

News

March 2020

NEW! bwUNICluster 2.0 & JUSTUS 2

Upcoming bwHPC Courses

**Announcements: Vampir Software, bwHPC
User Survey & ISC-High Performance 2020**

Inauguration Supercomputer HAWK

Workshop on Urban Challenges

We present our Competence Center ENM

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



bwUniCluster 2.0 in Betrieb gegangen

Das SCC nahm am 17.03.2020 im Rahmen des baden-württembergischen Umsetzungskonzepts für Hochleistungsrechnen (bwHPC) das neue Parallelrechnersystem „bwUniCluster 2.0+GFB-HPC“ (kurz bwUniCluster 2.0) als Landesdienst in Betrieb.

Der bwUniCluster 2.0 ersetzt das Vorgängersystem „bwUniCluster“ und umfasst auch die im November 2016 beschaffte Erweiterung des Vorgängersystems. Das moderne, erweiterte HPC-System besteht aus mehr als 840 SMP-Knoten mit 64-bit Xeon Prozessoren von Intel. Es

dient der Grund- und Lehrversorgung der Universitäten des Landes Baden-Württemberg mit Rechenleistung und kann von den Studentinnen und Studenten sowie von den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern aller Universitäten in Baden-Württemberg unentgeltlich



Photo by Simon Raffener/KIT

genutzt werden. Die Zugangs-

berechtigung zu diesem System regelt jede Landesuniversität für ihre Studentinnen und Studenten sowie Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter selbst. Nutzer, welche kürzlich Zugang zum bwUniCluster 1 hatten, haben automatisch auch Zugang zum bwUniCluster 2.0. Die Beantragung neuer Entitlements oder eine Neuregistrierung sind nicht nötig.

Weitere Informationen:

[Technische Beschreibung bwUniCluster 2.0](#)

Details zu Registrierung und Zugang:

wiki.bwhpc.de/e/bwUniCluster_2.0

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



bwUniCluster 2.0 went into operation

As part of the Initiative for High Performance Computing, Data Intensive Computing and Large Scale Scientific Data Management in Baden-Württemberg (bwHPC) the SCC put the new parallel computer system bwUniCluster 2.0 into operation as a federated service on March 17th, 2020.

The bwUniCluster 2.0 replaces the predecessor system "bwUniCluster" and also includes the extension of the predecessor system procured in November 2016. The modern, advanced HPC system consists of more than 840 SMP nodes with 64-bit Xeon processors from Intel. It provides the universities of the state of Baden-Württemberg with basic computing power and can be used free of charge by the students and staff of all universities in Baden-Württemberg.

Access is granted via the bwIDM federal identity management, regulated by each university individually. Users who recently had access to bwUniCluster 1 will automatically also have access to bwUniCluster 2.0. There is no need to apply for new entitlements or re-register.

Further information:

[Technical description of bwUniCluster 2.0](#)

Details to registration and access at

wiki.bwhpc.de/e/bwUniCluster_2.0

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



Neuer Hochleistungsrechner eingeweiht JUSTUS 2 ermöglicht komplexe Simulationen in Chemie und Quantenphysik

Die Universität Ulm hat einen neuen Hochleistungsrechner: Mit einer theoretischen Leistungsfähigkeit von 2 Petaflops setzt der 4,4 Millionen Euro teure Supercomputer JUSTUS 2 neue Maßstäbe.

Am Freitag, 6. März, drückten unter anderem Ministerialdirektor Ulrich Steinbach (Landesministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst) sowie der Ulmer Universitätspräsident Professor Michael Weber den symbolischen Startknopf. Weiterhin waren Vertreter des Kooperationspartners NEC Deutschland GmbH zur feierlichen Inbetriebnahme angereist.

