

GCS auf der ISC18 .....	1
Supercomputer JUWELS geht in Jülich an den Start .....	2
19. GCS Call for Large-Scale Projects .....	2
Doppelerfolg beim Deutschen Rechenzentrumspreis für das LRZ .....	3
LRZ ist neues Mitglied im VI-HPS .....	3
EU-Kommissar Oettinger besucht das HLRS .....	4
Jülicher Forscher auf EU-Veranstaltung „Shaping Europe’s Digital Future“ .....	4
SuperMUC Status & Results Workshop, SuperMUC-Berichtsband 2018 .....	5
ERC-Grant für JSC-Wissenschaftler Martin Schultz .....	5
Ada Lovelace Award für LRZ-Nutzerin Xiaoxiang Zhu .....	6
Supercomputing-Akademie am HLRS gestartet .....	6
Girls Day 2018: Schülerinnen an den GCS-Zentren .....	7
HLRS-Jahresbericht 2017 verfügbar .....	7
Simulation in den Sozialwissenschaften: Kooperation zwischen HLRS und FAU .....	8

## GCS AUF DER ISC18



Auch in diesem Jahr beteiligt sich das GCS in vielfältiger Weise an der ISC, der internationalen Supercomputing-Konferenz und Ausstellung in Frankfurt/Main. Vertreter der drei GCS-Zentren HLRS (Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart), JSC (Jülich Supercomputing Centre) und LRZ (Leibniz-Rechenzentrum Garching/München) agieren als Tutoren, Sprecher, Moderatoren, und/oder anderweitig Beitragende an diversen Konferenzveranstaltungen. Insbesondere genannt sei die Session „[German HPC in Context](#)“ (Di., 12.30h, Raum „Panorama 2“), in dem der GCS-Vorstandsvorsitzende Prof. Michael M. Resch über den aktuellen Status und die neuesten Entwicklungen im Rahmen der vor einem Jahr von MinDir Prof. Lukas (BMBF) auf der ISC17 angekün-

Visit us at  
**Booth #B-1310**  
June, 24–28, 2018  
Frankfurt/Main, Germany

digten „Smart Scaling Strategie“ – Deutschland auf dem Weg zum Exascale-Computing – berichten wird. Eine weitere Besonderheit ist die Bekanntgabe des diesjährigen Gewinners des alljährlich vom GCS

ausgelobten Förderpreises „Gauss Award“ für das beste technische Paper der ISC18, und es wird mit Spannung verfolgt werden, wie sich die drei von GCS gesponserten deutschen [Studententeams der Universitäten Erlangen-Nürnberg, Hamburg und Heidelberg](#) behaupten werden, die mit neun weiteren internationalen Mannschaften im ISC18-Studentencluster-Wettbewerb antreten. – Wie in den letzten Jahren wird das GCS zudem mit einem gemeinsamen Messestand (B-1310) im Ausstellungsteil der Veranstaltung präsent sein. ([Link](#))

## SUPERCOMPUTER JUWELS GEHT IN JÜLICH AN DEN START

Am JSC geht in diesen Tagen ein neuer Höchstleistungsrechner an den Start. Der neue Rechner JUWELS (Jülich Wizard for European Leadership Science) ersetzt den bisherigen Supercomputer JUQUEEN, der nach einer Betriebszeit von sechs Jahren Ende Mai 2018 abgeschaltet wurde.

Der Aufbau von JUWELS erfolgt in zwei Phasen, denn der Rechner ist als modulares System konzipiert. Zuerst wird Anfang Juli 2018 das JUWELS-Cluster in Betrieb gehen, ein von der europäischen Firma Atos gemeinsam mit den Softwarespezialisten der deutschen Firma ParTec gelieferter Rechner mit ca. 2.500 Knoten, ca. 120.000 Kernen und einer maximalen Rechenleistung von 12 Petaflops pro Sekunde. Eine Besonderheit des Cluster-Moduls ist seine neuartige



Der neue Supercomputer JUWELS am JSC  
© FZJ / Ralf Uwe Limbach

Warmwasserkühlung, die es erlaubt, den Großteil der Abwärme ohne zusätzliche Kälteerzeuger direkt mit der Außenluft zu kühlen und dadurch Energie zu sparen. 2020 soll dann das Booster-Modul hinzukommen, das viele besonders energieeffiziente Rechenkern besitzen wird. Finanziert wird JUWELS

im Rahmen des Projektes SiVeGCS, welches zu gleichen Teilen durch Bundes- und Landesmittel getragen wird. 20% des JUWELS-Clusters (500 Knoten) wurden durch eine erfolgreich eingeworbene Helmholtz-Investition beschafft. Ein entsprechender Anteil der Rechenzeit wird ausschließlich Forschern im Bereich der Erdsystemmodellierung (ESM) als sogenannte ESM-Partition zur Verfügung stehen. ([Link](#))

