

ISC High Performance 2025

Die Internationale Supercomputing Conference (ISC) feiert in diesem Jahr ihr 40-jähriges Jubiläum und findet vom 10. bis 13. Juni in Hamburg statt. Unter dem Motto „Connecting the dots“ bringt sie führende Akteure aus Wissenschaft, Industrie und Forschung zusammen, um Innovationen in HPC und KI, Datenanalyse sowie Storage, Networking, und Quantencomputing zu präsentieren, den gegenseitigen Austausch zu fördern und sich untereinander zu vernetzen. Auch in diesem Jahr wird es einen Gauß-Allianz-Stand mit Informationen zum neuen HPC-Kalender geben und die Mitglieder werden wieder mit vielfältigen Beiträgen vertreten sein. • NHR4CES beteiligt sich u. a. mit Tutorials wie „Mastering Tasking with OpenMP 6.0“ am wissenschaftlichen Programm. Expert:innen von NHR4CES stehen am NHR-Stand für den fachlichen Austausch zur Verfügung, wo sie auch Sofa Talks zum Thema „Connecting Visualization and High-Performance Computing“ organisieren. • Das NHR@FAU ist mit 2 Tutorials und einem Research-Poster vertreten, hält zusammen mit anderen Zentren den Workshop „EESP“ ab und wirkt am NHR-Stand bei den Sofa-Talks mit. Bei der Student Cluster Competition betreut es das gemeinsame Team der FAU und der USI Lugano. • Das GCS präsentiert seine Zentren – HLRS, JSC und LRZ – auf einem gemeinsamen Stand mit spannenden Exponaten und informiert über aktuelle Projekte, die mithilfe der GCS-Systeme berechnet wurden. Mitarbeitende aller 3 Zentren tragen zudem zum wissenschaftlichen Programm bei. • Das DKRZ unterstützt wieder die Student Cluster Competition: Für die online Coding Challenge entwickelte das DKRZ-Team Aufgaben mit dem Wetter- und Klimamodell ICON und stellt dafür 4 GPU-Knoten auf seinem HPC-System Levante bereit. Zudem entsendet es 2 Jury-Mitglieder zur Bewertung der Beiträge und ist mit einer Sprecherin bei der BoF-Session „Empowering Excellence in HPC Through Diversity and Inclusion“ vertreten. • Das SCC ist mit einem Fachvortrag zur Simulation von komplexen biologischen Strukturen auf modernen Hybridsupercomputern, einem Wissenschaftsposter zu einem Numerik-Framework für HPC und gemeinsam mit dem JSC mit einem Workshop zum Research Software Engineering in High Performance Computing vertreten. Zudem beteiligt es sich am Stand des bwHPC-Projekts und des NHR-Vereins. • Das ZIH und ScaDS.AI der TU Dresden werden an einem Stand ihre Arbeiten im Bereich HPC, KI und Datenanalyse präsentieren, das Team wird sich an den GA- und NHR-Messeständen einbringen und

am wissenschaftlichen Konferenzprogramm beteiligen. Weitere Informationen: isc-hpc.com/program/. (Kontakt: [GA-Redaktion](#), Gauß-Allianz e. V.)

Zweite Phase des HPC-Systems Viper in Betrieb

Im Februar ging an der Max Planck Computing and Data Facility (MPCDF) die zweite Phase des neuen Hochleistungsrechners Viper (vgl. [GA-IB Nr.106](#)) für Nutzende in den Testbetrieb. Das System der Max-Planck-Gesellschaft umfasst 600 Prozessoren des Typs AMD Instinct MI300A APU (Accelerated Processing Unit) mit je 128 Gigabyte schnellem HBM3-Hauptspeicher, auf den 24 Zen4 x86 CPU-Kerne und 228 CDNA3 GPU Compute Units kohärent zugreifen können. Der gemeinsame Hauptspeicher erleichtert im Vergleich zu herkömmlichen GPU-beschleunigten Architekturen die Programmierung, da explizite Datentransfers zwischen CPU und GPU entfallen. Dieser Prozessor wird auch im US-Exascale-System El Capitan und im Hunter-System am HLRS eingesetzt. Die 300 Viper-Knoten sind über InfiniBand NDR (400 Gb/s) vernetzt und nutzen IBM Storage Scale-Speicher (HDD und NVMe) mit ca. 12 Petabyte Kapazität. In den ersten Wochen liefen bereits mehrere Anwendungen aus der Plasmaphysik, der Astrophysik, der Materialforschung und der Biophysik erfolgreich auf dem neuen System. Weitere Informationen: mpcdf.mpg.de/services/supercomputing/viper. (Kontakt: [Markus Rampp](#), MPCDF)

