

Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen

<https://gwdg.de>

HPC bei der GWDG

Treffen mit Computacenter, NLGA

Christian Boehme, Christian Köhler, Julian Kunkel,
Martin Skowronek



Table of Contents

Vorstellung HPC bei der GWDDG

Aktuelle Beschaffung

HPC-Nutzung

Neue Projekte

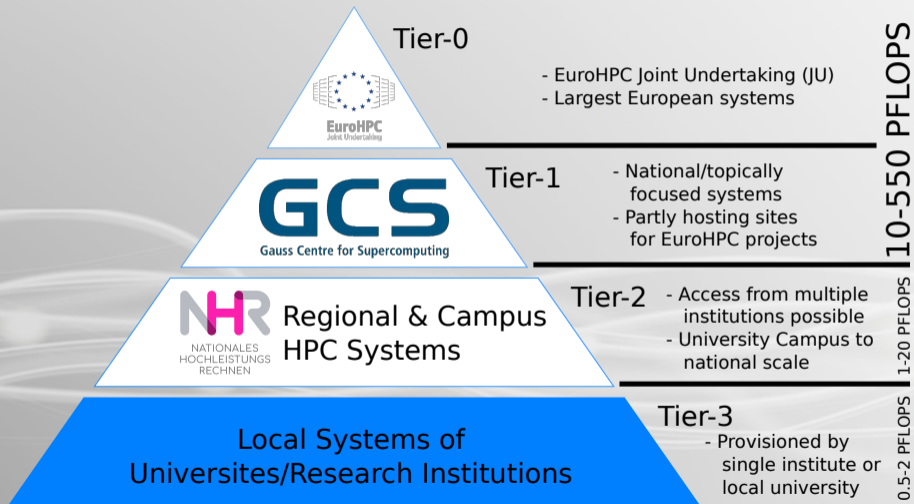
- Betreibt alle HPC-Services der Uni Göttingen
- Eigene Forschungsprojekte im Bereich der angewandten Informatik
- Ungefähr 200 Mitarbeiter in 8 Arbeitsgruppen



<https://www.gwdg.de>



- 60+ Mitarbeitende
- Bearbeitet alle HPC-und KI-Themen der GWDG
- Zentrum für Nationales Hochleistungsrechnen (NHR)
deutschlandweit - T2 HPC
- GWDG Scientific Compute Cluster - MPG, Uni Göttingen+DFG - T3 HPC
- KI-Servicezentrum für sensible und kritische Infrastrukturen (KISSKI)
- Quantum Computing Beratungszentrum QUICS
- Demnächst: HPC für Hochschule.digital Niedersachsen (HdN)
- Zusätzlich: Betreiber des DLR Supercomputers CARO



HPC landscape in Germany

Introduction GCS+NHR



- **GCS** - Gauss Centre for Supercomputing e.V.
 - 3 largest HPC systems in Germany → Tier 1
 - Access for researchers in Germany and European researchers via *EuroHPC Joint Undertaking (JU)*
- **NHR** - National High Performance Computing (NHR-Verein e.V.)
 - 9 HPC centers are funded → Tier 2
 - Access for researchers from all German Universities
 - Consulting from NHR staff & various HPC networks
 - Promotion of young scientists via *NHR Graduate School*
- Both GCS and NHR centers host large **GPU clusters** suitable for **AI training and inference** and offer **consulting** for AI users.



- Phase 1 (2018) → auSSer Betrieb
 - 448 Standardknoten (2 Xeon Gold 6148, 2x20 CPU-Cores, 192 GB Speicher)
 - High Mem-Knoten: 16x 768 GB
- Phase 2 (2020) → zu ersetzendes System
 - 1022 Standardknoten (2 Xeon Platinum 9242, 2x48 CPU-Cores, 384 GB Speicher)
 - High Mem-Knoten: 16x 768 GB, 2x 1,5 TB
 - 3 GPU-Knoten (2 Xeon Gold 6148, 2x20 CPU-Cores, 768 GB Speicher, 4x NVIDIA V100)
- Seit 2021 Öffnung für den NHR-Verbund



■ NHR NEC CPU-Cluster (Ersatz Emmy P1)

- Jeweils 2x Intel Sapphire Rapids 8468 (48 Kerne)
- 164x 256 GB, 164x 512 GB, 12x 1 TB, 2x 2 TB

■ NHR+**SCC** NEC CPU Add-on 2023

- 20+**44**x 512 GB, 16+**4**x 1 TB, **1**x2 TB
- 4 Knoten pro 2 HE-Chassis mit jeweils
 - 2x Intel Sapphire Rapids 8468 (48 Kerne) CPU
 - 1x Cornelis Omni-path (100 Gbit/s) HCA



