GCSnews



Nr. 021 Dezember

SUPERCOMPUTING AT THE LEADING EDGE

Projekt InHPC-DE	1
TOP500 mit deutscher Top Ten Beteiligung	2
Ergebnisse des 20. GCS Large-Scale Calls	2
Neuer Supercomputer für das HLRS	3
Neues NIC-Exzellenzprojekt am JSC	3
HPCwire Editors' Choice Award für das LRZ	4
PRACE Summer of HPC 2018: Preisverleihung im Jülich Supercomputing Centre	4
SuperMUC-NG Next Gen Science Symposium	5
Höchstleistungsrechnen für KMUs	5
FAU-Team in der Student Cluster Competition der SC18	6

WEITERE INTEGRATION DER GCS-ZENTREN: PROJEKT INHPC-DE

X-WIN LRZ

Die drei GCS-Zentren HLRS, JSC und LRZ sind seit Oktober dieses Jahres mit einer 2x100-Gigabit/s.-Datenanbindung an das deutsche Hochgeschwindigkeits-Wissenschaftsnetz X-WiN angeschlossen. Sie verfügen damit über die derzeit schnellsten individuellen Anbindungen an das nationale Backbone des Deutschen Forschungsnetzes (DFN).

Das unter dem Projektnamen InHPC-DE im Herbst 2017 begonnene Vorhaben ist ein Bestandteil der nationalen High-Tech-Strategie des BMBF, die die Beschaffung und den Betrieb von Höchstleistungsrechnern der nächsten Generation, Optimierungen der Infrastruktur und die Ausweitung und Intensivierung der Benutzerbetreuung in den drei GCS-Zentren vorsieht.

Essentieller Bestandteil des InHPC-DE-Projektes sind zudem das Aufsetzen der notwendigen Prozesse und Tools für die effiziente Verwaltung von Nutzerdaten, die einheitliche Steuerung von Simulationsrechnungen und die standortunabhängige Auswertung der Daten. Ergänzt wird dies durch die Entwicklung und Implementierung einer integrierten Service-orientierten Infrastruktur, die über ein verteiltes Datenmanagement bis hin zur Auswertung und kollaborativen Visualisierung alle wesentlichen Arbeitsschritte der Nutzer abbildet.

(www.gauss-centre.eu/inhpc-de)





TOP500 MIT DEUTSCHER TOP TEN BETEILIGUNG



In der auf der SC18 in Dallas, Texas, USA veröffentlichten TOP500-Liste der schnellsten Supercomputer der Welt ist mit SuperMUC-NG, dem neuen Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ) in Garching/München, erstmals seit Juni 2016 wieder ein deutsches System in den Top Ten gelistet.

Mit einer Linpack-Leistung von 19,46 Petaflops rangiert der neue LRZ-Rechner, der Anfang 2019 für die Benutzer freigegeben werden soll, auf Platz 8. Das im Juni d. J. am Jülich Supercomputing Centre in Betrieb genommene erste Modul des JUWELS-Clusters belegt mit gemessenen 6,18 Petaflops Rang 26, auf Platz 30 folgt der dritte GCS-Supercomputer, das am HLRS in Stuttgart installierte CRAY XC40-System Hazel Hen, mit einer Linpack-Leistung von 5,64 Petaflops. (www.gauss-centre.eu/Top500_Nov2018)

Der neue LRZ-Höchstleistungsrechner SuperMUC-NG. © LRZ

ERGEBNISSE DES 20. GCS LARGE-SCALE CALLS

Am 1. November öffnete sich für 13 nationale Simulations-Großprojekte das auf zwölf Monate begrenzte Zeitfenster, innerhalb dessen die hierfür zugestandenen Rechenzeitkontingente auf den drei GCS-Höchstleistungsrechnern abgerufen werden können. Mit dem 20. GCS Call for Large-Scale Projects genehmigte das GCS-Rechenzeitkomitee insgesamt 816,3 Millionen Kernstunden auf den High-Performance Computing (HPC) Systemen Hazel Hen des HLRS, JUWELS des JSC und SuperMUC des LRZ.

