

### HLRS erhält ISO 27001-Sicherheitszertifizierung

Das HLRS wurde im Juni für sein Informationssicherheitsmanagementsystem (ISMS) nach ISO 27001 zertifiziert. Diese Zertifizierung ist ein Beleg für die Wirksamkeit des umfassenden ISMS am HLRS. Dies schließt technische und organisatorische Maßnahmen ein, mit deren Hilfe Bedrohungen für die Sicherheit von gespeicherten Daten erkannt und Angriffe verhindert werden können bzw. auf beides reagiert werden kann. Dazu gehört auch der Schutz der Höchstleistungsrechner des Zentrums vor unbefugtem Zugriff. Der Anwendungsbereich beinhaltet die Bereitstellung von Rechenzeit auf seinen Höchstleistungsrechnern sowie die unterstützenden Prozesse zum Betrieb der Produktionsumgebung. Das umfasst Richtlinien, die potenzielle Sicherheitsrisiken auf allen Ebenen der Organisation abdecken, d.h. Hard-, und Software, Einrichtungen und Personal. Weitere Informationen: [hirs.de/de/news/detail/hirs-erhaelt-iso-27001](https://hirs.de/de/news/detail/hirs-erhaelt-iso-27001). (Kontakt: [Sophia Honisch](mailto:Sophia.Honisch@HLRS@GCS), [HLRS@GCS](mailto:HLRS@GCS))

### Startschuss für nordbayerisches HPC-Rechenzentrum

Bayerns Wissenschaftsminister Markus Blume hat am 31. Mai den Planungsauftrag zum Bau eines nordbayerischen Hochleistungsrechenzentrums erteilt. Bis zu 260 Mio. Euro sollen für dieses Hightech-Vorhaben bereitgestellt werden. Damit erhält nicht nur das NHR@FAU langfristig eine moderne und energieeffiziente Infrastruktur für leistungsfähige HPC- und KI-Anwendungen, sondern gleichzeitig soll ein IT-Leuchtturm für alle Universitäten und Hochschulen in Nordbayern geschaffen werden. Das LRZ in Garching steht für diese Perspektive Pate. Gemeinsam mit den südbayerischen Kolleg:innen haben sich auch das NHR@FAU und das RRZE aktiv am bisherigen Entwicklungsprozess für das Rechenzentrumskonzept beteiligt. Der zukunftsweisende Entwurf bildet nun die Grundlage für den Planungsauftrag und dessen Umsetzung bis zum Ende des Jahrzehnts. Weitere Informationen: [stmwk.bayern.de/pressemitteilung/12663/nr-48-vom-31-05-2023.html](https://stmwk.bayern.de/pressemitteilung/12663/nr-48-vom-31-05-2023.html). (Kontakt: [Gerhard Wellein](mailto:Gerhard.Wellein@NHR@FAU), [NHR@FAU](mailto:NHR@FAU))

### Innovationspartnerschaft für HPC-Anforderungen

Neben Simulationen werden Supercomputer heute vermehrt auch für KI-Anwendungsszenarien eingesetzt und müssen hohe Erwartungen an Energieeffizienz erfüllen. Auch die Aufnahme der ersten Quantentechnologien wird bereits vorgedacht. Im Hinblick auf die Planung und den Aufbau adäquater Systeme sind deshalb ganz unterschiedliche Perspektiven zu beachten. Am LRZ sind daher so viele Kolleg:innen wie nie in die Entwicklung und Be-

schaffung des nächsten HPC-Systems eingebunden. Der Nachfolger von SuperMUC-NG entsteht im Co-Design mit Technologieanbieter:innen und wird eng auf die Bedürfnisse der Nutzenden abgestimmt. Das LRZ entschied sich als erstes HPC-Zentrum dafür, die Beschaffung im Rahmen einer Innovationspartnerschaft zu realisieren. Zurzeit setzen sich ca. 12 Spezialist:innen aus den Bereichen HPC, KI, Future Computing und dem Anwender:innen-Support sowie die Führungsebenen intensiv mit der Evaluierung von Prototypen und Optimierung von Komponenten auseinander. Erste Forderungen und Benchmarks an das System wurden zudem mit Hilfe des Testbeds BEAST geklärt. Die Innovationspartnerschaft ist ein mehrstufiges Beschaffungsverfahren. Der Zuschlag für den Aufbau des Systems wird daher in einem mehrstufigen Wettbewerb ermittelt. Weitere Informationen: [tiny.badw.de/guVSVd](https://tiny.badw.de/guVSVd). (Kontakt: [Herbert Huber](mailto:Herbert.Huber@LRZ@GCS), [LRZ@GCS](mailto:LRZ@GCS))

