



INFOBRIEF

Nr. 013
Mai 2017

- Neuer GCS-Vorstand • Führungswechsel am Leibniz-Rechenzentrum • Rekorde: 17. GCS Large-Scale Call • Auszeichnung für Professor Arndt Bode • SuperMUC hilft neue Spezies im tropischen Regenwald zu entdecken • Hazel Hen simuliert „ultraschnellen Phasenübergang“ • JUQUEEN Extreme Scaling Workshop 2017 • HLRS auf der CeBIT 2017 • Testsysteme für Big Data und Machine Learning am LRZ • Neues HLRS-Schulungszentrum • Vorschau: GCS auf der ISC17

NEUER GCS-VORSTAND

Turnusgemäß stand im April 2017 die Wahl eines neuen Vorstandes für das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) an. Zum neuen Vorstandsvorsitzenden für die nächsten zwei Jahre wählten die GCS-Mitglieder Prof. Dr.-Ing. Michael M. Resch, Direktor des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS). Als seine Stellvertreter wurden Prof. Dr. Thomas Lippert (Jülich Supercomputing Centre/JSC) und Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller (Leibniz-Rechenzentrum, Garching/München) gewählt.



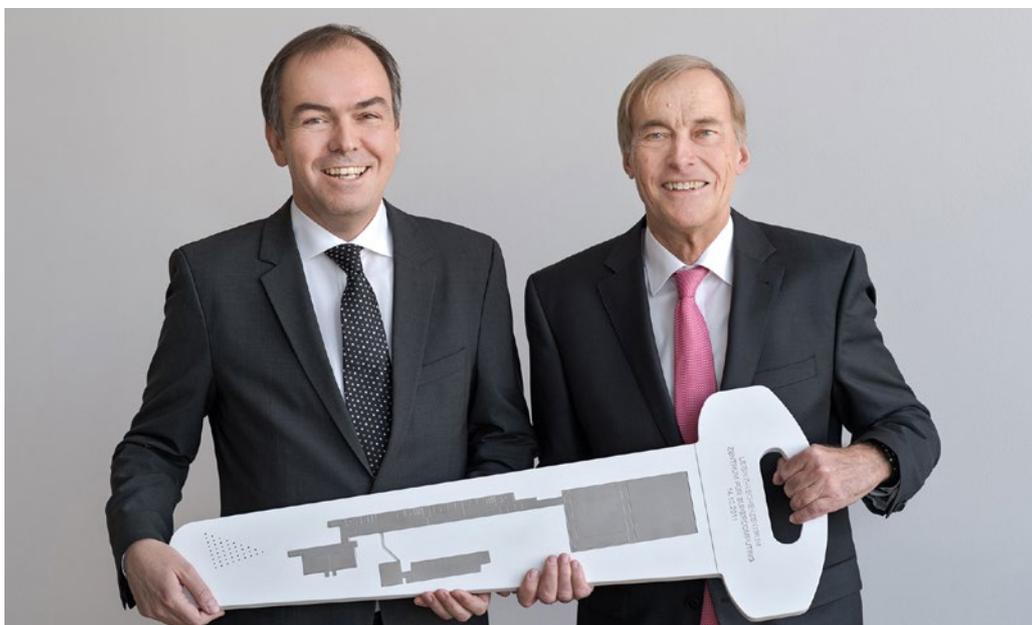
Prof. Michael M. Resch (HLRS) ist neuer GCS- Vorstandsvorsitzender. © HLRS



Prof. Heinz-Gerd Hegering
© HGH

Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering, langjähriges Mitglied des GCS-Vorstandes, wurde im Rahmen der in Garching abgehaltenen Mitgliederversammlung offiziell aus den Reihen des GCS-Vorstandes verabschiedet. Professor Hegering, einer der Initiatoren und Gründungsväter des GCS vor 10 Jahren, hatte sich für eine Wiederwahl nicht mehr zur Verfügung gestellt. Der Vorstand, das Management und die Mitglieder des GCS danken Herrn Hegering von ganzem Herzen für sein großartiges Engagement und seinen unermüdlichen Einsatz in den vergangenen 10 Jahren und wünschen ihm alles Gute für seinen wohlverdienten Ruhestand. ([Link](#))

