

## **TOP500**

Im Vergleich zu der im November 2020 erschienenen Liste der weltweit schnellsten Supercomputer gibt es in der aktuellen 57. Ausgabe (Juni 2021) der TOP500 unter den ersten zehn Plätzen nur wenig Veränderung. Weiterhin auf Platz 1 mit einer gemessenen Linpack-Leistung (Rmax) von 442 PetaFlop/s ist der japanische Supercomputer Fugaku. Der einzige Neuzugang unter den Top 10 ist das Perlmutter-System am NERSC des Lawrence Berkeley National Laboratory (USA). Das heterogene System mit A100-Beschleunigern von NVIDIA und AMD EPYC-CPU basiert auf der Shasta-Plattform von HPE Cray und erreichte mit einer Leistung von 64,6 PetaFlop/s (Rmax) den 5. Platz. Das schnellste europäische System ist weiterhin auf Platz 8 der am JSC – einem der drei GCS-Zentren – betriebene JUWELS Booster mit einer Gesamtleistung von 71 PetaFlop/s (Rpeak). Wie schon im Vorjahr führt China im Ranking in Bezug auf die Anzahl der Platzierungen mit insgesamt 188 Systemen. In Bezug auf die maximale Gesamtleistung liegen die 122 platzierten US-Systeme mit insgesamt 1.246 PetaFlop/s vorn. Insgesamt zählt die aktuelle TOP500-Liste 23 deutsche Systeme; 11 davon unter den ersten 100. Aus der Reihe der GA-Mitglieder haben es 15 Systeme in die Liste geschafft. Unter den Top 10 der Green500-Liste, die die Energieeffizienz der Systeme vergleicht, befinden sich die beiden am JSC betriebenen Systeme JUWELS Booster und JURECA Data Centric.

## **Neuer Atos-Supercomputer in Paderborn**

Die Universität Paderborn bekommt einen neuen Supercomputer. „Noctua 2“, so der Projektname der zweiten Ausbaustufe des 2018 installierten „Noctua“, wird von Atos gebaut und soll Ende des Jahres installiert werden. Der Rechner mit einem Gesamtfinanzierungsvolumen von mehr als 14 Mio. Euro wird als erstes System in das neue HPC-Rechenzentrum des Paderborn Center for Parallel Computing (PC<sup>2</sup>) einziehen. Der Forschungsbau befindet sich kurz vor der Fertigstellung. Der neue Supercomputer wird zur Hälfte durch das Land Nordrhein-Westfalen und den Bund im Forschungsbauten-Programm sowie über Investitionsmittel im Rahmen des Verbundes der Nationalen Hochleistungsrechenzentren (NHR) finanziert, in den die Universität Paderborn Anfang des Jahres aufgenommen wurde. Das neue System hat mehr als 140.000 Prozessorkerne und deckt ein breites Spektrum an Anwendungen ab – z. B. aufwendige atomistische Simulationen für die Physik, die Chemie und Maschinelles Lernen. Dank der freien Kühlung des Bull-

Sequana XH2000 ermöglicht es erhebliche Einsparungen im Energieverbrauch. Neben den AMD-Prozessoren und dem 6 Petabyte DDN-Lustre-Filesystem hat das System 128 A100 GPUs der Firma NVIDIA und bietet Platz für bis zu 100 FPGA-Karten. Weitere Informationen: [pc2.de/go/noctua2](https://pc2.de/go/noctua2) (Kontakt: Jens Simon, PC<sup>2</sup>)

