

Leibniz-Rechenzentrum

Als erstklassiger akademischer IT-Service-Anbieter und Supercomputing-Pionier hat das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) vor Kurzem mit der Entwicklung eines brandneuen Supercomputing-Systems begonnen. Daraus wird bald einer der leistungsfähigsten Computer der Welt entstehen. Der neu gebaute SuperMUC-NG wurde mit einer Kombination aus Technologien von Intel und Lenovo entwickelt und läuft auf SUSE Linux Enterprise High Performance Computing. Er soll die wissenschaftliche Forschung auf globaler Ebene vorantreiben.



Überblick

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) befindet sich auf dem Campusgelände der Stadt Garching in der Nähe von München. Das LRZ ist IT-Service-Anbieter für alle Universitäten im Großraum München sowie eine wachsende Zahl von Forschungseinrichtungen in ganz Bayern. Die Organisation unterstützt mit hochverfügbaren, sicheren und energieeffizienten Services auf Grundlage

modernster IT-Technologie zukunftsweisende Forschungsvorhaben und die Ausbildung in einer Vielzahl von wissenschaftlichen Disziplinen. Das LRZ spielt auch als Mitglied des Gauss Center for Supercomputing (GCS) eine wichtige Rolle und bietet erstklassige HPC-Services auf nationaler und europäischer Ebene. Das LRZ ist ein Institut der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.



„Der SuperMUC-NG ist eine bedeutende Errungenschaft. Die breite Kompatibilität des SUSE Betriebssystems, unsere langjährigen Beziehung zu dem Unternehmen und unsere eigene Erfahrung mit der Plattform haben uns überzeugt.“

DR. HERBERT HUBER

Abteilungsleiter für High Performance-Systeme
LRZ

Herausforderung

Big Data könnte der Schlüssel zum Verständnis des Ursprungs des Universums, der Zusammensetzung der Materie selbst und weiterer großer Fragen sein, die Wissenschaftler seit Jahrhunderten faszinieren. Um die Grenzen des Wissens mit bahnbrechender Forschung voranzutreiben, benötigen Wissenschaftler Zugang zu High Performance Computing-Umgebungen, die es ihnen ermöglichen, große Mengen komplexer Daten schnell und effizient zu verarbeiten.

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ist auf seinem Gebiet weltweit führend und bietet HPC- und Data Center-Ressourcen für die wissenschaftliche Forschung in der gesamten Region Bayern an. Darüber

Das LRZ auf einen Blick:

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) wurde 1962 in München gegründet und bietet eine Vielzahl von Daten-Services sowie leistungsfähige High Performance Computing-Ressourcen für die wissenschaftliche Forschung in Bayern, Deutschland und darüber hinaus.

■ Branche und Standort

Forschung, Deutschland

■ Produkte und Services

SUSE Linux Enterprise High Performance Computing

■ Ergebnisse

- + Unterstützung innovativer Forschungsprojekte
- + Starke Partnerschaft ermöglicht branchenführende Supercomputing-Lösung
- + Wegbereiter für Auszeichnungen und Innovation
- + Steigerung der Energieeffizienz, wodurch langfristige Kosteneinsparungen erzielt werden

hinaus gehört das LRZ zu den drei wichtigsten Akteuren im Gauss Center for Supercomputing (GCS), Deutschlands führender Supercomputing-Einrichtung. Diese hat sich zum Ziel gesetzt, eine konsolidierte HPC-Infrastruktur zu schaffen, die in einer breiten Palette wissenschaftlicher und industrieller Forschungsprojekte eingesetzt werden kann.

Bis vor Kurzem war das hochmoderne SuperMUC Petascale-System das Herzstück des LRZ. Mit mehr als 241.000 Cores und einer kombinierten Spitzenleistung von mehr als 6,8 Petaflops zählte es zu den schnellsten Supercomputern der Welt, und lief zum Teil auf SUSE Linux Enterprise.

Dr. Herbert Huber, Department Head of High Performance Systems am LRZ, erklärt: „Wir setzen am LRZ seit über zwei Jahrzehnten SUSE Lösungen ein. Der Hauptvorteil dieser Lösungen ist für uns die Kompatibilität, die sie bieten. Wir haben SUSE Linux Enterprise Server Ende der 1990er Jahre in unserem allerersten universellen Linux-Clustersystem implementiert, weil wir es für eines der besten Betriebssysteme für die Ausführung von HPC-Standardworkflows hielten – eine Qualität, die SUSE über die Jahre zuverlässig aufrecht erhalten hat.“

„Auf der Supercomputing-Ebene haben wir SUSE Linux Enterprise High Performance Computing erstmals 2006 eingeführt, da es sehr große Shared Memory-Knoten unterstützt und nahtlos mit dem HPC-Software-Stack und vielen kommerziellen Anwendungssoftwarepaketen zusammenarbeitet. Die perfekte Kompatibilität von SUSE Linux Enterprise Server mit unserem HPC-Software-Stack war und ist ein entscheidender Faktor für unsere Entscheidung, das SUSE Betriebssystem in unseren HPC-Systemen einzusetzen.“

Nach sieben Jahren technologischer Spitzenforschung stellte das LRZ fest, dass ein Upgrade seiner HPC-Infrastruktur nötig war.