FÜHRUNGSWECHSEL AM LEIBNIZ-RECHENZENTRUM



Arndt Bode (rechts) übergab symbolisch den Schlüssel an seinen Nachfolger, Dieter Kranzlmüller. © LRZ

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller ist der neue Leiter des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAW). Im Rahmen eines Festaktes am 30. März übergab Prof. Dr. Dr. h. c. Arndt Bode, der seit 1. Oktober 2008 den Vorsitz des LRZ-Direktoriums innegehabt hatte, den symbolischen Schlüssel an seinen Nachfolger im Amt.

Prof. Kranzlmüller ist seit 2008 einer der Direktoren des LRZ sowie Professor für Informatik am Lehrstuhl für Kommunikationssysteme und Systemprogrammierung der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU). Wie Arndt Bode in 2008 beginnt auch Dieter Kranzlmüller sein Amt mit der Beschaffung des LRZ-Höchstleistungsrechners der nächsten Generation, SuperMUC-NG. [\(Link\)](#)

REKORDE: 17. GCS LARGE-SCALE CALL

Mit mehr als 2,1 Milliarden Kernstunden auf den GCS-Supercomputern Hazel Hen, JUQUEEN und SuperMUC wurde im Rahmen des 17. GCS Large-Scale Calls ein bislang unübertroffen großes Rechenzeitkontingent zur Durchführung nationaler Simulations-Großprojekte genehmigt. Verteilt wird dieses Kontingent auf insgesamt 30 Large-Scale Projekte, die die strengen Beurteilungskriterien des GCS-Rechenzeitkomitees erfüllten. Vier Projekten wurden dabei Rechenzeitstunden im dreistelligen Millionenbereich zugestanden, und ebenfalls vier Projekte wurden als „Split-Projekte“ genehmigt. Die Berechnungen dieser

Projekte werden, um die spezifischen technischen Anforderungen bestmöglich zu erfüllen, auf verschiedenen GCS-Systemen durchgeführt. So z. B. das Projekt des Aerodynamischen Instituts (AIA) der RWTH Aachen, das mit insgesamt 335 Millionen Kernstunden die größte individuelle Rechenzeitzuwendung erhielt: Dr. Matthias Meinke und sein Team werden teils das CRAY-XC40-System Hazel Hen des HLRS und teils die IBM Blue Gene Q-Architektur des JUQUEEN-Supercomputers (JSC) für ihr Projekt „Simulation of Particulate Flows, Base-Flow Fields of Space Launchers, and Trailing Edge Noise“ nutzen. [\(Link\)](#)

AUSZEICHNUNG FÜR PROFESSOR ARNDT BODE



Prof. Dr. Dr. h. c. Arndt Bode (LRZ).
© LRZ

Am 16. März 2017 wurde Prof. Dr. Dr. h.c. Arndt Bode (LRZ) der Intel HPC Lifetime Achievement Award verliehen. Anlass war die Europäische Tagung „Intel EMEA HPC/HPDA Roundtable“, die dieses Jahr an der Technischen Universität München abgehalten wurde und jährlich Experten rund um die Themen Höchstleistungsrechnen und Höchstleistungs-Datenanalyse zusammenbringt. Die Auszeichnung soll die Arbeiten von Bode zur Architektur und zur Anwendung Paralleler Hoch- und Höchstleistungsrechner an der Universität Erlangen-Nürnberg (1976 – 1987), an der Technischen Universität München (1987 – 2017) und am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften würdigen. Die Übergabe erfolgte durch Dr. Helena Liebelt, Intel Director HPC Germany, und Stephan Gillich, Intel Director of Technical Computing GTM for EMEA.

