

Supercomputer „Levante“ am DKRZ eingeweiht

Der neue Supercomputer Levante wurde am 22. September am DKRZ mit Vertreter:innen aus Politik und Wissenschaft feierlich eingeweiht – u. a. mit Hamburgs Zweiter Bürgermeisterin und Wissenschaftssenatorin Katharina Fegebank, BMBF-Staatssekretärin Judith Pirscher, den Präsidenten der Max-Planck-Gesellschaft und der Helmholtz-Gemeinschaft, Prof. Martin Stratmann und Prof. Otmar Wiestler. Durch die Veranstaltung führte der Hamburger Meteorologe Frank Böttcher, der jüngst zum nächsten Vorsitzenden der Deutschen Meteorologischen Gesellschaft gewählt wurde. Neben politischen Statements verdeutlichten zwei Podiumsdiskussionen zu Herausforderungen der Klimaforschung Hamburgs exzellenten Ruf als Klimaforschungsstandort. Es wurde deutlich, dass Klimaforschung Rechenleistung, Speicherkapazität sowie umfassende technische Unterstützung braucht, wie sie das DKRZ zur Verfügung stellt. Die Veranstaltung bot für alle Gäste die Möglichkeit, den neuen Supercomputer zu besichtigen, dessen erste Ausbaustufe seit März 2022 in Betrieb ist und bereits erste Ergebnisse geliefert hat. Weitere Informationen: dkrz.de/de/Einweihung-Levante (Kontakt: [Michael Böttcher](mailto:Michael.Böttcher@dkrz.de), DKRZ)

Large-Scale-Rechenzeitprojekte im NHR-Verbund

Im Zuge der abgestimmten Rechenzeitvergabe innerhalb des NHR-Verbundes bieten alle beteiligten Zentren die Möglichkeit, Large-Scale-Projekte einzureichen. Die Bewilligungsentscheidung erfolgt quartalsweise nach einem Begutachtungsprozess durch den zentralen NHR-Nutzungsausschuss. Am 12. September wurden erstmalig 27 Anträge, die bei den lokalen Zentren eingingen, durch das Gremium final bewertet. Dabei wurden Rechenzeitkapazitäten von mehr als 700 Mio. Kernstunden sowie fast 1,5 Mio. GPU-Stunden bewilligt. Aktuell nehmen die NHR-Zentren wieder Large-Scale-Anträge an, die vom zentralen Nutzungsausschuss in seiner Dezembersitzung geprüft werden. Antragstellung: nhr-verein.de/rechnernutzung (Kontakt: [Thomas Kühne](mailto:Thomas.Kühne@nhr-verein.de), Universität Paderborn)

Exascale-Erdsystemsimulationen einer wärmeren Welt

Am 1. September startete das erste Modul „Faster“ des vom BMBF mit rund 14 Mio. Euro für vier Jahre geförderten Projektes WarmWorld. Das ambitionierte Vorhaben vereint mehr als 30 Wissenschaftler:innen sowie Software-Ingenieur:innen aus 12 Forschungseinrichtungen und Universitäten. Ziel ist es, Fortschritte in der Informationstechnologie auszunutzen, um mögliche zukünftige Klimaerwärmungen erstmals auf Kilometerskalen zu si-

mulieren und auszuwerten. Dadurch können essenzielle Prozesse im Klimasystem, wie Gewitterstürme und Ozeanwirbel, direkt simuliert und somit die Unsicherheiten in Klimaprojektionen stark reduziert werden. Das DKRZ übernimmt die Koordination für das Modul „Faster“. Die Module „Easier“ und „Better“ beginnen Anfang 2023. Eine Besonderheit ist das Modul „Smarter“, in dem eine offene Ausschreibung für Projektvorschläge aus der angewandten Mathematik und Informatik geplant ist, um die Workflows und den Modell-Durchsatz zu verbessern. Weitere Informationen: dkrz.de/de/warmworld_start (Kontakt: [Claudia Frauen](mailto:Claudia.Frauen@dkrz.de), DKRZ)

