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation, 36(2), 2013. S. 99-108. DOI: 10.1515/pik-2013-0007.

---

# Anhang

<b>Alternative Finanzierungsmodelle</b>	<b>44</b>
<b>Überblick über Hochleistungsrechenzentren in Deutschland (Mitgliedschaft in der Gauß-Allianz)</b>	<b>46</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>51</b>
<b>Glossar</b>	<b>53</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>54</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>55</b>

#### Finanzierung über Gebühren

Als alternative Finanzierungsoption hat der Wissenschaftsrat auch die Möglichkeit geprüft, pauschalisierte Betriebskosten für HPC-Systeme über Gebühren zu finanzieren. Ein vergleichbares Vorgehen gibt es z. B. bei Großgeräten in der Meeresforschung, auf die sich die entsprechende Fachcommunity mit der DFG verständigt hat; ähnliche Vereinbarungen gibt es auch bei Elektronenmikroskopen. Technisch handelt es sich dabei immer um projektbezogene Ergänzungskosten. Die Grundbetriebskosten werden auf diese Weise nicht mit abgedeckt. Damit kann diesem Wege auch kein essentielles Betriebspersonal finanziert werden.

Während die genannten Probleme prinzipiell aber durch eine kluge Berechnung der zu deckenden Kosten lösbar wären, entstünde dadurch ein beachtlicher zusätzlicher Begutachtungsaufwand. Der Grund dafür ist, dass neben der fachwissenschaftlichen Begutachtung eine separate Einschätzung der anfallenden Rechenkosten durchgeführt werden müsste. Diese kann nicht von Fachwissenschaftlerinnen und Fachwissenschaftlern erbracht werden, die einen Antrag z. B. bei der DFG inhaltlich begutachten. Hinzu tritt die Schwierigkeit, dass eine solche Kostenschätzung erst dann möglich wäre, wenn entschieden ist, auf welchem System eine Rechnung laufen wird. Schon heute unterscheiden sich diese Kosten zwischen einzelnen Zentren; wenn – wie im NHR – auch noch eine verstärkte Durchlässigkeit zwischen den Ebenen gewünscht ist, nehmen die Unwägbarkeiten zu. Es entstünde so ein erheblicher Mehraufwand, der dazu führen könnte, dass bei der Bewilligung noch nicht abschätzbar ist, in welchem Umfang ein Projekt gefördert werden kann oder muss.

Auch zeigt der internationale Vergleich, dass ein derartiges Verfahren weder beim europäischen PRACE noch z. B. in den USA zum Einsatz kommt. Schließlich gibt der Wissenschaftsrat zu bedenken, dass die Betriebskosten bei HPC ungleich höher sind als z. B. bei einem Elektronenmikroskop. Angesichts der Tatsache, dass die Masse der Anträge aus öffentlichen Fördermitteln finanziert werden, würde dies vermutlich bspw. den DFG Haushalt binnen kurzer Zeit überlasten. Eine gebührenförmige Mitfinanzierung der Betriebskosten stellt daher nach Einschätzung des Wissenschaftsrates keine tragfähige Finanzierungslösung dar.

#### Integration in die Nationale Roadmap für Forschungsinfrastrukturen

Das NHR bzw. einzelne Zentren könnten auch als Teil der Nationalen Roadmap finanziert werden. Die Kriterien für eine Aufnahme in die Roadmap machen

deutlich, dass HPC Systeme als weitestgehend passfähig erachtet werden können: |<sup>38</sup>

1 – Forschungsinfrastrukturen sind von nationaler strategischer Bedeutung für das jeweilige Wissenschaftsgebiet. Sie werden nicht nur von den Trägerorganisationen genutzt, sondern stehen in einem erheblichen Umfang auch externen (internationalen) Nutzerinnen und Nutzern zur Verfügung. Forschungsinfrastrukturen von nationaler Bedeutung leisten zudem auch wichtige Beiträge zur Ermöglichung von Spitzenforschung in den jeweiligen Forschungsfeldern.

2 – Forschungsinfrastrukturen zeichnen sich durch eine lange Lebensdauer (in der Regel über zehn Jahre) aus.