SUPERMUC HILFT NEUE SPEZIES IM TROPISCHEN REGENWALD ZU ENTDECKEN

Der tropische Regenwald zählt zu den artenreichsten Regionen der Erde. Auch kleinere, mit bloßem Auge nicht sichtbare Organismen sind darin heimisch. Forscher der TU Kaiserslautern hatten die DNA der in Bodenproben der Regenwälder von Costa Rica, Panama und Ecuador lebenden Mikroben extrahiert und sequenziert. Die Bioinformatiker Alexandros Stamatakis, Lucas Czech und Alexey Kozlov (Heidelberger Institut für Theoretische Studien und Karlsruher Institut für Technologie) analysierten die Daten anschließend mithilfe von SuperMUC und

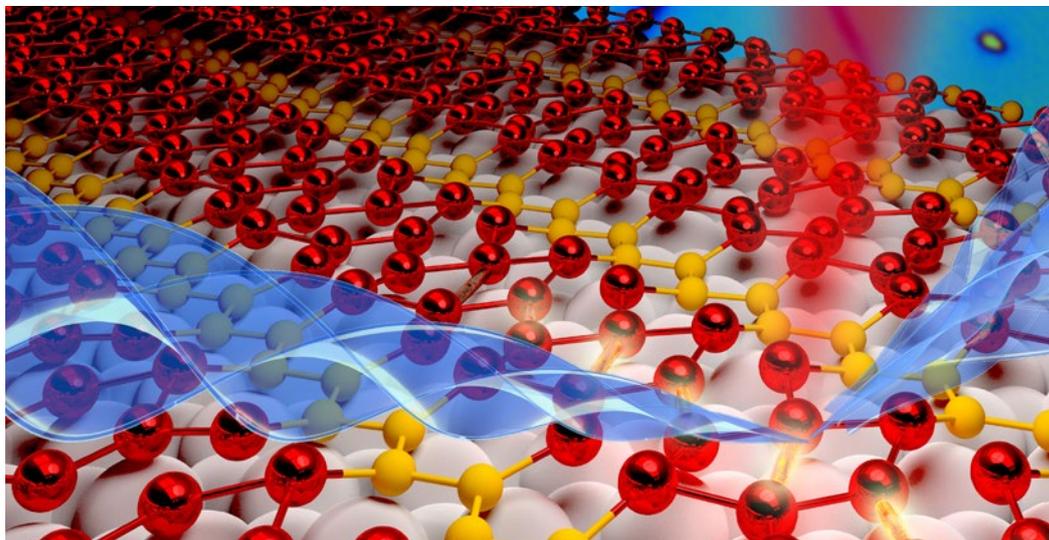
entdeckten dabei viele bislang unbekannte Arten. Etwa 1 Million Kernstunden verbrauchten die Forscher auf dem LRZ-Hochleistungsrechner für die Klassifizierung der Millionen von DNA-Sequenzen mittels phylogenetischer Platzierungen.

Die Studie wurde in der Fachzeitschrift „Nature Ecology and Evolution“ veröffentlicht (Mahé et al. (2017). Parasites dominate diverse soil protist communities in Neotropical rainforests. [\(Link\)](#)



HAZEL HEN SIMULIERT „ULTRASCHNELLEN PHASENÜBERGANG“

Einer Gruppe um die Materialphysiker Prof. Dr. Wolf Gero Schmidt und Andreas Lücke (Universität Paderborn) ist gemeinsam mit Kollegen aus Duisburg ein Experiment mit höchstem Seltenheitswert geglückt: Die Beobachtung eines sogenannten „ultraschnellen Phasenübergangs“ und dessen Simulation am Computer. Solche Übergänge finden statt, wenn etwa – stark



vereinfacht – Eis zu Wasser wird. Zur Klärung der Frage, was die Ursache dieses schnellen Phasenübergangs ist und welche Rolle dabei die Verankerung der Drähte auf der Siliziumoberfläche spielt, griffen die Forscher u. a. auf die HPC-Ressourcen des HLRS (Hazel Hen) zurück, was die quantenmechanische Berechnung der vielen hundert optisch angeregten Elektronen im komplexen Zusammenspiel mit der Dynamik der Indium- und Siliziumatome möglich machte. Die Wissenschaftler konnten nachweisen, dass sich dieser Phasenübergang bei geeigneter optischer Anregung in weniger als 350 Femtosekunden vollzieht. Zur Verdeutlichung: Eine

