

Inbetriebnahme des Hochleistungsrechners ForHLR

Am 4. März findet am KIT die feierliche Inbetriebnahme der zweiten Stufe des Forschungshochleistungsrechners ForHLR statt. Das gemeinsam von Bund und Land Baden-Württemberg finanzierte System ermöglicht insbesondere den Forschungsbereichen Umwelt, Energie, Nano- und Materialwissenschaften, komplexe Anwendungsprobleme in neuen Größenordnungen zu bearbeiten. Das dafür ebenfalls von Land und Bund geförderte neue Rechnergebäude wird mit neuester Kühltechnologie besonders energieeffizient betrieben. Als Parallelrechner der Leistungsklasse 2 trägt der ForHLR dazu bei, die Lücke zwischen extrem skalierenden Anwendungen und solchen aus dem schwach parallelisierten Bereich zu schließen. Das PetaFlop/s-System verfügt über mehr als 1170 Knoten und 24000 Rechenkernen, 74 Terabyte Hauptspeicher, ein nicht-blockierendes InfiniBand-EDR-Netzwerk mit Fat-Tree-Topologie sowie Lustre-Dateisystemen mit 4,8 Petabyte Plattenkapazität und einem Durchsatz von 80 Gigabyte/s. Der ForHLR 2 ist, wie der ForHLR 1, hoch performant an die Large Scale Data Facility des KIT angebunden. Über die Vergabe der Rechenzeit entscheidet der gemeinsam mit dem HLRS eingesetzte Lenkungsausschuss. Weitere Informationen: <http://www.scc.kit.edu/dienste/forh1r2.php> (Kontakt: [Horst Gernert](#), SCC/KIT)

Spitzenleistung für Darmstadt erreicht

Der Lichtenberg Hochleistungsrechner der TU Darmstadt hat nun mit rund einem PetaFlop/s seine theoretische Spitzenleistung erreicht. Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus ganz Hessen können für ihre Forschung das System nutzen. Die TU Darmstadt ist Mitglied im Hessischen Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen (HKHLR). Weitere Informationen: <http://www.hh1r.tu-darmstadt.de> (Kontakt: [Andreas Wolf](#), HRZ TU Darmstadt)

Dresdner GPU Computing Center: Weltweites Vorbild

Zunehmend werden Wissenschaftsfelder durch den Einsatz moderner Grafikprozessoren (GPUs) revolutioniert. Das GPU Computing Center (GCoE) der TU Dresden, des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf (HZDR) und des Max-Planck-Instituts für Molekulare Zellbiologie und Genetik (MPI-CBG) ist in dieser Entwicklung in verschiedenen Bereichen weltweit führend. In einer von der Firma NVIDIA veröffentlichten Fallstudie werden drei

herausragende Beispiele der Arbeit des GCoEs vorgestellt: Die Entwicklung von neuartigen Krebstherapien des HZDR, die revolutionären Arbeiten zur computergestützten Mikroskopie des MPI-CBG sowie die Arbeiten zum autonomen semantischen Verstehen von Kamerabildern des Computer Vision Lab Dresden (TU Dresden). Das ZIH unterstützt das GCoE mit der Bereitstellung von insgesamt 344 GPUs sowie methodenwissenschaftlicher Forschung und Entwicklung in der Performance-Optimierung von Anwendungen. Weitere Informationen: <https://gcoe-dresden.de/?p=600> (Kontakt: [Guido Juckeland](#), ZIH)

POP hilft HPC-Anwendern

Als eines der acht von der EU unter Horizon 2020 geförderten Centres of Excellence hat „POP – Performance Optimization and Productivity“ Ende 2015 seinen Betrieb aufgenommen. Entwickler von HPC-Anwendungen können damit nun auf den kostenlosen Rat von Experten zählen, wenn es um die Analyse der Performance und das Auffinden vorhandenen Verbesserungspotentials innerhalb ihrer parallelen Anwendungen geht. In POP arbeiten Experten von BSC, JSC, HLRS, RWTH Aachen, NAG und Ter@tec zusammen, um industriellen und akademischen Nutzern kostenlose Serviceangebote zur Performancemessung und -analyse zur Verfügung zu stellen und sie dabei zu unterstützen, das Leistungsverhalten der Anwendungen besser zu verstehen. Dabei geht es auch um die Erarbeitung von Verbesserungsvorschlägen für die Codeoptimierung. Trainingskurse runden das Angebot ab. Weitere Informationen: <http://www.pop-coe.eu/> (Kontakt: [Bernd Mohr](#), JSC)

EU Centre of Excellence E-CAM

Das ebenfalls im Rahmen von Horizon 2020 geförderte Centre of Excellence E-CAM verfolgt die Entwicklung einer europäischen Infrastruktur im Bereich der Simulation und Modellierung von Materialien und biologischen Prozessen, die industrielle bzw. gesellschaftliche Relevanz besitzen. Das Projektkonsortium besteht aus 15 Partnern aus zehn Ländern, die als CECAM-Knoten (www.cecarn.org) miteinander vernetzt sind. Gemeinsam soll Software für Skalen übergreifende Problemstellungen entwickelt werden, die zwischen elektronischen und Kontinuums-längen- und -zeitskalen eingesetzt werden können. Die Arbeiten konzentrieren sich dabei auf vier Bereiche: elektronische Strukturrechnungen, klassische

Molekulardynamik, Quantendynamik und mesoskopische Modellierung. Die Ergebnisse werden in einer frei zugänglichen Software-Bibliothek zusammengestellt. Ein wichtiger Aspekt des Projekts ist die Kooperation mit Industriepartnern. Gemeinsam werden problemspezifische Softwaremodule entwickelt und Schulungen durchgeführt. Dies trägt dazu bei, dass das wissenschaftliche Rechnen – insbesondere das HPC – in die industriellen Anwendungsbereiche gelangt. Weitere Informationen: <http://e-cam2020.eu> (Kontakt: [Godehard Sutmann](#), JSC)

