

**Bericht
über die Tätigkeiten des
Nationalen Koordinierungsausschusses
zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern**

<u>Inhalt</u>	<u>Seite</u>
Vorbemerkung	3
A. Zur Einrichtung des Ausschusses	5
A.I. Begründung für die Einrichtung des Ausschusses.....	5
A.II. Zusammensetzung des Ausschusses	6
A.III. Aufgaben des Ausschusses.....	7
B. Zur Bewertung des Ausschusses	11
B.I. Zur Umsetzung der Aufgaben.....	11
B.II. Zur Zusammensetzung des Ausschusses	12
B.III. Zur Zukunft des Ausschusses.....	12
C. Empfehlungen	15
D. Anhang I	16
E. Anhang II	17
F. Anhang III: HPC-Aktivitäten im nationalen und europäischen Umfeld 2006/2007	18
F.I. Gauß-Centrum für Supercomputing.....	18
F.II. HPC-Allianz	19
F.III. Aktivitäten auf europäischer Ebene	21

Vorbemerkung

Der Wissenschaftsrat hat sich in seiner „Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern“ vom Mai 2000¹ für die Einrichtung eines nationalen Koordinierungsausschusses zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern ausgesprochen. Der Ausschuss konstituierte sich im Mai 2001. Der Wissenschaftsrat empfahl, nach einer Erprobungsphase von fünf Jahren erneut über Aufgaben und Funktionen dieses Ausschusses zu beraten.

Zur Vorbereitung dieser Beratung im Wissenschaftsrat wurde der folgende Bericht vom Koordinierungsausschuss erarbeitet. In den Bericht flossen auch Antworten auf einen Fragebogen ein (siehe Anhang I), der an Bund, Länder und Wissenschaftsorganisationen sowie die Mitglieder und Gäste des Ausschusses gerichtet war.

Der Wissenschaftsrat hat den Bericht am 9. November 2007 zustimmend zur Kenntnis genommen.

1 Wissenschaftsrat: Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, S. 229-261, Köln 2001

A. Zur Einrichtung des Ausschusses

A.I. Begründung für die Einrichtung des Ausschusses

In der Empfehlung des Wissenschaftsrates zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern aus dem Jahr 2000 werden folgende Begründungen für die Einrichtung des Koordinierungsausschusses genannt:

„Die Dynamik im Bereich des Höchstleistungsrechnens, die ihren Ausdruck u. a. im exponentiellen Leistungsanstieg der Spitzenrechner und der Algorithmenentwicklung findet, sowie die Bedeutung des Höchstleistungsrechnens für die internationale Wettbewerbsfähigkeit der nationalen Spitzenforschung machen eine strategische Abstimmung der nationalen Beschaffungen erforderlich. Dies wird besonders deutlich, wenn man die Finanzierungsverpflichtungen des Bundes betrachtet, denen eine abgestimmte, Bestand und prognostizierten Bedarf berücksichtigende Investitionsplanung nur innerhalb eines jeweils gegebenen institutionellen Rahmens (Universitäten, Helmholtz-Gemeinschaft, Max-Planck-Gesellschaft) entspricht. Die Koordination der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Beschaffungen und eine damit verbundene, bundesweit abgestimmte Optimierung des Leistungsangebots findet bislang ihre Grenze an der institutionellen Zugehörigkeit des jeweiligen Zuwendungsempfängers. Erforderlich ist hingegen nach Auffassung des Wissenschaftsrates eine institutionenübergreifende, bundesweit von einem geeigneten Ausschuss koordinierte Investitionsstrategie für Aufbau und Betrieb nationaler Höchstleistungsrechner.

Insbesondere bei Beschaffungen mit wechselnden Standorten kommt der Kenntnis des gesamten Bundesbedarfs in Bezug auf das derzeitige und in Zukunft zu erwartende Anforderungsprofil sowie einem Überblick über das Gesamtspektrum der existierenden Ausstattungen und der Kenntnis grundlegender fachlicher Entwicklungstendenzen eine besondere Bedeutung zu, um bei der Architecturempfehlung die aktuellen Defizite zu berücksichtigen und für Bund, Länder, Fördereinrichtungen und Wissenschaft bei ihren Investitionsentscheidungen eine breite Entscheidungsbasis vorzubereiten.

Ziel einer Abstimmung und Koordination der Rahmenbedingungen bei den Beschaffungen auf Ebene der Rechenzentren ist es, der schnellen Entwicklung auf unterschiedlichen Architekturen und Plattformen folgen zu können. Eine Vorgabe, unabhängig vom Bedarf bzw. Anforderungskatalog verschiedene Architekturen berücksichtigen zu müs-

sen, erscheint jedoch nicht sinnvoll. Hingegen können Risikoabwägung und Innovationsförderung im Einzelfall Gesichtspunkte sein, bestimmte Architekturen zu bevorzugen. Vor dem Hintergrund der schnellen Innovationszyklen läuft jede Beschaffung unter ganz spezifischen Gegebenheiten ab, die sich in wenigen Jahren entscheidend wandeln.“²

A.II. Zusammensetzung des Ausschusses

Nach der Empfehlung aus dem Jahr 2000 sollten dem Ausschuss Repräsentanten universitärer und außeruniversitärer Forschungseinrichtungen, der Industrie sowie von Bund und Ländern angehören. Bei der Auswahl der Mitglieder sollte darauf geachtet werden, dass sowohl die wichtigsten Anwendungsgebiete des Höchstleistungsrechnens als auch die Methodenwissenschaften vertreten sind.

