

2018

JAHRESBERICHT

H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart



ENERGIE

GESUNDHEIT

KLIMA

MOBILITÄT

PHILOSOPHIE



# 2018

## JAHRESBERICHT

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 Höchstleistungsrechen-systeme 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, Datenanalytik sowie künstliche Intelligenz. Die Nutzer unserer Systeme forschen auf ganz unterschiedlichen Forschungsgebieten mit dem Schwerpunkt auf Ingenieurwissenschaften und angewandte Wissenschaften.

# Grußwort

## Editorial



Wir freuen uns, mit Ihnen auf die zahlreichen Erfolge der letzten zwölf Monate am HLRS zurückzublicken.

An oberster Stelle der wichtigsten Ereignisse steht sicherlich die Beschaffung unseres neuen Höchstleistungsrechners. Nach einer intensiven, einjährigen Ausschreibungsphase, an der führende Hardware-Anbieter teilnahmen, unterschrieb das HLRS im November 2018 einen Vertrag mit Hewlett Packard Enterprise (HPE), um „Hawk“ – unseren Höchstleistungsrechner der nächsten Generation – in Betrieb zu nehmen. Als Teil dieser Zusammenarbeit werden das HLRS und HPE gemeinsam Services ausbauen, Codes optimieren und neue Anwendungen für Maschinelles Lernen und Künstliche Intelligenz vorantreiben. Wir freuen uns darauf, unseren Nutzern in den kommenden Jahren deutlich leistungsfähigere Ressourcen für das Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HPC) anbieten zu können und damit unsere führende Position für die Weiterentwicklung zukünftiger HPC-Technologien auszubauen.

Das HLRS konnte seine Arbeit in zahlreichen neuen, EU-geförderten Projekten beginnen – darunter vier neue europäische Exzellenzzentren (CoEs) für HPC-Anwendungen, die das Rückgrat der europäischen HPC-Strategie bilden sollen. Als Mitglied von EXCELLERAT, HiDALGO, CheeSE und POP2 ist das HLRS in vier der neun in 2018 gestarteten europäischen Exzellenzzentren vertreten. Als koordinierender Partner des neuen European Center of Excellence for Engineering Applications (EXCELLERAT), wird das HLRS seine Position als führendes europäisches Zentrum für Simulation in den Ingenieurwissenschaften stärken. Unsere Unterstützung für die computergestützte Ingenieur- und angewandten Wissenschaften ist ein Schwerpunkt dieses Jahresberichts.

Welcome to the HLRS 2018 Annual Report. We are pleased to present this look back at our activities over the past 12 months, which were marked by many successes.

At the top of our list of achievements was certainly our procurement of a new high-performance computer. After an intense, yearlong competition among leading hardware vendors, HLRS signed a contract with Hewlett Packard Enterprise (HPE) in November to build Hawk, our forthcoming next-generation supercomputer. As part of this collaboration, HLRS and HPE will also work together on improving services, optimizing codes, and developing new types of high-performance computing (HPC) applications for machine learning and artificial intelligence. In the coming years we look forward to being able to offer our users a much more powerful supercomputing resource and will be well positioned to lead as HPC technologies continue to advance.

HLRS also successfully participated in the launch of several new EU-funded projects, including new European Centres of Excellence (CoE's) in high-performance computing that will form the backbone of the European HPC strategy. As a member of multiple new CoE's created in 2018 – EXCELLERAT, HiDALGO, CheeSE, and POP2 – HLRS is involved in four of the nine European centers. As project leader of the new European Centre of Excellence for Engineering Applications (EXCELLERAT), HLRS will strengthen its position as Europe's leading center for simulation in engineering, a critical tool for high-tech innovation. Our support for the computational engineering and applied science communities is the focus of this annual report's spotlight article. Also important in 2018 was the positive evaluation of several key research projects that HLRS leads or

Ein weiteres Ereignis in 2018 war die positive Bewertung einiger wichtiger Forschungsprojekte, die das HLRS leitet oder daran als bedeutender Partner teilnimmt. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft hat zum Beispiel im September das Exzellenzcluster SimTech der Universität Stuttgart wieder als deutsches Exzellenzcenter anerkannt, das seinen Fokus auf daten-integrierte Simulationswissenschaft legen wird. Als herausragende Einrichtung für das Höchstleistungsrechnen an der Universität Stuttgart, freut sich das HLRS auf die nächsten sieben Jahre, in denen wir in enger Zusammenarbeit mit unseren Kollegen die Grenzen der Simulation unter Benutzung von Big Data erweitern werden. Für uns liegt die Zukunft des Höchstleistungsrechnens nicht nur in der Entwicklung von neuen Technologien, sondern auch darin, die größten Herausforderungen der Menschheit zu adressieren. Unter Berücksichtigung wichtiger Zusammenhänge zwischen dem Höchstleistungsrechnen, der Politik und der Gesellschaft haben wir einen neuen Gesellschaftspolitischen Beirat geschaffen, der 2018 zum ersten Mal zusammengetroffen ist. Die Sitzung hat mehrere Themen identifiziert, die unsere Forschung voranbringen können und es dem HLRS ermöglichen werden, sich stärker als bisher auf die Bedürfnisse und Anforderungen der Gesellschaft zu konzentrieren. Dieses Jahr haben wir uns auch darüber gefreut, viele prominente Politikerinnen und Politiker aus Deutschland und Europa am HLRS willkommen zu heißen, um die Zukunft des Höchstleistungsrechnens und dessen Nutzen für die Gesellschaft zu diskutieren.

Der Schwerpunkt des HLRS auf die HPC-Weiterbildung verstärkte sich in diesem Jahr durch den Abschluss des ersten Moduls der Supercomputing-Akademie. Ihr Kursplan im „Blended Learning“-Format entspricht den Bedürfnissen der HPC-Nutzer aus der Industrie und ergänzt das wegweisende Schulungsprogramm des HLRS. Nach den vielen positiven Reaktionen der Auszubildenden und Teilnehmenden auf den ersten Testlauf der Supercomputing-Akademie freuen wir uns darauf, dieses innovative Programm in den nächsten Jahren wachsen zu sehen.

Ein weiteres Highlight von 2018 war die Gründung des Media Solution Centers Baden-Württemberg (MSC), in dem das HLRS eng mit unseren Partnern aus Industrie

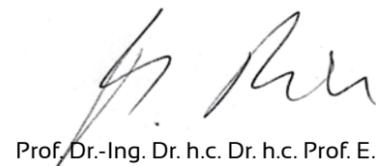
und Forschung arbeiten wird, um technischen Herausforderungen aus den Bereichen Medien und Kunst zu begegnen. Das MSC ist der neueste Bestandteil unserer industriellen Strategie, die mit dem Automotive Simulation Center Stuttgart (asc(s)) begann. In diesem Jahr feierte das asc(s) sein zehnjähriges Bestehen und demonstrierte somit, wie nachhaltig diese Strategie sein kann. Wir danken asc(s) Geschäftsführer Alexander Walser dafür, dass er für diesen Jahresbericht mit uns über die Vorteile des Networking innerhalb der Automobilindustrie sprach.

In Bezug auf unsere Leistungskennzahlen kann das HLRS stolz auf ein erfolgreiches Jahr zurückblicken. Unsere Drittmitteleinnahmen stiegen über die letzten Jahre hinweg, unser Einkommen aus industrieller HPC-Nutzung war wieder auf einem hohen Niveau und die Anzahl der Personen, die von unserem Weiterbildungsprogramm und unseren Vorlesungen profitieren, blieb hoch.

Auch die Benutzer unseres HPC-Systems hatten ein sehr produktives Jahr. Dieser Jahresbericht verdeutlicht anhand einiger Beispiele aus der Forschung unserer Nutzer, wie wichtig Simulation für unser Wohlergehen ist. Dazu gehören ein Geräusch-Vorhersage-Modell, das helfen könnte, den Lärm von Maschinengeräuschen zu reduzieren; eine Machine Learning-Anwendung, die Kraftwerke effizienter machen könnte; sowie einen Berechnungsansatz, der den Weg zu einer neuen Halbleitertechnologie ebnet.

Mit diesem Jahresbericht bringen wir auch unseren Dank an unsere Unterstützer und Förderer zum Ausdruck, die uns diese Erfolge in 2018 ermöglicht haben. Gleichzeitig freuen wir uns darauf, die neuen Herausforderungen 2019 in Angriff zu nehmen.

Mit freundlichen Grüßen,



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

participates in as a major partner. In September the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, or German Research Foundation) once again recognized the University of Stuttgart's Cluster of Excellence in Simulation Technology (SimTech) as a German national center of excellence for its proposal to expand our focus on data-integrated simulation science. As the prominent facility for high-performance computing at the University, HLRS looks forward to the coming seven years, in which we will work closely with our colleagues here to push the limits of using big data in simulation.

HLRS recognizes that the future of high-performance computing lies not just in new technologies, but also in addressing humanity's greatest challenges. Considering important relationships among supercomputing, society, and politics we created a new Sociopolitical Advisory Board, which held its first meeting this year. The gathering identified many topics that will feed back into our research and enable HLRS to remain focused on society's needs and requirements. Throughout the year we were also glad to welcome prominent politicians from Germany and Europe to HLRS to discuss the future of high-performance computing and how its potential could be maximized to benefit society.

HLRS's focus on HPC training grew in strength this year with the completion of the first course offered by the Supercomputing-Akademie. Its "blended learning" curriculum is designed to address the needs of HPC users in industry, and complements HLRS's existing state-of-the-art training program. Trainers and trainees were overwhelmingly positive about the Supercomputing-Akademie's first test-run, and we look forward to watching this innovative program grow in the coming years.

