

HPC-Förderprogramm des BMBF

Am 27. April fand die durch das BMBF, die Gauß-Allianz und die Universität Göttingen durchgeführte HPC-Statuskonferenz statt. Auf der Konferenzseite (gauss-allianz.de/de/hpc-statuskonferenz-2021) sind die Präsentationen und Videos aus Wissenschaft, Wirtschaft und Politik, die ein breites Spektrum aktueller Themen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens adressieren, online verfügbar. Das vom BMBF auf der Konferenz angekündigte Förderprogramm für exzellente Forschung in den Bereichen Künstliche Intelligenz sowie datenintensives und effizientes Rechnen wurde am 7. Mai offiziell veröffentlicht. Das Programm „Hoch- und Höchstleistungsrechnen für das digitale Zeitalter – Forschung und Investitionen zum High-Performance-Computing“ umfasst bis 2024 über 300 Mio. Euro sowie zusätzliche Mittel aus dem Konjunkturpaket der Bundesregierung. Es soll u.a. dem Ausbau der Exascale-HPC-Infrastruktur in Deutschland dienen. Die bereitgestellten Bundesmittel werden durch Kofinanzierungen durch die Länder sowie die EU im Rahmen von EuroHPC ergänzt. Durch die Förderung wissenschaftlicher Exzellenz sowie von Wertschöpfungspotenzialen der Wirtschaft durch Rechenkapazitäten, Vernetzung und durch neue Technologien sollen die Voraussetzungen für nachhaltige und leistungsfähige Datentechnologien, -anwendungen und -infrastrukturen geschaffen werden und einen Beitrag zur digitalen und technologischen Souveränität leisten. Forschende aus Wissenschaft und Wirtschaft können sich voraussichtlich ab Sommer 2021 um Fördermittel aus dem Programm bewerben. Weitere Informationen: bmbf.de/de/supercomputing-852.html (Kontakt: [Jens Lukaschkowitz](mailto:Jens.Lukaschkowitz@gauss-allianz.de), GA)

Kick-off für das LRZ Quantum Integration Centre

Am 17. März eröffneten der Bayerische Ministerpräsident Dr. Markus Söder und Wissenschaftsminister Bernd Sibler das Quantum Integration Centre (QIC) des LRZ als Dreh- und Angelpunkt für Informationstechnologien der Zukunft. Mit dem QIC verfolgt das LRZ drei Ziele und leistet damit einen wichtigen Beitrag innerhalb des Munich Quantum Valley: Den Auf- und Ausbau von Services rund um das Quantencomputing für die Wissenschaft, die Integration von Quanten- und Supercomputing durch die Entwicklung von Hard- und Software sowie den Austausch mit der internationalen Quantencomputing-Community, um ein detailliertes Bild der Anforderungen der Nutzenden zu erhalten. Die Aus- und Weiterbildung von Computing-Experten und -Expertinnen bildet dabei die Basis aller Aktivitäten. Die ersten QIC-Kooperationspart-

ner des LRZ sind Atos und IQM Quantum Computers. Mit der Atos Quantum Learning Machine (Atos QLM) können Nutzende bereits jetzt ohne spezielle Quantencomputing-Hardware Algorithmen für das Quantencomputing entwickeln und erste Simulationen durchführen. Mit IQM arbeitet das LRZ in einem gemeinsamen BMBF-geförderten Projekt an der Integration von Super- und Quantencomputing. Weitere Informationen: lrz.de/presse/ereignisse/2021-03-17-LRZ-eroeffnet-Quantum-Integration-Centre/ (Kontakt: [LRZ Presse](mailto:LRZ.Presse@LRZ.GCS), LRZ@GCS)