Wie bereits das Vorgängersystem ist JUSTUS 2 optimal auf die Forschungsbereiche theoretische Chemie sowie Quanten- und Festkörperphysik ausgerichtet. „JUSTUS 2 ermöglicht hochkomplexe Computersimulationen auf molekularer und atomarer Ebene etwa aus der Chemie und der Quantenwissenschaft sowie aufwändige Datenanalysen. Und dies bei einer deutlich höheren Energieeffizienz als sein Vorgänger“, sagte Ulrich Steinbach. „Der neue Hochleistungsrechner wird Forschenden aus ganz Baden-Württemberg zur Verfügung stehen und ist daher – gerade im Hinblick auf die Batterieforschung – eine sehr sinnvolle Investition in die Zukunft unseres Wissenschafts- und Wirtschaftsstandorts.“

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



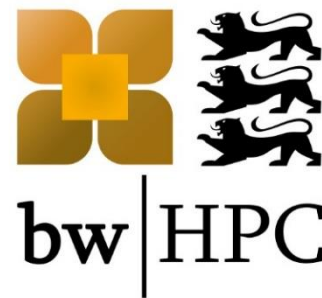
JUSTUS 2 zählt zu den 400 leistungsstärksten Supercomputern der Welt (Stand: KW 10). Mit 33 696 CPU-Kernen entspricht das System 15 000 herkömmlichen Laptops. Gegenüber dem Vorgänger ist eine um das Fünffache gesteigerte Performance zu erwarten. „Die theoretische Höchstleistung von JUSTUS 2 liegt bei mehr als 2 Petaflops. Durch den Einsatz neuester Technologien konnte der auf die Rechenleistung bezogene Energiebedarf gegenüber dem vorherigen System beinahe um Faktor drei verringert werden“, erklärte Professor Stefan Wesner, Leiter des Kommunikations- und Informationszentrum (kiz) der Universität Ulm.

Auch nach der erfolgreichen Inbetriebnahme von JUSTUS 2 wird die Zusammenarbeit mit den Zulieferern NEC Deutschland GmbH und Intel Deutschland GmbH fortgesetzt.

Im Zuge dieser Kooperation werden die Partner gemeinsam Zugriffsmethoden auf Ressourcen des Hochleistungsrechnen (High Performance Computing, HPC) aus der Cloud und für den Einsatz von „machine learning“ in Chemie-Anwendungen entwickeln. „Die Zusammenführung von HPC-Simulation und Datenauswertung mit Methoden der Künstlichen Intelligenz bringt eine neue Qualität in der Nutzung von Hochleistungsrechnern – und NEC steht an vorderster Front dieser Entwicklung“, ergänzte Yuichi Kojima, Geschäftsführer der NEC Deutschland GmbH.

An mindestens 530 wissenschaftlichen Publikationen war der vorherige Supercomputer der Universität Ulm beteiligt – und JUSTUS 2 wird an diese Erfolge anknüpfen: Bereits über 30 Forschergruppen aus ganz Baden-Württemberg wollen seine Rechen- und Speicherleistung zeitnah einsetzen.

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



Bei der effizienten Nutzung unterstützt auch weiterhin das HPC Kompetenzzentrum „Computational Chemistry and Quantum Sciences“ der Universität Ulm. In diesem Kompetenzzentrum steht Forschenden ein Team mit Sachverstand im Hochleistungsrechnen und in den Naturwissenschaften zur Seite.

Bei der Inbetriebnahme von JUSTUS 2 berichtete der Ulmer Quantenphysiker Professor Fedor Jelezko über Einsatzmöglichkeiten des Supercomputers: „Wir werden den Hochleistungsrechner JUSTUS 2 für quantenchemische Berechnungen einsetzen. Mithilfe des Vorgängersystems haben wir bereits die Wellenfunktion so genannter Stickstofffehlstellenzentren in künstlichen Diamanten berechnet sowie die Kopplung dieser Zentren an Kernspins.“ Gemeinsam mit Forscherkollegen hat Jelezko 2019 einen hochkarätigen ERC Synergy Grant über 9,4 Millionen Euro eingeworben. Außerdem profitiert die mit einem Exzellenzcluster geadelte Ulmer Batterieforschung in besonderem Maße von JUSTUS 2.

Über die Donaustadt hinaus zählt Chemie-Professor Andreas Köhn von der Universität Stuttgart zu den wichtigen künftigen Nutzern. Professor Köhn wird mithilfe von JUSTUS 2 die von ihm und seinen Mitarbeitenden entwickelten hochgenauen quantenchemischen Methoden auf Berechnungen an Systemen mit komplexer elektronischer Struktur anwenden – ein Beispiel sind Übergangsmetallverbindungen.

