

H L R I S

HÖCHSTLEISTUNGSRECHENZENTRUM
STUTT GART

2017

JAHRESBERICHT



ENERGIE

GESUNDHEIT

KLIMA

MOBILITÄT

PHILOSOPHIE



Grußwort

Editorial

Im Jahresrückblick zeichneten sich zwei besonders wichtige Ereignisse ab, die lange vorbereitet wurden und 2017 zu einem erfolgreichen Abschluss kamen.

Anlässlich eines Pressegespräches am HLRS stellte die baden-württembergische Wissenschaftsministerin Theresia Bauer im August 2017 die zukünftige HPC-Strategie des Landes Baden-Württemberg vor und unterstrich dabei die besondere Rolle des HLRS sowohl als Bundeszentrum als auch als europäisches Zentrum. Im Rahmen der Landesstrategie wird das HLRS in den Jahren 2019 und 2023 jeweils einen neuen Höchstleistungsrechner beschaffen und damit die technische Entwicklung bis in die Mitte des nächsten Jahrzehnts und darüberhinaus sichern können.

Bereits im März konnte das HLRS mit der Eröffnung seines neuen HPC Training Centers einen wesentlichen Meilenstein in seiner Weiterbildungsstrategie erreichen. Im Juli wurde das Gebäude dann offiziell von Staatssekretärin Giesela Splett im Beisein von Ehrengästen aus Land, Stadt und Wissenschaft an das HLRS übergeben. Mit dem neuen Gebäude kann

Looking back on 2017, I am struck by two significant events representing several years of hard work that came to a successful conclusion.

In a press conference at HLRS in August 2017, Baden-Württemberg Minister of Science, Research and the Arts Theresia Bauer introduced the state's future high-performance computing (HPC) strategy. During her presentation, she acknowledged HLRS's importance as a German federal supercomputing center and for the entire European research community. As part of Baden-Württemberg's strategy, HLRS looks forward to introducing new, more powerful HPC systems in 2019 and 2023, ensuring that it will continue to stay at the forefront of supercomputing through the middle of the next decade and beyond.

In April, HLRS also reached an important milestone in its effort to increase the number of scientists and engineers with HPC knowledge and skills. In July, State Secretary of Finance Giesela Splett and other honored guests from the federal and state governments joined us to celebrate the opening of a new HLRS building

das HLRS nun seine Schulungsmaßnahmen ausbauen und insbesondere dem steigenden Bedürfnis nach Weiterbildung im Bereich der Digitalisierung Rechnung tragen.

Im Zusammenspiel mit dem vom europäischen Sozialfonds und dem Land Baden-Württemberg geförderten Projekt sollen Synergieeffekte mit Nutzern aus der Wirtschaft erzielt werden. Als Projekt wird die Supercomputing-Akademie, ein Weiterbildungsprogramm, entwickelt, das neue didaktische Technologien und Methoden nutzt und sich gleichermaßen an Kunden aus der Industrie und Wissenschaft wendet, um ihnen die Möglichkeit zu bieten, kontinuierlich mit den Entwicklungen im HPC vertraut zu bleiben.

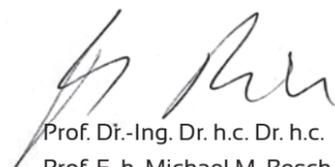
Auch über diese beiden Ereignisse hinaus blickt das HLRS auf ein sehr erfolgreiches Jahr 2017 zurück. So konnten die Einnahmen aus Drittmitteln weiter gesteigert werden, was zeigt, dass die eigene Forschung des HLRS auf den Ebenen des Landes, des Bundes sowie der europäischen Union verstärkt und positiv wahrgenommen und unterstützt wird.

Indem das HLRS den millionsten Job auf seinem HPC System feierte konnten auch seine Benutzer ein sehr erfolgreiches Jahr verzeichnen. Darüber hinaus wurden in Bereichen wie dem Design von Windturbinen, der Simulation des regionalen Klimas sowie der Astrophysik herausragende Ergebnisse erzielt, die wir in diesem Jahresbericht vorstellen.

Besonders freuen wir uns, dass Claus-Peter Hutter, Leiter der Akademie für Natur- und Umweltschutz Baden-Württemberg, sich zu einem Interview bereit erklärte und mit uns über unsere Kooperation in Bezug auf Nachhaltigkeit diskutierte. Damit können wir Ihnen einen externen Blick auf das HLRS und dessen Beitrag zur Nachhaltigkeit präsentieren.

Mit diesem Jahresbericht danken wir allen Unterstützern und Förderern des HLRS, die unsere Erfolge im Jahr 2017 ermöglicht haben. Gleichzeitig freuen wir uns auf das Jahr 2018 mit seinen neuen Herausforderungen.

Mit freundlichen Grüßen,



Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c.
Prof. E. h. Michael M. Resch
Direktor HLRS

dedicated to HPC training. This spectacular new facility will enable HLRS to expand its efforts to address the large, unmet need for continuing education in supercomputing—an important part of our mission.

In a project supported by the European Social Fund and the State of Baden-Württemberg, we are also now working to foster new synergies with HPC users from industry. Using new educational technologies and methods, a new program called the Supercomputing-Akademie will offer continuing education that is tailored to the needs of scientists and engineers working at high-tech companies, as well as academic researchers, and enable them to stay up-to-date with the latest HPC methods.

In many ways HLRS can proudly look back on a very successful year. Our third-party funding saw additional increases over previous years, showing that HLRS's in-house research projects on topics relevant to the future of supercomputing are seen positively in our federal and state governments, as well as the European Union.

Users of our HPC systems also had a very productive year. This annual report showcases some examples of our users' research, including the millionth compute job run on Hazel Hen. You can also read about contributions that HLRS is making in other research areas related to wind power generation, regional climate change prediction, and cosmology. We are also particularly grateful that Claus-Peter Hutter, leader of the Baden-Württemberg Academy for Nature Preservation and Environmental Protection, took the time to meet with us to discuss our cooperation on issues related to sustainability. His external perspective provides insights into ways that HLRS and its expertise in simulation are contributing to sustainability.

With this annual report we thank all of our supporters and funders who have made our successes in 2017 possible. At the same time we look forward to tackling new challenges in 2018.

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Universität Stuttgart
Nobelstrasse 19 | 70550 Stuttgart | Deutschland

tel ++49 (0)711 685-87269
fax ++49 (0)711 685-87209

email info@hlrs.de
web www.hlrs.de

Direktor HLRS:

Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Prof. E.h.
Michael M. Resch

Leitung: Dr. Jutta Oexle

Redaktion: Christopher M. Williams

Lektor/Produktion: F. Rainer Klank

Autoren: Lena Bühler (LB), Eric Gedenk (EG),
Christopher M. Williams (CW)

Übersetzung: Anna-Carina Kemper, Amelie Liebgott

Fotos und Abbildungen: Bildrechte aller nicht
gekennzeichneten Bilder: HLRS

Druck: www.dcc-kaestl.de

Gestaltung: Zimmermann Visuelle Kommunikation

© 2018

8	Highlights der Forschung
24	Im Blickpunkt
30	Neuigkeiten
38	Kooperationen
46	Workshops und Symposien
54	Forschung des HLRS
66	HPC erleben
70	Publikationen am HLRS
78	Systeme und Systemnutzung
90	Über uns



HIGHLIGHTS DER FORSCHUNG

Hazel Hens millionster Computer Job

Die Simulation der Verteilung einer nichtnewtonschen Flüssigkeit bei der Injektion durch eine Düse stellt einen Meilenstein für den Supercomputer des HLRS dar.

In der Natur gibt es viele Fälle, in denen Materialien, in verschiedenen Zuständen oder Phasen (Gase, Flüssigkeiten und Feststoffe), physikalisch interagieren. Diese Phänomene werden Multiphasenströmungen genannt. In der Meteorologie zum Beispiel bilden Regentropfen, Tau und Nebel mehrphasige Strömungen, ebenso wie der Austausch von Gasen zwischen den Ozeanen und der Atmosphäre. Mehrphasenströmungen treten auch in unserem täglichen Leben auf, wenn Wasser unter der Dusche von der Haut „springt“ oder wenn wir Nasenspray inhalieren, um die Symptome einer Erkältung zu mildern.

Von hoher Relevanz sind die Mehrphasenströmungen auch für die Ingenieurwissenschaften. Dabei ist ihr wichtigstes Anwendungsgebiet wahrscheinlich die Konstruktion von Kraftstoffspritzsystemen bei Automobilen, Gasturbinen und Raketen. Die Ausbringung von Düngemittel im landwirtschaftlichen Bereich und

die Verwendung von Sprühtrocknung bei der Herstellung von Pharmazeutika und Lebensmitteln sind weitere Beispiele für dieses Verfahren.

Zu verstehen, wie sich Mehrphasenströmungen im Detail verhalten, könnte in sämtlichen Fällen die Fähigkeiten verbessern, die natürliche Welt zu studieren und das Design effektiverer und effizienterer Produkte zu optimieren. Aufgrund der enormen Anzahl von Tröpfchen, die in den Mehrphasenströmungen involviert sind und des extrem kleinen Ausmaßes, in dem sie interagieren, ist unsere Fähigkeit, allein durch Beobachtungen Kenntnisse zu erlangen, begrenzt.

Aus diesem Grund wandten sich Wissenschaftler/innen um Professor Bernhard Weigand, Direktor des Instituts der Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt der Universität Stuttgart, an das HLRS und seinen Höchstleistungsrechner Hazel Hen, um Mehrphasenströmungen rechnerisch simulieren zu können. Diese Arbeit führte

zu einer Vielzahl von Erkenntnissen von weitreichender Praxisrelevanz.

Supercomputer simuliert Tröpfchendynamik

Professor Weigand und seine Gruppe interessieren sich hauptsächlich für grundlegende Mehrphasenströmungen mit Tröpfchen und haben in der Vergangenheit Themen im Zusammenhang mit der Wasserdynamik und Eiskristallbildung in Wolken untersucht. Derartige Probleme sind sowohl für die Niederschlagsprognose als auch für den Flugverkehr wichtig, da Eisbildung an Flugzeugflügeln die Flugstabilität negativ beeinflussen und die Treibstoffeffizienz verringern kann.

Um solche Phänomene untersuchen zu können, verwenden Weigand und sein Team einen mathematischen Ansatz namens direkte numerische Simulation (DNS). Über viele Jahre hinweg haben sie DNS-Methoden zu einem hauseigenen Softwareprogramm namens FS3D (Free Surface 3D) aufgebaut, mit dem sie die Dynamik von Tröpfchen modellieren können. FS3D kann beispielsweise präzise simulieren, was passiert, wenn ein Wassertropfen auf einen flüssigen Film fällt und eine „Krone“ bildet, eine neue Form annimmt und in kleinere Tröpfchen zerfällt.

Höchstleistungsrechnen ist für den Erfolg von FS3D unerlässlich, da die Software eine extrem hohe „Gate-Auflösung“ erfordert. Wie die Bildrate einer Video- oder Filmkamera muss das Programm die komplexen Kollisionen, Verwachsungen und Teilungen der Tröpfchen und Moleküle in extrem kleinen Raum- und Zeitskalen darstellen. FS3D kann solche Wechselwirkungen in zwei Milliarden „Zellen“ auf einmal simulieren, von denen jede ein Volumen von weniger als sieben Kubikmikrometern beinhaltet und verfolgt, wie sich die Zusammensetzung jeder Zelle im Laufe der Zeit verändert.

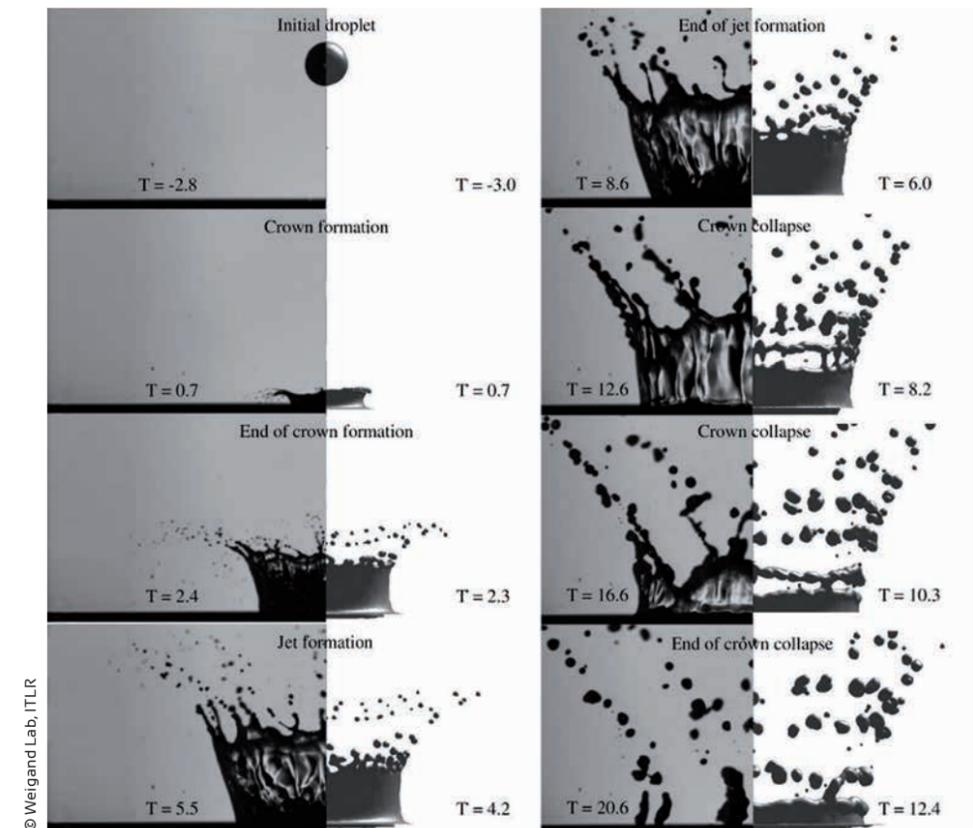
Das Erreichen einer so hohen Auflösung erzeugt massiv große Datensätze und nur mit einem Supercomputer, der so leistungsfähig wie Hazel Hen ist, werden solche Simulationen praktikabel. Leistung in diesem Umfang zur Verfügung zu haben, birgt jedoch auch einzigartige Herausforderungen. Um das volle Potenzial von Supercomputern ausnutzen zu können, ist die Entwicklung spezieller Software vonnöten, die hinter Algorithmen wie FS3D stehen und auf die parallele Rechenarchitektur von Höchstleistungsrechner-Systemen ausgerichtet sind. Diese Art von Programmierung erfordert spezielles Know-how und während der Entwicklung von FS3D haben sowohl HLRS- als auch Cray-Mitarbeiter dem Weigand Lab geholfen, diese für HPC zu optimieren.

„Es ist nicht wirklich praktikabel für uns HPC-Experten in unserem Labor zu haben und so haben die HLRS- und Cray-Mitarbeiter uns sehr dabei unterstützt, FS3D effektiv auf Hazel Hen zu betreiben“, sagt Professor Weigand. „Ihr Wissen und ihre Ratschläge waren für den Erfolg unserer jüngsten Studien sehr wichtig.“

Der millionste Job: Wie nichtnewtonsche Flüssigkeiten in Strahlen auseinanderbrechen

Hazel Hens millionster Job konzentrierte sich nicht auf atmosphärisches Wasser, sondern auf Mehrphasenströmungen in nichtnewtonschen Flüssigkeiten. Solche Flüssigkeiten – zu denen Materialien wie Farbe, Zahnpasta oder Blut gehören – verhalten sich nicht so, wie es Newtons Viskositätsgesetze vorhersagen würden; stattdessen folgen ihre fluidodynamischen Eigenschaften anderen Regeln, die noch nicht vollständig verstanden werden.

Weigands Team wollte ein besseres Verständnis darüber erlangen, wie nichtnewtonsche Strahlen ausbrechen,



© Weigand Lab, ILLR

Vergleich von Hochgeschwindigkeitsaufnahmen der Bildung von Tröpfchenkronen (linke Seite) mit FS3D-Simulationen.

wenn sie in eine gasförmige Atmosphäre injiziert werden. Diese Fragen ist wichtig, da Tröpfchengröße und die Zunahme der Flüssigkeitsoberfläche, wenn sie atomisiert wird, wichtige Faktoren bei der Optimierung der Prozesseffizienz sein können. So auch bei der Anwendung von aerosolierter Farbe auf einer Fahrzeugkarosserie.

Die Forscher simulierten die Injektion wässriger Lösungen der Polymere Praestol 2500® und Praestol 2540® über verschiedene Druckdüsen in die Luft. Bei Verwendung in der Wasserbehandlung, nimmt die Viskosität der Polymere aufgrund der Schubverformung ab.

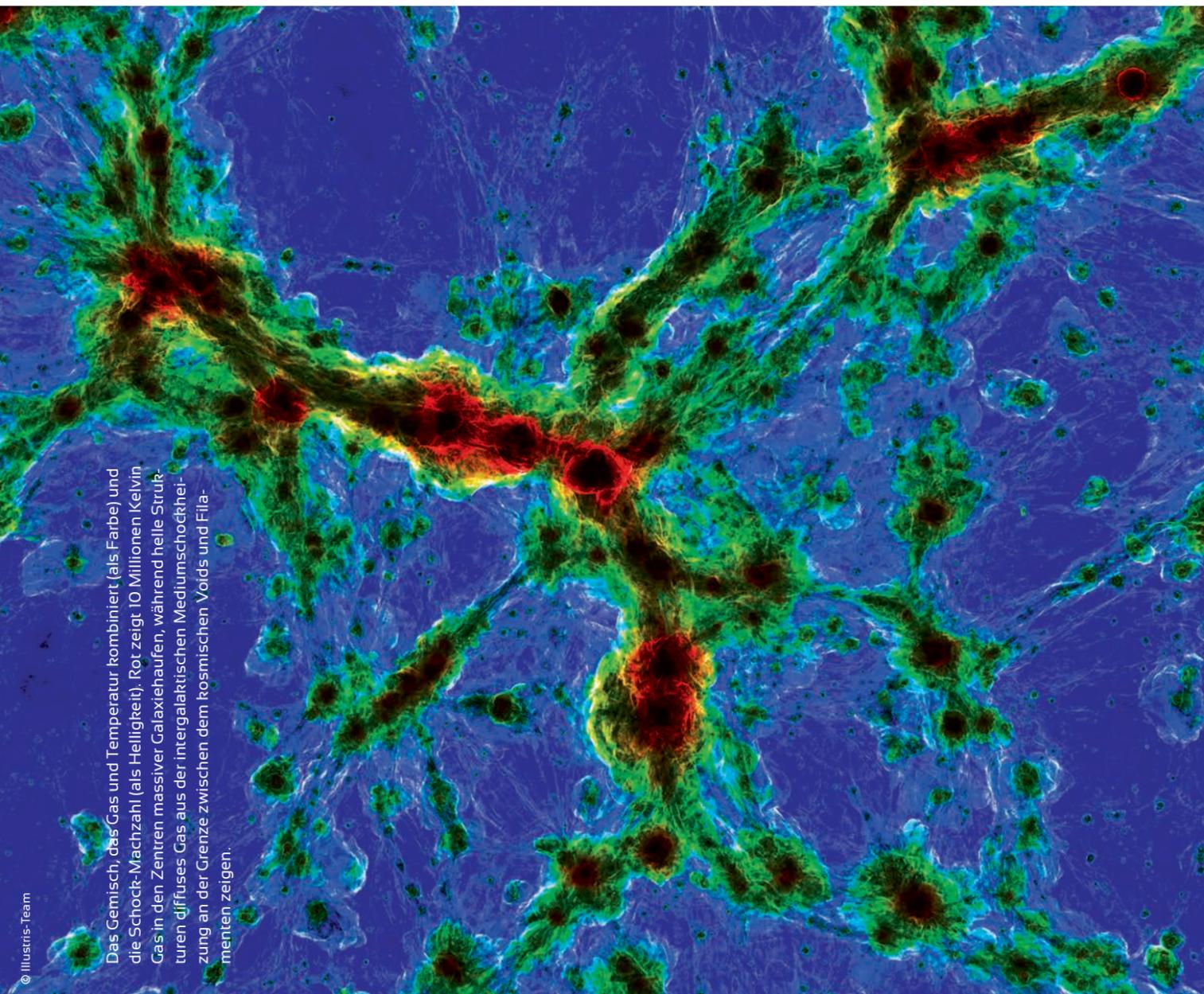
Um spezifische Merkmale dieser Flüsse untersuchen und um sich ein genaueres Bild von der Verteilung der Lösungen machen zu können, führte das Team Weigand eine Vielzahl von „virtuellen“ Experimenten mit der FS3D am Supercomputer durch. So modellierten sie zum Beispiel einen Strahlerfall nach der Injektion und die Auswirkung von Faktoren, wie die Strömungsgeschwindigkeit und die Düsenform, auf die viskosen Eigenschaften der Flüssigkeiten.

Der millionste Job auf Hazel Hen war eine von mehreren Nachbearbeitungsvisualisierungen, die das Team in Zusammenarbeit mit VISUS (Visualisation Research Center der Universität Stuttgart) durchführte, um die Entwicklung einer flüssigen Masse im Zeitverlauf zu untersuchen.

In dieser Serie von Studien erzeugten sie unter anderem extrem feinkörnige Visualisierungen von Änderungen, in der Form des durch den Strahl fließenden Stroms, identifizierten Unterschiede im Verlust der Strömungskohäsion unter verschiedenen Bedingungen und entdeckten Änderungen der Oberfläche, wenn der Strom zerstäubt wird. Dies führte zu Erkenntnissen über Ähnlichkeiten und Unterschiede zwischen newtonschen und nichtnewtonschen Strömungen und darüber, wie die Düsenform die Strömungseigenschaften beeinflusst.

In Zukunft können derartige Informationen Ingenieure in die Lage versetzen die Effizienz von Düsenkonstruktionen zu verbessern.

(CW)



© Illustris-Team
Das Gemisch, das Gas und Temperatur kombiniert (als Farbe) und die Schock-Machzahl (als Helligkeit). Rot zeigt 10 Millionen Kelvin Gas in den Zentren massiver Galaxiehaufen, während helle Strukturen diffuses Gas aus der intergalaktischen Mediumschockheizung an der Grenze zwischen dem kosmischen Voids und Filamenten zeigen.

Kosmologen brechen eigenen Rekord bei der Aufstellung der größten Simulation der Galaxiebildung

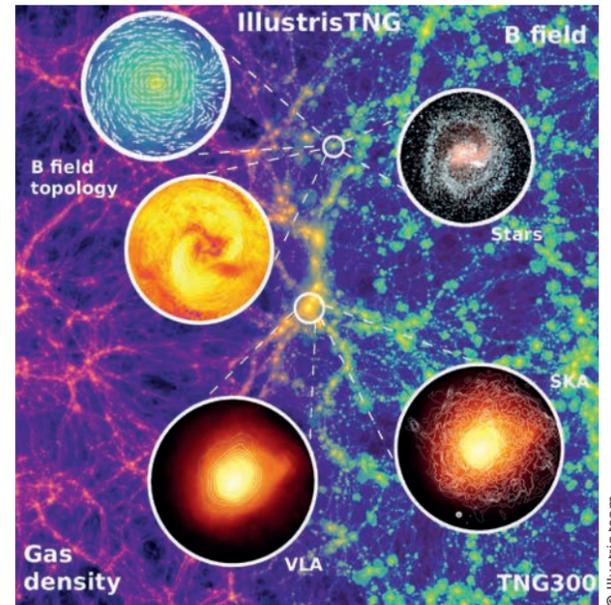
Um die Entstehung des Universums zu untersuchen, bietet ein interdisziplinäres Team der Kosmologie-Gemeinschaft eine Weltklasse-Simulation.

Wie Sterne den Nachthimmel erleuchten, haben Menschen lange versucht zu erklären. Das breite Spektrum von Theorien in der Geschichte hat ein gemeinsames und korrektes Leitbild, das bis heute von Astrophysikern angewandt wird: durch das Wissen um Sterne und ihrer Herkunft können wir mehr über unsere eigene Entstehung lernen. Die unermessliche Weite unserer Galaxie, ganz zu schweigen von unserem gesamten Universum, bedeutet jedoch, dass Experimente, die dabei helfen unsere Herkunft zu verstehen, teuer, kompliziert und sehr zeitaufwändig sind. In bestimmten Bereichen sind Experimente zur Untersuchung astrophysikalischer Aspekte nicht möglich, sodass Forscher, die einen besseren Einblick in die Entstehung von Galaxien erhalten wollen, auf Supercomputer angewiesen sind. In dem Versuch, ein vollständigeres Bild der Galaxienentstehung zu entwickeln, haben sich Forscher des Heidelberger Institut für Theoretische Studien, der

Max-Planck-Institute für Astrophysik und Astronomie, des Massachusetts Institute of Technology, der Harvard University und des Center for Computational Astrophysics in New York zur Nutzung von Supercomputerressourcen an das Höchstleistungsrechenzentrum (HLRS) in Stuttgart gewandt. Die hieraus resultierende Simulation wird zu einer wissenschaftlichen Überprüfung und Erweiterung des bestehenden experimentellen Wissens über die Anfangsphase des Universums beitragen.

