

Zwei neue Quantencomputer in Jülich

Die Jülich UNified Infrastructure for Quantum computing (JUNIQ) bietet Wissenschaft und Industrie Zugang zu modernsten Quantencomputern. Die Integration dieser Systeme in die modulare HPC-Umgebung des JSC ermöglicht zudem hybride Quantum-HPC-Anwendungen. Aktuell bietet JUNIQ Zugang zum Software-Simulator JUQCS sowie zum D-Wave Advantage™ System JUPSI, einem Quantenannealer. Künftig wird auch ein Quantensimulator des Herstellers Pasqal angebunden. In den kommenden 2 Monaten wird dieses Angebot außerdem um 2 neue Systeme erweitert: Der deutsch-finnische Hersteller IQM Quantum Computers wird einen gatterbasierten Quantencomputer des Typs IQM Spark liefern. Darüber hinaus fördert das NRW-Landesministerium für Kultur und Wissenschaft einen Ionenfallen-Quantencomputer, den das Siegener Start-up eleQtron und das JSC gemeinsam in die modulare HPC-Umgebung integrieren werden. Die Qubits dieses Systems werden mit Hilfe einer revolutionären Mikrowellen-Steuerung rechnen, welche an der Universität Siegen erfunden wurde. Weitere Informationen: go.fzj.de/jsc-erweiterung-junIQ-infrastruktur-2024. (Kontakt: [Kristel Michielsen](mailto:Kristel.Michielsen@JSC@GCS), JSC@GCS)

Deutschlands erster hybrider Quantencomputer

Am LRZ wurde erstmals ein Quantenprozessor in einen Supercomputer integriert: Das BMBF förderte das Projekt namens „Q-Exa“ mit rund 40 Mio. Euro. Die Firmen IQM Quantum Computers, Eviden und HQS Quantum Simulations bauten das erste hybride, einsatzfähige System gemeinsam mit dem LRZ auf. Dafür wurde ein 20-Qubit-Prozessor von IQM Quantum Computers auf Basis supraleitender Schaltkreise mit klassischer Rechnertechnologie verbunden. Erste Testläufe zeigen, dass das HPC-System SuperMUC-NG und Q-Exa erfolgreich Aufträge austauschen. Zur Steuerung des Q-Exa-Systems entwickelten Spezialist:innen des LRZ und von Partnerinstitutionen des Munich Quantum Valley zudem eine erste Version des Munich Quantum Software Stack (MQSS). Dessen Tools integrieren Quantensysteme in die Workflows von Supercomputern und koordinieren Berechnungen des Quantenprozessors. Ausgewählte Forschende können Q-Exa sowie den MQSS demnächst für eigene Projekte einsetzen. Weitere Informationen: tiny.badw.de/tRWJt. (Kontakt: presse@lrz.de, LRZ@GCS)

DIM.RUHR: Datenkompetenz im Gesundheitswesen

Gesundheitsversorgung und -forschung produzieren in einem hohen Maße Daten. Insbesondere vor dem Hin-

tergrund des kürzlich in Kraft getretenen Gesundheitsdatennutzungsgesetzes, das Versorgung und Forschung auf Datenebene stärker verknüpfen soll, werden Datenkompetenz und damit ein verantwortungsvoller Umgang mit Gesundheitsdaten immer wichtiger. Das Projekt DIM.RUHR möchte diese Lücke schließen. Durch gezielte Lehr-, Forschungs- und Vernetzungsangebote soll die Datenkompetenz bei Forschenden und bei Versorgenden gestärkt werden. Um Akzeptanz und Bewusstsein bei der Nutzung von Gesundheitsdaten sowie die Schaffung eines digitalen Gesundheitsdatenökosystems zu erreichen, bündeln die Universität Witten/Herdecke (UW/H), die Ruhr-Universität Bochum, die Hochschule für Gesundheit Bochum, die Hochschule Niederrhein, das Fraunhofer ISST sowie das ZB MED – Informationszentrum Lebenswissenschaften und das Netzwerk ORCA.nrw ihre Kompetenzen. DIM.RUHR ist eines von insgesamt 11 Datenkompetenzzentren, deren Aufbau durch das BMBF im Rahmen der Datenstrategie der Bundesregierung und des BMBF-Aktionsplans Forschungsdaten seit November 2023 für 3 Jahre gefördert wird. Weitere Informationen: dim-ruhr.de/. (Kontakt: dimruhr@uni-wh.de, UW/H)