Elektronenstrahl (blau) detektiert die durch den Laserpuls (rot) induzierte Strukturänderung der Indiumdrähte. Schematische Darstellung von Andreas Lücke, Universität Paderborn

Femtosekunde ist das Millionstel einer Milliardstel Sekunde, in 350 Femtosekunden legt Licht eine Strecke von lediglich einem Zehntel Millimeter zurück. Physiker sprechen in diesem Zusammenhang vom Phasenübergang im Quantenlimit – schneller kann dieser nicht ablaufen. Die Ergebnisse dieser Untersuchung wurden in der Fachzeitschrift [Nature](#) publiziert. ([Link](#))

JUQUEEN EXTREME SCALING WORKSHOP 2017

Anfang des Jahres wurde am Jülich Supercomputing Centre (JSC) der 8. Blue Gene Extreme Scaling Workshop durchgeführt. Mehr als 50 Stunden lang stand der gesamte Blue Gene/Q Supercomputer JUQUEEN sechs ausgewählten Teilnehmergruppen exklusiv zur Verfügung, um die Skalierbarkeit ihrer Anwendungen zu testen und zu optimieren. Am Ende waren alle sechs Codes in der Lage, die komplette Maschine mit ihren 458.752 Prozessorkernen zu nutzen, die meisten

davon sogar mit mehr als 1,8 Millionen Threads. Aufgrund ihrer ausgezeichneten Skalierbarkeit wurden zwei der Codes, die Anwendungen MPAS-A (vom KIT/NCAR) und die rigid body physics engine (Universität Erlangen), neu in den High-Q Club des JSC aufgenommen. Detaillierte Ergebnisse, auch die der Codes ParFlow (Universität Bonn/IBG Jülich), KKRnano (IAS, Jülich), CPMD und NestMC (JSC SimLab Neuroscience), wurden im technischen Bericht FZJ-JSC-IB-2017-01 des JSC veröffentlicht. ([Link](#))

HLRS AUF DER CEBIT 2017



Ministerin Prof. Dr. Johanna Wanka (Mitte) im Gespräch mit Dr. Uwe Wössner (HLRS, 2. v. l.).
© bw-i/Gabriel Poblete Young

Hohen Besuch erhielt das HLRS auf der CeBIT 2017: Prof. Dr. Johanna Wanka, Bundesministerin für Bildung und Forschung, besuchte mit ihrer Delegation den Messestand. Dr. Uwe Wössner (Leiter der Abteilung Visualisierung am HLRS) und sein Kollege Thomas Obst gaben der Ministerin einen Einblick in die Welt des Höchstleistungsrechnens und der Virtuellen Realität (VR). Die von den HLRS-Mitarbeitern vorbereiteten VR-Demos zeigten unter anderem live die Luftströmung um ein Motorrad und dessen Fahrer (s. Foto).