„2016 begannen wir, den SuperMUC Next Generation oder kurz SuperMUC-NG zu planen“, so Dr. Huber. „Wir waren sehr zufrieden mit der SUSE Unterstützung für das vorhandene SuperMUC-System, wussten aber, dass jetzt der Zeitpunkt gekommen war, sowohl die Leistung als auch die Energieeffizienz des LRZ-Supercomputers erheblich zu steigern.“

Die Schaffung eines neuen Supercomputersystems erforderte einen EU-weiten öffentlichen Ausschreibungsprozess.

„Wir haben einen wettbewerblichen Dialog mit zwei Dialogphasen als Ausschreibungsprozess für den SuperMUC-NG eingerichtet“, erklärt Dr. Huber. „So kamen wir schließlich zu unserer aktuellen HPC-Lösung.“

Lösung

Nach einem strengen Ausschreibungsprozess für das SuperMUC-NG-Projekt entschied sich das LRZ neben SUSE für eine gemeinsame Hardwarelösung von Intel und Lenovo. Der SuperMUC-NG besteht aus zehn „Inseln“ von Rechenknoten mit zusammen 311.040 Computing-Cores und einer Spitzenleistung von 26,9 Petaflops.

„Der SuperMUC-NG ist eine Weiterentwicklung seines Vorgängers“, sagte Dr. Huber. „Er besteht aus acht „dünnen“ Inseln aus Computing Nodes, einer „fetten“ Insel und einer Ein-/Ausgabe-Insel. Jede Insel ist über ein nicht blockierendes Omni-Path-1-Netzwerk verbunden, und die Konnektivität im Inselnetz hat einen Blockungsfaktor von 4.“

„Insgesamt haben die Computing-Inseln jeweils 6336 „dünne“ Knoten (mit 96 Gigabyte RAM) und 144 „fette“ Knoten (mit 768 Gigabyte RAM). Jeder Knoten verfügt über zwei Skylake 8147-Prozessoren mit 24 physischen Rechenkernen. Der SuperMUC-NG hat eine Gesamtspeicherkapazität von 70 Petabyte und eine Bandbreite von 500 Gigabyte pro Sekunde für seine parallelen Dateisystemfunktionen. Dies

ist eine echte Optimierung unserer Rechenkapazitäten.“

Intel unterstützt gemeinsam mit Lenovo und SUSE das LRZ bei der langfristigen Wartung und Unterstützung des Supercomputers und erleichtert den Zugriff auf dessen Cloud-Computing-Service, mit dem Benutzer ihre umfangreichen Daten visualisieren und verwalten können.

„Der SuperMUC-NG ist eine bedeutende Errungenschaft“, erklärt Dr. Huber. „Aufgrund der breiten Kompatibilität des SUSE Betriebssystems, unserer langjährigen Beziehung zu dem Unternehmen und unserer eigenen Erfahrung mit der Plattform waren wir überzeugt, dass es mit der neuen Hardware gut funktionieren wird. Die Bereitschaft der Unternehmen Intel, Lenovo und SUSE zur Zusammenarbeit bei diesem Projekt haben wir sehr geschätzt.“

Mit dem SuperMUC-NG kann das LRZ sich zudem an einer wichtigen Weiterentwicklung des GCS beteiligen, ein bedeutender Meilenstein im deutschen Supercomputing.

„In den akademischen und industriellen Forschungsgemeinschaften ist ein neuer Hauptschwerpunkt die effiziente Handhabung und Verarbeitung großer Datenmengen, die durch wissenschaftliche Simulationen erzeugt werden“, so Dr. Huber. „Einige dieser Daten erfordern langfristige Anstrengungen, um wertvolle Ergebnisse auszuwerten und zu extrahieren, die nur bei sehr hoher Rechenleistung wirklich realisierbar sind. Mit dem neuen SuperMUC-NG-System können wir Verbindungen zu anderen GCS-Mitgliedern herstellen, um Simulationsdaten auf eine Weise zu verarbeiten, die für keinen von uns einzeln möglich ist. Außerdem können wir so noch enger zusammenarbeiten, um Workflows zu entwickeln, die die Unterstützung für das Benutzer-, Projekt- und Datenmanagement verbessern, und neue Methoden für die Datenverarbeitung