Die Mitgliedschaft im Ausschuss sollte auf eine Zeit von drei Jahren bei einmaliger direkter Wiederberufung beschränkt bleiben. Der Ausschuss sollte sich vorbehalten, Vertretern weiterer Gremien einen ständigen Gaststatus einzuräumen und in Einzelfragen zusätzliche Sachverständige in die Beratungen einzubeziehen sowie einen Vertreter in die Sitzungen der wissenschaftlichen Beiräte der aktuellen Höchstleistungsrechenzentren entsenden zu können. Mit Blick auf seine Funktion sollten als ständige Gäste Vertreter der Höchstleistungsrechenzentren bzw. ihrer Wissenschaftlichen Beiräte, der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft sowie der Fachkommissionen der Trägerorganisationen dem Ausschuss angehören.

Diese Empfehlungen wurden bei der Einrichtung des Ausschusses berücksichtigt. Neben derzeit fünf Mitgliedern der Wissenschaftlichen Kommission, von denen einer den Vorsitz inne hat, wurden je ein Vertreter der Nutzer der Universitäten und der Fachhochschulen in den Ausschuss berufen. Weiterhin sind die Wissenschaftsorganisationen Fraunhofer Gesellschaft, Helmholtz-Gemeinschaft, Max-Planck-Gesellschaft und Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried-Wilhelm-Leibniz sowie die Industrie im Ausschuss vertreten. Darüber hinaus werden die Höchstleistungsrechenzentren durch die Direktoren zweier dieser Zentren repräsentiert. Entsprechend der Empfehlung sind der Bund

² Wissenschaftsrat: Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, S. 229-261, Köln 2001, hier S. 250f

und zwei Länder (Nordrhein-Westfalen und Brandenburg (bis Ende 2006) bzw. Sachsen (seit 2007)) ebenfalls Mitglieder im Ausschuss.

Gaststatus haben der Vorsitzende der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft, der Vertreter des Beratenden Ausschusses Rechenanlagen der Max-Planck-Gesellschaft, der Vertreter der wissenschaftlichen Beiräte der Höchstleistungsrechenzentren sowie ein weiterer Vertreter des Bundes.

A.III. Aufgaben des Ausschusses

Um den genannten Zielsetzungen gerecht zu werden, wurde in der Empfehlung aus dem Jahr 2000 vorgeschlagen, dass der Ausschuss folgende Aufgaben³ übernehmen könnte:

A Empfehlungen zu Investitionsentscheidungen

- 1) Prospektive Bedarfsermittlung im Rahmen des verfügbaren Finanzvolumens im Vorfeld beabsichtigter Installationen. Bund und Länder müssen an der Bedarfsermittlung beteiligt werden, um den Zusammenhang zwischen Bedarf und Finanzierung herzustellen.
- 2) Strategische Beratung zu Investitionsentscheidungen unabhängig von ihrer jeweiligen institutionellen Zugehörigkeit, um eine Abstimmung im investiven Bereich der Höchstleistungsrechenzentren zu erreichen. Die Empfehlungen richten sich an den Bund und die Länder sowie an die Trägerorganisationen der Höchstleistungsrechenzentren.

B Orientierungshilfen

- 1) Erarbeitung von Stellungnahmen und Durchführung von Anhörungen zu zentralen Fragen im Zusammenhang mit der Nutzung und dem Betrieb von Höchstleistungsrechnern (beispielsweise Metacomputing).
- 2) Unterstützung des Ausschusses für den Hochschulausbau des Wissenschaftsrates bei Investitionsvorhaben mit Finanzierung über das Hochschulbauförderungsgesetz.

C Weiterentwicklung von Steuerungsmodellen

- 1) Entwicklung und Erprobung bedarfsorientierter Selbstregelungsmechanismen.
- 2) Prüfung verschiedenartiger Kostenrechnungsmodelle für geeignete Nutzergemeinschaften.

Der Ausschuss sollte in seine Überlegungen auch die Beschaffungen von Projektrechnern der obersten Leistungsklasse der verschiedenen Forschungseinrichtungen sowie die für ausgewählte Fachgebiete wie beispielsweise der Klima- und Umweltforschung

³ Wissenschaftsrat: Empfehlung zur künftigen Nutzung von Höchstleistungsrechnern, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2000, S. 229-261, Köln 2001, hier S. 251f

bzw. Plasmaforschung zur Verfügung stehenden dedizierten Höchstleistungsrechner insoweit mit einbeziehen, als durch deren Bereitstellungen Auswirkungen auf die nationale Versorgungsstruktur zu erwarten sind.

Der Ausschuss hat in den sechs Jahren seines Bestehens (die konstituierende Sitzung fand im Mai 2001 statt) insgesamt 14 Mal⁴ getagt. Dabei hat er folgende Aufgaben entsprechend der Empfehlung wahrgenommen:

Um den Bedarf für die Einrichtung eines europäischen Höchstleistungsrechners zu ermitteln, fand im Oktober 2003 eine Anhörung von Vertretern mehrerer numerik-unterstützter Wissenschaftszweige statt (Klima- und Erdsystemforschung, Nanostrukturphysik, Festkörperphysik, Strömungsmechanik, Astrophysik, Quantenchromodynamik, Materialforschung, Chemie, Molekulardynamik, Polymerforschung und Biophysik). Sie bildete die Grundlage für die vom Ausschuss erarbeitete Empfehlung zur Einrichtung Europäischer Höchstleistungsrechner⁵, die vom Wissenschaftsrat im November 2004 verabschiedet wurde (Aufgabe A1).