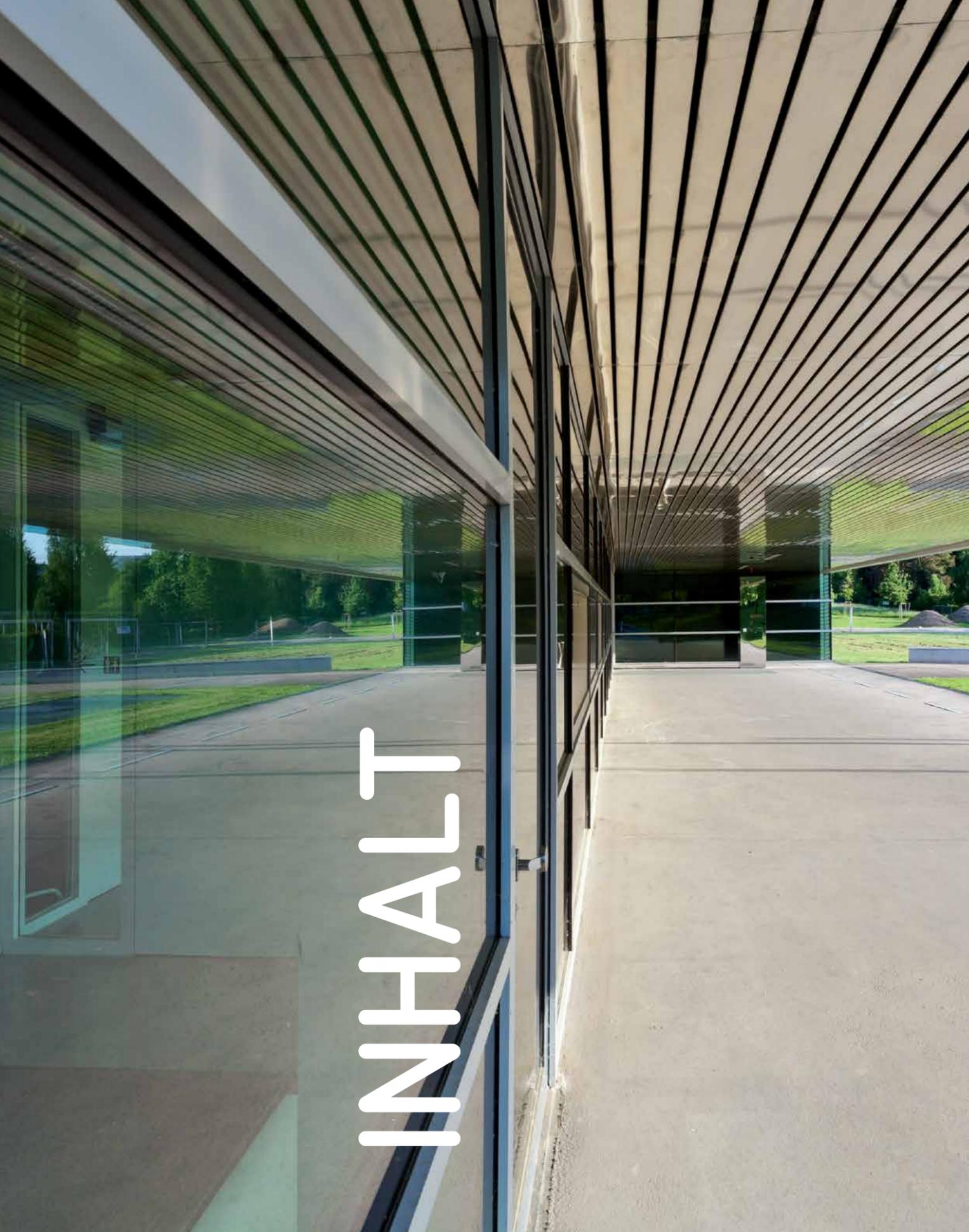
Another highlight of 2018 was the inauguration of the Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC), through which HLRS will work closely with partners from industry and academia to find solutions to challenges facing the fields of media and the arts. The MSC is the latest product of our industrial strategy, which began with the Automotive Simulation Center Stuttgart (asc(s)). This year the asc(s) celebrated its 10th anniversary, showing just how sustainable our strategy can be. We thank asc(s) director Alexander Walser for using the

occasion to talk with us for this annual report about the economic and scientific benefits of networking the German automotive industry.

In terms of key performance indicators HLRS can proudly look back on a very successful year. Our third-party funding saw an increase over previous years, our income from industrial HPC users was again at a high level, and the number of people benefiting from our training and education activities remained strong.

Users of our HPC systems also had a very productive year. This annual report showcases some examples of our users' research, including a new sound prediction model that could help reduce machinery noise, applications of HPC and machine learning to make power plants more efficient, and a computational approach that is helping to point the way toward new semiconductor technologies. Such applications show how simulation is making important contributions in areas that are critical for our wellbeing.

With this annual report we express our heartfelt thanks to our supporters and funders, who have made our successes in 2018 possible. At the same time, we look forward to tackling new challenges in 2019.



# INHALT

## 8 Im Blickpunkt

- 9 Die Zukunft gestalten

## 14 Neuigkeiten

- 15 Kurze Beiträge
- 22 EU fördert europäische Exzellenz-Zentren
- 23 Die HLRS-Visualisierung unterstützt den Bau von Stuttgart 21
- 24 Ein neues Weiterbildungsangebot schult Ingenieure und Informatiker im Umgang mit Höchstleistungsrechnern
- 25 Gesellschaftspolitischer Beirat verhilft HLRS zu mehr Weitblick
- 26 SimTech wird zum Nationalen Exzellenzcluster ernannt
- 27 Media Solution Center fördert Innovationen für Film und Digitale Kunst
- 28 EXCELLERAT - Neue HPC-Verfahren für Ingenieure in der Industrie
- 29 Zum Aufbau einer nachhaltigen HPC-Infrastruktur
- 30 Interview: Netzwerk der deutschen Autoindustrie
- 33 Dank Daten entspannt mit der S-Bahn durch Stuttgart?
- 36 Leistungssteigerung der HPC-Systeme durch erweiterten Support
- 38 EuxDat: Big Data für die Landwirtschaft
- 39 Doktoranden 2018
- 40 Einblicke in die „Black Box“ der Simulation

## 34 HLRS in Zahlen

## 42 Highlights der Forschung

- 43 Supercomputer macht ein Prognosemodell zum Lärmschutz möglich
- 46 Einsatz von computergestützter Chemie zur Untersuchung neuer Halbleitertechnologien
- 48 Simulation und maschinelles Lernen könnten Kraftwerke effizienter machen
- 50 Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer

## 56 Über uns

- 57 In unserem Rechenraum
- 59 Unsere Nutzer
- 60 Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
- 66 HPC Fort- und Weiterbildung in 2018
- 68 Workshops und Konferenzen in 2018
- 69 Organigramm
- 70 Organisation

# IM BLICKPUNKT

## Die Zukunft gestalten

**Das HLRS hat jahrzehntelange Erfahrung in Computational Engineering für akademische und industrielle Forschung. Durch aktuelle Expansionen in der Infrastruktur und im Dienstleistungsbereich schafft das HLRS nun die Basis, die es Ingenieuren und Wissenschaftlern ermöglicht, sämtliche Vorteile der nächsten Generation von noch schnelleren Supercomputern zu nutzen.**

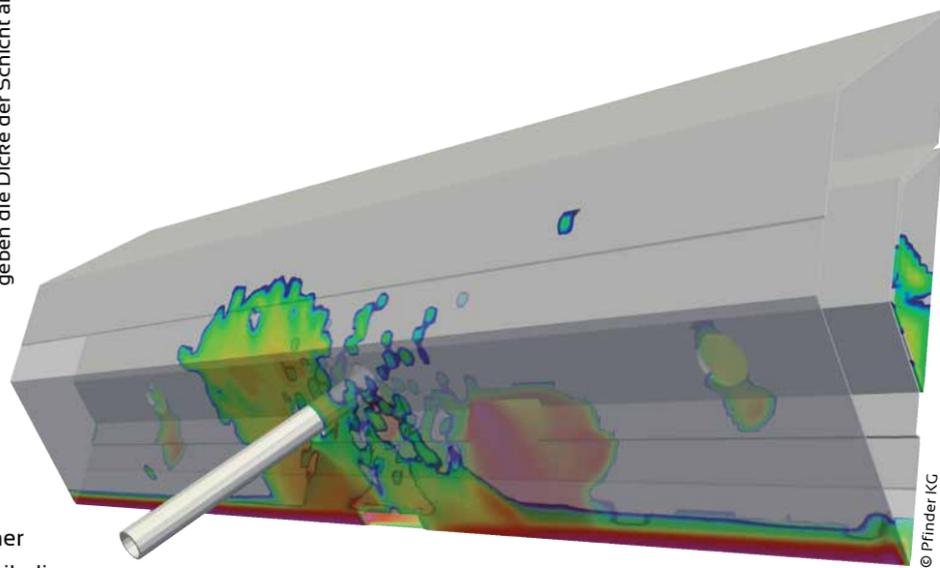
In der Landeshauptstadt Baden-Württembergs, im Mittelpunkt einer der dynamischsten Regionen Deutschlands für High-Tech Engineering, befindet sich das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart. Diese Region ist nicht nur die Heimat von herausragenden und wichtigen internationalen Konzernen wie Daimler, Bosch und Porsche, sondern auch ein riesiges und florierendes Ökosystem aus kleinen und mittleren Unternehmen mit einer langen Tradition in der Herstellung qualitativ hochwertiger mechanischer, elektronischer und chemischer Produkte. In ihrer Gesamtheit betrachtet stellen sie einen wichtigen Motor für Deutschlands wirtschaftlichen Erfolg dar.

Diese regionale Kraft im Ingenieurwesen hat auch eine wichtige Rolle in der Gestaltung der Entwicklung des HLRS gespielt. Auf dem Campus der Universität Stuttgart gelegen – ein Zentrum für Forschung und Bildung mit dem Schwerpunkt auf Ingenieurwissenschaft und angewandte Wissenschaft – hat das HLRS bereits seit Jahrzehnten eine hochmoderne Infrastruktur für Computersimulationen, Visualisierung und Datenanalyse geschaffen. Diese Werkzeuge sind essentiell für die Erforschung von Naturphänomenen geworden, die so komplex sind oder in so kleinem Umfang auftauchen, dass es schwer ist, sie auf irgendeine andere Weise zu studieren. In der Ingenieurwissenschaft ist das Designen von Präzisionsprodukten, für die Deutschland bekannt ist, ohne Computermodelle unvorstellbar.

