

### **Energieeffizientester deutscher Rechner am NHR**

In der aktuellen Green500-Liste der energieeffizientesten Rechner der Welt belegt das neue Göttinger HPC-System „Grete“ Platz 1 in Deutschland und Platz 12 weltweit. In der TOP500-Liste der weltweit schnellsten Supercomputer belegt „Grete“ mit einer Rechenleistung von 1,83 PetaFlop/s im Linpack-Benchmark Platz 470. Benannt nach Grete Hermann (1901–1984), die als Doktorandin Emmy Noethers an der Universität Göttingen grundlegende Arbeiten für die Computeralgebra leistete, erweitert „Grete“ das seit 2021 im NHR-Verbund durch die GWDG und die Universität Göttingen betriebene HPC-System „Emmy“ um eine besonders leistungsstarke und energieeffiziente Komponente. Das System der Firma MEGWARE umfasst 36 Knoten. Diese sind mit je zwei CPUs des Typs AMD Epyc 7513, 512 Gigabyte DDR4-Speicher, zwei NVMe-SSDs mit je 1 Terabyte Speicherplatz und vier GPUs des Typs NVIDIA A100 ausgestattet. Weitere Informationen: [gwdg.de/about-us/press-releases/2022/press-release-5-2022](https://gwdg.de/about-us/press-releases/2022/press-release-5-2022) (Kontakt: Julian Kunkel, NHR@GÖTTINGEN)

### **SCALEXA-Förderung des BMBF**

Mit dem Förderprogramm „SCALEXA“ fördert das BMBF 15 Verbundforschungsprojekte mit Fokus auf Skalierbarkeit, innovativen Methoden sowie Architekturen für zukünftige Exascale-Systeme. Für diese Forschung stellt das BMBF insgesamt 22,2 Mio. Euro bereit. Das Spektrum der mit den Vorhaben adressierten Ansätze reicht von innovativen Algorithmen u. a. für heterogene Systeme über taskbasierte Programmiermodelle für hochskalierbare Simulationssoftware, numerische Algorithmen mit variabler Berechnungsgenauigkeit bzw. mit Unterstützung von Methoden des maschinellen Lernens, flexibler Nutzung von RAM und NVRAM bis hin zur Auslagerung von Aufgaben in das Netzwerk. Damit sollen beispielsweise Herausforderungen aus der Klima- und Erdsystemforschung mit dem ICON-Modell, der numerischen Strömungssimulation mit OpenFoam und der Materialwissenschaft und Geodynamik mit FEATFLOW bewältigt werden. Weitere Informationen: [gauss-allianz.de/SCALEXA](https://gauss-allianz.de/SCALEXA).

### **Energieeffiziente Klimasimulationen für GreenHPC**

Die computergestützte Klimaforschung soll zu einem besseren Verständnis des Klimawandels und seinen Auswirkungen sowie zunehmend zur Bewertung von Anpassungsstrategien beitragen. Der Betrieb der dafür eingesetzten HPC-Systeme ist jedoch sehr energieintensiv. Das Projekt EECLiPs untersucht deshalb die Möglichkei-

ten, die Energieeffizienz bei der Ausführung von Klimasimulationen durch ein geeignetes Co-Design von HPC-Hardware und -Software deutlich zu verbessern. Das Vorhaben wird im Rahmen der aktuellen BMBF-Maßnahme GreenHPC für drei Jahre gefördert. Als Projektleiter wird das DKRZ die Integration in die Infrastruktur des Verbunds und die Durchführung der Klimasimulationen übernehmen. Das ZIH der TU Dresden trägt dazu die notwendige Expertise im Bereich Software bei, u. a. für die Analyse und Energiemessung von HPC-Anwendungen, und die Firmen ParTec und Atos übernehmen gemeinsam die hardwareseitigen Untersuchungen. Ziel ist eine optimale Lastverteilung des Klima- und Wettermodells ICON auf ein heterogenes Proof-of-Concept-System bestehend aus verschiedenen aktuellen Architekturen. Dabei wird der Trend zu spezialisierten Architekturen im HPC-Umfeld ausgenutzt, sodass der Energieverbrauch einer Simulation gesenkt wird, ohne die Ausführungszeit erheblich zu verlängern. (Kontakt: Hendryk Bockelmann, DKRZ)