Vor Kurzem gelang es dem Team seine rekordverdächtige „Illustris“-Simulation aus dem Jahr 2015, die die bisher größte hydrologische Simulation der Galaxienentstehung darstellte, zu erweitern. Mit Hilfe von hydrodynamischen Simulationen ist es den Forschern möglich, die Bewegung von Gas genau zu simulieren. Sterne bilden sich aus kosmischem Gas und das Licht der Sterne wiederum liefert Astrophysikern und

Gasdichte (links) und Magnetfeldstärke (rechts) in der TNG300-Box, zentriert auf dem massivsten Galaxiehaufen. Zoom Panels zeigen die Ausrichtung des Magnetfeldes und das stellare Licht (oben) sowie die Röntgen- und Radioemission des massiven Clusters (unten).



Kosmologen wichtige Hinweise über die Funktionsweise des Universums. Es gelang den Wissenschaftlern die Reichweite und die Genauigkeit ihrer Simulation zu verbessern. Die Fortsetzung läuft unter den Namen „Illustris, The Next Generation“ oder „IllustrisTNG“. Die ersten Ergebnisse wurden in drei Zeitschriftenartikeln veröffentlicht, die in den *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* erschienen. Außerdem sind weitere Artikel zur Veröffentlichung in Planung.

Magnetische Modellierung

Ebenso wenig wie sich die Menschheit die genaue Entstehung des Universums vorstellen kann, ist es einer Computersimulation nicht möglich die „Geburt des Universums“ im wörtlichen Sinne darzustellen. Anstatt dessen werden zahlreiche Gleichungen und andere Startbedingungen, wie bspw. Aufnahmen, die von Satellitenfelder oder anderen Quellen stammen, in einen gigantischen Rechenwürfel eingespeist, der einen großen Teil des Universums darstellt. Numerische Methoden sorgen daraufhin dafür, dass sich das

„Universe in a Box“ in Gang setzt. Bei vielen Aspekten können die Wissenschaftler ihre Berechnungen auf einer grundlegenden oder ab-initio-Ebene beginnen, ohne dass vorgefertigte Eingangsdaten vonnöten sind. Prozesse, die weniger erforscht sind, wie die Entstehung von Sternen oder das Wachstum supermassiver schwarzer Löcher, müssen durch Beobachtungen und durch Annahmen, die zur Vereinfachung der Berechnungsflut dienen, berechnet werden.

Während die Rechenleistung und das Know-how sich stetig verbessern, steigert sich auch die Fähigkeit, immer größere Bereiche des Weltraums und zunehmend kompliziertere Phänomene in Zusammenhang mit der Entstehung der Galaxien, zu simulieren. Im Rahmen von „IllustrisTNG“ simulierte das Team drei verschiedene „Teile“ des Universums mit unterschiedlich hohen Auflösungen. Das größte umfasste 300 Megaparsecs, bzw. ungefähr eine Milliarde Lichtjahre. Über eine Zeitspanne von 35 Millionen Core-Stunden nutzte das Team 24.000 Cores auf dem Supercomputer Hazel Hen.

Einer der größten Fortschritte von „IllustrisTNG“ stellt die

von den Wissenschaftlern überarbeitete Simulation dar, die eine genauere Berechnung von Magnetfeldern vornimmt und somit die Genauigkeit der Simulation verbessert. „Magnetfelder [...] sind aus verschiedenen Gründen interessant,“ erklärt Prof. Dr. Volker Springel, der Projektleiter und Wissenschaftler des Heidelberger Institut für Theoretische Studien. „Der magnetische Druck, der auf das kosmische Gas ausgeübt wird, kann gelegentlich dem thermischen (Temperatur-) Druck entsprechen. Wenn das nicht berücksichtigt wird, können diese Effekte verpasst und letztendlich das Ergebnis beeinträchtigt werden.“

Einen überraschenden Fortschritt in Bezug auf das Verständnis von schwarzen Löchern machte das Team während der Entwicklung von „IllustrisTNG“. Basierend auf Beobachtungen wussten die Wissenschaftler, dass supermassive schwarze Löcher kosmische Gase mit viel Energie antreiben und dieses Gas auch von Galaxienhaufen „wegpusten“. Dieses Wissen hilft dabei die Entstehung von Sternen in den größten Galaxien abzuschließen und begrenzt die maximale Größe, die sie erreichen können. In der vorherigen Illustris-Simulation bemerkten die Wissenschaftler, dass schwarze Löcher, während sie den Energieübertragungsprozess durchlaufen, die Entstehung von Sternen nicht vollständig stoppen. Bei der Überarbeitung der physikalischen Eigenschaften der schwarzen Löcher in der Simulation konnte das Team eine höhere Übereinstimmung zwischen den Daten und den Beobachtungen ausmachen, was den Forschern mehr Sicherheit gibt, dass ihre Simulation der Realität entspricht.

Eine langjährige Allianz

Seit März 2016 läuft die IllustrisTNG-Simulation auf HLRS-Ressourcen. Da der Datensatz von IllustrisTNG

sowohl größer als auch genauer ist, sind die Forscher zuversichtlich, dass ihre Daten breit gefächert genutzt werden, sodass sie mehr Zeit zur Verfeinerung der Simulation beantragen können. Die ursprüngliche Illustris-Datenfreigabe erreichte 2.000 registrierte Benutzer und resultierte in mehr als 130 Veröffentlichungen. Während dieser Zeit konnten sich die Wissenschaftler auf die Support-Mitarbeiter von HLRS verlassen. Häufig traten dabei sog. Low Level-Problematiken auf, die mit dem Code, genauer gesagt mit einhergehenden Speicherabstürzen und Dateisystemproblemen zusammenhängen. Die langjährige Zusammenarbeit zwischen dem Team und HLRS wurde von den 2016 und 2017 verliehenen Golden Spike Awards gekrönt, die während des jährlich stattfindenden Results and Review Workshop an herausragende Anwenderprojekte vergeben werden.

Team-Mitglieder Dr. Dylan Nelson wies darauf hin, dass es noch immer Verbesserungsbedarf gibt, obwohl die Supercomputer der aktuellen Generation bereits Simulationen ermöglichen, die die meisten grundlegenden Probleme im Zusammenhang mit der kosmologischen Modellierung im großen Stil weitgehend überwunden haben.

„Erhöhte Speicher- und Bearbeitungsressourcen der Systeme der nächsten Generation werden es uns erlauben große Volumina des Universums mit höherer Auflösung zu simulieren“, so Nelson, denn: „Große Volumina in der Kosmologie sind von hoher Relevanz, um die großräumige Struktur des Universums verstehen und sichere Vorhersagen für die nächste Generation großer Beobachtungsprojekte treffen zu können. Eine hohe Auflösung ist wichtig, um unsere physikalischen Modelle der Prozesse in den jeweiligen Galaxien verbessern zu können.“

(EG)

Untersuchung der Windenergieerzeugung auf komplexem Terrain

Wissenschaftler der Universität Stuttgart nahmen mithilfe von HLRS-Ressourcen bei der Planung und Realisierung einer Versuchsanlage teil, die dazu beitragen könnte, die Windkraft in neuen Gebieten nutzbar zu machen.

Deutschland hat im Rahmen der laufenden Energiewende massiv in Windenergie investiert. So haben sich in einigen Teilen des Landes, wie der flachen Region in der Nähe der Nordseeküste, Windparks zu einem Element des Landschaftsbildes entwickelt.

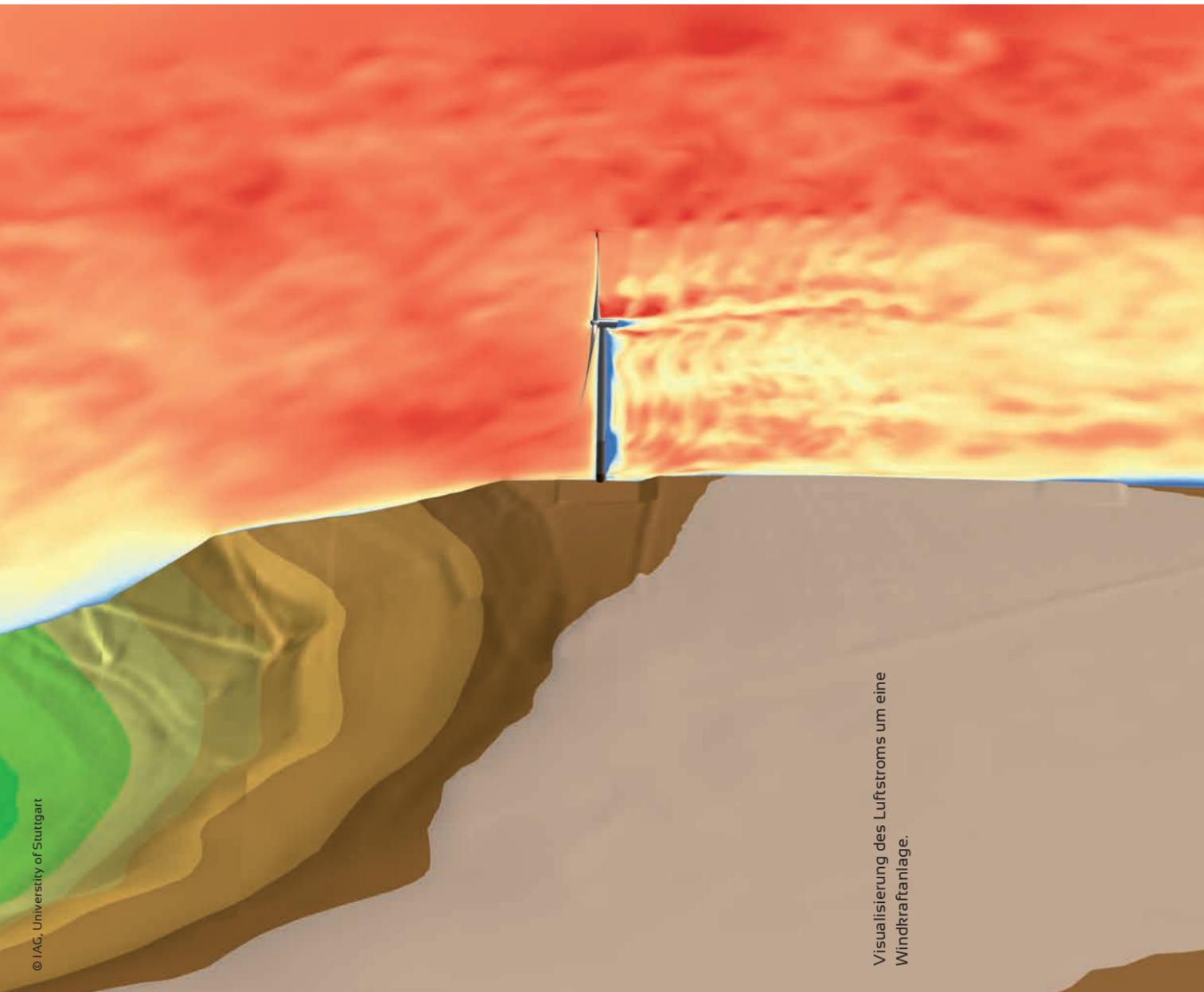
Trotz dieser Fortschritte befindet sich im Westen und Süden des Landes, wo die Bevölkerung dichter und die Industrie massiver angesiedelt ist, der größte Energiebedarf. Obwohl Energieunternehmen in den letzten Jahren Übertragungsleitungen installiert haben, um Windstrom aus dem Norden in diese Gebiete zu portieren, argumentieren viele Befürworter, dass die Erzeugung von Windenergie vor Ort unabdingbar sein wird, um den Bedarf an sauberer Energie zu decken.

Angesichts der Geländebeschaffenheit, die im Süden und Westen tendenziell unebener ist als im Norden, stellt dies jedoch eine Herausforderung dar. Um die Funktionsweise der Turbinen prognostizieren zu können existieren für flaches Terrain oder einen im Meer stehenden Windpark gute Modelle. Diese lassen sich

jedoch für die Planung einer Anlage in komplexer Topographie, wie sie in Süddeutschland vorzufinden ist, nicht zwangsläufig umsetzen, da unregelmäßige und uneinheitliche Windmuster vorkommen können.

Bestehende Modelle für derartige Standorte sind nicht so zuverlässig wie die für ebenere Landschaften. Darüber hinaus können die rauerer atmosphärischen Bedingungen Schwierigkeiten bei der Konstruktion bestehender Windturbinen verursachen. So wird die Identifizierung von Standorten, die effektiv für Windenergie genutzt werden und den Energieertrag sowie die Turbinenlasten quantifizieren könnten, durch diese Faktoren erschwert.

Um dieser Problematik zu begegnen, hat der Windforschungscluster WindForS (www.windfors.de) 2016 ein Projekt ins Leben gerufen, dessen Ziel es ist einen Forschungsstandort auf der Schwäbischen Alb einzurichten. Die Einrichtung wird weltweit die erste sein, die sich auf einem komplexen Terrain befindet, auf dem Wissenschaftler vollen Zugang zu den Turbinensteuerungen



Visualisierung des Luftstroms um eine Windkraftanlage.

und -einstellungen haben. Zu den Mitarbeitern gehören auch Wissenschaftler/innen des Institutes für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart. Unter Verwendung des Hazel Hen-Systems führten sie detaillierte Simulationen durch, die für die Auswahl und Planung des Standorts für das Testgelände und der spezifischen Standorte der Turbinen erheblich waren. Durch die Bereitstellung von Rechenleistung, die für die Modellierung solcher komplexer Systeme benötigt wird, wird das HLRS so auch bei künftigen Forschungsarbeiten des Projekts eine dauerhafte und unterstützende Rolle einnehmen.

Ein Windenergie-Labor

Das IAG-Team um Dr. Thorsten Lutz verwendet numerische Methoden der Computational Fluid Dynamics (CFD), um umfassende Modelle der komplexen Wechselwirkungen zwischen Windenergieanlagen und ihrer Umgebung zu entwickeln. Bei der Planung der anstehenden Windenergie-teststellen integrierten Wissenschaftler/innen des WindForS-Clusters Daten wie topografische Karten, Windgeschwindigkeitsmessungen, Vegetationsaufnahmen sowie geometrische und strukturelle Daten der Windturbinen, um ein extrem detailliertes Modell ihrer Funktionsweisen entwickeln zu können.

Sobald der Aufbau abgeschlossen ist, wird das Testgelände mit zwei Windturbinen sowie Messtürmen, Lidar-Geräten und Drohnen zur Dokumentation von Windströmung und Turbulenz ausgestattet sein. Die Windturbinen werden außerdem mit extrem empfindlichen Sensoren bestückt, um mechanische Belastungen und Formänderungen während des Betriebs nachverfolgen zu können. Die Daten, die durch diese Tests generiert werden, werden es den Stuttgarter Forschern

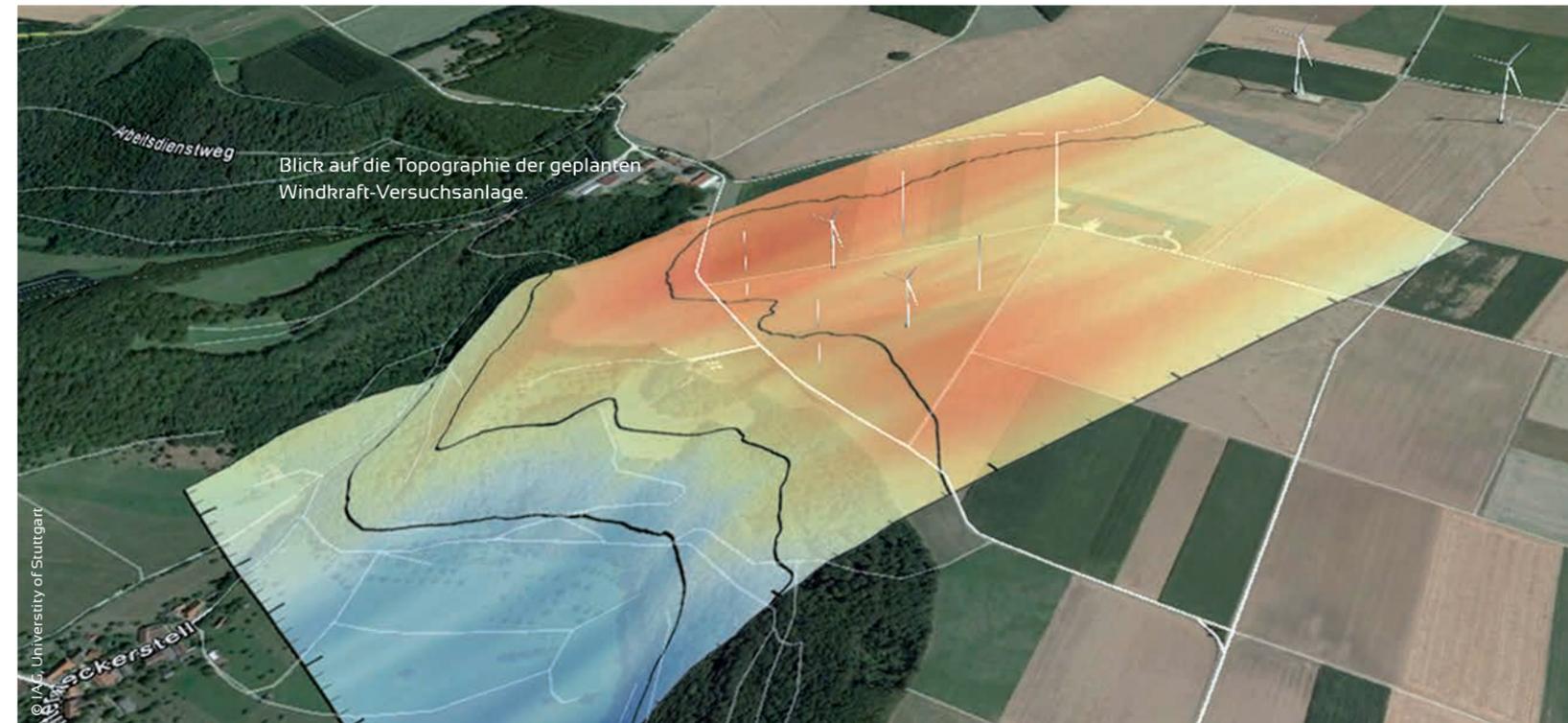
ermöglichen, ihre Modelle zu validieren und zu verfeinern, sodass das Verständnis der physikalischen Grundlagen der Windenergieerzeugung verbessert werden kann.

Verbesserung der Haltbarkeit und Reduzierung des Lärms

In der Praxis wird diese einzigartige Forschungseinrichtung mehrere Schlüsselprobleme der Windenergieerzeugung in komplexem Terrain angehen. Ein wichtiger Schwerpunkt liegt dabei auf der Untersuchung und Reduzierung der physischen Belastung von Windenergieanlagen. Der gestörte Zustrom von Wind auf Hügeln kann starke und unregelmäßige Vibrationen verursachen, die die aerodynamische Effizienz beeinträchtigen und gleichzeitig die Belastung und somit das Risiko einer Beschädigung der Turbine erhöhen. Dies zu verhindern und eine längere Lebensdauer der Turbinen sicherzustellen ist daher ein wichtiges Vorhaben.

„Mithilfe von Simulationen“, so Lutz, „helfen wir bei der Entwicklung von Konzepten für das Management der Rotorenbelastung und der Reduzierung der Vibrationen.“ Dieses Wissen könnte nicht nur die Langlebigkeit verbessern, sondern auch die Effizienz bei der Stromerzeugung erhöhen.

In Zukunft hofft das Team um Lutz auch das Verständnis für aeroakustische Geräuschmechanismen zu verbessern und dadurch bedingt eine Lärmreduktion, die aus dem Betrieb von Windkraftanlagen resultiert, erreichen zu können. Lärm resultiert aus der Wechselwirkung von Wind und Rotorblättern; wenn Luftdruckschwankungen Geräusche erzeugen, sind diese für das menschliche Ohr vernehmbar. Diese Störung kann es erschweren, akzeptable Standorte für Windkraftanlagen in dicht besiedelten Gebieten zu finden. Lutz geht



allerdings davon aus, dass das neue Testgelände die Wissenschaftler/innen befähigen wird, die Entstehung von Geräuschen besser zu verstehen. Auf diese Weise könnten Experimente mit modifizierten Rotorblättern und Rotorgeometrien entwickelt werden, die eine Lärmreduktion zum Ziel hätten.

Ein Testfeld für neue Windenergie-technologien

„In der Zukunft“, erklärt Lutz, „will WindForS Möglichkeiten zur Erprobung neuer Technologien erschaffen.“ Diese könnten beispielsweise die Erprobung von Blatt-designprototypen oder die Erforschung der Auswirkungen subtiler Veränderungen der Rotorform beinhalten. WindForS möchte dabei sowohl für akademische als auch industrielle Forschungsarbeiten als Partner fungieren. So könnten Unternehmen nach dem Aufbau Zeit auf dem Testgelände mieten, um Messungen, die für die Entwicklung neuer Konzepte zur Windgenerierung notwendig sind, durchzuführen. Für die am Projekt beteiligten Simulationswissenschaftler/innen bietet das Testgelände zudem die Möglichkeit, eigene

CFD-Modelle zu testen und zu verfeinern. Wenn sich neue Daten summieren und die Rechenleistung am HLRS zunimmt, könnten so immer präzisere Simulationen entwickelt werden, die das nötige grundlegende Wissen für zukünftige technologische Verbesserungen liefern.

Nachdem nun die meisten Vorbereitungen für das Testgelände abgeschlossen sind und lediglich noch die abschließende Umweltprüfung aussteht, erwarten die Forscher, dass der Bau im Jahr 2019 beginnt. Sobald der Betrieb aufgenommen werden kann, erhofft man sich durch das Testgelände einen erheblichen Erkenntnisgewinn zur Erweiterung der Möglichkeiten im Bereich der Windstromerzeugung in Deutschland und der ganzen Welt.

(CW)

Wetter und Klima mit verbesserten Modellen präziser Vorhersagen

Forscher der Universität Hohenheim haben die Auflösung vorhandener Klima- und Wettermodelle verbessert. Die optimierten Methoden können lokale und regionale Auswirkungen des Klimawandels, auch in bestimmten Regionen Deutschlands, präziser vorhersagen.

Die Klimaforscher der Universität Hohenheim nutzen seit Jahren Computermodelle, die immer präzisere Modelle zur Erforschung des Erdklimas liefern können und so zukünftige Klimaänderungen und unerwünschte Wettererscheinungen vorhersagen. Die Möglichkeit, Computermodellierungen auf den Supercomputern des HLRS zu erstellen, war unverzichtbar für die Forschung des Teams.

Das Klima eines Gebiets zu verstehen bedeutet nicht, lediglich das Wetter vorherzusagen. Obwohl Wetter und Klima oft synonym verwendet werden, haben sie eine völlig unterschiedliche Bedeutung. Als Wetter bezeichnet man Faktoren wie die Temperatur, den Niederschlag und die Windgeschwindigkeit, die an einem bestimmten Ort und zu einer bestimmten Zeit auftreten. Klima bezieht sich auf allgemeine Wettertrends über einen längeren Zeitraum. Die meisten Forscher sprechen von

dem repräsentativen Klima einer Region, das auf statistischen Daten von mindestens 30 Jahren beruhen.

Die Wissenschaftler der Universität Hohenheim sind Teil eines internationalen Konsortiums, die das Wetter- und Vorhersagemodell (WRF) entwickeln – eines der angesehensten und ausgereiftesten numerischen Modelle für atmosphärische Zirkulation der Welt.

Simulierte Jahreszeiten verbessern Einblicke

Selbst auf den leistungsfähigsten Supercomputern führen viele Klimaforscher ihre computergestützten Modellierungen mit relativ niedriger oder grober Auflösung durch, um Simulationen über eine große Fläche und einen längeren Zeitraum zu erhalten. Aufgrund rechnerischer Einschränkungen wird in vielen Klimasimulationen internationaler Konsortien ein begrenztes Gebiet in grobe Rechengitter aufgeteilt – mit Feldern von 12 auf 12

Kilometer oder mehr. Je feiner das Raster ist, desto mehr Details sehen die Forscher in ihren Simulationen. Auch mit der steigenden Anzahl von Eingabedaten, wie etwa komplexer Wolkenmikrophysik, korrekter Darstellung der Landoberfläche, Aerosolen in der Atmosphäre und präziseren Meeresoberflächentemperaturen, steigt die Genauigkeit einer Simulation.