Auf alle drei GCS-Zentren verteilen sich dieses Mal Forschungsvorhaben aus dem Gebiet der Ingenieurwissenschaften, wobei eine Strömungsmechanikstudie des Aerodynamischen Instituts (AIA) der RWTH Aachen mit mehr als 130 Millionen Kernstunden auf dem HLRS-System Hazel Hen mit dem größten individuellen Rechenzeitkontingent bedacht wurde. Fünf Forschungsprojekte aus dem Bereich der Hochenergiephysik werden auf den HPC-Plattformen des Jülich Supercomputing Centre (JUWELS) und des Leibniz-Rechenzentrums in Garching/München durchgeführt.

Der LRZ-Rechner kommt zudem in drei Simulationsvorhaben aus dem Feld der Astrophysik zum Einsatz, so z. B. für ein Projekt des Instituts für Theoretische Astrophysik der Universität Frankfurt, das mit 102 Millionen Kernstunden auf Super-MUC ebenfalls mit einem Rechenzeitkontingent im dreistelligen Millionenbereich bedacht wurde. (www.gauss-centre.eu/GCS call20)



NEUER SUPERCOMPUTER FÜR DAS HLRS



V.I.: Aron Precht (VP Sales, DACH & Russia Hewlett-Packard Enterprise), Prof. Michael M. Resch (Direktor des HLRS), Jan Gerken (Kanzler der Universität Stuttgart) und Heiko Meyer (Vorsitzender der Geschäftsführung, General Manager und Vice President, Enterprise Group Hewlett-Packard GmbH). © HLRS/Chris Williams

Am Höchstleistungsrechenzentrum (HLRS) in Stuttgart erfolgte am 30. November die Vertragsunterzeichnung für die Beschaffung eines neuen Supercomputers. Systemlieferant des nächsten HLRS-Rechners mit dem Codenamen "Hawk" ist das IT-Unternehmen Hewlett-Packard Enterprise (HPE). Der aus 5.000 Knoten bestehende neue Systemcluster wird auf AMDs zweiter Generation von EPYC-Prozessoren basieren. Er soll insbesondere die computergestützten Ingenieurwissenschaften und die Forschung in Wissenschaft und Industrie unterstützen, um Anwendungen in den Bereichen Energie, Klima, Mobilität und Ge-

sundheit voranzubringen. Mit einer theoretischen Spitzenleistung von 24 Petaflops wird Hawk 3,5 Mal schneller sein als der jetzige HLRS-Supercomputer Hazel Hen. Mit seiner Installation soll im zweiten Halbjahr 2019 begonnen werden, für Ende 2019 ist die Inbetriebnahme vorgesehen. Die finanziellen Mittel für den neuen HLRS-Höchstleistungsrechner, rund 38 Millionen Euro, werden zu gleichen Teilen vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg und vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) bereitgestellt. (www.hlrs.de/whats-new/news/detail-view/2018-11-13)

NEUES NIC-EXZELLENZPROJEKT AM JSC

Zweimal im Jahr vergibt die NIC-Rechenzeitkommission den Titel "NIC-Exzellenzprojekt" an herausragende Simulationsprojekte. Auf ihrer letzten Sitzung im Oktober 2018 beschloss die Kommission, Dr. Frank Lechermann (I. Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg) für sein Projekt "Konkurrierende Phasen in stark korrelierten Materialien" auszuzeichnen. Das Projekt, dem Rechenzeit auf JUWELS gewährt wurde, untersucht das komplexe Zusammenspiel zwischen atomistischen

