

BremHLR

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

Statusbericht 2024
des
Kompetenzzentrums
für
Höchstleistungsrechnen Bremen
–BremHLR–

Bremen, März 2025



Universität
Bremen

CONSTRUCTOR
UNIVERSITY



ALFRED-WEGENER-INSTITUT
HELMHOLTZ-ZENTRUM FÜR POLAR-
UND MEERESFORSCHUNG



HSB Hochschule
Bremerhaven

© 2003-2025 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

www.bremhlr.uni-bremen.de



Das Berichtsjahr 2024 in Stichpunkten

- Stabiler separater Betrieb der beiden NHR-Systeme NHR@ZIB und NHR-Nord@Göttingen
- Neue Cluster-Komponenten an beiden NHR-Standorten
- Konzeptentwicklung zur Verstetigung von BremHLR



Inhaltsverzeichnis

1	BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur	4
1.1	Aufgaben.....	4
1.2	Struktur.....	4
2	Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum.....	5
2.1	Unterstützung der NHR-Nutzung im Land Bremen	5
2.2	Weitere Aktivitäten des BremHLR	5
3	Konzeptentwicklung zur Verstetigung von BremHLR.....	5
4	Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten	6
5	Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR	8
6	Betrieb von NHR@ZIB und NHR-Nord@Göttingen und Verfügbarkeit neuer Cluster-Komponenten an den Zentren	10

1 BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur

1.1 Aufgaben

Das Land Bremen beteiligt sich am Nationalen Hochleistungsrechnen – NHR – um an dem rasanten Fortschritt der Computer- und Softwaretechnologie Teil zu haben. Das Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen – BremHLR – unterstützt dazu Wissenschaftler im wissenschaftlichen Rechnen insbesondere im Land Bremen. Die Fachberater des BremHLR leisten Unterstützung für Projekte sowohl in der Konzeption, der Antragstellung als auch der Durchführung. Der Schwerpunkt der Unterstützung liegt hierbei auf Projekten auf den NHR-Systemen in Berlin (NHR@ZIB) und Göttingen (NHR-Nord@Göttingen), die aus den früheren Rechenzentren des HLRN (Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen) hervorgegangen sind. Die Betreuung erfolgt aber auch für Rechenprojekte an den nationalen Höchstleistungsrechenzentren wie z. B. dem Jülich Supercomputing Centre (JSC).

Als Bestandteil im Kompetenznetzwerk des NHR beteiligt sich BremHLR unter anderem an der fachspezifischen Nutzerberatung, der Pflege von Software-Paketen und der Veranstaltung überregionaler Nutzerworkshops. Die Geschäftsstelle des BremHLR ist an der Universität Bremen im Zentrum für Industriemathematik angesiedelt.

Das BremHLR wurde am 1. Juli 2003 als Kooperation zwischen der Universität Bremen (UB), der heutigen Constructor University Bremen (CUB) und dem Alfred-Wegener-Institut Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung (AWI) gegründet. Seit April 2008 ist die Hochschule Bremerhaven (HBHV) und seit Juli 2021 die Hochschule Bremen (HSHB) Kooperationspartner des BremHLR. Das Kompetenzzentrum wird von den Hauptnutzern UB und AWI, sowie der Bremer Senatorin für Umwelt Klima und Wissenschaft (SUKW) anteilig finanziell getragen. Im Jahr 2024 konnte eine Weiterfinanzierung des BremHLR bis Ende 2026 sichergestellt werden.

1.2 Struktur

Dem Lenkungsausschuss des BremHLR als oberstes beschlussfassendes und steuerndes Gremium gehörten in der Berichtsperiode folgende Vertreter der kooperierenden Einrichtungen an. Im Einzelnen sind dies:

- Prof. Dr. Alfred Schmidt (UB/Zentrum für Technomathematik ZeTeM)
- Prof. Dr. Stephan Frickenhaus (AWI/Rechenzentrum, UB/FB3)
- Prof. Dr. Ulrich Kleinekathöfer (CUB)
- Prof. Dr. Henrik Lipskoch (HBHV)
- Prof. Dr. A. Baars (HSHB)
- Dr. Julia von Helden (SUKW)

