

Top500 des Supercomputing – November 2021

Wie schon in der Juni-Ausgabe der Top500 gibt es auf den ersten zehn Plätzen in der aktuellen 58. Liste nur wenige Veränderungen. Das Perlmutter-System am NERSC (USA) auf Platz 5 konnte seine gemessene Linpack-Leistung leicht verbessern. Neu hinzugekommen ist auf Platz 10 das bei Microsoft (USA) installierte Voyager-EUS2-System mit 30,05 PetaFlop/s. Auf Platz 8 rangiert weiterhin der Rechner JUWELS in Jülich als leistungsfähigstes europäisches System. Im Ländervergleich führt weiterhin China die Liste in Bezug auf die Anzahl der Platzierungen mit 173 Systemen (-15) vor den USA mit 149 Systemen (+27) an. In Bezug auf die maximale Gesamtleistung dominieren die in den USA installierten Systeme mit einer Leistung (Rpeak) von 1.466 PetaFlop/s (+17,7%) vor China mit 1.158 PetaFlop/s (-2%) das Ranking. Deutschland liegt mit 26 Systemen (+3) und einer maximalen Gesamtleistung von 281 PetaFlop/s (+7,6%) auf Platz 4. Neu im nationalen wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen hinzugekommen sind das System Levante am DKRZ mit einer Spitzenrechenleistung von 10,3 PetaFlop/s auf Platz 68 sowie das von NEC an das DLR gelieferte System CARO mit einer Spitzenrechenleistung von 5,6 PetaFlop/s auf Platz 135. Weitere Informationen: top500.org/lists/.

Quantencomputing stärkt das Supercomputing

Um das Quantencomputing in den Forschungsalltag zu bringen und weiterzuentwickeln, beschafft das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) einen Quantencomputer des finnisch-deutschen Start-up IQM. Das BMBF fördert diesen Kauf mit mehr als 40 Mio. Euro. Der Fokus für die Weiterentwicklung im Projekt „Quantencomputer-Erweiterung für Exascale-HPC (Q-Exa)“ liegt darauf, das HPC damit zu beschleunigen sowie Know-how für künftige Computer- und Informationstechnologien aufzubauen. Für Q-Exa wird erstmals in Deutschland ein 20-Qubit-Computer auf der Basis supraleitender Schaltkreise mit HPC-Ressourcen gekoppelt. Im Zusammenspiel von Super- und Quantencomputing soll einerseits die neue Technologie für Wissenschaft und Wirtschaft alltags-tauglich und kontrollierbar werden, andererseits kann das HPC deutlich höhere Leistungsstufen erreichen. Die Q-Exa-Strategie beruht auf Co-Design und Kooperation: Neben dem LRZ und IQM, sind die Firmen Atos und HQS Quantum Simulations sowie Anbieter von HPC- und Quantensystemen beteiligt. Weitere Informationen: lrz.de/presse/ereignisse/2021-11-15-Start-Q-Exa/ (Kontakt: presse@lrz.de, LRZ@GCS)

Container-Unterstützung auf HPC-Systemen

Werkzeuge zur Containerisierung spielen in vielen Bereichen des wissenschaftlichen Rechnens eine zunehmend wichtige Rolle. In den letzten Jahren schlägt sich dieser Trend auch im HPC nieder. Das KIT bietet auf seinen beiden HPC-Systemen HoreKa und bwUniCluster 2.0 daher schon seit einiger Zeit die Nutzung von Containern an. Zum Einsatz kommen dabei die Softwarewerkzeuge Singularity und das von NVIDIA entwickelte Enroot. Beide Lösungen können unter anderem die weit verbreiteten Docker-Container-Images ausführen und unterstützen die in den beiden HPC-Clustern verfügbaren Beschleuniger vom Typ NVIDIA A100/V100 und AMD MI100. Mithilfe eines Plugins für den Workload-Manager Slurm wird zudem die Nutzung von Containern in Batch-Jobs erleichtert. Das KIT plant, für den interaktiven Zugang zu HPC-Ressourcen neben den nativen, vom KIT gepflegten Jupyter-Installationen, die Verwendung von containerisierten Jupyter-Versionen anzubieten. Zudem soll der Einsatz von Containern für Anwendungszwecke wie Continuous Integration (CI), Deployment und Benchmarking auf den HPC-Systemen weiter vereinfacht werden. Weitere Informationen: nhr.kit.edu/userdocs/horeka/containers/ (Kontakt: [René Caspart](mailto:René.Caspart@kit.edu), KIT)

