

GCS-Höchstleistungsrechner für COVID-19-Forschung	1
Neuer Supercomputer am HLRS: HAWK	2
GCS-Team gewinnt internationalen „Data Mover Award“	2
EU-Projekt Sano zur rechnergestützten Medizin	3
Hochrangige Auszeichnung für Prof. Kurt Binder	3
Projekt ArkTIK: Neue Adsorptionskältetechnologie am LRZ	4
NIC-Symposium 2020 am Forschungszentrum Jülich	4
Proceedingsband zum NIC-Symposium 2020 erschienen	5
HLRS erhält EMAS-Zertifizierung	5
Datentransfer im Eiltempo – auch über den Atlantik	6
PRACE Ada Lovelace Award für SuperMUC-NG-Nutzerin Dr. Alice-Agnes Gabriel	6

GCS-HÖCHSTLEISTUNGSRECHNER FÜR COVID-19-FORSCHUNG

Für wissenschaftliche Vorhaben zur raschen Erforschung des COVID-19-Virus stellt das GCS seit dem 16. März Rechenkapazitäten der drei GCS-Supercomputer am HLRS, JSC und LRZ zur Verfügung. Forschende, die sich der Prävention, Eindämmung, Heilung oder Medikamentenentwicklung im Zusammenhang mit der Coronavirus-Pandemie widmen, erhalten bevorzugten Zugang zu den GCS-Höchstleistungsrechnern

sowie umfassenden Support durch die HPC-Experten vor Ort. Alle Rechenzeitanfragen zu diesem Thema werden priorisiert bearbeitet. Unterstützt werden Forschungsvorhaben mit unterschiedlichen Zielen, von der Erforschung des COVID-19-Virus selbst für eine rasche Entwick-

lung geeigneter Impfstoffe und Therapiemaßnahmen, über epidemiologische Forschung zu Modellen und Prognosen in Sachen Krankheitsausbreitung bis hin zur Identifizierung und Ausarbeitung von Maßnahmen zur effektiven Eindämmung der Pandemie. Interessierte Wissenschaftler/innen wurden aufgerufen, sich an die GCS-Geschäftsführung oder direkt an die Leiter der drei GCS-HPC-Zentren zu wenden. ([Link](#))



JUWELS
JSC@GCS

SuperMUC-NG
LRZ@GCS

Hawk
HLRS@GCS

NEUER SUPERCOMPUTER AM HLRS: HAWK

Am HLRS wurde am 19. Februar im Beisein des baden-württembergischen Ministerpräsidenten Winfried Kretschmann, der Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst in Baden-Württemberg, Theresia Bauer, und des Parlamentarischen Staatssekretärs bei der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Dr. Michael Meister, der neue Supercomputer „Hawk“ in Betrieb genommen. Hawk, ein Apollo-System von Hewlett Packard Enterprise (HPE), übertrifft mit seiner Spitzenleistung von rund 26 Petaflops das bisherige HLRS-Flaggschiff-System Hazel Hen um das 3,5fache. Damit ist Hawk einer der leistungsfähigsten Supercomputer der Welt und das schnellste General-Purpose-System für universelle Anwendungen im akademischen und industriellen Bereich in ganz Europa. Neben der Unterstützung der akademischen Forschung ermöglicht das HLRS auch der Privatwirtschaft den Zugang zu seinen Supercomputingtechnologien. Mit bis zu 10% von Hawks Rechenzeit wird die Digitalisierung der Wirtschaft in Baden-Württemberg und Deutschland maßgeblich unterstützt. Die Hälfte der Mittel für Hawk in Höhe



Im Rechnerraum des HLRS. Von links: Staatssekretärin Gisela Splett, Landtagsabgeordnete Sabine Kurtz, Parlamentarischer Staatssekretär Michael Meister, Ministerin Theresia Bauer, Ministerpräsident Winfried Kretschmann, HLRS-Direktor Michael Resch, HPE Chief Sales Officer Heiko Meyer. © Ben Derzian für HRLS

von insgesamt 38 Millionen Euro wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) bereitgestellt. Die andere Hälfte steuerte das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg bei. Die Abwicklung erfolgte durch das Gauss Centre for Supercomputing (GCS). ([Link](#))

