

Aktuelle TOP500-Liste der Supercomputer

Das auf der ISC in Frankfurt bekannt gegebene Ranking der weltweit leistungsstärksten Supercomputer bestätigt den bereits im November auf der SC'15 in den USA unübersehbaren Trend: Nicht nur die beiden schnellsten Supercomputer stehen derzeit in China, das Land liegt insgesamt in der TOP500-Liste mit 167 Systemen und 211 PetaFlops erstmals vor den USA. Der Spitzenreiter „Sunway TaihuLight“ am National Supercomputing Center in Wuxi ist mit 93 PetaFlops im Linpack-Benchmark dreimal so schnell wie sein Vorgänger „Tianhe-2“ vom National Supercomputing Center in Guangzhou. Mit einem Verbrauch von 15,3 MW liegt das neue System ebenfalls vorn und setzt mit über 6 GigaFlops/Watt zudem auf hohe Energieeffizienz. Ein weiteres Highlight ist, dass die zu Grunde liegenden RISC-Prozessoren SW26010 der Firma ShenWei mit 260 Kernen in China entwickelt wurden. Auch wenn die USA unter den Top 10 am stärksten vertreten sind, hat die Regierung bereits Mitte des letzten Jahres mit einer National Strategic Computing Initiative reagiert, um die technologische Entwicklung und Konkurrenzfähigkeit des amerikanischen HPC zu stärken. Der Anteil der europäischen Systeme ist leicht zurückgegangen. Deutschland, England und Frankreich sind die Länder mit den meisten Systemen, wobei das GCS mit einer Rechenleistung von in Summe mehr als 20 PetaFlops über die leistungsfähigste Systeminfrastruktur verfügt. Das HLRN-System Hazel Hen verteidigte mit Rang 9 eine Platzierung unter den Top 10. Weitere Informationen: <http://top500.org>.

Forschungsförderung 2017 durch Bund und Länder

Die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz hat ihre Haushaltsentscheidungen für die Forschungsförderung durch Bund und Länder für 2017 getroffen. Die Auswahl beruht auf den Empfehlungen des Wissenschaftsrats, über die in der Maiausgabe berichtet wurde (Infobrief Nr. 44). Die ausgewählten Projekte und Vorhaben können nun mit der Bereitstellung der finanziellen Mittel planen. Für die Forschungsförderung an Hochschulen und den Ausbau von Forschungsbauten wird bis 2021 eine Fördersumme von insgesamt 396 Mio. Euro bereitgestellt. Zu den in die gemeinsame Förderung aufgenommenen Einrichtungen und Vorhaben gehören auch der Hochleistungsrechner des HLRN sowie die Erweiterung des Hochleistungsrechners HRSK-II für die skalierbare Datenanalyse des ZIH der TU Dresden. Weitere Informationen: <http://www.gwk-bonn.de/fileadmin/Pressemitteilungen/pm2016-12.pdf>.

Wissenschaftsrat gibt grünes Licht für HLRN-IV

Der Wissenschaftsrat hat den Antrag zur Beschaffung des HLRN-Nachfolgerechners an den Standorten Berlin (ZIB) und Niedersachsen (Universität Göttingen) mit der bestmöglichen Note ausgezeichnet. Neben dem Zuse-Institut Berlin wurde als Standort in Niedersachsen die Universität Göttingen ausgewählt. Insbesondere wurde hervorgehoben, dass sich beide Standorte ideal sowohl hinsichtlich ihrer methodenwissenschaftlichen Forschung als auch den anwendungswissenschaftlichen Schwerpunkten ergänzen. Seit der Gründung des HLRN-Verbunds im Jahr 2002 wird die Rechenleistung von einer breiten Wissenschafts-Community in Norddeutschland genutzt, die laut Wissenschaftsrat die für eine effektive Nutzung des Systems notwendige Erfahrung höchst überzeugend einbringt und sehr gut in die nationale HPC-Versorgungspyramide integriert ist. Im September 2018 wird der mit einer Investitionssumme von 30 Mio. Euro veranschlagte HLRN-IV den seit 2013 betriebenen HLRN-III ersetzen. (Kontakt: [Thomas Steinke](#), ZIB)

