

### Startschuss für Europas ersten Quantencomputer

Am 17. Januar wurde am Forschungszentrum Jülich ein Quantenannealer mit mehr als 5.000 Qubits feierlich in Betrieb genommen. Damit gaben das Jülich Supercomputing Centre (JSC) und D-Wave Systems, einer der führenden Anbieter von Quantencomputer-Systemen, den Startschuss für das erste Quanten-Cloud-basierte System dieses Unternehmens außerhalb Nordamerikas. Das neue System soll in Zukunft eng in die vorhandene HPC-Infrastruktur integriert werden. Der Quantenannealer ist Teil der Jülicher Nutzer-Infrastruktur für Quantencomputing (JUNIQ), die Forschenden in Deutschland und Europa seit Herbst 2019 Zugriff auf verschiedene Quantensysteme ermöglicht. Während der Feierstunde unterstrichen Bundesforschungsministerin Bettina Stark-Watzinger, NRW-Ministerpräsident Hendrik Wüst und EU-Kommissarin Mariya Gabriel die Bedeutung der Zusammenarbeit bei der Entwicklung praktischer Quantenanwendungen über Branchen und Forschungsbereiche hinweg. Außerdem würdigten sie JUNIQ als weiteren wichtigen Schritt, um Deutschland und Europa im Bereich des Quantencomputing international an die Spitze zu bringen. Die Landesregierung und das BMBF unterstützen den Aufbau von JUNIQ mit einer Förderung in Höhe von je 5 Mio. Euro. Weitere Informationen: [fz-juelich.de/ias/jsc/junIQ](https://fz-juelich.de/ias/jsc/junIQ) (Kontakt: [Kristel Michielsen, JSC@GCS](mailto:Kristel.Michielsen@JSC@GCS))

### HPC-Erweiterung für TU Dresden

Ende November 2021 hat das ZIH der TU Dresden nach europaweiter Ausschreibung den europäischen Marktführer für HPC, Atos, mit der Installation einer Supercomputing-Erweiterung beauftragt. Die Inbetriebnahme ist für Herbst 2022 geplant. Der Fokus des neuen HPC-Clusters liegt auf hoher CPU-Leistung, großen Speicherbandbreiten und einem leistungsstarken I/O-System, das die besonderen Anforderungen im datenintensiven Rechnen und bei Datenauswertungen unterstützt. Dafür sollen mehr als 600 Knoten mit der nächsten Intel-CPU-Generation „Sapphire Rapids“ mit insgesamt deutlich mehr als 60.000 CPU-Kernen eingesetzt werden, für deren Kühlung eine besonders effiziente Warmwasserkühlung zum Einsatz kommen wird, die auch die Netzteile einschließt. Die Rechnererweiterung wird für eine leistungsstarke I/O-Infrastruktur mit Speicherkomponenten von 1 PiB Kapazität für das Home-Dateisystem sowie 21 PiB für große Zwischenspeicher ausgestattet sein. Die Finanzierung dieser Beschaffung erfolgt zum Großteil aus dem ZIH-

Budget für das Nationale Hochleistungsrechnen (NHR). Das Cluster wird im Rahmen des NHR-Verbundes zur Nutzung für die Forschung deutschlandweit bereitgestellt. Weitere Informationen: [tu-dresden.de/zih/news/supercomputing-cluster-2022](https://tu-dresden.de/zih/news/supercomputing-cluster-2022) (Kontakt: [Andreas Knüpfer, ZIH](mailto:Andreas.Knuepfer@ZIH))

### Kapazitäten für Urgent Computing am HLRS

Globale Herausforderungen wie Pandemien und Naturkatastrophen erfordern schnelle Reaktionen seitens der Behörden. In dem dreijährigen Projekt Computational Immediate Response Center for Emergencies (CIRCE) wird das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) eine Studie über den Bedarf an und die möglichen Anwendungen von Simulationen, Hochleistungsdatenanalyse und künstlicher Intelligenz in Krisensituationen durchführen. Mithilfe von Sondierungsgesprächen mit potenziellen Partnern auf Bundes- und Landesebene wird das HLRS evaluieren, welche Daten den Behörden zur Verfügung stehen, als Grundlage für Prognosen dienen könnten und welche Arten von Prognosewerkzeugen den größten Nutzen bringen würden. Zudem soll ermittelt werden, welche organisatorischen Verfahren erforderlich sind, um die sofortige Verfügbarkeit der HPC-Ressourcen des HLRS in Notsituationen zu gewährleisten. CIRCE wird vom BMBF und dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg kofinanziert. Weitere Informationen: [hlrs.de/de/whats-new/news/detail-view/2021-11-30/](https://hlrs.de/de/whats-new/news/detail-view/2021-11-30/) (Kontakt: [Michael Resch, HLRS@GCS](mailto:Michael.Resch@HLRS@GCS))