„Unser Hauptziel war es stets, der wissenschaftlichen Gemeinschaft zu dienen. Mit dem SuperMUC-NG und der laufenden Unterstützung durch SUSE, Intel und Lenovo können wir auch weiterhin die wissenschaftlichen Durchbrüche unterstützen, die das menschliche Wissen vorantreiben.“

DR. HERBERT HUBER

Abteilungsleiter für High Performance-Systeme
LRZ

Kontakt:
www.suse.com

auf der Grundlage von KI und maschinellem Lernen zu erkunden. Diese neuen Methoden sind nur ein Teil unserer viel breiteren Forschungsstrategie hier am LRZ, die komplett vom SuperMUC-NG unterstützt wird.“

Ergebnisse

Das LRZ plant den Beginn der vollständigen Einführung des SuperMUC-NG für Anfang 2019, hat aber bereits begonnen, das Potenzial vieler zukunftsweisender wissenschaftlicher Projekte zu erkennen.

„Wir befinden uns derzeit in der Planungsphase für eine Reihe wissenschaftlicher Projekte, die die erweiterten Fähigkeiten des SuperMUC-NG voll ausnutzen“, sagt Dr. Huber. „Zum Beispiel planen wir, in Zusammenarbeit mit dem bayerischen Gesundheitsministerium die Überwachung des Pollengehalts in der Luft zu unterstützen und Vorhersagen zu modellieren, die Pollenallergikern helfen. Zudem ermöglicht der SuperMUC-NG genauere Simulationen des Blutflusses bei Aneurysmen, des Luftstroms in den menschlichen Atemwegen und der Wirkung einzelner Arzneimittel bei Patienten.“

„Darüber hinaus gewinnen wir mit dem SuperMUC-NG einen tieferen Einblick in den Ursprung und die Entwicklung von Sternen und Galaxien und er hilft Wissenschaftlern dabei, ein tieferes Verständnis der komplexen mathematischen Struktur der Materie selbst zu entwickeln. Diese äußerst

ehrgeizigen und innovativen Projekte werden technisch nur mit dem sehr hohen Leistungsniveau des SuperMUC-NG realisierbar sein. Mit den neuen Speicherfunktionen des SuperMUC-NG sind unsere Forscher in der Lage, wichtige Datensätze über mehrere Generationen von Computersystemen hinweg zu verwalten, und das SUSE Betriebssystem ist skalierbar genug, um zukünftige Hardware-Erweiterungen zu ermöglichen.“

Mit der vollständigen Einführung des SuperMUC-NG-Systems erwartet das LRZ erhebliche Verbesserungen der Systemeffizienz. Die Organisation wurde bereits offiziell für ihre Arbeit im Supercomputing-Bereich ausgezeichnet.

„Dank der Verbesserungen bei der Systemhardware sowie der Entwicklung einer energiebewussten Planungsfunk-



tion neben Lenovo erwarten wir für die Lebensdauer des SuperMUC-NG Energiekosteneinsparungen in Höhe von etwa 35%. Dies bedeutet eine erheblich höhere Effizienz, insbesondere bei Arbeiten in diesem Maßstab. Wir haben

sogar vor Kurzem vom Bayerischen Wissenschaftsministerium eine offizielle Anerkennung für die wissenschaftliche Innovation erhalten, die der SuperMUC-NG unterstützt, und der SuperMUC-NG wurde mit dem „HPCwire Editors‘ Choice Award“ für „Energy Efficient HPC“ ausgezeichnet.

Für die Zukunft plant das LRZ, die Hardware-Kapazität weiter auszubauen und die Cloud-Storage-Technologie stärker zu nutzen.

„Unsere Zukunftspläne sehen eine noch engere Zusammenarbeit mit GCS und die Weiterentwicklung von Cloud-Computing-Ressourcen vor, um die Speicherung und Verarbeitung wissenschaftlicher Daten zu unterstützen“, erklärt Dr. Huber. „Außerdem haben wir vor, unsere High Performance-Hardware-Umgebung zu erweitern, sobald uns das Budget dafür zur Verfügung steht. Wir befinden uns sogar in der Konzeptionsphase zur Schaffung innovativer neuer Hardwarelösungen, darunter Quantencomputer und Exascale-Systeme, die wir innerhalb des nächsten Jahrzehnts implementieren möchten.“

Dr. Huber schließt: „Unser Hauptziel war es stets, der wissenschaftlichen Gemeinschaft zu dienen. Mit dem SuperMUC-NG und der laufenden Unterstützung durch SUSE, Intel und Lenovo können wir auch weiterhin die wissenschaftlichen Durchbrüche unterstützen, die das menschliche Wissen vorantreiben.“