GCS-TEAM GEWINNT INTERNATIONALEN „DATA MOVER AWARD“



Ein Team aus GCS-Vertretern, das in zentrumsübergreifender Formation erstmals an einem internationalen HPC-Wettbewerb (High-Performance Computing) teilgenommen hatte, ging als stolzer Gewinner der Kategorie „Best Systemic Approach“ der internationalen „SCA Data Mover Challenge“ hervor.

Der Wettbewerb, ausgerufen im Rahmen der diesjährigen SupercomputingAsia-Konferenz (SCA20), hatte zur Aufgabe, sehr große Datensätze so schnell und effizient wie möglich rund um den Globus zu transferieren. Dies nahm das GCS-Team bestehend aus Vertretern der drei GCS-Zentren HLRS, JSC und LRZ zum Anlass, zu beweisen, dass das am JSC entwickelte UNICORE File Transfer Protokoll (UFTP) nicht nur für den Versand großer Datenmengen zwischen der drei GCS-Zentren hervorragend geeignet ist, sondern auch für den Transfer großer Datenpa-

kete rund um den Globus. Der Testdatensatz umfasste insgesamt 1 Terabyte an Daten, wobei die Dateigrößen zwischen wenigen Kilobyte und mehreren Gigabyte stark variierten. Diese Testdaten mussten so schnell und für den Benutzer so unkompliziert wie möglich zwischen verschiedenen Standorten übertragen werden. Da die Gewinner des Wettbewerbs bereits im Vorfeld der SCA identifiziert worden waren, wurden die Auszeichnungen trotz der wegen der Corona-Pandemie kurzfristig abgesagten SCA20-Konferenz online bekanntgegeben. ([Link](#))

EU-PROJEKT SANO ZUR RECHNERGESTÜTZTEN MEDIZIN



Das Forschungszentrum Jülich ist einer von sechs Partnern aus Polen, Großbritannien und Deutschland, die im EU-Teaming-Projekt Sano in den nächsten sieben Jahren ein Zentrum für computergestützte personalisierte Medizin in Krakau, Polen aufbauen. Sano, ausgestattet mit Fördermitteln von insgesamt 30 Mio. €, soll hierzu neue Algorithmen, Model-

le und Simulationsmethoden für die personalisierte Medizin entwickeln und darauf aufbauende diagnostische und therapeutische Lösungen in die klinische Praxis bringen. Zu diesem Zweck arbeitet Sano eng mit einem Netzwerk aus Krankenhäusern und Unternehmen des rasch wachsenden Gesundheits- und Biowissenschaftssektors in und um Krakau zusammen. Ein weiterer Fokus des Projekts ist der Aufbau von spezialisierten Studien- und Ausbildungsgängen in

der computergestützten Medizin. Die Beiträge Jülichs, insbesondere in den Bereichen Datenmanagement, Software-Infrastruktur und fachspezifische Services, werden vom SimLab Biology am Jülich Supercomputing Centre koordiniert. Wissenschaftlich begleitet wird das Projekt durch ein Scientific Committee, in dem u.a. der GCS-Vorstand und LRZ-Leiter Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller sowie Prof. Dr. Holger Gohlke, NIC-Forschungsgruppenleiter am JSC, vertreten sind. ([Link](#))

HOCHRANGIGE AUSZEICHNUNG FÜR PROF. KURT BINDER (UNIVERSITÄT MAINZ)