Neuer Hochleistungsrechner für Baden-Württemberg

Das SCC setzt mit dem bwUniCluster 3.0 einen neuen Maßstab für Forschung und Lehre an den Baden-Württembergischen Hochschulen und Universitäten. Seit 2014 betreibt das SCC den bwUniCluster erfolgreich als Grundversorgungssystem für HPC-Rechenleistung. Nach dem Upgrade auf bwUniCluster 2.0 und einer Erweiterung im Jahr 2023 wurde Anfang April am KIT-Campus Nord mit bwUni-Cluster 3.0 die neueste Version des Rechenclusters in Betrieb genommen. Mit den rund 90 neuen Rechenknoten und den weiterbetriebenen Knoten der letzten Erweiterung umfasst dieses System zusammen nun über 370 SMP-Knoten, ausgestattet mit leistungsstarken 64-Bit-Prozessoren von AMD und Intel. Unterstützt von insgesamt 112 Grafikprozessoreinheiten und etwa 27.000 Rechenkernen erreicht der bwUniCluster 3.0 beeindruckende 7,1 PetaFlop/s Rechenleistung. Besondere Erwähnung verdient die am Rechenzentrum vorhandenen Infrastruktur für Warmwasserkühlung, die es ermöglicht, die deutlich leistungsstärkere Hardware

sogar noch energieeffizienter zu betreiben. Weitere Informationen: scc.kit.edu/dienste/bwUniCluster_3.0.php. (Kontakt: [Samuel Braun](mailto:Samuel.Braun@SCC), SCC)

LRZ nimmt HPC-System CoolMUC in Betrieb

Am LRZ ist ein neues HPC-Cluster in Betrieb gegangen: CoolMUC vereint die Leistung diverser Prozessorarchitekturen und steht Forschenden an bayerischen Hochschulen ab sofort zur Verfügung. Insgesamt 119 Rechenknoten bieten geballte Performance, darunter 106 mit Intel Sapphire Rapids-Chips, die mit 512 Giga-byte Arbeitsspeicher und 112 Rechenkernen besonders für parallele Anwendungen mit geringem Speicherbedarf geeignet sind. Für datenintensivere Jobs kommen die 12 Ice-Lake-Knoten zum Einsatz, mit jeweils 80 Rechenkernen sowie einem Terabyte Kurzzeitspeicher. Ergänzt wird das System durch "Teramem", einem Knoten mit Cooper-Lake-Prozessor, 96 Rechenkernen und rund 6 Terabyte Arbeitsspeicher. Der aktuelle CoolMUC wird demnächst mit GPUs ergänzt und bis 2026 durch weitere CPUs ausgebaut. Neben den klassischen HPC-Disziplinen nutzen immer weitere Fachbereiche wie Biologie, Umwelt- und Lebenswissenschaften oder Sozial- und Wirtschaftswissenschaften das Rechencluster für ihre Forschung. Weitere Informationen: tiny.badw.de/XH6Y1. (Kontakt: [Gerald.Mathias](mailto:Gerald.Mathias@LRZ), LRZ@GCS)

