

# NHR4CES – wesentlich mehr als nur ein großer Rechner

Christian Bischof  
Matthias Müller

**RWTH**AACHEN  
UNIVERSITY



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT

**NHR4**  
**CES** NHR for  
Computational  
Engineering  
Science

# NHR (Nationales Hochleistungsrechnen) in Kürze

## Ziele:

- **HPC-Kapazitäten** für wissenschaftliche Forschung an Hochschulen
- **Zentrenübergreifende** interdisziplinäre **Kooperation**
- Stärkung der **HPC-Kompetenzen der Nutzenden** und Unterstützung **junger Wissenschaftler\*innen**
- Förderung des **wissenschaftlichen Rechnens**

## Finanzierung:

- ca. 75 Mio. EUR pro Zentrum über 10 Jahre (2021-2030), 50/50 Bund-/Länder-Finanzierung
- Budget kann für **Investitionen, Betriebskosten und Personal** verwendet werden

**RWTH Aachen und TU Darmstadt haben lange bestehende wissenschaftliche Zusammenarbeit  
und ergänzen sich in wissenschaftlichen Schlüsselfeldern**

**RWTH Aachen und TU Darmstadt beantragen deshalb gemeinsam**

**NHR4CES – NHR for Computational Engineering Sciences**



# NHR4CES: NHR for Computational Engineering Sciences



# Vision and Mission of NHR4CES

## NHR4CES = NHR for Computational Engineering Sciences

*“Ziel von NHR4CES ist es, in einer **Kombination von HPC und Forschungsdatenmanagement** ein Ökosystem zu schaffen, das die **Entwicklung skalierbarer Algorithmen und Software für die Entwicklung, die Berechnung und die Herstellung von technischen Produkten**, die von zentraler Bedeutung für Entwicklungen in Wirtschaft und Gesellschaft sind, umfassend unterstützt. Der **Schwerpunkt** von NHR4CES liegt auf den **Ingenieur- und Materialwissenschaften** sowie der ingenieurwissenschaftlich orientierten **Physik, Chemie und Medizin.**“*

### Methodische Kompetenzen:

#### Cross-Sectional Groups (CSGs)

- Parallelism & Performance
- Data Management
- Data Science & Machine Learning
- Visualization

### Fachliche Kompetenzen:

#### Simulation and Data Labs (SDLs)

- Energy Conversion
- Fluids
- Materials Science
- Digital Patient

Unterstützung des  
wiss. Nachwuchs

Mentoring Board

Infrastruktur

HRZ@TUDa  
+  
IT Center@RWTH

# Cross-Sectional Groups

## Parallelism and Performance (4 WM)

PIs: *Christian Bischof, Christian Terboven, Sandra Wienke, Felix Wolf*

- Anwendung von Performance und Correctness Tools auf User Codes
- Parallelisierung und Portierung von Codes

## Data Management (3 WM)

PIs: *Carsten Binning, Christian Bischof, Matthias Müller*

- Unterstützung datenintensiver Workflows
- Verbindung zu NFDI-Initiativen

## Data Science and ML (4 WM)

PIs: *Wil van der Aalst, Kristian Kersting, Bastian Leibe*

- ML-orientierter Software und Support Stack
- Training in ML

## Visualization (2 WM)

PI: *Torsten Kuhlen*

- Explorative und intuitive Datenanalyse in 3D
- Big Data Visual & Immersive Analytics

# Simulation and Data Labs

## Energy Conversion (5 WM)

*Pis: Christian Hasse, Holger Marschall, Heinz Pitsch*

- ODE Löser optimiert für chemische Reaktionen
- In-situ Datenverarbeitung
- Open Source Bibliotheken und Training für OpenFOAM

## Digital Patient (3 WM)

*Pis: Volkmar Schulz, Andreas Schuppert, Guilia Rossetti*

- Systematische Entwicklung von krankheitsspezifischen digitalen Patienten
- HPC-Umgebung für die Integration räumlich aufgelöster Einzelzellenanalyse und -darstellung

## Fluids (5 WM)

*Pis: Marek Behr, Jeannette Hussong, Suad Jakirlic, Martin Oberlack, Wolfgang Schröder*

- Bibliotheken für Gitteradaption und hochstabiles Load Balancing
- Beiträge zu OpenFOAM

## Materials Design (5 WM)

*Pis: Karsten Albe, Sandra Korte-Kerzel, Jochen Schneider, Bai-Xiang Xu*

- Beiträge zu Open Visualization Tool (OVITO)
- Integration von Community Software, z.B. Pyiron, Datalib und Jupyter notebooks



# Mentoring Board

Das Mentoring Board berät das Management Board von NHR4CES im Hinblick auf die Unterstützung von jungen Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen und die Förderung von Frauen in HPC.



