

Gauß-Allianz-Zentren auf der SC20

Die Supercomputing Conference (SC20) findet vom 9. bis 19. November als virtuelle Konferenz statt. Diese größte und wichtigste internationale Plattform für HPC hält ein umfassendes Programm zu den neuesten Technologien, Trends und Innovationen bereit. Seit vielen Jahren bietet die SC mit ihrem Programm und einem Messebereich unzählige Austauschmöglichkeiten zu den Themen HPC, Networking, Speicherung und Analyse – von Software- und Hardware-Entwicklungen bis hin zu Anwendungen und Forschung. Die Gauß-Allianz-Mitglieder nutzen auch das diesjährige Format, um sich zu informieren und vorzustellen:

- Das LRZ richtet das Augenmerk auf die Future Computing Group, die die bayerische Hightech-Agenda umsetzt. Die Aktivitäten der Gruppe konzentrieren sich auf die Bewertung neu entstehender Architekturen und Technologien der Exascale-Klasse, die Entwicklung hochskalierbarer Anwendungen des maschinellen Lernens und der künstlichen Intelligenz sowie die Systemintegration der Quantenbeschleunigung mit Supercomputing-Systemen. Zusätzlich gibt das LRZ via Mozilla Hubs virtuelle Einblicke in Projekte wie „Virtual Human“.
- Die TU Darmstadt stellt fünf Projekte vor, die auf dem Lichtenberg-Rechner durchgeführt wurden. Inhaltlich beschäftigen sie sich mit der automatischen Identifikation, Extraktion und Orchestrierung rechenintensiver Kernels mittels einer Multitier-Sprache, mit dem Auffinden typbezogener Fehler in MPI-Anwendungen im Bereich algorithmisches Differenzieren und mit Laufzeitanalysen von Programmen mit exponentiellem Laufzeitverhalten, darüber hinaus mit Leistungsmodellierung räumlich divergierender Performanz sowie der Verbesserung der Optimierungssequenz des Compilers LLVM durch Reinforcement-Learning.
- Das RRZE präsentiert Ergebnisse zur Performancemodellierung für den neuen Fujitsu-A64FX-Prozessor auf dem PMBS-Workshop, wo der Beitrag den „Best Late-Breaking Paper Award“ errang. Außerdem konnte das populäre Ganztagestutorial „Node-Level Performance Engineering“ zum neunten Mal in Folge platziert werden.
- Das ZIH präsentiert in einem virtuellen Messestand vom 17. bis 19. November seine Ergebnisse und Aktivitäten in den Bereichen Performanceanalyse, Systemmonitoring, Machine Learning sowie Künstliche Intelligenz (booth.zih.tu-dresden.de/). Die SC-Teilnehmenden können hier direkt mit dem ZIH-Team in Kontakt treten. Darüber hinaus beteiligt sich das ZIH an verschiedenen wissenschaftlichen Veranstaltungen. Weitere Informationen: gauss-allianz.de/de/article/sc20.

JSC am Exzellenzzentrum für Verbrennung beteiligt

Das „Center of Excellence in Combustion (CoEC)“ ist ein von der EU gefördertes Projekt, das am 1. Oktober mit einem Gesamtbudget von rund 5,6 Mio. Euro startete. Es vereint elf europäische Partner mit Expertise in der numerischen Simulation der Verbrennung mit dem Ziel, eine dem Industriesektor zugängliche Hochleistungssoftware für den Entwurf innovativer Verbrennungstechnologien zu entwickeln. Die Simulation der turbulenten Verbrennung in echten Anlagen, wie Motoren und Gasturbinen, ist rechnerisch äußerst anspruchsvoll und gehört stets zu der Gruppe der Anwendungen, die einen großen Teil der verfügbaren Rechenzeit auf Supercomputern nutzen können. Das Exzellenzzentrum will den Übergang der europäischen Verbrennungscodes zum Exascale-Computing fördern und neue Durchbrüche auf dem Weg zur Dekarbonisierung ermöglichen. Das Projekt gliedert sich in vier Hauptaktivitäten: Recheneffizienz, Modellierung, Datenverarbeitung und Zukunftstechnologien. Das JSC ist für das Arbeitspaket „Datenverarbeitung und -analyse“ verantwortlich. Es widmet sich darin den Herausforderungen und Möglichkeiten, die sich aus der zunehmenden Menge der in den Simulationen verfügbaren Daten ergeben. (Kontakt: [Jens Henrik Göbber](mailto:Jens.Henrik.Göbber@GCS), JSC@GCS)

