



INHALT

- Neue Top500-Liste • Besuch Ministerin Theresia Bauer am HLRS • Forschungsprojekte auf JUQUEEN • XXL-Projekte auf Hornet • Themenspezifische Anwenderunterstützung am LRZ: Lebenswissenschaften und Astrophysik • GCS Website - Statistiken für 2014

GCS-SUPERCOMPUTER IN DEN TOP500

Wie jedes Jahr wurde auf der Supercomputing-Conference 2014 (SC'14), die im November in New Orleans (USA) stattfand, die neueste Rangliste der weltweit leistungsfähigsten Höchstleistungsrechner veröffentlicht (TOP500, 44. Ausgabe). Alle drei GCS-Supercomputer rangieren aktuell unter den 20 größten HPC-Systemen der Welt. Das neue HLRS-System Hornet debütierte in seiner ersten Ausbaustufe auf Platz 16, und der LRZ-Rechner SuperMUC, der – wie auch Hornet – im Laufe dieses Jahres eine planmäßige Aufrüstung erfährt, rangiert in der aktuellen Rangliste auf Platz 14. Leistungsstärkster deutscher Supercomputer bleibt weiterhin JUQUEEN (Jülich Supercomputing Centre) auf Rang 8 mit einer Spitzenleistung von 5,87 PetaFlops. ([Link](#))



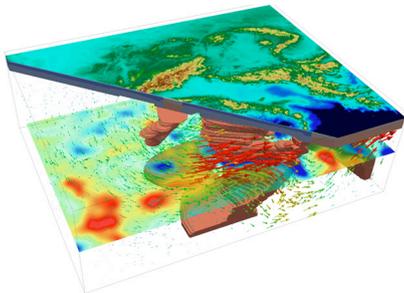
THERESIA BAUER, LANDESMINISTERIN BADEN-WÜRTTEMBERG FÜR WISSENSCHAFT, FORSCHUNG UND KUNST, AM HLRS

Frau Ministerin Theresia Bauer, Wissenschaftsministerin des Landes Baden-Württemberg und frisch gekürte „Wissenschaftsministerin des Jahres 2015“, stattete Anfang Februar dem HLRS einen Besuch ab. Neben einer Führung durch den HLRS-Rechnerraum mit Vorstellung des neuen Supercomputers Hornet und dem anschließenden Besuch des Visualisierungslabors (CAVE) nutzte Gastgeber Prof. Resch (HLRS) die Gelegenheit, Frau Ministerin Bauer ausführlich über die Rolle des Höchstleistungsrechnens in Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft zu informieren. Angesprochen wurden auch die wissenschafts-philosophischen Grundlagen der Simulation sowie das zunehmend wichtiger werdende Thema der Aus- und Weiterbildung am HLRS.



JSC: NIC-EXZELLENZPROJEKT, OKTOBER 2014

Die NIC-Rechenzeitkommission des Jülich Supercomputing Centre (JSC) hat kürzlich ein weiteres Projekt als NIC-Exzellenzprojekt 2014 ausgezeichnet. Das Projekt „Numerische Modellierung von Deformationen in der Lithosphäre auf der Längenskala der Erdkruste in geologischen Zeiträumen“, eingereicht von Prof. Boris Kaus (Johannes Gutenberg-Universität Mainz) befasst sich mit dreidimensionalen Verformungsmodellen, um die Dynamik von tektonischen Vorgängen in der Erdkruste zu studieren. ([Link](#))

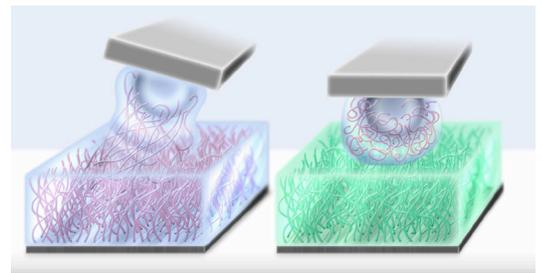


3D-Simulation möglicher Fließbewegungen im Erdmantel unterhalb der Alpen.

© Institut für Geowissenschaften, Johannes-Gutenberg-Universität Mainz

NEUE METHODE ZUR SCHMIERUNG VON SCHARNIEREN UND GELENKEN

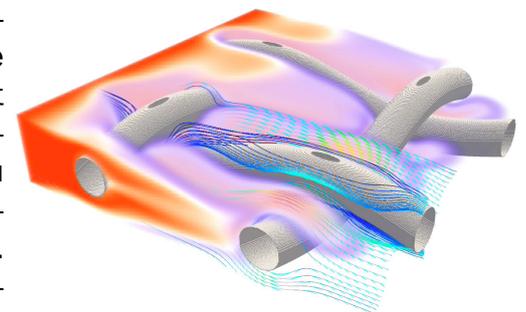
Wissenschaftlern aus Jülich und Twente (NL) ist es gelungen, mithilfe von Simulationen am JSC Supercomputer JUQUEEN die biologische Schmierung in natürlichen Gelenken technisch zu kopieren. Als Vorbild dienten den Forschern die überragenden mechanischen Eigenschaften dieser Gelenke, die sich dank einer speziellen Polymerschicht auf dem Knorpel auch bei hohem Druck praktisch reibungsfrei bewegen. Das von den Forschern entwickelte Verfahren berücksichtigt die Nutzung zweier verschiedener Arten von Polymeren, wodurch die biologische Schmierung sogar noch verbessert wird. Die Ergebnisse sind in der Fachzeitschrift Nature Communications nachzulesen ([Link](#)). Siehe auch: Exascale-Newsletter des Forschungszentrums Jülich. ([Link](#))



Zwei unterschiedliche Polymere an der Kontaktstelle (re.) verhindern, dass sich die Polymere ineinander verhaken und dadurch abbremsen (li.). © Nolux Media