Die erhöhte Auflösung und Detailgenauigkeit machen Berechnungen jedoch wesentlich zeitaufwendiger. Um dieses Problem zu umgehen, verwenden Wissenschaftler regionale atmosphärische Modelle wie das WRF. Damit können sie sich stärker auf die Region ihres Interesses konzentrieren, wie etwa einen Kontinent, und gleichzeitig Daten der gesamten Erdatmosphäre einbeziehen.

Hohenheimer Forscher, darunter Dr. Thomas Schwitalla, arbeiten nun daran, die jahreszeitliche Wettervorhersage zu verbessern. Dafür vergleichen sie eine hochauflösende WRF-Modellsimulation mit globalen meteorologischen Analysedaten und anderen hochauflösenden Beobachtungen aus demselben Zeitraum.

Schwitalla weist darauf hin, dass er durch die Konzentration auf eine Jahreszeit die Fähigkeit eines Modells überprüfen kann, das Wetter in einer Region in diesem Zeitraum statistisch vorherzusagen. Dies kann wiederum dazu beitragen, die Vorhersagequalität zukünftiger unerwünschter Wetterereignisse wie Dürren oder Hitzewellen zu verbessern.

In seiner jüngsten Arbeit hat Schwitalla von Februar bis Juni 2015 eine Simulation über den gesamten Globus (ohne die Eiskappen) mit ultrahoher Auflösung – Quadrate mit 3 auf 3 Kilometern – durchgeführt. Durch diese höchst rechenintensive Modellierung können Forscher testen, ob ihr Modell fähig ist, Wetter- und Klimaphänomene auf der Ebene zu modellieren, die dem jeweiligen Forschungsinteresse am besten entspricht.

Schwitalla hofft nun auf Zugang zur gesamten Hazel Hen und ihrem Nachfolgesystem, um mit seinem Team einen weiteren großen Sprung in der Klimaforschung zu wagen. So wollen er und seine Gruppe in Zukunft eine Auswahl jahreszeitlicher Simulationen durchführen und die Auflösung nach und nach auf einen Kilometer

erhöhen. Dadurch kann das Team die Prognoseunsicherheit des Modells bewerten und eine bessere Darstellung der physikalischen Prozesse erstellen.

Das zukünftige Klima Deutschlands modellieren

Neben relativ kleinen Zeitspannen in ultrahoher Auflösung nutzen die Hohenheimer Forscher die HLRS-Ressourcen auch, um größere Klimatrends in ferner Zukunft zu prognostizieren.

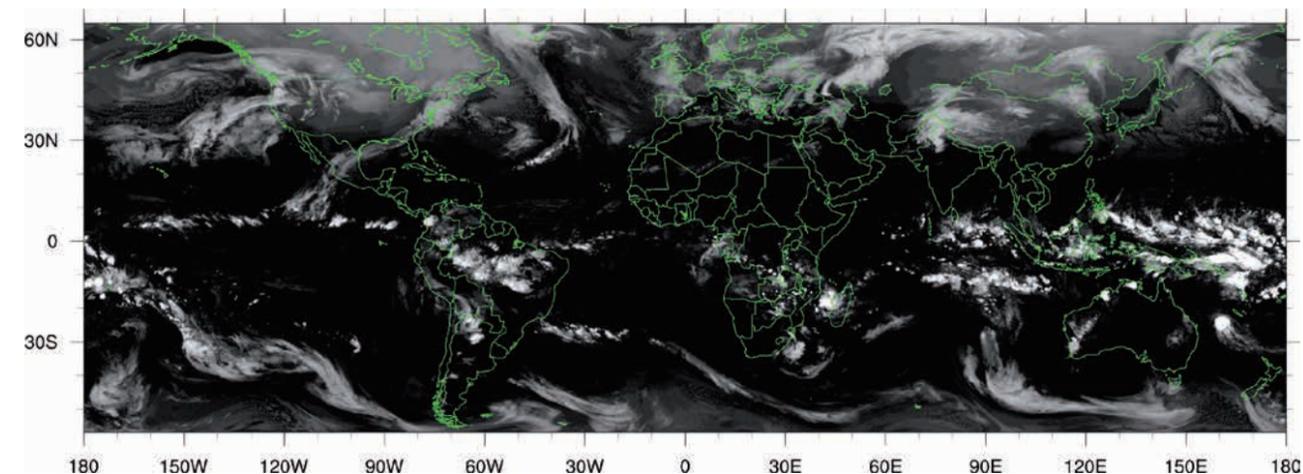
ReKliEs-De lautet der Name eines dieser Projekte. Drs. Kirsten Warrach-Sagi und Viktoria Mohr haben während der letzten drei Jahre gemeinsam mit anderen Klimaforschern daran gearbeitet, das Erdklima der Vergangenheit, Gegenwart und Zukunft über 140 Jahre hinweg zu modellieren.

Das Projekt wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) finanziert und ist Teil einer Initiative, die zu einer großen Reihe von europäischen Simulationen beiträgt. Diese wird wiederum vom Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) gefördert und soll globale Klimamodelle so

weiterentwickeln, dass sie auf der Ebene von Kontinenten präziser werden. Dafür nutzten Warrach-Sagi und ihre Mitarbeiter 97 Millionen Core-Stunden der Hazel Hen und erzeugten während ihrer Simulation 2 Petabyte an Daten – mehr als 2 Millionen Gigabyte – bei 5.400 Kernen pro Lauf und vier parallel durchgeführten Läufen. Sie modellierten Klimamuster von 1958 bis zum Jahr 2100, während sie das Klima in 1-Minuten-Zeitschritten simulierten und pro drei Stunden simulierter Zeit Daten exportierten.

Die Ergebnisse prognostizieren verheerende Auswirkungen auf die Ernte des Winteranbaus in Deutschland: Würde sich die Erde im nächsten Jahrhundert um eine Durchschnittstemperatur von 4° C erwärmen, werden die Sommer in Südwestdeutschland heißer und trockener und die Winter wärmer und feuchter, während Nordostdeutschland feuchter sein würde als heute. Diese Durchschnittserwärmung könnte erreicht werden, wenn die Treibhausgasemissionen nicht nach Standards wie dem Pariser Übereinkommen von 2015 reduziert werden.

Visualisierung der Wolkenbildung mithilfe des Wetterforschungs- und vorhersagemodells WRF (Weather Research and Forecasting). Wissenschaftler der Universität Hohenheim sind Teil des Entwicklungsteams der WRF-Software, einem der weltweit fortschrittlichsten Klimamodelle.



Das Team hat die wichtige Aufgabe, seine Datensätze auf der Website der Earth System Grid Federation (ESGF) zur Verfügung zu stellen, was bedeutet, dass das riesige Datenvolumen irgendwo gespeichert werden muss. Laut Warrach-Sagi verbringen die Forscher einen Großteil ihrer Zeit damit, Analysedaten auf Rechner auf- und wieder abzuspielen, diese für längerfristige Speicherung zu übertragen und herauszufinden, was davon für andere Wissenschaftler am wertvollsten ist. Die Datensätze werden auf der ESGF-Website gehostet, damit andere Klimaforscher diese Daten zum Beispiel für Folgenabschätzungen in den Bereichen Landwirtschaft, Forstwirtschaft oder Hydrologie verwenden können.

Aufgrund der wachsenden Rechenleistung ist Warrach-Sagi zuversichtlich, dass nicht nur der Klimawandel in höherer Auflösung modelliert werden kann. Klimaforscher sollen sich auch auf einen breiteren, multidisziplinären Modellansatz stützen können, der bessere Vorhersagen über die Auswirkungen des Klimawandels auf andere mögliche Aspekte der

menschlichen Aktivität zulässt. Die Klimaforscherin nutzt WRF zunehmend, um Landnutzungseffekte zu untersuchen und möchte mit diesen Simulationen bald Pflanzenwachstumsmodelle berechnen. (EG)

„Tue Gutes und lehre darüber“: HPC-Weiterbildung am HLRS

Unter anderem mit der Eröffnung eines neuen Gebäudes für HPC-Training, verstärkt das HLRS seine Bemühungen, seine Expertise mit akademischen und industriellen Forschern zu teilen.

Das Jahr 2017 war ein wichtiger Meilenstein in der Geschichte des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS). Bei einer Einweihungsfeier am 14. Juli versammelten sich hochrangige Vertreter des Landes Baden-Württemberg, der Stadt Stuttgart, der Universität Stuttgart und weitere geladene Gäste, um die Eröffnung eines neuen HLRS-Gebäudes zu feiern. Dieses dient dem Zweck Professionelle im Umgang mit Höchstleistungsrechnen (HPC) zu schulen.

Die rund 1.000 m² große und 6.8 Mio. € teure Einrichtung bietet einen hochmodernen Hörsaal, kleinere Seminarräume sowie Räumlichkeiten, die eine Erweiterung des Mitarbeiterstabes zulassen. Bereits jetzt lässt sich ein positiver Effekt auf die Qualität der Trainingsaktivitäten, Konferenzen und Symposien bescheinigen, die das HLRS anbietet. Die baden-württembergische Staatssekretärin für Finanzen Gisela Splett bezeichnete das HLRS als „Leuchtturm“ für

Wissenschaft und Forschung und lobte die Eröffnung der neuen HLRS-Ausbildungsstätte als eine Veranstaltung, die die globale Reichweite des Zentrums erhöhen wird. „Hier trifft sich ein Netzwerk, das zu unserer wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit in Baden-Württemberg und in Europa auch für zukünftige Generationen eine ganz wichtige Rolle spielt“, so Gisela Splett.

Die Eröffnung eines neuen HLRS-Trainingszentrums war jedoch nicht die einzige Optimierungsmaßnahme der Ausbildungsaktivitäten des Zentrums in den letzten Jahren. Durch die Pflege von Kooperationen in seinem umfassenden Netzwerk und die Integration neuer pädagogischer Ansätze und Bildungstechnologien verfolgt das HLRS eine vielschichtige Strategie, die auf die Verbreitung technischen Wissens abzielt, das für den Einsatz von Höchstleistungsrechnen erforderlich ist. „Sie kennen alle den Spruch: Tue Gutes und rede



Gisela Splett (Staatssekretärin im Finanzministerium Baden-Württemberg)

darüber“, so Simone Rehm, Prorektorin für Informationstechnologie (CIO) der Universität Stuttgart, bei der Einweihungsfeier. „Ich variere diesen Spruch aus dem heutigen Anlass: Tue Gutes und lehre darüber.“ Da Schulungen bereits einen wichtigen Stellenwert in der HLRS-Strategie einnehmen, erhöht das Institut die Auswirkungen von Simulationstechnologien auf Forschung und Entwicklung.

Wichtige Lücken in Bildung und Schulung schließen

Die numerische Simulation bietet seit langem leistungsfähige Werkzeuge für Forschung und Entwicklung. Die Verwendung von Simulationen auf Supercomputern erfordern jedoch spezielles Wissen, das viele Wissenschaftler und Ingenieure während ihrer akademischen Ausbildung nicht vermittelt bekommen. Dr. Rolf Rabenseifner, Leiter des HLRS-Trainingsprogramms, bezeichnet es als „(...) das Ziel des HLRS, diese Nische anzusprechen und eine professionelle Weiterbildung zu bieten. Diese vermittelt essentielle praktische Fähigkeiten, die die Wissenschaftler im Umgang mit Simulationen brauchen, um komplexe Probleme zu lösen.“

Da es sich beim HLRS um ein nationales Höchstleistungsrechenzentrum an der Universität Stuttgart handelt, besteht die Mehrheit der Teilnehmer aus akademischen Wissenschaftlern, die an öffentlich geförderten Projekten arbeiten. Wenn junge Wissenschaftler beispielsweise anfangen in einem Labor zu arbeiten, das sich mit Problemen der Aerodynamik, der Klimamodellierung oder der Molekulardynamik befasst, werden sie häufig vom Labor an das HLRS weitergeleitet, um die HPC-Fähigkeiten zu erwerben, die für die Forschungsarbeit dieses Labors erforderlich sind. Aus

diesem Grund konzentriert sich das Kern-HLRS-Trainingsprogramm seit mehr als 20 Jahren auf die wichtigsten Grundkenntnisse, die HPC-Anwender benötigen: parallele Programmierschnittstellen, wie MPI oder OpenMP sowie Fortran und Advanced C++ für Höchstleistungsrechnen und HPC-Architekturen. Im Laufe der Jahre wurde das Portfolio um weitere verwandte Themen wie Cluster-Dateisysteme und Leistungsoptimierung sowie spezialisierte HPC-Domänen, wie Visualisierung und Strömungsmechanik, erweitert. (Siehe S. 52 für eine vollständige Liste der angebotenen Kurse im Jahr 2017).

Der von HLRS angebotene Schulungsplan befasst sich darüber hinaus mit den neuesten HPC Trends, Tools und Herausforderungen. So veranstaltete das HLRS im Jahr 2017 beispielsweise einen zweitägigen Workshop der von Cray (dem Erbauer des HLRS-Supercomputers Hazel Hen) und dem Hardware-Hersteller NVIDIA organisiert wurde und der die aufstrebenden Bereiche der künstlichen Intelligenz und Deep-Learning entmystifizierte. In der Region Stuttgart, die die Heimat einer großen High-Tech-Community darstellt und umgeben von Automobilherstellern wie Daimler und Porsche ist, sind diese Bereiche aufgrund ihrer Relevanz für zukünftige selbstfahrende Fahrzeuge auf großes Interesse gestoßen. Der Kurs umfasst dabei Themen wie Objekterkennung, Bildsegmentierung und neuronale Netze und ist der am häufigsten besuchte Kurs des Jahres 2017.

„Supercomputing und seine Anwendungen entwickeln sich ständig weiter und wir müssen mit diesen Trends Schritt halten“, sagt Rabenseifner. „In naher Zukunft erwarten wir beispielsweise eine Konvergenz zwischen Datenanalyse und Höchstleistungsrechnen, die neue Herausforderungen beinhalten wird. Die

Mitarbeiter des HLRS werden ganz vorne dabei sein, um diese Konvergenz zu steuern und unser Schulungsprogramm wird es uns ermöglichen, das von uns gewonnene Wissen mit Menschen aus Wissenschaft und Industrie zu teilen, sodass deren Arbeit davon profitieren kann.“

Netzwerke aufbauen, Grenzen überschreiten

Die Schulungsaktivitäten des HLRS richten sich nicht nur an lokale Forscher, sondern bilden einen ehrgeizigen Ansatz zum Aufbau von HPC-Know-how in Deutschland, Europa und auf der ganzen Welt.

Als eines von drei Mitgliedern des Gauss Centre for Supercomputing e.V. (GCS) – einer Allianz, die das Rückgrat der nationalen HPC-Infrastruktur bildet – koordiniert das HLRS die HPC-Kurse. Dies geschieht in Zusammenarbeit mit GCS-Partnern wie dem Jülich Supercomputing Centre, dem Leibniz-Rechenzentrum sowie anderen deutschen Supercomputingzentren wie der Technischen Universität Dresden, der Universität Siegen und der Universität Frankfurt. Um einen einfachen Zugang zu HLRS-Wissen gewährleisten zu können, finden nicht alle Veranstaltungen in Stuttgart statt, sondern werden auch an anderen Standorten angeboten.

Des Weiteren bietet das HLRS in seiner Funktion als Mitglied der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) auch hochmoderne Kurse im Bereich des PRACE Advanced Training Centres (PATC) für Wissenschaftler auf der ganzen Welt an. Neben dem traditionellen Unterricht unterstützt das HLRS auch bei der Entwicklung von sog. „massive open online course“ (MOOC) für das parallele Rechnen.

Um die Reichweite der technischen Expertise des HLRS zu erhöhen, bietet das Zentrum auch ein „Train

the Trainer“-Programm mit einem auf Parallel Computing gesetzten Schwerpunkt an. Das Programm wurde gemeinsam mit an anderen Instituten tätigen Dozenten entwickelt und beinhaltet neben den neuesten Standards für MPI und OpenMP auch pädagogische Konzepte zur effektiveren Wissensvermittlung. Bisher hat das „Train the Trainer“-Programm des HLRS die Entwicklung neuer Kurse in Supercomputingzentren in Belgien und Österreich ermöglicht und für das Jahr 2018 ist eine Erweiterung des Angebots auch für die Niederlande und Irland vorgesehen.

Zu den internationalen Ausbildungskooperationen des HLRS gehört auch die alle zwei Jahre stattfindende zehntägige Deutsch-Russische Nachwuchswissenschaftlerschule und Konferenz für Paralleles Programmieren und Höchstleistungsrechnen in Nowosibirsk. Darüber hinaus werden auch Tutorien auf den jährlich stattfindenden Supercomputingkonferenzen, wie der ISC High Performance in Frankfurt oder der International Conference for High Performance Computing, Storage and Analysis (SC) in den Vereinigten Staaten, abgehalten.

Die Pflege des Netzwerks hat eine wichtige Onlinekomponente, da das HLRS seine aktualisierten Kursmaterialien über seine Website zur Verfügung stellt. „Indem wir elektronische Aufzeichnungen und Foliensets früherer Kurse zur Verfügung stellen“, erklärt Rabenseifner, „bieten wir Wissenschaftler/innen, überall und unabhängig von ihrer geografischen Lage, einen Zugang zu nützlichen Schulungsinformationen.“ Dieser „just-in-time“ Lieferansatz ermöglicht es den Wissenschaftler/innen auf das Wissen bei Bedarf zuzugreifen und gegebenenfalls Material nachzulesen bzw. zu überprüfen, deren Inhalt ihnen zwar im Kurs erklärt worden war, den sie aber möglicherweise noch nicht vollständig

beherrschen. Durch die maximale Flexibilität sind die Wissenschaftler/innen in der Lage die großen Herausforderungen von HPC leichter zu bewältigen.

Die Supercomputing-Akademie: Weiterbildung für HPC-Anwender in der Industrie

Obwohl der traditionelle HLRS-Kursbesucher in der akademischen Forschung tätig ist, ist die Simulation auch für kleine und mittlere Feinmechanikunternehmen, die einen wichtigen Beitrag zur guten wirtschaftlichen Lage Baden-Württembergs leisten, von hoher Bedeutung. Viele dieser Unternehmen sind jedoch noch nicht groß genug, um interne Vollzeit-HPC-Experten anzustellen, die Schritt halten könnten mit Best Practices in der Programmierung und dem Datenmanagement.

Im Jahr 2016 hat das HLRS es sich zum Ziel gemacht diese kritische Wissenslücke zu schließen. Mit Zuschüssen in Höhe von 2,5 Millionen € aus dem Europäischen Sozialfond, vom baden-württembergischen Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst und von der Universität Stuttgart konnte das HLRS ein Projekt zur Spezialisierung des Trainingsprogramms hinsichtlich der Bedürfnisse der Industrie beginnen. Die Initiative wird in Zusammenarbeit mit Partnern der Universität Freiburg, der Universität Ulm und Sicos BW entwickelt und 2018 für die Kursteilnehmer unter dem Namen Supercomputing-Akademie eröffnet.

„Die Supercomputing-Akademie stellt die nächste Generation der Fortbildung am HLRS dar“, so Dr. Andreas Wiese, CEO von Sicos BW, einer unabhängigen Organisation am HLRS, das den HPC-Zugang für kleine und mittelständische Unternehmen erleichtert. „So wie das neue Schulungsgebäude am HLRS physisch mit dem Gebäude verbunden ist, in dem sich Hazel Hen befindet, wird die Supercomputing-Akademie ein integraler

Bestandteil der HLRS-Schulungen sein.“ Während der Lehrplanerstellung für die Supercomputing-Akademie hat sich das HLRS mit einigen Einschränkungen beschäftigen müssen, die den Zugang zum bestehenden Trainingsprogramm für die industriellen HPC-Benutzer erschweren. „Von Anfang an haben wir uns im Dialog mit Vertretern der Industrie befunden, um ihre Bedürfnisse in Erfahrung zu bringen und um zu sehen, wie es um ihre HPC-Expertise bestellt ist“, so Markus Klietmann von Sicos BW. Eine wichtige praktische Überlegung war, dass industrielle HPC-Benutzer in der Regel nicht die Zeit haben, Tage oder Wochen ihrer Arbeitszeit zu nutzen, um an Schulungen in einem „traditionellen Klassenzimmer“ teilzunehmen. Aus diesem Grund wird die Supercomputing-Akademie einen pädagogischen Ansatz namens Blended Learning nutzen, der eine Kombination der besten Eigenschaften von Lernen im Klassenzimmer und Online-Lernen darstellt. Die Kursteilnehmer werden den Dozent und die Studenten vor Ort am HLRS treffen, obwohl der Großteil des Unterrichts online stattfinden wird. Zusätzlich zum individuellen Lernen, welches die Teilnehmer zu einem ihnen passenden Zeitpunkt durchführen können, wird es virtuelle Klassenzimmer geben, in denen sie sich jede Woche online treffen, sodass Ideen ausgetauscht und Fragen an die Trainer gestellt werden können.

Wenn man bedenkt, dass der typische industrielle Anwender acht bis zehn Stunden am Tag arbeitet und familiär eingebunden ist und sich anschließend noch Zeit finden muss, um für die HPC-Kurse zu lernen, bietet der Blended Learning-Ansatz eine sehr flexible Gestaltungsmöglichkeit. Die interaktive Dimension wird den Teilnehmern auch wertvolle branchenübergreifende Perspektiven bieten, die sie andernfalls nicht erhalten würden.



Die Supercomputing-Akademie wird im April 2018 mit einem Modul starten, das sich auf parallele Programmierung konzentriert. Zurzeit befindet sich das HLRS-Team in der Frühphase der Entwicklung zusätzlicher Module, die in den kommenden Jahren erscheinen werden. Zukünftige Themen des Moduls werden voraussichtlich HPC Cloud Computing, Leistungsoptimierung, ökonomische und ökologische Aspekte von HPC, Simulation, Visualisierung und Datenmanagement sein. Eine weitere interessante Dimension des Curriculums der Supercomputing-Akademie ist ihr modularer Charakter. Dies wurde auch bewusst auf der Grundlage von Interviews mit Branchenvertretern durchgeführt, die verschiedene Arten von HPC-Nutzern aufzeigten. Dazu gehören Ingenieure, für die HPC eine wichtige Komponente bei der Produktentwicklung darstellt, Programmierer, deren Code für den Betrieb auf den HPC-Systemen optimiert werden muss und Rechenressourcenmanager, die gewährleisten müssen, dass die Mitarbeiter in ihrem Unternehmen über die erforderlichen Computerressourcen verfügen. Ähnlich wie ein Chamäleon, versucht das HLRS sich den variierenden Benutzerbedürfnissen anzupassen.