3 – Forschungsinfrastrukturen erfordern bedeutende Investitions- und/oder Betriebskosten, deren nationaler Anteil sich in der Regel mindestens auf Gesamtkosten von über 15 Mio. Euro in den ersten zehn Jahren aus öffentlichen Mitteln beläuft.

4 – Die Steuerung der Nutzung von Forschungsinfrastrukturen erfolgt über die Bewertung der wissenschaftlichen Qualität der beantragten Projekte in einem wissenschaftsgeleiteten und transparenten Begutachtungsverfahren mit externen Gutachterinnen und Gutachtern (*peer review*).

Vor allem hinsichtlich der Lebensdauer von HPC Systemen von drei bis fünf Jahren wäre allerdings die Nationale Roadmap nicht ideal. Die unterschiedlichen Trägerstrukturen der HPC-Zentren lassen eine Berücksichtigung in einer Nationalen Roadmap darüber hinaus problematisch erscheinen, da so für jedes Zentrum unterschiedliche Finanzierungsmodelle entwickelt werden müssten. Weiterhin erfordert das NHR ein hohes Maß an Kooperation zwischen den einzelnen Zentren, auch hierfür ist die Nationale Roadmap nicht ausgelegt. Schließlich erscheint die Nationale Roadmap als Finanzierungsmechanismus für das NHR wenig geeignet, da aufgrund des Wettbewerbs mit Nicht-HPC-Projekten nicht sichergestellt werden könnte, dass eine hinreichende Zahl von Zentren finanziert werden könnte.

|<sup>38</sup> Vgl. Wissenschaftsrat: Bericht zur wissenschaftsgeleiteten Bewertung umfangreicher Forschungsinfrastrukturvorhaben für die Nationale Roadmap (Pilotphase), Köln 2013; S. 11-13. Vgl. auch: Wissenschaftsrat: Konzept für eine wissenschaftsgeleitete Bewertung umfangreicher Forschungsinfrastrukturvorhaben für eine Nationale Roadmap (Pilotphase), Drs. 1766-11, Köln, 2011.

## Überblick über Hochleistungsrechenzentren in Deutschland (Mitgliedschaft in der Gauß-Allianz)

Name	Standort	Betreiber	Neuestes E2 System	Thematische und methodische Schwerpunkte
Rechen- und Kommunikationszentrum der RWTH Aachen	Aachen	Uni	2011	Ingenieurwissenschaften, Naturwissenschaften, Mathematik an der Schnittstelle zu Informationstechnologien.  Methodische Schwerpunkte: besonders im Bereich der Visualisierung, Performanceanalyse, automatische Korrektheitsanalyse, Parallelprogrammierparadigmen sowie Energie-Effizienz und TCO im HPC.
Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)	Berlin, Hannover	Sonstige (HLRN Länderverbund)	2012	Ozeanographie, Geowissenschaften, Meteorologie und Klimaforschung, Physik; insbesondere Teilchen-, Astro- und Festkörperphysik, Chemie, Ingenieurwissenschaften; insbesondere Windenergie, Schiff- und Flugzeugbau, Küsteningenieurwesen, Materialwissenschaften, Medizin- und Bioinformatik.  Methodische Schwerpunkte: Skalierbare Algorithmen für ManyCore und GPU, Analyse und Management sehr großer Datenmengen, <i>in situ</i> Datenanalyse und Visualisierung, hochskalierende Verfahren, schnelle PDE-Löser, parallele Datenassimilation, zukunftsorientierte Programmierparadigmen, energieoptimierte HPC-Anwendungen, Risikovorhersage in Echtzeit.
Forschungszentrum Computational Engineering (CE) Technische Universität Darmstadt	Darmstadt	Uni	2014	Ingenieurwissenschaften und Naturwissenschaften. Methodische Schwerpunkte: Software-Entwicklung, Methoden zur Analyse und Modellierung von Programmleistungsmetriken, portable Programmiermethodiken für hybride Architekturen und domain-spezifische Lösungsansätze.

