

Infobrief Nr. 79: März 2020

#### **Neuer Supercomputer am HLRS**

Am HLRS wurde am 19. Februar der neue Supercomputer Hawk im Beisein des Ministerpräsidenten Winfried Kretschmann, der Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst in Baden-Württemberg, Theresia Bauer, sowie des Parlamentarischen Staatssekretärs im BMBF, Dr. Michael Meister, in Betrieb genommen. Das Apollo-System von Hewlett Packard Enterprise übertrifft mit seiner Spitzenleistung von rund 26 PetaFlop/s das bisherige Flaggschiff-System Hazel Hen um das 3,5fache. Damit ist Hawk einer der leistungsfähigsten Supercomputer der Welt und das schnellste System für universelle Anwendungen im akademischen und industriellen Bereich in ganz Europa. Neben der Unterstützung der akademischen Forschung ermöglicht das HLRS auch der Privatwirtschaft den Zugang zu seinen Supercomputing-Technologien. Mit bis zu 10% von Hawks Rechenzeit wird die Digitalisierung der Wirtschaft in Baden-Württemberg und Deutschland maßgeblich unterstützt. Die Hälfte der Finanzierung in Höhe von insgesamt 38 Mio. Euro wurde vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg bereitgestellt. Die zweite Hälfte steuerte das BMBF bei. Die Finanzierung erfolgte unter der Schirmherrschaft des Gauss Centre for Supercomputing. Weitere Informationen: hlrs.de/news/detail-view/2020-02-19/ (Kontakt: Michael Resch, HLRS@GCS)

### Neues Rechencluster als Landesdienst am KIT

Das SCC nimmt am 17. März im Rahmen des badenwürttembergischen Umsetzungskonzepts für Hochleistungsrechnen (bwHPC) das neue Parallelrechnersystem "bwUniCluster 2.0+GFB-HPC" (kurz bwUniCluster 2.0) als Landesdienst in Betrieb. Der bwUniCluster 2.0 ersetzt das Vorgängersystem "bwUniCluster". Dessen im November 2016 beschaffte Erweiterung wird als Extra-Partition im neuen System weiterbetrieben. Das moderne erweiterte HPC-System besteht aus mehr als 840 SMP-Knoten mit 64-bit Xeon Prozessoren von Intel. Es dient der Grundversorgung der Universitäten des Landes Baden-Württemberg mit Rechenleistung und kann von den Mitarbeiter/innen aller Universitäten in Baden-Württemberg unentgeltlich genutzt werden. Die Zugangsberechtigung zu diesem System regelt jede Landesuniversität für ihre Beschäftigten selbst. Aktuelle Nutzungsberechtigungen für den bwUniCluster, werden automatisch auf den neuen bwUniCluster 2.0 übertragen. Weitere Informationen: scc.kit.edu/dienste/bwUniCluster 2.0.php (Kontakt: Jennifer Schroeter, KIT)

### Netzwerk für KI-Spitzenforschung in Europa

Das Tübingen Al Center ist ein Verbundprojekt zwischen der Universität Tübingen und dem MPI für Intelligente Systeme. Das vom BMBF mit insgesamt 14,7 Mio. Euro geförderte Kompetenzzentrum für Maschinelles Lernen erforscht robuste Lernsysteme und trägt zu gesellschaftlichem Nutzen bei, insbesondere durch Bildungsinitiativen wie den Bundeswettbewerb für künstliche Intelligenz (bw-ki.de) und Ausgründungen von Start-ups. Auf lange Sicht soll das Tübingen Al Center zu einer neuartigen öffentlichen Forschungseinrichtung innerhalb eines europäischen Verbunds entwickelt werden. Um dies zu erreichen, haben sich die Forschenden des Tübingen Al Centers zusammen mit anderen europäischen Spitzenforschenden zur ELLIS-Initiative zusammengeschlossen. ELLIS steht für European Laboratory for Learning and Intelligent Systems. Inzwischen gibt es bereits 11 überregionale Fellowship-Programme und 17 regionale Forschungsgruppen (ELLIS Units), die führende Wissenschaftler/innen im Bereich der lernenden KI zusammenbringen, die die Entwicklungen in den letzten Jahren maßgeblich vorangetrieben haben. Das längerfristige Ziel von ELLIS ist es, aus diesem Netzwerk heraus eine Forschungseinrichtung zu schaffen, die mit bekannten Spitzenforscher/innen weltweit junge Talente anzieht und ausbildet, um die KI der Zukunft zu entwickeln. Weitere Informationen: ellis.eu (Kontakt: Monika Lam, Al Center Tübingen)

## JARDS - Software zur Ressourcenvergabe

Vergabeprozesse für HPC-Ressourcen wie Rechenzeit oder Speicher- und Datenverarbeitungsressourcen umfassen von der Beantragung über die Begutachtung bis hin zur Durchführung von HPC-Projekten komplexe Arbeitsabläufe für unterschiedliche Nutzergruppen. Die seit 2014 vom JSC entwickelte Software JARDS (Joint Application, Review, and Dispatch Service) ist eine PHP-basierte Web-Anwendung für die Handhabung solcher Prozesse. Für jede Phase des Prozesses bietet JARDS ein separates, flexibel anpassbares Modul mit entsprechender Funktionalität und einem ausgeklügelten, erweiterbaren und rollenbasierten Zugriffsmodell. Für die Schnittstelle zwischen JARDS und der Nutzerverwaltung steht eine REST-API und ein konfigurierbares Event-Management zur Verfügung. Über das JSC

hinaus wird JARDS bereits für die Vergabeprozesse der RWTH Aachen eingesetzt und ist Basis des am Gauss Centre for Supercomputing eingesetzten GCS-JARDS. Weitere Hochleistungsrechenzentren testen derzeit den Einsatz von JARDS. Weitere Informationen: hdl.handle. net/2128/23753 (Kontakt: Florian Janetzko, JSC@GCS)