„Wissen und Erfahrung im Bereich HPC gibt einem Unternehmen gewisse Vorteile“, so Hanna Skubski, Projektkoordinatorin der Supercomputing-Akademie

am HLRS. „Die Supercomputing-Akademie wird das Wissen der HLRS-Experten in der Industrie auf eine Art und Weise transferieren, die letztlich ihrer Innovationsfähigkeit zugutekommen wird.“

Mehr als ein Gebäude

Datenanalyse, -simulation und -visualisierung werden in den kommenden Jahren für Grundlagenforschung, Feinmechanik und andere Bereiche an Bedeutung gewinnen. Um die Vorteile dieser Tools ausnutzen zu können, muss das HLRS nicht nur seine erstklassige Supercomputing-Infrastruktur pflegen, sondern auch seine Nutzer im effizienten und effektiven Umgang befähigen. „Das neue HLRS-Trainingszentrum war für uns ein großer Schritt nach vorne“, so HLRS-Direktor Michael Resch. „Aber am Ende des Tages sind ein Gebäude und ein Supercomputer nur so wertvoll wie das, was Menschen damit machen. In diesem Sinne muss die Weiterentwicklung unserer Trainingsangebote – insbesondere für die Industrie – ein wesentlicher Bestandteil der Aktivitäten des HLRS sein. Sie werden das HLRS weiterhin als führendes wissenschaftliches Zentrum für Simulationstechnik in Deutschland und in Europa positionieren und den hiesigen Wissenschaftlern und Unternehmen letztendlich eine möglichst globale Wettbewerbsfähigkeit ermöglichen.“ (CW)

NEUIGKEITEN



HLRS und GCS feiern 10-jährige Zusammenarbeit

Auf der ISC 2017 feierte das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) gemeinsam mit dem Jülich Supercomputing Centre und dem Leibniz Supercomputing Centre das 10-jährige Bestehen ihrer gemeinsamen Dachorganisation Gauss Centre for Supercomputing (GCS). HLRS-Direktor und GCS-Vorstand Prof. Michael Resch sprach über die Zukunft von HPC an den Deutschen Tier 1 Rechenzentren. Während der ISC 2017 lobte Prof. Wolf-Dieter Lukas, Leiter des Referats für Schlüsseltechnologien am Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), das GCS als eine von Deutschlands größten wissenschaftlichen Erfolgsgeschichten. Laut Lukas plant der Bund höhere Investitionen in Hoch- und Höchstleistungsrechnen und strebt im Hinblick auf Exascale eine „Smart Scale“ Strategie an. (EG)

Landesministerin kündigt im HLRS neue HPC-Strategie an

Bei ihrem Besuch des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) am 24. August, sprach Theresia Bauer, Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg, erstmals offiziell über die geplante Landesstrategie für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HPC). Mit 500 Millionen € soll die HPC-Infrastruktur ausgebaut werden, wobei Bauer das HLRS als zentrales Element der landesweiten Digitalstrategie würdigt. Der Erfolg dieser Strategie hängt aber nicht nur davon ab, größere und schnellere Rechner zu bauen, appellierte Bauer. Die Zusammenarbeit zwischen Forschung und Industrie und die Ausbildung des HPC-Nachwuchses seien ebenfalls zentrale Elemente. In dieser Hinsicht seien die Kooperationen des HLRS mit Nutzern aus der Industrie gute Beispiele dafür, dass es sich lohnt, Nutzer aus Wissenschaft und Wirtschaft in der Bedienung von HPC-Anwendungen zu schulen. (EG)



Der Mittelstand lernt das HLRS kennen

Im Rahmen einer gemeinsam organisierten Veranstaltung der IHK Stuttgart mit Sicos BW konnten Vorstände lokaler Unternehmen im Mai hinter die Kulissen des HLRS blicken und dessen Angebots- und Dienstleistungsspektrum kennenlernen. Die Besucher erhielten eine Führung durch den Rechnerraum und die CAVE, einer Anlage für Virtual Reality. „Unser Ziel ist es, den Zugang zu Hoch- und Höchstleistungsrechnen und Simulation zu vereinfachen,“ sagte Sicos BW-Geschäftsführer Dr. Andreas Wierse. „Kleinere Unternehmen fühlen sich zu Beginn immer gehemmt, weil die Hürden auf dem Weg zur effizienten Nutzung von Hochleistungsrechnen unüberwindbar scheinen. Um darüber hinweg zu helfen, versuchen wir, ihnen das Wissen und die Ressourcen zu vermitteln, die sie brauchen um Hoch- und Höchstleistungsrechnen in ihre Arbeitspraxis zu integrieren.“ Diese Veranstaltung war Teil einer fortlaufenden Initiative zur Unterstützung kleinerer Unternehmen. (CW)

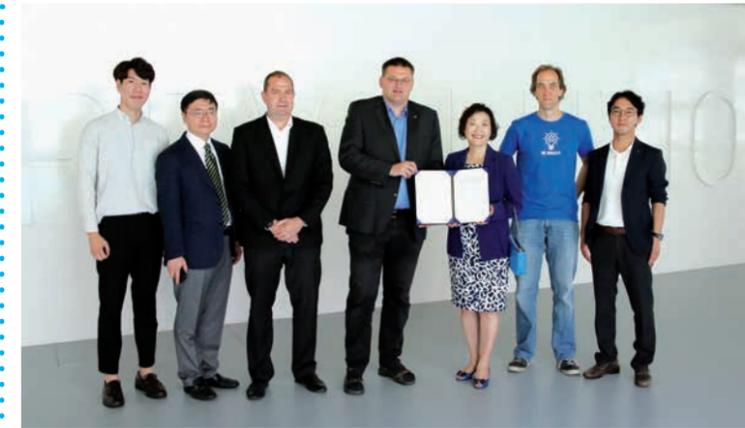


Verleihung der Golden Spike Awards

Jedes Jahr stellen Wissenschaftler, die einen Supercomputer am HLRS benutzen, auf einem Workshop den Fortschritt ihrer aktuellen Forschung vor. Dabei umfassen die Themengebiete der Projekte ein breites Spektrum wissenschaftlicher und technischer Fachrichtungen, wie Numerische Strömungsmechanik, Klimaforschung, Biologie, Materialforschung und Grundlagenforschung in der Physik und Astrophysik. Am Ende der zweitägigen Veranstaltung zeichnete die Jury die Leiter von drei hervorragenden Projekten mit dem Golden Spike Award aus: Johannes Letzgus (Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Universität Stuttgart), Prof. Volker Springel (Heidelberger Institut für Theoretische Studien, Universität Heidelberg) und Thorsten Zirwes (Engler-Bunte-Institut, Karlsruher Institut für Technologie). (CW)

Reallabor wird auf den Frühjahrmessen Stuttgart vorgestellt

Die Frühjahrmessen Stuttgart ist eines der größten deutschen Events zur Nachhaltigkeit und zieht jeden April mehr als 100.000 Besucher an. 2017 stellten Mitarbeiter des HLRS ihren Beitrag zum Projekt Reallabor Stadt:quartiere 4.0 vor, das als eines von 14 Reallaboren in Baden-Württemberg vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst gefördert wird. Die Labore sollen neue Methoden und Technologien für partizipative Stadtentwicklung untersuchen und erproben. Mitarbeiter des HLRS haben in diesem Rahmen Virtual Reality-Modelle der Städte Stuttgart und Herrenberg entwickelt, die Nutzern neue Planungsstrategien besser vermittelbar und zugänglich machen, bevor sie umgesetzt werden. Unter den Besuchern des Messestandes befanden sich Landesminister für Verkehr Winfried Hermann und Landesminister für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Franz Untersteller. (CW)



Asiatisch-Deutsche Zusammenarbeit verlängert

Das HLRS hat 2017 bestehende Kooperationsvereinbarungen mit dem Shanghai Supercomputing Center und dem Korea Institute of Science and Technology Information erneuert. Die Absichtserklärungen legen Möglichkeiten zur Zusammenarbeit zwischen dem HLRS und den beiden jeweiligen Zentren fest, wie etwa Anwendungen für numerische Algorithmen, parallele und vernetzte Computertechnologien, immersive Visualisierungstechniken und institutsübergreifende Bildungs- und Austauschprogramme. (CW)



Frau Prof. Dr. Johanna Wanka, Bundesministerin für Bildung und Forschung (Mitte), am HLRS-Stand auf der CEBIT 2017.



Sabine Kurtz
Michael Resch
Christine Neumann



Fabian Mayer
Ines Aufrecht
Michael Resch
Fritz Kuhn
Thomas Beisel

Regierungsbeauftragte zu Besuch am HLRS

Das HLRS hieß auch 2017 zahlreiche Vertreter von Bund, Land und Städten willkommen, um die Leistungsstärke der dort ansässigen Technologien zu demonstrieren und die Spitzenforschung, die diese Technologien ermöglicht, zu veranschaulichen.

Im Rahmen der IT-Messe CEBIT in Hannover besuchte Bundesministerin für Bildung und Forschung Prof. Dr. Johanna Wanka den HLRS-Stand. Nach einem umfassenden Gespräch demonstrierte ihr Dr. Uwe Wössner, Abteilungsleiter für den Fachbereich Visualisierung, unter anderem eine Technologie für die Simulation von Luftströmung um ein sich bewegendes Motorrad. Ihr ausdrückliches Interesse galt den Möglichkeiten, die das Hoch- und Höchstleistungsrechnen für die Adressierung technischer und gesellschaftlicher Probleme birgt.

Im April kamen die CDU-Landtagsabgeordnete Sabine Kurtz und Christine Neumann in Begleitung des parlamentarischen Beraters der CDU-Fraktion zu Besuch ans HLRS. Sie diskutierten die Rolle von Supercomputing

und Simulation in Wissenschaft, Industrie und politischen Entscheidungsfindungsprozessen.

Auch der Stuttgarter Oberbürgermeister Fritz Kuhn gehörte im letzten Jahr zu den Besuchern. Gemeinsam mit Fabian Mayer, Bürgermeister für Allgemeine Verwaltung, Kultur und Recht, und Leiterin für Wirtschaftsförderung Ines Aufrecht besichtigte er den Rechner Hazel Hen und erhielt eine Demonstration der Virtual Reality-Anlage CAVE. Die anschließende Diskussion beschäftigte sich mit der Rolle des HLRS in der Stuttgarter Kulturszene.

(CW)



HLRS stellt auf der SC17 virtuellen OP-Saal vor

Auf der SC17 Konferenz in Denver, Colorado demonstrierte das HLRS einen Visualisierungsansatz, der in Zusammenarbeit mit dem Medizintechnik-Hersteller Dräger entwickelt wurde. Dabei wurde Augmented Reality mit Luftströmungsdaten, die auf einem Supercomputer simuliert wurden, verknüpft. Mit Hilfe dieser Visualisierungen konnte Dräger seine medizinischen Geräte so entwerfen, dass Rückströmungen von unsauberen Bereichen des Operationssaals reduziert wurden und somit das Risiko von Wundinfektionen bei Patienten verringert werden kann. HLRS-Geschäftsführer Dr. Bastian Koller wurde auch auf Panels und Vorträgen des SC17 als Sprecher zum Thema Hochleistungs-Datenanalyse eingeladen.

(CW)

Projektstart von HPC-Europa 3 zur Förderung europaweiter Forschungsk Kooperation

Das EU-geförderte Projekt HPC-Europa3 bietet dem wissenschaftlichen Nachwuchs Stipendien zum Austausch an einem der acht teilnehmenden Rechenzentren an. Das HLRS plant in diesem Rahmen bis zu 150 junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit Zugang zu seinen Rechnersystemen bis zu einer Höhe von 4,2 Millionen Rechenstunden einzubinden. Insgesamt sollen alle teilnehmenden Rechenzentren 1.220 Nachwuchswissenschaftler/innen insgesamt 100 Millionen Rechenstunden zur Verfügung stellen. Zusätzlich möchte das HLRS Vertreter von kleinen und mittleren Unternehmen (KMUs) nach Stuttgart einladen, um ihnen zu vermitteln, welche Vorteile HPC für ihre internationale Wettbewerbsfähigkeit bringt. Aufgrund der starken Nähe zu Maschinenbau und Technik strebt das HLRS den Aufbau langfristiger Partnerschaften zum Technologietransfer mit den teilnehmenden KMUs an, um ihnen so die effektive Nutzung von HPC-Technologien und –Dienstleistungen zu ermöglichen.

(LB)



Japanische KMUs zu Besuch am HLRS

Bei ihrem Besuch erfuhren Vertreter japanischer kleiner und mittlerer Unternehmen (KMUs) und der NEC Corporation, wie das HLRS industrielle Forschung und Entwicklung unterstützt. Dr. Andreas Wierse, Geschäftsführer von Sicos BW, stellte in diesem Rahmen das HPC-Konzept für die Industrie des Landes Baden-Württemberg vor. Die unabhängige Einrichtung, die im HLRS ansässig ist, unterstützt KMUs, die daran interessiert sind, Hoch- und Höchstleistungsrechnen für ihr Unternehmen zu nutzen und stellt aus diesem Grund einen wichtigen Baustein des HPC-Konzeptes dar. Auf der Veranstaltung diskutierten alle Beteiligten, wie das HLRS und Sicos BW gemeinsam KMUs dabei helfen können, Probleme bei der Nutzung leistungsstarker Computertechnologien wie HPC, Datenanalyse und Machine Learning zu überwinden.

(CW)



Technologie zur Unfallanalyse auf der CEBIT vorgestellt

Im März trafen sich digitale Pioniere aus aller Welt auf der CEBIT 2017 in Hannover, der größten Messe für Informationstechnik weltweit. Dort stellte das HLRS einige aktuelle Anwendungen ihrer leistungsstarken 3D Laserscanning- und HPC-Visualisierungstechnologien vor, wie etwa VISDRAL. Dieser Ansatz nutzt 3D Technologien, um Fahrzeuge, die in einen Unfall verwickelt wurden, im Detail zu scannen. Dabei werden die Formen der Unfallfahrzeuge sowie weitere relevante Faktoren erfasst, wie die Beschaffenheit der Fahrbahnoberfläche und die Positionen von Gegenständen aus der Umgebung. Sobald diese Daten auf den Rechner importiert und überlagert werden, können Unfallmodelle simuliert werden um so ein genaues Verständnis vom Unfallhergang zu erhalten.

(CW)

KOOPERATIONEN



Wissenschaftler am HLRS unterstützen Entwicklung des MULTI-Aufzugsystems von thyssenkrupp Elevator

Mit Hilfe von Virtual Reality und numerischer Simulation leisten die Visualisierungsexperten des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) einen wichtigen Beitrag zur Entwicklung einer bahnbrechenden Technologie.

Im Juni 2017 nahm das Technologieunternehmen thyssenkrupp Elevator AG den weltweit ersten Aufzug in Betrieb, der sich sowohl vertikal als auch horizontal bewegen kann. Anstatt dass die Aufzugskabinen wie üblich von Kabeln gehalten werden, werden sie gemäß dem neuen Konzept MULTI an Schienen angeschlossen. Diese Bewegungsfreiheit ermöglicht es Architekten die Konstruktion großer Gebäude und Gebäudekomplexe komplett neu zu überdenken. Der erste, voll funktionsfähige Prototyp wird in einem speziell erbauten Turm bei Rottweil – zwischen Schwäbischer Alb und Schwarzwald – betrieben.

Die Mitarbeiter der Visualisierungsabteilung des HLRS arbeiten seit 2014 hinter den Kulissen an der Entwicklung von MULTI. Gemeinsam mit Ingenieuren von thyssenkrupp Elevator und Bauleitern der Ed. Züblin AG testeten sie wesentliche Merkmale des Aufzugssystems

vor dessen Bau mit Hilfe von Simulationen. Mit den Daten von thyssenkrupp Elevator schuf das HLRS Team eine Virtual Reality-Simulation des Aufzugssystems und des Turms. Nach der visuellen Wiedergabe dieser Simulation in der CAVE, einer immersiven, dreidimensionalen Virtual Reality-Anlage des HLRS, konnten Architekten und Ingenieure mit dem Modell interagieren und sich darin bewegen. Das verschaffte ihnen einen Eindruck davon, wie die Nutzer den eigentlichen Aufzug möglicherweise erleben könnten und gab ihnen die Möglichkeit, die hochkomplexe Mechanik des Systems in Aktion zu beobachten. Die Simulation half den Entwicklern außerdem bei der Identifikation fehlerhafter oder optimierbarer Merkmale. Das Zusammenstoßen von Maschinenteilen in Bewegung wird zum Beispiel allein durch herkömmliche, rechnerunterstützte Konstruktionssoftware (CAD) wesentlich schwerer erkannt.

In Zusammenarbeit mit Züblin integrierte das HLRS die Virtual Reality-Simulation auch in seine Strategie zur Bauwerksdatenmodellierung (BIM). Dadurch konnte auch simuliert werden, wie effizient sich der Aufzug durch die Konstruktion bewegen würde. Das BIM-Modell ermöglichte es außerdem den Bauleitern das Gebäude selbst zu planen. So wurde etwa bestimmt, wie große Bauteile – etwa Motorblöcke – in das Gebäude befördert werden und in Position gebracht werden können. Die HLRS-Mitarbeiter nutzten die Simulationen außerdem für die Modellierung der Luftströmung innerhalb und außerhalb des Turms. Dadurch wurden etwa turbulente Luftströme betrachtet, die entstehen, wenn Aufzugskabinen im Schaft aneinander vorbeifahren, oder wie der Turm selbst auf hohe Belastungen wie Stürme reagiert.

Besonders innovativ war das Modell, welches das HLRS für die Optimierung der Luftschachtkonstruktion entwickelte. „Normalerweise muss man bei der Gestaltung jeder neuen Aufzuggeometrie bei null anfangen und viele Berechnungen nochmals durchführen,“ so

Dr. Uwe Wössner, Abteilungsleiter im Bereich Visualisierung. „Mit unserem Simulationsansatz muss man lediglich die neue Geometrie digital importieren und einige Skripte ausführen. Das geht viel schneller und ist somit günstiger, als andere Methoden, die neue Ideen testen sollen.“

„Die Möglichkeit, ein MULTI-System in einem konkreten Gebäude während der Entwicklungsphase virtuell installieren zu können, ist ein gewaltiger Vorteil für die Zukunft,“ betont Wössner. „Dadurch können Kunden noch vor dem Bau sehen, wie der Aufzug betrieben wird und verschiedene Kombinationen ausprobieren und so herausfinden, welche ihre Anforderungen am ehesten erfüllt.“

Sobald der Bau physikalischer Prototypen untragbar zeit- und kostenintensiv wird, können durch den Einsatz von Simulation und Visualisierung Zeit und Kosten gespart und Verzögerungen der Bauarbeiten entgegen gewirkt werden. Mit dessen zunehmender Verbreitung wird der Beitrag des HLRS weiterhin wichtig für den zukünftigen Erfolg des MULTI-Systems sein. (CW)

Die Biene Maja wird mit HPC Innovation Award gewürdigt

Im Verlauf der ISC High Performance 2017 im Juni in Frankfurt präsentierte das Marktforschungsinstitut Hyperion Research den HPC Innovation Excellence Award. Einer der alljährlich vergebenen Trophäen ging an die Produktionsfirmen M.A.R.K. 13 und Studio 100 Media, die für den Animationsfilm *Die Biene Maja* einige der Animationen lieferten. Während der Produktion nutzten sie die Rechenleistung des HLRS um ca. 115.000 CGI-Bilder zu berechnen. Jeder Rahmen wurde

sowohl aus Perspektive des rechten, als auch des linken Auges berechnet – ein kaum tragbarer Rechenaufwand für einen herkömmlichen Computer. Der Erfolg dieses Projektes veranlasste das HLRS zur Beteiligung am Media Solution Center BW, das der Medienindustrie einen Zugang zu HPC-Lösungen zur Verfügung stellt. Das HLRS wird für die Produktion des Nachfolgers *Die Biene Maja 2: Die Honigspiele* seine Zusammenarbeit mit M.A.R.K. 13 fortsetzen.



Supercomputing unterstützt die Nachhaltigkeit: Ein Interview mit Claus-Peter Hutter



Seit 2010 führt das HLRS gemeinsam mit der Umweltakademie Baden-Württemberg das Projekt „Nachhaltigkeit in Rechenzentren“ durch. Mithilfe einer Förderung des Landesministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kultur identifiziert das Projekt Maßnahmen, die das HLRS vornehmen kann, um seine ökologische, ökonomische und soziale Verantwortung zu ergänzen und entwickelt einen Leitfaden, auf die andere HPC-Zentren zurückgreifen können, um solche Ziele selbst zu erreichen. Laut Claus-Peter Hutter, Leiter der Akademie für Natur- und Umweltschutz Baden-Württemberg hat die Kooperation mit dem HLRS seine ursprünglichen Ziele mehr als übertroffen und viele neue Möglichkeiten für die Zusammenarbeit mit regionalen Unternehmen und Gemeinden aufgezeigt.

? Warum arbeitet die Umweltakademie mit dem HLRS zusammen?

▶ Als Einrichtung des Landes Baden-Württemberg und seines Umweltministeriums ist es eine wichtige

Aufgabe der Umweltakademie, das Thema Nachhaltigkeit in der Gesellschaft zu verankern. Weil keine Einzelpersonen, individuelle Firmen oder Gemeinden Nachhaltigkeit alleine realisieren können, sind wir von vornherein sehr breit vernetzt und versuchen Partner zusammenzubringen, die unsere Nachhaltigkeitsziele gemeinsam fördern können.

2009 haben uns Dialogpartner aus der Wirtschaft auf das HLRS aufmerksam gemacht, und in Gesprächen mit HLRS-Direktor Michael Resch haben wir sehr schnell festgestellt, dass es gemeinsame Ansätze gibt, wie man Themen wie Nachhaltigkeit und Umweltvorsorge in einem Höchstleistungsrechenzentrum und mit dessen Vernetzung voranbringen kann.

Als Erstes haben wir einen Fahrplan entwickelt, wie man das Thema Nachhaltigkeit am HLRS selbst angehen kann, und es gab verschiedene Workshops, um zu definieren, was Nachhaltigkeit für das Institut und für die tägliche Arbeit bedeutet. Darauf aufbauend hat das HLRS mit unserer Unterstützung eine Nachhaltigkeitsstrategie entwickelt und setzt jetzt alles daran, diese

Strategie zu leben und fortzuentwickeln. 2018 wird das Zentrum sich auch um die EMAS-Zertifizierung bewerben – EMAS (Eco-Management and Audit Scheme) ist das anspruchsvollste Programm für Nachhaltigkeit in Organisationen der EU. Ein Energiemanagementsystem nach ISO 50001 wird 2019 auch am HLRS eingeführt. Während dieses Prozesses war es zudem interessant zu sehen, welche anderen, weiteren Möglichkeiten das HLRS für Nachhaltigkeit in Baden-Württemberg bietet.

? Wie trägt das HLRS zur Nachhaltigkeit in Baden-Württemberg bei?

▶ Das HLRS bietet ungeheure Möglichkeiten als „Environmental Provider“ in der Städteplanung und Entwicklung von Infrastruktur-Projekten bei der Gewerbeplanung. Gemeinsam mit dem HLRS haben wir zum Beispiel Symposien mit dem Verband Region Stuttgart veranstaltet – dieser ist in der Region Stuttgart für die überregionale Städte- und Raumplanung zuständig. Die Symposien haben schnell gezeigt, dass das

HLRS durch Simulation und Visualisierung helfen kann, Stadtentwicklungsprozesse ebenso wie Herausforderungen und vor allem Potentiale begreifbarer zu machen. Auch für stadtklimatologische Aspekte und Klimaschutz ist Simulation extrem relevant. Seitdem haben wir etliche Kommunen auf das HLRS aufmerksam gemacht, denen zuvor gar nicht bewusst war, welche Kompetenzen das HLRS bietet, um das vorhandene Datenmaterial optimal auszunutzen.

Auch für die Industrie in Baden-Württemberg ist die Simulation wichtig für Nachhaltigkeit. Höchstleistungsrechnen geht einher mit einem hohen Energieverbrauch, aber wenn man z. B. an Strömungswiderstände und andere Strömungstechnik im Fahrzeugbau denkt, erkennt man sofort, wie die Simulation hilft, enorme Mengen Energie einzusparen. Solche Ansätze sieht man heutzutage überall in vielen Bereichen der Ingenieurwissenschaften.

? Wie profitiert die Gesellschaft von der Forschung, die am HLRS betrieben wird?

Man wirft der Wissenschaft oftmals vor, dass die Grundlagenforschung generell vergisst, aufzuzeigen, wie die Menschheit und letztlich die Steuerzahler von ihr profitieren. Das HLRS ist natürlich ein wissenschaftliches Institut aber aufgrund seiner verschiedenen Forschungsaufträge aus Industrie und Gesellschaft hat es auch einen sehr engen Bezug zur Praxis. Das bietet die Möglichkeit, die Arbeit der Universität Stuttgart in die Gesellschaft einfließen zu lassen. Daher ist, aus meiner Sicht, die Zusammenarbeit der Umweltakademie mit dem HLRS ein sehr erfolgreiches Projekt das unsere ursprünglich gesetzten Ziele deutlich übertroffen hat und dies auch noch weiterhin tun wird. Durch unsere Kooperation mit dem HLRS haben wir Netzwerke ausgeweitet und neue Netzwerke geschaffen, von denen alle Beteiligten profitieren. Im Grunde verhält es sich auch hier nicht anders als in der Natur: Ökologische Systeme sind letztlich Netzwerke, in denen vieles voneinander abhängt. Je breiter wir uns alle aufstellen anstatt isoliert zu arbeiten, umso besser können wir für die Umwelt und die Gesellschaft agieren. (CW)

Virtual Reality-Kunstwerk wird am Tag der Wissenschaft im HLRS eingeweiht

Im Rahmen des jährlich stattfindenden „Tag der Wissenschaft“ der Universität Stuttgart präsentierte das HLRS im Juli 2017 eine Virtual Reality-Installation der brasilianischen Künstlerin Regina Silveira. Zuvor hatte sie das HLRS besucht um in der CAVE zu arbeiten, einer Anlage für Virtual Reality die für die Visualisierung

großer Datensätze genutzt wird. Das Kunstwerk mit dem Namen *Infinities* entstand in Zusammenarbeit mit dem Instituto Itaú Cultural, São Paulo auf Initiative von MATTconcept, einer internationalen Plattform für Kunstprojekte. Silveira spendete das Werk dem HLRS, wo es exklusiv ausgestellt werden darf.





