

News

Januar 2019

Flashback:
Erfolgreiches bwHPC-Symposium

bwHPC-Nutzerumfrage
bwHPC-Schulungen
E-Science-Tage 2019

Projektstart des Begleitprojektes bwHPC-S5
Positive DFG-Begutachtung für JUSTUS II

Flashback: Erfolgreiches bwHPC- Symposium



Wissenschaft erfolgreich vereint: bwHPC-Symposium und ZKI AK Supercomputing in Freiburg

Am 26. und 27. September 2018 richtete die Universität Freiburg das inzwischen fünfte bwHPC-Symposium aus. Während am ersten Tag interessante Vorträge von Forscherinnen und Forschern einen Eindruck davon vermitteln, für welche unterschiedlichen Zwecke sie das „High

Performance Computing“-Angebot im Land einsetzen, knüpfte der zweite Tag mit dem Start des Projektes bwHPC-S5 („Scientific Simulation and Storage Support Services“) an.



Foto: Jonathan Bauer/RZ Universität Freiburg

Anschließend fand die ZKI AK Supercomputing (Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung e. V. Arbeitskreis Supercomputing) statt. Der Arbeitskreis bietet ein Forum für den Erfahrungsaustausch für alle, die sich sowohl für die Beschaffung und den Betrieb, als auch für die Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern oder Rechnerclustern in der Wissenschaft interessieren.

Flashback: Erfolgreiches bwHPC- Symposium



Die Eröffnungsrede wurde von Prof. Dr. Gunther Neuhaus, dem Vizerektor und Prorektor für Forschung an der Universität Freiburg, gehalten. Im Anschluss hielt Peter Castellaz, der Referatsleiter des Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden Württemberg (MWK), eine kurze Ansprache zur Begrüßung aller Teilnehmenden. Nachfolgend, sorgten renommierte Wissenschaftler für ein vielfältiges Programm mit interessanten Vorträgen. Teil des Symposiums war auch eine Postersession. Während der Vortragspausen konnten die Teilnehmer über circa 20 Poster diskutieren. Die Poster präsentierten sehr unterschiedliche Themen, von der Struktur des bwHPC Projektes, über Ressourcen-Beschreibung, bis hin zu konkreten wissenschaftlichen Ergebnissen in den einzelnen Fachgebieten.

Das fünfte bwHPC-Symposium hat sein Ziel erreicht – es diente auch als Ort des Austausches zwischen den Rechenzentren und den Anwenderinnen und Anwendern. Es konnte hierbei eine Brücke von der Grundinfrastruktur zu den betrieblichen Aufgaben geschlagen werden.

Das Symposium findet jährlich im Herbst an einer der an bwHPC-beteiligten Einrichtungen statt und wurde in den Vorjahren an der Universität Tübingen (2017), Universität Heidelberg (2016), Universität Ulm (2015) und dem Karlsruher Institut für Technologie (2014) abgehalten.

Im kommenden Jahr findet das bwHPC-Symposium an der Universität Mannheim statt.

bwHPC-Nutzerumfrage



Nehmen Sie an unserer Umfrage teil

Im Rahmen der Landesinitiative bwHPC werden durch unser landesweites Team Aktivitäten des Hochleistungsrechnens (HPC), des datenintensiven Rechnens (DIC) und des Managements großer, wissenschaftlicher Datenmengen (LS²DM) der baden-württembergischen Universitäten und Hochschulen koordiniert. Dazu gehören insbesondere die Unterstützung bei technischen und wissenschaftlichen Fragen und ein umfangreiches Schulungsprogramm.



Zur stetigen Qualitätsverbesserung wird in regelmäßigen Abständen eine Umfrage durchgeführt. Sie dient dazu, nahe an Ihren Bedürfnissen zu sein, unsere Leistungen kontinuierlich zu optimieren und Ihren Wünschen näher zu kommen.

Durch Ihre Teilnahme an dieser Umfrage unterstützen Sie uns in der Beschaffung neuer Rechner. Auch haben Sie die Möglichkeit, Wünsche und Kritik zu äußern und uns zu helfen, unsere Aktivitäten für Sie zu optimieren.