Innovative Technologie für Big-Data-Analysen am ZIH

Das ZIH hat im Rahmen der Förderung von Forschungsbauten 2017 insgesamt zehn Mio. Euro beantragt, um sein HPC-Konzept um spezielle Datenanalyse-Möglichkeiten zu erweitern und alternative Speichertechnologien anzubieten. Dies umfasst eigens für die Datenanalyse ausgerichtete Rechnerknoten und neue Technologien auf dem Gebiet der Permanent-Speicher. Weiterhin wird die notwendige Software-Umgebung zur Verwaltung einer solch komplexen Infrastruktur aufgebaut. Die konzeptionelle Zusammenführung der beiden sehr dynamischen Forschungsbereiche Hochleistungsrechnen und Data Analytics ist eine konsequente Weiterentwicklung des datenintensiven Rechnens, das das ZIH seit der Antragstellung für den ersten Hochleistungsrechner-/Speicherkomplex (HRSK) im Jahr 2004 verfolgt. Bundesweit und speziell auch in Sachsen zielen zahlreiche Projekte, die über viele Wissenschaftsgebiete gestreut sind, auf die Schnittstelle von Hochleistungsrechnen und Datenanalyse – HPC/Data Analytics – ab. Sie ist deshalb nicht nur für die Struktur- und Entwicklungsplanung der TU Dresden von strategischer Bedeutung. Insbesondere werden die Analysekapazitäten des Rechners bundesweit abrufbar sein. Die Antragstellung erfolgte in enger Abstimmung mit dem Sächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst. (Kontakt: [Michael Kluge](#), ZIH)

BMBF-Projekt ParaPhase gestartet

Phasenfeldmodelle bilden eine wichtige Klasse von Modellen für eine Vielzahl von industriell relevanten physikalischen und technischen Prozessen. Beispiele sind die Beschreibung von Riss- und Schädigungsprozessen in Festkörpern oder die Darstellung wachsender Kristallschichten bei Kristallzüchtung durch Flüssigphasenepitaxie. Der Preis für diese breite Anwendbarkeit und mathematische Eleganz ist jedoch der hohe Rechenaufwand, der für die Simulation von Phasenfeldproblemen nötig ist. Daher zielt das vom JSC koordinierte, dreijährige BMBF-Projekt „ParaPhase – Raum-Zeit-parallele adaptive Simulation von Phasenfeldmodellen auf Höchstleistungsrechnern“ darauf ab, innovative Methoden und anwendungsorientierte Software für die effiziente und großskalige Berechnung von Phasenfeldproblemen zu entwickeln. Der im Rahmen dieses Projekts entwickelte Raum-Zeit-parallele Algorithmus wird auf Basis der weit verbreiteten Open-Source-Software DUNE implementiert werden, um über die unmittelbar gewonnenen Resultate hinaus hohe Nachhaltigkeit und große Breitenwirkung zu erzielen. (Kontakt: [Robert Speck](mailto:Robert.Speck@JSC), GCS@JSC)

Kooperation zwischen DKRZ und JAMSTEC

Das DKRZ und sein japanisches Pendant, das Center for Earth Information Science and Technology (CEIST), welches am JAMSTEC (Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology) den Earth Simulator betreibt, beschließen eine Kooperationsvereinbarung. Führende Koordinatoren sind Prof. Thomas Ludwig und Dr. Joachim Biercamp vom DKRZ sowie Herr Makoto Tsukakoshi, Dr. Kenichi Itakura und Dr. Hitoshio Uehara von CEIST. Die Zusammenarbeit ist für folgende Bereiche geplant: Berechnungen von gekoppelten Klimamodellen auf HPC-Systemen, Analyse und Benchmarking neuer Hard- und Software, Kostenanalyse für den Einsatz nicht standardisierter Hardware wie Beschleunigerkarten für Klimamodelle, Energieeffizienz von HPC-Systemen, Evaluation und Optimierung von Ein- und Ausgabesystemen sowie Erfahrungsaustausch beim Management und bei der Konzeption von fachspezifischen Rechenzentren. In den nächsten zwei Jahren sind im Rahmen der Kooperation die Durchführung gemeinsamer Workshops, der Austausch von Computerprogrammen zur Evaluation, Überprüfung und Leistungsvergleich (Benchmarking), gemeinsame Projekte und der Austausch von Personal angedacht. (Kontakt: [Thomas Ludwig](mailto:Thomas.Ludwig@DKRZ), DKRZ)