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



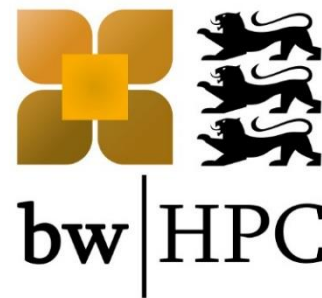
JUSTUS 2 verfügt über 702 Knoten mit je zwei Prozessoren. Das gesamte System ist auf 13 so genannte Racks verteilt, die 2,2 Meter hoch sind. Jedes dieser mit Wasser oder Luft gekühlten Racks wiegt eine Tonne.

Nach Abschluss der Aufbauarbeiten wird das System in den kommenden Wochen zunächst konfiguriert und ausführlich getestet, bevor der Supercomputer in den regulären Benutzerbetrieb übergeben wird. Bis alle Daten migriert sind, werden der Vorgänger JUSTUS und JUSTUS 2 parallel betrieben.

Der neue Hochleistungsrechner der Universität Ulm hat rund 4,4 Millionen Euro gekostet. Das nach dem deutschen Chemiker Justus von Liebig benannte System ist von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), dem Land Baden-Württemberg sowie den Universitäten Ulm, Stuttgart und Freiburg finanziert worden. „Gerade an einer naturwissenschaftlich und technisch ausgerichteten Universität wie Ulm ist Hochleistungsrechnen essentiell notwendig. Daher ist JUSTUS 2 eine bedeutende Investition in die Zukunft unserer strategischen Entwicklungsbereiche und darüber hinaus“, resümierte Informatikprofessor und Universitätspräsident Professor Michael Weber.

Anschließend hatten die Gäste Gelegenheit, den Hochleistungsrechner JUSTUS 2 zu besichtigen.

NEW! bwUniCluster 2.0 & JUSTUS 2



New high-performance computer inaugurated

JUSTUS 2 enables complex simulations in chemistry and quantum physics. The new high performance computer sets new standards with a theoretical performance of 2 petaflops, the 4.4 million euro. On Friday, 6th March, Ministerial Director Ulrich Steinbach (Ministry of Science, Research and the Arts Baden-Württemberg, MWK) and the President of Ulm University, Professor Michael Weber, among others, pressed the symbolic start button.



Photo by Elvira Eberhardt/Ulm University

Representatives of the cooperation partner NEC Deutschland GmbH also attended the official opening ceremony. The previous supercomputer at the University of Ulm was involved in at least 530 scientific publications - and JUSTUS 2 will build on these successes: More than 30 research groups from all over Baden-Württemberg are already planning to use its computing and storage power in the near future.

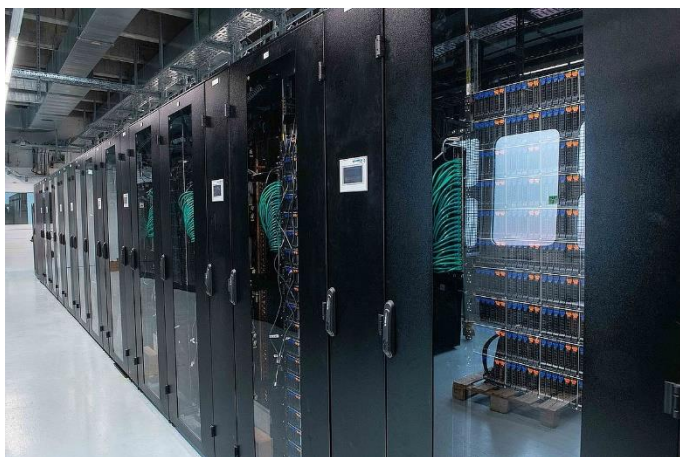
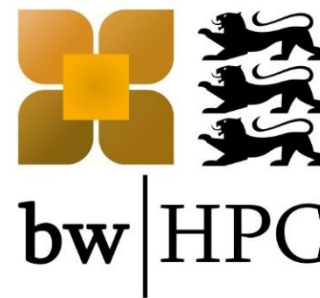