Das HLRS stellt schon seit Langem wichtige Höchstleistungsrechnerressourcen für Wissenschaftler zur Verfügung, unter anderen in Disziplinen wie computergestützter Flüssigkeitsdynamik, Physik, Chemie und Materialwissenschaft. Dies schließt nicht nur akademische Forscher ein, sondern auch Wissenschaftler in industrieller Forschung und Entwicklung – zum Beispiel in der Automobil- und Energieindustrie sowie in der Luftfahrt. Tatsächlich gehen ungefähr 10% der Recherauslastung des HLRS an industrielle Benutzer, eine nennenswerte Zahl in Deutschlands Supercomputer-Landschaft.

Eine Brücke zwischen der akademischen und der industriellen Welt zu schlagen, hat es dem HLRS ermöglicht, seine Expertise im Bereich des Höchstleistungsrechnens weiterzuentwickeln und bei vielen verschiedenen rechnergesteuerten Ingenieursproblemen der realen Welt anzuwenden. Das Ziel des HLRS, die Ressourcen zur Verfügung zu stellen, die den Bedarf von Berechnungsingenieuren optimal decken, war die treibende Kraft für die Investitionen in eine neue Computer-Infrastruktur, neue professionelle Weiterbildungsangebote und Informatikforschung. So legt das HLRS die Grundlagen für zukünftige größere Supercomputer und konzentriert sich darauf, Werkzeuge und Dienstleistungen zur Verfügung zu stellen, die es den Ingenieuren ermöglicht, die Ressourcen optimal zu nutzen.

Simuliertes Auftragen einer Wachsschicht auf einen beispielhaften Schweller über eine Düse. Die Farben geben die Dicke der Schicht an.



### HPC verbessert die Automobilherstellung

Das HLRS ist ein wichtiger Partner für Stefan Hildebrand vom Chemikalienhersteller Pfänder KG und ermöglicht es der Firma, neue Leistungen für seine Klienten in der Automobilindustrie zu entwickeln.

Pfänder bietet auf Wachs basierte Korrosionsschutzmittel an, welche in der Autoherstellung typischerweise durch Roboter am Fließband aufgebracht werden. Als Teamleiter für Digital Engineering führt Hildebrand Computersimulationen durch, um diesen Prozess zu optimieren. Insbesondere benutzt er OpenFOAM, eine gängiges Softwarepaket für computerbasierte Flüssigkeitsdynamik, das berechnet, wie die Schutzschichten sich verhalten wenn sie von einer Düse eingespritzt werden, welche Wege die Tropfen in der Luft nehmen und wie diese einen Film auf der Oberfläche bilden werden. Diese Modelle werden genutzt, um die Flüssigkeitsmenge, die für eine bestimmte Anwendung versprüht wird, zu optimieren, die beste Düsenanordnung zu identifizieren, und sicherzustellen, dass der Film vollständig schützend und langlebig ist.

Pfänder besitzt zwar ein kleines, internes paralleles Computersystem. Wenn jedoch komplexere Fragen auftauchen oder wenn Resultate schnell erbracht werden müssen, wendet sich Hildebrand an das HLRS. „Wenn wir an einem Projekt für einen Klient arbeiten, das eine Simulation im großen Maßstab benötigt“,

erklärt Hildebrand, „können wir keine vier Wochen warten, um die Berechnungen auf unserem System laufen zu lassen. Das HLRS ermöglicht es uns, schnell einen Job durch hunderte von Rechenkernen laufen zu lassen im Gegensatz zu den 16, die wir hier haben. Anstatt vier Wochen zu warten, kann das HLRS uns Resultate in 3-4 Tagen liefern.“

Die Möglichkeit, sich an das HLRS zu wenden, bietet auch andere Vorteile gegenüber der Installation eines eigenen, größeren HPC-Systems. Da Pfänders rechnergestützte Arbeit starken Schwankungen unterliegt, macht es ökonomisch keinen Sinn, ein eigenes System zu installieren, nur damit es für ein paar Monate im Jahr genutzt wird. Des Weiteren kann Hildebrand davon ausgehen, dass das HLRS zuverlässige, hochmoderne Hardware nutzt, die auch stetig weiterentwickelt wird. Mit den Entwicklungen der HPC-Technologien mitzuhalten, wäre für ein kleines Unternehmen nicht möglich. Zugang zu dieser Rechnerleistung zu haben, war für Hildebrand 2018 besonders wichtig, als sein Team zum ersten Mal die Anwendung von Pfänder-Beschichtungen nicht nur für eine Komponente, sondern für ein ganzes Automobil gleichzeitig simulierte. Dieser Leistungssprung in der Berechnung benötigte eine enorme Rechenleistung und lag weit über den Möglichkeiten

des eigenen Systems. Er hofft, den HLRS Supercomputer auch in Zukunft weiterhin nutzen zu können, da die Möglichkeit, ganze Systeme zu modellieren, für seine Firma neue Marktchancen im Bereich Anwendungslösungen von Beschichtungen eröffnet.

### Hawk: Neue Möglichkeiten für industrielle Produktion

Benutzern des HPC-Systems vom HLRS wird bald noch mehr Rechenleistung zur Verfügung stehen. Im November 2018 kündigten das HLRS und Hewlett Packard Enterprise eine gemeinsame Kollaboration an, um einen Next-Generation Supercomputer zu bauen. Dieser wird 3,5 mal schneller sein als Hazel Hen, dem aktuellen Aushängeschild des HLRS. Der erwartete Höchstleistungsrechner mit dem Namen Hawk wird der schnellste in der weltweiten industriellen Produktion werden. Er wird computergestützte Ingenieurwissenschaften und Forschung in sämtlichen Disziplinen der Wissenschaft und industriellen Anwendungen in Bereichen wie Energie, Klima, Mobilität und Gesundheit antreiben. Das Hawk-System wird mit seinen 5.000 Rechenknoten eine theoretische Höchstleistung von 24 PetaFLOPs aufweisen.

Ein wichtiges Merkmal von Hawk sind die Spezifikationen, die gezielt auf die Bedürfnisse von Berechnungsingenieuren zugeschnitten sind. Die Architektur von Hawk basiert auf der nächsten Generation von EPYC-Prozessoren des Chip-Herstellers AMD, die den Codenamen ROME trägt. Das HLRS hat die ROME-Prozessoren ausgewählt, da sie ein Memory-Subsystem nutzen, was für Bereiche wie rechnergestützte Strömungs- und Molekulardynamik sowie andere Forschungsgebiete, in denen viele Nutzer tätig

sind, besonders geeignet ist. Außerdem komplettiert das neue System mit den AMD EPYC-Prozessoren die Einsatzmöglichkeiten der Rechner des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) – einem Zusammenschluss der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland. Diese Auswahl unterstützt das Ziel des GCS, seinen Nutzern unterschiedliche Rechnerarchitekturen anzubieten.

„Wir sind sehr erfreut, dass Hawk durch den Leistungszuwachs eine Vorreiterrolle für unser Höchstleistungsrechnersystem einnimmt.“ sagt Prof. Dr. Michael M. Resch, Direktor des HLRS. „Der wahre Gewinner sind jedoch die Kunden, insbesondere die Berechnungsingenieure in der wissenschaftlichen Forschung und in der Industrie, die von der Möglichkeit profitieren werden, immer komplexere Simulationen durchführen zu können.“

### Die nächste Ebene

Es gibt keinen Zweifel, dass große Höchstleistungsrechner größere Simulationen ermöglichen und sich die Anzahl der zur Verfügung stehenden Kernstunden für die Forschungsgemeinschaft wächst. Gleichzeitig wird aber deutlich, dass es nicht alleine ausreicht, Hardware zu bauen, um den stets wachsenden Bedarf der Berechnungsingenieure zu decken.

Software für ein großes paralleles Rechnersystem, wie Hazel Hen oder Hawk, zu schreiben ist weitaus komplexer als denselben Algorithmus auf einem Desktop Computer oder einem kleinem Computer Cluster anzuwenden. In der Tat benötigt man für die Entwicklung und Implementierung effektiver und effizienter Codes für HPC-Systeme ein Spezialwissen; dies wird besonders wichtig werden, wenn Höchstleistungsrechner

Exascale erreichen, die nächstgrößere Ebene der Rechnerleistung nach dem aktuellen Petascale. Es wird nötig sein, die Codes für solche extrem parallelisierten Systeme zu optimieren, um die individuelle rechnergestützte wissenschaftliche Forschung zu beschleunigen und die Benutzung von Höchstleistungsrechnern effizienter zu gestalten – dies wird wiederum helfen, Energie zu sparen und HPC-Ressourcen für die größtmögliche Anzahl potentieller Benutzer zur Verfügung zu stellen. Schon vor vielen Jahren hat das HLRS erkannt, dass die Zukunft des Höchstleistungsrechnens in der Entwicklung und Zunahme des Zugangs zu hochmodernen Codes liegt, die eine Skalierung von immer umfangreicheren Systemen ermöglicht. Aus diesen Gründen hat das Zentrum einige Projekte aufgestellt, die das Ziel verfolgen, Berechnungsingenieure auf die Zukunft vorzubereiten.

#### Ingenieure aus der Industrie auf eine neue Dimension bringen

2018 wurde das HLRS zum Haupt-Koordinationszentrum für das neue Horizon 2020 geförderte Forschungsprogramm mit dem Namen EXCELLERAT (European Center of Excellence for Engineering Applications) ernannt. In einem gemeinsamen Netzwerk mit 13 Partnern in ganz Europa, wird EXCELLERAT der HPC- und der Ingenieur-Community Zugang zu skalierten Anwendungen zur Verfügung stellen und die Verfügbarkeit durch Technologietransfer unterstützen (siehe Seite 28 um mehr über EXCELLERAT zu erfahren). Firmen wie Porsche, ANSYS und Festo haben den Bedarf an Ressourcen und Expertise erkannt und ihre Unterstützung für EXCELLERAT ausgesprochen. Der Flugzeughersteller Airbus, ist einer der ersten Teilnehmer des Projekts, weil EXCELLERAT es ermöglicht, das akademische Wissen mit industriellen Bedürfnissen zu vernetzen.

