

Fusion von HPC und Data Analytics (HPC-DA)

Das ZIH der TU Dresden erweitert seinen Hochleistungsrechner um Systemkomponenten für die Analyse komplexer großer Datenmengen. Die Erweiterung bietet den Forschenden mehr als 2 Petabyte Flash-Speicher mit einer Bandbreite von etwa 2 Terabyte/s, wobei der Flash-Speicher flexibel konfigurierbar ist und an allen vorhandenen ZIH-Rechenknoten genutzt werden kann. Für große Datenvolumen wird daneben ein Objekt-Speicher von 10 Petabyte bereitgestellt. Beide Lösungen werden von der Firma NEC geliefert. Als Schnittstelle von HPC und Data Analytics bietet „HPC-DA“ skalierbare virtuelle Forschungsumgebungen, die auf die Anforderungen der Anwender/-innen zugeschnitten sind. Die Rechenkapazität wird um 22 Power-9-Knoten der Firma IBM mit jeweils sechs NVIDIA-V100-GPUs erweitert, die an die genannten Speichersysteme angebunden werden und damit eine der momentan leistungsfähigsten Machine-Learning-Infrastrukturen in Deutschland zur Verfügung stellen. Insgesamt bietet das System damit die Möglichkeit, verschiedene Technologien flexibel zu effizienten und individualisierbaren Forschungsinfrastrukturen zu kombinieren. Die Installation wird Nutzer/-innen aus ganz Deutschland offenstehen, deren HPC- und Big-Data-Anwendungsfälle in besonderer Weise von HPC-DA profitieren können. Der Produktionsbetrieb soll Ende 2018 beginnen; Projektanträge können ab September über das Antragsportal des ZIH eingereicht werden: <https://hpcprojekte.zih.tu-dresden.de/da/> (Kontakt: Michael Kluge, ZIH)

Scientific Simulation and Storage Support Services

Mit dem neuen Projekt „bwHPC-S5: Scientific Simulation and Storage Support Services“ soll in Baden-Württemberg eine integrierte landesweite Rechen- und Dateninfrastruktur etabliert werden, deren Ziel die Steigerung von Effizienz und Effektivität durch erstklassige Unterstützung der Wissenschaftler/-innen und Nutzer/-innen ist. Durch die Berücksichtigung der Nutzersicht und der übergreifenden Organisation aller dafür relevanten Aktivitäten sowie der Öffentlichkeitsarbeit soll für alle Dienste Unterstützung mit den gleichen Strukturen und Informationsmedien angeboten werden. Die Basis dafür bilden neben dem etablierten föderativen Betrieb der HPC-Infrastruktur der Aufbau der BaWü-Datenföderation und die übergreifenden Basisdienste und Querschnittsaufgaben. Gemeinsame Innovationsaktivitäten zur Untersuchung neuer Hardware, Systemsoftware oder anderen Fragestellungen nutzen die bestehende enge Kooperation, um den schnellen Entwicklungen in diesem Umfeld effizient zu begegnen. Das Projekt wird durch das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg

gefördert. Das SCC bringt seine langjährigen Erfahrungen und Kompetenzen als HPC-Betreiber und im Umgang mit großen und komplexen wissenschaftlichen Daten ein. Die Gesamtverantwortung für das Vorgängerprojekt bwHPC-C5 und den aktuell gestarteten Nachfolger bwHPC-S5 liegt beim SCC sowie der Universität Ulm. Weitere Informationen: <https://www.bwhpc-c5.de/> (Kontakt: Robert Barthel, KIT)