Verbesserung von Sustained Simulation Performance auf Supercomputern

Die Teilnehmer eines internationalen Workshops diskutierten neue Strategien zur Verbesserung von Hochleistungsrechnersystemen.

Um die Potenziale paralleler Rechnersysteme voll auszuschöpfen, muss die Hardware korrekt konfiguriert und die Software so geschrieben sein, dass Einzelkomponenten einer Rechnung über mehrere Prozessoren verteilt werden können. Hinzu kommt, dass unterschiedliche Vorgänge, die innerhalb einer Berechnung ausgeführt werden, die Systemressourcen unterschiedlich beanspruchen. Damit Supercomputer effizient bedient werden können, müssen diese Einzelkomponenten so organisiert werden, dass die Ressourcen während der Rechenzeit gleichmäßig ausgelastet sind. Im HPC-Bereich spricht man dabei von „Sustained Simulation Performance“.

Am 10. und 11. Oktober trafen sich Nutzer und Hersteller von HPC-Systemen am HLRS um über Herausforderungen in Bezug auf Simulationsleistung zu sprechen und Innovationen zu diskutieren, die dieses Ziel erreichbarer machen. Zu Beginn der Konferenz diskutierten die

Teilnehmer die Supercomputer der nächsten Generation, die derzeit in Deutschland und Japan entwickelt werden – mit besonderem Fokus auf Hardware-Optimierung, die im Hinblick auf eine Verbesserung der Sustained Simulation Performance durchgeführt wurden. Im weiteren Verlauf wurden neue Ansätze für die Programmierung von HPC-Systemen beschrieben. Gegenstände der Diskussion waren dabei Strategien zur Algorithmen-Optimierung für parallele Rechenumgebungen, Reduktion von Speicherplatzbedarf, Beschleunigung der Eingabe/Ausgabe-Frequenz von Anwendungsdaten und die Verbesserung der Sustained Simulation Performance auf Cloud-Computing-Plattformen, in agentenbasierten Systemen und in Visualisierungsumgebungen. Zudem kamen Methoden der angewandten Informatik im Kontext von numerischer Strömungsmechanik, Strukturmechanik, Aerodynamik, und Multiphysik.

(CW)

Energieeffizienz in HPC-Zentren fördern

High-Performance Computing (HPC) ist ein unverzichtbares Werkzeug für die Untersuchung vieler Probleme in Forschung und Technologieentwicklung geworden. Aber die Nutzung dieser Möglichkeiten bedeutet auch Kosten. Der Betrieb eines Supercomputers verschlingt die gleiche Energie wie eine Kleinstadt, erfordert große Kühlsysteme, um die Überhitzung elektronischer Geräte zu verhindern, und benötigt Tonnen von elektronischer Hardware, deren Herstellung und Entsorgung erhebliche Auswirkungen auf die Umwelt haben.

All diese Tatsachen bedeuten einen kostenintensiven Betrieb von HPC-Systemen. Dies führt dazu, dass ihre Betreiber ein großes Interesse daran haben, sie so

effizient wie möglich zu gestalten. Jedes Rechenzentrum muss jedoch seinen eigenen Weg finden, um seinen Hochleistungsrechner nachhaltiger zu betreiben, nicht nur hinsichtlich seiner wirtschaftlichen, sondern auch hinsichtlich seiner ökologischen und sozialen Aspekte.

Um eine Diskussion über diesen ganzheitlichen Ansatz der Nachhaltigkeit anzuregen, organisierte und veranstaltete das HLRS vom 25. bis 26. Oktober 2017 seinen ersten Energieeffizienz-Workshop für nachhaltiges Hochleistungsrechnen. Die Veranstaltung brachte Vertreter von den drei Höchstleistungsrechenzentren des Gauss Centre for Supercomputing (GCS – HLRS, das Jülich Supercomputing Centre (JSC) und das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ – von Hochleistungsrechenzentren der Gauß-Allianz und von weiteren Hochschulen in Baden-Württemberg zusammen. Viele der Vorträge beriefen sich auf fortschrittliche Kühlsysteme und Ideen zur Wiederverwendung von entstandener Wärme. Sie gelten derzeit als die wichtigsten Stellschrauben zur Effizienzsteigerung in Rechenzentren. (CW)



Marina Köhn, Umweltbundesamt



Summer School: Computersimulation und Sozialwissenschaften

Das fünftägige Event wurde im September 2017 am HLRS mit dem Ziel ausgerichtet, ein interdisziplinäres Verständnis von Informatikern und Wissenschaftlern aus Geistes- und Sozialwissenschaften zu schaffen. Dafür wurden den Teilnehmenden aus dem Bereich der Sozialwissenschaften zu Beginn die Grundlagen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens vermittelt. Mit Diskussionen und Vorträgen über die Zuverlässigkeit von mathematischen Simulationsverfahren, die Herausforderungen der Sozialwissenschaften bei deren Verwendung und den Möglichkeiten von Virtual Reality für Forschung und Technologieentwicklung wurde tiefer in die Materie eingetaucht. Die Veranstaltung war der Auftakt einer geplanten interdisziplinären Kollaboration zwischen den organisierenden Parteien HLRS, Middlesex University London und Politecnico Milano. (CW)



Vladimir Titarev, Russian Academy of Sciences

Deutsche und russische HPC-Experten tauschen sich auf Konferenz aus

Die gemeinsam mit dem Keldysh Institut für angewandte Mathematik der Russischen Akademie der Wissenschaften organisierte Konferenz bot einen zwanglosen Rahmen für den internationalen Ideenaustausch und die Planung von Kooperationsmöglichkeiten. Etwa 70 Wissenschaftler kamen zusammen, darunter wichtige Persönlichkeiten aus den Mathematik- und PC-Communities der beiden Länder. Die Vorträge behandelten die Optimierung numerischer Methoden für HPC-Systeme, die Supercomputing-Architektur der Zukunft und wissenschaftliche sowie wirtschaftliche Anwendungsfälle. Die dritte Deutsch-Russische Konferenz soll im April 2018 in Kaliningrad stattfinden. (CW)

Herausforderungen der Industrie bei der HPC-Nutzung am Runden Tisch diskutiert

Obwohl die Rechenressourcen des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) primär großen akademischen Forschungsprojekten gewidmet werden, zählen auch Kunden aus der Industrie zu den Nutzern des HLRS. Durch die Zusammenarbeit mit privaten Technologieunternehmen aus unterschiedlichen Bereichen positioniert sich das HLRS insbesondere auch für kleine und mittlere Unternehmen (KMUs) als ein Partner für industrielle Forschung und Entwicklung in Baden-Württemberg.

Ganz ohne Zweifel: High-Performance-Computing (HPC) ist für Unternehmen ein unverzichtbares Werkzeug, um im globalen Markt effizienter und wettbewerbsfähiger zu agieren. Auch wenn HPC-Nutzer aus der Industrie – im Vergleich zu wissenschaftlichen Großprojekten – eher bescheidene Computerressourcen verwenden, sind sie mit HPC-spezifischen Herausforderungen konfrontiert. Diese sind jedoch anders gestaltet als die ihrer Kollegen aus dem akademischen Bereich. Der erste „Industrial HPC User Roundtable“, der am 8. Dezember 2017 am HLRS stattfand,

sollte dazu dienen, herauszufinden, worin genau diese besonderen Herausforderungen bestehen und wie HPC-Zentren wie das HLRS den Kunden aus der Industrie dabei helfen können, diese zu überwinden.

Mehr als 30 HPC-Anwender aus Unternehmen unterschiedlicher Größe und Branchen hatten sich zu der eintägigen Veranstaltung eingefunden, um besagte Herausforderungen zu diskutieren. Eingeladen zu der Veranstaltung hatte die Sicos BW, eine unabhängige, am HLRS ansässige Organisation, die KMUs den Zugang zu HPC-Ressourcen vermittelt. Die Vorträge und die regen Diskussionen zeigten, dass sich die HPC-Branche nicht in allen Bereichen so entwickelt, wie industrielle Anwender es sich wünschen würden. Die Teilnehmer diskutierten neue Herausforderungen für die Industrie bei der Hardware, Software und der Workflow-Integration, und sie wiesen auf den Bedarf an stetigen Weiterbildungsmöglichkeiten hin, um bei neuen Entwicklungen von Computing-Technologien und -Methoden auf dem aktuellen Stand bleiben zu können. (CW)



Workshops und Konferenzen

Date	Location	Partners	Topic
Feb 17	Stuttgart		Computer Simulation: Prediction, Risk, Uncertainty
Mar 27-29	Stuttgart		German-Russian Conference: Supercomputing in Scientific and Industrial Problems
Apr 3-5	Stuttgart	Russian Academy of Sciences Keldysh Institute	16th HLRS/hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems
Jun 1-2	Stuttgart		Workshop on Epistemic Opacity
Sep 11-13	Dresden		11th Parallel Tools Workshop
Sep 25-29	Stuttgart	Middlesex University London Politecnico Milano	Summer School: On Computer Simulation Methods
Oct 5-6	Stuttgart		High-Performance Computing in Science & Engineering: 20th Results and Review Workshop
Oct 10-11	Stuttgart	Tohoku University	26th Workshop for Sustained Simulation Performance
Oct 25-26	Stuttgart		Energy Efficiency Workshop for Sustainable High-Performance Computing 2017
Nov 2-3	Bad Boll		Science and Art of Simulation Workshop 2017
Dec 4-5	Stuttgart		7th German HPC Status Conference

HPC Fort- und Weiterbildung in 2017

2017 bot das HLRS 39 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprachen. Die Kurse fanden an 126 Tagen in Deutschland und anderen Ländern statt. Mehr als 1.000 Interessierte nahmen an den Kursen teil.

Date	Location	Topic
Jan 12	Garching	Introduction to Hybrid Programming in HPC *
Feb 13-17	Siegen	Introduction to Computational Fluid Dynamics
Feb 20-24	Dresden	Parallel Programming with MPI, OpenMP, and Tools
Mar 7-8	Stuttgart	OpenMP GPU Directives for Parallel Accelerated Supercomputers *
Mar 9-10	Stuttgart	Introduction to Parallel Programming with HPX NEU
Mar 13-15	Frankfurt	Parallelization with MPI and OpenMP
Mar 14-17	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
Mar 20-24	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing *
Mar 27-31	Stuttgart	Iterative Linear Solvers and Parallelization
Apr 3-7	Stuttgart	CFD with openFOAM®
Apr 4-7	Stuttgart	Cray XC40-Workshop on Scaling and Node-Level Performance
Apr 27-28	Stuttgart	Node-Level Performance Engineering *
May 4-5	Stuttgart	Cray & NVIDIA DLI – Deep Learning Workshop NEU
May 9-11	Vienna	Parallelization with MPI
May 29-30	Stuttgart	Cluster Workshop
May 31 - Jun 1	Stuttgart	Scientific Visualization
Jun 8-9	Vienna	Shared Memory Parallelization with OpenMP
Jun 12	Stuttgart	Introduction to Hybrid Programming in HPC (MPI+X)
Jun 29-30	Stuttgart	Introduction to Unified Parallel C (UPC) and Co-Array Fortran (CAF) *
Jul 3-4	Stuttgart	Efficient Parallel Programming with GASPI *

Jul 10-21	Novosibirsk	9th German-Russian Young Scientists' School and Conference on Parallel Programming and High-Performance Computing
Aug 21-24	Zurich	Parallel Programming with MPI/OpenMP
Aug 28 - Sep 1	Stuttgart	CFD with openFOAM®
Sep 4-8	Garching	Iterative Linear Solvers and Parallelization
Sep 11-15	Stuttgart	Introduction to Computational Fluid Dynamics
Sep 14-15	Stuttgart	Workshop on ZFS (Zonal Flow Server)
Sep 19	Stuttgart	Introduction to the Cray XC40 HPC System at HLRS
Sep 20-22	Stuttgart	Cray XC40-Workshop on Scaling and Node-Level Performance
Sep 26	Stuttgart	Introduction to Cluster File Systems
Oct 16-20	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (MPI, OpenMP, and Advanced Topics) * Including Parallel Programming Train the Trainer Program*
Nov 6-7	Stuttgart	Scientific Visualization
Nov 13-17	Stuttgart	StarCCM+ Training
Nov 20-22	Vienna	Parallelization with MPI
Nov 20-23	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
Nov 23-24	Vienna	Shared Memory Parallelization with OpenMP
Nov 27-29	Jülich	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP
Nov 27 - Dec 1	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing
Dec 1 + 4	Heverlee	Parallel Programming with MPI
Dec 14	Heverlee	Parallel Programming with OpenMP

* PATC Kurse: Das HLRS ist Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing (GCS), einem der sechs PRACE Advanced Training Centers (PATC) in der EU. Die gekennzeichneten Kurse sind teilweise von PRACE gesponsert und Teil des PATC Kursprogramms. Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website: www.hlrs.de/training/.

FORSCHUNG DES HLRS

Reallabor 4.0: Digitale Modelle für Stadtplanung unter Bürgerbeteiligung

Städte sind komplexe Systeme, die man teilweise nur schwer verstehen kann. Virtual Reality und andere Methoden, die am HLRS entwickelt werden, können dazu beitragen, Stadtplanung für das fachfremde Publikum verständlicher zu machen.

Für das Forschungsprojekt „Reallabor Stadt:quartiere 4.0“ entwickelten Forscher am HLRS digitale Visualisierungswerkzeuge, die die Darstellung und Diskussion komplexer technischer Details der Stadtplanung vereinfachen. Das vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg geförderte Projekt bildet damit einen wichtigen Baustein für die Beteiligung der Zivilgesellschaft in realen Planungsprozessen.

Mit Fokus auf die Städte Stuttgart und Herrenberg entwickelten die HLRS-Wissenschaftler detaillierte Modelle, in die sie vielschichtige Daten aus der Umgebung integrierten: dreidimensionale Vermessungsdaten lieferten geografische Basisinformationen zur Topografie. Ergänzend dazu wurden große Datenmengen mittels 3D-Laserscanning von Straßen, Gebäuden und anderen topographischen Gegebenheiten erfasst. Darüber hinaus integrierten die Wissenschaftler Daten von Bürgergruppen, darunter Luftqualitätsmessungen

aus dem OK Lab Stuttgart und eine Karte des ADFC Herrenberg, die mögliche Gefahren auf Radwegen aufzeigt.

Aufbauend auf diesen Modellen entwickelte das HLRS zwei Prototypen für immersive Visualisierungen. Der erste Prototyp erstellt ein physikalisches Modell für den Stadtteil Stuttgart-West und ein dazugehöriges virtuelles Modell. In der CAVE, einem 3D-Visualisierungsraum am HLRS, können schließlich unterschiedliche Planungsvarianten in Echtzeit visualisiert, eingesehen und sogar virtuell begangen werden.

Der zweite Prototyp basiert auf dem Visualisierungsmodell der Stadt Herrenberg. So können etwa Verkehrsströme und -knotenpunkte in der CAVE in Virtual Reality verfolgt werden. Die Stadt Herrenberg verfügt nun über die Möglichkeit, diesen Prototypen im Rahmen ihres Konzeptes für die Mobilitätsentwicklung (IMEP 2030) zu nutzen. Wie solche Kooperationen umsetzbar wären, wird derzeit diskutiert. (LB)

Mit MIKELANGELO HPC-Anwendungen in der Cloud rechnen

Als Partner in einem multinationalen EU-Forschungsprojekt entwickelten HLRS-Forscher eine Software, die zwei leistungsstarke Technologien miteinander verknüpft.

Häufig stehen Wissenschaftler oder Unternehmen vor rechenintensiven Problemen, die nur mithilfe von High-Performance Computing (HPC) gelöst werden können. Wenn dafür die notwendigen Computersysteme fehlen, gibt es die Möglichkeit, die Berechnungen auf physische HPC-Systeme auszulagern, wie etwa die des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS). Allerdings sind diese Systeme häufig nicht auf bestimmte Anwendungen ausgerichtet, weil etwa das für die Berechnung notwendige Programm in einer Programmiersprache geschrieben ist, die das System nicht unterstützt, oder weil die notwendige Software für ein anderes Betriebssystem optimiert ist.

Eine weitere Option, die zunehmend an Bedeutung gewinnt, ist die Durchführung solcher Berechnungen in der Cloud. Dort können Anwendungen kostengünstiger berechnet werden und sind flexibel zugänglich – sie sind aber deutlich weniger leistungsstark in Bezug auf

rechenintensive Aufgaben oder große Datenmengen, die für HPC-Anwendungen üblich sind.

Diesem Problem hat sich das Projekt MIKELANGELO angenommen, das mit rund 6 Millionen € aus dem Topf des Horizon 2020 Programms der Europäischen Union gefördert wurde. Mithilfe zahlreicher internationaler Partner wurde ein Softwarepaket entwickelt, das es Big Data und HPC-Anwendungen erlaubt, effizient in der Cloud ausgeführt zu werden. Das HLRS trug durch die Entwicklung eines Jobmanagement-Systems maßgeblich zum Erfolg des Projektes bei.

Ressourcenverteilung und I/O optimieren

Mithilfe sogenannter Virtueller Maschinen (VMs), die für die Vereinigung von HPC und Cloud benötigt werden, können Nutzer die Systembedingungen ihrer lokalen Rechner reproduzieren und gleichzeitig von den fehlenden, leistungsstärkeren Ressourcen profitieren, wie

etwa große Mengen an CPU und Speicherplatz. Wenn Nutzer ihre Berechnungen unter virtuellen HPC-Bedingungen vornehmen wollen, muss der zuständige Administrator zunächst die virtuelle Umgebung auf den speziellen Bedarf des Nutzers abstimmen. Zu definieren sind dafür etwa Speicherplatz, CPU, Betriebssystem und weitere Ressourcen und Systemvoraussetzungen. So können die Nutzer mit der virtuellen HPC-Systemumgebung genauso umgehen, wie mit einem traditionellen, physischen Supercomputer.

Das HLRS entwickelte in seiner Funktion als MIKELANGELO-Partner vTorque – eine Software, die diese Ressourcen in der Cloud flexibel verteilt und zuordnet. Damit können nicht nur die Befehlssequenzen einer Berechnung geplant werden. vTorque verwaltet gesamte virtuelle Infrastrukturen, indem die Nutzer der Software von ihren eigenen Computern aus eine komplette Anwendung regulieren können, ohne an ein konkretes Betriebssystem oder eine bestimmte Software gebunden zu sein. Eine weitere Herausforderung der Virtualisierung – insbesondere bei HPC-Anwendungen – liegt in der Eingabe und Ausgabe von Daten (I/O). Die großen Datenmengen, die verarbeitet und gespeichert werden müssen, benötigen gewaltige Mengen an Ressourcen. Weitere Partner des MIKELANGELO-Projekts entwickelten zu diesem Zweck Softwarekomponenten, die etwa virtuelles I/O durch höchst leistungsfähige, gekoppelte Netzwerke beschleunigen. Mitarbeiter des HLRS integrierten diese Softwarekomponenten anschließend in vTorque und präsentierten dessen Funktionsweise sowohl in der Cloud, als auch in HPC-Systemen.

Als die Wissenschaftler des HLRS eine identische HPC-Anwendung in beiden Umgebungen verglichen, lief diese auf einer VM mittels vTorque maximal 3%

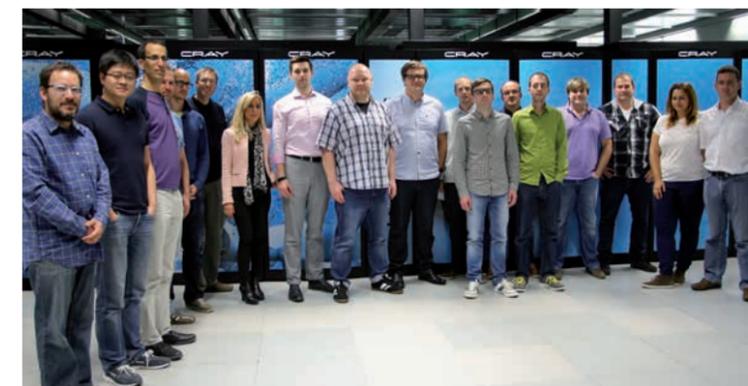
langsamer, als auf einem physischen Supercomputer – eine beeindruckende Leistung.

Ein Fahrplan für die Zukunft

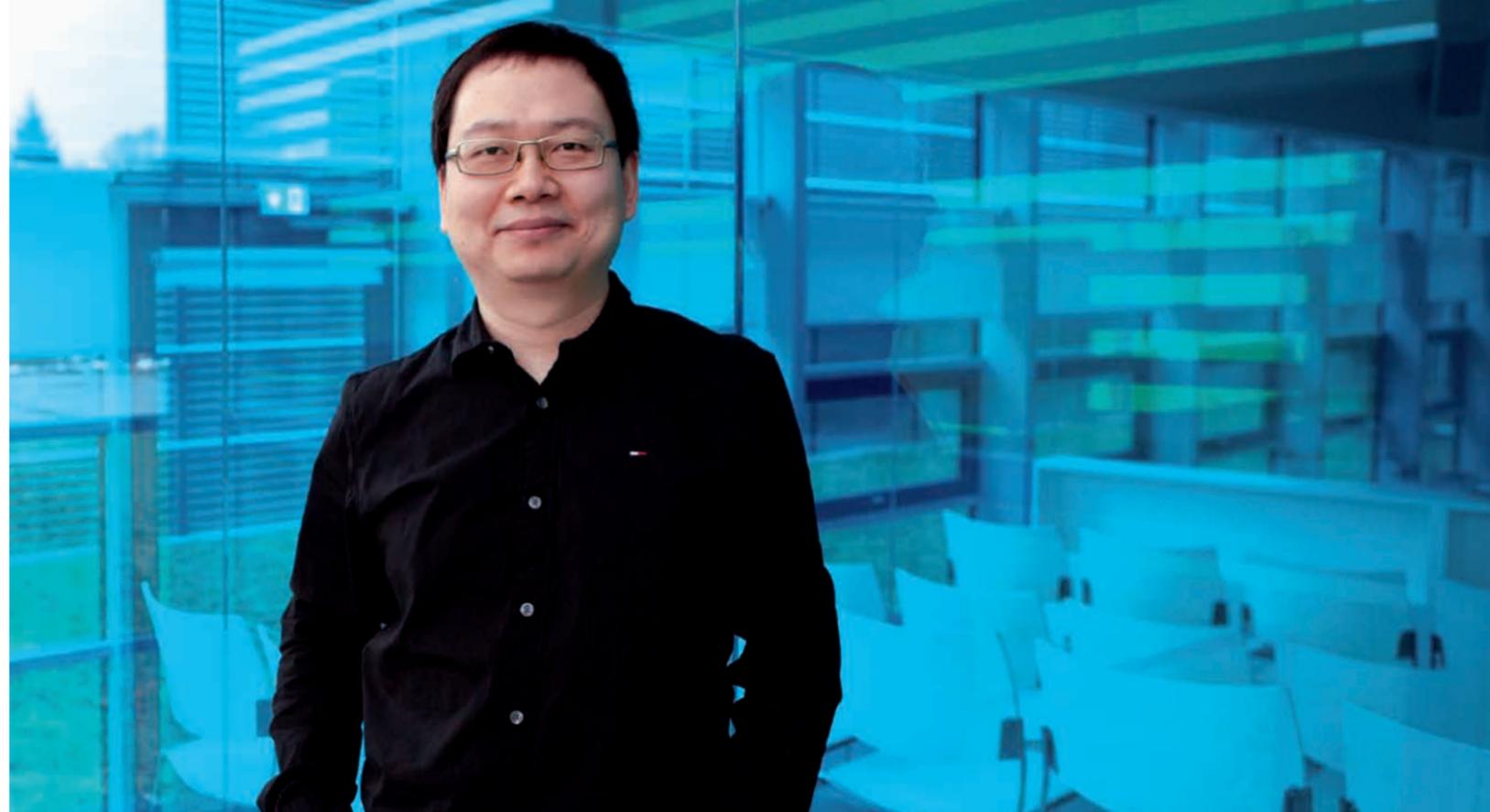
Das MIKELANGELO-Projekt wurde in eine Jahrespublikation erfolgreicher, über Horizon 2020 geförderter, deutscher Forschungsprojekte im Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik aufgenommen. Es beeinflusste auch die ETP4HPC Strategic Research Agenda der Europäischen Kommission.