Neue HPC-Benchmarks: SPEChpc 2021

Im Oktober hat die Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC) ihre neuen Anwendungsbenchmarks für Performance-Messungen von HPC-Systemen veröffentlicht. Diese zielen auf heterogene Mehrknotensysteme mit mehreren Levels an Parallelität ab, wie z. B. bei modernen CPU- oder GPU-Clustern. Diese Parallelitätslevel werden mit „MPI+X“ angesprochen, wobei „X“ durch OpenMP auf dem Host, OpenACC oder OpenMP Offloading unterstützt wird. Um verschieden große HPC-Systeme evaluieren zu können, enthalten die neuen Standards SPEChpc 2021 vier Suites, die sowohl sehr kleine als auch enorm große Datensätze zur Verfügung stellen. Qualifizierte nicht kommerzielle Organisationen können sich die Benchmark-Suites der SPEChpc kostenlos herunterladen und nutzen. Die Gauß-Allianz-Mitgliedszentren RWTH Aachen und TU Dresden unterstützen die SPEC-Aktivitäten seit Jahren aktiv. Für SPEChpc 2021 dient das ZIH-System TAURUS als Referenzplattform, gegen die alle Ergebnisse normalisiert werden; auch auf CLAIX der RWTH Aachen wurden Messungen durchgeführt und veröffentlicht. Die beiden Mitglieder haben zudem aktiv an der

Erstellung der Ausführungsregeln mitgearbeitet. Weitere Informationen: spec.org/hpc2021/.

Energieeinsparung durch effizientere Kühlung

Neben den Rechensystemen verursachen deren Kühlsysteme den zweitgrößten Stromverbrauch in Rechenzentren. In dem neuen Projekt DEGREE, das vom Institut für Gebäudeenergetik, Thermotechnik und Energiespeicherung (IGTE) der Universität Stuttgart und dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) initiiert wurde, werden Forschende einen neuen Ansatz testen: Ziele sind es, die Energieeffizienz durch einen Kühlmix aus freier Kühlung und aktiver Kühlung sowie gleichzeitig das Verhältnis zwischen der Temperatur des Kühlkreislaufs und der bestmöglichen Leistung des Rechensystems zu optimieren. Dazu wird ein Leitfaden für Rechenzentrumsbetreiber entwickelt, um die dynamische Kühlungsregelung in ihren eigenen Einrichtungen zu testen und umzusetzen. Die Integration dieser Ansätze soll dazu beitragen, den Energieverbrauch und die CO₂-Emissionen, die durch die Kühlung von Rechenzentren entstehen, zu senken. DEGREE wird mit einer Laufzeit von zwei Jahren von der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU) gefördert. Weitere Informationen: hlrs.de/news/detail-view/2021-11-08/ (Kontakt: [Michael M. Resch](mailto:Michael.M.Resch@hlrs.de), HLRS@GCS)

