

Press release

Universität Ulm

Andrea Weber-Tuckermann

07/04/2024

<http://idw-online.de/en/news836513>

Miscellaneous scientific news/publications, Research projects
Energy, Information technology, Physics / astronomy
transregional, national



universität
uulm

Weg frei für JUSTUS 3 - Neuer Supercomputer wird an der Uni Ulm aufgebaut

Ein neuer Hochleistungsrechner der Superlative wird an der Universität Ulm aufgebaut. Möglich gemacht hat JUSTUS 3 die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) mit der Bewilligung von 2,1 Millionen Euro für einen Großgeräteantrag der Uni. Die DFG trägt damit die Hälfte der Gesamtfördersumme von 4,2 Millionen Euro. Die andere Hälfte umfasst eine Gegenfinanzierung des Landes von 1,5 Millionen Euro sowie Investitionsanteile der Universitäten Ulm und Stuttgart in Höhe von 400 000 und 200 000 Euro. Genutzt werden die Dienste von JUSTUS 3 für mehr als 100 Forschungsprojekte aus den Landesuniversitäten und -hochschulen, und zwar schwerpunktmäßig für die Batterieforschung und Quantenwissenschaften.

Der Supercomputer JUSTUS 3, ursprünglich benannt nach dem deutschen Chemiker Justus von Liebig, wird noch leistungsfähiger und energieeffizienter sein als sein Vorgänger. „Der neue Hochleistungsrechner soll außerdem neueste Technologietrends aus dem High Performance Computing aufgreifen und nachhaltiger zu betreiben sein“, sagt Professor Joachim Ankerhold, Vizepräsident für Forschung an der Universität Ulm, der für den Antrag verantwortlich ist. Geplant ist beispielsweise eine Warmwasserkühlung und die Nutzung der Abwärme für die Gebäudeheizung.

Wissenschaftsministerin Petra Olschowski sagt: „Baden-Württemberg ist beim Supercomputing europaweit führend. Insbesondere für das Hochleistungsrechnen in der Theoretischen Chemie sowie in der Quanten- und Festkörperphysik leistet die Universität Ulm einen bedeutenden Beitrag. Der neue Hochleistungsrechner JUSTUS 3 wird das Supercomputing nicht nur an der Universität Ulm auf die nächste Ebene heben: In den Zukunftsbereichen Quantentechnologie und Batterieforschung steht die Rechenkapazität allen Landeshochschulen zur Verfügung – und stärkt dadurch unseren Innovationscampus QuantumBW sowie den Forschungsstandort Baden-Württemberg.“

Die genauen technischen Kennzahlen des künftigen Hochleistungsrechners werden nach dem Abschluss der nun anlaufenden EU-weiten Ausschreibung bekannt, denn das System ist äußerst komplex und besteht aus zahlreichen Hard- und Softwarekomponenten. „Vorgesehen ist, die Ausstattung auf die Nutzeranforderungen abzustimmen und dabei auch zukünftige Bedarfe – beispielsweise für den Einsatz von KI-gestützten Methoden – zu berücksichtigen“, erklärt Jürgen Salk. Der Physiker, der im Kommunikations- und Informationszentrum der Universität Ulm (kiz) den Bereich Scientific Software & Computer Services leitet, hat gemeinsam mit seinem Team den Förderantrag koordiniert und verfasst. Aktiv unterstützt wurde das Team dabei durch mehr als 40 wissenschaftliche Arbeitsgruppen aus sieben Landesuniversitäten mit der Darstellung zukünftiger Forschungsvorhaben, in denen das neue System eingesetzt werden wird. JUSTUS 3 adressiert Rechnerbedarfe für fachspezifische Anwendungen mit außerordentlich langen Laufzeiten sowie einem hohen Bedarf an Hauptspeicher und hochleistungsfähigen lokalen Dateisystemen.