# Gründung einer ML-Gruppe am DKRZ

Die rasante Entwicklung des Maschinellen Lernens (ML) als eine der Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) bekommt in der Klimawissenschaft und am DKRZ einen immer höheren Stellenwert. Mit der neuen Forschungsgruppe "Climate Informatics and Technologies" unter Leitung von Dr. Christopher Kadow wird am DKRZ eine besondere Schnittstelle zwischen Klima- und KI/ML-Forschung entstehen. Moderne ML-Methoden sollen für die Klimawissenschaften auf dem Hochleistungsrechner des DKRZs erforscht, transferiert, weiterentwickelt und der Klimaforschungsgemeinschaft zur Verfügung gestellt werden. Ein Fokus liegt auf der Verschmelzung mit der Erdsystemmodellierung, um zum Beispiel Klimavorhersagen zu verbessern, aber auch fehlende Klimaaufzeichnungen zu rekonstruieren. (Kontakt: Christopher Kadow, DKRZ)

## Im Eiltempo über den Atlantik

Schnell, schneller, am schnellsten: 4,5 Gigabyte Daten pro Sekunde hat das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) im Schnitt über 9000 Kilometer übertragen. Grundlage für das rekordverdächtige Tempo sind das LRZ-eigene Data Science Storage-System, der hybride Transfer-Service Globus Online sowie eine technisch ähnliche Ausstattung auf beiden Seiten. 4,5 Gigabyte entsprechen in etwa dem Fassungsvermögen einer DVD, im Supercomputing aber einem Klacks. Die Astrophysiker aus Potsdam verschickten über das LRZ in Garching etwa eine hunderttausend Mal so große Datenmenge an das Hochleistungsrechenzentrum NERSC, in Berkeley, USA. Die rund 500.000 Gigabyte wurden in Einzelpaketen über mehrere Wochen im Eiltempo transferiert. Dazu baut das DSS zur Verwaltung von Dateien auf zwei IBM Spectrum Scale Cluster, zwei Globus-Connect-Server sowie einem Hochgeschwindigkeits-Ethernet-Netz auf. Den schnellen Online-Transfer zwischen den Globus-Connect-Servern von Quelle und Ziel steuert und überwacht wiederum Globus Online, ein gemeinnütziger Internetdienst der Universität Chicago und dem Argonne National Lab, Lemont, für die Wissenschaft, den das LRZ seinen Nutzer/innen zur Verfügung stellt. Die hohe Geschwindigkeit der Datenübertragung durch Leitungen und über Kontinente hinweg ist möglich, weil das NERSC ähnlich ausgestattet ist. Weitere Informationen: doku.lrz.de/display/PUBLIC/Data+Science+Storage (Kontakt: Stephan Peinkofer, LRZ@GCS)

# Gaststudentenprogramm am JSC

In diesem Sommer richtet das JSC zum 21. Mal sein Gaststudentenprogramm aus. Studierende mit Schwer-

punkt Informatik, Mathematik, Natur- oder Ingenieur-wissenschaften können hautnah verschiedene Aspekte des wissenschaftlichen Rechnens kennenlernen. Das Programm dauert zehn Wochen und findet vom 3. August bis zum 9. Oktober in Jülich statt. Die Teilnehmenden arbeiten zusammen mit Wissenschaftler/innen an aktuellen Forschungs- und Entwicklungsthemen. Die Themenauswahl ist vielfältig und reicht von Molekulardynamik, Simulationen aus der Quantenchemie über Performance-Analyse und -Optimierung hin bis zu Evaluierung und Programmierung neuester HPC-Hardware. Bewerbungsschluss ist am 14. April. Das Bewerbungsformular und weitere Informationen sind online unter: fz-juelich.de/ias/jsc/gsp/ abrufbar. (Kontakt: Ivo Kabadshow, JSC@GCS)

#### Deutsch-russische HPC-Konferenz am ZIH

Vom 6. bis 8. April veranstaltet das ZIH an der TU Dresden die deutsch-russische Konferenz "Supercomputing in Scientific and Industrial Problems" (SSIP 2020). Ziel dieser Veranstaltung ist es, Forschende aus russischen und deutschen Universitäten und Forschungslabors zusammenzubringen, um aktuelle Ansätze und Ergebnisse des Supercomputing zur Lösung wissenschaftlicher und industrieller Fragestellungen zu diskutieren. Der Schwerpunkt der Veranstaltung liegt auf relevanten numerischen Methoden und Supercomputing-Technologien und deren Analyse sowie auf der Modellierung komplexer Probleme im Zusammenhang mit Kontinuumsmechanik und industriellen Anwendungen. Weitere Informationen und Anmeldung: tu-dresden.de/zih/ssip2020 (Kontakt: Jacqueline Papperitz, ZIH)

# Veranstaltungen

- 20.04.2020: MPI: A Short Introduction to One-sided Communication, HLRS@GCS, Stuttgart
- 20.-21.04.2020: Introduction to hybrid programming in HPC, LRZ@GCS, Garching
- 20.-24.04.2020: Fortran for Scientific Computing, HLRS@GCS, Stuttgart
- 21.-22.04.2020: Interactive High-Performance Computing with Jupyter, JSC@GCS, Jülich
- 04.-06.05.2020 GPU Programming with CUDA, JSC@GCS, Jülich
- 05.-06.05.2020: HPC Technology Transfer Training Course, HLRS@GCS, Stuttgart
- 05.-08.05.2020: Advanced C++ with Focus on Software Engineering, HLRS@GCS, Stuttgart

### HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

https://hpc-calendar.gauss-allianz.de