Neben EXCELLERAT beteiligt sich das HLRS auch an Projekten, die sich auf das Identifizieren und Adressieren von Möglichkeiten für Höchstleistungsrechnen in speziellen industriellen Bereichen fokussieren. Seit mehr als zehn Jahren ist das HLRS ein wichtiger Partner des Automotive Solution Center Stuttgart (siehe Seite 30), eine Allianz verschiedener Firmen, die Simulationen für die Automobilentwicklung und -design

nutzen. Das HLRS hat 2018 auch mit der Hochschule der Medien (HdM) und dem Zentrum für Kunst und Medien (ZKM) das Media Solution Center gegründet, eine Allianz von Organisationen, die an der Erforschung von Möglichkeiten für Höchstleistungsrechnen in der Medienkunst interessiert sind. Für die kommenden Jahre plant das HLRS, dieses Solution Center-Modell auch in anderen Bereichen zu implementieren.

#### Die Supercomputing-Akademie schult zum HPC-Experten

Seit langem ist es eine Hauptaufgabe des HLRS HPC-Schulungen anzubieten. 2018 hat das Zentrum ein neues Schulungsprogramm entworfen, das die Bedürfnisse von Ingenieuren und Wissenschaftlern in der Industrie aufgreift.

Das neue Programm, unter dem Namen Supercomputing-Akademie, richtet sich hauptsächlich an Berufstätige, die sich neben Beruf und Familie weiterbilden möchten. Hierzu wird ein Lernformat, das sogenannte Blended-Learning genutzt, das Präsenzseminare mit Online-Schulung verknüpft, wobei der Schwerpunkt der Weiterbildung auf der Online-Schulung liegt. Das hat den Vorteil, dass die Teilnehmenden zeit- und ortsungebunden lernen können.

Die Supercomputing-Akademie – die vom Ministerium für Soziales und Integration Baden-Württemberg aus dem Europäischen Sozialfonds sowie dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert wird – hatte im Juli das erste 15-wöchige Modul für „Paralleles Programmieren“ beendet. Von September bis Dezember wurde das Modul wegen hoher Nachfrage wiederholt. Anfang 2019 wird das zweite Modul „Simulation“ starten. Weitere Module wie „Performance Optimierung“, „HPC-Cluster: plan, build, run“, „Wirtschaftlichkeit und Nachhaltigkeit von HPC“, „Visualisierung“ und „Datenmanagement“ – Themen von großem Interesse bei Systemadministratoren, Programmierern und Anwendern – werden folgen.

Die Supercomputer-Akademie ist ein Bestandteil eines permanenten Dialoges zwischen dem HLRS und der Industrie. Durch die Zusammenarbeit mit dem gemeinnützigem Unternehmen Sicos BW hat das Zentrum in den letzten zwei Jahren das Industrial HPC User



Feierliche Vertragsunterzeichnung für den neuen Supercomputer „Hawk“ mit Vertretern der Universität Stuttgart und von Hewlett Packard Enterprise.

Aron Precht (VP Sales, DACH & Russia, Hewlett Packard Enterprise)

Heiko Meyer (General Manager und Vice President, Enterprise Group, Hewlett-Packard GmbH)

Jan Gerken (Kanzler, Universität Stuttgart)

Michael M. Resch (Direktor, HLRS)

Roundtable (iHURT) organisiert, ein ganztägiges Treffen mit dem Ziel, den Informationsaustausch in industrieller Forschung und Entwicklung zu fördern. Dieser Dialog ermöglicht es dem HLRS, die wesentlichen Herausforderungen, mit denen HPC-Nutzern in der Industrie konfrontiert werden, zu verstehen und hierfür die Entwicklung von neuen Infrastrukturen und Dienstleistungen in den kommenden Jahren weiterzuführen.

#### Ausblick

Im kommenden Jahrzehnt werden Simulation, Visualisierung, Datenanalyse und Machine Learning ein wesentlicher Bestandteil in der Forschung und Entwicklung sein und eine tragende Rolle übernehmen, um die wichtigsten Herausforderungen anzugehen. Durch Identifizieren und Fokussieren auf die Bedürfnisse von Ingenieuren und Wissenschaftlern ist das HLRS bestrebt, einen größtmöglichen Zugang zu diesen Werkzeugen zu liefern.

Die Installierung des Hawk, der nächsten Generation von Höchstleistungsrechnern, 2019 wird ein bedeutender Schritt in Richtung dieses Ziels sein. Zusätzlich sind das ambitionierte Schulungsprogramm des HLRS und seine weitreichenden Kontakte in die Industrie wichtige Teile dieser Bemühung. Durch diese Aktivitäten hat sich das HLRS als zentraler Partner für Innovation in Baden-Württemberg, in Deutschland, in Europa und darüber hinaus positioniert.

(CW)



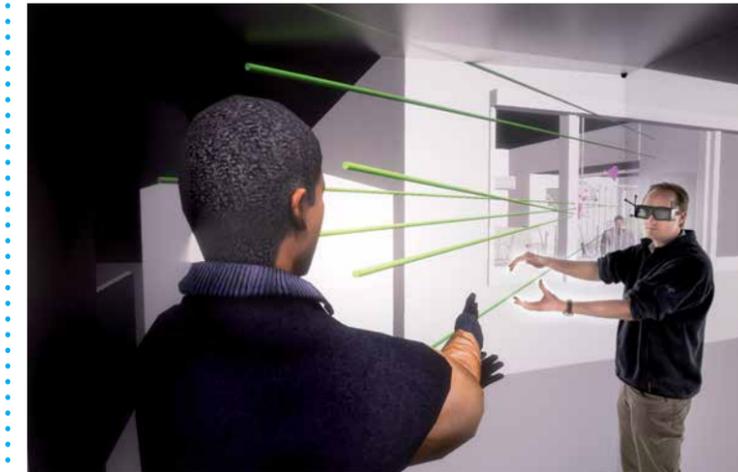
Günther Oettinger

HLRS Direktor Michael Resch

## Ministerpräsident Oettinger besucht HLRS

Als langjähriger Fürsprecher des HLRS in seiner früheren Rolle als Ministerpräsident von Baden-Württemberg, kennt der EU-Kommissar für Haushalt und Personal, Günther Oettinger, die Bedürfnisse und Herausforderungen des Höchstleistungsrechnens. Am 17. Mai sprachen Oettinger und HLRS-Direktor Michael Resch über die Bedeutung einer Europäischen Strategie für Höchstleistungsrechnen, die in der Lage ist, europäischen Wissenschaftlern Zugang zu modernster Technologie zu ermöglichen. Ein Diskussionsthema war die Frage, wie das Europäische HPC durch das EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC) unterstützt werden kann, das die Finanzierung von zwei pre-Exaflop-Systemen und zwei Exaflop-Systemen in den kommenden Jahren plant. Sowohl Oettinger als auch Resch sahen die Notwendigkeit, Höchstleistungsrechnen für wissenschaftliche Anwendungen und für die Industrie zur Verfügung zu stellen.

(LB)



## HLRS unterstützt Kriminalitätsuntersuchung mit 3D-Visualisierung

In einer Folge der ARD-Fernsehsendung Kriminalreport wurde darüber berichtet, wie 3D-Modellierung und -Simulation dazu beitragen können, komplexe Straftaten aufzudecken. Es wurde die Methodik des Landeskriminalamtes Baden-Württemberg (LKA) vorgestellt, die zur Analyse von 3D-Bildern von Tatorten genutzt wird, sowie die neuesten Ergebnisse des HLRS für diese Näherungsmethoden. Der Leiter der HLRS-Visualisierungsabteilung Uwe Wössner erklärte, dass Ermittler die Visualisierungsumgebungen dazu nutzen können, um unter anderem die Flugbahn einer Patrone genau zu untersuchen oder eine Autopsie durchzuführen. Solche Methoden können forensische Beweise liefern, die mit anderen Methoden nur schwer zu finden wären. In den letzten Jahren hat das HLRS mit dem LKA zur Entwicklung neuer Methoden für die 3D-digitale Rekonstruktion von Tatorten zusammengearbeitet, um diese noch effektiver untersuchen zu können.

(EG)



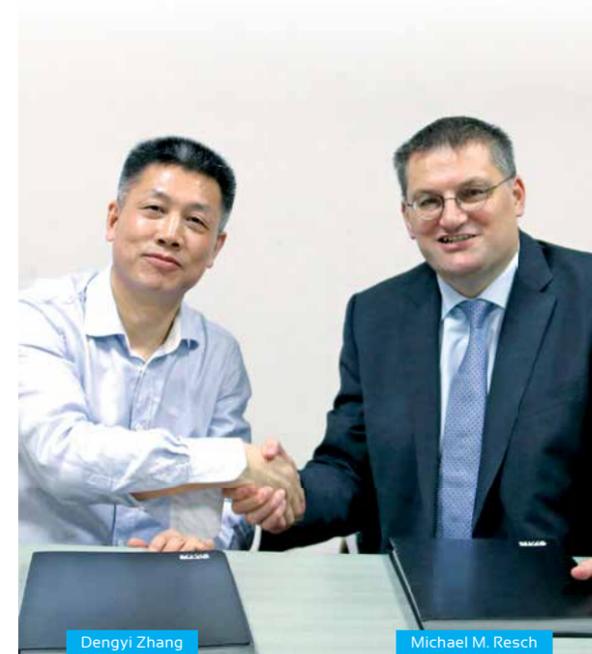
### HPC-User-Forum prüft den Stand europäischen Supercomputings

Oberste Zielsetzung des HPC-User-Forums am 1.-2. Oktober war die Förderung der Interaktion zwischen HPC-Benutzern und -Technologieherstellern und Einblicke in die Art und Weise zu geben, wie Supercomputer und deren Nutzung sich entwickeln. Neben Neuigkeiten aus dem HLRS und seinen Partnern im Gauss Centre for Supercomputing, standen Vorträge von Leonardo Flores (Europäische Kommission) über das EuroHPC