Supercomputing in Medizin und Pharmaforschung

Das internationale Forschungsprojekt CompBioMed will die Digitalisierung in der Medizin voranbringen. Mit Supercomputern soll anhand von Messwerten, Daten und Abbildungen ein lebender Mensch simuliert und visualisiert werden – Virtual Human. Gemeinsam mit dem Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) des LRZ gelang es einer Arbeitsgruppe um den britischen Mediziner und Informatiker Prof. Dr. Peter Coveney, den Blutfluss in den Venen und Arterien eines Unterarms zu modellieren und zu veranschaulichen. Diese faszinierende Arbeit schaffte es auf der internationalen Konferenz Supercomputing 2021 (SC'21) unter die weltweit besten 6 wissenschaftlichen Visualisierungen. Doch Supercomputer können noch mehr: Das Zusammenspiel smarter Mustererkennung und Supercomputing-Software beschleunigt die Suche nach Wirkstoffen für Medikamente. Forschende von CompBioMed und Expert/innen des LRZ bauten innovative Screening-Prozesse auf und testeten diese am SuperMUC-NG in Garching. Mehr zu den Meilensteinen für Medizin und Pharmakologie: lrz.de/presse/ereignisse/2021-11-11-Visualisierung-Arm/ (Kontakt: presse@lrz.de, LRZ@GCS)

Platz drei für DKRZ-Team bei ML-Challenge

Bei der zweiten "AI4Sentinel2 Challenge" erreichte das DKRZ-Team „EagleEyes“ den dritten Platz. Bei dem Online-Wettbewerb sollten Machine-Learning-Methoden

entwickelt werden, die die räumliche Auflösung von Sentinel-2-Satellitenbildern der Region Slowenien künstlich verbessern. Nachdem dafür zunächst landwirtschaftlich genutzte Flächen erkannt werden mussten, sollten die Ergebnisdaten außerdem eine räumliche Auflösung von 2,5 Metern erreichen und damit eine im Vergleich zu den Originalbildern vierfach höhere Auflösung erzielen. Für den dritten Platz erhielt das Team eine sechstägige Unterstützung bei der Erstellung von Lösungskonzepten und deren Portierung in die Cloud, die für Aufgabenstellungen im HAICU/AIM-Projekt verwendet werden. Weitere Informationen: dkrz.de/de/ml-challenge/ (Kontakt: [Frauke Albrecht](mailto:Frauke.Albrecht@dkrz.de), DKRZ)

SC'21: Beste Wissenschaftsvisualisierung vom DKRZ

Ein gemeinsames Team des DKRZ, des Max-Planck-Instituts für Meteorologie, der Universität Stockholm und der Intel Corporation hat den SC'21 Best Scientific Visualization & Data Analytics Showcase Award für ihre Visualisierung „Putting the Ocean into the Center: A coupled ICON Atmosphere/Ocean Simulation in Spilhaus Projection“ gewonnen. Mit der Auszeichnung würdigt die Supercomputing Conference die beeindruckendsten Videos des Jahres im HPC-Bereich unter den Bewertungskriterien Gesamtqualität, Darstellung der wissenschaftlichen Inhalte und kreativen Innovationen im Produktionsprozess. Klimasimulationen sind eine der datenintensivsten wissenschaftlichen Disziplinen. Das diesjährige Gewinnerteam hat eine sturmauflösende Simulation mit dem global gekoppelten Erdsystemmodell ICON-ESM durchgeführt, das globale Simulationen mit einer Auflösung von 5 km ermöglicht. Für die Visualisierung wurde die Spilhaus-Projektion ausgewählt, die die Ozeane als einen Wasserkörper, ohne Ausschnitte, Beschneidungsebenen und mit nur geringen Verzerrungen darstellt. Visualisiert wurden die zeitlich variierenden 3D-Ozean- und Atmosphärendaten wie Meeresoberflächendruck und Windstärken in 10 m Höhe, Geschwindigkeit der Meeresoberfläche und Meereis, Wolken als Zusammensetzung von flüssigem Wolkenwasser und Wolkeneis oder Meerestemperatur. Weiterführende Informationen: dkrz.de/de/kommunikation/aktuelles/sc21-auszeichnung.

Veranstaltungen

- 11.01.2022: [Machine learning on HPC – Einführung](#), ZIH, TU Dresden
- 13.01.2022: [Introduction to parallel I/O and distributed file systems](#), TU Dresden
- 19.01.2022: [Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows](#), LRZ@GCS, online

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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