Schlüssel für die europäischen Exascale-Systeme

Nach 3 Jahren Forschung und Entwicklung haben die Projekte DEEP-SEA, IO-SEA und RED-SEA ihre abschließenden Reviews mit ausgezeichnetem Feedback bestanden. In allen 3 SEA-Projekten wurden Technologien für hocheffiziente, skalierbare heterogene Exascale-Supercomputer entwickelt – insbesondere mit Blick auf die „Modular Supercomputing Architecture“ (MSA). Die kommende Exascale-Generation, die mindestens 10^{18} Rechenoperationen pro Sekunde ausführt, wird den wissenschaftlichen und industriellen Anwendungsbereich revolutionieren. Das europaweit erste System dieser Art, JUPITER, wird noch in diesem Jahr schrittweise am JSC installiert. Die hohen Anforderungen an die Energieeffizienz werden durch die Integration verschiedener Hardware-Komponenten, darunter CPUs, Beschleuniger (wie GPUs) sowie spezielle Kommunikations- und Speichertechnologien adressiert. Die damit verbundenen Herausforderungen standen im Fokus der SEA-Projekte, die Lösungen zur effizienten Nutzung von heterogenen und MSA-Supercomputern geschaffen und damit den Stand der Technik grundlegend vorangetrieben haben. Die SEA-Projekte wurden von der European High-Performance Computing Joint Undertaking (JU) sowie Belgien, Deutschland, Frankreich, Griechenland,

Irland, Italien, Spanien, Schweden, der Schweiz und der Tschechischen Republik finanziert. Weitere Informationen: go.fzj.de/jsc-sea-projekte-abschluss-2024. (Kontakt: [Estela Suarez](mailto:Estela.Suarez@GCS), JSC@GCS)

Digitaler Zwilling der Membranherstellung

Lange, flexible Kettenmoleküle aus chemisch unterschiedlichen Blöcken – Blockcopolymer – bilden räumlich periodische Strukturen auf der Nanometer-Skala. Separieren und Filtrieren sind wichtige technische Prozesse, in denen Membrane aus Blockcopolymer Anwendung finden – z. B. zur Wasseraufbereitung. Im BMBF-Projekt „Virtuelles skalenübergreifendes Design zur Teilchensimulation mittels modularem Supercomputing (MExMeMo)“ entwickelt ein interdisziplinäres Team aus den Bereichen Experiment, Teilchensimulation, Kontinuumsmodellierung und Supercomputing einen digitalen Zwilling zur Modellierung des komplexen Herstellungsprozesses solcher Membranen. Rechenintensive Teilchensimulationen und Kontinuumsmodellierung werden verknüpft, um verschiedene physikalische Phänomene wie Verdampfung, Mikro- und Makrophasenseparation, Lösemitteltransport und glasartiges Erstarren, auf Skalen vom Molekül (Nanometer) bis hin zur Membrandicke (einige Mikrometer) zu erfassen. Auf dem modularen JUWELS-System am JSC werden die auf GPUS ausgeführten Teilchensimulationen mit dem Kontinuumsmodell, das CPUs verwendet, gekoppelt. Experimente parametrisieren die Modelle und validieren die Ergebnisse. So kann der gesamte Herstellungsprozess von der verdampfungsinduzierten Mikrophasenseparation an der Membranoberfläche bis zu den Hohlräumen der mechanisch-stabilisierenden Unterschicht untersucht werden, um strukturelle, thermodynamische sowie kinetische Material- und Prozessparameter zu optimieren. Das Vorhaben mit den Partnern Universität Hamburg, Georg-August-Universität Göttingen, Helmholtz-Zentrum Hereon, JSC und ParTec AG wird durch die SCALEXAMaßnahme des BMBF gefördert. Weitere Informationen: gauss-allianz.de/en/project/title/MExMeMo. (Kontakt: [Marcus Müller](mailto:Marcus.Mueller@GCS), Georg-August-Universität Göttingen)