Link zur bwHPC-Nutzerumfrage:

<https://survey.uni-stuttgart.de/evasys/online.php?p=bwhpcs5>

Text: Marion Moser/Universität Ulm

Das bwHPC Schulungsangebot



Workshops

bwHPC bietet ein landesweites Schulungsprogramm an, das sich sowohl an Anfänger als auch an Fortgeschrittene richtet und u. a.



Foto: HLRS

Einführungskurse zur Benutzung der bwHPC-Cluster, Kurse zu Programmiersprachen und zum parallelen Programmieren sowie Einführungen in wissenschaftliche Applikationen umfasst. Das aktuelle Kursangebot und Informationen zur Registrierung finden Sie auf der Seite 6 des Newsletter und unter

https://training.bwhpc.de/ilias/goto.php?target=dcl_96_41&client_id=bwhpc

Online-Kurse

Um einen ständigen, ortsunabhängigen Zugang zu Informationen zu gewährleisten, bauen wir auf unserer Trainingsplattform training.bwhpc.de Online-Kurse zum Selbststudium auf. Der Kurs „Introduction to bwHPC“ bietet erste Schritte für Anfänger (Login, Datentransfer) und erklärt die Benutzung des Batch -Systems. Der Einführungskurs „Linux Basics“ bietet eine knappe und präzise Anleitung zur Verwendung von Linux auf den bwHPC-Clustern. Hier geht's zu den E-Learning-Kursen:



https://training.bwhpc.de/ilias/goto.php?target=cat_306&client_id=bwhpc

Ankündigungen: bwHPC-Schulungen



Niveau	Thema	Titel	Kurs- beginn	Kurs- ende	Ort
Advanced course	Simulation	CFD with OpenFOAM	11.03. 2019	15.03. 2019	Universität Stuttgart
					hls.de/training/2019-03-11-of1
Advanced course	Tools	Iterative Linear Solvers and Parallelization	25.03. 2019	29.03. 2019	Universität Stuttgart
					hls.de/training/2019-03-25-iter-s
Advanced course	Programming	Fortran for Scientific Computing	06.05. 2019	10.05. 2019	Universität Stuttgart
					hls.de/training/2019-04-01-ftn1
Basic course	Introduction	High-Performance Computing (HPC) in Baden-Württemberg	09.04. 2019	09.04. 2019	KIT Karlsruhe
					indico.scc.kit.edu..._course_2019-04-09
Advanced course	HPC utilization	High-Performance Computing (HPC) in Baden-Württemberg	10.04. 2019	10.04. 2019	KIT Karlsruhe
					indico.scc.kit.edu..._course_2019-04-10

E-Science Tage 2019



E-Science-Tage 2019: Data to Knowledge

Vom 27. bis 29. März 2019 finden die E-Science-Tage 2019 "Data to Knowledge" in Heidelberg statt. Nachdem die ersten E-Science-Tage 2017 unter dem Motto "Forschungsdaten managen" standen, setzt die Neuauflage einen neuen Akzent und rückt den Forschungsaspekt mehr in den Mittelpunkt. Die Sicht auf Daten wird ergänzt durch die Suche nach dem Wissen, das in den Daten steckt. Die E-Science-Tage 2019 orientieren sich an den Leitfragen:

- ✓ Wie entsteht aus Daten neues Wissen?
- ✓ Wie wird das Wissen geteilt und erhalten?

Ausgehend vom Forschungsdatenmanagement, das ein zentrales Thema bei den E-Science-Tagen ist und bleibt, wird eine Brücke geschlagen von Konzepten, Technik, Infrastrukturen und Diensten hin zur Forschung und zum Erkenntnisgewinn, der aus der Untersuchung von Daten entsteht.

E-SCIENCE-TAGE

Link zu den E-Science-Tagen: <https://www.e-science-tage.de>

Text: Fabian Gebhart/Universität Heidelberg

7

Projektstart des Begleitprojektes: bwHPC-S5



Das Projekt bwHPC-S5 (S5 für „Scientific Simulation and Storage Support Services“) ist ein Begleitprojekt zum Umsetzungskonzept der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für das Hochleistungsrechnen (HPC), Data Intensive Computing (DIC) und Large Scale Scientific Data Management (LS²DM).