Prof. Dr. Kurt Binder, langjähriger stellvertretender Vorsitzender des GCS-Lenkungsausschusses, langjähriger Vorsitzender des Wissenschaftlichen Rats des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) und Professor an der Johannes Gutenberg Universität Mainz, wurde von der American Physical Society mit dem „2020 Polymer Physics Prize“ ausgezeichnet. Damit wurden speziell seine herausragenden Beiträge zur statistischen Physik der Polymere, insbesondere Phasenübergänge und kritische Phänomene, und seine Demonstration der Rolle von Polymeren als Schlüsselsysteme zur Untersuchung zentraler Konzepte der modernen Physik der kondensierten Materie gewürdigt. Besonders bemerkenswert ist,



Prof. Dr. Kurt Binder (auf dem NIC-Symposium 2016.) © FZJ

dass diese Auszeichnung durch eine Theorie und Experiment übergreifende Fachorganisation erfolgte, die normalerweise nicht die „Computational Sciences“ zum Fokus hat, sondern die breite Wirksamkeit der ausgezeichneten Arbeiten hervorhebt. Diese Arbeiten und wissenschaftlichen

Erfolge wären – laut Binder – nicht möglich gewesen ohne die nachhaltige Unterstützung mit Supercomputer-Ressourcen. Sein ausdrücklicher Dank gilt daher dem NIC und dem Forschungszentrum Jülich, deren Supercomputer er und seine Gruppe seit 1982 kontinuierlich nutzen.

PROJEKT ArKtIK: NEUE ADSORPTIONSKÄLTETECHNOLOGIE AM LRZ

Seit 2011 setzt das LRZ auf warmes Wasser, um seine Supercomputer zu kühlen. Im Winter heizt die dabei abgeführte Abwärme die Flure und Büros des LRZ, mit Hilfe von speziellen Geräten könnten sie aber auch dabei helfen, Speichersysteme, Netzwerkkomponenten und weitere Technik, durch die kein Wasser fließen kann und darf, mit kalter Luft zu kühlen: Im März 2020 startet daher das Forschungsprojekt ArKtIK, das das Bundesministerium für Bildung und Forschung

für 2,5 Jahre finanziert. ArKtIK steht dabei für Adsorptionskältetechnologie für Informationstechnologie-Kühlung. Partner im Vorhaben sind Rechnerhersteller Megware, der Betreiber von Rechenzentren Cloud&Heat sowie InvenSor, Spezialist für Adsorptionskühlung. Ziel von ArKtIK wird sein, Adsorptionstechnik an niedrigere Temperaturen anzupassen, außerdem sollen die Geräte einfacher mit Computern kombiniert werden können. „Normalerweise sind Adsorptionskältemaschinen

auf Temperaturen über 70 Grad Celsius ausgelegt, selbst am LRZ mit unserer weltweit führenden Heißwasserkühlung sind wir unter 60 Grad“, erklärt Michael Ott (LRZ). „Adsorber arbeiten mit drei Wasserkreisläufen, die auch noch verbunden werden müssen, das erhöht den Installationsaufwand.“ Alternativen bieten kompakte Geräte, die in Computerracks eingebaut werden. Hierzu muss bestehende Technik jedoch angepasst und weiterentwickelt werden.

NIC-SYMPOSIUM 2020 AM FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH

Am 27. und 28. Februar 2020 fand am Forschungszentrum Jülich das 10. NIC-Symposium statt. Auf dieser Veranstaltung präsentierten Forschende ihre Aktivitäten und Ergebnisse, die in den letzten zwei Jahren mit Hilfe der JSC-Supercomputer – JUWELS und JURECA – durch die vom John von Neumann-Institut für Computing (NIC) bewilligten Forschungsprojekte erzielt wurden. Die eingeladenen Vorträge und eine Postersession mit 120