Zur Unterstützung des Ausschusses für den Hochschulausbau des Wissenschaftsrates bei Investitionsvorhaben mit Finanzierung über das Hochschulbauförderungsgesetz hat der Koordinierungsausschuss ausführliche Stellungnahmen zu den Rechneranträgen der Länder Baden-Württemberg⁶, Bayern^{7,8}, Sachsen⁹ und der Norddeutschen Länder¹⁰

4 31. Mai 2001, 27. November 2001, 19. März 2002, 22. Oktober 2002, 31. März 2003, 14. Oktober 2003, 18. März 2004, 29. Juni 2004, 6. Oktober 2004, 2. Juni 2005, 29. März 2006, 30. Oktober 2006, 14. März 2007, 25. September 2007

5 Wissenschaftsrat: Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2004, Bd. III, S. 505-538, Köln 2005

6 Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Baden-Württemberg auf Errichtung eines Höchstleistungsrechner-Systems in Karlsruhe und Stuttgart zum 32. Rahmenplan, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2002, Bd. II, S. 61-82, Köln 2003

7 Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Bayern auf Neubau eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum und zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners im Zusammenhang mit der Errichtung eines Gebäudes für das Leibniz-Rechenzentrum zum 32. Rahmenplan, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2002, Bd. II, S. 83-102, Köln 2003

8 Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Bayern auf Beschaffung eines Höchstleistungsrechners für das Leibniz-Rechenzentrum zum 33. Rahmenplan, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2003, Bd. I, S. 291-309, Köln 2004

9 Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Anmeldung des Landes Sachsen auf Beschaffung eines Höchstleistungsrechners/ Speicherkomplexes „Datenintensives Rechnen“ für das Zentrum für Hochleistungsrechnen und das Universitätsrechenzentrum der Technischen Universität Dresden zum 34. Rahmenplan, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen zum 34. Rahmenplan für den Hochschulbau 2005-2008, Bd. 3, S. SN 109-SN 118, Köln 2004

10 Wissenschaftsrat: Stellungnahme zur Beschaffung eines Nachfolgesystems des Rechnerverbundes der Norddeutschen Länder für Hoch- und Höchstleistungsrechnen, in: Wissenschaftsrat: Empfehlungen und Stellungnahmen 2005, Bd. I, S. 421-436, Köln 2006

erarbeitet und dem Wissenschaftsrat zur Beratung und Verabschiedung vorgelegt (Aufgabe B2; siehe auch Anhang II).

Außerdem nahm er zum Rechnerantrag des Landes Nordrhein-Westfalen für die RWTH Aachen im März 2006 Stellung. Diese Stellungnahme wurde allerdings nicht im Wissenschaftsrat beraten, da das Investitionsvolumen unterhalb der vom Ausschuss definierten Grenze von 15 Mio. Euro lag, ab der ein Rechnerantrag dem Wissenschaftsrat zur Beratung und Verabschiedung vorgelegt wird.

Zu geplanten Rechnerbeschaffungen außeruniversitärer Forschungseinrichtungen nahm der Ausschuss im August 2005 Stellung zu Investitionsmaßnahmen des Deutschen Klimarechenzentrums in Hamburg und im März 2006 zu einem Antrag des Rechenzentrums Garching der Max-Planck-Gesellschaft und des Max-Planck-Instituts für Plasmaphysik. Diese Empfehlungen wurden dem Wissenschaftsrat nicht vorgelegt, da es sich im ersten Fall um einen Projektrechner, d. h. für einen speziellen Wissenschaftsbereich, handelte und im anderen Fall das Investitionsvolumen unterhalb der vom Ausschuss definierten Grenze von 15 Mio. Euro lag. Darüber hinaus erörterte er in der Sitzung im März 2006 die Beschaffung des Rechners JUBL des John von Neumann-Instituts für Computing¹¹ (Aufgabe A2; siehe auch Anhang II).

Im Vorfeld von Investitionsentscheidungen für universitäre und außeruniversitäre Einrichtungen hat der Ausschuss im November 2001 eine Anhörung der Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren John von Neumann-Institut für Computing, Leibniz-Rechenzentrum München, Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, Deutsches Klimarechenzentrum in Hamburg und Rechenzentrum der RWTH Aachen durchgeführt, um eine prospektive Bedarfsermittlung im Rahmen des verfügbaren Finanzvolumens im Vorfeld durchzuführen. Der Ausschuss hat sich damit über die geplanten Investitionen informiert (Aufgabe A1).

Im Oktober 2002 hat der Ausschuss eine Anhörung über Verfahren und Kriterien der Begutachtung von Rechenzeitanträgen durch Lenkungsausschüsse, Wissenschaftliche Ausschüsse und Rechenzeitkommissionen der Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren durchgeführt. Dafür lagen Informationen vom Leibniz-Rechenzentrum München,

11 Die Beschaffung des Rechners JUMP im John von Neumann-Institut für Computing erfolgte bereits vor der konstituierenden Sitzung des Ausschusses, so dass sich der Ausschuss zu diesem Rechner nicht äußern konnte

Rechenzentrum Universität Stuttgart, Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft und des Max-Planck-Instituts für Plasmaphysik, John von Neumann-Institut für Computing, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen Universität Hannover, Rechenzentrum der Universität Karlsruhe, Rechen- und Kommunikationszentrum der RWTH Aachen und Deutschen Klimarechenzentrum in Hamburg vor. Im Ergebnis stellte er fest, dass die Vergabe von Rechenzeit für die Forschungsprojekte nach sinnvollen Maßstäben erfolge und dass das etablierte Verfahren gut funktioniere (Aufgaben B1, C1).

Mit Ausnahme der Aufgabe C2, für deren Behandlung der Ausschuss keine Veranlassung sah, hat er sich allen Aufgaben gewidmet.

B. Zur Bewertung des Ausschusses

Zur Vorbereitung der Beratung über Aufgaben und Funktionen des Nationalen Koordinierungsausschusses zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern wurde ein Fragebogen an die Mitglieder und Gäste des Ausschusses, an Bund, Länder und die Wissenschaftsorganisationen versandt (siehe Anhang I), deren Antworten in Kapitel B eingeflossen sind. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die in Kapitel F dargestellten Entwicklungen zum Zeitpunkt der Beantwortung noch nicht öffentlich bekannt waren und deshalb von der Mehrzahl der Antwortenden auch nicht einbezogen werden konnten.