Das HLRS hatte sich auf der CeBIT 2017 als Unter- aussteller der Universität Stuttgart auf dem Stand von Baden-Württemberg International (BW-I) beteiligt. [\(Link\)](#)

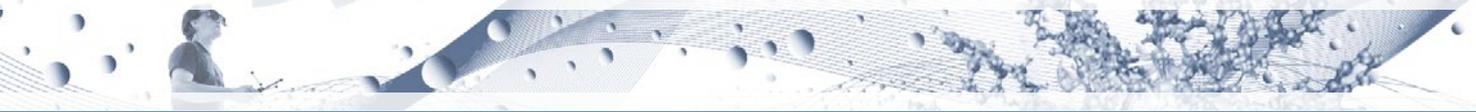
GCS AUF DER INTERNATIONALEN SUPERCOMPUTING CONFERENCE (18.-22.6.2017)

Auch in diesem Jahr wird das GCS sich in vielfältiger Form an der Internationalen Supercomputing Conference (ISC) beteiligen, die vom 18.-22. Juni 2017 in Frankfurt/Main stattfindet. Zahlreiche Vertreter der drei GCS-Zentren übernehmen aktive Rollen in diversen Sessions, Workshops und Tutorials, oder sind als Sitzungs-Leiter, Moderator oder Vortragender auf der Konferenz aktiv. Zudem präsentiert sich das GCS erneut mit einem eigenen Stand (Nr. B1310) in der begleitenden Ausstellung in der Messehalle. Ein besonderes Ereignis findet dieses Jahr auf dem GCS-Stand am Dienstag, 20.6., statt: Anlässlich seines 10-jährigen Bestehens lädt GCS ab 16.30 Uhr zu einer kleinen Geburtstagsfeier ein. [\(Link\)](#)



GCS
Gauss Centre for Supercomputing

SUPERCOMPUTING
AT THE LEADING EDGE



TESTSYSTEME FÜR BIG DATA UND MACHINE LEARNING AM LRZ

Das LRZ hat zwei neue Systeme für Big Data und Machine Learning in Betrieb genommen: Teramem1 und DGX-1. Das Big Memory System Teramem1 besitzt 96 Rechenkerne und einen RAM-Speicher von 6 TeraByte. Es ist somit besonders interessant für Big-Data-Anwendungen, die wenige Rechenkerne aber einen riesigen Hauptspeicher benötigen. Testnutzer arbeiten an Anwendungsfällen wie etwa Genom-Analysen, der Durchforstung großer In-Memory-Datenbanken oder der Visualisierung und Auswertung riesiger Datenbestände.



Das Big Memory System Teramem1 des LRZ: 96 Rechenkerne, 6 TB RAM.
© Philip Klak for LRZ

Als „Supercomputer in a box“ lässt sich das Machine-Learning-System DGX-1 von NVIDIA beschreiben. Acht hochwertige NVIDIA-Tesla-P100-Grafikprozessoren mit insgesamt fast 29.000 NVIDIA-CUDA-Recheneinheiten erbringen eine Leistung von 170 Teraflops. Das Betriebsmodell ist so dynamisch wie das Forschungsgebiet Machine Learning. Testnutzer trainieren hier zum Beispiel große Neuronale Netze, um sie anschließend auf wesentlich weniger leistungsfähiger Hardware zur Mustererkennung einsetzen zu können. [\(Link\)](#)

NEUES HLRS-SCHULUNGSZENTRUM



Der neue Schulungsraum des HLRS.
© HLRS

Im März 2017 wurde am HLRS das neue Schulungszentrum in Betrieb genommen, dessen Herzstück der 254 m² große, mit modernster IT- und Medien-Ausstattung bestückte Schulungsraum ist. Mit mehr als 1000 Trainings- und 400 Workshop-Teilnehmer/-innen im Jahr 2016 ist das HLRS bereits jetzt Europas größte HPC-Ausbildungseinrichtung im wissenschaftlichen Bereich.

Um den Wissenstransfer in die Industrie zu fördern, werden derzeit am HLRS neue Trainingskonzepte ausgearbeitet, die Teilnehmer/-innen außerhalb der traditionellen wissenschaftlichen Gemeinschaft ansprechen sollen. Ein spezieller Fokus liegt dabei auf der Ingenieurausbildung, um die zahlreichen Ingenieurbüros in der Region Stuttgart im Bereich Simulation zu stärken. [\(Link\)](#)