Effizientere Eigenlöser für die Forschung

Die ersten der durch das BMBF im Rahmen des 4. HPC-Calls auf dem Gebiet „Anwendungsorientierte HPC-Software für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Wissenschaft und Wirtschaft“ geförderten Projekte starten Anfang 2016. Das Projekt „ELPA-AEO – Eigenwert-Löser für Petaflop-Anwendungen: Algorithmische Erweiterung und Optimierungen“ adressiert die Software-Herausforderungen, die mit der immer höheren Leistungsfähigkeit neuer HPC-Architekturen bei immer höherem Stromverbrauch bezüglich „Time-to-Solution“ und „Energy-to-Solution“ einhergehen. Ziel von ELPA-AEO ist die Steigerung der Effizienz von Supercomputer-Simulationen für die Lösung des Eigenwertproblems für dichte und bandstrukturierte symmetrische Matrizen. Hierbei sollen insbesondere Fragestellungen aus der Materialforschung, der biomolekularen Forschung und der Strukturmechanik berücksichtigt werden. Ausgehend von Eigenlösern aus der ELPA-Bibliothek (BMBF-Förderung bis 2011) sollen durch das neue Verbundvorhaben mit Wissenschaftlern aus Berlin, Garching und Wuppertal einerseits noch größere Probleme als bisher bearbeitet werden können. Andererseits geht es in ELPA-AEO darum, den mit der Simulation verbundenen Rechenaufwand zu verringern und bei vorgegebener Genauigkeit und weiterhin hoher Software-Skalierbarkeit den Ressourceneinsatz und den Energieverbrauch zu reduzieren. Weitere Informationen: <http://elpa-aeo.mpcdf.mpg.de> (Kontakt: [Hermann Lederer](#), MPCDF)

Korrektheitsanalysen für Exascale-Anwendungen

Unter Koordination der RWTH Aachen ist am 1. Januar das Projekt „MYX – MUST correctness checking for YML and XMP programs“ gestartet. MYX ist eines von vier neuen Projekten im DFG-Schwerpunktprogramm „Software for Exascale Computing“ und mit französischen und japanischen Partnern trilateral angelegt (vgl. GA-Infobrief Nr. 40). Mit zunehmender Komplexität und Parallelität der Rechnersysteme werden Werkzeuge zum automatischen Erkennen von Programmierfehlern immer wichtiger. Die Projektpartner aus Frankreich und Japan arbeiten bereits in dem gemeinsamen Projekt FP2C an den Programmierparadigmen YvetteML und XcalableMP. XcalableMP ist eine Pragma-basierende PGAS-Sprache mit Exascale-Ambitionen, YvetteML beschreibt den

Workflow der Komponenten einer Exascale-Anwendung. Im Rahmen des Projekts MYX wird die Anwendung von automatischen Korrektheitsanalysen in die Weiterentwicklung dieser Programmierkonzepte integriert. Außerdem wird erforscht, welche Eigenschaften Programmierparadigmen mitbringen müssen, um automatische Korrektheitsanalysen effizient auszuführen. Weitere Informationen: <http://www.itc.rwth-aachen.de/myx> (Kontakt: [Christian Terboven](#), RWTH Aachen)

International HPC Summer School 2016

Die mittlerweile siebte „International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences“ wird vom 26. Juni bis 1. Juli in Ljubljana, Sloweniens Hauptstadt und Europas „Green Capital 2016“, stattfinden. Die Organisation und Finanzierung wird zum dritten Mal in Folge durch die Veranstalter Compute/Calcul Canada für Kanada, PRACE für Europa, RIKEN AICS für Japan und XSEDE/NSF für die USA getragen. Doktoranden und Postdocs wissenschaftlicher Einrichtungen aus Europa, den USA, Kanada und Japan können sich noch bis zum 15. Februar 2016 um einen der begehrten 80 Plätze bewerben. Die Auswahl erfolgt durch ein Review-Verfahren. Die Agenda der Sommerschule bündelt in einzigartiger Weise HPC-Herausforderungen in verschiedenen wissenschaftlichen Disziplinen, Programmiertechniken, Visualisierung, Hands-on-Sessions, Mentoring, Poster-Sessions und fördert den interkontinentalen Informationsaustausch. Die Teilnahme ist für Studierende kostenfrei, ebenso wie Unterkunft, Verpflegung und die Anreise außerhalb von Europa. Weitere Informationen: <http://ihpcss2016.hpcfs.uni-lj.si> (Kontakt: [Hermann Lederer](#), MPCDF)

Veranstaltungen

- 22.-26.02.2016: [Iterative Gleichungssystemlöser und Parallelisierung](#), HLRS, Stuttgart
- 29.02.-02.03.2016: [HiPerCH – High Performance Computing in Hessen](#), HKHLR, Kassel
- 29.02.-04.03.2016: [Einführung in die Numerische Strömungstechnik](#), ZIMT, Siegen
- 01.-02.03.2016: [Einzelprozessoroptimierung](#), RRZ, Universität Hamburg
- 14.-16.03.2016: [GPU Programming using CUDA](#), HLRS, Stuttgart
- 14.-16.03.2016: [Parallel I/O and Portable Data Formats](#), JSC, Jülich
- 14.-18.03.2016: [Parallel Programming in Computational Engineering and Science 2016](#), IT Center, RWTH Aachen
- 04.-08.04.2016: [Fortran for Scientific Computing](#), HLRS, Stuttgart