

GCS-Supercomputer für COVID-19-Forschung

Für wissenschaftliche Vorhaben zur raschen Erforschung des COVID-19-Virus stellt das GCS seit dem 16. März Rechenkapazitäten der drei GCS-Supercomputer am HLRS, JSC und LRZ zur Verfügung. Forschende, die sich der Prävention, Eindämmung oder Heilung im Zusammenhang mit der Corona-Pandemie widmen, erhalten bevorzugten Zugang zu den GCS-Höchstleistungsrechnern sowie umfassende Unterstützung durch die HPC-Experten vor Ort. Alle Rechenzeitanfragen zu diesem Thema werden priorisiert bearbeitet. Unterstützt werden Forschungsvorhaben mit unterschiedlichen Zielen: von der Erforschung des Virus für eine rasche Entwicklung geeigneter Impfstoffe und Therapiemaßnahmen über epidemiologische Forschung zu Modellen und Prognosen zur Krankheitsausbreitung bis hin zur Identifizierung und Ausarbeitung von Maßnahmen zur effektiven Eindämmung der Pandemie. Interessierte Wissenschaftler/innen sind aufgerufen, sich an die GCS-Geschäftsführung zu wenden oder an die Leiter der drei GCS-HPC-Zentren. Weitere Informationen: gauss-centre.eu/news/newsflashes/article/gcs-centres-to-help-covid-19-researchers-access-hpc-resources/ (Kontakte: [Claus-Axel Müller](mailto:Claus-Axel.Mueller@GCS), GCS; [Michael Resch](mailto:Michael.Resch@HLRS), HLRS@GCS und [Bastian Koller](mailto:Bastian.Koller@HLRS), HLRS@GCS; [Thomas Lippert](mailto:Thomas.Lippert@JSC), JSC@GCS; [Dieter Kranzmüller](mailto:Dieter.Kranzmueller@LRZ), LRZ@GCS)

Mehr Coolness für Supercomputer

Seit 2011 setzt das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) auf warmes Wasser, um seine Supercomputer zu kühlen. Die dabei entstehende Abwärme heizt zumindest im Winter die Flure und Büros, könnte aber mit Hilfe von speziellen Geräten auch dabei helfen, Speichersysteme, Netzwerkkomponenten und weitere Technik, durch die kein Wasser fließen kann und darf, mit kalter Luft zu kühlen: Im März startete daher das Forschungsprojekt „ArKtIK – Adsorptionskältetechnologie für Informationstechnologiekühlung“, das für 2,5 Jahre durch das BMBF finanziert wird. Partner im Vorhaben sind der Rechnerhersteller Megaware, der Betreiber von Rechenzentren Cloud&Heat sowie Invenso, Spezialist für Adsorbertechnik. Ziel von ArKtIK wird sein, Adsorbertechnik an niedrigere Temperaturen anzupassen. Die Kältemaschinen arbeiten am effizientesten bei über 70 Grad Celsius, im Rechenzentrum steigt die Temperatur in der Regel nicht über 60 Grad. Außerdem sollen die Geräte einfacher mit Computern kombiniert werden können, denn Adsorber arbeiten mit

drei Wasserkreisläufen, die verbunden werden müssen. Dafür muss bestehende Technik angepasst und weiterentwickelt werden. (Kontakt: [Michael Ott](mailto:Michael.Ott@LRZ), LRZ@GCS)

Neuer Hochleistungsrechner in Ulm

Die Universität Ulm hat Anfang März einen neuen Supercomputer eingeweiht. Mit 33.696 Rechnerkernen und einer theoretischen Leistungsfähigkeit von 2 PetaFlop/s gehört das nach dem Chemiker Justus von Liebig benannte HPC-System JUSTUS 2 zu den 400 leistungsstärksten Supercomputern weltweit. Durch den Einsatz neuester Technologien konnte der auf die Rechenleistung bezogene Energiebedarf des von den Firmen NEC und Intel gelieferten Systems gegenüber dem seines Vorgängers deutlich verringert werden. Die Investition von 4,4 Mio. Euro wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), dem Land Baden-Württemberg sowie den Universitäten Ulm, Stuttgart und Freiburg finanziert und steht Forschenden aus ganz Baden-Württemberg – insbesondere für die Forschungsbereiche theoretische Chemie und Quantenwissenschaften – zur Verfügung. Weitere Informationen: uni-ulm.de/uni-aktuell/justus-2 (Kontakt: [Stefan Wesner](mailto:Stefan.Wesner@uni-ulm.de), Universität Ulm/kiz)