Hochleistungsrechnen für alternative Energien

Wissenschaftler/-innen der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) werden im Rahmen des EU-geförderten „Energy oriented Centre of Excellence (EoCoE) for computing applications“ erforschen, wie Supercomputern bei der Erforschung und Entwicklung der zukünftigen weltweiten Energieversorgung vermehrt und erweitert eingesetzt werden können. In der zweiten Förderphase des EoCoE soll dazu untersucht werden, wie sich physikalische Systeme in der Energieforschung – Photovoltaik und Geothermie, Windparks oder die Plasmaphysik für die mögliche Nutzung der Fusionsenergie – noch besser und effizienter auf dem Computer nachbilden lassen. Die Arbeitsgruppen von Professor Rüde (FAU/Informatik) und Professor Wellein (RRZE/Informatik) werden dazu beitragen, komplexe parallele Simulationsprogramme hinsichtlich ihrer Genauigkeit, Parallelität und Hardwareeffizienz zu analysieren und zu optimieren. Damit ergänzen sie zielgerichtet die exzellenten fachlichen Arbeiten der ersten Projektphase des EoCoE. Die Projektpartner sind das Maison de la Simulation (CEA, Frankreich) als Koordinator sowie weitere Institute aus acht Ländern. Weitere Informationen: <https://www.ecoe.eu>.

Skalierbare Algorithmen für Erdsystemmodelle

Die zweite Phase des Projektes ESCAPE wird ab 1. Oktober 2018 für drei Jahre im europäischen Horizon-2020-Programm „Transition to Exascale Computing“ gefördert. ESCAPE steht für „Energy-efficient SCalable Algorithms for weather and climate Prediction at Exascale“. Das Nachfolgerprojekt ESCAPE-2 soll hochskalierende und energieeffiziente Methoden für Wettervorhersage- und Klimamodelle entwickeln. Hierbei geht es sowohl um bestehende als auch um neue innovative algorithmische Konzepte und geeignete Weiterentwicklungen der Programmiermodelle, um mit der zunehmenden Parallelität und Komplexität von HPC-Systemen im Exascale-Bereich produktiv umgehen zu können. Das DKRZ ist unter anderem gemeinsam mit der Firma BULL federführend bei der Erstellung einer Benchmarksuite mit einer für Erdsystemmodelle repräsentativen Performance-Charakteristik. Zur Einschätzung der Vorhersa-

geunsicherheit werden zusätzlich Werkzeuge aus anderen Disziplinen eingesetzt. Unter Leitung des European Centre for Medium-Range Weather Forecasts kooperieren für ESCAPE zwölf europäische Partner, darunter als einer von zwei deutschen das DKRZ. Weitere Informationen: https://cordis.europa.eu/project/rcn/215821_de.html (Kontakt: Jörg Behrens, DKRZ)

Vom SuperMUC ins Museum

Ein Team um Professor Hans-Peter Bunge, Inhaber des Lehrstuhls für Geophysik der LMU München, hat die Konvektion im Erdinnern und ihre Auswirkungen auf die Erdoberfläche auf dem SuperMUC des LRZ simuliert und im dortigen Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung V2C visualisiert. Dieses Modell wurde nun als 3D-Druck angefertigt und kann im American Museum of Natural History in New York, einem der größten Naturkundemuseen der Welt, in der Ausstellung „Hall of Planet Earth“ besichtigt werden. Weitere Informationen: https://www.uni-muenchen.de/forschung/news/2018/bunge_amnh.html (Kontakt: Ludger Palm, LRZ@GCS)

BMW-Ausschreibung: Smarte Datenwirtschaft

Die Verwertung von Daten ist ein bedeutender Wirtschaftsfaktor. Neben den Möglichkeiten der Datennutzung für datenproduktzentrierte Geschäftsmodelle und innovative Dienstleistungen sind die Anforderungen an Datensicherheit und Datensouveränität eine große Herausforderung. Ziel des neuen Technologieprogramms „Smarte Datenwirtschaft“ des BMWi ist es, Daten wirtschaftlich intelligent zu nutzen, sie sicher und rechtskonform zu verwenden und als eigenständiges Wirtschaftsgut zu behandeln. Im Rahmen der Förderung sollen dazu Pilotanwendungen prototypisch entwickelt und erprobt werden. Gesucht werden Lösungen wie Datenprodukte und -systeme, daraus abgeleitete Datendienste und datenbasierte Geschäftsmodelle. Der aktuelle Technologiewettbewerb mit dem Ziel der Projektförderung durchläuft sechs Phasen. Termine und weitere Informationen: https://www.digitale-technologien.de/DT/Redaktion/DE/Downloads/Publikation/Smarte_Datenwirtschaft_Bekanntmachung.pdf?