### Hawk-Einsatz für die 2D-Materialforschung

Mithilfe von Höchstleistungsrechnern konnten Forschende am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) Graphen-ähnliche zweidimensionale (2D) Materialien ermitteln, die sich für die Herstellung elektronischer Geräte einsetzen lassen. Graphen wird hergestellt, indem es in dünnen Kohlenstoffatomschichten aus Graphit abgeschält wird. Allerdings ist Graphen sehr spröde, was die industrielle Herstellung erschwert. Für die Suche nach einem neuen 2D-Material in einer Materialdatenbank setzte das Team am HZDR den Supercomputer Hawk des HLRS mit ersten Erfolgen ein. Im Bereich der Sulfide und Chloride identifizierten die Forschenden Verbindungen, die sich leichter aus der Masse in 2D-Schichten trennen lassen. Künftige Materialsuchen wollen sie nun mithilfe von HPC ausweiten und die Werkstoffe katalogisieren. Um die Suche nach relevanten 2D-Verbindungen zu beschleunigen, sind spezielle maschinelle Lernmodelle geplant. Weitere Informationen: [hirs.de/de/news/detail/neue-2d-materialklasse-mithilfe-von-hawk-erforscht](https://hirs.de/de/news/detail/neue-2d-materialklasse-mithilfe-von-hawk-erforscht). (Kontakt: [Erik Gedenk](mailto:Erik.Gedenk@GCS), [GCS](mailto:GCS))

### ERA5-Daten für 1940–2023 am DKRZ

Um die Erdsystemforschung so effektiv wie möglich zu gestalten, stellt das DKRZ für die Nutzenden seiner Hochleistungsrechner ausgewählte, großvolumige Datensätze externer Datenerzeuger zentralisiert bereit. Ein Beispiel dafür ist ERA5, die fünfte Generation der globalen Wetter- und Klima-Reanalyse-Datensätze des Europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersage, die als Teil des Copernicus Climate Change Service (C3S) erstellt werden. Sie dienen beispielsweise als Antriebsdaten für Klimamodellsimulationen, zur Modellevaluation oder zur

Analyse von Klimatrends. Zunächst umfasste der Datensatz den Zeitraum ab 1979. Vor Kurzem wurde dieser erweitert, sodass er nun den Zeitraum von Januar 1940 bis März 2023 abdeckt. Die Zeitreihe, die derzeit 1,4 Petabyte an Daten umfasst, wird jedoch kontinuierlich aktualisiert. Die Daten sind im Dateisystem des Hochleistungsrechners Levante abgelegt und zudem über einen intake-Katalog verfügbar. Weitere Informationen: [dkrz.de/ERA5\\_auf\\_Levante/](https://dkrz.de/ERA5_auf_Levante/). (Kontakt: [Data Support](#), DKRZ)

### Effiziente Massenspeicher für Supercomputer

Hochleistungsrechner erreichen immer höhere Rechenleistungen bis hin zu ExaFlop/s. Die Entwicklung der verfügbaren Speicherbandbreite hat damit nicht in gleichem Maße Schritt gehalten. Ziel des Vorhabens „Skalierbare und performante Massenspeicherzugriffe für Exascale-Supercomputer – MCSE“ ist eine deutliche Effizienzsteigerung durch eine Aufhebung der Trennung zwischen flüchtigem und nichtflüchtigem Speicher. Nach der systematischen Untersuchung von Schnittstellen für elementare Ein-/Ausgabe (E/A) von parallelen Anwendungen soll im Projekt dazu die speicherunabhängige IO-Verbschnittstelle zum Ausdrücken von E/A-Semantiken entwickelt werden. Basierend auf dem Infinite Memory Layer (IML) des Fraunhofer ITWM wird ein Ökosystem für E/A in Kampagnen entwickelt, die bis zu mehreren Monaten andauern. IML wird dabei um E/A-Schnittstellen, Metadaten und Persistenz ergänzt. Das Projekt wird im Rahmen des BMBF-Programms SCALEXA gefördert und durch die Universität Göttingen koordiniert. Partner sind die GWDG, das ZIH der TU Dresden, das Fraunhofer ITWM, das DLR und die ThinkParQ GmbH. Weitere Informationen: [gauss-allianz.de/de/project/title/MCSE](https://gauss-allianz.de/de/project/title/MCSE). (Kontakt: [Julian Kunkel](#), GWDG)