Postern behandelten vielfältige Themen aus den Bereichen Astrophysik, Biologie, Chemie, Elementarteilchenphysik, Material- und Materiewissenschaften, Erde und Umwelt, Computerwissenschaften und numerische Mathematik, Strömungsmechanik und Plasmaphysik. Mit über 200 Teilnehmern war das Symposium sehr gut besucht. Dies freute auch Prof. Thomas Lippert, den Direktor des Jülich Supercomputing Centre (JSC) und des NIC, der

in seinem Einführungsvortrag die enorme Bedeutung des Exascale-Computing, das die HPC-Landschaft in den kommenden Jahren prägen wird, hervorhob und einige Einblicke in die Entwicklung des Exascale-Computing am JSC gab. Darüber hinaus informierte er über den neuesten Stand des JUWELS-Booster-Moduls, das im Laufe dieses Jahres installiert und den Wissenschaftlern zur Verfügung gestellt werden soll. ([Link](#))



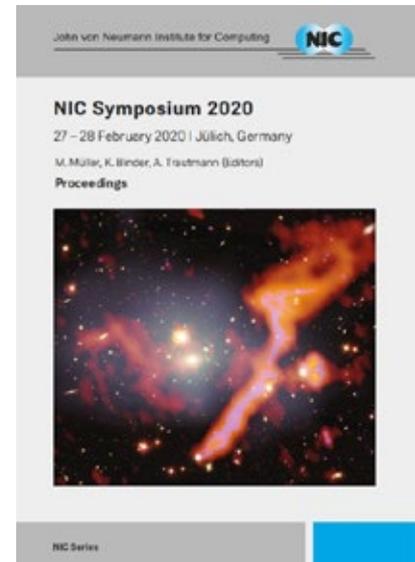
Teilnehmer des NIC-Symposiums 2020 in Jülich © Forschungszentrum Jülich GmbH / Ralf-Uwe Limbach

PROCEEDINGSBAND ZUM NIC-SYMPIOSIUM 2020 ERSCHIENEN

Begleitend zum NIC-Symposium am Forschungszentrum Jülich erschien der Symposiumsband mit Beiträgen ausgewählter Projekte auf den JSC-Superrechnern. Diese Beiträge umfassen außer den auf der Tagung präsentierten Vorträgen auch weitere Artikel, die thematisch ein breites wissenschaftliches Spektrum abdecken und sich u.a. mit subatomaren Teilchen, Materialforschung, Biologie, Chemie, Medizin, Strömung sowie Themen aus der Klimafor- schung und Strömungsmechanik, Mathematik und Informatik bis hin zu astronomischen Fragestellungen beschäftigen. Darüber hinaus informiert der Leitartikel

von E. Suarez et al. über die Aktivitäten des JSC im Hinblick auf das Exascale-Computing. Hierbei wird insbesondere auf das Modulare Supercomputing eingegangen. Außerdem steuerten die Forschungsgruppen des NIC ein eigenes Kapitel bei. Ebenso wurde den herausragenden Simulationsprojekten, die in den letzten zwei Jahren als NIC-Exzellenzprojekt ausgezeichnet wurden, ein eigenes Kapitel gewidmet.

Die Proceedings sind online verfügbar unter <http://hdl.handle.net/2128/24435>.



Titelblatt der Proceedings des NIC-Symposiums 2020 © Forschungszentrum Jülich GmbH

HLRS ERHÄLT EMAS-ZERTIFIZIERUNG



Als erstes Tier-0/1-Rechenzentrum hat das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) die Zertifizierung gemäß EMAS (Eco-Management and Audit Scheme) erworben. Das auch als Umwelt-Audit bekannte EMAS wurde von der Europäischen Union entwickelt und ist ein Gemeinschaftssystem aus Umweltmanagement und Umweltbetriebsprüfung. Für das HLRS bedeutet diese Auszeichnung, sich zu noch umfangreicheren Nachhaltigkeitsmaßnahmen zu verpflichten, als dies im Rahmen der bereits im November 2019 erworbenen ISO-Zertifizierungen 14001 und 50001 definiert wurde.

Für EMAS-Teilnehmende besteht die Pflicht, jährlich eine aktualisierte Umwelterklärung, in der über die direkten oder indirekten Auswirkungen des Unternehmens auf die Umwelt, seine Umweltleistung und seine Umweltziele berichtet wird, zu veröffentlichen.