Joint Undertaking sowie von Earl Joseph und Steve Conway von HPC-Industrieberatern Hyperion Research zu Trends in der HPC-Industrie auf dem Programm. Führende HPC-Hardwarehersteller äußerten sich zu technischen Herausforderungen und industrielle HPC-Anwender schilderten u.a. Szenarien rund um autonomes Fahren. Sicos BW sowie Repräsentanten der Fortissimo- und EXCELLERAT-Projekte beleuchteten zudem, welchen speziellen Herausforderungen industrielle HPC-Anwender begegnen. (CW)

### Stuttgart und Wuhan unterzeichnen Kooperationsvertrag

Am 3. April unternahm das HLRS den nächsten Schritt zur Stärkung seiner wissenschaftlichen Zusammenarbeit mit Asien. In einer Zeremonie in Wuhan, China, unterzeichneten der Direktor des Höchstleistungsrechenzentrums der Universität Wuhan Dengyi Zhang und HLRS-Direktor Michael Resch eine Vereinbarung, in der sie sich für die nächsten drei Jahre zu einer Zusammenarbeit bereiterklärten. Das HLRS und das Höchstleistungsrechenzentrum der Universität Wuhan wollen den Austausch von Wissenschaftlern vorantreiben und sich auf zentrale Forschungsthemen im Höchstleistungsrechnen konzentrieren. Beide Seiten werden auch ihre Erfahrungen bei der Installation großer Computersysteme in die Kooperation einbringen. Neben seiner Zusammenarbeit mit der Universität Wuhan hält das HLRS auch Vereinbarungen mit vielen anderen internationalen HPC-Zentren. (CW)



Dengyi Zhang

Michael M. Resch

### Golden Spike Awards würdigen herausragende Forschung

Jedes Jahr bietet der Results & Review Workshop den Nutzern des HLRS-Supercomputers die Gelegenheit, über ihre Forschung und die besten HPC-Praktiken zu diskutieren. Beim 21. Workshop, vom 4. bis zum 5. Oktober, wurden Forschungsergebnisse aus Numerischer Strömungsmechanik, Klimaforschung, Informatik, Chemie, Physik und Biologie mit 41 Anwenderprojekten, 22 wissenschaftlichen Gesprächen und 19 Plakaten vorgestellt. Auf dem Workshop verlieh das HLRS die Golden Spike Awards Vertretern von drei herausragenden Projekten: Mathis Bode von der RWTH Aachen („Towards clean propulsion with synthetic fuels“), Travis Jones vom Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft („Sulfur in ethylene epoxidation on silver“) und Christoph Wenzel von der Universität Stuttgart („DNS of compressible turbulent boundary layers with adverse pressure gradients“). (CW)



### Girls Day 2018

Der Girls Day ist eine jährliche, deutschlandweite Veranstaltung, die bei Mädchen das Interesse an Berufen in den Bereichen Naturwissenschaften, Ingenieurwissenschaft und Informationstechnologie wecken soll. 2018 besuchten zehn Schülerinnen das HLRS, um die Welt der Höchstleistungsrechnen kennenzulernen. Das Programm umfasste eine praktische Einführung in die Rechner-Hardware, eine Besichtigung des HLRS-Computerraums und eine Schulung im Umgang mit der Programmiersprache Scratch. Zum Abschluss des Tages konnten sie in einem Flugsimulator im 3D-Visualisierungsraum des HLRS über dem Schwarzwald gleiten, was mit einer HLRS-Pilotenlizenz ausgezeichnet wurde. Am Ende des Tages waren sich alle einig, dass sie nicht nur Spaß hatten sondern dass eine Berufskarriere im Computingumfeld durchaus spannend und vielfältig sein kann. (AL)



### Illustris-Projekt jetzt auf Briefmarke

Im Dezember gab die Deutsche Post die Freigabe einer neuen Briefmarke bekannt, welche das Illustris-Projekt zeigte. Die internationale wissenschaftliche Kollaboration, unter der Leitung von Volker Springel vom Heidelberger Institut für Theoretische Studien in Zusammenarbeit mit Forschern des Massachusetts Institute of Technology, der Harvard University und des Max-Planck-Institut für Astrophysik, hat die weltweit größte kosmologische Simulation von Galaxienbildung erstellt. Derzeit arbeitet das Illustris-Team mit dem HLRS zusammen, um die Simulationen des Projekts IllustrisTNG auf Hazel Hen

auszuführen. 2018 hat das Projekt fünf Artikel gleichzeitig veröffentlicht, die die Ergebnisse der ersten IllustrisTNG-Simulationen dokumentieren. Das Projekt ist zweifacher Gewinner des Golden Spike Awards, einem jährlichen Preis für herausragende Forschung unter Verwendung von HLRS-Rechenressourcen. (CW)





### Stuttgart gewinnt zum dritten Mal in Folge die Formula SAE Michigan

Das Rennteam der Universität Stuttgart gewann 2018 das Formula SAE Michigan, die inoffizielle Weltmeisterschaft des Internationalen Formula StudentNetzwerks. Es war das dritte Jahr in Folge, dass ein Team der Universität Stuttgart den Wettbewerb gewann. Zusätzlich zum Bau eines Rennwagens und dem Testen auf der Rennstrecke, präsentierten die Teammitglieder ihre Werke Experten aus den Bereichen Motorsport, Automobilindustrie und Raumfahrt. Die Teams werden nach Leistung, Design, Bau-, Kosten- und Verkaufspräsentationen beurteilt. Seit 2016 fungiert das HLRS als offizieller Förderer des Teams der Universität Stuttgart und sponsert die Computerstunden für Strömungsberechnungen (CFD), um die Aerodynamik des Fahrzeugs zu verbessern. „Die Unterstützung seitens des HLRS ist einer der Eckpfeiler für die Entwicklung unserer Rennwagen“, so Teammitglied Johannes Burgbacher. (AL)

### Dritter jährlicher deutsch-russischer Workshop

In April trafen sich Forscher von akademischen Instituten aus Russland und Deutschland in Kaliningrad, um die Zusammenarbeit zwischen den beiden Forscherkreisen weiterzuentwickeln. Das Treffen war das dritte in einer Reihe von jährlichen Workshops, welche zur Förderung des internationalen Dialogs organisiert werden. Nach der Begrüßung durch Prof. Dr. Sci. Boris Chetverushkin (Keldysh Institute der angewandten

### Künstler visualisiert Luftverschmutzung in Stuttgart

Für das Drehmoment Produktionskunst-Festival, organisiert von der KulturRegion Stuttgart, kooperierte der Künstler Michael Saup mit dem HLRS, um die „berühmte“ Luftverschmutzung der Stadt sichtbar zu machen. Sein Virtual Reality-Projekt namens „Staub“ visualisiert Sensormessungen von Partikelemissionen und integriert diese in Open Source-Straßenbilder und Echtzeitdaten zur Verkehrslage. Besucher der Installation verwenden ein VR-Headset, um diese ansonsten unsichtbare Belastung zu betrachten. „Es inspiriert mich, mit Leuten zusammenzuarbeiten, die ähnliche Werkzeuge verwenden, diese aber sonst für völlig andere Zwecke nutzen“, sagte Saup. „Der Ideenaustausch mit in der Informatik tätigen Personen ... kann zu neuen Vorstellungen über Zukunftsszenarien führen.“ Die Installation wurde im Oktober zwei Wochen lang in der St.-Maria-Kirche in Stuttgart gezeigt. (CW)



© Michael Saup

Mathematik, Russische Akademie der Wissenschaften) und Prof. Dr. Sci. Andrei Klemeshev (Rektor der Immanuel Kant Baltic Federal University) wurde auf der dreitägigen Konferenz ein breites Spektrum von Themen diskutiert. Die Gespräche konzentrierten sich auf wissenschaftliche Herausforderungen in Bereichen wie numerische Strömungsdynamik, Kosmologie und Strukturmechanik sowie auf modernste Methoden im Höchstleistungsrechnen. (CW)



### Neues Cloud-basiertes Filesystem bietet mehr Flexibilität

Um den Service für die Nutzer weiter auszubauen, implementierte das HLRS ein neues Cloud-basiertes Filesystem vom Hardware-Hersteller Quobyte. Es ergänzt das vorhandene Lustre-Filesystem und bietet den Benutzern, deren Berechnungen auf Millionen

von kleinen Dateien basieren, eine optimale Plattform. Weil die Cloud-basierte Plattform an das baden-württembergische digitale Hochgeschwindigkeitsnetzwerk BelWü angeschlossen ist, ermöglicht sie den direkten und schnellen Zugang auf die Daten von ihrem Arbeitsplatz. Darüber hinaus erlaubt die Skalierbarkeit der neuen Plattform den Benutzern, die Daten für die Dauer ihrer Projektvergabe auf dem System zu speichern, anstatt 60 Tage, wie es auf Lustre erforderlich ist. Das Verschieben von geeigneten Projekten in das Quobyte-System bietet nicht nur eine günstigere Lösung, sondern reduziert auch Engpässe im Lustre System, so dass es für Projekte verwendet werden kann, für die es am besten geeignet ist. (CW)

### Ungarischer Minister besucht das HLRS

Am 19. Oktober besuchten der ungarische Minister für Innovation und Technologie Prof. Dr. Laszlo Palkovics und der ungarische Außenhandelsattaché Dr. David Bencsik das HLRS. Nach einer Vorstellung der Forschungs- und Industrieaktivitäten des HLRS – mit Fokus auf die Kollaboration des HLRS mit der Automobilindustrie, insbesondere in Bezug auf die Forschung von autonomen Fahrzeugen – diskutierten Minister Palkovics und HLRS-Direktor Michael Resch den aktuellen Stand des Höchstleistungsrechnens in Europa, einschließlich des EuroHPC Joint Undertakings und der Partnership für Advanced Computing in Europa. Das HLRS hat bereits mit der Universität Pécs und der Ungarischen Akademie der Wissenschaften zusammengearbeitet. Übereinstimmend wollen beide Seiten nach neuen Wegen für die Zusammenarbeit beim autonomen Fahren und Höchstleistungsrechnen suchen. (EG)