HPC-Symposium der Jülich Aachen Research Alliance

Das erste JARA-HPC-Symposium „JHPCS'16“ findet vom 4. bis 5. Oktober am IT Center der RWTH Aachen statt und bildet den Auftakt einer Veranstaltungsreihe zum Einsatz von Hoch- und Höchstleistungsrechnern in unterschiedlichen wissenschaftlichen Forschungsgebieten. Mit der Veranstaltung soll sowohl erfahrenen Wissenschaftlern als auch dem wissenschaftlichen Nachwuchs eine Platt-

form für den Austausch über aktuelle Entwicklungen im Bereich der HPC-Anwendungen geboten werden. Der Fokus dieses ersten Treffens liegt auf dem Einsatz von Visualisierungsmethoden und Werkzeugen zur Leistungsoptimierung in Verbindung mit Anwendungsentwicklungen in den Ingenieur-, Material- und Neurowissenschaften. Die wissenschaftliche Leitung des Symposiums liegt bei den Professoren Thomas Lippert (Jülich Supercomputing Centre, FZJ), Matthias Müller (IT Center, RWTH Aachen) und Wolfgang Schröder (Aerodynamisches Institut, RWTH Aachen). Die Symposiumsbeiträge werden im Anschluss im Rahmen der Springer LNCS-Reihe veröffentlicht. Weitere Informationen: <http://jhpcs16.jara.org> (Kontakt: [Michaela Bleuel](mailto:Michaela.Bleuel@JARA-HPC), JARA-HPC)

SuperMUC-Simulationen zur personalisierten Medizin

Als Ergebnis eines „Extreme Scaling Workshops“ am LRZ konnte ein Team um Peter Coveney vom University College London UCL mit Simulationen auf dem SuperMUC am LRZ zeigen, dass es möglich ist, innerhalb weniger Stunden vorherzusagen, auf welche Weise ein bestimmtes Medikament u. a. gegen Brustkrebs an einer bestimmten Stelle im Körper – in diesem Fall an einem bestimmten Protein – wirken wird. Dies ermöglicht die Auswahl des für die konkrete Patientin am besten geeigneten Medikaments. Die Forscher untersuchten insgesamt fünfzig Medikamente daraufhin, wie sie an verschiedene Proteine binden, bei denen z.B. die Aminosäuresequenzen durch Mutationen im Genom verändert wurden. Dadurch kann man die Eignung verschiedener Strukturen für die Entwicklung und klinische Anwendung neuer Medikamente bei verschiedenen Erkrankungen beurteilen. Die Forschungen finden im Rahmen des EU-geförderten Projektes „COMPAT“ statt, an dem mit dem UCL und dem LRZ insgesamt elf europäische Partner beteiligt sind. COMPATs Ziel ist es, den Einsatz von Simulationen für den Fortschritt von Wissenschaft und Technik an der Weltspitze voranzutreiben. Weitere Informationen: <http://www.badw.de/de/meta/presse/pressemitteilungen/2016/pm-30-16/index.html> (Kontakt: [Ludger Palm](mailto:Ludger.Palm@LRZ), GCS@LRZ)

Veranstaltungen

- 09.-12.08.2016 [Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP](#), GCS@JSC, Jülich
- 05.-09.09.2016: [Iterative Linear Solvers and Parallelization](#), GCS@LRZ, Garching
- 12.-16.09.2016: [Introduction to Computational Fluid Dynamics](#), GCS@HLRS, Stuttgart
- 19.-23.09.2016 [CECAM Tutorial: Atomistic Monte Carlo Simulations of Bio-molecular Systems](#), GCS@JSC, Jülich
- 26.-30.09.2016: [CFD with OpenFOAM®](#), GCS@HLRS, Stuttgart
- 27.-30.09.2016: [HiPerCH6](#), HKHLR, Darmstadt