Photo by Elvira Eberhardt/Ulm University

Written by Annika Bingmann/Ulm University

Upcoming bwHPC Courses



Level	Topic	Title	Begin	End	Location
Basic course	Introduction	Introduction to bwHPC and MLS&WISO	15.04. 2020	16.04. 2020	bwHPC eLearning
			Registration by email		
Advanced course	Programming	Fortran for Scientific Computing	20.04. 2020	24.04. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-04-20-ftn1		
Advanced course	Programming	Advanced C++ with Focus on Software Engineering	05.05. 2020	08.05. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-05-05-cpp2		
Basic Course	Tools	35th VI-HPS Tuning Workshop	11.05. 2020	15.05. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-05-11-vi-hps		
Advanced course	Parallel programming	Efficient Parallel Programming with GASPI	18.06. 2020	19.06. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-06-18-gaspi		
Advanced course	Parallel programming	programming Node-Level Performance Engineering	29.06. 2020	01.07. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-06-29-nlp		
Advanced course	Programming	Intermediate C++ with Focus on Software Engineering	07.07. 2020	10.07. 2020	University Stuttgart
			hls.de/training/2020-07-07-cpp3		

Upcoming bwHPC Courses



Level	Topic	Title	Begin	End	Location
Advanced course	Programming	Deep Learning and GPU programming using OpenACC	14.07. 2020	17.07. 2020	University Stuttgart hls.de/training/2020-07-14-dl1
Advanced course	Simulation	Introduction to Computational Fluid Dynamics	14.09. 2020	18.09. 2020	University Stuttgart hls.de/training/2020-09-14-cfd-s
Advanced course	Parallel Programming	Parallel Programming Workshop (MPI, OpenMP and Advanced Topics)	12.10. 2020	16.10. 2020	University Stuttgart hls.de/training/2020-10-12-par

Announcement of the E-Learning course "Introduction to MLS&WISO"

On April 15th and 16th the bwHPC competence center MLS&WISO offers an online training on the use of the bwForCluster MLS&WISO in Mannheim and Heidelberg. The course replaces the Hands-On Workshop of the past years and was adapted to a new format. During the course there is the possibility to ask questions to the course instructors.

Registration is possible from March 30th, 2020 via training.bwhpc.de.

Announcements: Vampir Software & bwHPC User Survey



Vampir Software

The Universities and the Universities of Applied Sciences of the state of Baden-Württemberg have jointly procured a state license for the Vampir software on the bwHPC systems with the support of the MWK.



Photo by vampir.eu

Vampir allows performance analysis of self-developed software with regard to processor, communication and IO performance. The advantage of Vampir are the various analysis functions, the scalable visualization even for very large trace data and the support of own metrics. A first installation can be found on bwUniCluster 2.0. Courses to train usage and performance analysis are planned for users of bwUniCluster and bwForCluster.

Written by Rainer Keller/Hochschule Esslingen

bwHPC User Survey

We have already received numerous feedbacks from the community, for which we thank you very much.

Please take this opportunity until *March 31, 2020* in case you have not already done. There is no obligation to take part in our user survey, however the more inputs we receive, the better we can tailor the project's services to fit your needs.

https://survey.uni-stuttgart.de/evasys/online.php?p=bwHPCS5_20
(NOTE: The survey is only available in German language.)



Written by Marion Moser/Ulm University

11

Announcements: ISC High Performance 2020



ISC High Performance: The HPC Event

The bwHPC project team will be present at the International Supercomputing Conference 2020 (ISC'20) in Frankfurt am Main from June 21 to June 25, 2020 to present the wide range of supported HPC activities in the field of science. At the bwHPC booth no. B-1223 visitors will have the opportunity to get first-hand information on the different HPC clusters of the five bwHPC cluster sites.

VISIT US AT BOOTH # B-1223



THE EVENT FOR HIGH PERFORMANCE COMPUTING, MACHINE LEARNING AND DATA ANALYTICS

For more information visit: <https://www.isc-hpc.com>

Inauguration Supercomputer Hawk



Inauguration Supercomputer Hawk

On February 19, 2020, the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) celebrated the beginning of operation of its next-generation supercomputer, called Hawk HPE Apollo (Hawk) <https://www.hlrs.de/systems/hpe-apollo-hawk>.

For the University of Stuttgart, as well as the state of Baden-Württemberg and Germany as a whole, the event marked the beginning of a new era for advanced academic and industrial research in the computational sciences, simulation, and artificial intelligence, particularly with respect to their applications for engineering.

The recently inaugurated Supercomputer Hawk (tier 1 and 0) as well as the HPC cluster ForHLR (tier 2), both funded from federal and state programs, represent the top of the tier level pyramid of Baden-Württemberg.