Name	Standort	Betreiber	Neuestes E2 System	Thematische und methodische Schwerpunkte
Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH) der TU Dresden	Dresden	Uni	2013	Life Sciences.  Methodische Schwerpunkte: Skalierbare Software-Werkzeuge zur Unterstützung der Anwendungsoptimierung auf HPC-Systemen; Datenintensives Rechnen und <i>Data Life Cycle</i> ; Leistungs- und Energieeffizienz-Analyse für innovative Rechnerarchitekturen; verteiltes Rechnen und <i>Cloud Computing</i> ; Datenanalyse, Methoden und Modellierung; Parallele Programmierung, Algorithmen und Methoden.
Regionales Rechenzentrum Erlangen (RRZE)	Erlangen	Uni	2013	Methodische Schwerpunkte: <i>Performance Engineering</i> ; Hardware-effiziente Löser für dünn besetzte Matrixprobleme; Hardware-effiziente Lattice-Boltzmann basierte CFD-Löser
Goethe-Zentrum für Wiss. Hochleistungsrechner (G-CSC) der Universität Frankfurt am Main	Frankfurt am Main	Uni	2011	Physik der elementaren und komplexen Materie, Klima und Biodiversität, Quantenchemie, Bioinformatik, Hirnforschung.  Methodische Schwerpunkte: Architektur für Hochleistungsrechner, Software Entwicklung für moderne Prozessorarchitekturen, GPU und Datenverarbeitung in Hochratenexperimenten sowie die Entwicklung robuster Algorithmen zur Lösung partieller Differentialgleichungen.
Max Planck Computing and Data Facility (ehem. Rechenzentrum Garching (MPCDF)	Garching	AUF	2013	u. a. Astrophysik, Plasmaphysik, Materialforschung und Lebenswissenschaften.

Name	Standort	Betreiber	Neuestes E2 System	Thematische und methodische Schwerpunkte
Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDC)	Göttingen	Uni/AUF	2013	u. a. Astrophysik, Chemie.  Methodische Schwerpunkte: Parallelisierung von Algorithmen, Management von Forschungsdaten. Die GDWG betreibt eigenen Angaben zufolge derzeit drei Systeme der Ebene 3.
Deutsches Klimarechenzentrum (DKRZ)	Hamburg	Uni/AUF	2009	Klimatologie und den mit der Klimatologie unmittelbar verwandte Disziplinen (Geowissenschaften, Physik) Methodische Schwerpunkte: besonders Anwendungsunterstützung und Datenmanagement
Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY)	Hamburg	AUF	2010	Hochenergiephysik, Astroteilchenphysik, Theoretische Physik und Forschung mit Photonen
Steinbuch Centre for Computing des KIT (SCC)	Karlsruhe	Uni/AUF	2010	Teilchenphysik, darüber hinaus Mix aus Anwendungen mit Schwerpunkten (im künftigen ForHLR) in Umweltforschung, Energieforschung, Nanostrukturen und -technologien sowie Materialwissenschaften Methodische Schwerpunkte: vier Sim Labs zu den Themen Energie, NanoMikro, Elementar- und Astroteilchenphysik sowie Klima.
Regionales Rechenzentrum Köln (RRZK)	Köln	Uni	k. A.	Lebenswissenschaften, Chemie  Das RRZK ist nach eigenen Angaben auf Ebene 3 am Übergang zu Ebene 2 angesiedelt.
Johannes Gutenberg-Universität	Mainz	Uni	2013	Physik, Chemie, Biologie, Informatik und Medizin



Name	Standort	Betreiber	Neuestes E2 System	Thematische und methodische Schwerpunkte
Deutscher Wetterdienst (DWD)	Offenbach	Sonstige	2011	Operationelle Wettervorhersage sowie meteorologische Forschung und Entwicklung.
Paderborn Center for Parallel Computing (PC <sup>2</sup> )	Paderborn	Uni	2013	k. A.  Das PC2 ist nach eigenen Angaben auf Ebene 3 am Übergang zu Ebene 2 angesiedelt.

Quelle: Wissenschaftsrat nach Angaben der Zentren.