Wechsel an der Spitze: HoreKa geht in den Pilotbetrieb

Das SCC hat den Pilotbetrieb des neuen „Hochleistungsrechners Karlsruhe“ – kurz HoreKa – aufgenommen. Mit 769 Rechenknoten, fast 60.000 CPU-Kernen, mehr als 220 Terabyte Hauptspeicher und 668 GPUs wird das System eine theoretische Spitzenleistung von mehr als 17 PetaFlop/s erreichen und damit voraussichtlich zu den zehn schnellsten Rechnern Europas gehören. Ein zentraler Faktor für die Auslegung des Systems waren die enormen Datenmengen, welche bei wissenschaftlichen Forschungsprojekten anfallen. Eine mehrstufige Datenhaltung soll zusätzlich die schnelle Weiterverarbeitung auf externen Speichersystemen garantieren. HoreKa wurde in den letzten Monaten neben dem ForHLR II aufgebaut und in Betrieb genommen. Erste Nutzende haben bereits Zugriff erhalten, um ihre Anwendungen anpassen und optimieren zu können. Ab dem 1. Juni soll HoreKa dann Wissenschaftler/innen aus ganz Deutschland zur Verfügung stehen. Rechenzeitanträge können bereits jetzt gestellt werden. Das Vorgängersystem ForHLR II wurde stufenweise zurückgebaut und Mitte April abgeschaltet. Weitere Informationen: nhr.kit.edu/userdocs/horeka/ (Kontakt: [Jennifer Buchmüller](mailto:Jennifer.Buchmüller@KIT), KIT)

Spende neuer Systeme für Forschung an COVID-19

Der Computerhardware-Hersteller AMD hat dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) zehn Serversysteme aus seinem Fond „COVID-19 High Performance Computing“ gespendet. Die im April gelieferten Systeme werden für die Forschung im Zusammenhang mit der Coronavirus-Pandemie sowie weiteren globalen Herausforderungen eingesetzt. Zuvor hatte das HLRS gemeinsam mit dem Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung (BiB) ein Berechnungsmodell für die Auslastung von Intensivstationen in Deutschland entwickelt, mit dem sich der Bedarf an Intensivbetten bis zu acht Wochen vorhersagen lässt. Auf der gespendeten Infrastruktur wird künftig ein täglicher Bericht über die Auslastung von Kranken-

häusern berechnet. Die Berechnungen könnten auch politische Entscheidungen, wann, wo und welche Maßnahmen notwendig sind, unterstützen. Die Serversysteme können zudem beispielsweise für das EU-geförderte Projekt HiDALGO und das vom Land Baden-Württemberg geförderte Projekt bwHPC-S5 genutzt werden. Die neuen AMD-Knotenpunkte werden in das HLRS-Cluster Vulcan integriert. Jeder der gespendeten Server enthält einen AMD-EPYC™-Prozessor und acht AMD-Instinct™-Beschleuniger, die für Anwendungen mit Maschinellem Lernen, Deep Learning und Künstlicher Intelligenz optimiert wurden. Das Serversystem mit 530 TeraFlop/s und 64-bit Gleitkomma-Leistung wurde von der Firma Penguin Computing gebaut. Weitere Informationen: hlrs.de/news/detail-view/2021-04-19/ (Kontakt: [Christopher Williams](mailto:Christopher.Williams@GCS), HLRS@GCS)

Lücken in der Physik mit Rechenpower schließen

Forschende in Deutschland haben Europas leistungsfähigste Supercomputer-Infrastruktur am Gauss Centre for Supercomputing (GCS) für neue und genauere Lattice Quantum Chromodynamics (QCD) Berechnungen von Myonen in einem Magnetfeld genutzt. Die Gruppe fand einen Wert zur Berechnung des Standardmodells für das Verhalten von Myonen, der von dem bisher angenommenen Wert abweicht. Der neue theoretische Wert stimmt mit den kürzlich veröffentlichten experimentellen Ergebnissen der „Muon g-2“-Kollaboration am Fermi National Accelerator Laboratory in den Vereinigten Staaten überein. Dies deutet darauf hin, dass keine Überarbeitung des Standardmodells notwendig ist. Die Berechnungen wurden in der Zeitschrift Nature veröffentlicht, die experimentellen Ergebnisse in Physical Review Letters. Das Team nutzte v.a. den Supercomputer JUWELS am JSC, führte daneben aber auch umfangreiche Berechnungen an den beiden anderen GCS-Standorten durch – auf Hawk am HLRS sowie SuperMUC-NG am LRZ. Sowohl die Experimental- als auch die theoretischen Physiker/innen sind sich einig, dass für die Bestätigung der Ergebnisse weitere Forschung notwendig ist. Eines ist jedoch klar: Die zur Verfügung gestellten GCS-Ressourcen waren für die notwendige Präzision dieser bahnbrechenden Ergebnisse unerlässlich. Weitere Informationen: gauss-centre.eu/news/research-highlights/article/german-national-supercomputing-centre-provides-computational-muscle-to-look-for-cracks-in-the-standa/ (Kontakt: [Eric Gedenk](mailto:Eric.Gedenk@GCS), GCS)