**For more
information
visit:**

<https://www.hlrs.de/news/detail-view/2020-02-19>



Photo by Ben Derzian/University Stuttgart

Workshop on Urban Challenges



Hands-On-Workshop KOLLABORATIVE PLANUNG AM VIRTUELLEN STADTMODELL

Am 6. März fand im Rahmen der Morgenstadt Werkstatt 2020 des Fraunhofer-Instituts für Arbeitswirtschaft und Organisation IAQ der Hands-On-Workshop “KOLLABORATIVE PLANUNG AM VIRTUELLEN STADTMODELL - Simulation und Datenvisualisierung im digitalen Zwilling“ statt.

Die rund 20 Teilnehmerinnen und Teilnehmer hatten am Zentrum für Virtuelles Engineering des Fraunhofer IAQ und im Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) die Möglichkeit, digitale Zwillinge (virtuelle Kopien realer Siedlungen), Simulationen zur Berechnung von Klima, Verkehr oder Emissionen sowie deren Visualisierung in virtueller Realität kennenzulernen, auszuprobieren und zu diskutieren. Sie erhielten einen Einblick, wie durch die Einführung nahtloser Abläufe zwischen rechenintensiven Simulationen (HPC) und datenintensiver Analytik (Big Data) große Mengen von Stadt-, Klima- und Verkehrsdaten direkt nach ihrer automatischen Generierung analysiert werden können.



Photo by Fabian Dembski/University Stuttgart

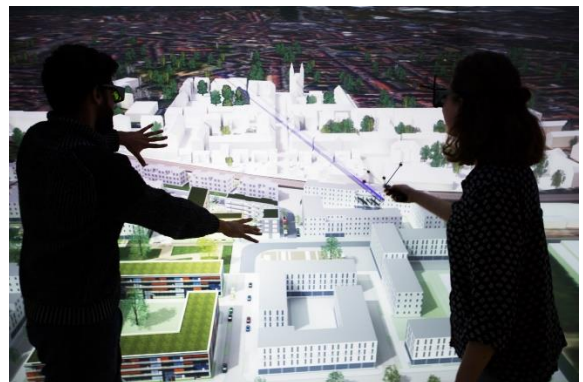


Photo by Fabian Dembski/University Stuttgart

Workshop on Urban Challenges



Der Workshop richtete sich nicht nur an Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, sondern auch an Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus den Bereichen der kommunalen Verwaltungen und zeigte im Rahmen des bwHPC-Kompetenzzentrums Global System Sciences (GSS) den Zugang zu verschiedenen Cluster- und Speicherressourcen in Baden-Württemberg auf.

Für weitere Informationen:

<https://www.iao.fraunhofer.de/lang-de/veranstaltungen/669/morgenstadt-werkstatt-2020.html>

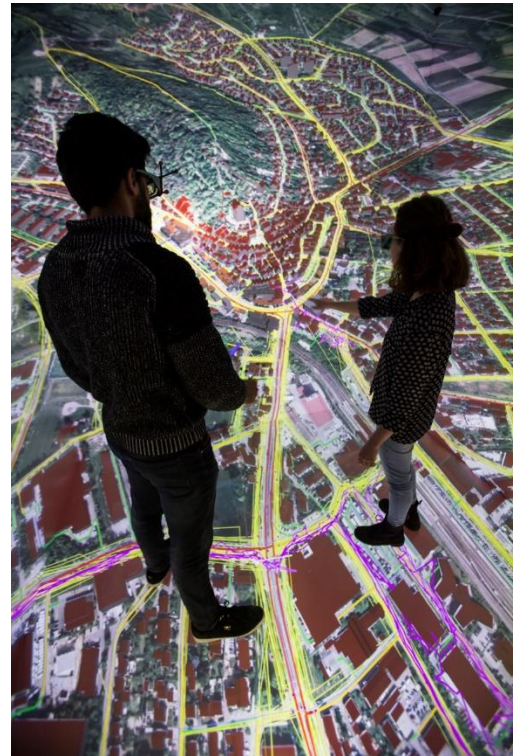


Photo by Fabian Dembski/University Stuttgart

Within the framework of Morgenstadt Werkstatt 2020 of the Fraunhofer Institute for Industrial Engineering IAO, the Hands-On-Workshop “KOLLABORATIVE PLANUNG AM VIRTUELLEN STADTMODELL - Simulation und Datenvisualisierung im digitalen Zwilling“ took place at the Center for Virtual Engineering ZVE and the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) on March 6th.