Es startete am 1. Juli 2018 und knüpft an das Projekt bwHPC-C5 an.



Das Begleitprojekt bündelt die Fachkompetenzen in den Bereichen HPC, DIC und LS²DM und stellt den Wissenschaftlern einen Anknüpfungspunkt zur Nutzung dieser Dienste bereit.

bwHPC-S5 erweitert das in den Vorgängerprojekten etablierte förderative Dienstemanagement um Aspekte der Erfassung, Verarbeitung, Speicherung und Archivierung großer wissenschaftlicher Datensätze. bwHPC-S5 bietet den Nutzern im Land Baden-Württemberg einen umfassenden und bedarfsorientierten Service rund um die vorhandenen HPC-, DIC- und LS²DM-Systeme.

Projektstart des Begleitprojektes: bwHPC-S5



bwHPC-S5 bietet den Nutzern im Land einen umfassenden Service rund um die vorhandenen HPC-, DIC- und LS²DM-Systeme. Darunter sind:

- ✓ Unterstützung beim Einstieg in die Nutzung der HPC-Systeme der Ebene 3
- ✓ Unterstützung der Nutzer bei der Parallelisierung ihrer Codes und bei HPC-Anwendungen und beim Übergang auf höhere HPC-Leistungsebenen
- ✓ Unterstützung beim datenintensiven Rechnen (DIC) und beim Management umfangreicher wissenschaftlicher Daten (LS²DM)
- ✓ Bereitstellung eines landesweit abgestimmten Schulungsprogrammes für HPC, DIC und LS²DM
- ✓ Bereitstellung von technischen Dokumentationen und effizienten Nutzungen der Systeme
- ✓ Bereitstellung von Entwicklerwerkzeugen und wissenschaftlichen Anwenderprogrammen
- ✓ Bereitstellung eines landesweiten Supportportals für die Nutzer der Systeme.

Positive DFG- Begutachtung für JUSTUS II



Durchbrüche in den Naturwissenschaften finden nicht mehr ausschließlich im Labor statt: An über 300 Veröffentlichungen der vergangenen Jahre hat der Ulmer Supercomputer JUSTUS einen erheblichen Anteil. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) hat nun einer Erneuerung des „bwForCluster JUSTUS“ in Höhe von insgesamt 4,7 Millionen Euro zugestimmt.

Die Ko-Finanzierung des Nachfolge-Clusters „Computational Chemistry and Quantum Sciences“ durch das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst (MWK) erfolgt im Zuge der Digitalisierungsstrategie digital@bw. In Zukunft soll die Rechenleistung des Ulmer Supercomputers nicht nur Chemikern zur Verfügung stehen, sondern auch Forschenden aus Quantentechnologie und Festkörperphysik.

Am Forschungscluster „JUSTUS“ konnten zunächst Forschende aller Landesuniversitäten im Bereich theoretische Chemie die Rechenleistung dieses Hochleistungscomputers nutzen. Das nun bewilligte Nachfolgesystem wird darüber hinaus Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus den Quantenwissenschaften sowie der Festkörperphysik offen stehen. Insbesondere bei der Übertragung von Erkenntnissen aus der



Hochleistungsrechner JUSTUS Foto: Elvira Eberhardt/kiz

Quantentechnologie in die Praxis sind Computersimulationen wertvolle Ergänzungen zu Theorie und Experiment. Dabei reichen Anwendungsgebiete von der Biomedizin bis zur Batterieforschung.

Positive DFG- Begutachtung für JUSTUS II



„Neben Theorie und Experiment gewinnt die Simulation gerade in den Naturwissenschaften immer mehr an Bedeutung. Daher ist die Förderung des Forschungsclusters Computational Chemistry and Quantum Sciences an der Universität Ulm ein großer Erfolg. Gerade auch für die an der Universität Ulm besonders starken Forschungsschwerpunkte Quantentechnologie sowie Energiespeicherung und -wandlung bieten sich hier hervorragende Möglichkeiten“, sagen Universitätspräsident und Informatik-Professor Michael Weber und Forschungs-Vizepräsident Professor Joachim Ankerhold.

