

Hessisches HPC-Kompetenzzentrum geschaffen

Das HPC-Ökosystem Hessens braucht neben Hardware-Ressourcen vor allem auch Wissenschaftler, die in der Lage sind, aus ihren methodischen Ideen mit vertretbarem Aufwand parallele Codes zu erzeugen, diese effizient einzusetzen und weiterzuentwickeln. Darin sind sich die hessischen Universitäten Darmstadt, Frankfurt, Gießen, Kassel und Marburg sowie das Hessische Ministerium für Wissenschaft und Kunst (HMWK) einig. Deshalb fördert das HMWK die Gründung eines Hessischen HPC-Kompetenzzentrums. Das Zentrum wird die vorhandenen HPC-Strukturen koordinieren, nachhaltig etablieren und weiterentwickeln. Es soll standortübergreifende wissenschaftliche Dienstleistungen für die Performanz paralleler Programme, Produktivität der Programmierung, HPC software stewardship, Schulungsangebote und HPC-Betrieb erbringen und somit Software als HPC-Infrastruktur fördern. Das Hessische HPC-Kompetenzzentrum schafft damit eine Struktur, die auf die langfristigen Bedürfnisse der Wissenschaft ausgerichtet ist und wirtschaftlich relevante Innovationen ermöglicht. (Kontakt: [Christian Bischof](#), TU Darmstadt)

Exascale-Simulation von Hochleistungsstählen

Bei der Reduktion von CO₂-Emissionen im Automobilbau unter gleichzeitiger Verbesserung der Crashesicherheit spielen Hochleistungsstähle eine bedeutende Rolle. Die Eigenschaften moderner Hochleistungsstähle mit einer höheren Festigkeit und einer besseren Duktilität in Kombination mit einem geringeren Gewicht werden durch das komplexe Zusammenspiel der einzelnen Komponenten auf der Mikroskala bestimmt. Das Materialverhalten für realistische und anspruchsvolle Ingenieur Anwendungen auf mehreren Skalen in 3D zu simulieren, erfordert eine Rechnerkapazität, wie sie erst durch Exascale-Computer zur Verfügung stehen wird. Die entsprechenden Algorithmen müssen speziell für den effizienten Einsatz auf den zu erwartenden, zukünftigen Hardwarekonfigurationen entworfen werden. Dazu soll ein direkter Multiskalenansatz mit neuen hocheffizienten, parallelen Löseralgorithmen (Gebietszerlegung, Mehrgitter) kombiniert werden. Ein umfassender Performance-Engineering-Ansatz soll eine systematische Optimierung und Parallelisierung über alle Softwareebenen sicherstellen. Im Konsortium EXASTEEL im DFG-Schwerpunktprogramm SPPEXA haben sich Arbeitsgruppen aus den Bereichen Mechanik (J. Schröder, D. Balzani, Universität Duisburg-Essen), Numerische Mathematik/Wissenschaftliches Rechnen (A. Klawonn, Universität zu Köln; O. Rheinbach, TU Freiberg) und Informatik (G. Wellein, Universität Erlan-

gen-Nürnberg) zusammengefunden, um in sechs Projektjahren solche Algorithmen und eine entsprechende Softwareumgebung zu entwickeln. Weitere Informationen: <http://www.mi.uni-koeln.de/numerik/de/left/research/exasteel> (Kontakt: [Axel Klawonn](#), Universität zu Köln).