Die fachspezifische Betreuung der Projekte an den Rechenzentren des Nationalen Hochleistungsrechnens (NHR) sowie von Projekten an anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren wird von den Fachberatern des BremHLR geleistet, die ebenfalls den Einrichtungen der Kooperationspartner angehören. Im Berichtszeitraum waren folgende Fachberater tätig:

- Dr. Lars Nerger (AWI/Rechenzentrum, UB/ZeTeM, Leiter Geschäftsstelle)
- Thorsten Coordes (UB/ZARM)
- Dr. Achim Geleßus (CUB/CLAMV)
- Dr. Paul Gierz (AWI/Rechenzentrum)

Die Geschäftsstelle ist verantwortlich für die Organisation der Workshops (siehe Abschnitt Veranstaltungen) und die Unterstützung der Nutzer, insbesondere im Antragsverfahren. Im Jahr 2024 wurde das Sekretariat der Geschäftsstelle betreut von

- Katharina Müller.

2 Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum

2.1 Unterstützung der NHR-Nutzung im Land Bremen

Ein Schwerpunkt der Aktivitäten des BremHLR lag auch in diesem Berichtszeitraum in der Unterstützung der NHR-Nutzung. Neben der Tätigkeit von Prof. Dr. Stephan Frickenhaus als Mitglied des technisch-strategischen Beirats bestand die Unterstützung des NHR durch das BremHLR hauptsächlich in der Fachberatung für Bremer Projekte am NHR von der Antragstellung bis zur Begleitung rechenintensiver Projekte während der gesamten Projektlaufzeit.

Eine wesentliche Aufgabe im Berichtsjahr war die weitere Unterstützung der Bremer Nutzer des NHR bei der effizienten Nutzung der NHR-Hochleistungsrechner-Systeme mit Schwerpunktsetzung auf die Rechner der früheren HLRN-Rechenzentren in Berlin und Göttingen.

2.2 Weitere Aktivitäten des BremHLR

Im Veranstaltungsjahr 2024 wurde vom BremHLR der *17. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* organisiert und durchgeführt. Mit 7 Teilnehmern war dieser Workshop wieder gut besucht.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 16. bis 20. September 2024 an der Universität Bremen gegeben. Als Referent konnte wie bereits in vergangenen Jahren Dr. Hinnerk Stüben vom Regionalen Rechenzentrum der Universität Hamburg gewonnen werden, der den Workshop gemeinsam mit dem BremHLR-Fachberater Dr. Lars Nerger leitete.

Der weiterhin gute Zuspruch und der große Erfolg der Veranstaltungen zeigt deutlich den dringenden Bedarf zur Ausbildung im Hoch- und Höchstleistungsrechnen und gibt Anlass dazu solche Workshops auch weiterhin als regelmäßige Ausbildungs- und Schulungs-Maßnahme anzubieten.

Die Fachberater des BremHLR beteiligten sich an den Netzwerkworkshops des NHR-Kompetenznetzwerks die im Mai 2024 in Göttingen und im September, im Rahmen der NHR-Konferenz, in Darmstadt abgehalten wurden. Ferner wurde ein Fachberaterworkshop online abgehalten. Bei den Workshops wurden unterschiedliche Themen des NHR-Betriebs und der Nutzerbetreuung besprochen. Eine Übersicht über die Veranstaltungen ist in Abschnitt 4 zu finden.

3 Konzeptentwicklung zur Verstetigung von BremHLR

Das BremHLR besteht seit dem Jahr 2003 und wird seit seiner Gründung auf Projektbasis gefördert. Um dem langfristigen Bedarf an Beratungsleistung im Bereich des Hochleistungsrechnens und des dazugehörigen Datenmanagements gerecht zu werden wurde eine Initiative initiiert um BremHLR als Landeskompetenznetzwerk zu verstetigen. Hierbei wird auch die vergrößerte Komplexität des NHR-Verbunds berücksichtigt, da die Bremer Nutzenden hierdurch bis zu 9 NHR-Zentren nutzen können, was mehr

Beratungsaufwand mit sich bringt. Die Arbeiten an der Entwicklung eines Konzepts für die Verstetigung von BremHLR wurden im Jahr 2024 begonnen.