B.I. Zur Umsetzung der Aufgaben

Die Umfrage hat ergeben, dass die eindeutige Mehrheit der Befragten¹² der Ansicht sind, der Ausschuss sei seinen Aufgaben gemäß der Empfehlung aus dem Jahr 2000 gerecht geworden. Die Entscheidungen des Ausschusses hätten zu einer koordinierten Investitionsstrategie sowie zu einer angemessenen nationalen Infrastruktur im Bereich des Hoch- und Höchstleistungsrechnens geführt. Dem wissenschaftspolitischen Ziel, an wenigen Standorten Höchstleistungsrechner zu installieren, die deutschlandweit im wissenschaftlichen Bereich zur Nutzung offen gehalten werden, sei entsprochen worden. Der Ausschuss habe koordinierend gewirkt und zu einer verbesserten Kommunikation zwischen den Rechenzentren geführt.

Die Empfehlungen des Ausschusses haben aus Sicht der Länder, die Investitionen im Hoch- bzw. Höchstleistungsrechnerbereich getätigt haben, einen hohen Stellenwert. Aufgrund stark begrenzter staatlicher Investitionsmittel werde jede kostenintensive Maßnahme in Bezug auf wissenschaftliche Ausrichtung und Bedarfsermittlung sowie wissenschaftspolitische Einordnung kritisch betrachtet. Hierbei bekomme das Votum eines unabhängigen nationalen Fachgremiums, das die vorgesehene Maßnahme unter übergreifenden Gesichtspunkten bewertet, ein entscheidendes Gewicht.

Es gibt allerdings auch Stimmen, nach denen der Ausschuss dem Aufgabenkatalog nur zum Teil gerecht geworden ist. So sei im Bereich A „Empfehlungen zu Investitionsentscheidungen“ eine prospektive Bedarfsermittlung nur ansatzweise erfolgt; hier wird eine

¹² Der Fragebogen (Anhang I) wurde an die Mitglieder und Gäste des Ausschusses, an Bund, Länder und die Wissenschaftsorganisationen versandt

Fortschreibung gewünscht. Vermisst wurde insbesondere eine Empfehlung zu Investitionsentscheidungen, die unabhängig von den Wünschen und Planungen einzelner Wissenschaftsorganisationen durchgeführt werden. Im Bereich B „Orientierungshilfen“ solle die Erarbeitung von separaten Orientierungshilfen zu zentralen Fragen ausgeweitet werden.

B.II. Zur Zusammensetzung des Ausschusses

Die Zusammensetzung des Ausschusses, bestehend aus universitären und außeruniversitären Nutzern und Betreibern von Höchstleistungsrechnern sowie Vertretern von Bund, Ländern, den Wissenschaftsorganisationen und der Industrie habe sich bewährt. Angeregt werden eine stärkere Beteiligung der Nutzerdisziplinen und eine internationale Beteiligung. Unter Berücksichtigung der strategischen Zielsetzungen des Ausschusses wird zudem eine enge und verbindlichere Verzahnung mit allen Planungen und Investitionen im Bereich des Höchstleistungsrechnens, unabhängig von der institutionellen Zugehörigkeit, gewünscht. Für eine vorausschauende Abstimmung der Beschaffungsplanung insbesondere im Höchstleistungsrechnerbereich wäre zudem eine permanente Absprache zwischen Trägern und Geldgebern wünschenswert.

Die Dauer der Mitgliedschaft für die Fachvertreter auf drei Jahre mit der Möglichkeit einer Wiederberufung wird begrüßt und sollte beibehalten werden. Die beiden Vertreter der Länderseite sollten nach fünf Jahren im Einvernehmen der Länder durch Vertreter anderer Länder neu besetzt werden.

B.III. Zur Zukunft des Ausschusses

Wie bereits erwähnt, waren zum Zeitpunkt der Abfrage nur einige der Beteiligten über die aktuellen strukturellen Entwicklungen im Bereich HPC informiert (s. Anhang III). Diese weisen in ihren Antworten darauf hin, dass die Aufgaben und Funktionen des Ausschusses notwendig und sinnvoll sind, allerdings halten sie die Fortführung dieses Ausschusses nur so lange für erforderlich, wie es kein anderes Forum gibt, das sich die Aufstellung und Durchsetzung eines notwendigen nationalen High Performance Computing-Konzepts zu eigen macht. Hintergrund ist die geplante Schaffung einer übergreifenden Kooperationsplattform für Einrichtungen des Hoch- und Höchstleistungsrech-

nens in Deutschland ausgehend vom Verbund der drei nationalen Höchstleistungsrechner Jülich-München-Stuttgart innerhalb des deutschen Gauß-Centrums für Supercomputing.

Bei der Entscheidung über die Zukunft des Ausschusses sollten folgende Extreme vermieden werden:

- ein Vakuum bei der erforderlichen Abstimmung nationaler Rechnerbeschaffungen der unten erläuterten Leistungsstufe, aber auch
- eine Dopplung derartiger Beratungs- und Abstimmungsgremien.

Der Ausschuss hat sich bisher bei der Abstimmung über die Ländergrenzen hinweg als hilfreich erwiesen. Ob der Ausschuss nach Gründung der HPC-Allianz (siehe Kapitel F.II) weiter bestehen soll und welche Aufgaben er gegebenenfalls übernehmen könnte, sollte erst beraten werden, wenn die Gründung der HPC-Allianz erfolgt ist und deren Aufgaben genau bekannt sind. Das weitere Bestehen des Ausschusses ist somit von der weiteren Entwicklung abhängig.