Die Umwelterklärung wurde nun auf der Website des HLRS publiziert: www.hlrs.de/de/about-us/media-publications/environmental-statement

DATENTRANSFER IM EILTEMPO – AUCH ÜBER DEN ATLANTIK



Prof. Dieter Kranzlmüller (LRZ) vor dem NERSC-Supercomputer Cori. © LRZ

Parallel einhergehend mit den fortlaufend leistungsfähiger werdenden HPC-Systemen sind stetig wachsende Berge an Daten, die nicht nur bearbeitet und ausgewertet, sondern auch gespeichert und ggf. innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinde ausgetauscht werden wollen. Das LRZ bietet mit dem Data Science Storage (DSS) Service einen innovativen Dienst, der es erlaubt, sehr

große Datenmengen nicht nur innerhalb des LRZ-Ökosystems oder über das DFN-Netz, sondern auch weltweit zu teilen - und dies komfortabel per Mausklick über eine einfach zu bedienende grafische Benutzeroberfläche im Web. In einem gar rekordverdächtigen Tempo wurde dies kürzlich bei der Weitergabe von Daten an Wissenschaftler im 9000 km entfernten Kalifornien unter Beweis gestellt. Forscher des NERSC (National Energy Research Scientific Computing Center) waren an Berechnungen interessiert, die Wissenschaftler des Instituts für Physik und Astronomie der Universität Potsdam auf SuperMUC durch-

geführt hatten. In Verbindung mit [Globus Online](#), einem gemeinnützigen Dienst zum Transfer und Sharing von Forschungsdaten der Universität Chicago und dem Argonne National Lab, konnten dank DSS die insgesamt 500 Terabyte umfassenden Daten mit einer Geschwindigkeit von 4,5 GB pro Sekunde von Garching an das NERSC am Lawrence Berkeley National Laboratory in Kalifornien übertragen werden. Die hohe Geschwindigkeit der Datenübertragung durch Leitungen und über Kontinente hinweg ist möglich, weil das NERSC über ähnlich leistungsfähige Netzwerk- und Speichersysteme verfügt. ([Link](#))

PRACE ADA LOVELACE AWARD FÜR SUPERMUC-NG-NUTZERIN DR. ALICE-AGNES GABRIEL

Durch die Kombination verschiedener numerischer Modelle konnte Alice-Agnes Gabriel mit ihrem Team am LRZ-Höchstleistungsrechner SuperMUC-NG neue Erkenntnisse zum Tsunami-Rätsel von Palu/Indonesien gewinnen: Nicht (nur) Erdbeben am Steilufer lösten die Riesenwelle aus, sondern schnelle Risse am Meeresboden und die enge Tektonik der schmalen Bucht haben wesentlich dazu beigetragen. Dafür und für weitere rechengestützte Erdbeben Szenarien wird die Geophysikerin, die als akademische Rätin an der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) forscht und lehrt, mit dem PRACE Ada Lovelace Award ausgezeichnet. Diese Auszeichnung für besonders erfolgreich im HPC-Bereich tätige Wissenschaftlerinnen wird von der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) seit 2016 jährlich vergeben. Dr. Gabriel hat sich auf die numerischen und mathematischen Problemlösungen in der Seismologie spezialisiert, High Performance Computing (HPC) gehört damit zu ihrem Alltag. Mit ihrer Forschung

aber auch mit ihrer Lehre leistet sie einen herausragenden Beitrag für die HPC- und Geophysik-Community in Europa und weltweit. Ihre Arbeit wurde bereits für mehrere Preise nominiert und ausgezeichnet, darunter der Best Paper Award SC17, mit dem ein Panel internationaler Juroren das beste wissenschaftliche Paper der jährlich stattfindenden Supercomputing Conference (SC) würdigt, und eine Nominierung für den Gordon-Bell-Preis 2014, der von der Association for Computing Machinery (ACM) ebenfalls auf der SC vergeben wird. ([Link](#))



Dr. Alice-Agnes Gabriel © LMU