### Paderborn mit neuen Rechenressourcen für NHR

Seit drei Jahren bietet das PC<sup>2</sup> als Tier-2-HPC-Zentrum in einem offenen, wissenschaftsgeleiteten Antragsverfahren Zugang zu Rechenressourcen für bundesweite Nutzung an. Seither wurden über 40 Projekte mit über 2 Mio. Stunden Rechenzeit (Core-h) und mehr als 200 kleinere Projekte nach positiver Begutachtung genehmigt und primär auf dem HPC-System Noctua 1 ausgeführt. Dieses bewährte Verfahren zur Rechenzeitvergabe wird nun an die erweiterten Ressourcen und die Vorgaben der NHR-Vergaberichtlinien angepasst. Im Rahmen des aktuellen Calls zur Projekteinreichung (Call 2022-2) können derzeit sogenannte „Normal-Projekte“, d.h. Vorhaben mit über 4 Mio. Core-h sowie Großprojekte mit über 12 Mio. Core-h für den Bewilligungszeitraum April 2022 bis März 2023 beantragt werden. Die Projektkontingente können mit dem neuen HPC-System

Noctua 2 weiter erhöht werden, das derzeit am PC<sup>2</sup> installiert wird und über 140.000 Prozessorkerne verfügt. Neben den CPU-Partitionen der beiden HPC-Systeme werden ab April auch 128 GPUs (NVIDIA A100-40) und 80 FPGAs (Xilinx Alveo U280 und BittWare 520N) zur Verfügung stehen. Pro Quartal wird eine Ausschreibung stattfinden. Projekte aus der Theoretischen Chemie oder Festkörperphysik können durch das PC<sup>2</sup> gesondert fachlich betreut werden. Weitere Informationen: [pc2.uni-paderborn.de/go/call2022-2](https://pc2.uni-paderborn.de/go/call2022-2) (Kontakt: [Jens Simon](mailto:Jens.Simon@pc2.uni-paderborn.de), PC<sup>2</sup>)

### Big Data europaweit analysieren und austauschen

Die Daten wissenschaftlicher Studien bergen meist mehr Antworten, als durch eine einzelne Forschungsfrage ausgewertet werden können. Da aufwändige Experimente zudem für Wiederholungen zu teuer sind, wird der Austausch von Forschungsdaten immer wichtiger. Außerdem sollten Wissenschaftler:innen die für ihre Berechnungen geeigneten Supercomputer auswählen können. Das europäische Projekt LEXIS hat sich vom 1. Januar 2019 bis 31. Dezember 2021 dieser Herausforderung angenommen. Koordiniert vom tschechischen Supercomputing-Zentrum IT4Innovations erarbeiteten 17 Institute, Unternehmen und Rechenzentren, darunter das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), Technologien, um den Austausch von Tera- bis Petabytes an Daten und den Zugriff auf europäische Rechenressourcen zu ermöglichen. Auf der dabei entstandenen LEXIS-Plattform finden sich Werkzeuge, die Analyse- und Simulationsprozesse effizient starten. Daten werden im Hintergrund für den nächsten Arbeitsschritt vorbereitet. Das Portal bietet zudem Features für das Management von Daten, die auf Diensten von EUDAT basieren. Gruppen können mit LEXIS über Grenzen hinweg zusammenarbeiten, Unternehmen und Forschende können Datensätze nutzen, die in anderen Ländern gespeichert sind. Weitere Informationen: [lrz.de/presse/ereignisse/2021-12-07-LEXIS-Projekt/](https://lrz.de/presse/ereignisse/2021-12-07-LEXIS-Projekt/) (Kontakt: [Stephan Hachinger](mailto:Stephan.Hachinger@lrz.de), LRZ@GCS)