Nationale Forschungsdateninfrastruktur für Katalyse

Das HLRS ist Mitglied des NFDI-Konsortiums NFDI4Cat, das mit dem Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur für katalysebezogene Wissenschaften beauftragt wurde. Ziel des Projektes, das unter der Leitung der DECHEMA (Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.) steht, ist die Entwicklung eines Infrastruktur-, Software- und insbesondere Datenmanagementstandards für die nächste Generation der chemisch-technischen Forschung. Als Mitglied der NFDI4Cat-Koordinierungsgruppe wird das HLRS ein dediziertes Repository erstellen und hosten sowie ein Portal für den Austausch und den Zugriff auf an verteilten Orten gespeicherten Daten bereitstellen. Zudem übernimmt das HLRS eine tragende Rolle bei der Entwicklung standardisierter Metadaten und Ontologien für die Katalyseforschung, wodurch die Kompatibilität unterschiedlicher Datensätze sichergestellt, deren Verwendbarkeit verbessert und ihre potenziellen Auswirkungen auf den wissenschaftlichen Fortschritt verstärkt werden soll. Das Vorhaben wird vom Bund und den Ländern im Rahmen der NFDI-Initiative über fünf Jahre mit 10 Mio. Euro gefördert. Weitere Informationen: hlrs.de/news/detail-view/2020-10-09/ (Kontakt: [Björn Schembera](mailto:Björn.Schembera@HLRS@GCS), HLRS@GCS)

Neues HLRS-Projekt: Vertrauen in Informationen

Forschungsergebnisse sind nicht nur Gegenstand öffentlicher Kontroversen – sie werden im Rahmen von Desinformationskampagnen teilweise auch untergraben. Die aktuelle Debatte über die Ausbreitung des Corona-Virus unterstreicht diese Problematik. Vertrauen und Misstrauen in Informationen spielen hierbei eine zentrale Rolle, denn in Informationsgesellschaften müssen sich Individuen mit zahlreichen Themen auseinandersetzen, die nur wenige aus eigener Erfahrung kennen und bewerten können (Ursachen des Klimawandels, Dynamik einer Pandemie, Transformation von Energiemärkten usw.). Blindes Vertrauen schwächt aufgeklärte und demokratische Prozesse dabei genau so wie grundloses Misstrauen. Das neue Forschungsprojekt des HLRS „Vertrauen in Informationen – Bewertungsstrategien der Glaubwürdigkeit computerbasierter Informationen, Modelle und Methoden“ wird dieses Spannungsfeld anhand praktischer Probleme in sechs Teilprojekten untersuchen, die von Deep Fakes und KI-Methoden zur Bekämpfung von Desinformation bis zu Vertrauen in computerunterstützte Methoden in der Medizin, Kriminologie und Stadtplanung reichen. Das Projekt wird vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst (MWK) in Baden-Württemberg gefördert. Weitere Informationen: hlrs.de/news/detail-view/2020-10-15/ (Kontakt: [Andreas Kaminski](mailto:Andreas.Kaminski@hlrs.de), HLRS@GCS)