XXL-SIMULATIONSPROJEKTE AUF HORNET (HLRS)

Bevor der neue HLRS-Supercomputer Hornet zur allgemeinen Nutzung freigegeben wurde, musste sich der Ende 2014 installierte Großrechner einem wahren Stress-Test mit Großprojekten unterziehen. Nationale Forscher waren eingeladen worden, Hornet mit maschinenfüllenden Applikationen zu testen, also mit hoch-skalierenden Anwendungen, die alle verfügbaren 94.646 Rechenkerne des Systems simultan nutzen. Diese sogenannten XXL-Projekte repräsentierten unterschiedliche wissenschaftliche Bereiche wie Strömungsmechanik, Umwelt und Ernährung, Klimaforschung, Planetenforschung und generelle Ingenieurwissenschaften. Das Ergebnis stellte sowohl die HPC-Experten des HLRS wie auch die wissenschaftlichen Nutzer mehr als zufrieden: Hornet meisterte die Prüfungen mit Bravour und lieferte in allen Bereichen hervorragende Grundlagen für weitere Forschungsarbeiten. ([Link](#))



Transport von Lösungskomponenten durch einen Kanal mit komplexer Geometrie.

© Institut für Simulationstechnik & Wissenschaftliches Rechnen, Universität Siegen

Bravour und lieferte in allen Bereichen hervorragende Grundlagen für weitere Forschungsarbeiten. ([Link](#))

THEMENSPEZIFISCHE ANWENDERZENTREN AM LRZ

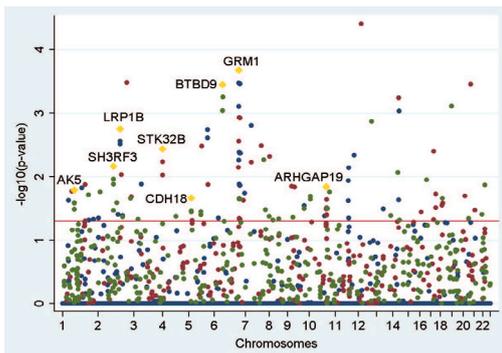
Das Leibniz-Rechenzentrum Garching (LRZ) hat mit dem LRZ Bio Application Lab und dem LRZ Astro Application Lab weitere Domänen-spezifische Anwenderzentren eingerichtet. Damit wurde die Grundlage geschaffen, in optimaler Form auf die teils sehr unterschiedlichen Anforderungen eingehen zu können, welche Anwender aus den diversen Wissenschafts- und Forschungsbereichen an die verfügbaren HPC-Ressourcen stellen. Forschern aus diesen Bereichen kann fortan noch besser als bislang optimaler anwendungsspezifischer technischer System- und Nutzer-Support angeboten werden. ([Link](#))

LRZ ASTRO APPLICATION LAB

Das Astro Application Lab des LRZ bietet Domänen-spezifischen technischen Support für Anwender aus dem Feld der Astro- und Plasmaphysik. Im ersten Schritt wurden derzeitige und potentielle SuperMUC-Anwender aufgerufen, ihre Bewerbung für high-level-Support zur Optimierung und Tuning ihrer Anwendungen bzw. ihres Codes auf die aktuelle und zukünftigen Versionen von SuperMUC einzureichen. Beantragt werden können Astro-Lab-Ressourcen von bis zu drei Personen-Monaten. Es ist angestrebt, dass die daraus resultierenden Kooperationen in einer langfristig ausgelegten Zusammenarbeit mit dem LRZ münden, aus der idealerweise gemeinsame Publikationen oder durch externe Fördergelder gesponserte Folgeprojekte resultieren. Der erste „Astro Lab Call“ schloss Ende Januar 2015. Die Bewerbungen werden derzeit gesichtet, ausgewählte Projekte gehen im März an den Start.

LRZ BIO APPLICATION LAB

Zum Start des LRZ Bio Application Labs wurden bereits drei Projekte aus dem Life-Science-Bereich erfolgreich durchgeführt. Zwei davon beinhalten Workflows zur Verbindung von HPC-Ressourcen, Cloud-Ressourcen und Peta-Scale-Storage-Systemen im Bereich der Bioinformatik. Die Daten stammen u.a. aus einem EU-Projekt, das sich mit der Erforschung des Mikrobioms (Bakterien-Genom) von Kindern mit Asthma-Erkrankungen beschäftigt. Das dritte Projekt („Iphigenie“) hat die Skalierbarkeit und Last-Balancierung eines Molekular-Dynamik-Codes zum Ziel. Weiterhin wird der Einsatz von Intel Xeon Phi Beschleuniger-Karten evaluiert. Der Code erlaubt bereits die Kopplung von molekularmechanischen und quantenchemischen Simulationen auf vielen Rechenknoten des SuperMUC.



Genomweite Interaktionsanalyse für Asthma: p-Werte für Interaktionen sind gegen die einzelnen Loci im Genom aufgetragen. Die Werte oberhalb der roten Linie sind genomweit signifikant.

© Dr. Ege (Klinikum der Universität München, Kinderklinik und Kinderpoliklinik im Dr. von Haunerschen Kinderspital)

STATISTIKEN ZU GCS-WEBSITE-AUFRUFEN 2014 LIEGEN VOR

Jetzt bestätigen es auch offizielle Statistiken des Jahres 2014: Das neue Konzept des GCS-Webauftrages wird von der Öffentlichkeit angenommen. Erfreulich häufig werden die GCS-Seiten besucht, wobei die Rubriken „Projects“, in denen Berichte über auf GCS-Supercomputern durchgeführten Simulationsprojekte einzusehen sind, am meisten frequentiert werden.