**Lois Curfman-McInnes**  
Senior computational scientist  
Argonne National Lab



**Adrian Tate**  
CEO  
Numerical Algorithms Group (NAG)



**Ursula van Rienen**  
Prof.'in Universität Rostock  
Mitglied Acatech

# NHR4CES: Zusammenarbeit im „Betrieb“

- **Systemharmonisierung**

- Verbesserung der Kompatibilität und Dokumentation
- Schneller Datenaustausch (in Vorbereitung)

- **Koordinierte Beschaffungszyklen**

- Immer neueste Hardware aufgrund alternierend getakteter Beschaffungen
- Über die beiden Standorte hinweg immer hohe Systemkapazität und –Verfügbarkeit

		2024				2025				2026				2027				2028				2029				2030			
		Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
@RWTH	Compute Storage						B									B			B									B	
@TUDa	Compute Storage				B							B								B								B	

- **Gemeinsames Supportkonzept**

- Abgestimmte Expertise an den beiden Standorten
- Abgestimmte Unterstützung von Werkzeugen und System-Software



# Resource Allocation Board

- **Gemeinsames NHR4CES Resource Allocation Board (RAB)**

- Die Rechenzeitressourcen werden nach einem wissenschaftsgeleiteten Verfahren vergeben.
- Das Verfahren wird vom NHR Nutzungsausschuss nach den Vorgaben der GWK festgelegt.
- Die Nutzung der Systeme ist dann kostenlos.
- Beide Standorte werden von einem gemeinsamen Board begutachtet.
- Je nach Umfang des Antrages mehrere wissenschaftliche und technische Gutachten.
- Das Begutachtungsverfahren ist für schon begutachtete Forschungsprojekte (z.B. DFG, BMBF) vereinfacht.
- Derzeitige Mitglieder des Resource Allocation Boards:
  - Prof. Dr. Karsten Albe (Materialwissenschaften, TUDa – stellv. Vorsitzender)
  - Prof. Dr. Heinz Pitsch (Maschinenbau, RWTH – Vorsitzender)
  - Prof. Dr. Martin E. Garcia (Condensed Matter Physics and Ultrafast Phenomena, University of Kassel)
  - Prof. Dr. Christian Hasse (Simulation reaktiver Thermo-Fluid Systeme, TU Darmstadt)
  - Prof. Dr. Vera Krewald (Theoretische Chemie, TU Darmstadt)
  - Dr. Matthias Meinke (Chair of Fluid Mechanics and Institute of Aerodynamics, RWTH Aachen University)
  - Prof. Dr. Franziska Schönebeck (Institut für Organische Chemie, RWTH Aachen University)
  - Prof. Dr. Birgit Strodel (Strukturbiochemie, FZ Jülich)

# Lichtenberg II HPC Cluster @ TU Darmstadt



In Betrieb seit	Q4 2020
Hauptspeicher	257 TByte
CPU Peak-Performance	4.5 PFLOPS
GPU Peak-Performance	424 TFLOPS