KI-Inkubator-Labore in der Prozessindustrie

Als drittgrößte Industriebranche Deutschlands ist die Prozessindustrie Impulsgeber für viele Wirtschaftszweige und steht mit ihren Produkten meist am Anfang der Wertschöpfungskette. Immer kürzere Produktlebenszyklen und neue Anforderungen an Nachhaltigkeit bilden ein Spannungsfeld, in dem die etablierten Engineering-Methoden an ihre Grenzen stoßen und die Anreicherung und Ergänzung mit Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) sinnvoll erscheint. Seit April 2020 widmen sich 20 Industrie- und Wissenschaftseinrichtungen dieser Herausforderung auf der vom BMWi geförderten Plattform KEEN. Ziel von KEEN ist es auf breiter Basis den wirtschaftlichen und gesellschaftlichen Mehrwert von KI-Technologien und -Methoden herauszuarbeiten und in der Prozessindustrie einzuführen. Dies erfolgt in drei Säulen: 1) Modellierung von Prozessen, Produkteigenschaften und Anlagen, 2) Engineering komplexer Systeme und 3) selbstoptimierende Anlagen. Koordiniert wird KEEN von Prof. Leon Urbas, Professur für Prozessleittechnik & Arbeitsgruppe Systemverfahrenstechnik der TU Dresden (TUD). Das ZIH der TUD unterstützt als Rechenzent-

rumspartner sowie im Rahmen des KI-Kompetenzzentrums ScaDS.AI. Weitere Informationen: [keen-plattform.de/](https://www.keen-plattform.de/) (Kontakt: [Leon Urbas](mailto:Leon.Urbas@tud.de), TUD)

HLRS erhält EMAS-Zertifizierung

Als erstes Tier-0/1-Rechenzentrum hat das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) die Zertifizierung gemäß EMAS (Eco-Management and Audit Scheme) erworben. Das auch als Umwelt-Audit bekannte EMAS wurde von der Europäischen Union entwickelt und ist ein Gemeinschaftssystem aus Umweltmanagement und Umweltbetriebsprüfung. Für das HLRS bedeutet diese Auszeichnung, sich zu noch umfangreicheren Nachhaltigkeitsmaßnahmen zu verpflichten, als dies im Rahmen der bereits im November 2019 erworbenen ISO-Zertifizierungen 14001 und 50001 definiert wurde. Für EMAS-Teilnehmende besteht die Pflicht, jährlich eine aktualisierte Umwelterklärung, in der über die direkten oder indirekten Auswirkungen des Unternehmens auf die Umwelt, seine Umweltleistung und seine Umweltziele berichtet wird, zu veröffentlichen. Die Umwelterklärung wurde nun auf der Website des HLRS publiziert: [hlrs.de/de/about-us/media-publications/environmental-statement](https://www.hlrs.de/de/about-us/media-publications/environmental-statement) (Kontakt: [Marcel Brodbeck](mailto:Marcel.Brodbeck@hlrs.de), GCS@HLRS)

Ausschreibung zur Rechenzeitvergabe

Für die aktuelle 21. Ausschreibung zur Rechenzeitvergabe in der europäischen PRACE-Forschungsinfrastruktur kann noch bis zum 28. April, 10:00 Uhr, der Zugang zu den Systemen beantragt werden. Der PRACE-Projekt-Zugang umfasst in der aktuellen Ausschreibung neun Systeme und bietet mehr GPUs als je zuvor. Unter den verfügbaren Systemen befinden sich die drei deutschen Systeme des GCS HAWK (HLRS), JUWELS-Cluster und -Booster (JSC) sowie SuperMUC-NG (LRZ). Weitere Informationen zu allen Systemen sowie technische Richtlinien für die Bewerbung und die Vorlage zu Projektumfang und -plan: prace-ri.eu/21st-call-for-proposals-press-release/