Einzelne Länder erwarten auch, dass als Folge der Föderalismusreform die Bedeutung des Ausschusses bei konkreten Investitionsentscheidungen zurückgehen wird. Generell wird seitens dieser Länder absehbar kein Beratungsbedarf durch den Ausschuss auf der Basis der künftigen Investitionsförderung nach Art. 143c GG (neu) erwartet. Anders ist es im Bereich einer Finanzierung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern für Hochschulen auf der Grundlage des Art. 91 b Abs. 1 Nr. 3 GG (neu). Hierfür ist das Votum des Wissenschaftsrates – vorbereitet durch den Ausschuss für Forschungsbauten – erforderlich.

Die Praxis, dass dem Ausschuss über Investitionsvorhaben in der Höhe von 7,5 bis 15 Mio. Euro berichtet wird und Investitionen mit einem Volumen von über 15 Mio. Euro vom Ausschuss wissenschaftspolitisch begutachtet werden, sollte bei einer Verlängerung des Mandats des Ausschusses generell weiterhin aufrechterhalten werden.¹³

Die ursprüngliche Definition der Versorgungspyramide, die aus 1. der Arbeitsplatzebene, 2. der Instituts-/Fachbereichsebene, 3. der Ebene der Hochleistungsrechenzentren wie z. B. institutionellen Rechnern (wie dem Deutschen Klima Rechenzentrum und dem

¹³ Es wird aber vorgeschlagen, die Grenzen um die Inflation der letzten Jahre zu bereinigen.

Deutschen Wetterdienst) und 4. der Ebene der bundesweit zugänglichen Höchstleistungsrechner besteht, orientiert sich an der Funktion der Rechner und dem Zugang zu ihnen. Es wird angeregt, diese Definition wieder einzuführen und sich nicht an Rechenleistung und Investitionsvolumina zu orientieren. Der Ausschuss solle sich dabei auf die höchste Ebene der Versorgungspyramide konzentrieren und entsprechend der Empfehlung aus dem Jahr 2000 den Abstimmungsbedarf der Beschaffungen der höchsten Leistungsstufe so koordinieren, dass im Zeitabstand von relevanten Innovationszyklen jeweils mindestens ein System entsprechend dem neuesten technischen Stand zur Verfügung steht.

C. Empfehlungen

Im Sinne seiner Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner (2004) unterstützt der Wissenschaftsrat alle Bestrebungen, das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland und Europa zu sichern und zu stärken. Er begrüßt nachdrücklich die auf Initiative des BMBF, der Länder Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen sowie der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren erfolgte Gründung des Gauß-Centrums für Supercomputing. Mit dem Gauß-Centrum spricht das Höchstleistungsrechnen in Deutschland zukünftig auch im Rahmen der Europäischen Union mit einer Stimme. Es wird sehr begrüßt, dass das Gauß-Centrum an der europäischen Initiative PACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) als Principal Partner mitwirkt, Koordinator des gleichnamigen Projektantrags ist und somit die Voraussetzung schafft, dass Deutschland ein Standort für ein europäisches Tier0-Zentrum¹⁴ werden kann. Damit ist die Umsetzung der Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner auf gutem Wege.

Die bisher vom Koordinierungsausschuss wahrgenommenen Aufgaben werden auch nach Gründung des Gauß-Centrums weiterhin relevant sein. Dies gilt insbesondere in Bezug auf die Koordination der aus öffentlichen Mitteln finanzierten Rechnerbeschaffungen (s. Abschnitt A.I) und Beschaffungsstrategien.

Über die Zukunft des Koordinierungsausschusses sollte daher erst abschließend beraten werden, wenn die Gründung der HPC-Allianz erfolgt ist und deutlich wird, welche Aufgaben sie wahrnehmen kann. Dabei wird auch zu bedenken sein, wie Nutzer aus der Wissenschaft und den Ländern, die selber keine Hoch- und Höchstleistungsrechner betreiben, berücksichtigt werden können. Bis dahin sollte der Koordinierungsausschuss seine bisherigen Aufgaben entsprechend der Empfehlung aus dem Jahr 2000 weiterhin wahrnehmen.

Der Wissenschaftsrat bittet daher den Bund und die beteiligten Länder ihm so rechtzeitig über die Entwicklungen der HPC-Allianz zu berichten, dass er seinerseits über die erforderlichen Entscheidungen für die Zukunft des Koordinierungsausschusses beraten kann.

¹⁴ Tier [=Schicht] 0-Zentren sind die drei Höchstleistungsrechenzentren, Tier1-Zentren sind die Hochleistungsrechenzentren, Tier2-Zentren sind die universitären Rechenzentren usw.; die geplanten europäischen Höchstleistungsrechner werden „europäische Tier0-Zentren“ genannt

D. Anhang I

Fragenkatalog für die Anhörung von Bund, Ländern und Wissenschaftsorganisationen am 30. Oktober 2006

Fragen zu bisherigen Aufgaben und Funktionen des Ausschusses:

1. Ist der Ausschuss seinen Aufgaben gemäß der Empfehlung aus dem Jahr 2000 und dem Protokoll der konstituierenden Sitzung – insbesondere hinsichtlich der getroffenen Investitionsentscheidungen – gerecht geworden?
2. Waren die Empfehlungen des Ausschusses bezogen auf Ihr Land/Ihre Institution für Ihre Investitionsentscheidungen hilfreich?
3. Hat sich die Zusammensetzung des Ausschusses und die Dauer der Mitgliedschaft bewährt?

Fragen zu künftigen Aufgaben und Funktionen des Ausschusses:

4. Halten Sie eine Fortführung der Aufgaben und Funktionen des Ausschusses für notwendig und sinnvoll? Dies gilt besonders für Abstimmungen im Investitionsbereich vor dem Hintergrund der Föderalismusreform.
5. Frage nur an die Länder: Sehen Sie Beratungsbedarf durch den Ausschuss für Ihre Investitionsentscheidungen im Bereich der Hochleistungsrechner auf der Basis der künftigen Investitionsförderung nach Art. 143c GG (neu)?
6. Der Ausschuss hatte sich darauf verständigt, dass ihm über Investitionsvorhaben in der Höhe von 7,5 bis 15 Mio. Euro lediglich berichtet wird. Investitionen mit einem Volumen von 15 Mio. Euro und mehr sollten vom Ausschuss wissenschaftspolitisch begutachtet werden (siehe Anlage 2 III.). Soll diese Praxis weiterhin aufrechterhalten oder soll sie modifiziert werden?