Joseph Schuchart

### Joseph Schuchart gewinnt den Best Paper Award auf IWOMP 2018

Auf dem internationalen Workshop für OpenMP in Barcelona wurde Joseph Schuchart, ein Wissenschaftler vom HLRS, für seine Untersuchung des taskyield anerkannt. Taskyield ist eine wichtige Software zum Scheduling von „Tasks“ während des parallelen Rechnens. Schuchart untersuchte mehrere mögliche Implementierungen davon und verglich ihre Genauigkeit und Leistung. Da es schwierig sein kann, herauszufinden, wie taskyield Tasks priorisiert, präsentierten er und seine Kollegen einen Test, der aufspürt, welche Variante von taskyield in verschiedenen OpenMP-Compilern und Laufzeiten verwendet wird. „Unsere Motivation ist es, Entwicklern und Nutzern zu helfen, indem wir sie über die Schwachstellen der taskyield-Funktion informieren. Wir möchten auch ein Werkzeug präsentieren, das Einblicke in die Funktionsweise von OpenMP-Implementierungen bietet“, so Schuchart. (AL)



Michael Resch

Laszlo Palkovics



### HLRS öffnet seine Türen am Tag der Wissenschaft

Am 30. Juni nahm das HLRS am Tag der Wissenschaft an der Universität Stuttgart teil. Mehr als 300 Besucher wurden bei dieser Veranstaltung begrüßt, die der breiten Öffentlichkeit die Möglichkeit bot, Höchstleistungsrechnen zu erleben und mehr über deren Einsatz in der Forschung und der Technologieentwicklung zu erfahren. Die Besucher besichtigten den Rechnerraum des HLRS und besuchten die CAVE, eine 3D-Virtual Reality-Einrichtung. Dort genossen sie den Nervenkitzel, in einem Fahrsimulator durch die Straßen einer Stadt zu fahren oder im Paragliding-Simulator hoch über einer virtuellen Landschaft zu fliegen. Mitarbeiter zeigten auch Visualisierungsanwendungen in der Stadtplanung und HLRS-Direktor Michael Resch hielt einen Vortrag, der eine lebhaftere Einführung in das Höchstleistungsrechnen sowie seinem kulturellen und philosophischem Kontext bot. (CW)

### Nachhaltigkeitstage 2018

Die Nachhaltigkeitstage der Universität Stuttgart fanden im Juni im Rahmen der NI-Tage Baden-Württemberg statt, die Teil der Europäischen Nachhaltigkeitswoche und der Deutschen Aktionstage Nachhaltigkeit sind. Die Ziele sind für das Nachhaltigkeitsteam des HLRS, als Organisator der Veranstaltung, einen Ideenaustausch zwischen Akteuren der Nachhaltigkeit, interessierten Studierenden und Mitarbeitenden zu ermöglichen. Während dieser zwei Tage gab es Gespräche über Fortschritte an der Universität mit einem Fokus auf die besonderen Herausforderungen bezüglich Energieverbrauch und Kühlung im Höchstleistungsrechnen. „Mit den Nachhaltigkeitstagen wollen wir zeigen, dass nachhaltiges Handeln ein übergeordnetes Ziel sein muss, das auf einer gemeinsamen Überzeugung basiert und allen Beteiligten zugute kommen kann“, so Sabine Eger, Mitglied des HLRS-Nachhaltigkeitsteams. (AL)

### Laufen für die Digitalisierung

Am 27. Juli liefen Digitalisierungsexperten um den Vaihinger Campus der Universität Stuttgart – im wörtlichen Sinne. Mit den Ehrengästen Thomas Strobl, Baden-Württembergs Minister für Inneres, Digitalisierung und Migration und Ultramarathonläufer Jürgen Mennel, stärkte die Veranstaltung mit dem Titel „Digitalisierung: Läuft“ Baden-Württemberg als Standort für digitale Expertise. Während einer Pressekonferenz betonte HLRS-Direktor Michael Resch, dass das Land die ideale Grundlage für eine erfolgreiche Digitalisierungsstrategie geschaffen hat und wies darauf hin, dass die erfolgreiche Zusammenarbeit des HLRS mit den Kommunen und der deutschen Industrie durch eine Kollaboration zwischen Politik, Wirtschaft und Wissenschaft weiterentwickelt werden könnte. Strobl lobte die Fortschritte der Digitalisierung in Baden-Württemberg. (LB)

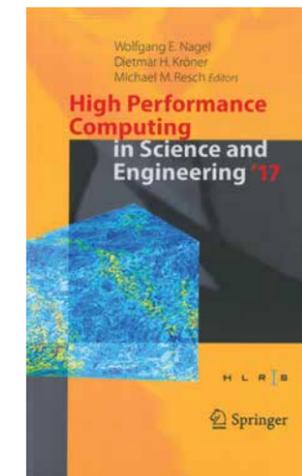


### HLRS und KISTI legen Kooperationsmöglichkeiten fest

Bei einem Treffen in Daejeon, Südkorea, haben HLRS-Direktor Michael Resch und die Präsidentin des Institutes für Wissenschafts- und Technologieinformation Korea (KISTI), Choi Heeyoon, mehrere Möglichkeiten zur Zusammenarbeit gefunden. Ein besonderes Thema beinhaltet die Entwicklung neuer Werkzeuge für die Entwicklung und Herstellung digitaler Produkte. Durch die Kombination von HEMOS-Fluid (einer von KISTI entwickelten Softwareplattform für Flüssigkeitsanalyse) und COVISE (einer vom HLRS entwickelten Software-Umgebung für Simulationsnachbearbeitung und Visualisierung), sehen die Zentren Möglichkeiten zur Entwicklung eines neuen Ansatzes für die Visualisierung von Simulationsdaten. Die Zentren erwarten, dass die verstärkte Zusammenarbeit die Wettbewerbsfähigkeit von KMU verbessern könnten. (CW)

### Neues Buch: High-Performance Computing in Science and Engineering '17

Dieses Buch präsentiert den Stand der Technik in der Supercomputer-Simulation einschließlich der Erkenntnisse von Forschern, die 2017 Höchstleistungsrechner des HLRS verwendeten. Die Berichte decken alle Bereiche der Informatik und Technik ab, von der numerischen Strömungsmechanik (CFD) bis hin zur Computerphysik und von der Chemie bis zur Informatik, mit einem besonderen Augenmerk auf industriell relevante Anwendungen. Mit der Präsentation von Ergebnissen, die durch den HLRS-Supercomputer Hazel Hen erzielt wurden, umfasst diese Ausgabe die wichtigsten Methoden im Höchstleistungsrechnen und Anwendungen, die ein hohes Maß an dauerhafter hohen Leistung („Sustained Performance“) liefern. Wissenschaftler und Ingenieure werden Ausführungen finden, um die beste Performance für Produktionscodes, die von besonderem Interesse sind, zu erreichen.



Das HLRS blüht auf

### Das HLRS blüht auf

Der Frühling 2018 kündigte sich am HLRS bunter an, als in früheren Jahren. Im Rahmen des Projekts „Nachhaltigkeit in HPC-Zentren“ bepflanzten Mitarbeiter im Herbst 2017 das Außengelände des HLRS mit Blumenzwiebeln. Im April wurden dann die Ergebnisse ihrer Arbeit sichtbar, Krokusse und Narzissen durchbrachen die Erde. Das Projekt hatte das Ziel, die Biodiversität auf dem HLRS Betriebsgelände zu erhöhen und das Wohlbefinden der Mitarbeiter zu stärken. So trägt es zur Mission der Nachhaltigkeitsinitiative des HLRS bei, durch ein breites Aktivitätsspektrum die verschiedenen Dimensionen der Nachhaltigkeit zu adressieren: Umwelt, Wirtschaft und Gesellschaft. (CW)

Der zweite Industrial HPC User Round Table (iHURT), der vom HLRS und Sicos BW organisiert wurde, konzentrierte sich auf die vielfältigen Herausforderungen, denen sich industrielle HPC-Nutzer gegenübersehen, wie z.B. komplexe Programmiercodes, neue Technologien, Lizenzmodelle, Benutzerunterstützung oder die Organisation von Workflows. Unter den mehr als 30 Teilnehmern befanden sich Unternehmensvertreter aus vielfältigen Branchen, unter ihnen Pfänder (Zulieferer für die Automobilindustrie), Putzmeister (Zement-Pumpentechnik), Bosch, Porsche, Stihl und BASF. Vorträge von HPC-Nutzern stellten eine Vielzahl industrieller HPC-Anwenderszenarien in Bezug auf die Entwicklung neuer Brandschutzsysteme oder Zementpumpen sowie der Bedeutung von HPC in der chemischen Industrie vor. (CW)

### Zweiter Industrial HPC User Roundtable

Der zweite Industrial HPC User Round Table (iHURT), der vom HLRS und Sicos BW organisiert wurde, konzentrierte sich auf die vielfältigen Herausforderungen, denen sich industrielle HPC-Nutzer gegenübersehen, wie z.B. komplexe Programmiercodes, neue Technologien, Lizenzmodelle, Benutzerunterstützung oder die Organisation von Workflows. Unter den mehr als 30 Teilnehmern befanden sich Unternehmensvertreter aus



# EU fördert europäische Exzellenz-Zentren

Vier neue Exzellenz-Zentren werden gefördert, die gesellschaftlich und wirtschaftlich von höchster Bedeutung sind.

2018 wurden alle vier vom HLRS eingereichten Anträge für Centres of Excellence (CoE's) für innovative Anwendungen im Höchstleistungsrechnen (HPC) von der EU genehmigt. Damit ist das HLRS an vier von neun geförderten Exzellenz-Zentren in diesem Bereich beteiligt. Die Exzellenz-Zentren nahmen Ende 2018 ihre Arbeit für eine Laufzeit von drei Jahren auf und werden mit 7 Mio. Euro von der EU unterstützt.