Online-Kursangebote von PRACE: MOOCs

Seit knapp drei Jahren werden innerhalb des europäischen PRACE-Projekts „offene Massen-Online-Kurse“ – so genannte MOOCs – entwickelt und über die Plattform Futurelearn angeboten. Dabei handelt es sich um Online-Kurse zu Themen aus dem Bereich Supercomputing und Datenwissenschaften, die weltweit ohne Begrenzung der Teilnehmerzahl kostenfrei zugänglich sind. Lediglich für zusätzliche Dienste, wie abschließende Prüfungsaufgaben und Ausstellung von Teilnahmezertifikaten werden Gebühren erhoben. Neben aufgezeichneten Videosequenzen werden bei MOOCs auch Übungen, Diskussionsforen und Quizfragen für die Lernenden zur Verfügung gestellt. Die meisten PRACE-MOOCs sind nur für einen bestimmten Zeitraum online zugänglich. Im April starten zwei neue Online-Kurse: das vom HLRS, ASTRON und

SURFsara entwickelte MOOC „A short introduction to MPI one-sided communication“ ab 20. April und der von den finnischen PRACE-Partnern am CSC konzipierte Kurs „Python in High Performance Computing“ ab 27. April. Außerdem sind derzeit noch die MOOCs „Managing Big Data with R and Hadoop“ und „Defensive Programming and Debugging“ verfügbar. Weitere Informationen zu PRACE-MOOCs: www.futurelearn.com/partners/prace. Wegen der aktuellen Kontaktbeschränkungen werden einige normale Kurse der PRACE Training Centres, zu denen die drei GCS-Zentren gehören, ebenfalls als online-Version – meist als Videokonferenz – angeboten. Weitere Informationen zu PRACE-Kursen: events.prace-ri.eu/category/2/.

Ada Lovelace Award für SuperMUC-NG-Nutzerin

Durch die Kombination verschiedener numerischer Modelle konnte Dr. Alice-Agnes Gabriel mit ihrem Team am SuperMUC-NG des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) ausschlaggebende Erkenntnisse zum Tsunami-Rätsel von Palu/Indonesien gewinnen. Dafür und für weitere rechen-gestützte Erdbebenszenarien wird die Geophysikerin, die als akademische Rätin an der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) lehrt und forscht, mit dem PRACE Ada Lovelace Award ausgezeichnet. Laut Jury tragen die verwendeten numerischen Simulationen in Verbindung mit experimentellen Beobachtungen dazu bei, das physikalische Verständnis in Bezug auf Erdbeben zu verbessern. Das mittel- bis langfristige Ziel ist es, Menschen besser vor den Folgen der Erdbeben zu schützen. Weitere Informationen: prace-ri.eu/dr-alice-agnes-gabriel-wins-2020-prace-ada-lovelace-award-for-hpc/ (Kontakt: presse@lrz.de, LRZ@GCS)

Veranstaltungen (vorbehaltlich aktueller Änderungen aufgrund COVID-19)

- 11.-15.05.2020: [35th VI-HPS Tuning Workshop](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 18.-19.05.2020: [Introduction to the programming and usage of the supercomputing resources at Jülich](#), JSC@GCS, Jülich
- 25.-29.05.2020: [HPC Tunathon 2020](#), JSC@GCS, Jülich
- 08.-10.06.2020: [HPC code optimisation workshop](#), LRZ@GCS, Garching
- 16.-17.06.2020: [Cluster Workshop](#), HLRS@GCS, Stuttgart
- 18.-19.06.2020: [Efficient Parallel Programming with GASPI](#), HLRS@GCS, Stuttgart

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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