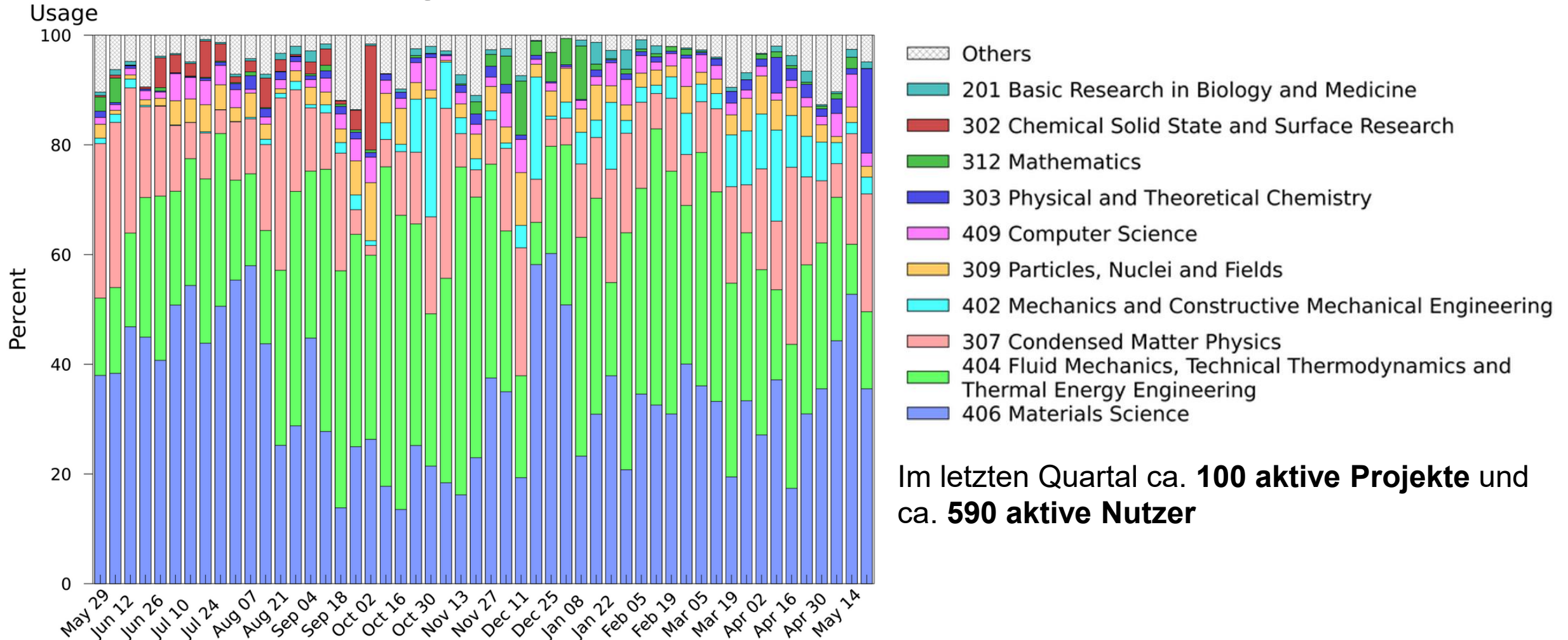
JETZT IN DER ABNAHME	Q3 2023
Hauptspeicher	306 TByte
CPU Peak-Performance	4.0 PFLOPS
GPU Peak-Performance	1.3 PFLOPS



Festplatten	4 PByte
Flash-Speicher	2 PByte

Der Lichtenberg-II Rechner wurde vor NHR nach den Regularien der üblichen Forschungsgroßgeräteförderung (§91b GG) im Rahmen der programmatischen Förderlinie “Hochleistungsrechnen” beantragt und dann in das NHR System eingebracht. Die Fertigstellung von Lichtenberg II ist der Anlass für die heutige Feier!

# Viele Fachdisziplinen benötigen Hochleistungsrechnen!



Im letzten Quartal ca. **100 aktive Projekte** und ca. **590 aktive Nutzer**

# Training

- Angebote aller SDL/CSG und der Betriebsteams
- Anwendungsbezogene Methoden der Künstlichen Intelligenz aktuell stark im Fokus
- Breite Palette der Themen spiegelt fachliche Breite der Nutzenden wider.
- Abgestimmt mit Ländernetzwerken



18.09.2023 10:00 - 19.09.2023 15:00	Scaling Unet in native Pytorch and Tensorflow	Training	SDL Materials Design
18.09.2023 11:00 - 19.09.2023 19:00	1st NHR Conference	Conference	NHR Alliance
21.09.2023 13:00 - 22.09.2023 17:30	Machine Learning in Combustion	Training	SDL Energy Conversion
21.09.2023 14:00 - 15:00	HPC Consultation Hour #23	Consultation Hour	IT Center RWTH Aachen University
28.09.2023 16:00 - 17:00	Machine Learning Consultancy Hour	Consultation Hour	CSG Data Science and Machine Learning
11.10.2023 09:00 - 13:00	Process Mining and Scientific Workflows running on the HPC cluster	Training	CSG Data Science and Machine Learning
12.10.2023 09:00 - 13.10.2023 13:00	Introduction to Machine Learning and Deep Learning	Training	CSG Data Science and Machine Learning
19.10.2023 14:00 - 15:00	HPC Consultation Hour #24	Consultation Hour	IT Center RWTH Aachen University
23.10.2023 09:00 - 25.10.2023 17:00	Machine Learning for Materials Science	Training	SDL Materials Design
25.10.2023 13:00 - 14:30	Introduction to interactive HPC with JupyterHub at the RWTH	Training	Operations NHR4CES
26.10.2023 16:00 - 17:00	Machine Learning Consultancy Hour	Consultation Hour	CSG Data Science and Machine Learning
02.11.2023 14:00 - 15:00	HPC Consultation Hour #25	Consultation Hour	IT Center RWTH Aachen University
06.11.2023 08:00 - 16.11.2023 16:00	Parallelization in OpenFOAM for HPC Deployment	Training	SDL Energy Conversion



# We are NHR4CES!







[office@nhr4ces.de](mailto:office@nhr4ces.de)  
[www.nhr4ces.de](http://www.nhr4ces.de)