E. Anhang II

Rechner	Empfehlung verabschiedet	Investitionskosten	Leistung	Finanzierung	bundesweit fachlicher Zugang	Hochleistungsrechner	Projektrechner	Instituts-/ Landesrechner	Behandlung im Ausschuss
Jülich (JUMP)	vor NatKo	42 Mio. €	9,1 TFlops	90 % BMBF, 10 % Land	ja	nein	ja	nein	nein
HLSR (Stuttgart)	Mai 2002	40 Mio. €	12,7 TFlops	HBFG (50 % Bund, 50 % Land)	ja	nein	ja	nein	Stellungnahme
LRZ (München)	Mai 2003	38 Mio. €	33 TFlops in 2006, insgesamt 69 TFlops in 2007	HBFG (50 % Bund, 50 % Land)	ja	nein	ja	nein	Stellungnahme
TU Dresden	Mai 2004	12,5 Mio. €	unbekannt	HBFG (50 % Bund, 50 % Land)	nein	ja	nein	ja	Stellungnahme
HLRN (Norddeutsche Länder)	Mai 2005	30 Mio. €	geplant 50 TFlops/s	HBFG (50 % Bund, 50 % Land)	ja	ja	nein	nein	Stellungnahme
DKRZ (Hamburg)	Sept. 2005	30 Mio. €	geplant 10 TFlops	100 % BMBF	nein	ja	nein	nein	Kennntnisnahme
Jülich (JUBL)	März 2006	8 Mio. €	45,6 TFlops	100 % HGF (90 % Bund, 10 % Land)	ja	nein	ja	nein	Kennntnisnahme
MPG (Garching)	März 2006	15 Mio. €	geplant 50 TFlops	100 % MPG	nein	ja	nein	nein	Kennntnisnahme
RWTH Aachen	März 2006	10 Mio. €	geplant 36,8 TFlops	HBFG (50 % Bund, 50 % Land)	nein	ja	nein	ja	Bericht

F. Anhang III: HPC-Aktivitäten im nationalen und europäischen Umfeld 2006/2007

Die im Folgenden skizzierten Aktivitäten auf dem Gebiet des High Performance Computing (HPC) sind auf Initiative des BMBF, der Länder Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen sowie der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren erfolgreich begonnen worden. Sie sind für die Gesamtbewertung der Situation wichtig und wurden deshalb nachrichtlich in diesen Bericht aufgenommen.

Da die neu etablierten bzw. im Aufbau befindlichen Gremien des Gauß-Centrums und der HPC-Allianz zu einem erheblichen Ausmaß ähnliche Aufgaben wie der Koordinierungsausschuss übernehmen können, müssen sie in die Entscheidungen über die künftigen Aufgaben und die Zukunft des Koordinierungsausschusses einbezogen werden. Diese Gremien sind

- sowohl für das High Performance Computing auf europäischer Ebene, hier besonders bei der Umsetzung der Empfehlung zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner,
- als auch auf nationaler Ebene

von weitreichender Bedeutung.

F.I. Gauß-Centrum für Supercomputing

Im April 2007 wurde das Gauß-Centrum als gemeinnütziger eingetragener Verein „Gauss Centre for Supercomputing (GCS) e.V.“ gegründet und ein Sprecher benannt. Das Gauß-Centrum vereint als Mitglieder zunächst die drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Jülich, München und Stuttgart, um Deutschland für die europäischen Aktivitäten eines HPC-Tier0¹⁵-Zentrums handlungsfähig zu machen.

Die Gründung des Gauß-Centrums basiert auf der Erkenntnis, dass die deutsche HPC-Szene im europäischen Rahmen mit einer Stimme sprechen muss, um erfolgreich zu

¹⁵ Tier [=Schicht] 0-Zentren sind die drei Höchstleistungsrechenzentren, Tier1-Zentren sind die Hochleistungsrechenzentren, Tier2-Zentren sind die universitären Rechenzentren usw.; die geplanten europäischen Höchstleistungsrechner werden „europäische Tier0-Zentren“ genannt

sein. Auf der Grundlage mehrerer Studien und Konzepte¹⁶ haben die Leitungen der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren¹⁷ seit Juli 2006 regelmäßig über Formen einer näheren Kooperation zwischen den Zentren beraten. Parallel dazu gab es Arbeitsgespräche zwischen Vertretern der zuständigen Ministerien der drei Zentren (Bayern, Baden-Württemberg, Nordrhein-Westfalen, BMBF). Ziel des Gauß-Centrums ist die nachhaltige Versorgung der computergestützten Wissenschaften und Forschung in Deutschland und Europa mit Rechenkapazität der obersten Leistungsklasse unter besonderer Berücksichtigung technisch-industrieller Anwendungsprobleme. Das GCS soll außerdem organisatorisch die nationale Handlungsfähigkeit auf den Feldern verbessern, auf denen Deutschland in Europa im Höchstleistungsrechnen mit einem einheitlichen Erscheinungsbild und Standpunkt auftreten muss. Vorrangig kommt dabei dem GCS die technische Sprecherrolle in allen Fragen zu, die europäische Höchstleistungsrechner betreffen.

Mit der Gründung des Gauß-Centrums und damit mit der Schaffung eines deutschen Ansprechpartners im Bereich der HPC-Community wurde für die Zusammenarbeit auf europäischer Ebene und auch für die Umsetzung der Empfehlung des Wissenschaftsrates zur Einrichtung europäischer Höchstleistungsrechner eine wichtige Basis geschaffen.