## **KIT-Supercomputer auf Rang 14 in Europa**

Zum 1. Juni nahm das KIT als Nationales Hochleistungsrechenzentrum (NHR@KIT) den wissenschaftlichen Betrieb des neuen Hochleistungsrechners „HoreKa“ auf. In der aktuellen TOP500-Liste zählt das System zu den fünfzehn schnellsten Rechnern in Europa; im weltweiten Vergleich belegt es Rang 53. In Bezug auf die Energieeffizienz erreicht HoreKa im internationalen Ranking den 13. Platz. Das Hybridsystem bestehend aus einem auf Grafikprozessoren (GPUs) basierenden Rechenbeschleuniger und einer mit Standardprozessoren (CPUs) ausgestatteten Partition. Durch die GPUs der Firma NVIDIA wird eine extrem hohe Leistung garantiert, die etwa für bestimmte Rechenoperationen wie Gleichungssystemlöser oder Algorithmen für Anwendungen in der Künstlichen Intelligenz benötigt wird. Die neueste Generation der Intel-CPUs, die mit Beginn des HoreKa-Testbetriebs erst offiziell vorgestellt wurden, sind ebenfalls für bestimmte Operationen optimiert. HoreKa kombiniert die Stärken beider Architekturen geschickt, sodass ein Maximum an Leistungsfähigkeit erreicht wird. Insgesamt erreicht das System eine Spitzenleistung von 17 PetaFlop/s. Das ThinkSystem von Lenovo wurde durch die pro-com Datensysteme GmbH geliefert. Weitere Informationen: [kit.edu/kit/pi\\_2021\\_059\\_supercomputer-des-kit-einer-der-15-schnellsten-in-europa.php](https://kit.edu/kit/pi_2021_059_supercomputer-des-kit-einer-der-15-schnellsten-in-europa.php) (Kontakt: Jennifer Buchmüller, KIT)

## **Hamburg Climate Futures Outlook**

Der Exzellenzcluster Climate, Climatic Change, and Society (CLICCS) legt mit dem Hamburg Climate Futures Outlook 2021 eine neue Studie vor, die untersucht, inwieweit eine Klimazukunft mit Netto-Null-Emissionen bis 2050 möglich und plausibel ist. Es gibt viele mögliche Zukunftsszenarien, aber nicht alle sind auch plausibel. Sie entstehen aus einer Kombination sozialer und physikalischer Dynamiken. Zur Abschätzung der Plausibilität müssen daher Erkenntnisse aus mehreren Disziplinen berücksichtigt werden. Der erste Hamburg Climate Futures Outlook versucht erstmals systematisch zu bewerten, welche Szenarien plausibel sind. Wobei Szenarien als plausibel eingestuft werden, wenn sich nach derzeitigen wissenschaftlichen Erkenntnissen aus Physik und

Gesellschaftswissenschaften eine nennenswerte Wahrscheinlichkeit ableiten lässt, dass sie tatsächlich eintreten könnten. Fazit der Studie: Eine vollständige Dekarbonisierung bis 2050 ist derzeit nicht plausibel. Für dieses Ziel müsste der gesellschaftliche Wandel erheblich ehrgeiziger ausfallen. Der Exzellenzcluster CLICCS wird von der DFG gefördert. Er ist am Centrum für Erdsystemforschung und Nachhaltigkeit der Universität Hamburg angesiedelt und kooperiert mit elf Partnerinstituten, darunter dem DKRZ. Weitere Informationen: [dkrz.de/de/HHClimateFutureOutlook](https://dkrz.de/de/HHClimateFutureOutlook).

### Nachhaltige Digitalisierung in Baden-Württemberg

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) leitet das neue Projekt „Energie, Nachhaltigkeit, Ressourceneffizienz in IT und Rechenzentren“ (ENRICH), um Möglichkeiten für die Zukunft der Digitalisierung in Baden-Württemberg zu identifizieren und Rechenzentren nachhaltiger zu gestalten. Aktuelle Informationstechnologien werden ebenso untersucht, wie Ressourceneffizienz in Rechenzentren inklusive deren Nachhaltigkeitspotenzial. Rasche, innovationsgetriebene Entwicklungszyklen für Hardware und Anwendungen bei gleichzeitig zunehmender Komplexität der Technologien erhöhen den Anspruch von Maßnahmen zur nachhaltigen Verbesserung der Umweltleistung. So sollen auch Fragen wie die nachhaltige Beschaffung von Hardware, die Entwicklung von Energieeffizienzmaßnahmen – einschließlich Abwärmenutzung – untersucht werden. Für die Umsetzbarkeit der vorgeschlagenen Lösungen ist die Integration der Anwenderperspektive maßgeblich. ENRICH wird für zwei Jahre vom Ministerium für Umwelt, Klimaschutz und Energiewirtschaft des Landes Baden-Württemberg gefördert. Beteiligt sind Beschäftigte des Instituts für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung der Universität Stuttgart, der DIALOGIK gGmbH und der Universität Ulm sowie Hewlett Packard Enterprise. Das HLRS wird vorrangig die Lieferketten für IT-Hardware analysieren sowie den KI-Einsatz für höhere Energie- und Ressourceneffizienz und den Betrieb digitaler Infrastrukturen erforschen. Weitere Informationen: [hlrs.de/news/detail-view/2021-06-22/](https://hlrs.de/news/detail-view/2021-06-22/). (Kontakt: [Natalie Lewandowski, HLRS@GCS](mailto:Natalie.Lewandowski@HLRS@GCS))