### **Helmholtz AI Rechnerinfrastruktur im Test**

Bei der Ermittlung des Nutzens von HPC-Systemen für moderne KI-Arbeitsabläufe, ist die MLPerf™ HPC-Benchmarking-Suite essentiell, um aus unterschiedlichen Rechnerplattformen und Konfigurationen die beste verfügbare Option für KI-Aufgaben zu identifizieren. Mitglieder der Plattform Helmholtz AI aus dem Steinbuch Centre for Computing (SCC) am KIT und dem JSC haben auch dieses Jahr ihre Ergebnisse in das MLPerf-Konsortium eingebracht und gezeigt, dass die HPC-Infrastrukturen ihrer Helmholtz-Zentren mit den leistungsfähigsten KI-Chips ausgestattet sind. Die genutzten Systeme HoreKa und JUWELS-Booster sind beide mit Beschleunigern des Typs NVIDIA A100 ausgestattet. Der JUWELS-Booster verwendete für diese Messungen sogar bis zu 3.072 GPUs dieses Typs. Mit diesen Benchmarks können code- sowie systembasierte Optimierungsmethoden und -werkzeuge genau abgestimmt werden, wodurch deutliche Leistungssteigerungen bei bestimmten KI-Aufgaben erreicht wurden. So belegt HoreKa in den jüngsten CosmoFlow-Benchmark-Ergebnissen den 2. Platz hinter NVIDIAs Selene-System und den 1. Platz für Forschungs- und Lehrinrichtungen in Bezug auf die schnellste Trainingszeit. Weitere Informationen: [scc.kit.edu/ueberuns/16590.php](https://scc.kit.edu/ueberuns/16590.php) (Kontakt: Markus Götz, KIT)

### **HPC-System Hawk für die Nanomedizin**

Das HLRS unterstützt Forschende mit Molekulardynamiksimulationen bei der Weiterentwicklung von mRNA-

Impfstoffen u. a. gegen Viruserkrankungen. Ein mRNA-Impfstoff enthält einen Teil der genetischen Sequenz des Virus, die mRNA, der mithilfe lipidbasierter Nanopartikel durch die Zellmembran transportiert wird. Dabei wird die mRNA durch eine sogenannte Translation in Proteine übersetzt, die eine Immunreaktion im Körper auslösen und so das Immunsystem gegen eine Infektion trainieren. Die Effizienz der Translation wird entscheidend durch die Zusammensetzung der Nanopartikel beeinflusst, für deren Entwicklung Höchstleistungsrechner ins Spiel kommen: Sie modellieren die Wechselwirkung in den Nanopartikeln, sodass die Vorgänge der Lipid-mRNA auf molekularer Ebene betrachtet werden können. Mithilfe des HLRS-Supercomputers Hawk konnte beispielsweise der Einfluss des pH-Werts von Flüssigkeiten auf die Translation erkannt werden. Weitere Informationen: [hlrs.de/de/news/detail/hawk-im-einsatz-zur-verbesserung-der-nanomedizin](https://hlrs.de/de/news/detail/hawk-im-einsatz-zur-verbesserung-der-nanomedizin) (Kontakt: [Eric Gedenk](mailto:Eric.Gedenk@GCS), GCS)

### Digitale Zwillinge für Energiewende in Kommunen

In der aktuellen Forschungsinitiative SRI „DiTEoS“ (Stuttgart Research Initiative: Discursive Transformation of Energy Systems) beschäftigen sich Forschende des HLRS und anderer Institute der Universität Stuttgart mit Methoden der Modellierung und Simulation für lokale und individuelle Energie- und Heizungsversorgungs-lösungen. Das multidisziplinäre Team wird realistische und dynamische Simulationen entwickeln, die die Abhängigkeiten sowohl auf der Ebene einzelner Gebäude als auch auf der regionalen Ebene berücksichtigen. Am HLRS werden mithilfe dieser Modellierungen „digitale Zwillinge“ von Gebäude- und Energiesystemen erstellt, mit dem Ziel alle Stakeholder eines bearbeiteten Gebiets in die Gestaltung der örtlichen Transformationsprozesse einzubinden. Zudem verfolgt DiTEoS eine sozialwissenschaftliche Perspektive, um Konflikte zwischen den unterschiedlichen Anforderungen aller Beteiligten der Energiewende zu reduzieren und gemeinsame Lösungen zu fördern. DiTEoS wird von der Carl-Zeiss-Stiftung (CZS) über das Programm „CZS Durchbrüche – RessourcenEffizienz“ für sechs Jahre mit insgesamt ca. 5 Mio. Euro finanziert. Die Universität Stuttgart beteiligt sich mit zusätzlichen Mitteln, um damit einen neuen Forschungsschwerpunkt sowie ein Graduiertenkolleg aufzubauen. Weitere Informationen: [hlrs.de/de/news/detail/stuttgarter-forschungsinitiative-unterstuetzt-energiewende-in-kommunen](https://hlrs.de/de/news/detail/stuttgarter-forschungsinitiative-unterstuetzt-energiewende-in-kommunen) (Kontakt: [Christopher Williams](mailto:Christopher.Williams@HLRS@GCS), HLRS@GCS)