Darin wird ein Fahrplan skizziert, wie das europäische HPC-Ökosystem Exascale-Kapazitäten erreichen kann, welche zukünftigen Projekte zu diesem Zweck gegründet werden müssen und wie das Horizon 2020 Programm vor diesem Hintergrund bewertet werden kann. In der aktuellsten Version von November 2017 wurde speziell das Thema Virtualisierung als Forschungsschwerpunkt für HPC-Systemarchitekturen und -Komponenten identifiziert und auf die Liste technologischer Trends der HPC-Community gesetzt.

MIKELANGELO wurde vom Slowenischen F&E-Institut XLAB geleitet und kooperierte mit Partnern aus Deutschland, Israel, Irland und Slovenien. (LB)



Forschung und Praxis: Ein Interview mit Xuan Wang



Xuan Wang studierte Computerwissenschaften an der Tongji-Universität in Shanghai bevor er nach Deutschland kam und an der Universität Stuttgart seinen Abschluss als Diplom-Informatiker erwarb.

Als wissenschaftlicher Mitarbeiter am HLRS übernahm er ein Forschungsprojekt und promovierte im Dezember 2017. Anfang 2018 wechselte er zur Daimler AG als Data und Solution-Architekt mit Fokus auf Big Data.

? Was war das Thema Ihrer Doktorarbeit, Herr Wang?

▶ Für ein Rechenzentrum wie das HLRS ist die Effizienz des HPC-Systems sehr wichtig. Bevor das Rechnen auf einem Supercomputer stattfindet – und auch danach – müssen riesige Datenmengen über verschiedene Filesysteme hinweg behandelt werden. Wenn wir diesen Prozess – wir nennen es Input/Output oder I/O – für einen Job optimieren, läuft der Job schneller. Wenn wir die Laufzeit von allen unseren Rechen-Jobs möglichst stark verkürzen, laufen mehr Jobs innerhalb

der gleichen Zeit und das System wird insgesamt produktiver.

Im gleichen Moment hat das Thema I/O bei unseren Nutzern keine Priorität. Sie suchen lediglich Ergebnisse und haben manchmal in ihrer Programmierung geringe Kenntnisse über I/O-Optimierung. In meiner Doktorarbeit habe ich eine semi-automatische Methode entwickelt, um diese Verfahren zu vereinfachen.

Die Software beschleunigt das Datenlesen und -schreiben, ohne dass der Nutzer wissen muss, wie das I/O funktioniert. Als Bonus können unsere Systemadministratoren ihre Programme überprüfen und die Nutzer darauf hinweisen, wie sie ihre I/O besser optimieren könnten. Im Endeffekt hilft diese Software dabei, dass das HLRS in der Lage ist, seine Anwender besser zu unterstützen und die wertvolle Rechenzeit auf dem Höchstleistungsrechner effizienter zu nutzen.

? Während Ihrer Doktorarbeit haben Sie gleichzeitig als wissenschaftlicher Mitarbeiter am HLRS gearbeitet. Was war Ihre Aufgabe?

▶ Neben meinem Forschungsprojekt war ich Datenbank-Administrator und hatte operative Tätigkeiten am HLRS bezüglich der Integration von Datenbanken der drei Mitglieder des Gauss Centre for Supercomputing – HLRS, das Jülich Supercomputing Centre (JSC) und das Leibniz Supercomputing Centre (LRZ).

Ich habe früher gedacht, dass nur die Erforschung spannender Themen während eines Doktoratsstudiums wichtig ist, um einen anspruchsvollen Job zu finden. Aber in diversen Vorstellungsgesprächen wurde mir verdeutlicht, dass meine Erfahrungen im operativen Bereich in Kombination mit meiner Forschungstätigkeit für die Industrie sehr interessant sind.

? Was reizt Sie an Ihrer neuen Stelle bei Daimler?

▶ Ich gehe jetzt zur Industrie, weil ich näher an „fassbaren“ Produkten arbeiten möchte. In meiner Doktorarbeit zum Beispiel wurde mein Code in einer Simulation gebraucht, um einen Lackierungsprozess zu optimieren. Ich habe mich gefreut, zu sehen, dass dies zu einer

Reduzierung der benötigten Core-Stunden geführt hat, aber wie genau die Simulationsergebnisse aussahen – das habe ich leider überhaupt nicht erfahren. Es wird für mich sicherlich spannend sein, zu beobachten, wie meine Beiträge die Herstellung von neuen Produkten beeinflusst. Als Informatiker wird mir das auch wertvolles Feedback geben und mich motivieren, meine Software fortlaufend zu verbessern.

Obwohl ich jetzt das HLRS verlasse, glaube ich nicht, dass ich HPC komplett hinter mir lassen werde. Momentan interessiert sich die Automobilindustrie sehr für autonomes Fahren und Konnektivität. Dafür braucht sie viele Mitarbeiter mit IT-Wissen. Auch diese Branche sammelt enorm große Datensätze und braucht HPC, um diese zu analysieren. Die Kombination meiner Erfahrungen am HLRS – meine Forschung sowie meine Arbeit im operativen Bereich – hat mich gut darauf vorbereitet, in dieser neuen Welt wichtige Beiträge zu liefern.

(CW)

Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Neben der Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Forscher und Ingenieure aus Wissenschaft und Industrie, wird das HLRS für eigene Forschungsvorhaben zu wichtige Themen im Hochleistungsrechnen gefördert. Diese Projekte, die meist in Zusammenarbeit mit weiteren Partnern durchgeführt werden, beschäftigen sich mit den wichtigsten Herausforderungen und Möglichkeiten im HPC-Bereich. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2017. Erfahren Sie mehr über unsere aktuellen Projekte auf unserer Website:

www.hlrs.de/about-us/research/current-projects/

Projekt	Dauer	Gefördert durch
BEAM-ME → Ziel ist das Ausschöpfen des Potenzials, welches parallelisiertes Rechnen auf Hochleistungsrechnern mit verteiltem Arbeitsspeicher für die hochaufgelösten Optimierungsmodelle der Energiesystemanalyse bietet.	Dezember 2015 – November 2018	BMBF
bw Naha 2 → Die Implementierung eines Energiemanagementsystems nach ISO 50001 und eines Umweltmanagementsystems nach EMAS (Eco-Management and Audit Scheme) soll Verbräuche senken sowie die Umweltleistung verbessern und so zur Nachhaltigkeitsstrategie am HLRS beitragen.	Januar 2017 – Dezember 2019	MWK
BW Stiftung II → Die BW Stiftung unterstützt baden-württembergische Hochschulen und gemeinnützige außeruniversitäre Forschungseinrichtungen bei der Nutzung der Rechner des HLRS und berät ggf. hinsichtlich möglicher Optimierungen.	Oktober 2016 – September 2019	MWK
bwDataArchiv → Das Projekt entwickelt die technische Infrastruktur für die Langzeitspeicherung und entwickelt eine Service für die sichere Speicherung von wissenschaftlichen und kulturelevanten Daten.	Januar 2015 – Juli 2017	MWK
bwHPC-C5 → Das Projekt koordiniert Unterstützung von Nutzern des High Performance Computing (HPC) in Baden-Württemberg und die Umsetzung aller damit verbundenen Maßnahmen und Aktivitäten.	Juli 2013 – Juni 2018	MWK

bwITsec → EbwVisu entwickelt einen Service zur Fernvisualisierung von wissenschaftlichen Daten, der eine hohe Skalierbarkeit durch Cloud-Technologien gewährleistet.	Oktober 2015 – Dezember 2017	MWK
bwVisu → bwVisu entwickelt einen Service zur Fernvisualisierung von wissenschaftlichen Daten, der eine hohe Skalierbarkeit durch Cloud-Technologien gewährleistet.	August 2014 – Juli 2017	MWK
CATALYST → CATALYST untersucht Methoden zur Analyse von Modellierungs- und Simulationsdaten mit dem Ziel, HPC und Datenanalyse zu verknüpfen..	Oktober 2016 – September 2019	MWK
CoeGSS → Das Centre of Excellence for Global Systems Science bietet Entscheidungshilfen für globale Herausforderungen. Es verbindet Hochleistungsrechnen mit Gedanken zu globalen Systemen, um wirtschaftliche, politische und gesellschaftliche Entscheidungen zu verbessern.	Oktober 2015 – September 2017	EU
DIPL-ING → Ziel des Projekts ist es, ein effizientes Datenmanagement im Hinblick auf große Mengen wissenschaftlicher Daten aus den ingenieurwissenschaftlichen Studiengängen der Universität Stuttgart zu untersuchen.	April 2017 – März 2019	BMBF

EOPEN November 2017 – Oktober 2020 EU
→ EOPEN nimmt sich den massiven Datenströmen aus Erdbeobachtungsdaten an, um die Methoden zu Datenharmonisierung, Standardisierung, Fusion und Austausch skalierbar zu machen.

EuroLab-4-HPC September 2015 – August 2017 EU
→ Ziel von EuroLab-4-HPC ist die Einrichtung eines europäischen Exzellenzforschungszentrums für Höchstleistungsrechner.

EUXDAT November 2017 – Oktober 2020 EU
→ EUXDAT bietet eine Plattform, die HPC- und Cloud-Infrastrukturen vereint, um eine große Menge heterogener Daten zu verwalten und zu verarbeiten. Dadurch soll die nachhaltige Entwicklung in der Landwirtschaft unterstützt werden.

ExaFLOW Oktober 2015 – September 2018 EU
→ ExaFLOW adressiert algorithmische Herausforderungen der numerischen Strömungsmechanik, um Simulationen in Exascale zu ermöglichen. Für die Bereitstellung von Open-Source-Anwendungen werden industrielle Anwendungsfälle durchgeführt.

Exasolvers Mai 2016 – April 2019 DFG
→ Exascale Computer zeichnen sich durch hohe Parallelität aus. Exasolvers vereint relevante Aspekte hochskalierter Problemlösungen und entwickelt Methoden, die perfekt skalieren und eine optimale Komplexität aufweisen.

EXPERTISE März 2017 – Februar 2021 EU
→ EXPERTISE ist ein Europäisches Ausbildungsnetzwerk (ETN), das die nächste Generation von Maschinenbau- und Informatikingenieuren ausbildet. Das Forschungsziel ist die Entwicklung eines Instruments für die Strömungsanalyse großflächiger Modelle von Turbinenkomponenten, um den virtuellen Test der gesamten Maschine zu ermöglichen.

FORTISSIMO 2 November 2015 – Oktober 2018 EU
→ FORTISSIMO 2 unterstützt kleine und mittlere Unternehmen (KMU) dabei, Simulationen auf Supercomputern zu berechnen um ihr Kerngeschäft zu erweitern und so ihre Wettbewerbsfähigkeit zu verbessern.

HPC Europa3 Mai 2017 – März 2020 EU
→ HPC Europa3 zielt darauf ab, die transnationale Zusammenarbeit zwischen (Nachwuchs-) Wissenschaftlern aus EU-Ländern zu fördern, die sich mit Themen wie Anwendungen, Tools und Middleware für HPC befassen.

InHPC-DE November 2017 – September 2021 BMBF
→ Ziel des InHPC-DE-Projekts ist die zunehmende Integration der drei Gauss-Zentren. Das Projekt umfasst Förderung einer 100-GBit-Verbindung zu den deutschen Wissenschaftsnetzen sowie Möglichkeiten für Hochgeschwindigkeits-Datenmanagement und Visualisierung.

iWindow September 2014 – August 2017 BMBF
→ In modernen Werkzeugmaschinen können Bediener über Beobachtungsfenster laufende Prozesse beobachten und steuern. iWindow erweitert das Fenster um computergenerierte Bilder und zusätzliche Informationen.

Media Solution Center (MSC) Januar 2015 – Oktober 2017 MWK
→ Ziel des MSC ist eine bessere Vernetzung von Medienindustrie und Forschung in den Bereichen Simulation und High Performance Computing durch den Aufbau eines Netzwerkes und der Durchführung von Forschungsprojekten.

MIKELANGELO Januar 2015 – Dezember 2017 EU
→ MIKELANGELO will die Reaktionsfähigkeit, Agilität und Sicherheit virtueller Infrastrukturen durch verpackte Anwendungen verbessern. Dabei helfen das Gastbetriebssystem OSv und der superschnelle Hypervisor sKVM.

MoeWe Juli 2016 – Dezember 2020 ESF, MWK
→ Um den langfristigen Bedarf an Supercomputing-Experten zu decken, bietet Moewe ein modulares, flexibles Trainingsprogramm an. So werden Branchenexperten zu Experten im Bereich High Performance Computing.

MontBlanc 3 Oktober 2015 – September 2018 EU
→ MontBlanc 3 entwirft eine neue, innovative HPC-Systemarchitektur bestehend aus energieeffizienten Lösungen, die in eingebetteten und mobilen Geräten verwendet werden.

MWK CoE: Automotive März 2016 – Juni 2018 MWK
→ In diesem Projekt sollen die Themen Simulation und HPC für die Automobilindustrie etabliert und gestärkt werden. Mithilfe internationaler Vernetzung und der Analyse von Fördermöglichkeiten soll ein Exzellenzzentrum entstehen.

PetaGCS Januar 2010 – Dezember 2019 BMBF / MWK
→ Ziel des Projektes PetaGCS ist die Beschaffung und der Betrieb der nächsten Generation Supercomputer für das HLRS für die Jahre 2011 bis 2019. Die Beschaffung wird vom Gauss Centre for Supercomputing (GCS) koordiniert.



HPC ERLEBEN

HLRS stellt Nachhaltigkeit in den Fokus

Im Rahmen der NI-Tage 2017 organisierte das HLRS eine Veranstaltung, um die Bemühungen an der Universität Stuttgart im Bereich Nachhaltigkeit zu präsentieren.

Die Suche nach nachhaltigen Lösungen beim Höchstleistungsrechnen (HPC) ist wegen des enormen Strom- und Wasserverbrauchs zu einem unvermeidlichen Thema geworden. Vor diesem Hintergrund werden die Verbesserung von Effizienz, der Einsatz von umweltfreundlichen Produkten und andere Bemühungen, um Umweltbelastungen und soziale Auswirkungen zu vermindern, erforderlich. Dadurch kann sichergestellt werden, dass HPC weiterhin praktikabel bleibt.

2014 erhielt das HLRS eine finanzielle Förderung vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, um das Projekt Nachhaltigkeit in HPC-Zentren durchzuführen. In Anerkennung des Erfolges wurde im Jahr 2017 ein Nachfolgeprojekt gestartet. Seitdem ist Nachhaltigkeit zu einer wichtigen Dimension für die Forschung am HLRS geworden, die zu einer umweltverträglichen Entscheidungsfindung beiträgt und die Arbeitsbedingungen im Zentrum verbessert.

Solche Aktivitäten am HLRS sind nur einige Beispiele unter vielen an der Universität Stuttgart, sich den Herausforderungen im Bereich Nachhaltigkeit zu stellen. Aus diesem Grund zielte der erste Nachhaltigkeitstag der Universität darauf ab, Initiativen mit dem Schwerpunkt Nachhaltigkeit weiter bekannt zu machen, das Interesse der Studierenden zu wecken und sie zu neuen Ideen zu inspirieren.

In einer Reihe von Vorträgen sprachen Spezialisten aus verschiedenen Bereichen der Universität wichtige Herausforderungen und Lösungen an. Mitarbeiterinnen des Nachhaltigkeitsprojekts am HLRS stellten auch die Nachhaltigkeitsinitiativen am HLRS vor. Im Foyer vor dem Hörsaal stellten das HLRS und mehrere Nachhaltigkeitsinitiativen an der Universität ihre Aktivitäten mit dem Ziel vor, Studenten und andere Passanten zu informieren und sie dazu zu motivieren, sich mit dem Thema Nachhaltigkeit auseinanderzusetzen. (CW)



Schülerinnen besuchen das HLRS am Girls' Day

Der Girls' Day ist eine jährlich stattfindende Veranstaltung, bei der Unternehmen und Organisationen aus ganz Deutschland gezielt bei Mädchen und jungen Frauen das Interesse für technische und naturwissenschaftliche Berufe wecken wollen. Auch das HLRS empfing am 27. April einigen Schülerinnen von Stuttgarter Gymnasien, stellte ihnen grundlegende Konzepte des Höchstleistungsrechnens vor und demonstrierte, wie es in der Entwicklung moderner Technologien eingesetzt werden kann. „Selbst wenn sich die Mädchen schlussendlich gegen eine Arbeit im Höchstleistungsrechnen entscheiden, möchten wir, dass sie Spaß haben,“ meint die Organisatorin Jutta Sauer. „Sie sollen ein neues Gefühl für ihre Möglichkeiten bekommen, wenn sie über ihr zukünftiges Berufsleben nachdenken.“

(CW)



Schüler für erfolgreiche „Simulierte Welten“-Projekte ausgezeichnet

Im Juli nahmen sechs Schülerinnen und Schüler ihre Urkunden für erfolgreich durchgeführte Projekte zum Thema Simulation entgegen, für deren Umsetzung die Nachwuchswissenschaftler 1.000 € aus dem Projekt Simulierte Welten erhalten hatten. Dieses wird vom HLRS mit dem Ziel durchgeführt, Schülerinnen, Schüler und deren Lehrkräfte für die Bedeutung und Anwendung von Simulationen zu sensibilisieren und ihr Interesse am Programmieren zu fördern. Die Schülerprojekte thematisierten den Blutkreislauf in einem menschlichen Herzen, Verkehrssimulationen und die technikphilosophische Auseinandersetzung mit dem Wahrheitsgehalt von Computersimulation.

(CW)

Öffentlicher Vortrag beleuchtet Simulationen und ihre Grenzen

Vor einem vollen Saal im Carl-Zeiss-Planetarium Stuttgart vermittelte HLRS-Direktor Michael Resch zentrale theoretische Konzepte, die sich mit Merkmalen und Zuverlässigkeit von Computersimulationen auseinandersetzen. Denn obwohl Simulationen ein wichtiges Instrument zur Analyse komplexer Probleme darstellen, stellte Resch klar, dass menschliche und technische Fehler und Verzerrungen nicht ignoriert werden dürfen. Demnach müssen die Nutzer dieser Methode vorsichtig damit umgehen, Modelle an der Realität zu testen. Die Veranstaltung war das Abschlusslicht einer Reihe von wissenschaftlichen Vorträgen, die sich an die allgemeine Öffentlichkeit richtete. Sie wurde von der Universität Stuttgart im Rahmen der Ausstellung *Im digitalen Labor* organisiert.

(CW)



PUBLIKATIONEN AM HLRS

Publikationen von Mitarbeitern des HLRS

Bischof C, Formanek N*, Gehring P, Hermann M*, Hubig C, Kaminski A*, Wolf F (eds). 2017. **Computersimulationen verstehen. Ein Toolkit für interdisziplinär Forschende aus den Geistes- und Sozialwissenschaften.** TU Prints, Darmstadt.

Bonilla DR*, Glass CW*. 2017. **Exploiting functional directives to achieve MPI parallelization.** Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel, Distributed and Cloud Computing for Engineering. Pécs, Hungary. June 4-5.

Bonilla DR*, Glass CW*. 2017. **Using functional directives to analyze code complexity and communication.** TMPA-2017: Tools and Methods of Program Analysis. Moscow, Russia. March 3-4.

Bönisch T*, Resch M*, Schwitalla T, Meinke M, Wulfmeyer V, Warrach-Sagi K. 2017. **Hazel Hen—leading HPC technology and its impact on science in Germany and Europe.** Parallel Comput 64:3-11.

Breuer T, Bussieck M, Cao KK, Cebulla F, Fiand F, Gils HC, Gleixner A, Khabi D*, Koch T, Rehfeldt D, Wetzel M. 2017. **Optimizing large-scale linear energy system problems with block diagonal structure by using parallel interior-point methods.** ZIB Report 17-75.

Cheptsov A*. 2017. **From static to dynamic: a new methodology for development of simulation applications.** In: Yurish SY (ed). Advances in Intelligent Systems: Reviews, Vol. 1: 69-88. IFSA Publishing.

Dimitriadis SI, Liparas D*, Tsolaki MN. 2017. **Random forest feature selection, fusion and ensemble strategy: combining multiple morphological MRI measures to discriminate among healthy elderly, MCI, cMCI and Alzheimer's disease patients.** J Neurosci Methods. Dec 18.

Duran JM*. 2017. **Computer simulations as a technological singularity in the empirical sciences.** In: Callaghan V, Miller J, Yampolskiy R, Armstrong S (eds). The Technological Singularity. The Frontiers Collection. Springer.

Duran JM*. 2017. **Varieties of simulations: from the analogue to the digital.** In: Resch M*, Kaminski A*, Gehring P (eds). The Science and Art of Simulation I. Springer.

Duran JM*. 2017. **Varying the explanatory span: scientific explanation for computer simulations.** Int Stud Phil Sci. 31(1):27-45.

Fan S, Chen F, Rauchfuss H, Har'El N, Schilling U*, Struckmann N*. 2017. **Towards a lightweight RDMA para-virtualization for HPC.** Proceedings of the Joint Workshops on Co-Scheduling of HPC Applications (COSH 2017) and Virtualization Solutions for High-Performance Computing (VisorHPC 2017). Stockholm, Sweden, January 24.

Friedrich A, Gehring P, Hubig C, Kaminski A*, Nordmann A (eds). 2017. **Technisches Nichtwissen. Jahrbuch Technikphilosophie 3.** Nomos.

Gehring P, Hubig C, Kaminski A*. 2017. **Was ist ein Hochleistungsrechner?** In: Bischof C, Formanek N*, Gehring P, Hermann M*, Hubig C, Kaminski A*, Wolf F (eds). Computersimulationen verstehen. Ein Toolkit für interdisziplinär Forschende aus den Geistes- und Sozialwissenschaften. TU Prints, Darmstadt.

Ham J, Kieferle JB, Wössner U*. 2017. **Exploring the three dimensional spatiality of polyrhythmic drum improvisation.** In: Fioravanti A, Cursi S, Elahmar S, Gargaro S, Loffreda G, Novembri G, Trento A. (eds.) ShoCK! - Sharing Computational Knowledge! Proceedings of the 35th International Conference on Education and Research in Computer Aided Architectural Design. Rome, Italy, Sep 20-22. Volume 2.

Hoppe D*, Gienger M*, Bönisch T*, Shcherbakov O*, Moise D. 2017. **Towards seamless integration of data analytics into existing HPC infrastructures.** Proceedings of the Cray User Group (CUH '17). Redmond, WA, USA, May 2017.

Hoppe D*, Sandoval Y, Sulistio A, Malawski M, Balis B, Pawliłk M, Figiela K, Krol D, Orzechowski M, Kitowski J, Bubak M. 2017. **Bridging the gap between HPC and cloud using HyperFlow and PaaSage.** Proceedings of the 12th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2017). September 10-13. Lublin, Poland. Springer

Hubig C, Kaminski A*. 2017. **Outlines of a pragmatic theory of truth and error in computer simulation.** In: Resch M*, Kaminski A*, Gehring P (eds). The Science and Art of Simulation I. Springer.

Kaminski A*. 2017. **Der Erfolg der Modellierung und das Ende der Modelle: Epistemische Opazität in der Computersimulation.** In: Brenneis A, Honer O, Keesser S, Vetter-Schultheiß S (eds). Technik—Macht—Raum: Das Topologische Manifest im Kontext interdisziplinärer Studien. Springer.

Kaminski A*. 2017. **Hat Vertrauen Gründe oder ist Vertrauen ein Grund? Eine dialektische Tugendtheorie von Vertrauen und Vertrauenswürdigkeit.** In: Kertscher J, Müller J (eds). Praxis und „Zweite Natur“: Begründungsfiguren normativer Wirklichkeit in der Diskussion. Mentis.

Kaminski A*. 2017. **Measuring intelligence effectively: psychometrics from a philosophy of technology perspective.** In: Mößner N, Nordman A (eds). Reasoning in Measurement. Routledge.

Kaminski A*. 2017. **Technik und Weltbezug. Wie wissenschaftliche Erfahrung möglich ist.** In: Friedrich A, Gehring P, Hubig C, Kaminski A*, Nordmann A (eds). Technisches Nichtwissen: Jahrbuch Technikphilosophie 3. Nomos.

Küster U*, Schneider R*, Ruopp A*. 2017. **The numerical approximation of Koopman modes of a nonlinear operator along a trajectory.** In: Resch M*, Bez W, Focht E, Gienger M*, Kobayashi H (eds). Sustained Simulation Performance 2017. Springer.

Montañana JM*, Hervás A, Soriano PP. 2017. **A procedure of generation of directed graphs for the comparative study of algorithms for the detection of communities.** Mathematical Modelling in Engineering & Human Behaviour 2017 Conference. Valencia, Spain.