We present our Competence Center ENM



The Competence Center ENM in Freiburg is one of seven competence centers of the bwHPC initiative in Baden-Württemberg for High Performance Computing (HPC), Data Intensive Computing (DIC) and Large Scale Scientific Data Management (LS²DM).

The Competence Center ENM is a service unit that supports scientists in using the large-scale computational research facilities in Baden-Württemberg. It covers the following scientific fields:

- ❖ Elementary Particle Physics
- ❖ Neuroscience
- ❖ Microsystems Engineering
- ❖ Material Sciences

Closely related to the Competence Center ENM are the bwUniCluster in Karlsruhe and the bwForCluster NEMO in Freiburg. Both are supercomputers with several hundred compute nodes and thousands of compute cores interlinked with a high speed network. They serve as entry-level compute clusters for work groups from the aforementioned fields.

We present our Competence Center ENM

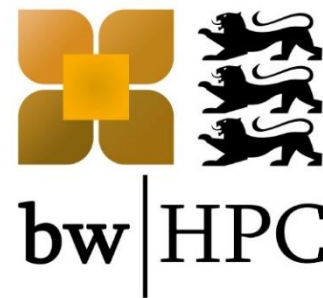


Individual researchers with computational tasks that have outgrown their local workstations are invited to move to the bwUniCluster. Getting access is easy and fast. Following a short, optional e-learning webinar, users will be able to start their first job on the bwUniCluster in no time. Scientists and scientific work groups from the ENM fields with larger computational demands are offered access to the bwForCluster NEMO.

The Competence Center ENM is tasked with supporting scientists from the ENM fields in using these large scale computational resources. Support begins with simple tasks like giving introductory courses, offering consultations for work groups, resolving issues via the ticket system and keeping the bwHPC Wiki updated as a point of reference.

If a scientific work group encounters a complex problem, chances are that the formation of a TigerTeam is beneficial. This is a group of people that can be formed on-demand, consisting of interested work group members, experts from the scientific field and members of the respective competence center.

We present our Competence Center ENM



The bwUniCluster and the bwForCluster NEMO are entry-level supercomputers. Once researchers have experienced – and can make proper use of – the potential of computational power beyond the workstation, it is likely that the researchers begin to scale the scope of their scientific questions to the ability of these new resources. However, scaling computational problems is often a challenge in itself, exposing unexpected bottlenecks. In these cases, the Competence Center ENM can help with consultations and best practices. In time, resolving scaling problems prepares scientific work groups to use even larger computational resources, such as the ForHLR II in Karlsruhe (national scope) or Hawk (European scope) in Stuttgart.



Photo by Michael Janczyk/University Freiburg

We present our Competence Center ENM



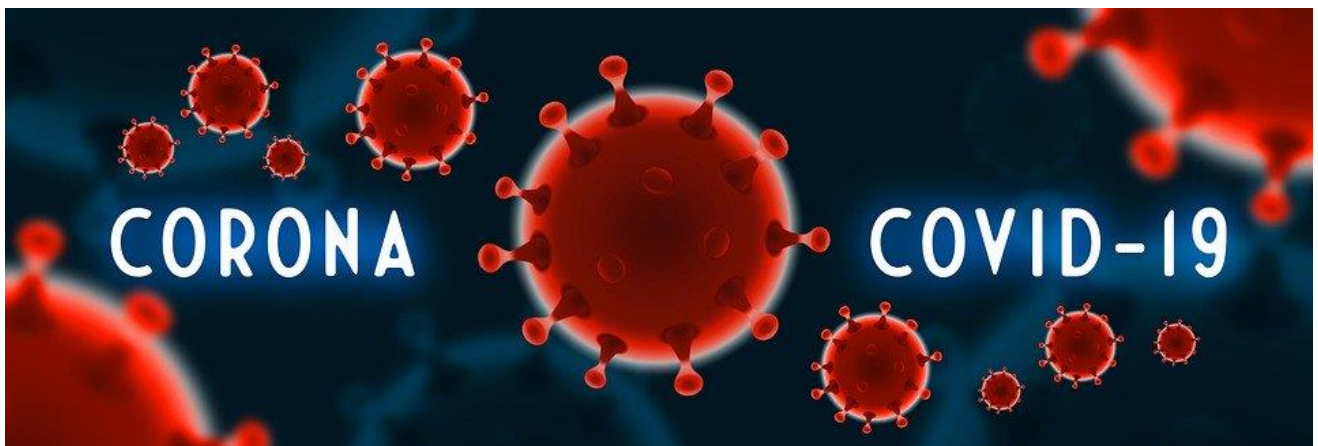
Large scale computational and experimental infrastructures produce large amounts of data. Processing, analyzing and managing this research data has become increasingly challenging. Supercomputers are procured with large, fast and directly attached file systems. However, these are only meant for transient storage. Sustainable storage for research data – not only those produced or processed by supercomputers - has to answer to more diverse demands: Findability, Accessibility, Interoperability and Reusability, referenced in short as FAIR-principles. The Competence Center ENM supports researchers in developing skills to manage their research data with respect to these principles.