BremHLR ist als Kompetenzzentrum Ansprechpartner sowohl für Nutzerkreise und Gremien der Hochschulen im Land Bremen zu Themen des Hochleistungsrechnens, als auch für die Senatorische Behörde in fachlichen, organisatorischen und auch strategischen Fragen zu Kapazität und Nutzung lokaler Rechnersysteme und nationaler Verbünde wie NHR. BremHLR kann ein Bindeglied zu den Datenkompetenzen im Land Bremen darstellen, in dem nationale Aktivitäten im Datenmanagement aus dem Bereich HPC heraus verfolgt werden, u.a. durch Beteiligung seiner Partnereinrichtungen in NFDI- und NHR-Initiativen. Als Kommunikationsplattform informiert BremHLR über Neuerungen in der regionalen und nationalen HPC-Landschaft. Die BremHLR-Fachberatenden sind Multiplikatoren für Themen des HPC in die Forschung und Kommunikatoren zu den HPC-Infrastrukturen hin – der Zusammenschluss in BremHLR ermöglicht es sowohl wissenschaftlichen Nutzern als auch Infrastruktur-Betreibenden, an Informationsflüssen verschiedener NHR-Zentren und deren Initiativen und Kompetenznetzwerken teil zu haben. BremHLR nutzt und fördert hierbei das besondere Profil der beiden NHR-Zentren in Berlin und Göttingen in der HPC-Community-Arbeit der norddeutschen Bundesländer. Als Landeskompetenznetzwerk steht BremHLR der Bremer Forschungspolitik und den Bremer Hochschulen fachlich beratend zur Verfügung. BremHLR ist Baustein der im Land Bremen exzellent aufgestellten und synergistisch genutzten wissenschaftlichen Infrastrukturen der Hochschulen. Es ist offen für Beteiligung weiterer außeruniversitärer Forschungseinrichtungen im Land Bremen.

Strukturell soll das BremHLR als Landesnetzwerk weiterhin aus den HPC-Fachberatenden sowie dem Lenkungsausschuss bestehen. Weiterhin soll die Geschäftsstelle des BremHLR an der Universität Bremen angesiedelt sein um eine gute Vernetzung insbesondere mit den Daten-fokussierten Projekten zu gewährleisten. In regelmäßigen Sitzungen wird über die Entwicklungen im Rahmen des NHR und weiterer Kompetenznetze informiert und beraten. Im Rahmen von BremHLR bestehen bisher originäre Kenntnisse im Bereich des HPC und in der Handhabung großer Datenmengen, die insbesondere bei Modellierungsprojekten erzeugt werden, wobei sich die Beratung bisher auf die eigentlichen Nutzung der HPC- Systeme zur simulationsgetriebenen Erzeugung der Daten fokussiert hat. Als weitergehende Aufgabe über die Beratung zur Nutzung der HPC-Systeme hinaus soll auch im Bereich des Datenmanagements von HPC- Daten beraten werden. Die Handhabung der oft großen Datenmengen die in den Berechnungen auf den HPC-Systemen entstehen erfordert besondere Sorgfalt und Kenntnisse. Dieses betrifft sowohl klassische Modellsimulationen aber auch Datenprodukte die aus HPC-Projekten mit Einsatz von künstlicher Intelligenz erzeugt werden.

In diesem Rahmen sollen bestehende Beziehungen zu anderen Kompetenznetzwerken weiterverfolgt und neue Anknüpfungen zu weiteren Kompetenznetzen, wie den NFDI-Konsortien und insbesondere dem Projekt DataNord, aufgebaut werden. Ein wesentliches Ziel ist hierbei, die Nutzenden dabei zu unterstützen ihre auf den HPC-Systemen erzeugten Daten entsprechend den FAIR-Kriterien zugänglich zu machen. Optional kann BremHLR innerhalb einer Landesinitiative Daten und Computing verfolgt werden, die die Kompetenzen in High-Performance Computing und Datenmanagement unter einem Dach vereinen würde. BremHLR soll der Senatorischen Behörde gegenüber weiterhin im Jahresrhythmus berichtspflichtig sein über die Verwendung der Mittel, den Stand der Vernetzung, laufende und geplante Aktivitäten des Netzwerks und das Land Bremen betreffende Informationen aus dem NHR.

4 Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten

Auch im Jahr 2024 wurden die NHR-Rechner in Berlin und Göttingen intensiv durch Bremer Projekte genutzt. Über das Jahr wurde auf den beiden NHR-Systemen ein prozentualer Anteil

von 9,4% an der gesamten genutzten Rechenleistung der beiden Systeme erreicht. Dieser Nutzungsanteil stellt eine stabile Nutzung ähnlich wie den Vorjahren da.