Neue Erkenntnisse zur Verbesserung von Solarzellen

Für ein besseres Verständnis für die Umwandlung von Licht in Strom mithilfe von Solarzellen und der Verbesserung ihrer Leistung nutzte ein Forschungsteam um Professor Wolf Gero Schmidt von der Universität Paderborn die Ressourcen des Supercomputers Hawk am HLRS. Das Team simulierte, wie sogenannte Exzitonen (bestimmte Teilchen) in Solarzellen kontrolliert und bewegt werden können, um mehr Energie einzufangen. Dabei machten die Forschenden eine überraschende Entdeckung: Sie fanden heraus, dass das strategische Hinzufügen von Verunreinigungen in das System die

Bewegung der Exzitonen in einem großen Solarmodul offenbar verbessern kann, wodurch sich die Effizienz der Energieumwandlung steigern ließe. Die Ergebnisse wurden im Journal Physical Review Letters veröffentlicht. Weitere Informationen: gauss-centre.eu/news/research-highlights/university-of-paderborn-researchers-use-hawk-supercomputer-and-lean-into-imperfection-to-improve-solar-cell-efficiency. (Kontakt: [Eric Gedenk](mailto:Eric.Gedenk@GCS), GCS)

SCC-Teams tragen zur ICON-Weiterentwicklung bei

Während der diesjährigen Student Cluster Competition (SCC) auf der ISC24 war die Coding Challenge wieder ein wichtiger Bestandteil. Das DKRZ hat dafür eigens eine sequenzielle Version der Wolken-Mikrophysik für das Wetter- und Klimamodell ICON in C++ entwickelt, die die Teams mithilfe unterschiedlicher Programmierstandards auf GPUs portieren mussten. Die besten der insgesamt 17 eingereichten Resultate erzielten die Sun Yat-Sen University (China) für OpenMP und die North Carolina State University (USA) für OpenACC. Erstmals in der Geschichte der SCC werden die Ergebnisse der Coding Challenge weiter genutzt: Die von den Studierenden entwickelten Codes fließen in die ICON-Weiterentwicklung ein. Die Teammitglieder werden zukünftig als ICON-Entwickler:innen namentlich aufgeführt. Für den virtuellen Teil der SCC stellte das DKRZ zudem 4 GPU-Knoten seines Systems Levante zur Verfügung. Außerdem unterstützten DKRZ-Expert:innen die Durchführung der SCC in Hamburg und waren im Jurorenausschuss vertreten. Weitere Informationen: dkrz.de/de/isc24. (Kontakt: [Panagiotis Adamidis](mailto:Panagiotis.Adamidis@DKRZ), DKRZ)

Veranstaltungen

- 15.07.2024: [AI Training Series - The LRZ Compute Cloud for AI Support](#), LRZ@GCS
- 16.07.2024: [HPC Cluster Introduction Course](#), PC², hybrid
- 22.07.2024: [AI Training Series - Introductory AI Workshop by Intel](#), LRZ@GCS, online
- 23.07.2024: [Introduction to the LIKWID tool suite](#), NHR@FAU, online
- 23.–24.07.2024: [AI Training Series - Fundamentals of Deep Learning - powered by NVIDIA](#), LRZ@GCS, online
- 12.–16.08.2024: [Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP](#), JSC@GCS
- 20.08.2024: [HPC Tuning and Analysis](#), PC², hybrid

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

hpc-calendar.gauss-allianz.de