You can reach the Competence Center ENM via the website www.hpc.uni-freiburg.de where you can get further information regarding the bwUniCluster and the bwForCluster NEMO. For support questions, you can use the bwHPC ticket system (<https://bw-support.scc.kit.edu>) or the ENM ticket system directly: enm-support@hpc.uni-freiburg.de.

Stay home and stay safe



The COVID-19 pandemic is currently posing major challenges for the population and companies.



The bwHPC team wishes you and your family and your working environment all the best and excellent health.

The bwHPC team is still here for you during coronavirus crisis.



Imprint



Publisher:

bwHPC Project Management
Steinbuch Center for Computing
Karlsruhe Institute for Technology (KIT)

Communication and Information
Center (kiz)

Ulm University

E-mail: office@bwHPC.de

Editorial Office & Layout:

Marion Moser, Ulm University

Phone: +49 (0)731 50-22483

Fax: +49 (0)731 50-22471

E-mail: marion.moser@uni-ulm.de

» For the content of the text
contributions and the linked
sites are exclusively the
respective authors responsible «

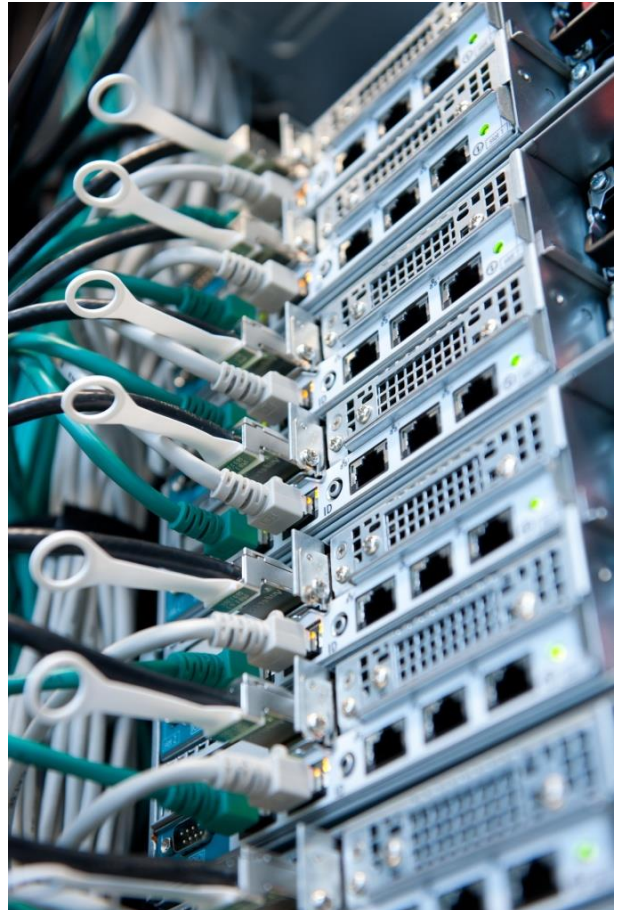


Photo by Elvira Eberhardt/Ulm University

The editorial staff uses gender-appropriate language. In individual cases there may be deviations for reasons of easier legibility. At this point we expressly point out that both the male and the female spelling are meant for the corresponding contributions.

For further information please visit www.bwhpc.de