## 19. GCS CALL FOR LARGE-SCALE PROJECTS

Insgesamt 1,06 Milliarden Kernstunden Rechenzeit genehmigte das GCS-Rechenzeitkommittee 17 wissenschaftlich anspruchsvollen Forschungsprojekten im Rahmen des 19. GCS Calls for Large-Scale Projects (Laufzeit: Mai 2018–April 2019). Mehr als die Hälfte dieses Kernstundenkontingents (580 Millionen) wird vom Cray XC-40-System Hazel Hen des HLRS bereitgestellt. Die Projekte betreffen zum Großteil das Gebiet der Ingenieurwissenschaften (Strömungsmechanik), einem Thema, welches das HLRS traditionell als eines seiner Schwerpunkte betrachtet. Die Bereiche Grundlagenforschung (3 Projekte), Biologie und Astrophysik komplementieren die für Hazel Hen genehmigten Anträge.

Vier Projekte aus dem 19. Call werden mit besonderem Augenmerk verfolgt werden, denn es werden die ersten Simulations-Großprojekte sein, die auf dem neuen JSC-Rechner JUWELS durchgeführt

werden. Da JUWELS offiziell Ende Juni in Betrieb genommen wird, verschiebt sich das Rechenzeitfenster für diese Projekte aus so unterschiedlichen Gebieten wie der Atom- und Nuklearphysik, kondensierten Materie, Grundlagenforschung und Ingenieurwissenschaften um zwei Monate.

Dem Garchinger HPC-System SuperMUC wurden insgesamt fünf Großprojekte zugewiesen. Während den LRZ-Nutzern noch bis zum Ende dieses Jahres die aktuelle SuperMUC-Installation zur Verfügung steht, laufen schon jetzt erste Bestrebungen, die Anwendungen auf den neuen Rechner SuperMUC-NG (Next-Generation) zu migrieren. Die größten SuperMUC-Allokationen aus dem 19. Call unterstützen Projekte aus den Lebens- und Ingenieurwissenschaften (beide 75 Millionen Kernstunden) und aus dem Bereich kondensierte Materie. ([Link](#))

## DOPPELERFOLG BEIM DEUTSCHEN RECHENZENTRUMSPREIS FÜR DAS LRZ

Das LRZ war beim diesjährigen Deutschen Rechenzentrumspreis doppelt erfolgreich: In der Kategorie „Datacenter Klimatisierung und Kühlung“ konnte das LRZ mit zwei Lösungen aus dem Bereich Wasserkühlung punkten und gemeinsam mit den Partnern Fahrenheit und MEGWARE die Plätze 1 und 2 für sich verbuchen. Das LRZ setzte sich damit in der mit insgesamt 51 Einreichungen meistumkämpften Kategorie durch.

Fahrenheit und MEGWARE haben für das LRZ Lösungen entwickelt, die die bestehenden Technologien ergänzen und weiterentwickeln und deutlich effizienter kühlen. Bei der Lösung von Fahrenheit handelt es sich um ein Adsorptionskühlsystem zur Nutzung der Rechnerabwärme. Dies wird z. B. beim künftigen nationalen Höchstleistungsrechner SuperMUC-NG



Dr. Herbert Huber (LRZ, rechts) bei der Übernahme der Auszeichnung.  
© Future Thinking Congress

(Next Generation) eingesetzt. Der von MEGWARE gelieferte CoolMUC-3 überzeugte mit seiner 100%-Warmwasserkühlung auch von Komponenten wie Switches oder Netzteilen. ([Link](#))

## LRZ IST NEUES MITGLIED IM VI-HPS

Seit April 2018 ist das LRZ offizielles Mitglied des Virtual Institute – High Productivity Supercomputing (VI-HPS). Seit seiner Gründung 2007 setzt sich das VI-HPS-Konsortium zum Ziel, Entwicklerinnen und Entwicklern von komplexen Simulationscodes Werkzeuge an die Hand zu geben, mit denen die Codequalität überprüft werden kann, um die Leistungsfähigkeit kontinuierlich zu steigern. Mit der Mitgliedschaft möchte das LRZ sein Engagement in dieser Community weiter erhöhen und seine