Freiheitsgraden. Dies ist relevant für das Verständnis der grundlegenden physikalischen Prozesse in kondensierter Materie und Materialien für potentiell technologische Anwendungen. Insbesondere konzentriert sich das Projekt auf die anspruchsvollen Verbindungen von Übergangsmetallelementen mit Sauerstoff, bei denen ein starker Wettbewerb zwischen der freien Bewegung und der räumlichen Lokalisierung der Ladungsträger besteht. (www.john-von-neumann-institut.de/nic/lechermann)



HPCWIRE EDITORS' CHOICE AWARD FÜR DAS LRZ

Auf der SC in Dallas gab das Fachmagazin HPCwire die diesjährigen Gewinner der alljährlich ausgerufenen "HPCwire Readers' and Editors' Choice Awards" bekannt, die für verschiedene Themen aus dem Bereich High-Performance Computing vergeben werden. Als einer

der Preisträger ging das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) hervor, das zusammen mit seinen Partnern Lenovo und Intel mit dem "Editors' Choice Award" in der Rubrik "Energieeffizientes High-Performance Computing" geehrt wurde. Mit dieser Auszeichnung, die auf dem Votum der HPC-affinen Redakteure und Journalisten beruhte, wurde dem LRZ Anerken-



Prof. Dieter Kranzlmüller (LRZ, links) bei der Übergabe der HPCwire-Auszeichnung auf der SC18 durch Tom Tabor (re.), Chief Executive Officer von Tabor Communications, Inc. und Herausgeber des Fachmagazins HPCwire. Mitte: Erika Krimmer (LRZ). © LRZ

nung gezollt für seine anhaltenden Bemühungen, im Supercomputing-Betrieb Einsparpotentiale zu identifizieren, um den Energiebedarf zu reduzieren. Das LRZ wurde damit einmal mehr seiner Rolle als "Pionier in Sachen energieeffizientes Rechenzentrum" gerecht.

(www.gauss-centre.eu/HPCwire_SuperMUC-NG)

PRACE SUMMER OF HPC 2018: PREISVERLEIHUNG IM JÜLICH SUPERCOMPUTING CENTRE



Die Preisträger des PRACE SoHPC Awards 2018 vor dem Supercomputer JUWELS im JSC; von links Conor O'Mara, Sukhminder Singh. © FZJ

PRACE Summer of HPC (SoHPC) ist ein Nachwuchsförderprogramm für bis zu 25 Studierende der Naturwissenschaften, das einen achtwöchigen Aufenthalt bei einer PRACE-Partnerorganisation ermöglicht und den Teilnehmenden Einblicke in das High-performance Computing (HPC) gibt. Neben einem einwöchigen HPC-Training und der Arbeit an Forschungsprojekten in einem multidisziplinären und internationalen Umfeld werden die Studierenden auch ermutigt, ihre Erfahrungen in Blog-Posts und Videopräsentationen auszutauschen. Aufgrund ihrer Leistung und ihrer Öffentlichkeitsarbeit für das HPC und PRACE werden die zwei besten Studierenden nach Beendigung des Programms mit dem PRACE SoHPC Award ausgezeichnet. Die diesjährige Preisverleihung fand am 23. Oktober 2018 am Jülich Supercomputing Centre statt. Die beiden Gewinner dieses Jahres heißen Conor O'Mara (Trinity College Dublin) und Sukhminder Singh (Friedrich-Alexander-Universität Erlangen). Sie erhielten jeweils einen Gutschein über 1500 Euro für die Teilnahme an einer HPC-Konferenz ihrer Wahl sowie eine Glastrophäe.