Neue KI-Gruppe „Robust and Efficient AI“ am KIT

Am Steinbuch Centre for Computing (SCC) des KIT startete zum 1. September die neue Nachwuchsforschungsgruppe „Robust and efficient AI“. Die Quantifizierung von Unsicherheiten in der Zeitreihenvorhersage ist für industrielle Anwendungen von großer Relevanz. Moderne KI-Modelle erzielen zwar hohe Vorhersagegenauigkeiten, benötigen jedoch immense Mengen an Rechenressourcen. Gängige Ansätze der Fehlerabschätzung sind in gleichem Maße rechenintensiv, was ihren Einsatz in großen KI-Anwendungen derzeit noch erheblich erschwert. Die Forschungsarbeiten der Gruppe zielen darauf ab, mit Ansätzen des verteilten, datenintensiven Hochleistungsrechnens skalierbare Algorithmen zur Quantifizierung von Unsicherheiten zu entwickeln, um den Bedarf der Modelle an Speicher und Rechenleistung zu adressieren und gleichzeitig die Trainings- und Vorhersagezeit zu reduzieren. Die Gruppe geht aus dem Projekt „EQUIPE: Skalierbare, effiziente Methoden zur Quantifizierung von Unsicherheiten in der KI-basierten Zeitreihenvorhersage“ hervor, das im Rahmen der BMBF-Richtlinie zur Förderung von Ideen nachwuchs Forschungsvorhaben von KI-Nachwuchsgruppen finanziert. Weitere Informationen: scc.kit.edu/ueberuns/16369.php (Kontakt: [Charlotte Debus](mailto:Charlotte.Debus@scc.kit.edu), SCC)

Supercomputing 2022 in Dallas

Als größte und wichtigste internationale Plattform im Bereich des High Performance Computing (HPC) bietet die SC22 vom 13. bis 18. November in Dallas, USA der weltweiten Community die Möglichkeit zum Austausch zu neuen Produkten, technologischen Innovationen und wissenschaftlichen Erkenntnissen. Thematisiert werden Schlüsselfragen und Neuentwicklungen in den Bereichen HPC, Networking, Speichertechnologien, Software- und Hardware-Entwicklungen sowie Anwendungen und Forschung. Mehrere GA-Mitglieder beteiligen sich wie folgt am

SC-Programm: • Das JSC stellt die Quantencomputing-Infrastruktur JUNIQ, die Planungen zum europäischen Exascale-Rechner JUPITER sowie hauseigene HPC-Werkzeuge vor. JSC-Mitarbeitende beteiligen sich mit einem Workshop zum Codesign von Supercomputern, zwei Tutorials zur verteilten GPU-Programmierung für Exascale und zum hybriden parallelen Performance-Engineering, einem eingeladenen Vortrag und mehreren Birds-of-a-Feather-Sessions (BoFs). • Das Team des HLRS trägt zum Programm der Konferenz mit einer Beteiligung an der BoF „European HPC Ecosystem Summit“ sowie dem Poster „PowerMan: Online Power Capping by Computationally Informed Machine Learning“ innerhalb der Research Poster Session bei. • Das LRZ setzt einen Schwerpunkt auf Future Computing – vor allem die Integration von HPC und Quantencomputing. Dazu werden auch LRZ-Partner vom Munich Quantum Valley sowie vom BMBF-Projekt Q-Exa zugegen sein. Ein weiterer Fokus liegt auf dem Thema Energieeffizienz. • Forschende aus dem JARA-CSD präsentieren die gemeinsamen Aktivitäten am JSC-Stand. Sie beteiligen sich an Tutorials und Workshops zu den Themen Advanced OpenMP, Mastering Tasking mit OpenMP, Coupling Machine Learning und HPC sowie Data Race Detection und einem Research-Poster zu einem C++-Interface für MPI. • Das NHR@FAU ist mit dem Tutorial „Node-Level Performance Engineering“ vertreten. • Das ZIH und ScaDS.AI Dresden/Leipzig werden ihre Aktivitäten zu Performanceanalyse, Data Intensive Computing, Data Analytics und KI präsentieren. Neben weiteren interaktiven Demonstrationen werden u. a. die Software-Werkzeuge „Vampir“ zur Performanceanalyse – als Neuheit mit Analysen von TensorFlow- und PyTorch-Anwendungen – sowie „asanAI“ für das Training und den Entwurf von KI-Modellen und „codeCAI“ zur Generierung von Programmcode aus natürlichsprachlichen Anweisungen vorgeführt. Das Team wird zudem im wissenschaftlichen Programm mitwirken. Weitere Informationen: sc22.supercomputing.org.