F.II. HPC-Allianz

In dem Strategiepapier „High Performance Computing in Deutschland – Argumente zur Gründung einer strategischen Allianz“, das im Auftrag des BMBF erstellt wurde, wird der genannte Zusammenschluss der drei Höchstleistungsrechenzentren nur als ein erster Schritt zum Aufbau einer deutschen HPC-Allianz gesehen, der zusätzlich auch die deutschen Hochleistungsrechenzentren angehören würden. Dabei werden im Strategiepapier folgende Aufgaben für die HPC-Allianz genannt:

¹⁶ Im Einzelnen: (1) Studie „Konzept für Einrichtung und Betrieb eines Deutsch-Europäischen Zentrums für Höchstleistungsrechnen“ einer Arbeitsgruppe aus Bayern und Baden-Württemberg, (2) das im Auftrag des BMBF entstandene Papier „High Performance Computing in Deutschland – Argumente zur Gründung einer strategischen Allianz“ in der Fassung vom 22. September 2006 und (3) die im Benehmen mit den Ländern Baden-Württemberg und Bayern seitens des BMBF am 13. Juli 2006 unter dem Titel „Schavan: Strategische Allianz schafft größten europäischen Rechnerverbund“ herausgegebene Pressemitteilung

¹⁷ John von Neumann-Institut für Computing Jülich, High Performance Computing Center Stuttgart, Leibniz-Rechenzentrum München

- Wissenschaft, Wirtschaft und Politik dahingehend beraten, dass das Potenzial des wissenschaftlichen Rechnens im Allgemeinen und des Höchstleistungsrechnens im Besonderen für Deutschland optimal erschlossen und weiterentwickelt wird;
- die Arbeiten auf dem Gebiet des Hoch- und Höchstleistungsrechnens (d. h. der obersten beiden Stufen der Versorgungspyramide) koordinieren (unbeschadet eventueller Gutachterfunktionen des Wissenschaftsrates bzw. der DFG);
- bei allen organisatorischen Fragen, die mit der Versorgung der einschlägigen Nutzergruppen mit HPC-Kapazität zu tun haben, beratend und unterstützend tätig sein;
- für die laufende Fortschreibung der Aktualisierung der technischen Planung im HPC-Bereich für die deutsche Versorgungspyramide sorgen;
- die Position Deutschlands im HPC-Bereich international einheitlich und abgestimmt vertreten;
- Maßnahmen zur Anwenderunterstützung und Lösungsentwicklung empfehlen und (soweit möglich) umsetzen helfen;
- Kompetenzzentren für die Entwicklung von Anwendungs-Lösungen und Einrichtungen für den wissenschaftlichen Austausch fördern (in Kooperation mit Universitäten und anderen HPC-Betreibern);
- Maßnahmen zur laufenden Information der allgemeinen Öffentlichkeit über Notwendigkeit und Nutzen des HPC entwickeln und umsetzen.

Dies verdeutlicht, dass die HPC-Allianz in erster Linie planende und koordinierende Aufgaben haben soll. Die Erbringung der eigentlichen Leistungen (wie z. B. die Bereitstellung von HPC-Kapazitäten durch die Rechenzentren) bleibt die Aufgabe der jeweiligen Vereinsmitglieder. Zu den zentralen Aufgaben der HPC-Allianz gehören:

- Erarbeitung von Empfehlungen für die technische und die Beschaffungs-Planung für die Kapazitäten auf Stufe 0 der Leistungspyramide. Dabei ist jeweils auch die Frage der Betriebskosten explizit zu berücksichtigen. Beteiligt werden die Vertreter der Zentren der Stufen 0 (Höchstleistungsrechner) und 1 (Hochleistungsrechner) der Leistungspyramide.
- Erarbeitung von Empfehlungen für die technische und die Beschaffungs-Planung für die Kapazitäten auf Stufe 1 der Leistungspyramide. Beteiligt werden Vertreter der Zentren der Stufen 1 (Hochleistungsrechner) und 2 (Universitäts-/ Institutsrechner).

- Entwicklung der Struktur der Versorgungspyramide in Deutschland insgesamt und Erarbeitung der Regeln und Prozeduren für den Zugang zu (öffentlich finanzierten) HPC-Kapazitäten.

Neben den oben genannten zentralen Aufgaben befasst sich die HPC-Allianz auch mit folgenden Aspekten:

- Kontakt zu Anwendern von Ergebnissen des HPC in der Wirtschaft
- Förderung von Qualifizierung und Ausbildung
- Koordinierung der Nutzerbetreuung
- Koordinierung der Infrastruktur
- Koordinierung der Software-Plattformen
- Projektorganisation

Die Mitgliedschaft in der HPC-Allianz steht offen für:

- Öffentlich finanzierte Zentren, die eine Einrichtung auf der Ebene der nationalen Höchstleistungsrechner (Tier0), der Hochleistungsrechner (Tier1) oder Ebene der Instituts-/Fachbereichsebene (Tier2) der Versorgungspyramide betreiben;
- Privat finanzierte Zentren, die in der Nutzung und Weiterentwicklung der HPC-Technologie aktiv und mit der deutschen wissenschaftlichen Gemeinde entsprechend verflochten sind.

Die Gremien der HPC-Allianz Vereins sollen Mitgliederversammlung, Aufsichtsrat, Vorstand, Geschäftsführer und Wissenschaftlicher Beirat sein.

Das Gauß-Centrum beteiligt sich aktiv bei der Vorbereitung der Gründung der deutschen HPC-Allianz mit dem Namen „Gauß-Allianz zur Förderung des Höchstleistungsrechnens in Deutschland“.