Expertise noch aktiver einbringen. Derzeit fokussieren sich die LRZ-Aktivitäten vorrangig auf das Tool “Callgrind”, das seit Kurzem am LRZ gepflegt und weiterentwickelt wird. Callgrind hilft insbesondere, Engpässe beim Zugriff auf Daten zu identifizieren und zu beseitigen. Die beliebten Workshops und Trainings in diesem Bereich, wie die Ausrichtung der VI-HPS-Tuning-Workshops, bietet das LRZ weiterhin an. ([Link](#))

## EU-KOMMISSAR OETTINGER BESUCHT DAS HLRS

Am 17. Mai besuchte der EU-Kommissar für Haushalt und Personal, Günther Oettinger, das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart. Kommissar Oettinger und der Direktor des HLRS, Prof. Michael M. Resch, besprachen die Notwendigkeit einer europäischen Strategie für Hoch- und Höchstleistungsrechnen. Ein weiteres wichtiges Gesprächsthema betraf das „Gemeinsame Unternehmen EuroHPC“ der EU und der Mitgliedsstaaten, das einerseits sicherstellen soll, allen europäischen Wissenschaftseinrichtungen Zugang zu Spitzensystemen und Hochleistungsrechnern zu verschaffen, und andererseits zum Ziel hat, innerhalb der nächsten fünf Jahre eine leistungsstarke gesamteuropäische IT-Infrastruktur aufzubauen. Kommissar Oettinger und Professor



EU-Kommissar Günther Oettinger (links) mit dem Direktor des HLRS, Prof. Dr.-Ing. Michael M. Resch (rechts). © HLRS

Resch stimmten darin überein, dass HPC zugänglich und produktiv für wissenschaftliche Anwendungen sowie industrielle Forschung bleiben muss.

## JÜLICHER FORSCHER AUF EU-VERANSTALTUNG „SHAPING EUROPE’S DIGITAL FUTURE“



Mariya Gabriel, EU-Kommissarin für digitale Wirtschaft und Gesellschaft (Mitte), Prof. Katrin Amunts (links) und Prof. Thomas Lippert (rechts), Quelle: <https://twitter.com/GabrielMariya/status/98707404928840089>

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich stellten auf der im April in Sofia stattgefundenen Veranstaltung „Shaping Europe’s Digital Future“ ihre Forschung auf den Gebieten der Neurowissenschaften und des Hochleistungsrechnens vor. Zur Konferenz hatten sich Forscher, Industrievertreter und Repräsentanten von EU-Institutionen und Ministerien eingefunden, um die zentrale Rolle des High Performance Computing (HPC) für viele Bereiche der europäischen Wissenschaft und Industrie zu diskutieren. Forscher um die Jülicher Neurowissenschaftlerin Prof. Katrin Amunts, wissenschaftliche Leiterin des Human Brain Projects (HBP), veranschaulichten die zunehmende Bedeutung des HPC in den Neurowissenschaften. Jun.-Prof. Giulia Rossetti konnte zeigen, dass Simulationen neue Einsichten auf der molekularen Ebene liefern, die Voraussetzung für die Entwicklung neuer Therapien ist. In einem produktiven Wechselspiel lassen sich neue Einblicke in die erstaunliche Komplexität des Gehirns gewinnen und gleichzeitig Fortschritte auf dem Gebiet des HPC und der Künstlichen Intelligenz vorantreiben. Prof. Thomas Lippert und Prof. Kristel Michielsen vom JSC gaben einen Einblick in die europäische Supercomputer-Infrastruktur PRACE und diskutierten gemeinsam mit Experten aus der Wissenschaft und Industrie über neue Arten der Informationsverarbeitung wie Quantencomputer und das sogenannte neuromorphe Computing. ([Link](#))

## SUPERMUC STATUS & RESULTS WORKSHOP



Der Garching Höchstleistungsrechner SuperMUC. © Johannes Naumann/LRZ

7,6 Milliarden CPU-Stunden, 5,6 Millionen ausgeführte Jobs, über 750 Forschungsprojekte mit knapp 2000 involvierten Wissenschaftlern: Seit 2012 hat SuperMUC Wissenschaft und Forschung auf Weltklasseniveau ermöglicht. Bevor das System von SuperMUC-NG (Next-Generation) abgelöst wird, lädt das Leibniz-Rechenzentrum für den 24. und 25. Juli 2018 die HPC-Community zu einem „Status and Results Workshop“ ein. Nutzer von SuperMUC werden dort die Ergebnisse ihrer Projekte präsentieren – mit besonderem Augenmerk auf die eingesetzten Algorithmen und ihre Erfahrungen mit dem System. Während des Anwenderforums besteht die Möglichkeit, mit LRZ-Experten aktuelle

und zukünftige Anforderungen zu erörtern und gemeinsam mit dem Publikum ergebnisreiche Diskussionen über den Einsatz und die Herausforderungen von künftigen HPC-Systemen zu führen. Anmeldungen sind bis zum 10.07.2018 möglich. ([Link](#))