Najmabadi SM, Offenhäuser P*, Hamann M, Jainabalkya G, Hempert F, Glass CW*, Simon S. 2017. **Analyzing the effect and performance of lossy compression on aeroacoustic simulation of gas injector.** Computation 5(2):24.

Poke M*, Hoefler T, Glass CW*. 2017. **AllConcur: leaderless concurrent atomic broadcast.** In: Proceedings of HPDC '17. Washington, DC, USA, June 24-30.

Resch MM*. 2017. **On the missing coherent theory of simulation.** In: Resch M*, Kaminski A*, Gehring P (eds). The Science and Art of Simulation I. Springer.

Resch MM*, Bönisch T*. 2017. **High performance computing—trends, opportunities, and challenges**. In: Iyanyi P, Topping BHV, Varady G (eds). *Advances in Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering*. Saxe-Coburg Publications.

Ruopp A*, Schneider R*. 2017. **MRI-based computational hemodynamics in patients**. In: Resch M*, Bez W, Focht E, Gienger M*, Kobayashi H (eds). *Sustained Simulation Performance 2017*. Springer.

Rutkai G, Köster A, Guevara-Carrion G, Janzen T, Schappals M, Glass CW*, Bernreuther M*, Wafai A*, Stephan S, Kohns M, Reiser S, Deublein S, Horsch M, Hasse H, Vrabec J. 2017. **ms2: A molecular simulation tool for thermodynamic properties, release 3.0**. *Comput Phys Commun* 221:343-351.

Schappals M, Mecklenfeld A, Kröger L, Botan V, Köster A, Stephan S, Garcia EJ, Rutkai G, Raabe G, Klein P, Leonhard K, Glass CW*, Lenhard J, Vrabec J, Hasse H. 2017. **Round robin study: molecular simulation of thermodynamic properties from models with internal degrees of freedom**. *J Chem Theor Comput* 13:4270-4280.

Schembera B*. 2017. **Myths of simulation**. In: Resch M*, Kaminski A*, Gehring P (eds). *The Science and Art of Simulation I*. Springer.

Schembera B*, Bönisch T*. 2017. **Challenges of research data management for high performance computing**. In: Kamps J, Tsakonas G, Manolopoulos Y, Iliadis L, Karydis I (eds). *Research and Advanced Technology for Digital Libraries. Lecture Notes in Computer Science 10450*. Springer.

Schöne R, Tschüter R, Ilsche T, Schuchart J*, Hackenberg D, Nagel WE. 2017. **Extending the functionality of Score-P through plugins: interfaces and use cases**. In: Niethammer C*, Gracia J*, Hilbrich T, Knüpfer A, Resch M*, Nagel W (eds). *Tools for High Performance Computing 2016*. Springer.

Schuchart J*, Nachtmann M*, Gracia J*. 2017. **Patterns for OpenMP task data dependency overhead measurements**. In: de Supinski B, Olivier S, Terboven C, Chapman B, Müller M (eds). *Scaling OpenMP for Exascale Performance and Portability. Lecture Notes in Computer Science 10468*. Springer.

Skvortsov P*, Schembera B*, Dürr F, Rothermel K. 2017. **Optimized secure position sharing with non-trusted servers**. arXiv:1702.08377.

Struckmann N*, Sandoval Y, HarEl N, Chen F, Fan S, Cinkelj J, Berginc G, Chronz P, Gilboa N, Scalosub G, Meth K, Kennedy J. 2017. **MIKELANGELO: Micro KErnel virtualizAtioN for hiGh pErformance cLOud and hpc systems**. *Proceedings of the 6th European Conference on Service-Oriented and Cloud Computing (ESOCC2017)*. September 28-29. Oslo, Norway. Springer.

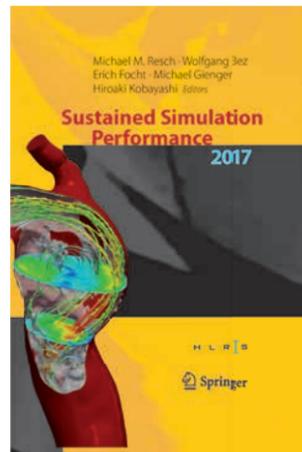
Trento A, Wössner U*, Kieferle JB, Cataldo A. 2017. **DSA—digital support for art—process and tools to realize a large sculpture in a heritage urban environment**. In: Fioravanti A, Cursi S, Elahmar S, Gargaro S, Loffreda G, Novembri G, Trento A. (eds.) *ShoCK! - Sharing Computational Knowledge! Proceedings of the 35th International Conference on Education and Research in Computer Aided Architectural Design*. Rome, Italy, September 20-22. Volume 1.

Weber J, Wackerbarth A*. 2017. **Methoden der ethischen Evaluierung digitalisierter Dienstleistungen in der Pflege**. In: Pfannstiel M, Krammer S, Swoboda W (eds). *Digitale Transformation von Dienstleistungen im Gesundheitswesen III*. Springer.

Zhou H*, Gracia J*. 2017. **Application productivity and performance evaluation of transparent locality-aware one-sided communication primitives**. *Int J Network Comput* 2017;7(2)136-153.

* Autor: Mitarbeiter am HLRS

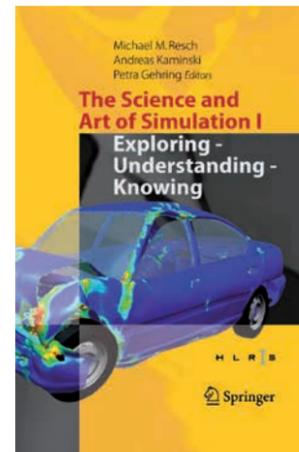
Sustained Simulation Performance 2017



Editors:
Wolfgang Bez
Erich Focht
Michael Gienger
Hiroaki Kobayashi
Michael M. Resch
(Springer, 2017)

This book presents the state of the art in high-performance computing on modern supercomputer architectures. It addresses trends in hardware and software development in general, as well as the future of HPC systems and heterogeneous architectures. The contributions cover a broad range of topics, from improved system management to computational fluid dynamics, high-performance data analytics, and novel mathematical approaches for large-scale systems. In addition, they explore innovative fields like coupled multiphysics and multiscale simulations. All contributions are based on selected papers presented at the 24th Workshop on Sustained Simulation Performance, held at HLRS in December 2016 and the subsequent Workshop on Sustained Simulation Performance, held at the Cyber-science Center, Tohoku University, Japan in March 2017.

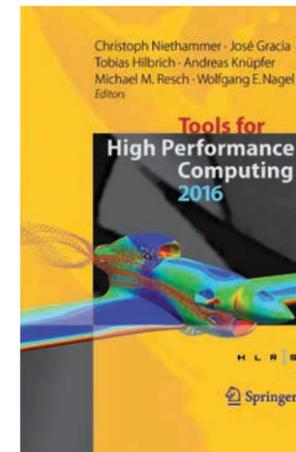
The Science and Art of Simulation I



Editors:
Petra Gehring
Andreas Kaminski
Michael M. Resch
(Springer, 2017)

This new book series addresses computer simulations as a scientific activity and engineering artistry (in the sense of a *technē*). The first volume is devoted to three topics: the art of exploring computer simulations, the art of understanding computer simulations, and the art of knowing through computer simulations. Bringing together perspectives of both scientists and philosophers of science, it considers such questions as the implicit assumptions of simulation and the problems they entail, the capabilities and limitations of simulation in political and social contexts, and the unique kinds of knowledge that are gained in simulation that complicate our understanding of scientific method and progress.

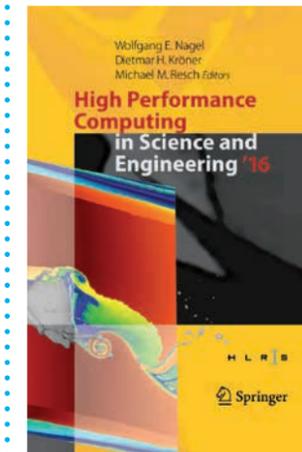
Tools for High-Performance Computing 2016



Editors:
Dietmar H. Kröner
Wolfgang E. Nagel
Michael M. Resch
(Springer, 2017)

Compiling proceedings from an October 2016 conference, this book is based on an awareness that high-performance computing is playing an increasingly important role in numerical simulation and modeling in both academic and industrial research. At the same time, however, the efficient use of large-scale parallel systems is becoming more difficult. In response, the HPC community has developed tools for parallel program development and analysis over the last decade, and what may have started as a collection of small helper scripts has now matured into production-grade frameworks. Some of these tools have been commercialized, while others are operated on an open-source basis by a growing research community. Powerful user interfaces and an extensive body of documentation also allow easy usage by non-specialists. The essays collected in the book cover recent developments aimed at helping users and tool developers to manage the unique challenges of computing on HPC systems.

High-Performance Computing in Science and Engineering '16



Editors:
Dietmar H. Kröner
Wolfgang E. Nagel
Michael M. Resch
(Springer, 2017)

Based on results discussed at the 19th Results and Review Workshop, held at HLRS in October 2016, the book covers fields of computational science and engineering including computational fluid dynamics, computational physics, chemistry, and computer science with a special emphasis on industrially relevant applications. Presenting findings generated using Hazel Hen, one of Europe's leading high-performance computing systems, this volume treats a wide variety of applications that deliver a high level of sustained performance and covers the main HPC methods. The book was published in cooperation with scientists at the Albert-Ludwig-Universität Freiburg and the Technische Universität Dresden.



In unserem Rechnerraum

Cray XC40 Hazel Hen

Der Supercomputer Hazel Hen ist das Herzstück der HPC-Systeminfrastruktur des HLRS. Mit einer Spitzenleistung von 7,42 Petaflops stellt es eines der leistungsstärksten HPC-Systeme der Welt (Platz 19 in den TOP500, November 2017) und den schnellsten Supercomputer Deutschlands dar. Hazel Hen ging im Oktober 2015 in Betrieb, basiert auf dem Intel Haswell Processor und den Cray Aries-Netzwerktechnologien und ist für eine dauerhafte Anwendungsleistung und hohe Skalierbarkeit ausgelegt.

CPU	Intel® Xeon CPU E5-2680 v3 12 core @ 2,5 GHz
Number of nodes / cores	7.712 / 185.088
Peak performance	7,42 PFLOPS
Memory	128 GB/node
Disk storage	15 PB

Cray Urika-GX

Projekte, die auf dem Cray XC40 Hazel Hen laufen, generieren zunehmend große Datenmengen. Um ein leistungsfähiges Werkzeug für die Analyse solcher Ergebnisse bereitzustellen, installierte das HLRS im Dezember 2016 eine spezialisierte Data Analytics Plattform. Dieses Forschungsprojekt bietet den Benutzern die Möglichkeit, Datenanalysemethoden für technische Anwendungen anzupassen.

Optimized software for	Spark Hadoop CGE (CrayGraph Engine)
Number of nodes	48 + 16
Kooperationen mit akademischen und industriellen Partnern	Daimler, Porsche, Sicos BW, u.a.

NEC SX-ACE

Der NEC SX-ACE ist ein Vektorcomputer, der für Anwendungen optimiert ist, die Vektoroperationen und hohe Speicherbandbreite erfordern.

CPU	NSC Vector CPU, 4 cores @ 1,0 GHz
Number of nodes / cores	64 / 256
Peak performance	~16 TFLOPS
Memory	4 TB
Memory BW per node	220 GB/s (single core), 256 GB/s (4 cores)
Interconnect	NEC IXS

NEC Cluster

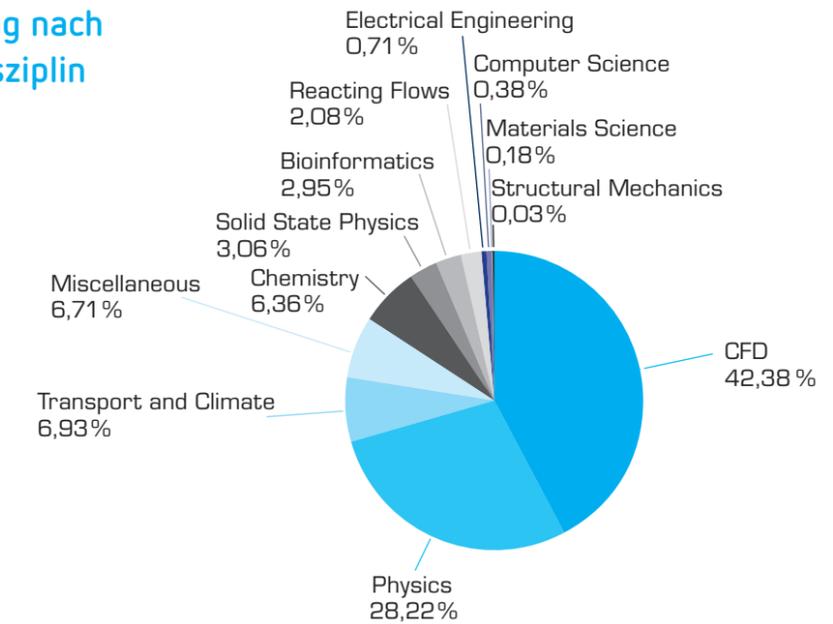
Dieser Standard-PC-Cluster wurde im Frühjahr 2009 installiert. Um den steigenden Anforderungen an Rechenressourcen gerecht zu werden, wurde seine Konfiguration ständig angepasst. Die aktuelle Konfiguration ist wie folgt:

Node type	Intel Xeon E5-2670 (SandyBridge)	124
Node type	Intel Xeon E5-2660 v3 @ 2,6 GHz (Haswell)	88
Node type	Intel Xeon E5-2680 v3 @ 2,5 GHz (Haswell)	360
Memory per node	32 / 64 / 128 / 256 GB	
Interconnect	Infiniband QDR/FDR	

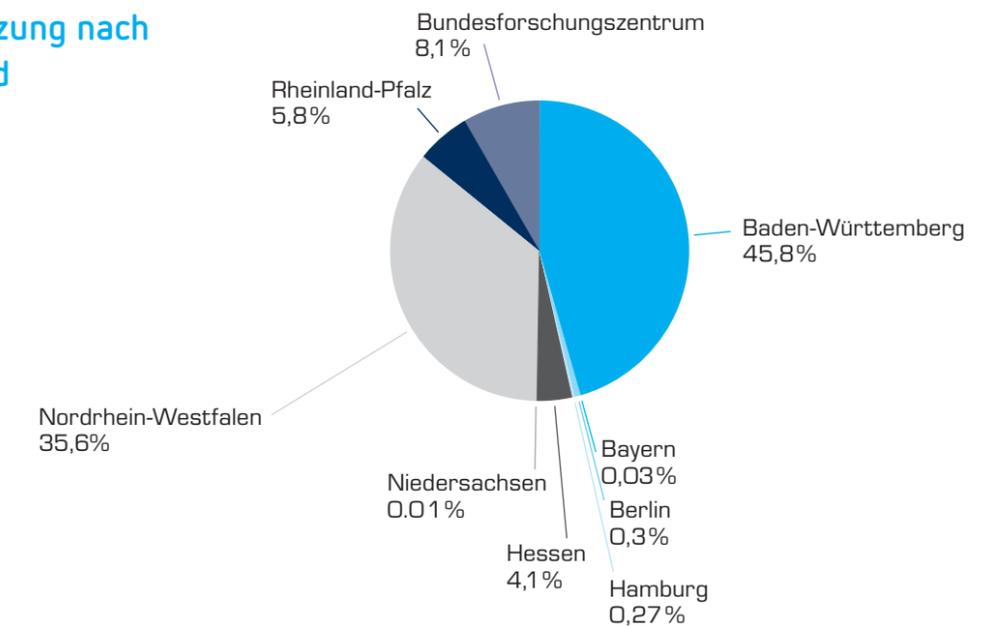
Unsere Nutzer

2017 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hazel Hen 14 neue Forschungsprojekte ("large-scale projects": jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 1,28 Milliarden Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS 5 internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 96,7 Millionen Core-Stunden. 2017 wurden auf Hazel Hen insgesamt 104 Projekte mit 1,5 Milliarden Core-Stunden gerechnet.

Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



Systemnutzung nach Bundesland



Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer

Antoniadis AF, Tsoutsanis P, Drikakis D. 2017. **Assessment of high-order finite volume methods on unstructured meshes for RANS solutions of aeronautical configurations.** Comput Fluids 146:86-104.

Babb JF, McLaughlin BM. 2017. **Radiative charge transfer in collisions of C with He⁺.** J Phys B: At Mol Opt Phys. 50:044003.

Bahe YM, Barnes DJ, Dalla Vecchia C, et al. 2017. **The Hydrangea simulations: galaxy formation in and around massive clusters.** Mon Not R Astron Soc. 470(4):4186-4208.

Bangga G, Lutz T, Dessoky A, Krämer E. 2017. **Unsteady Navier-Stokes studies on loads, wake, and dynamic stall characteristics of a two-bladed vertical axis wind turbine.** J Renew Sustain Ener. 9: 053303.

Bangga G, Lutz T, Jost E, Krämer E. 2017. **CFD studies on rotational augmentation at the inboard sections of a 10 MW wind turbine rotor.** J Renew Sustain Ener. 9:023304.

Bangga G, Lutz T, & Krämer E. 2017. **Root flow characteristics and 3D effects of an isolated wind turbine rotor.** J Mech Sci Technol. 31:3839.

Bangga G, Weihing P, Lutz T, et al. 2017. **Effect of computational grid on accurate prediction of a wind turbine rotor using delayed detached-eddy simulations.** J Mech Sci Technol. 31:2359.

Barnes DJ, Kay ST, Bahe Y, et al. 2017. **The Cluster-EAGLE project: global properties of simulated clusters with resolved galaxies.** Mon Not R Astron Soc. 471(1):1088-1106.

Beinke R, Klaiman S, Cederbaum LS, et al. 2017. **Many-body effects in the excitation spectrum of weakly interacting Bose-Einstein condensates in one-dimensional optical lattices.** Phys Rev A. 95(6):063602.

Benson SP, Pleiss J. 2017. **Self-assembly nanostructures of triglyceride-water interfaces determine functional conformations of *Candida antarctica* lipase B.** Langmuir 33:3151-3159.

Bovard L, Martin D, Guercilena F, et al. 2017. **r-process nucleosynthesis from matter ejected in binary neutron star mergers.** Phys Rev D. 96:124005.

Braun C, Hogan C, Chandola S, et al. 2017. **Si(775)-Au atomic chains: geometry, optical properties, and spin order.** Phys Rev Materials 1:055002.

Breitsprecher K, Abele M, Kondrat S, Holm C. 2017. **The effect of finite pore length on ion structure and charging.** J Chem Phys. 147:104708.

Buhl S, Gleiss F, Köhler M, et al. 2017. **A combined numerical and experimental study of the 3D tumble structure and piston boundary layer development during the intake stroke of a gasoline engine.** Flow Turbul Combust. 98(2):579-600.

Carbonio EA, Rocha TCR, Yu A, et al. 2017. **Are multiple oxygen species selective in ethylene epoxidation on silver?** Chem Sci. (Epub ahead of print)

Dörr PC, Kloker MJ. 2017. **Crossflow transition control by upstream flow deformation using plasma actuators.** J Appl Phys. 121: 063303.

Dörr PC, Kloker MJ. 2017. **Numerical investigations on Tollmien-Schlichting wave attenuation using plasma-actuator vortex generators.** AIAA J. doi:10.2514/1.J.056779.

Dröske NC, Förster FJ, Weigand B, von Wolfersdorf J. 2017. **Thermal investigation of an internally cooled strut injector for scramjet application at moderate and hot gas conditions.** Acta Astronautica 132:177-191.

Ertl M, Weigand B. 2017. **Analysis methods for direct numerical simulations of primary breakup of shear-thinning liquid jets.** Atomization Spray 27(4):303-317.

Evarestov RA, Gryaznov D, Arrigoni M, et al. 2017. **Use of site symmetry in supercell models of defective crystals: polarons in CeO₂.** Phys Chem Chem Phys. 19:8340-8348.

Fambri F, Dumbser M, Zanotti O. 2017. **Space-time adaptive ADER-DG schemes for dissipative flows: Compressible Navier-Stokes and resistive MHD equations.** Comp Phys Commun. 220:297-318.

Flad D, Gassner G. 2017. **On the use of kinetic energy preserving DG-schemes for large eddy simulation.** J Comput Phys. 350:782-795.

Fosser G, Khodayar S, Berg P. 2017. **Climate change in the next 30 years: What can a convection-permitting model tell us that we did not already know?** Clim Dynam. 48(5-6):1987-2003.

Greiner MT, Jones TE, Klyushin A, et al. 2017. **Ethylene epoxidation at the phase transition of copper oxides.** J Am Chem Soc. 139(34):11825-11832.

Han P, Antonov D, Wrachtrip J, Bester G. 2017. **Surface-bound states in nanodiamonds.** Phys Rev B. 95:195428.

Han P, Bester G. 2017. **Force field potentials for the vibrational properties of II-VI semiconductor nanostructures.** Phys Rev B. 96:195436.

Hanauskie M, Takami K, Bovard L, et al. 2017. **Rotational properties of hypermassive neutron stars from binary mergers.** Phys Rev D. 96:043004.

Hindmarsh M, Huber SJ, Rummukainen K, Weir DJ. 2017. **Shape of the acoustic gravitational wave power spectrum from a first order phase transition.** Phys Rev D. 96: 103520.

Hoilijoki S, Ganse U, Pfau-Kempf Y, et al. 2017. **Reconnection rates and X line motion at the magnetopause: global 2D-3V hybrid-Vlasov simulation results.** J Geophys Res. 122(3):2877-2888.

Hötzer J, Steinmetz P, Dennstedt A, et al. 2017. **Influence of growth velocity variations on the pattern formation during the directional solidification of ternary eutectic Al-Ag-Cu.** Acta Materialia 136:335-346.

Janecek I, Naar P, Stachon M, et al. 2017. **Fragmentation of KrN⁺ clusters after electron impact ionization. Short-time dynamics simulations and approximate multi-scale treatment.** Phys Chem Chem Phys. 19:2778-2790.

Janecek I, Stachon M, Gadea FX, Kalus R. 2017. **Fragmentation of KrN⁺ clusters after electron impact ionization II. Long-time dynamics simulations of Kr7⁺ evolution and the role of initial electronic excitation.** Phys Chem Chem Phys. 19:25434-25440.

Janzen T, Zhang S, Mialdun A, et al. 2017. **Mutual diffusion governed by kinetics and thermodynamics in the partially miscible mixture methanol + cyclohexane.** Phys Chem Chem Phys. 19:31856-31873.

Käpylä PJ, Käpylä MJ, Olsper N, et al. 2017. **Convection-driven spherical shell dynamos at varying Prandtl numbers.** Astron Astrophys. 599:A4.

Kellner M, Sprenger I, Steinmetz, et al. 2017. **Phase-field simulation of the microstructure evolution in the eutectic NiAl-4Cr system.** Comput Materials Sci. 128:379-387.

Klaiman S, Streltsov AI, Alon Oe. 2017. **Uncertainty product of an out-of-equilibrium Bose-Einstein condensate.** J Phys: Conf Ser. 826:012020.

Knist S, Goergen K, Bonomo E, et al. 2017. **Land-atmosphere coupling in EURO-CORDEX evaluation experiments.** J Geophys Res-Atmospheres 122(1):79-103.

Knodel MM, Reiter S, Targett-Adams P, et al. 2017. **3D spatially resolved models of the intracellular dynamics of the hepatitis C genome replication cycle.** Viruses 9(10):282.

Knop-Gericke A, Pfeifer V, Velasco-Velez JJ, et al. 2017. **In situ X-ray photoelectron spectroscopy of electrochemically active solid-gas and solid-liquid interfaces.** J Electron Spectrosc. 221:10-17.

Kohns M, Horsch M, Hasse H. 2017. **Activity coefficients from molecular simulations using the OPAS method.** J Chem Phys. 147:144108.

Kohns M, Werth S, Horsch M, et al. 2017. **Molecular simulation study of the CO₂-N₂O analogy.** Fluid Phase Equilib. 442:44-52.

Koß P, Statt A, Virnau P, Binder K. 2017. **Free-energy barriers for crystal nucleation from fluid phases.** Phys Rev E. 96:042609.

Köster A, Mausbach, Vrabec J. 2017. **Premelting, solid-fluid equilibria, and thermodynamic properties in the high density region based on the Lennard-Jones potential.** J Chem Phys. 147:144502.

Kotomin EA, Merkle R, Mastrikov YA, Kuklja MM, Maier J. 2017. **The effect of (La,Sr)MnO₃ cathode surface termination on its electronic structure.** ECS Transactions 77(10):67-73.