Nationales Datenkompetenzzentrum für Sachsen

Come2Data ist eines von 11 nationalen Zentren in Aufbau und setzt auf einen interdisziplinären, regionalen Ansatz zur praxisnahen Vermittlung von Datenkompetenzen – mit besonderem Fokus auf den Wissenschaftsstandort Sachsen. Unter Einbeziehung von Expertise und Angeboten führender sächsischer Einrichtungen – wie der Sächsischen Landesbibliothek – Staats- und Universitätsbibliothek Dresden, der TU Chemnitz, der TU Dresden (Projektleitung) sowie der Universität Leipzig – werden Ausbildungs- und Unterstützungsangebote sowie nationale Netzwerke in den Bereichen (Forschungs-)Datenmanagement, Data Analytics, KI und interdisziplinäre Anwendungen gebündelt. Eine virtuelle Plattform dient dabei als offener Forschungs-, Unterstützungs-, Vernetzungs- und Lernort, der diese Angebote über sächsische Standorte hinweg für Forschende, Lehrende, Lernende und die interessierte Öffentlichkeit bereitstellt. Gefördert durch BMBF und EU markiert Come2Data einen wichtigen Schritt zur Stärkung der datenbasierten Innovationskraft in Sachsen. Weitere Informationen: come2data.de. (Kontakt: [Franziska Korb-King](mailto:Franziska.Korb-King@Come2Data), Come2Data/ZIH)

Simulationen für personalisierte Krebstherapien

Mit Molekulardynamik-Simulationen am HLRS untersuchten Forschende genetische Mutationen, die mit aggressiven Krebsarten in Verbindung stehen. Diese Simulatio-

nen ermöglichen einen tiefen Einblick in die strukturellen Veränderungen in Proteinen auf atomarer Ebene und helfen, potenzielle therapeutische Angriffspunkte zu identifizieren. Ein interdisziplinäres Team um Dr. Andreas Joerger (Goethe-Universität Frankfurt) und Dr. Giovanni Settanni (Ruhr-Universität Bochum, Johannes Gutenberg-Universität Mainz) analysierte Mutationen des Proteins p53. Unter normalen Bedingungen dient p53 als Bollwerk gegen Krebs, indem es die Zellteilung steuert und DNA-Schäden repariert. Verändert sich die Struktur dieses Proteins, kann dies zu unkontrollierter Zellteilung führen. Hochauflösende Simulationen auf dem Supercomputer Hawk deckten eine potenzielle Bindungsstelle in der p53-Mutation Y163C auf, die für neue Medikamente genutzt werden könnte. Die aus der Simulation gewonnenen Erkenntnisse könnten die Suche nach effektiveren Krebstherapien unterstützen und personalisierte Behandlungsstrategien voranbringen. Weitere Informationen: hlrs.de/de/news/detail/simulationen-unterstuetzen-die-suche-nach-personalisierten-krebstherapien. (Kontakt: [Christopher Williams](mailto:Christopher.Williams@HLRS), HLRS@GCS)

NHR-Konferenz 2025 in Göttingen

Der NHR-Verein lädt zu seiner diesjährigen wissenschaftlichen Konferenz ein, die vom 22. bis 23. September an der Georg-August Universität Göttingen (NHR@Göttingen) stattfinden wird. Ziel der Konferenz ist es, den Austausch und die Vernetzung von Nutzenden von HPC-Ressourcen in den unterschiedlichen Fachgebieten zu fördern sowie Trends und Impulse zu diskutieren. Im Fokus stehen die Themen KI in den Sozial- und Lebenswissenschaften sowie Datenmanagement und -speicherung. Mit internationalen Keynotes, Vorträgen und Postern wird die Grundlage für wissenschaftliche Diskussionen über Disziplingrenzen hinweg geboten. Spezialist:innen der NHR-Zentren aus dem operativen Betrieb, dem Support und der wissenschaftlichen Fachberatung beteiligen sich und stehen den Nutzenden sowohl in direkten Gesprächen als auch auf dem Podium für Diskussionen zur Verfügung. Weitere Informationen: nhr-verein.de/Conference. (Kontakt: [Susanne Passow](mailto:Susanne.Passow@NHR), NHR-Verein)

Veranstaltungen

- 20.–22.05.2025: [Introduction to Bayesian Statistical Learning 2](https://www.gauss-allianz.de/veranstaltungen/introduction-to-bayesian-statistical-learning-2), JSC@GCS, online
- 27.–28.05.2025: [EuroCC2 AI for Science Bootcamp](https://www.gauss-allianz.de/veranstaltungen/eurocc2-ai-for-science-bootcamp), GCS, EuroCC2 and NVIDIA, online
- 03.–05.06.2025: [Helmholtz AI Conference 2025](https://www.gauss-allianz.de/veranstaltungen/helmholtz-ai-conference-2025), Helmholtz AI

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