---

BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
CE	Forschungszentrum Computational Engineering (TU Darmstadt)
CFD	Computational Fluid Dynamics
DESY	Deutsches Elektronen-Synchrotron
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DFN	Deutsches Forschungsnetz
DKRZ	Deutsches Klimarechenzentrum
DWD	Deutscher Wetterdienst
ESFRI	European Strategy Forum on Research Infrastructures
F&E	Forschung und Entwicklung
FAIR	Facility for Antiproton and Ion Research
FLOP	Floating Point Operation, Gleitkommaoperation
G-CSC	Goethe-Zentrum für wissenschaftliches Hochleistungsrechnen
GA	Gauß Allianz
GCS	Gauss Centre for Supercomputing
GG	Grundgesetz
GPU	Graphics Processing Unit
GSI	Helmholtz-Zentrum für Schwerionenforschung
GWDG	Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen mbH
GWK	Gemeinsame Wissenschaftskonferenz
HLRN	Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen
HLRS	Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart
HPC	High Performance Computing
HPDA	High Performance Data Analytics
HS	Hochschulen
JSC	Jülich Supercomputing Centre
MPCDF	Max Planck Computing and Data Facility

	(ehm. Rechenzentrum Garching)
LRZ	Leibniz Rechenzentrum, München
NHR	Nationales Hoch- und Höchstleistungsrechnen
PC <sup>2</sup>	Paderborn Center for Parallel Computing
PRACE	Partnership for Advanced Computing in Europe
Programm FuG	Programm zur „gemeinsamen Förderung von Forschungsbauten an Hochschulen einschließlich Großgeräten“ gemäß Art. 91 b GG
PSL	Programmatisch-strukturelle Linie Hochleistungsrechnen (im Programm FuG)
RRZE	Regionales Rechenzentrum Erlangen
RRZK	Regionales Rechenzentrum Köln
RRZN	Leibniz Universität IT Services, Hannover (ehm. Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen)
SCC	Steinbuch Centre for Computing (am KIT, Karlsruhe)
SciDAC	Scientific Discovery through Advanced Computing
SIMD	Single instruction multiple data
TCO	Total Cost of Ownership
XSEDE	Extreme Science and Engineering Discovery Environment
ZIB	Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, Berlin
ZIH	Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen, Dresden

*Application Scaling* bezeichnet die Portierung von Anwendungen auf Rechner mit größeren Prozessor bzw. Core Zahlen.

*Capability Computing* beschreibt die Nutzung von HPC Ressourcen für einzelne große Anwendungen.

*Capacity Computing* beschreibt die Nutzung von HPC Ressourcen für eine sehr große Zahl einzelner sich wiederholender Anwendungen.

*Capability Test Computing* bezeichnet das systematische Testen und Optimieren komplexer Rechenprogramme v.a. hinsichtlich der Skalierbarkeit, bevor lange Rechnungen auf vielen Prozessoren der höchsten Leistungsklasse gestartet werden.

*Exascale Computing* beschreibt Rechensysteme, die mindestens ein exaFLOP, also mindestens eine Milliarde Gleitkommaoperationen, pro Sekunde berechnen können.

*High Performance Data Analytics* bezeichnet graphenbasierte Analyseverfahren, bei denen Daten nicht mit einer vorgegebenen Fragestellung nach festen Mustern durchsucht werden, sondern ohne feste Fragestellung nach Mustern in den Daten geforscht wird. Um diese Aufgaben rechentechnisch zu lösen bedarf es eng gekoppelter HPC-Systeme.

Abbildung 1:	Zentren der Ebenen 1 und 2	17
Abbildung 2:	Klassifikation der HPC-Zentren der Gauß-Allianz	18
Abbildung 3:	Zeitliches Szenario zur Einrichtung des NHR	32

**Tabellenverzeichnis**

---

Tabelle 1:	Mittel des Bundes für die Projektförderung des Höchstleistungsrechnens der Ebene 1 (Tsd. €)	23
Tabelle 2:	Mittel für Investitionen in Hochleistungsrechner nach Art. 91 b GG seit 2007 (Tsd. €)	24