### Europäisches KI-Sprachmodell OpenGPT-X

Unter der Leitung der Fraunhofer-Institute für Intelligente Analyse- und Informationssysteme (IAIS) und für Integrierte Schaltungen (IIS) startet aktuell das Projekt OpenGPT-X mit dem Ziel, ein großes KI-Sprachmodell für Europa zu entwickeln und damit die digitale Souveränität und marktwirtschaftliche Unabhängigkeit Europas zu gewährleisten. Mit einer Förderung von rund 15 Mio. Euro durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz werden insgesamt 10 deutsche Organisationen aus Wirtschaft, Wissenschaft und der Medienbranche die europäische Antwort auf GPT-3 entwickeln. Dieses KI-Sprachmodell des amerikanischen Unternehmens OpenAI revolutionierte vor ca. 2 Jahren den Markt, bietet seinen Nutzenden jedoch keinen freien Zugang, sondern lediglich eine Schnittstelle als Zugriff. Zudem sind Datenschutz und die Einbindung europäischer Sprachen nicht

gewährleistet. Während in OpenGPT-X Fraunhofer IAIS gemeinsam mit dem Deutschen Forschungszentrum für Künstliche Intelligenz sowie den Unternehmen Aleph Alpha und Alexander Thamm GmbH die KI-Modelle entwickeln, stellen das Forschungszentrum Jülich und das ZIH der TU Dresden ihre HPC-Systeme zur Verfügung und arbeiten an Leistungsverbesserungen von Modellen und Hardwarenutzung. Die 1&1 IONOS AG wird die Integration in die Gaia-X-Struktur betreuen. Domänenspezifische Daten für die Entwicklung der Modelle erhält das Projekt u. a. von ControlExpert und dem WDR. Weitere Informationen: [tu-dresden.de/zih/news/projektstart-open-gpt-x](https://tu-dresden.de/zih/news/projektstart-open-gpt-x) (Kontakt: [René Jäckel](mailto:René.Jäckel@zih.dtu-dresden.de), ZIH)

### Schutz von Gewässern durch Simulation

Auch wenn Naturschutz und Umweltvorschriften eine wichtige Rolle bei der Begrenzung der Schäden an unseren Seen und Flüssen spielen, können von Menschen verursachte Verschmutzung und Naturkatastrophen verheerende Auswirkungen haben. Seit 2017 finanziert die Baden-Württemberg Stiftung ein umfangreiches Projekt, um die Auswirkung von Verschmutzungen in Gewässern auf die Wasserqualität besser zu verstehen. Forschende des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) untersuchen dies unter anderem gemeinsam mit Kolleg:innen aus der Umweltwissenschaft und Biologie und kombinieren dafür Simulationen mit experimentellen Techniken. Mithilfe der HPC-Ressourcen am HLRS kann die Forschungsgruppe komplexe, mehrphasige, turbulente Strömungssimulationen durchführen, die zeigen, wie sich das Sedimentbett von Gewässern verändert und was dies für flussabwärts fließende Schadstoffe bedeutet. Ihre Ergebnisse wurden vor Kurzem im Journal of Fluid Mechanics veröffentlicht. Weitere Informationen: [hlrs.de/news/detail-view/2022-01-11/](https://hlrs.de/news/detail-view/2022-01-11/) (Kontakt: [Eric Gedenk](mailto:Eric.Gedenk@hlrs.de), GCS)

### Veranstaltungen

- 21.02.-28.03.2022: [Performance Optimierung - Kommunikation](#), HLRS@GCS, online
- 21.02.-28.03.2022: [Introduction to ANSYS CFX](#), LRZ@GCS, online
- 22.-23.02.2022: [Parallel I/O and Portable Data Formats](#), JSC@GCS, online
- 23.-25.02.2022: [Programming with Fortran](#), LRZ@GCS, online
- 25.02.2022: [NVIDIA NHR Workshop: Instructor-Led Workshop: Fundamentals of Accelerated Computing with CUDA C/C++](#), ZIH, online
- 21.-25.03.2022: [Parallel Programming in Computational Engineering and Science 2022](#), IT Center RWTH Aachen University, online

### HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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