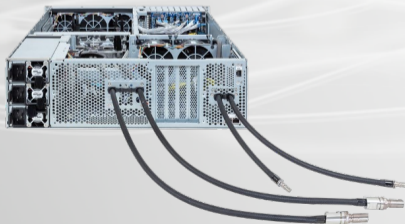
■ MEGWARE GPU-Cluster Grete

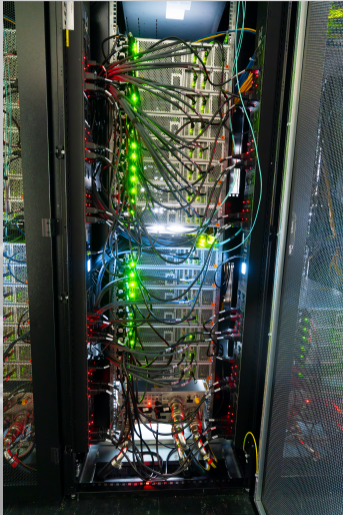
- Knoten aus verschiedenen Projekten:
34x NHR, 22x REACT, 35x KI-Servicezentrum, 9x Institute/SFBs, **3x SCC**

■ MEGWARE GPU Add-on

- 5 Knoten mit jeweils
 - 2x Intel Sapphire Rapids 8468 (48 Kerne) CPU
 - 4x NVIDIA H100 SXM5 (94 GB) GPU
 - 2x InfiniBand HDR (200 Gbit/s) HCA
- 3 HE pro Knoten, DLC
- via Rahmenvertrag KI-Servicezentrum

■ Seit Inbetriebnahme mit gemeinsamem Betriebskonzept





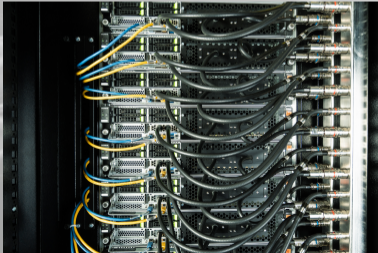
“Grete”/REACT

Left side: power+fabric

Right side: LAN+DLC

Source: GWDG

- Direct Liquid Cooling (DLC) improves the **energy-efficiency** of HPC systems.
- Power Usage Effectiveness (PUE) as low as 1.03, i.e. only 3% overhead for cooling is achievable.
- Extracted heat can be reused for other purposes.

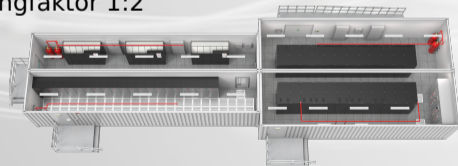
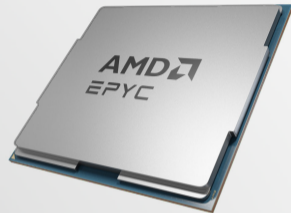


← DLC manifold with
GPU nodes

Primary cooling loop →



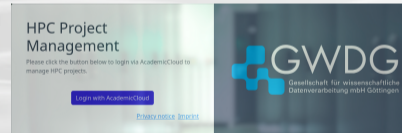
- Ausschreibung Mai 2025, Zuschlag im September
- Anwendungs- und synthetische Benchmarks
 - GROMACS, OpenFOAM, Quantum ESPRESSO, PALM
 - HPL, HPCG, IO500 (als Funktionstest)
- **CPU-System** (je 2x 128 cores, 768GB-4 TB), zusätzlich
 - GPU-Technologieupdate (je 8x NVIDIA B200)
 - Turbo-Knoten: 2x32c, 768 GB , 2x NVMe SSD, MOLPRO-Benchmark
 - Vis-Knoten: je 4x NVIDIA RTX Blackwell
 - Cornelis CN5000 Omni-Path (400 Gb/s), Blockingfaktor 1:2
- **Nachnutzung** DLC-Infrastruktur
- Installation in zwei Phasen:
CPU-Technologieupdate AMD Turin→Venice