Der Fokus auf industrielle Anwendungsfälle von EXCELLERAT entspricht dem Tätigkeitsschwerpunkt des HLRS und wird aufgrund dieser Expertise und Erfahrung vom HLRS federführend geleitet. EXCELLERAT macht komplexe Simulationstechnologie für den Maschinen- und Anlagenbau nutzbar. Damit kann die Industrie Entwicklung und Test von Produkten noch effizienter und sicherer gestalten. So wird ein wertvoller Beitrag für die Innovationskraft und Konkurrenzfähigkeit der Unternehmen geleistet.

POP 2 unterstützt Nutzer und Entwickler von Simulationsprogrammen bei der Parallelisierung und verbessert so die Leistung ihrer Codes. Damit können die Leistungsfähigkeit europäischer Supercomputer und die Produktivität für industrielle Anwender gesteigert werden.

Das CheeSE-Projekt nutzt HPC, um Naturkatastrophen zuverlässiger und schneller vorhersagen zu können und so die Reaktionszeit zu verkürzen.

HiDALGO verbindet Datenanalyse und Machine Learning mit HPC, um bessere Lösungsansätze für globale Fragestellungen von Auswirkungen gesellschaftlicher Systeme wie Finanzen, Gesundheitsversorgung, Migration und Energie zu ermöglichen. In diesem



Das HLRS nimmt an vier neuen CoEs der Europäischen Kommission teil.

einzigartigen Konsortium werden sich die Simulations- und Sozialwissenschaften zusammenschließen, wobei das HLRS die HPC-Expertise und seine Infrastruktur für Hochleistungsdatenanalyse bereitstellen wird.

Das HLRS gehört auch zum FocusCoE, einer Kollaboration, die alle neun CoEs vereint und sie bei ihren Aktivitäten unterstützt, um den Wissensaustausch zu erleichtern. Das HLRS wird dazu beitragen Schulungsaktivitäten zur Ermittlung und Lösung gemeinsamer Probleme der CoE's anzubieten. (LB)

# Die HLRS-Visualisierung unterstützt den Bau von Stuttgart 21

Mitarbeiter am HLRS entwickelten ein 3D-Modell einer höchstkomplexen Stütze, um die Planung seines Baus am neuen Stuttgarter Tiefbahnhof zu unterstützen.

2018 fing der Bau von den architektonisch beeindruckendsten Merkmalen des neuen Stuttgarter Hauptbahnhofs an. Die sogenannte „Kelchstützen“ sind massive, kelchförmige Stützen für Fenster, die das Tageslicht in die Tiefen des unterirdischen Bahnhofs einlassen werden. Mit einer Höhe von mehr als 12 Metern und einem Durchmesser von ungefähr 32 Metern versprechen die eleganten, kurvigen Formen aus Stahlbeton eindrucksvolle Sehenswürdigkeiten zu werden. Für die Bauingenieure des Projekts Stuttgart 21 stellte die komplexe Geometrie der Kelchstützen eine einzigartige Herausforderung dar. Obwohl CAD-Zeichnungen von den Baukörpern existierten, war es eine immense Herausforderung, die kurvigen Bauteile dreidimensional mit einer Vielzahl von stützenden Stahlstangen präzise vorzuformen, um später den Beton einzugießen. Die hohen Ansprüche der schwebenden Kelche erforderten neues Denken.

Um die Herstellung dieser Bauteile besser zu planen, beauftragte die deutsche Bahn das HLRS, eine

3D-Visualisierung von einer Kelchsäule zu entwickeln. Mit Hilfe von CAD- und Punktwolkendaten entwarfen die Mitarbeiter am HLRS ein interaktives Modell für die CAVE, ein dreidimensionaler Schauraum für die virtuelle Realität.

Stellvertreter der deutschen Bahn und der Ed. Züblin AG besuchten das HLRS, um gemeinsam über das virtuelle Modell eine Strategie auszuarbeiten, wie die Stütze am effizientesten und mit den höchsten strukturellen Ansprüchen hergestellt werden könnte. Nachdem die erste Stütze in Beton gegossen wurde, machte das HLRS-Team 3D Scans der baulichen Anlage, um überprüfen zu können, ob die Stütze exakt nach den Vorgaben gefertigt wurde.

Laut Uwe Wössner, Leiter der Visualisierungsabteilung am HLRS, war die Zusammenarbeit sehr produktiv: „Unsere Partner konnten sich die höchstkomplexe Geometrie viel besser vorstellen, Probleme in den originalen Plänen erkennen und effektive Lösungen schnell finden.“ (CW)



3D Visualisierung einer der Stuttgart 21 Kelchstützen in der HLRS CAVE.

# Ein neues Weiterbildungsangebot schult Ingenieure und Informatiker im Umgang mit Höchstleistungsrechnern

Mit einem Blended Learning-Ansatz erwerben IngenieurInnen und InformatikerInnen HPC-Kompetenzen.

Am 17. Juli absolvierten 14 Teilnehmer das erste, dreimonatige Modul „Paralleles Programmieren“ der Supercomputing-Akademie. Teilgenommen haben Ingenieure und Informatiker, die ihre Kenntnisse im Bereich des Höchstleistungsrechnens berufsbegleitend aufbauen oder weiterentwickeln wollten.

Die Lernenden haben über einen Zeitraum von 15 Wochen online mit interaktiven Lernskripten, Animationen, Programmierübungen und Erklärvideos gelernt und ihre Fragen mit den Dozentinnen und Dozenten in virtuellen Meetings diskutiert.

Im Zentrum stehen dabei Lerninhalte zur Code-Entwicklung auf parallelen Systemen für Anwendungsprogrammierer. Vermittelt werden Kenntnisse über die Architektur paralleler Systeme und Programmiermodelle wie MPI oder OpenMP, ebenso wie die Fähigkeit, Programmbibliotheken und zentrale Parallelisierungskonzepte effizient einzusetzen.

Die Supercomputing-Akademie wird vom Ministerium für Soziales und Integration Baden-Württemberg aus Mitteln des Europäischen Sozialfonds sowie vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst, Baden-Württemberg gefördert. Das HLRS baut in Kooperation mit den Universitäten Freiburg und Ulm sowie in Partnerschaft mit Sicos BW, die den Zugang zu Höchstleistungsrechnern für Kleine und Mittelständische Unternehmen (KMU) fördert, die Supercomputing-Akademie auf. Das Ziel ist es, ein kontinuierliches Weiterbildungsprogramm für HPC anzubieten, das für große als auch kleine Firmen attraktiv ist.

Im Rahmen des Weiterbildungsprogramms der Supercomputing-Akademie werden Module wie „Simulation“, „Visualisierung“, „Performance-Optimierung“, „Cluster, Cloud und HPC“, „Ökologie und Ökonomie von HPC“ und „Datenmanagement“ vorbereitet. (CW)



# Gesellschaftspolitischer Beirat verhilft HLRS zu mehr Weitblick

Der Beirat soll Potenziale aufzeigen, in denen Computersimulation einen gesellschaftspolitischen Beitrag leisten kann.



Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) verfügt über einen der leistungsstärksten Supercomputer Europas. Doch auch, wenn jeder Einzelne im Alltag indirekt von Simulationen profitiert, stehen das wissenschaftliche oder wirtschaftliche Interesse meist im Vordergrund. Hinzu kommt, dass dieses Wissen in der Regel einer Expertengruppe vorbehalten ist.

Das kann zu einem eingeschränkten Blickwinkel führen: „Der Mehrwert von Computersimulationen ist unbestritten. Darum dürfen sie kein Privileg des Elfenbeinturms sein“, lautet die Meinung von Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS. Aus diesem Grund hat er gemeinsam mit Andreas Kaminski, Leiter der Abteilung Philosophie der Computersimulation am HLRS, den Gesellschaftspolitischen Beirat einberufen, der seine Arbeit am 10. April startet. Reschs Vision lautet: „Wir wollen uns gemeinsam dafür einsetzen, dass in Zukunft mehr gesellschaftliche Gruppen von dem Einsatz von Simulationen profitieren.“

Die 13 Beiratsmitglieder kommen aus unterschiedlichen gesellschaftlichen Bereichen und sichern so die erforderliche Vielfalt gesellschaftlich relevanter Themen. Dabei erkennen viele Mitglieder in Simulationen das Potenzial, komplexe Zusammenhänge verständlich zu gestalten: „Simulation kann Entscheidungsträgern und betroffenen Menschen komplexe gesellschaftliche Phänomene zugänglicher machen“, so Beiratsvorsitzender Prof. Ortwin Renn, Wissenschaftlicher Direktor am Institute for Advanced Sustainability Studies in Potsdam. Er gibt zu bedenken: „Vor dem Hintergrund dieses Fortschritts muss aber sichergestellt sein, dass ethische Werte nicht verletzt und gesellschaftliche Präferenzen ausreichend berücksichtigt werden.“ Im Fokus der Diskussion am HLRS standen Themen wie Stadtentwicklung und die Entstehung von sozialer Ungleichheit und Populismus. (LB)

# SimTech wird zum Nationalen Exzellenzcluster ernannt

Der interdisziplinäre Forschungsverbund der Universität Stuttgart mit dem Schwerpunkt auf datenintegrierte Simulationstechnologie wurde im Rahmen der Exzellenzstrategie zur Stärkung der Spitzenforschung in Deutschland für die kommenden sieben Jahre zur Förderung ausgewählt.

Dies gab die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Anschluss an die Sitzung der Exzellenzkommission am 27. September 2018 in Bonn bekannt.

Seit 2007 hat das Exzellenzcluster „Simulation Technology“ (SimTech) an der Universität Stuttgart die Simulationwissenschaften hinsichtlich Modellen, Methoden und Computing-Aspekten aus Ingenieurperspektive in großer Breite und Tiefe vorangetrieben und diese mit seinem interdisziplinären und methodischen Profil als international sichtbaren Forschungsschwerpunkt etabliert. Dessen Forschungsergebnisse und -erfolge kann die Universität Stuttgart nun in eine neue Richtung weiterentwickeln.

Die Ausrichtung des Exzellenzclusters auf datenintegrierte Simulationwissenschaft steht für eine Vielzahl zukunftsweisender Forschungsfragen. Die vielen Daten, die heute aus Sensormessungen, Datenerhebungen, Experimenten und Simulationen zur Verfügung stehen, bieten neue und immer bedeutender werdende Möglichkeiten, Erkenntnisse zu gewinnen.