### ClusterCockpit 1.0.0 offiziell freigegeben

Das NHR@FAU hat die erste stabile Version des Monitoring-Frameworks ClusterCockpit veröffentlicht. Die flexible Software-Infrastruktur für jobspezifisches Performance- und Energiemonitoring von HPC-Systemen wird vom BMBF im Rahmen des GreenHPC-Projekts „Open-Source-Lösungsansätze für Monitoring und Systemeinstellungen für energieoptimierte Rechenzentren (EE-HPC)“ gefördert. Als Open-Source-Software kann ClusterCockpit von GitHub heruntergeladen werden. Ein weiterer Fokus des ClusterCockpit-Projekts liegt auf Format- und Schnittstellenstandards für HPC-Überwachungsumgebungen mit einfacher Installation und Wartung, hoher Sicherheit und intuitiver Nutzung. Die Software lässt sich als vollständig integrierte Überwachungslösung sowie mit externen Komponenten einsetzen. ClusterCockpit ist bislang am NHR@FAU, am PC<sup>2</sup> und am DKRZ im Einsatz. Das NHR@FAU unterstützt interessierte Einrichtungen bei der Planung und Einrichtung von ClusterCockpit vor Ort. Weitere Informationen: [clustercockpit.org/](https://clustercockpit.org/). (Kontakt: [Jan Eitzinger](#), NHR@FAU)

### Erste HPC-Konferenz des NHR

Mit einer neuen wissenschaftlichen Konferenzserie will der Verbund für Nationales Hochleistungsrechnen (NHR-Verbund) den Austausch von Forschenden zur HPC-Nutzung fördern. Im Fokus der ersten Konferenz am 18. und 19. September am ZIB stehen die Themen Atomistische Simulation, Lebenswissenschaften und Agenten-basierte Simulation. Durch internationale Keynotes, Vorträge, Poster und Diskussionen bietet die Konferenz eine Plattform über Disziplinengrenzen hinweg. HPC-Spezialist:innen der NHR-Zentren aus dem operativen Betrieb, dem Support und der wissenschaftlichen Fachberatung werden sowohl in direkten Gesprächen als auch auf dem Podium für Fragen zur Verfügung stehen. Die Anmeldung ist bis zum 15. August möglich. Weitere Informationen: [events.uni-paderborn.de/event/487](https://events.uni-paderborn.de/event/487). (Kontakt: [Susanne Passow](#), NHR)

### ZKI-Herbsttagung zu Datenmanagement und KI

Vom 11. bis 13. September richten das ZIH der TU Dresden und der Verein der Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung (ZKI e.V.) die ZKI-Herbsttagung 2023 an der TU Dresden aus. Unter dem Titel „Datenmanagement und künstliche Intelligenz: Über Herausforderungen der Zukunft“ werden im Programm aktuelle hochschulrelevante Fragestellungen thematisiert, wie z.B. Herausforderungen in Datenmanagement, -haltung sowie Infrastrukturen oder im Bereich Software und Virtualisierung in Rechenzentren. Als weiterer Schwerpunkt werden Fachvorträge aktuelle Trends und Entwicklungen rund um KI und Datenanalyse beleuchten. Zwei Keynotes aus den datenintensiven Anwendungsbereichen Systembiologie und Astrophysik werden die besonderen Herausforderungen an der Schnittstelle von fachspezifischer Anwendungs- und Methodenforschung im Bereich Supercomputing zur Lösung aktueller wissenschaftlicher Fragen adressieren. Weitere Informationen: [tu-dresden.de/zih/zki-herbsttagung-2023](https://tu-dresden.de/zih/zki-herbsttagung-2023). (Kontakt: [Claudia Schmidt](#), ZIH)

### Veranstaltungen

- 16.–24.08.2023: [Parallel Programming with MPI/OpenMP](#), HLRS/ETH Zürich, online
- 20. und 27.09.2023 (Teil 1+2): [Introduction to Parallel Programming with OpenMP](#), NHR@FAU, online
- 05.10.2023: [Data Parallelism - How to Train Deep Learning Models on Multiple GPUs](#), LRZ
- 12.–13.10.2023: [Introduction to Machine Learning and Deep Learning](#), NHR4CES, online

### HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

[hpc-calendar.gauss-allianz.de](https://hpc-calendar.gauss-allianz.de)