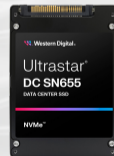
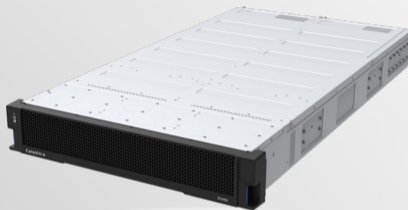
- Nutzung der Nachkaufoption geplant für
 - Tier-3-System (Scientific Compute Cluster)
 - Hochschule.Digital Niedersachsen - HPC.NDS
 - Beschaffungen für einzelne Institute/Berufungen
- Spezifikationen in der Ausschreibung
 - Preisliste für alle Komponenten (Rechner+Infrastruktur)
 - $\leq 7\%$ Aufpreis ggü. initialer Beschaffungen
 - $\leq 7,5\%$ davon für Wartung
 - kein Overhead für Lieferung bei Auslösung ≤ 30 Tage nach Zuschlag
 - Preisanpassung wg. Wechselkursschwankung $> 3\%$ möglich
 - Ansonsten Rücksprache mit OEMs vorbehalten



- Systeme: NHR (Emmy/Grete), Scientific Compute Cluster (SCC), KI-Servicezentrum, REACT-Cluster, Hosting
- Projektportal für u.a. JARDS/nhr - goe Projekte: <https://hpcproject.gwdg.de>
- Compute-Knoten über **Slurm** erreichbar
- Systemübergreifende Doku: <https://docs.hpc.gwdg.de>
- Compute/Quota Self-Service CLI `sbalance/show-quota`
- Aktuelle Entwicklungen
 - Exportkontrolle: Länderangabe implementiert
 - nächster Schritt: Automatisierung GPU-Limits
 - Rechenzeit/FS-Quota Anzeige im Portal, Rückmeldung aus System in Arbeit



- **HOME** (Vast) pro Account verfügbar, automatisches Tape-Backup, für Konfiguration/Tests/Skripte
- **COLD/PROJECT** (Ceph) für Daten außerhalb aktiver Compute-Jobs
- **WORKSPACE** (Lustre) Einrichtung on demand, zeitlich limitiert, höchste Performance
- **PERM** Archivspeicher (nur NHR)



- Open Source Containerlösung
- Kompatibel mit Images von DockerHub
- Auf GWGD HPC-Systemen als Modul direkt verfügbar:

module load apptainer

- GPU-Nutzung möglich (z.B. mit CUDA)
- Vordefinierte Container aus wiss. Anwendungsgebieten: Bioinformatik, Quantencomputing-Simulationen, JupyterHPC, RStudio





APPTAINER

- Zugriff auf HPC und Wissen um HPC-Nutzung ist oft lückenhaft in Studium und Forschung.
- Wir bieten HPC-Ressourcen via Webbrowser für alle Arten von Accounts an.
 - Testzugang kann einfach per Mail beantragt werden.
- Kursaccounts können gemeinsam angelegt werden.




Server Options

HPC Project (Username)
Test Accounts AG C SCC (u14533) v Standard Profiles



HPC Type

Jupyter  <input checked="" type="checkbox"/>	Desktop  <input type="checkbox"/>
---	--

HPC Application

JupyterLab  <input checked="" type="checkbox"/>	RStudio  <input type="checkbox"/>	Code IDE  <input type="checkbox"/>
--	--	---

HPC Device

CPU  <input checked="" type="checkbox"/>	GPU  <input type="checkbox"/>
---	--

► Advanced

[Documentation](#)
Jupyter-HPC resources are limited and shared between all users. Dedicated resources and profiles for courses are available upon request by lecturers. Please shut down your jupyter server via the hub control panel if you don't need it anymore, or it will continue running!

Start

■ Trainingsangebot der GWDG für

- Beschäftigte
- Führungskräfte
- Studierende
- Auszubildende

■ Registrierung per AcademicCloud

■ Kursinhalte insb. aus den Bereichen

- HPC: Bash MPI, CUDA, Jupyter, ...
- KI: Deep Learning, Tools, Performance Engineering, ...

■ Übersicht: https://docs.hpc.gwdg.de/training/gwdg_academy

■ Registrierung: <https://academy.gwdg.de/>



- Grundsystem ist zentral aufgebaut
 - CPU-, GPU-, Login-, Transfer- und weitere Serviceknoten
 - Lokaler und paralleler Flash- und Plattenspeicher
 - Hochleistungsnetzwerk (Omni-Path, InfiniBand)
 - Betriebssystemimage und Anwendungssoftware-Bereitstellung
- Edge-Systeme für Screening-Facilities
 - GWGD kann bei lokaler Installation unterstützen.
 - High-Throughput Datenverarbeitung
 - Qualitätskontrolle, Datenreduktion
 - Anbindung an das HPC-System