Koutsou G. 2017. **Nucleon structure and the neutron electric dipole moment from twisted mass lattice QCD.** Few-Body Syst. 58:104.

Kronenburg A, Stein OT. 2017. **LES-CMC of a partially premixed, turbulent dimethyl ether jet diffusion flame.** Flow Turbul Combust. 98:803.

Lakehal D, Metrailler, Reboux S. 2017. **Turbulent water flow in a channel at Re_T = 400 laden with 0.25 mm diameter air-bubbles clustered near the wall.** Phys Fluids 29:065101.

Landmann M, Rauls E, Schmidt WG. 2017. **Understanding band alignments in semiconductor heterostructures: composition dependence and type-I–type-II transition of natural band offsets in nonpolar zinc-blende Al_xGa_{1-x}/Al_yGa_{1-y}N composites.** Phys Rev B. 95:155310.

Lautenschlaeger MP, Stephan S, Urbassek HM, et al. 2017. **Effects of lubrication on the friction in nanometric machining processes: a molecular dynamics approach.** Appl Mech Mater. 869:85-93.

Lechte C, Conway GD, Görler T, Tröster-Schmid, ASDEX Upgrade Team. 2017. **X mode Doppler reflectometry k-spectral measurements in ASDEX Upgrade: experiments and simulations.** Plasma Phys Contr F. 59(7).

Lintermann, A. & Schröder, W. 2017. **A hierarchical numerical journey through the nasal cavity: from nose-like models to real anatomies.** Flow Turbul Combust.

Lode AUJ, Bruder C. 2017. **Fragmented superradiance of a Bose-Einstein condensate in an optical cavity.** Phys Rev Lett. 118:013603.

Loosem S, Statmolpv V, Meinke M, Schröder W. 2017. **Modal analysis of passive flow control for the turbulent wake of a generic planar space launcher.** CEAS Space J. (ePub ahead of print)

Lücke A, Gerstmann U, Kühne TD, Schmidt WG. 2017. **Efficient PAW-based bond strength analysis for understanding the In/Si(111)(8x2) - (4x1) phase transition.** J Comput Chem. 38(26):2276-2282.

Luitz DJ, Bar Lev Y, Lazarides A. 2017. **Absence of dynamical localization in interacting driven systems.** SciPost Phys. 3:029.

Luitz DJ, Huveneers F, de Roeck W. 2017. **How a small quantum bath can thermalize long localized chains.** Phys Rev Lett. 119:150602.

Mitza A, Nizenkov P, Pfeiffer M, Fasoulas S. 2017. **Three-dimensional implementation of the low Diffusion method for continuum flow simulations.** Comput Phys Commun. 220:269-278.

Müller A, Schippers S, Hellhund J, Kilcoyne ALD, Phaneuf RA, McLaughlin BM. 2017. **Photoionization of tungsten ions: experiment and theory for W4⁺.** J Phys B: At Mol Opt Phys. 50(8).

Müller A, Schippers S, Phaneuf RA, et al. 2017. **Photoionisation of Ca⁺ ions in the valence-energy region 20-56eV: experiment and theory.** J Phys B: At Mol Opt Phys. 50:205001.

Munoz-Munoz YM, Hsieh CM, Vrabec J. 2017. **Understanding the differing fluid phase behavior of cyclohexane + Benzene and their hydroxylated or aminated forms.** J Phys Chem B. 212(21):5374-5384.

Neuber G, Kronenburg A, Stein OT, Cleary MJ. **MMC-LES modelling of droplet nucleation and growth in turbulent jets.** Chem Eng Sci. 167:204-218.

Nizenkov, P., Noeding, P., Konopka, M. et al. 2017. **Verification and validation of a parallel 3D direct simulation Monte Carlo solver for atmospheric entry applications.** CEAS Space J. 9:127.

Nozaki D, Lücke A, Schmidt WG. 2017. **Molecular orbital rule for quantum interference in weakly coupled dimers: low-energy giant conductivity switching induced by orbital level crossing.** J Phys Chem Lett. 8(4):727-732.

Nozaki D, Schmidt WG. 2017. **Current density analysis of electron transport through molecular wires in open quantum systems.** J Comput Chem. 38(19):1685-1692.

Nozaki D, Toher C. 2017. **Is the antiresonance in meta-contacted benzene due to the destructive superposition of waves traveling two different routes around the benzene ring?** J Phys Chem C. 121:11739-11746.

Ogata T, Johnson SJ, Schiemann R, et al. 2017. **The resolution sensitivity of the Asian summer monsoon and its inter-model comparison between MRI-AGCM and MetUM.** Clim Dynam. 49(9-10):3345-3361.

Palmroth M, Hoilijoki S, Juusola L, et al. 2017. **Tail reconnection in the global magnetospheric context: Vlasiator first results.** Ann Geophys. 35(6):1269-1274.

Pandey S, Chu X, Laurien E. 2017. **Investigation of in-tube cooling of carbon dioxide at supercritical pressure by means of direct numerical simulation.** Int J Heat Mass Transfer 114:944-957.

Pandey S, Laurien E, Chu X. 2017. **A modified convective heat transfer model for heated pipe flow of supercritical carbon dioxide.** Int J Therm Sci. 117:227-238.

Pfeiffer M, Gorji MH. 2017. **Adaptive particle-cell algorithm for Fokker-Planck based rarefied gas flow simulations.** Comp Phys Commun. 213:1-8.

Pfeifer V, Jones TE, Velez JJV, et al. 2017. **In situ observation of reactive oxygen species forming on oxygen-evolving iridium surfaces.** Chem Sci. 8:2143-2149.

Reitzle M, Kieffer-Roth C, Garcke H, Weigand B. 2017. **A volume-of-fluid method for three-dimensional hexagonal solidification processes.** J Comput Phys. 339:356-369.

Riefer A, Schmidt WG. 2017. **Solving the Bethe-Salpeter equation for the second-harmonic generation in Zn chalcogenides.** Phys Rev B. 96:235206.

Riefer A, Weber N, Mund J, et al. 2017. **Zn-VI quasiparticle gaps and optical spectra from many-body calculations.** J Phys: Condensed Matter 29:215702.

Rohrmüller M, Schmidt WG, Gerstmann U. 2017. **Electron paramagnetic resonance calculations for hydrogenated Si surfaces.** Phys Rev B. 95:125310.

Rutkai G, Thol M, Span R, Vrabec J. 2017. **How well does the Lennard-Jones potential represent the thermodynamic properties of noble gases?** Mol Phys. 115(9-12):1104-1121.

Santos-Santos IME, Dominguez-Tenreiro R, Granato GL, et al. 2017. **Diversity of dwarf galaxy IR-submm emission patterns: CLUES from hydrodynamical simulations.** Astron Astrophys. 603:A4.

Schiemann R, Demory ME, Shaffrey LC, et al. 2017. **The resolution sensitivity of Northern Hemisphere blocking in four 25-km atmospheric global circulation models.** J Climate Jan 1.

Schlottke-Lakemper M, Yu H, Berger S, et al. 2017. **A fully coupled hybrid computational aeroacoustics method on hierarchical Cartesian meshes.** Comput Fluids 144:137-153.

Schneiders L, Meinke M, Schröder W. 2017. **Direct particle-fluid simulation of the Kolmogorov-length-scale size particles in decaying isotropic turbulence.** J Fluid Mech. 819:188-227.

Schneiders L, Meinke M, Schröder W. 2017. **On the accuracy of Lagrangian point-mass models for heavy non-spherical particles in isotropic turbulence.** Fuel 201:2-14.

Schröder M, Meyer HD. 2017. **Transforming high-dimensional potential energy surfaces into sum-of-products form using Monte Carlo methods.** J Chem Phys. 147:064105.

Schwitalla T, Bauer HS, Wulfmeyer V, Warrach-Sagi K. 2017. **Continuous high-resolution midlatitude-belt simulations for July–August 2013 with WRF.** Geosci Model Dev. 10(5):2031-2055.

Seidl MJ, Aigner M, Keller R, Gerlinger P. 2017. **CFD simulations of turbulent nonreacting and reacting flows for rocket engine applications.** J Supercrit Fluid. 121:63-77.

Seino K, Sanna S, Schmidt WG. 2017. **Temperature stabilizes rough Au/Ge(001) surface reconstructions.** Surf Sci. 667:101-104.

Selvam PK, Kulenovic R, Laurien E, et al. 2017. **Thermal mixing of flows in horizontal T-junctions with low branch velocities.** Nucl Eng Des. 322:32-54.

Smyth RT, Johnson CA, Ennis DA, et al. 2017. **Relativistic R-matrix calculations for the electron-impact excitation of neutral molybdenum.** Phys Rev A. 96:042713.

Statnikov V, Meinke M, Schröder W. 2017. **Reduced-order analysis of buffet flow of space launchers.** J Fluid Mechan. 815:1-25.

Tebi S, Paszkiewicz M, Aldahhak H, et al. 2017. **On-surface site-selective cyclization of corrole radicals.** ACS Nano. 11(3):3383-3391.

Vo S, Stein OT, Kronenburg A, Cleary MJ. 2017. **Assessment of mixing time scales for a sparse particle method.** Combust Flame 179:280-299.

Vovchenko V, Pasztor A, Fodor Z, et al. 2017. **Repulsive baryonic interactions and lattice QCD observables at imaginary chemical potential.** Phys Lett B. 775:71-78.

Watermann T, Sebastiani D. 2017. **Liquid water confined in cellulose with variable interfacial hydrophilicity.** Z Phys Chem. (ePub ahead of print)

Weiner SE, Tsatsos, Cederbaum LS, Lode AUJ. 2017. **Phantom vortices: hidden angular momentum in ultracold dilute Bose-Einstein condensates.** Sci Rep. 7:40122.

Weir DJ. 2017. **Acoustic waves and the detectability of first-order phase transitions by eLISA.** J Phys Conf Ser. 840:012031.

Zhang F, Baust T, Zirwes T, et al. **Impact of infinite thin flame approach on the evaluation of flame speed using spherically expanding flames.** Energy Technol-Ger. 5(7):1055-1063.

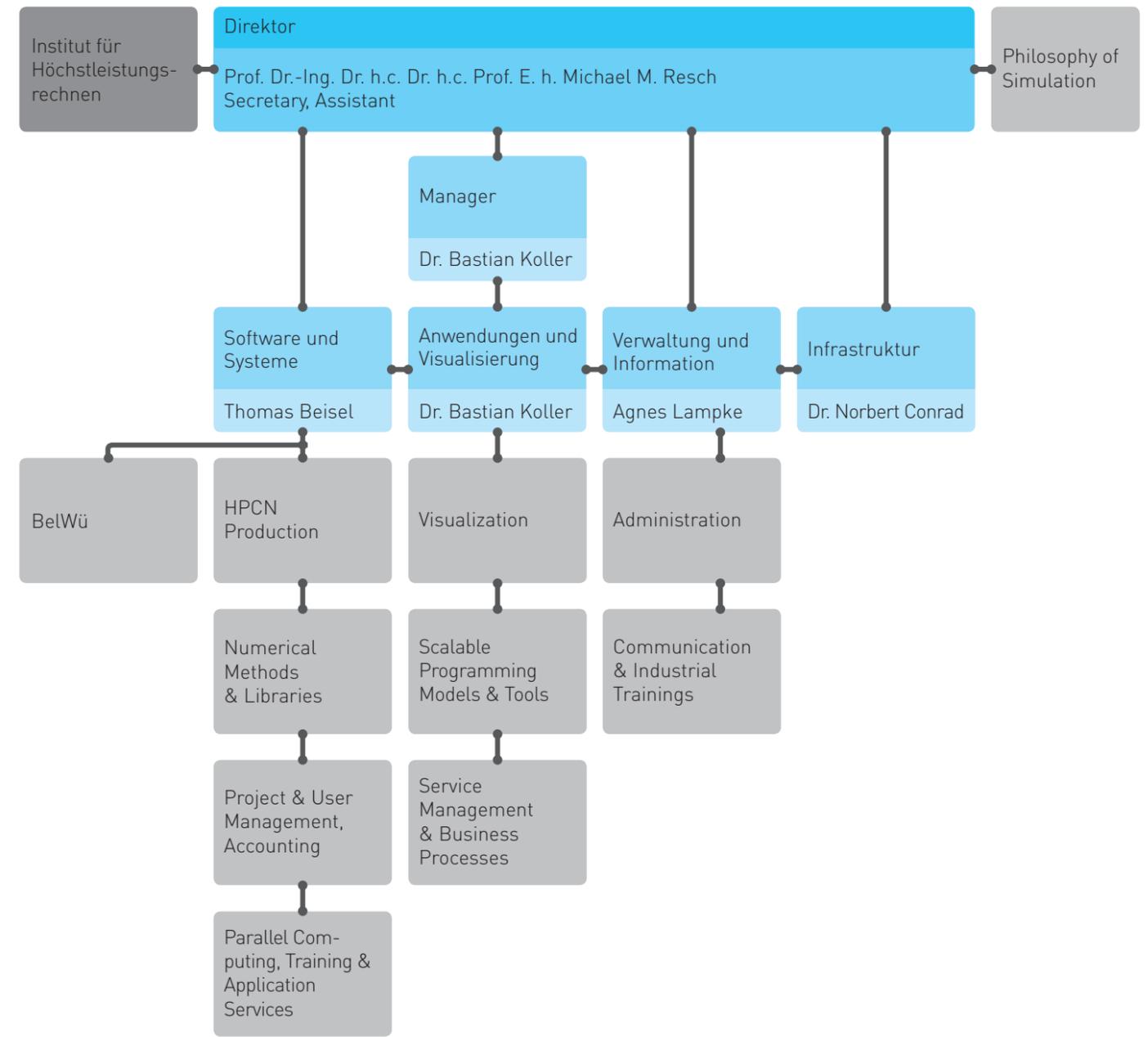
Zhang F, Zirwes T, Habisreuther P, Bockhorn H. 2017. **Effect of unsteady stretching on the flame local dynamics.** Combust Flame 175:170-179.

Zhang F, Zirwes T, Nawroth H, et al. 2017. **Combustion-generated noise: an environment-related issue for future combustion systems.** Energy Technol-Ger. 5(7):1045-1054.



ÜBER UNS

Organigramm

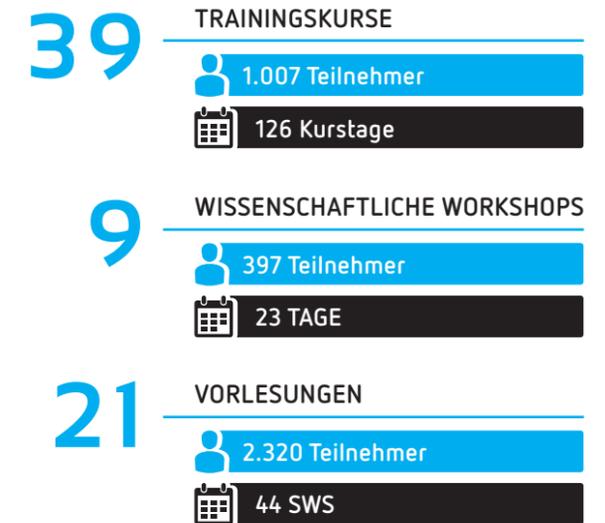


Systemnutzung

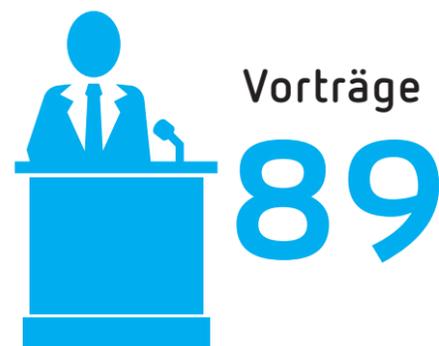


- CORE-STUNDEN
- NUTZERPROJEKTE
- INDUSTRIELLE KUNDEN
- PUBLIKATIONEN DER NUTZER

Aus- und Weiterbildung



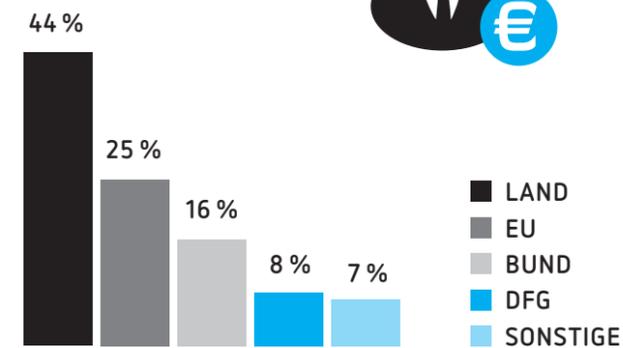
HLRS IN ZAHLEN



Publikationen



Drittmittel



Organisation

Verwaltung und Information

→ Leitung: Agnes Lampke

Administration

Leitung: Agnes Lampke

Die Verwaltung kümmert sich um alle administrativen Aufgabengebiete des HLRS. Zu den Verantwortungsbereichen gehören insbesondere die Finanzplanung, Controlling und Buchführung, Finanzprojekt- und Projektcontrolling, Rechtsfragen, Personalverwaltung, Personalentwicklung, Beschaffung und Inventarisierung und unterstützt bei der Vorbereitung von Veranstaltungen.

Communication and Industrial Trainings

Leitung: Dr. Jutta Oexle

Konzipiert und führt die Kommunikation des HLRS mit der Öffentlichkeit und den Medien aus. Die Abteilung stellt die zentrale Anlaufstelle für alle Fragen zum Zentrum und seiner wissenschaftlichen Arbeit dar und publiziert neue Erkenntnisse, Erfolge und andere Neuigkeiten rund um das Zentrum. Darüber hinaus werden Trainings und Workshops entwickelt und dem Industrie- und Dienstleistungssektor angeboten. So wird breites Interesse geweckt und die Zugänglichkeit zu HPC-Technologien und -lösungen über die traditionelle Gemeinschaft wissenschaftlicher Nutzer hinaus verbessert.

Anwendungen und Visualisierung

→ Leitung: Dr. Bastian Koller

Visualization

Leitung: Dr. Uwe Wössner

Unterstützt Ingenieure und Wissenschaftler bei der visuellen Analyse von Daten, die durch Simulation auf Höchstleistungscomputern erzeugt werden. Durch die Bereitstellung von Technologien, die Benutzer in visuelle Darstellungen ihrer Daten eintauchen lassen, ermöglicht die Abteilung den Benutzern die direkte Interaktion mit ihnen, wodurch die Analysezeit verringert und neue Arten von Erkenntnissen ermöglicht

werden. Die Abteilung verfügt über Expertisen in Tools wie Virtual Reality, Augmented Reality und hat darüber hinaus eine Methode entwickelt, um Verarbeitungsschritte, die über mehrere Hardwareplattformen verteilt sind, in eine nahtlos verteilte Softwareumgebung zu integrieren.

Scalable Programming Models & Tools

Leitung: Dr. José Gracia

Führt Forschung zu parallelen Programmiermodellen und Werkzeugen zur Entwicklung paralleler Anwendungen in HPC durch. Derzeit liegt der Fokus auf transparenten globalen Adressräumen mit Hintergrunddatenübertragungen, Task-Parallelism basierend auf verteilten Datenabhängigkeiten, kollektivem Entladen von I/O-Operationen und parallelem Debugging. Als Service für HLRS-Nutzer behält sich die Gruppe auch einen Teil des Software-Stacks vor, der sich auf Programmiermodelle, Debugging- und Performance-Analyse-Tools bezieht.

Service Management & Business Processes

Leitung: Michael Gienger

Entwickelt und betreibt dynamische und skalierbare Cloud-Computing-Dienste, insbesondere im geschäftlichen Kontext. Die Gruppe führt Forschungsarbeiten zur Leistungs- und Verfügbarkeitsüberwachung, zum elastischen Workflow-Management und zum energieeffizienten Betrieb für föderierte Cloud-Umgebungen durch. Sie befasst sich auch mit Fragen im Zusammenhang mit dem Aufbau von Clouds für Hochleistungsrechner, insbesondere für datenintensive Anwendungen.

Software und Systeme

→ Leitung: Thomas Beisel

High Performance Computing Network – Production (HPCN-Production)

Leitung: Thomas Beisel

Ist verantwortlich für den Betrieb aller Plattformen in der Compute Server-Infrastruktur. Diese Abteilung betreibt

auch die für die HPC-Systemfunktion erforderliche Netzwerkinfrastruktur und ist für die Sicherheit in Netzwerken und bereitgestellten Plattformen zuständig.

Numerical Methods and Libraries

Leitung: Dr. Ralf Schneider

Stellt numerische Bibliotheken und Compiler für HLRS-Computing-Plattformen bereit. Die Abteilung verfügt über Erfahrung in der Implementierung von Algorithmen auf verschiedenen Prozessoren und HPC-Umgebungen, einschließlich der Vektorisierung basierend auf der Architektur moderner Computer. Sie führt auch Forschungen zur Simulation von Blutfluss und Knochenfrakturen im menschlichen Körper durch und ist verantwortlich für Schulungen, die sich auf Programmiersprachen und numerische Methoden konzentrieren, die für HPC wichtig sind.

Project & User Management, Accounting

Leitung: Dr. Thomas Bönisch

Verantwortet das Nutzermanagement und das Accounting am HLRS. In diesen Bereich fallen auch die Erstellung und die Pflege der Webschnittstellen zum (Bundes-) Projektmanagement und die Informationsbereitstellung für die Nutzer. Außerdem sind in der Abteilung die Aktivitäten des HLRS mit Bezug zur europäischen Supercomputerinfrastruktur PRACE sowie das Datenmanagement gebündelt. Dazu gehören der Betrieb des High Performance Storage Systems (HPSS) und dessen Weiterentwicklung, sowie die Konzeption neuer Ansätze für das Datenmanagement der Anwendungen und Projekte im Bereich Data Analytics.

Parallel Computing, Training & Application Services

Leitung: Dr. Rolf Rabenseifner

Organisiert das akademische Fortbildungsprogramm des HLRS im Bereich Hoch- und Höchstleistungsrechnen mit den Schwerpunkten Parallele Programmierung, Strömungssimulation, Leistungsoptimierung, wissenschaftliche Visualisierung, Programmiersprachen für wissenschaftliches Rechnen und Data in

HPC. Des Weiteren organisiert das Team den Review-Prozess der Simulationsprojekte auf dem Bundeshöchstleistungsrechner. In der Betreuung der akademischen Kunden und der damit verbundenen Installation von Software-Paketen liegen die Schwerpunkte im Bereich Strukturmechanik und Chemie. Diese ist auch in den Service für Industriekunden integriert.

Infrastruktur

→ Leitung: Dr. Norbert Conrad

Plant und betreibt Einrichtungen und Infrastruktur am HLRS. Dieser Bereich stellt den zuverlässigen und effizienten Betrieb der HLRS-High-Performance-Computing-Systeme sicher, bietet eine komfortable Arbeitsumgebung für HLRS-Wissenschaftler und die Verwaltung und fördert alle Aspekte des energieeffizienten HPC-Betriebs.

Das Team ist auch verantwortlich für das Nachhaltigkeitsprogramm des HLRS, das das gesamte HLRS-Personal dabei unterstützt, nach zertifizierten Prinzipien der Nachhaltigkeit zu handeln.

Stabstelle Begleitforschung

Philosophy of Science & Technology of Computer Simulation

Leitung: Dr. Andreas Kaminski

Untersucht, wie die Computersimulation Wissenschaft und Technikentwicklung verändert und wie Gesellschaft und Politik darauf reagieren: Ändert die Simulation unser Verständnis von Wissen und wie wir wissenschaftliche Ergebnisse rechtfertigen? Wie kann die Simulation helfen, Unsicherheiten über die Zukunft zu überwinden? Und wie gehen wir mit den Unsicherheiten der Simulation selbst um?

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) wurde 1996 als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum Deutschlands gegründet. Als Einrichtung der Universität Stuttgart und Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing stellt das HLRS seine Rechenkapazitäten Nutzern aus Wissenschaft und Industrie zur Verfügung. Das HLRS betreibt modernste Höchstleistungsrechensysteme und -technologien, bietet erstklassige Weiterbildung in den Bereichen Programmierung und Simulation und forscht an wegweisenden Fragestellungen und Technologien rund um die Zukunft des Höchstleistungsrechnens (HPC). Die HLRS-Expertise umfasst unter anderem die Bereiche parallele Programmierung, numerische Methoden für HPC, Visualisierung, Grid und Cloud Computing sowie Datenanalytik.

Dieser Jahresbericht wurde auf Papier gedruckt, das mit dem Blauen Engel zertifiziert ist.