Achte HPC-Status-Konferenz der Gauß-Allianz

Die diesjährige HPC-Status-Konferenz der Gauß-Allianz findet am 8. und 9. Oktober am Regionalen Rechenzentrum Erlangen (RRZE) statt. Die Konferenz bietet Forschenden eine Plattform zum interdisziplinären Austausch über aktuelle Forschungsaktivitäten und Fragestellungen im Bereich des HPC in Deutschland. Eine Besonderheit dieser Veranstaltung liegt im themenübergreifenden Austausch der verschiedenen Disziplinen. Dieses Jahr werden durch BMBF und DFG geförderte HPC-Projekte ihre Forschungsgebiete mit aktuellen Ergebnissen präsentieren und zur Diskussion stellen. Es werden Präsentationen in den Gebieten „Anwendungsorientierte HPC-Software für Wissenschaft und Wirtschaft“, „Grundlagenorientierte

Forschung für HPC-Software“ und „Performance Engineering für wissenschaftliche Software“ erwartet. Die Veranstaltung richtet sich an alle Nutzergruppen sowie Interessierte, die Hoch- und Höchstleistungsrechnen einsetzen wollen. Die Anmeldung ist bis 15. September offen. Weitere Informationen: <https://eveeno.com/hpc-status-konferenz-2018> (Kontakt: Gerhard Wellein, RRZE)

Summer School CP2K in Paderborn

Vom 27. bis 29. August fand am Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) eine Sommerschule zum Thema „Computational Spectroscopy“ statt. Die knapp 50 Teilnehmer/-innen setzten sich aus (Post-)Doktoranden/-innen, etablierten Wissenschaftler/-innen sowie Lehrenden zusammen. Nach einer Einführung in die ab-initio-Molekulardynamikmethode, wurden in Fachvorträgen die theoretischen Grundlagen der computergestützten Spektroskopie vermittelt und anschließend in Laborübungen auf dem PC²-Supercomputer OCuLUS praktisch angewendet. Am 2. Tag fand ein Treffen der Entwickler statt, um die Zukunft des Programmpakets CP2K zu diskutieren. Insbesondere ging es um neue linear-skalierende Algorithmen sowie Möglichkeiten zur weiteren massiven Parallelisierung und Hardwarebeschleunigung mit Hilfe von FPGAs, die im OCuLUS-Nachfolgesystem Noctua verstärkt eingesetzt werden. Weitere Informationen: <https://pc2.uni-paderborn.de/teaching/trainings/cp2k-tutorial/> (Kontakt: Thomas D. Kühne, Universität Paderborn)

Veranstaltungen

- 17.-18.09.2018: [12th International Parallel Tools Workshop](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 17.-21.09.2018: [Advanced Fortran Topics](#), LRZ@GCS, Garching
- 18.-19.09.2018: [Extreme Data Workshop](#), JSC@GCS, Jülich
- 18.09.-10.12.2018: [Improving Software Performance - Parallel Programming](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 19.09.2018: [Advanced Deep Learning Workshop for Multi-GPU](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 20.-21.09.2018: [Training for Maxeler Dataflow Architectures](#), JSC@GCS, Jülich
- 04.-05.10.2018: [High Performance Computing in Science and Engineering](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 09.-11.10.2018: HPC in Baden-Württemberg, Kursreihe ([introductory](#), [intermediate](#), [advanced](#)), SCC/KIT, Karlsruhe
- 25.-26.10.2018: [Scientific Visualization](#), HLRS@GCS, Stuttgart

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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