- **Project partners: GWDG, UGOE, AQUA, CIDAS, IEE, UMG, LUH, LUIS, MHH**
- **Training platform: additional cluster modul like NHR Grete**
 - Hardware: 4xA100/H100-nodes with IB HDR
 - Location: GWDG
- **Inference service: geo-redundant cluster module**
 - Focus on inference throughput and flexible replication
 - Hardware: 4xH100/8xH200 nodes
 - Locations: GWDG and LUIS
- **Research hardware with various architectures**
 - Focus on developing and porting AI models
 - Hardware: ARM, Graphcore, RISC-V, FPGAs, ...
 - Locations: GWDG and LUIS
- **Extension planned for 2026** → Inference hardware



■ Coordinated by HLRS with expertise from strong partners

- GWDG: Inference platform, security, data management
- LRZ: AI software stacks, training
- KIT: Trustworthy AI
- SICOS: Outreach, industry customers

■ Focus

- Start-ups, SMEs, industry, academia and the public sector
- Manufacturing, engineering and research

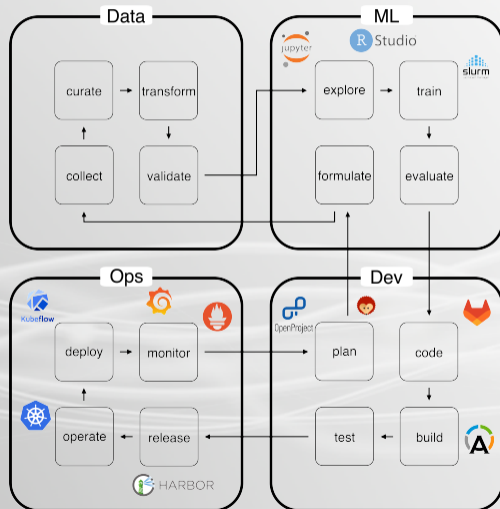
■ AI Factory = 2 projects

- Service project over 3 years (since 1st April 2025)
- Infrastructure over 5 years (start mid 2026)



- **Infrastructure:** AI-optimized supercomputer tailored for AI workloads, simulation, data analytics, as well as hybrid workflows
- **Comprehensive AI services:** Technical consulting, customized training and onboarding support
- **Concierge Services:** Expert guidance from the initial inquiry to the implementation
- **Seamless Transition:** Migrate effortlessly from laptop or cloud to the AI-optimized supercomputer
- **Ecosystem Collaboration:** Embedded in Germany's robust AI ecosystem
- **Service Brokering:** Connecting with European national and international AI initiatives

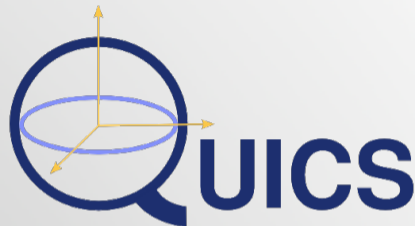
- Providing Cloud backend
- Covering full MLOps Lifecycle
- Key tasks
 - Scalable AI Accelerator (SAIA) platform
 - SecureHPC workflow
 - Hardened GWGD Cloud



■ Projektpartner

- Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen (GWGD)
- Leibniz Universität Hannover / L3S
- Physikalisch-Technische Bundesanstalt, PTB (Unterauftrag)

- Beratungsangebot an KMUs für Quantum Computing Anwendungen
- Anwendungsbeispiele: Optimierungsprobleme, Quantum Machine Learning
- Einfacher Zugang zu QC-Ressourcen, GPUs für Simulationen und Neuromorphe Hardware



- Drei Zentren für zusätzliche Tier-3-HPC-Versorgung in Niedersachsen
U Göttingen/GWGD, LU Hannover, TU Braunschweig
- Sechs "Digital Science Support Teams"
U Göttingen/GWGD, LU Hannover, TU Braunschweig,
TU Clausthal, U Oldenburg, U Osnabrück
 - Entwicklung von langfristig nutzbarer Forschungssoftware
 - KI-Nutzung bei der Entwicklung von Forschungssoftware
- Koordination durch TU Braunschweig (SST) und
GWGD (Tier-3-Versorgung)



- Mehr Gestaltungsmöglichkeiten und Technologieupdates für niedersächsische Universitäten
- Vom MWK bereitgestellt
 - Personalmittel für neue Beratungsleistungen
 - Investitionsmittel für leistungsstarke HPC-Systeme: EUR 8,1M
 - Ergänzung durch DFG-Forschungsgroßgeräteanträge
 - Geplante Laufzeit 2026-2031
- Von nutzenden Universitäten bereitgestellt: Energiekosten
 - Entstehende Kosten werden nach Nutzung verteilt