Der stabile Betrieb der beiden NHR-Systeme ermöglicht eine stabile Nutzung. Insgesamt wurden im Jahr 2024 etwa 157 Mio. core-h¹ durch Bremer Projekte am HLRN abgenommen.

Abbildung 3.1 zeigt die quartalsweise Nutzung der Rechner in Berlin und Göttingen durch die Bremer Projekte in den letzten 5 Jahren. Anfang 2020 wurde die Nutzung wegen einer Umbauphase nur unvollständig erfasst. In Jahr 2024 wurde die Art der Nutzungserhebung an den beiden NHR-Zentren umgestellt. Da die Nutzerstatistik der Zentren zum 2. Quartal 2024 getrennt wurde und in Göttingen ein neues System eingeführt wurde sind die gezeigten Nutzungszahlen ab dem 2. Quartal 2024 ggf. nicht vollständig.

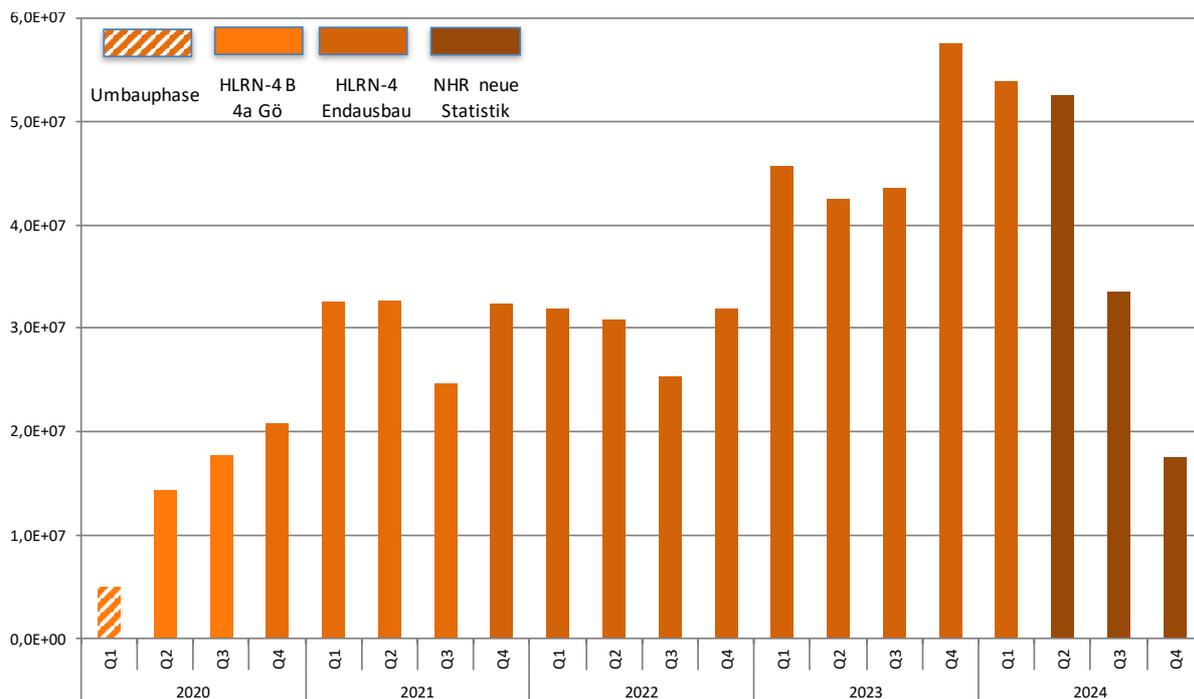


Abbildung 3.1: Quartalsweise Rechenzeitnutzung der Bremer HLRN-Großprojekte auf den HLRN-IV Systemen in der Einheit Prozessor-Stunden (core-h). Die Farben zeigen die Verfügbarkeit der unterschiedlichen Ausbaustufen des HLRN-Systems. Im vierten Quartal 2019 war der Betrieb durch die Umbaumaßnahmen beeinträchtigt und weitgehend nur das HLRN-IV System in Göttingen verfügbar. Im ersten Quartal 2020 waren die Nutzer vielfach mit Portierungsarbeiten befasst. Seit dem vierten Quartal 2020 befindet sich das HLRN-IV System im Endausbau.

Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt die Tabellen 3.1. Im Jahr 2024 wurden vom BremHLR 29 Projekte am HLRN betreut. 4 neue Projekte mit teilweise sehr großem Rechenzeitbedarf wurden im Jahr 2024 vom Wissenschaftlichen Ausschuss der beiden NHR-Zentren bewilligt. 13 Projekte wurden im Berichtsjahr beendet.

¹Seit dem vierten Quartal 2022 wird die Rechenleistung der NHR-Systeme in Prozessorkern-Stunden erfasst. Die Werte der früheren Quartale, die noch in der Norddeutschen Parallelrechner-Leistungseinheit erfasst wurden, wurden entsprechend dem Faktor 96/14=6,857 umgerechnet.



5 Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

NHR Workshop „HPC Competence Networks“

Veranstalter: GWDG

Datum: 21.-22. Mai 2024

Ort: Göttingen

Beschreibung: Workshop zur Diskussion von Themen des NHR-Betriebs und der Nutzerberatung.

17. BremHLR-Workshop *Einführung in die Programmierung mit MPI und OpenMP*

Veranstalter: BremHLR

Datum: 16. – 20. September 2024

Ort: Universität Bremen

Beschreibung: In dem Workshop wurden die Grundlagen der parallelen Programmierung vermittelt. Der Schwerpunkt lag auf den Programmiermodellen MPI und OpenMP. Praktische Übungen bildeten einen wesentlichen Teil des Workshops.

Referenten: Dr. Hinnerk Stüben (Regionales Rechenzentrum der Universität Hamburg) und Dr. Lars Nerger (BremHLR).

NHR Networking Workshop

Veranstalter: NHR-Verein

Datum: 11.-12. September 2024

Ort: Darmstadt

Beschreibung: Workshop zur Diskussion von Themen des NHR-Betriebs und der Nutzerberatung. Working-Group Sitzungen zu unterschiedlichen Fachgebieten, wie Erdsystemwissenschaften.

BremHLR User-Forum

Veranstalter: BremHLR

Datum: 27. September 2024

Ort: Universität Bremen

Beschreibung: Informationsveranstaltung für bestehende und interessierte potentielle Nutzer des NHR. Bestandteil des User-Forums waren Präsentationen von Mitarbeitern der beiden NHR-Zentren zu aktuellen Themen, wie der Umstellung der Nutzerverwaltung in Göttingen und neuen Hardware-Komponenten.

NHR@ZIB & NHR-Nord@Göttingen Fachberater-Workshop

Veranstalter: NHR@ZIB

Datum: 1. Oktober 2024

Ort: online

Beschreibung: Workshop zur Diskussion von Themen des NHR-Betriebs und der Nutzerberatung.

Tabelle 3.2: Von BremHLR betreute Bremer HPC-Projekte. Status: E = Erstantrag, F = Fortsetzung, X = Projektende in 2024; kcore-h: Kontingent im Jahr 2024 in tausend core-h.