### Supercomputing-Akademie für HPC/Simulation/AI

Die Supercomputing-Akademie des HLRS bietet berufsbegleitende HPC-Onlinekurse zur Weiterbildung und Zertifizierung als Anwender/in, Entwickler/in oder Administrator/in inklusive individueller Betreuung an. Angesprochen werden Fachkräfte aus dem naturwissenschaftlichen und technischen Bereich, die tiefere HPC- und Simulationskompetenzen erlernen wollen. Die Lerninhalte verteilen sich auf die Themengebiete Simulation, Aufbau und Betrieb von HPC, Paralleles Programmieren sowie Datenmanagement und Datenanalyse. In die inhaltliche Konzeption ist Fachexpertise aus dem Simulations- und

HPC-Anwendungsbereich der Industrie und Forschung eingeflossen. Die Kurse erstrecken sich über 3 bis 6 Wochen und werden von Expert/innen des HLRS geleitet. In wöchentlichen virtuellen Seminaren besteht exklusiv die Möglichkeit, dem Expertenteam konkrete Fragen zu stellen und sich mit anderen Teilnehmenden, beispielsweise aus der Industrie zu vernetzen. Weitere Informationen: [supercomputing-akademie.de/](https://supercomputing-akademie.de/) (Kontakt: [Alexander Hektor, HLRS@GCS](mailto:Alexander.Hektor@HLRS@GCS))

### Gut gerechnet, SuperMUC-NG

Vom 8. bis 10. Juni diskutierten Wissenschaftler/innen beim Status- und Results-Workshop des LRZ über Ergebnisse von SuperMUC-NG. Zeitweise loggten sich bis zu 160 Interessierte in die Veranstaltung ein. Seit dem Start 2019 rechneten die rund 311.000 Knoten knapp 30 Mrd. Stunden. Sie erledigten dabei in 840 Forschungsprojekten rund 195.000 Jobs, modellierten Turbulenzen, in Luft- und Wasserströmungen und sogar im Feuer. Besonders rechenintensiv sind Anwendungen aus der Physik und Thermodynamik, da hier besonders viele Daten erzeugt werden. So modellierte ein Team des Max-Planck-Instituts für Astrophysik aus einem Datenvolumen von 25 Terabyte die Materieverteilung im Universum über zwei Mrd. Lichtjahre hinweg, um das Werden von Galaxien zu rekonstruieren. Auch die Ingenieur-, Bio- oder Umweltwissenschaften sowie Pharmazie und Medizin setzen auf HPC. SuperMUC-NG simulierte z. B. die Auswirkungen von Erdbeben, den Einfluss von Verkehrsemissionen auf das Klima sowie den Blutfluss im menschlichen Körper. Die Forschungsgruppe CompBioMed visualisierte auf SuperMUC-NG, wie Blut durch die Adern im Unterarm gepumpt wird. Damit können Mediziner lernen und besser behandeln. 17 der 26 Vorträge finden sich bei Youtube: ([bit.ly/3yeUGgy](https://bit.ly/3yeUGgy)). Informationen zu weiteren Projekten, für die SuperMUC-NG rechnet, wurden im Berichtsband „HPC in Science and Engineering“ veröffentlicht: [bit.ly/364F5UZ](https://bit.ly/364F5UZ). (Kontakt: [Helmut Brüchle, LRZ@GCS](mailto:Helmut.Bruechle@LRZ@GCS))

### Veranstaltungen

- 09.-13.08.2021: [Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP](#), JSC@GCS, online
- 23.-26.08.2021: [Four-day course in parallel programming with MPI/OpenMP @ ETH](#), HLRS@GCS, online
- 15.09.2021: [Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows](#), LRZ@GCS, online
- 20.-23.09.2021: [HiPerCH 13](#), HKHLR, online
- 20.-24.09.2021: [CFD mit OpenFOAM®](#), HLRS@GCS, Stuttgart

### HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

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