Jetzt online: CMIP6-Klimasimulationen

Informationen und animierte Visualisierungen der neuen Klimasimulationen für das Modellvergleichsprojekt CMIP6 (Coupled Model Intercomparison Project Phase 6) sind jetzt auf der DKRZ-Webseite verfügbar. Die umfangreichen Szenarienrechnungen wurden auf dem Supercomputer des DKRZ für den 6. Sachstandsbericht des Weltklimarats IPCC durchgeführt. Allein 2019 benö-

tigten Wissenschaftler/innen des Max-Planck-Instituts für Meteorologie (MPI-M), des Alfred-Wegener-Instituts (AWI) Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung, des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt, des Deutschen Wetterdienstes sowie des DKRZ für diese Simulationen 1,2 Mio. Knotenstunden Rechenzeit auf dem DKRZ-Supercomputer Mistral. Insgesamt wurden etwa 13.000 Modelljahre mit dem am MPI-M entwickelten Erdsystemmodell MPI-ESM-1.2 sowie dem am AWI entwickelten Klimamodell AWI-CM-1-1 simuliert. Die standardisierten Ergebnisdaten wurden über den ESGF-Datenknoten (Earth System Grid Federation) am DKRZ publiziert. Der CMIP6-Datenpool am DKRZ umfasste Ende April 2020 ungefähr 1,1 Petabyte an qualitätsgeprüften, primär publizierten und 2,1 Petabyte an replizierten Klimamodelldaten. Der Teil der Daten, die im Weltklimabericht des IPCC verwendet werden, wird für die langfristige Nachnutzung in ein Referenzdatenarchiv am DKRZ überführt. Weitere Informationen: dkrz.de/p/cmip6/ (Kontakt: [Michael Böttinger](mailto:Michael.Böttinger@DKRZ), DKRZ)

CASUS-Team testet Europas stärksten Supercomputer

Forschende des Center for Advanced Systems Understanding (CASUS) am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) gehören zu den ersten, die auf dem JSC-System JUWELS-Booster gerechnet haben. Gemeinsam mit ihren HZDR-Kolleg/innen vom Institut für Strahlenphysik konnten sie vor dem offiziellen Start die neue Rechnerarchitektur mit der von ihnen entwickelten Simulationssoftware PIconGPU testen. Der Code auf Basis der Programmbibliothek alpaka wurde vor allem für den Bereich der Plasma- und Laserphysik konzipiert und soll bei der Entwicklung von Teilchenbeschleunigern für die Strahlentherapie von Krebs oder in der Hochenergiephysik zum Einsatz kommen. Er läuft effizient auf unterschiedlichen Hardware-Typen, ohne dabei neu angepasst werden zu müssen. Damit ist PIconGPU mit Hilfe von alpaka für künftige Exascale-Computing-Anwendungen vorbereitet. Erste Leistungstests bescheinigten den auf JUWELS-Booster genutzten NVIDIA-A100-Grafikkarten eine auf 140% gestiegene Rechenleistung im Vergleich zu den GPUs vom Typ NVIDIA V100. Aktuell liegt der Supercomputer auf Platz 7 der 500 schnellsten Computersysteme der Welt und auf Platz 1 in Europa. Das CASUS- und HZDR-Team plant, mit JUWELS-Booster zukünftig digitale Zwillinge von Plasmabeschleunigern zu entwickeln. Mit diesen Zwillingen soll das Optimierungspotenzial der aktuell am HZDR betriebenen Plasmabeschleuniger ausgeschöpft werden. Weitere Informationen: casus.science/de-de/news/casus-news/dresden-team-at-juwels-booster (Kontakt: [Michael Bussmann](mailto:Michael.Bussmann@CASUS), CASUS und [Alexander Debus](mailto:Alexander.Debus@HZDR), HZDR)

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:
<https://hpc-calendar.gauss-allianz.de>