Die Ergebnisse der SuperMUC-Nutzer aus den Jahren 2016 und 2017 sind zudem in dem soeben erschienen Band „High Performance Computing in Science and Engineering“ (Ausgabe 2018) erschienen. Die digitale Version des Bandes steht in verschiedenen Formaten auf der [LRZ-Webseite zum Herunterladen](#) bereit. Gedruckte Exemplare sind zudem auf dem GCS-Stand auf der ISC18 verfügbar.

## ERC-GRANT FÜR JSC-WISSENSCHAFTLER

Privatdozent Dr. Martin Schultz vom JSC wurde im April mit einem Advanced Grant des Europäischen Forschungsrats ERC ausgezeichnet. Für sein Projekt IntelliAQ, in dem er mit Hilfe von Deep-Learning-Methoden und dem Einsatz der JSC-Supercomputer Vorhersagen für Stickoxide, Ozon und Feinstaub entwickeln will, erhält der Geowissenschaftler rund 2,5 Millionen Euro Fördermittel über einen Zeitraum von 5 Jahren. Das Projekt will Daten von Messstationen für Luftschadstoffe mit hochauflösenden geografischen Daten und numerischen Wettervorhersagemodellen verknüpfen. Als Grundlage dient unter anderem die am JSC betriebene TOAR-Datenbank, das weltweit größte Datenarchiv bodennaher Ozonmessungen. Die Ergebnisse des Projektes könnten auch als Grundlage für Maßnahmen dienen, die die Luftqualität in Städten verbessern. ([Link](#))



Dr. Martin Schultz (JSC).  
© FZJ / Ralf-Uwe Limbach

## ADA LOVELACE AWARD FÜR LRZ-NUTZERIN XIAOXIANG ZHU

Prof. Dr.-Ing. Xiaoxiang Zhu erhielt für ihren Beitrag zum Höchstleistungsrechnen in Europa die Auszeichnung „[Ada Lovelace Award](#)“ der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE). Zhu und ihr Team nutzen satellitengestützte Erdbeobachtungstechnologien, um die dreidimensionale Erfassung von Städten und deren Dynamik im globalen Maßstab zu erforschen. Die dabei anfallenden riesigen Datenmengen verarbeitet Xiaoxiang Zhu auf dem SuperMUC des LRZ, um anschließend mittels mathematischer Optimierungen, die Millionen von Prozessorstunden erfordern, eine vierdimensionale Darstellung der Veränderung in Raum und Zeit zu generieren. Veränderungen an Gebäuden bis hinab in den Millimeter-Bereich erlauben detaillierte Aussagen über die



Xiaoxiang Zhu leitet das [SiPEO-Team](#) (Signal Processing in Earth Observation) am DLR und an der TUM sowie seit 2018 die DLR-Abteilung „EO Data Science“ des Instituts für Methodik der Fernerkundung. © TUM

Entwicklung der Städte, weshalb Zhus Forschungen neue Möglichkeiten für die Beobachtung und Planung von Städten eröffnen. So können beispielsweise Risiken rechtzeitig erkannt und vermieden werden, die durch Veränderungen des Untergrunds oder schlechte Baukonstruktion entstehen können. Das GCS hatte diese Forschungsarbeit in einer [GCS-Feature-Story](#) ausführlich vorgestellt.

Die Luft- und Raumfahrttechnikerin und Geodätin ist seit 2016 Mitglied im Jungen Kolleg der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Bereits 2015 er-

hielt Xiaoxiang Zhu den Heinz Maier-Leibnitz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), einen ERC Starting Grant in 2016 und eine Helmholtz-Exzellenzprofessur in 2018. ([Link](#))

## SUPERCOMPUTING-AKADEMIE AM HLRS GESTARTET

Am 19. April fiel am HLRS der Startschuss für die Supercomputing-Akademie, ein neues HPC-Weiterbildungsangebot, das gemeinsam mit den Universitäten Freiburg und Ulm sowie der Sicos BW GmbH eingeführt wurde. Das Schulungsangebot bietet Ingenieur/innen und Informatiker/innen die Gelegenheit, Supercomputing-Kompetenzen

berufsbegleitend aufzubauen und kontinuierlich weiterzuentwickeln. Das jetzt angelaufene erste Schulungsmodul „Paralleles Programmieren“ soll demnächst durch weitere Module zu den Themen Simulation, Visualisierung, Performance-Optimierung u. A. ergänzt werden, die aktuell in Vorbereitung sind. ([Link](#))