### Erstes deutsches WHPC-Chapter anerkannt

Die globale Organisation „Women in High Performance Computing“ (WHPC: [womeninhighperformancecomputing.org](https://womeninhighperformancecomputing.org)) wurde gegründet, um innerhalb der HPC-Gemeinschaft mehr Chancengleichheit, Vielfalt und Integration zu schaffen. Die Initiative ist auf Konferenzen wie der SC und ISC aktiv und bietet Workshops und Mentoring-Programme an. Auf

fünf Kontinenten arbeiten bereits viele Institutionen als sogenannte Chapter mit WHPC zusammen. Das lokale Netzwerk „Jülich Women in High Performance Computing“ des Forschungszentrums Jülich (JuWinHPC) wurde kürzlich als erstes deutsches Netzwerk von der globalen Dachorganisation als offizielles Chapter anerkannt. Ein Ziel des Chapters ist die Stärkung der lokalen HPC-Gemeinschaft, z. B. durch regelmäßige Mitgliedertreffen. Zudem arbeitet JuWinHPC bereits mit anderen internationalen Chapters daran, ein besseres Verständnis über das Geschlechterungleichgewicht im Bereich HPC zu entwickeln und insbesondere Frauen, die auf diesem Gebiet arbeiten, sichtbarer zu machen. Auf nationaler Ebene plant JuWinHPC die Gründung weiterer Chapter zu unterstützen, um deutschlandweit die Zusammenarbeit voranzutreiben. Weitere Information: [fz-juelich.de/en/ias/jsc/juwinhpc](https://fz-juelich.de/en/ias/jsc/juwinhpc) (Kontakt: [Ruth Schöbel](mailto:Ruth.Schoebel@JSC@GCS), JSC@GCS)

### International HPC Summer School 2023

Die „International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences“ (IHPCSS) wird noch internationaler: Neben der Beteiligung Australiens hat auch Südafrika Interesse bekundet und möchte sich zunächst mit Beobachterstatus beteiligen. Die 13. HPC-Sommerschule wird vom 9. bis 14. Juli 2023 in Atlanta, USA stattfinden. Ab Dezember sollen sich Promovierende und Postdocs aus wissenschaftlichen Einrichtungen in Australien, Europa, Kanada, Japan oder den USA um einen der 80 Plätze bewerben können, wobei für die Ausrichtung in 2023 wieder Wechsel bei den Träger-Organisationen stattfinden. Während die erste Sommerschule 2010 zwischen Europa und den USA durch das EU-Projekt DEISA sowie das NSF-Projekt TeraGrid stattfand, übernahmen in den Folgejahren z.B. das EU-Projekt PRACE und das NSF-Projekt XSEDE. 2013 kam dann Japan mit dem Forschungszentrum RIKEN als Träger hinzu. 2014 folgte Kanada mit Unterstützung durch Compute Canada/Calcul Canada, was 2017 an die Universität von Toronto überging. In Europa hat EuroHPC die Verantwortung und Führungsposition innerhalb des europäischen HPC-Ökosystems übernommen und löst PRACE als Träger für den europäischen Teil ab. Weitere Informationen: [ihpcss.org](https://ihpcss.org) (Kontakt: [Hermann Lederer](mailto:Hermann.Lederer@MPCDF), MPCDF)

#### Veranstaltungen

- 12.12.2022: [ENRICH: Energie, Nachhaltigkeit, Ressourceneffizienz in IT und Rechenzentren](#), HLRS, Stuttgart
- 15.12.2022: [VisIt and OSPRay Studio for Scientific Visualisation](#), LRZ@GCS, Garching

**HPC-Kalender der Gauß-Allianz:**  
[hpc-calendar.gauss-allianz.de](https://hpc-calendar.gauss-allianz.de)