NHR@FAU-Team zur Student Cluster Competition

Jedes Jahr lädt die Student Cluster Competition (SCC) der SC22 Studierende aus der ganzen Welt ein, sich im HPC zu messen. Die Herausforderung besteht darin, höchstmögliche Rechenleistung mit einem selbst konfigurierten System zu erreichen. Neben klassischen HPC-Benchmarks wie LINPACK, HPCG und IO500 umfassen die Anwendungen auch den CFD-Code PHASTA, die Molekulardynamikanwendung LAMMPS sowie eine bislang unbekannte Anwendung, die erst während des Wettbewerbs in Dallas enthüllt wird. Ein sechsköpfiges Team aus Bachelor-Studierenden der Studiengänge Informatik und Computational Engineering der FAU tritt bei der SCC an. Es wird gemeinsam vom Lehrstuhl Rechnerarchitektur und dem Zentrum für Nationales Hochleistungsrechnen Erlangen (NHR@FAU) betreut. Das Team entschied sich für einen einzelnen Knoten, der von MEGWARE zur

Verfügung gestellt wurde und identisch mit den im NHR@FAU-System „Alex“ eingesetzten ist. Weitere Informationen: hpc.fau.de/2022/09/20/student-cluster-competition-news-2022/ (Kontakt: [Dominik Ernst](mailto:Dominik.Ernst@FAU), NHR@FAU)

Hackathon zum Thema Energy-Efficient AI

Im Dezember findet der zweite AI-HERO-Hackathon statt, der vom KIT zusammen mit dem Deutschen Krebsforschungszentrum organisiert wird. An drei Tagen entwickeln die Teilnehmenden möglichst energieeffiziente KI-Modelle für einen Anwendungsfall aus den Bereichen Energie oder Gesundheit. Die Modellentwicklung findet auf dem Karlsruher Supercomputer HoreKa statt, der es erlaubt, die verbrauchte Energie pro Job und Knoten zu messen. Das diesjährige Event wird gemeinsam von den Forschungsplattformen Helmholtz AI, Helmholtz Imaging sowie Helmholtz Metadata Collaboration zusammen mit dem NHR@KIT ausgerichtet und von Lenovo unterstützt. KI-Forschende aus allen NHR-Zentren, Helmholtz-Zentren sowie beteiligten deutschen Universitäten sind herzlich zur Teilnahme eingeladen. Weitere Informationen und die Registrierung: events.hifis.net/e/aihero2 (Kontakt: consultant-helmholtz.ai@kit.edu)

Relaunch der NHR4CES-Website

Modernes Design, klare Strukturen und neue Features: Die neue NHR4CES-Website ist ganz auf die Nutzenden ausgelegt. Neben einer übersichtlichen Darstellung der Supportmöglichkeiten stehen ein Formular für generelle Anfragen sowie die fachlichen Kontakte der Cross-Sectional Groups (CSG) und Simulation and Data Labs (SDL) für eine optimale Unterstützung zur Verfügung. Ebenso werden Informationen zur Struktur von NHR4CES und der Vergabe von Rechenzeit bereitgestellt. Trainings, Workshops und Events der SDLs und CSGs sind im Kalender aufgeführt. Daneben stehen auch die Mitarbeitenden der verschiedenen Gruppen und Labs im Fokus der Webseite und präsentieren hier ihre Arbeit; durch persönliche Profile bietet sich für die beteiligten Personen die Möglichkeit, die Kernkompetenzen und Forschungsschwerpunkte vorzustellen. So können Nutzende genau den oder die Ansprechpartner:in für ihr Anliegen finden. Eine Datenbank bietet einen Überblick über die Projekte, die im Rahmen von NHR4CES durchgeführt wurden. Website: www.nhr4ces.de (Kontakt: servicedesk@itc.rwth-aachen.de)

Veranstaltungen

- 26.-28.10.2022: [Directive-based GPU programming with OpenACC](#), JSC@GCS, online
- 26.-28.10.2022: [Modern C++ Software Design](#), LRZ@GCS, online

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:
hpc-calendar.gauss-allianz.de