## GIRLS DAY 2018: SCHÜLERINNEN AN DEN GCS-ZENTREN



Gleitschirm-Flug durch virtuelle Welten in der CAVE des HLRS. (c) HLRS

Mit einem unterschiedlichem Programmangebot beteiligten sich die drei GCS-Zentren am 26. April am Girls Day 2018. Während an allen Standorten den Schülerinnen die Chance geboten wurde, Supercomputer von Weltklasse live zu besichtigen und ihnen zudem ein erstes Kennenlernen der Welt der Virtuellen Realität ermöglicht wurde, war das darüber hinaus gehende Angebot recht divers: So arbeiteten am HLRS die Mädchen „hands on“ an Computer-Hardwarekomponenten, schrieben mit der Programmiersprache Scratch erste kleine Programme und Spiele, um anschließend in der

HLRS-CAVE mit einem Gleitschirm virtuell durch den Schwarzwald zu fliegen. Während am LRZ den technikinteressierten Mädchen u. a. mit Linux- und HTML-Kursen die Kunst des Programmierens nähergebracht wurde, war für die Schülerinnen am JSC eines der Highlights, die Arbeitsweise eines Supercomputers mithilfe des Supercomputer-Simulators „SuperReSi“ kennen zu lernen. Ausführliche Informationen zum dualen Studiengang und die Präsentation einer Doktorandin, die über ihren Werdegang vom MATSE bis zur Promotion referierte, rundeten am JSC das Programm ab.

## HLRS-JAHRESBERICHT 2017 VERFÜGBAR

Seit wenigen Tagen ist der HLRS Jahresbericht 2017 veröffentlicht. Die Broschüre enthält eine umfassende Zusammenstellung der wichtigsten und nennenswerten Geschehnisse am Stuttgarter HPC-Zentrum im vergangenen Jahr. Neben reinen Zahlen und Fakten bietet der Bericht einen Überblick über die vielfältigen HPC-Trainingsaktivitäten des HLRS,

beleuchtet Highlights aus Forschungsprojekten der Nutzer der HLRS-Technologien, stellt wichtige Industrie-Kooperationen vor und beschreibt die diversen Initiativen und Aktivitäten am Höchstleistungsrechenzentrum im Bereich Nachhaltigkeit im Supercomputing. Der HLRS-Jahresbericht steht auch [online](#) zur Verfügung.

## SIMULATION IN DEN SOZIALWISSENSCHAFTEN: KOOPERATION ZWISCHEN HLRS UND FAU

Zum offiziellen Kick-Off einer neu vereinbarten Kooperation im Bereich „Simulation in den Sozialwissenschaften“ zwischen dem Department Philosophy of Computer Simulation des HLRS und dem Institut für Soziologie an der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg fand im März d. J. in Erlangen die erste Veranstaltung der diesbezüglich initiierten neuen Workshopreihe „Sozialwissenschaftliche Simulationen und die Soziologie der Simulation“ statt. Generell führt die Initiative Forscherinnen und Forscher aus der Soziologie, der Philosophie der Computersimulation, der Medienkulturforschung, der Mathematik und der Informatik in der Absicht zusammen, Simulationsmodelle kritisch zu reflektieren und Anstöße für ihre Anwendung in Wissenschaft und Gesellschaft zu geben. Die Workshops selbst werden bestückt von (1) Sozialwissenschaftlern, welche die Computersimulation als Methode verwenden, um z. B. Migrations- und Heiratsmuster zu erforschen, (2) Soziologen, die untersuchen, wie die Ergebnisse von Computersimulationen in Wissenschaft, Politik und Gesellschaft verstanden und bewertet werden, und (3) Simulationswissenschaftlern des HLRS, welche (a) an den mathematisch-technischen Grundlagen für sozialwissenschaftliche Simulationen arbeiten und (b) ihre Ergebnisse an Politik und Gesellschaft weitergeben. Die Ergebnisse der jährlich ausgerichteten Workshops werden in einer im Springer-Verlag erscheinenden Buchreihe publiziert. ([Link](#))



Die Teilnehmer des ersten Workshops „Sozialwissenschaftliche Simulationen und die Soziologie der Simulation“. (c) HLRS