F.III. Aktivitäten auf europäischer Ebene

Im Jahr 2006 wurde durch HPC-EUR, einer Gruppe von europäischen HPC-Experten, zu denen auch Vertreter aus Deutschland zählen, die Studie zu „Scientific Cases for a European HPC Initiative“ erstellt. Sie enthält eine Zusammenstellung von zahlreichen „Grand Challenges“ und diente zur Vorbereitung eines Antrags bei der europäischen Kommission zur Finanzierung von Höchstleistungsrechnern auf europäischer Ebene.

Die „Grand Challenges“ wurden in fünf Schlüsselbereiche (Wetter- und Klimaforschung, Hochenergiephysik/ Plasma- und Astrophysik, Biologie und Life Sciences, Ingenieurwissenschaften, Materialwissenschaften/ Chemie/ Nanotechnologien) zusammengefasst.

Die Kommission der Europäischen Union (EU) veranstaltete ihrerseits im März 2006 einen Workshop mit dem Titel „The need for a HPC Infrastructure service provisioning model in Europe“ zur Vorbereitung des Calls für das 7. Rahmenprogramm der EU im Hinblick auf eine europäische HPC-Infrastruktur. Der Workshop sollte die Arbeiten von ESFRI (European Strategy Forum on Research Infrastructures) und e-IRG (e-Infrastructure Reflection Group) ergänzen. Die Studie zu „Scientific Cases for a European HPC Initiative“ wurde auf dem Workshop zur Kenntnis genommen.

Am 28. Juni 2006 gründete sich die HPC European Task Force (HET) und ersetzte das HPC-EUR. Das HET-Konsortium besteht aus nationalen Vertretern, die deutsche Delegation aus einem BMBF-Vertreter und dem Sprecher des geplanten Gauß-Centrums. HET hatte die Aufgabe, eine Studie zu erstellen, die die Grundzüge eines Rahmenwerkes für eine europäische HPC-Versorgung darstellt und bei der Formulierung eines Calls des 7. Rahmenprogramms der EU Verwendung finden könnte. Dieser Auftrag wurde erfolgreich umgesetzt, bis Ende 2006 entstanden drei Papiere mit unterschiedlichen Schwerpunkten (siehe auch www.hpcineuropetaskforce.eu):

- „A Sustainable High Performance Computing Ecosystem for Europe“ (zur technischen Ausgestaltung einer europäischen HPC-Versorgung)
- “HET Peer Review Process Proposal for Tier0 applications”¹⁸ (zu Nutzeraspekten)
- “Towards a Sustainable High-Performance Computing Ecosystem through Enabling Petaflop Computing in Europe” (zur Organisation einer europäischen HPC-Versorgung).

Die deutsche Delegation hat maßgeblich an der Gestaltung der Papiere mitwirken können. Bei der Abfassung haben zudem stets Kontakte zu DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications) bestanden.

¹⁸ Tier (=Schicht) 0-Zentren sind die geplanten europäischen Höchstleistungsrechenzentren; auf Deutschland bezogen sind die Tier1-Zentren die drei Höchstleistungsrechenzentren, Tier2-Zentren sind die Hochleistungsrechenzentren, Tier3-Zentren sind die universitären Rechenzentren usw.

Aufgrund der erfolgreichen Arbeit von HET wurde „European High Performance Computing Service“ als eine der für Europa als prioritär eingeschätzten 35 Infrastrukturmaßnahmen in die European Roadmap for Research Infrastructures 2006 des European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) aufgenommen.

Damit war die notwendige Voraussetzung für eine Förderung durch die EU geschaffen, da im 7. EU-Forschungsrahmenprogramm nur Projekte für neue Infrastrukturmaßnahmen finanziell unterstützt werden, die in der genannten ESFRI-Roadmap enthalten sind. Im Dezember 2006 wurde die entsprechende Bekanntmachung veröffentlicht, die für den Bereich HPC zunächst die Förderung der Vorbereitung des Aufbaus einer europäischen HPC-Infrastruktur vorsieht.

Ein Konsortium aus 15 Ländern¹⁹ hat sich entschieden, dazu einen Antrag einzureichen (PACE – Partnership for Advanced Computing in Europe). Dazu wurde in den ersten Monaten 2007 die Konsortialbildung auf der Basis eines „Memorandum of Understanding concerning the establishment of a European Tier0 High Performance Computing Service“ vorangetrieben, welches am 17. April 2007 im BMBF in Berlin von den beteiligten internationalen Partnern unterschrieben wurde. Das Gauß-Centrum wird als Principal Partner²⁰ mitwirken und ist Koordinator des Anfang Mai 2007 eingereichten Projektantrags. Die geplante Laufzeit der Vorbereitungsphase soll zwei Jahre betragen, d. h. Ende 2009 abgeschlossen sein.

Mit der Tatsache, dass das Gauß-Centrum bei dem Call als Principal Partner mitwirkt, ist eine Voraussetzung dafür geschaffen worden, dass Deutschland Standort eines europäischen Höchstleistungsrechners werden kann. Allerdings wird der finanzielle Beitrag der EU zunächst sehr gering sein, so dass mittelfristig die Kosten für die Anschaffung dieser Rechner weiterhin von den einzelnen Staaten getragen werden müssen. Es besteht deshalb zunächst kein unmittelbarer Wettbewerb zwischen den Principal Partners um den Zeitpunkt dieser Anschaffungen. Dieser wird wie bisher ausschließlich von den finanziellen Möglichkeiten der einzelnen Staaten abhängen.

¹⁹ Deutschland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Großbritannien, Italien, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Schweden, Schweiz, Spanien, Türkei

²⁰ Die Principal Partners des Konsortiums sind Deutschland, Großbritannien, Frankreich, Spanien und die Niederlande. Nur in diesen Ländern soll jeweils ein europäischer Tier0-Höchstleistungsrechner, der größtenteils aus den nationalen Mitteln des jeweiligen Staates zu finanzieren ist, installiert werden