SkaSim – Höchstleistungsrechnen für die Industrie

Das BMBF-Projekt „SkaSim – Skalierbare HPC-Software für molekulare Simulationen in der chemischen Industrie“ wird maßgeblich zum nachhaltigen Einzug der molekularen Simulation in die industrielle Praxis beitragen. Während in diesem Bereich heute noch vorwiegend experimentelle Daten Verwendung finden, gewinnt die Simulation zunehmend an Eigendynamik: die Kosten sinken, die Präzision steigt und selbst sicherheitsrelevante Stoffe können gefahrlos untersucht werden. In SkaSim werden neue Simulationsmethoden erforscht mit der Zielsetzung, die gewaltige Rechenleistung modernster Computersysteme zum Tragen zu bringen sowie spezifische, hochaktuelle Szenarien erstmals zugänglich zu machen. Die anspruchsvolle, interdisziplinäre Natur dieses Vorhabens spiegelt sich dem breiten Spektrum der vertretenen Partner wider. Koordiniert durch das HLRS, vereinigt das Konsortium Fachhochschulen, Universitäten, die Fraunhofer Gesellschaft, KMU sowie international führende Unternehmen der chemischen Industrie. (Kontakt: [Colin W. Glass](#), HLRS)

ISC Cloud und ISC Big Data

Im September werden gleich zwei Ableger der International Supercomputing Conference (ISC) in Heidelberg durchgeführt: die ISC Cloud und die ISC Big Data. Die ISC Cloud'13, die unter dem Motto „HPC and Manufacturing Meet Cloud“ steht, findet vom 23. bis 24. September statt. Konferenz und Aussteller widmen sich neben Fallstudien aus Wissenschaft und Industrie auch den Themen HPC als Service sowie Sicherheit, Datenschutz und Anwendungssoftware in der Cloud. Die ISC Cloud findet in diesem Jahr bereits zum 4. Mal statt, um Entwickler, Nutzer, Manager und Entscheidungsträger aus Industrie, Forschung und Entwicklung in diesem Bereich zusammenbringen. Direkt im Anschluss daran werden vom 25. bis 26. September Experten aus Wissenschaft und Industrie auf der ersten ISC Big Data über aktuelle Big-Data-Themen diskutieren. So wird auch Professor Ramin Yahyapour des GA-Zentrums Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen (GWDG) unter dem Konferenzmotto „Where HPC and Enterprise Meet“ über Anwendungsfälle und aktuelle Big-Data-Themen aus Wissenschaft und Praxis informieren. Der

aktuelle Stand der Forschung und Entwicklungstrends werden ebenso im Fokus stehen wie Renditesteigerung durch Big-Data-Analytik und Big-Data-Anwendungen im Forschungsbereich. Weitere Informationen: <http://www.isc-events.com/cloud13> und <http://www.isc-events.com/bigdata13>.

2. Internationale EUDAT-Konferenz

Vom 28. bis 30. Oktober 2013 findet in Rom die 2. internationale EUDAT-Konferenz statt. EUDAT (European Data Infrastructure), ein Konsortium von 25 Partnern aus 13 europäischen Ländern, an dem auch die GA-Mitglieder DKRZ, FZJ-JSC, KIT-SCC und RZG beteiligt sind, hat sich den Aufbau einer paneuropäischen kollaborativen Dateninfrastruktur mit modernsten Systemen und Diensten zum Ziel gesetzt, um Forscher aus den unterschiedlichsten Communities bei ihrer datenintensiven wissenschaftlichen Arbeit zu unterstützen. Die Konferenz wird sich daher insbesondere den aktuellen Herausforderungen im Bereich des Datenmanagements widmen. Keynote-Sprecher werden Richard Frackowiak von der Universität Lausanne, Ewan Birney vom Europäischen Bioinformatik-Institut und Maryline Lengert von der Europäischen Weltraumorganisation ESA sein. Das vollständige Programm und weitere Informationen sind unter <http://www.eudat.eu/2nd-conference> erhältlich.