Die Erneuerung des Forschungsclusters folgt den strategischen Zielen der baden-württembergischen Universitäten für das High Performance Computing (HPC) sowie für die Speicherung und Verarbeitung großer wissenschaftlicher Datenmengen. Am Standort Ulm steht durch das "HPC Kompetenzzentrum Computational Chemistry and Quantum Sciences" den Forschenden zudem ein Team mit IT-Sachverstand und Expertise in der Unterstützung von Anwendern aus den genannten Fachbereichen zur Seite.

Das MWK unterstützt mit seiner Strategie zum High Performance und Data Intensive Computing (DIC) den Ausbau der digitalen Infrastruktur in Baden-Württemberg. Dazu hat das Ministerium der DFG mehrere Anträge vorgelegt: Parallel zum Ulmer Forschungscluster wurden Projekte an den Universitäten Freiburg, Tübingen, Heidelberg sowie am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) bewilligt.



Hochleistungsrechner JUSTUS Foto: Elvira Eberhardt/kiz

Wir blicken zurück



Ein erfolgreiches Jahr ging zu Ende und wir hoffen, dass wir auch in 2019 gemeinsam an diesen Erfolg anknüpfen können.

Das bwHPC-Team wünscht Ihnen in diesem Sinne ein frohes und erfolgreiches neues Jahr!



Impressum



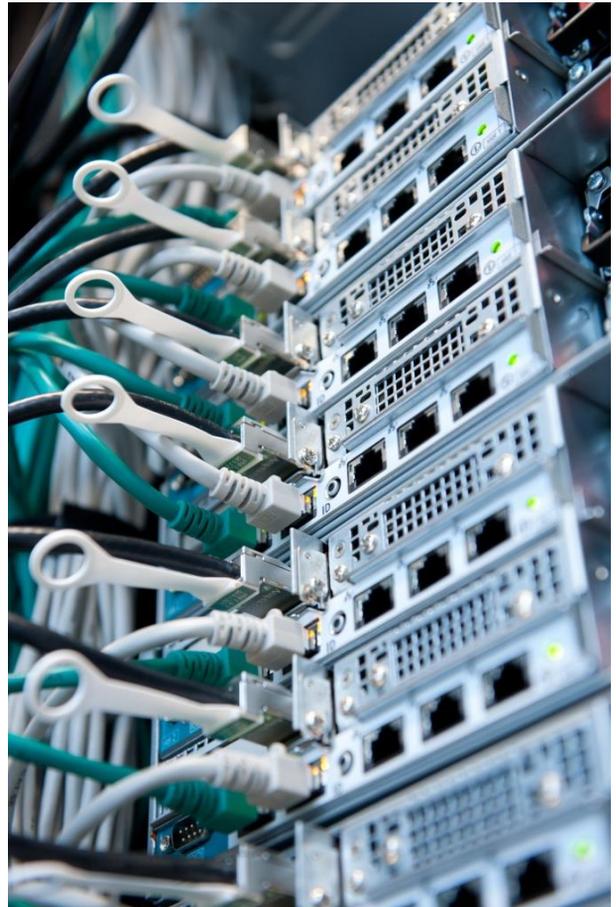
Herausgeber:

bwHPC Projektleitung
Steinbuch Centre for Computing
Karlsruher Institut für Technologie
(KIT)
Kommunikations- und
Informationszentrum (kiz)
Universität Ulm
E-Mail: office@bwHPC.de

Redaktion & Layout :

Marion Moser, Universität Ulm
Telefon: +49 (0)731 50-22483
Telefax: +49 (0)731 50-22471
E-Mail: marion.moser@uni-ulm.de

»Für den Inhalt der Textbeiträge
und die verlinkten Seiten sind
ausschließlich die jeweiligen
Autoren bzw. Autorinnen
verantwortlich«



Hochleistungsrechner JUSTUS
Foto: Elvira Eberhardt/kiz

Die Redaktion verwendet eine gendergerechte Sprache. In Einzelfällen kann es aus Gründen der leichteren Lesbarkeit zu Abweichungen kommen. Wir weisen an dieser Stelle ausdrücklich darauf hin, dass sowohl die männliche als auch die weibliche Schreibweise für die entsprechenden Beiträge gemeint sind.

Für weitere Informationen besuchen Sie www.bwhpc.de