Blauer Engel für das HLRS

Das HLRS hat für den nachhaltigen Betrieb seiner Einrichtung das Umweltzeichen „Blauer Engel“ erhalten. Diese vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit vergebene Auszeichnung ist das jüngste von diversen Zertifikaten für Nachhaltigkeit und ökologische Verantwortung, die das HLRS im Laufe eines Jahres erworben hat. Die Ministerin des MWK in Baden-Württemberg, Theresia Bauer, gratulierte dem HLRS zu diesem Erfolg und lobte dabei die Strategie des Höchstleistungsrechenzentrums im Hinblick auf Nachhaltigkeit, Klimaschutz und Energieeffizienz. In bewundernswerter Weise setzen sich die Mitarbeiter/innen am Höchstleistungsrechenzentrum für Nachhaltigkeit, Klimaschutz und Energieeffizienz ein, auch beim Betrieb der Supercomputer. Die umfangreichen Nachhaltigkeitsmaßnahmen am HLRS wurden im Rahmen des Projekts „Nachhaltigkeit in HPC-Zentren“ durchgeführt, das vom baden-württembergischen MWK unterstützt wurde. Weitere Informationen: hlrs.de/de/whats-new/news/detail-view/2020-10-12-1/ (Kontakt: [Norbert Conrad](mailto:Norbert.Conrad@hlrs.de), HLRS@GCS)

Wissenschaftlicher GPU-Programmier-Hackathon

Vom 21. bis 30. September organisierte das Schweizer Supercomputing-Zentrum CSCS den virtuellen GPU-Programmier-Hackathon „Eurohack 2020“. Immer mehr Supercomputer – so auch der „Piz Daint“ am CSCS – basieren auf einer HPC-Architektur mit Grafikprozessoren

(GPUs) als Beschleuniger, an die die Modellcodes angepasst werden müssen. Neun Teams, hauptsächlich aus der Schweiz, Deutschland und Schweden, nutzten den Hackathon, um mit Mentor/innen von CSCS und NVIDIA ihre Anwendungen für GPUs zu optimieren. Das Spektrum reichte von Klimamodellierung über Astrophysik bis hin zur Elektrophysiologie. Das DKRZ-Team portierte mit OpenACC erfolgreich einen wichtigen Teil des ICON-Ozean-Modellcodes, der effizient auf GPUs laufen kann. Mit den Erfahrungen sollen zukünftig weitere Portierungsarbeiten in Angriff genommen werden, so dass langfristig mit einem komplett angepassten ICON-Ozean-Modell auch gekoppelte Atmosphären-Ozean-Klimasimulationen auf GPUs laufen können. Weitere Informationen: dkrz.de/p/eurohack2020/ (Kontakt: [Claudia Frauen](mailto:Claudia.Frauen@dkrz.de), DKRZ)

LRZ beim #FutureTech4Climate-Hackathon

Vom 13. bis 15. November organisiert das Bayerische Staatsministerium für Digitales einen Hackathon an dem sich auch das LRZ beteiligt. Bei der #FutureTech4Climate Challenge werden Codes, Programme, Apps und andere technische Lösungen zur Verlangsamung des Klimawandels gesucht. Das LRZ engagiert sich dabei für Ideen zum Stromsparen beim Supercomputing und stellt z. B. Verbrauchsdaten von SuperMUC-NG zur Verfügung. Teilnehmende sollten Programmiersprachen kennen und erste Erfahrungen in der Auswertung von Big Data mitbringen. Die Preise des Hackathons werden am 19. November 2020 während des Bayerischen Digitalgipfels verliehen, an dem sich der Leiter des LRZ, Professor Dr. Dieter Kranzlmüller, bei einer Panel-Diskussion unter dem Motto „Think globally, go digital“ beteiligen wird. Der Schwerpunkt der Veranstaltung liegt auf dem ganzheitlichen Ansatz beim Betrieb eines energieeffizienten Rechenzentrums, den das LRZ bereits seit einem Jahrzehnt verfolgt. Die Anmeldung und weitere Informationen unter: code-bavaria.de/innovation-challenge (Kontakt: [Sabrina Schulte](mailto:Sabrina.Schulte@lrz.de), LRZ@GCS)

Veranstaltungen

- 02.-03.12.2020: [Molecular Modeling with Schrödinger-Suite Workshop](#), LRZ@GCS, online
- 02.-04.12.2020: [Node-level performance engineering](#), LRZ@GCS, online
- 07.-11.12.2020: [VI-HPS Tuning-Workshop](#), HKHLR & CSC Frankfurt, online
- 07.-11.12.2020: [Fortran for Scientific Computing](#), HLRS@GCS, online
- 07.-11.12.2020: [GPU programming with CUDA](#), JSC@GCS, online

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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