Euro-Par 2013 in Aachen

Vom 26. bis 30. August fand auf dem Campus der RWTH Aachen die 19. Euro-Par Konferenz statt. Die ca. 280 Teilnehmer widmeten sich im Rahmen von mehr als 150 Vorträgen einer breiten Themenpalette aus dem Bereich paralleles und verteiltes Rechnen. In den eingeladenen Hauptvorträgen bezogen Professor Alok Choudhary von der Northwestern University, Professor Arndt Bode von der TU München und Dr. Timothy Mattson von Intel Stellung zu brandaktuellen Themen wie Big Data, Green Computing und den neuesten parallelen Programmiermodellen. Eine Expertenrunde lieferte sich außerdem eine hitzige Debatte über den optimalen Einsatz von Beschleunigern. Im Vorfeld der Hauptkonferenz konnten sich die Teilnehmer zwei Tage lang in 13 Workshops und drei Tutorien bereits mit spezielleren Themen der Parallelverarbeitung auseinandersetzen. Einen Höhepunkt der Veranstaltung bildete die Verleihung des Euro-Par Achievement Awards an Professor Bode. Die Konferenz wurde gemeinsam von der German Research School for Simulation Sciences (GRS), dem Forschungszentrum Jülich und der RWTH Aachen im Rahmen der Jülich Aachen Research Alliance ausgerichtet. Im nächsten Jahr wird die Euro-Par in Porto, Portugal stattfinden. Weitere Informationen: <http://www.europar2013.org> (Kontakt: Felix Wolf, GRS)

GA-Jahresmitgliederversammlung 2013

Am Rande der dritten HPC-Statuskonferenz der Gauß-Allianz (GA) an der TU Dresden, zu der ca. 80 Teilneh-

mer aus Wissenschaft und Industrie die Gelegenheit nutzten, sich insbesondere über aktuelle Forschungsfragen auf dem Gebiet HPC-Software für skalierbare Parallelrechner auszutauschen, fand am 6. September die Jahresmitgliederversammlung der GA statt. Die Teilnehmer stimmten darin überein, dass die koordinierte, enge Kooperation der Mitgliedszentren ein entscheidender Faktor für die weitere strategische Entwicklung des Hochleistungsrechnens in Deutschland ist. Die bereits in den letzten beiden Jahren angestoßene Diskussion über die Möglichkeiten und Chancen einer Profilbildung innerhalb der GA wurde fortgeführt, wobei insbesondere die Anforderungen der Anwenderwissenschaften an den unterschiedlichen Standorten hervorgehoben wurden. So wurde der Auftrag der Zentren zu einer jeweils durchaus breiten Unterstützung der Anwender unterstrichen. Im Bereich der Methodenkompetenz wird die Schwerpunktbildung bereits erfolgreich umgesetzt, hier soll auch zukünftig vorhandene Expertise – im Rahmen einer fachlichen Abstimmung – weiter strategisch ausgebaut werden, wobei die meisten Themen sinnvollerweise von mehreren Zentren gemeinsam vorangetrieben werden sollten. Bei der Wahl des Vorstands wurde Professor Wolfgang E. Nagel, TU Dresden, als Vorsitzender wiedergewählt; nachdem die beiden langjährigen Vorstandskollegen Professor Heinz-Gerd Hegering und Professor Christian Bischof – auf eigenen Wunsch – ihr Ausscheiden langfristig angekündigt hatten, wurden die beiden stellvertretenden Vorstandsmitglieder Professor Michael Resch – als Vertreter des GSC – und Professor Thomas Ludwig vom DKRZ gewählt. (Kontakt: Wolfgang E. Nagel, ZIH)

Veranstaltungen

- 16.-20.09.2013: [Advanced Fortran Topics](#), LRZ Garching
- 23.-27.09.2013: [Parallel Programming Course](#), HLRS, Stuttgart
- 30.09.-01.10.2013: [Workshop „High Performance Computing in Science & Engineering 2013“](#), HLRS, Stuttgart
- 07.-11.10.2013: [12th VI-HPS Tuning Workshop](#), JSC, Jülich
- 10.-11.10.2013: [ZKI-Tagung Supercomputing](#), TU Darmstadt
- 14.-15.10.2013: [Scientific Visualization](#), HLRS, Stuttgart
- 16.10.2013: [Industrial Services of the National HPC Centre Stuttgart](#), HLRS, Stuttgart
- 21.-23.10.2013: [GPU Programming using CUDA](#), HLRS, Stuttgart
- 28.-31.10.2013: [Cray XE6/XC30 Optimization Workshop](#), HLRS, Stuttgart