(www.gauss-centre.eu/SoHPC_award)



SUPERMUC-NG NEXT GEN SCIENCE SYMPOSIUM

Langjährige bzw. wiederholte Nutzer der am LRZ betriebenen High-Performance Computing (HPC) Rechnersysteme, sogenannte "HPC Power User", waren im November der Einladung des LRZ-Direktoriums zum "SuperMUC-NG Next-Gen Science Symposium" gefolgt. Die wissenschaftliche Veranstaltung, zu der sich auch Vertreter des Bundesund Landesministeriums eingefunden hatten, durch die der LRZ-Höchstleistungsrechner je zur Hälfte finanziert wird, hatte primär zwei Zielsetzungen: Zum einen wurden an Beispielen repräsentativer Projekte bisher erzielte wissenschaftliche Ergebnis-

se und Fortschritte vorgestellt. Zum anderen wurde den erfahrenen HPC-Nutzern die Plattform geboten, gegenüber den anwesenden HPC-Experten des LRZ ihre Erwartungen und Wünsche an die neue, noch leistungsfähigere "Next-Generation"-Version des LRZ-Supercomputers zu artikulieren. Zudem wurden Wege und Möglichkeiten diskutiert, die nachhaltig sicherstellen sollen, dass dem wertvollen Forschungsgerät das volle Leistungspotenzial zum Zweck des Fortschritts in Wissenschaft und Forschung entlockt werden kann. (www.lrz.de/presse/ereignisse/SuperMUC-NG-Science-Symposium)

HÖCHSTLEISTUNGSRECHNEN FÜR KMUs

Im November war das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) Gastgeber des ersten Workshops für KMUs (kleine und mittlere Unternehmen) der Automotive-Branche zur Simulation mit Höchstleistungsrechnern. Die Veranstaltung sollte einmal mehr dazu dienen, KMUs zu ermutigen, auf High-Performance Computing (HPC) Technologien zuzugreifen. Denn während für Konzerne der Automobilindustrie die Nutzung von Höchstleistungsrechnern selbstverständlich ist, fehlt kleinen und mittleren Unternehmen oft die Erfahrung, wann und wie diese Technologien einen Mehrwert liefern.

Vertreter von KMUs hatten beim Workshop Gelegenheit, Erfahrungen auszutauschen und von jenen zu lernen, die Höchstleistungsrechnen bereits für Prototyp und Produktentwicklung nutzen. So konnte das italienische Unternehmen Moxoff durch eine HPC-basierte Simulationsplattform das Belüftungssystem eines Motorradhelms optimieren. Die Simulation eines Helms gelang dabei in 17 statt in 1.800 Stunden. Der Workshop wurde vom EU-Projekt HPC Europa 3 unter Leitung des HLRS in Zusammenarbeit mit SICOS BW organisiert und mit Mitteln aus PRACE unterstützt. (www.hpc-europa.eu/1st-sme-workshop)



FAU-TEAM IN DER STUDENT CLUSTER COMPETITION DER SC18





Erfolgreich kehrte ein Team von sechs Bachelor-Studentinnen und Studenten der Friedrich-Alexander-Universität (FAU) Erlangen-Nürnberg von der SC18 in Dallas, Texas, zurück. Als einziger deutscher Repräsentant hatte sich das vom GCS gesponserte Team deFAUlt, neben 14 internationalen Vertretungen, für den Studentencluster-Wettbewerb (Student Cluster Competition/SCC) qualifiziert, wo es in den heiß umkämpften Benchmark-Leistungstests jeweils Podiumsplätze ergatterte: In der Kate-

gorie High-Performance Linpack (HPL) Test hatten die Studierenden aus Franken ihrem selbstkonfigurierten Clustersystem mit 47,9 TeraFlop/s die zweitbeste Leistung entlocken können, im High-Performance Conjugate Gradients (HPCG) Benchmark kam das Team auf Platz drei. Die SCC-Gesamtwertung schloss das deFAUlt-Team mit einem respektablen fünften Rang ab. Als Gesamtsieger ging die Mannschaft der Tsinghua University, China, hervor. (www.gauss-centre.eu/default-scc)



Team deFAUlt auf der SC18. Hinten, v. I.: Oleksandr Bannov, David Sauerwein, Benedikt Oehlrich und Betreuer Johannes Hofmann. Vorne v. I.: Manuel Peschel, Eva Dengler und Meike Blöcher. © Jo Julia Photography for SC18