Kennung	Projektleiter	Institut	Laufzeit	kcore-h	Status
hbb00001	Prof. Dr. L. Colombi Ciacchi	UB/BCCMS	III/20 – I/24	100	X
hbb00002	Dr. S. Köppen	UB/BCCMS	III/22 – III/24	44000	X
hbb00003	Dr. S. Köppen	UB/BCCMS	IV/22 – III/24	1600	X
hbb00004	Dr.-Ing. I. Grothaus	UB/BCCMS	III/24 – II/25	6240	E
hbc00045	Prof. Dr. T. Neudecker	UB/Chemie	II/20 – III/24	19987	X
hbc00061	Dr. L. Moskaleva	UB/Chemie	IV/21 – IV/24	3720	F
hbc00062	Dr. M. Fischer	UB/Geo	I/22 – IV/25	5340	F
hbc00064	Dr. X. Guo	CUB	I/24 – IV/24	3869	E
hbc00066	Prof. Dr. T. Neudecker	UB/Chemie	III/24 – II/25	3300	E
hbi00037	Prof. Dr. U. Fritsching	UB/FB4	II/17 – II/24	600	X
hbi00059	Prof. Dr. L. Colombi Ciacchi	UB/BCCMS	IV/22 – II/24	726	X
hbi00062	Prof. Dr. U. Fritsching	UB/FB4	III/23 – II/24	634	X
hbi00064	Prof. Dr. U. Fritsching	UB/FB4	III/24 – II/25	8262	E
hbk00059	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	III/17 – IV/24	10131	F
hbk00062	Dr. A. Rozanov	UB/IUP	IV/17 – III/25	1600	F
hbk00083	Prof. Dr. B. Rost	AWI & UB	II/21 – III/24	3665	X
hbk00085	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	IV/21 – III/24	12768	X
hbk00090	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	III/22 – II/24	25000	F
hbk00094	Prof. Dr. B. Rost	AWI & UB	III/22 – III/24	10994	X
hbk00095	Dr. L. Nerger	AWI	III/22 – III/24	10302	X
hbk00096	Prof. Dr. M. Schulz	UB/MARUM	IV/22 – IV/24	12440	F
hbk00097	Prof. Dr. T. Kanzow	AWI & UB	I/23 – IV/24	5600	F
hbk00098	Dr. A. Rozanov	UB/IUP	I/23 – I/25	8825	F
hbk00099	Prof. Dr. T. Kanzow	AWI & UB	II/23 – I/25	10901	F
hbp00058	Prof. Dr. U. Kleinekathöfer	CUB	II/20 – II/24	1328	X
hbp00067	Dr. Y. Liu	UB/BCCMS	IV/20 – I/24	214	X
hbp00068	Prof. Dr. U. Kleinekathöfer	Jacobs U	IV/20 – IV/24	9032	F
hbp00072	Dr. A. Rozanov	UB/IUP	I/22 – III/25	32590	F
hbp00075	Dr. A. Pahedath	UB/BCCMS	I/23 – II/24	2277	X
hbp00076	Dr. S. Amiri	UB/BCCMS	I/23 – IV/24	4372	F

6 Betrieb von NHR@ZIB und NHR-Nord@Göttingen und Verfügbarkeit neuer Cluster-Komponenten an den Zentren

Im Jahr 2024 wurde die Trennung der NHR Zentren NHR@ZIB und NHR-Nord@Göttingen abgeschlossen. Nun werden beide Zentren mit vollständig unabhängiger Nutzerverwaltung betrieben, was z.B. dazu führt, dass auch die Nutzung getrennt erfasst wird. Ebenso werden bei neuen Nutzeranträgen diese Accounts nur noch separat an dem jeweiligen Zentrum eingerichtet und bei Anträgen an beiden Zentren werden unterschiedliche Nutzernamen vergeben. Weiterhin gemeinsam ist noch die Begutachtung der Projektanträge. Diese werden über das zentrale Antragssystem des NHR-Verbunds eingereicht und dann vom gemeinsamen Wissenschaftliche Ausschuss von NHR@ZIB und NHR-Nord@Göttingen begutachtet. Des Weiteren berät der gemeinsame strategisch-technische Beirat die beiden Zentren

Am NHR-Standort in Berlin wurde in Jahr 2024 ein neues Cluster-System in Betrieb genommen, das den bisherigen Rechner erweitert. Dieser Cluster besteht aus

- 168 Rechenknoten; pro Knoten
 - 2 Prozessoren AMD EPYC 9654 Genoa mit je 96 Rechenkernen
 - 1,5 TByte Hauptspeicher

Des Weiteren wurde das bisherige Dateisystem durch neue Hardware ersetzt. Dabei wurde die verfügbare Kapazität von 10 PByte auf 20 PByte verdoppelt. Gemeinsam mit der Installation des neuen Cluster-Systems wurde auch auf dem bisherigen Rechner das Betriebssystem und die Nutzerumgebung wie Compiler erneuert.

Am NHR-Standort in Göttingen wurde ebenfalls ein neues Cluster-System in Betrieb genommen, das die Phase 1 des HLRN-IV Systems ersetzt. Dieser Cluster besteht aus

- 411 Rechenknoten; pro Knoten
 - 2 Prozessoren Intel Sapphire Rapids Xeon Platinum 8468 mit je 48 Rechenkernen
 - 512 GByte Hauptspeicher

Das Filesystem hat in Göttingen eine Kapazität von 8,4 PByte.