Mehr als 1300 Publikationen belegen erfolgreiche gemeinschaftliche Nutzung

Die Forschergruppen, die mit JUSTUS 3 arbeiten wollen, kommen insbesondere aus der Theoretischen Chemie, der Quanten- und Festkörperphysik. Viele von ihnen kooperieren in landesweiten multidisziplinären Forschungsverbänden miteinander. Dazu gehört beispielsweise der Batterieforschungs-Exzellenzcluster POLiS und das Center for Integrated Quantum Science and Technology (IQST) sowie die landesweite Innovationsallianz QuantumBW. Einsatzgebiete

reichen dabei von der Erforschung neuer Batteriematerialien und Technologien zur nachhaltigen Energiespeicherung über die Entwicklung quantenbasierter Technologien zur Anwendung in Quantensensoren und -computern bis hin zur biochemischen Wirkstoffforschung. Eine Schlüsselrolle spielt dabei die computerbasierte Modellierung von molekularen Wechselwirkungen und quantenmechanischen Effekten auf atomarer Ebene sowie Datenanalysen mit immens großem Umfang. „Bislang entstanden mit Hilfe der JUSTUS-Rechner mehr als 1300 wissenschaftliche Publikationen. Dies ist ein beeindruckender Beleg für die erfolgreiche gemeinschaftliche Nutzung des Superrechners“, erklärt Professor Michael Weber, Präsident der Universität Ulm und Vorsitzender der Landesrektoratekonferenz (LRK).

Übrigens gehörten bereits die Vorgängermodelle zum Zeitpunkt der Inbetriebnahme zu den 400 leistungsstärksten Supercomputern der Welt. JUSTUS 2 hat 33 696 CPU-Kerne und kommt auf eine Höchstleistung von 2 Petaflops. Dieses System soll durch JUSTUS 3 abgelöst werden, um über das Jahr 2025 hinaus einen verlässlichen Forschungsbetrieb mit hoher Verfügbarkeit und möglichst bedarfsgerechter Kapazität an Rechenressourcen gewährleisten zu können.

JUSTUS 3 vereint Leistungsstärke mit Energieeffizienz

Auch der neue Hochleistungsrechner soll gleichermaßen von erfahrenen Forschenden und dem wissenschaftlichen Nachwuchs genutzt werden. Unterstützt und beraten werden Nutzerinnen und Nutzer auch in Zukunft wieder vom bwHPC Kompetenzzentrum für Computergestützte Chemie und Quantenwissenschaften, das an der Universität Ulm ansässig ist. Realisiert wird das Konzept im Rahmen der Landesstrategie High Performance Computing (HPC) und Data-Intensive Computing (DIC) sowie durch das Begleitprojekt bwHPC-S5. Das Land Baden-Württemberg fördert damit den Ausbau entsprechender Wissenschaftsinfrastruktur an den Universitäten und Hochschulen des Landes.

„Der neue Hochleistungsrechner JUSTUS 3, der nun an der Uni Ulm aufgebaut wird, vereint Leistungsstärke und Energieeffizienz mit einem nachhaltigen Ressourceneinsatz“, versichert Professor Ankerhold, der als Leiter des Instituts für Komplexe Quantensysteme zu den zukünftigen Nutzern gehören wird. Die DFG ist von dem Projekt überzeugt: Das Gutachtergremium hat ein herausragendes Begutachtungsergebnis bestätigt und räumt dem Antrag höchste Förderpriorität ein. Die Beschaffung von JUSTUS 3 wurde daher ohne Kürzung zur Bewilligung vorgeschlagen.

contact for scientific information:

Prof. Dr. Joachim Ankerhold, Vizepräsident für Forschung und Leiter des Instituts für Komplexe Quantensysteme der Universität Ulm, E-Mail: joachim.ankerhold@uni-ulm.de



Vorgänger JUSTUS 2 gehörte bei seiner Inbetriebnahme im Jahr 2020 zu den 400 rechenstärksten Supercomputern der Welt



Jürgen Salk vor dem Großrechner JUSTUS 2
Montage
Uni Ulm