High-Performance Computing ermöglicht, dass simulations- und datengetriebene Ansätze, die Anwendbarkeit und Genauigkeit von Simulationen sowie Verlässlichkeit der darauf basierenden Entscheidungen auf eine neue Stufe gehoben werden. Aus diesem Grund ist das HLRS, mit Direktor Michael Resch als Forschungsleiter für Höchstleistungsrechner, ein wichtiger Partner im SimTech-Cluster.

„Das HLRS ist mit SimTech gut vernetzt und wir freuen uns sehr zu sehen, dass es wieder als nationales

Exzellenzcluster anerkannt wird“, so Resch. „Unsere Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern wird nicht nur neue vielversprechende (spannende) Entdeckungen ermöglichen, sondern auch das HLRS befähigen, seine Kompetenzen weiterzuentwickeln.“ (CW)



Die Perfusions-MRT ist eine vielversprechende, ergänzende Methode für die Therapie von Multipler Sklerose. In einem Projekt führen SimTech-Forscher detaillierte Simulationen in kleinem Maßstab durch, wie sich MR-Kontrastmittel im Gehirn ausbreiten. Die Methode könnte die Analyse von Bildern von MS-Läsionen verbessern.

# Media Solution Center fördert Innovationen für Film und Digitale Kunst

Das neu gegründete Media Solution Center Baden-Württemberg macht Höchstleistungsrechnen (HPC) und Computersimulation für die Medienproduktion nutzbar.

Im Oktober haben das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), das Zentrum für Kunst und Medientechnologie Karlsruhe (ZKM) und die Hochschule der Medien Stuttgart (HdM) das Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC) gegründet. Mithilfe des Vereins sollen Innovationen an der Schnittstelle von Kunst und Computertechnologie gefördert werden. Aufgabe des MSC ist es, technische Herausforderungen in der Medienproduktion zu identifizieren, um die Entwicklung von HPC- und Simulationstechnologien zu beschleunigen, die diese adressieren. Um dieses Ziel zu erreichen, wird der MSC in Verbundprojekten an Lösungsansätzen für die Probleme von Medienproduzenten forschen. Der Verein wird auch den Austausch der daraus entstehenden Technologien und des Know-hows ermöglichen und für die Medienbranche relevante Veranstaltungen organisieren. Zu den wichtigsten Anwendungsbereichen, mit denen sich der MSC beschäftigen wird, gehören Animation, Simulation und Visual Effects (VFX).

In Abstimmung mit der HdM wird das HLRS auch wissenschaftliche Weiterbildungsprogramme organisieren, die Menschen aus der Medienbranche in der effektiven Nutzung von High-Performance Computing schulen. Dazu gehört die Verwendung und Entwicklung von Software für HPC-Umgebungen.

Der MSC begrüßt die Mitgliedschaft anderer Personen und Unternehmen der Medienbranche – darunter Animationsstudios, Visual-Effects-Spezialisten und Kunstorganisationen – sowie von Leitern wissenschaftlich-technischer Forschungsgruppen in Baden-Württemberg, deren Arbeit für die Medienproduktion relevant ist. Letztendlich zielt das MSC darauf ab, den vorwettbewerblichen Austausch von Wissen und Informationen zwischen allen teilnehmenden Organisationen zu stärken. Vorsitzender des Vereins ist Prof. Dr. Bernd Eberhardt von der Hochschule der Medien. HLRS-Direktor Prof. Dr. Michael Resch ist stellvertretender Vorsitzender. (CW)



Das HLRS wurde 2017 mit einem HPC Innovation Award für seine Arbeit mit M.A.R.K. 13 und Studio 100 Media ausgezeichnet. Durch die Zusammenarbeit wurde die Produktion des Animationsfilms „Die Biene Maja“ mithilfe von High-Performance Computing beschleunigt.

# EXCELLERAT – Neue HPC-Verfahren für Ingenieure in der Industrie

Ein neues Exzellenzzentrum der Europäischen Union, das vom HLRS koordiniert wird, unterstützt industrielle HPC-Anwender bei der Einführung leistungsfähiger Hardware- und Softwaretechnologien.



Das HLRS hat mit EXCELLERAT ein neues Europäisches Kompetenzzentrum (CoE) für technische Anwendungen gegründet. Mit rund acht Millionen Euro wird das Zentrum, das aus 13 Partnern und sieben europäischen Ländern besteht, von der EU unterstützt. Seine Aufgabe ist es, den Technologietransfer von modernsten HPC-Entwicklungen in den Ingenieurbereich zu beschleunigen. EXCELLERAT wird die Weiterentwicklung wichtiger Codes für High-Tech Engineering vorantreiben, ihre Skalierbarkeit auch für große Rechenarchitekturen maximieren und den Technologietransfer in das industrielle Umfeld unterstützen.

Diese Aktivitäten werden Ingenieure über den gesamten Lebenszyklus der HPC-Anwendung, einschließlich Daten-Preprocessing, Code-Optimierung, Durchführung und Postprocessing unterstützen. Darüber hinaus

wird EXCELLERAT Schulungen für die Zielgruppe anbieten, damit die Vorteile der neuesten HPC-Technologien effektiv genutzt werden können.

EXCELLERAT wird im Konsortium mit Partnern zusammenarbeiten, die wichtige Codes für die akademische Anwendung in technischen Bereichen wie Luftfahrt, Automobilindustrie, Verbrennung und Flüssigkeitsdynamik entwickeln. Zur Integration von Codes in reale industrielle Anwendungen werden diese Partner eng mit den Endnutzern außerhalb des Konsortiums zusammenarbeiten. Dies wird zu schnellen Feedback-Zeiten innerhalb des Lebenszyklus der HPC-Anwendung, von der Beratung über Methodik und Code-Implementierung bis hin zur Datenübertragung und Code-Optimierung führen. So werden Endnutzer von den Projektergebnissen aus erster Hand profitieren. (LB)

# Zum Aufbau einer nachhaltigen HPC-Infrastruktur

Auf einem zweitägigen Treffen diskutieren IT- und Infrastruktur-Experten, wie die Planung von Rechenzentren den wachsenden Anforderungen an Höchstleistungsrechnen auf umweltfreundliche Weise gerecht werden kann.



Mit dem Ziel, immer leistungsfähigere Supercomputer zu erhalten, entwickeln sich die Technologien für das High-Performance Computing (HPC) rasant weiter. Obwohl dieses Wachstum gut für Wissenschaft und Technologie ist, führt es auch zu höheren Anforderungen an die Infrastruktur von Rechenzentren: Räume, in denen größere Maschinen untergebracht werden können, Kühlsysteme, die mit der erhöhten Wärmeproduktion umgehen können und die Energieversorgung, um alles in Gang zu halten.

Wie kann dieser zunehmende Bedarf an Ressourcen nachhaltig verwaltet werden? Im Oktober 2018 trafen sich IT-Spezialisten und Experten für Forschungsinfrastruktur aus der deutschsprachigen HPC-Community am HLRS, um ganzheitliche Strategien zur Bewältigung dieser Herausforderungen zu diskutieren. Die

Veranstaltung zeigte eine breite Palette von Ideen für eine nachhaltige Computerarchitektur auf und hob gleichzeitig einige wichtige Herausforderungen hervor, die angesprochen werden sollten.

Das Ziel jedes Rechenzentrums ist es, bei der Eröffnung die neueste Technologie installieren zu lassen. Allerdings kann die Errichtung einer Ziegel- und Mörtelkonstruktion 5-7 Jahre dauern, sodass die besten Technologien häufig erst nach Projektbeginn verfügbar sind. In Anbetracht der Komplexität des Projektes wurde betont, dass nachhaltiges Bauen von Supercomputing-Zentren nur möglich ist, wenn sich IT-Experten, Architekten und Planer, lokale Regierungsbehörden und Geldgeber von Beginn an mit dem Thema befassen. (CW)

# Netzwerk der deutschen Autoindustrie

**Der Wettbewerb in der Automobilindustrie ist sehr hart, aber das Automotive Simulation Center Stuttgart hat gezeigt, dass eine Kooperation wichtige Vorteile bieten kann.**

Seit vielen Jahren benutzt Porsche Simulationsressourcen am HLRS, um bessere Fahrzeuge zu entwickeln. Allerdings wurde in den frühen 2000er Jahren klar, dass existierende kommerzielle Softwarepakete mit der sich ständig verdoppelnden Core-Leistung der Hardware nicht mehr Schritt halten konnten. Um die Entwicklung von effizienterer und effektiverer Software für die Simulation zu beschleunigen, schloss sich Porsche im Jahr 2008 mit dem HLRS, Daimler, Opel und anderen Unternehmen – auch mit Unterstützung des Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg – zusammen, um das Automotive Simulation Center Stuttgart (asc(s) zu gründen.

Seitdem hat das asc(s ein Netzwerk von großen und kleinen Unternehmen innerhalb der Automobilindustrie aufgebaut, wobei das HLRS eine zentrale Rolle einnimmt. Kürzlich haben wir mit dem Geschäftsführer Alexander F. Walser über die Tätigkeiten des Zentrums gesprochen, über die Rolle des HLRS und warum die Simulation für die Autobranche immer wichtiger wird.

**? Wie beschreiben Sie das asc(s)?**

**▶** Das asc(s ist eine Nonprofit-Vereinigung, die Automobilhersteller, Softwarehäuser, Hardwarehersteller, Engineering-Dienstleister, Start-ups und wissenschaftliche Einrichtungen zusammen an einen Tisch bringt, um die zukünftigen Anforderungen bezüglich der virtuellen Fahrzeugentwicklung abzuleiten und zu steuern.

Wie ein OEM (Original Equipment Manufacturer, Originalausrüstungshersteller) einen Schraubendreher einkaufen kann, um ein Fahrzeug zu bauen, so versuchen wir die virtuelle Automobilentwicklung zu unterstützen, damit die Hersteller die richtigen Simulationsmethoden zur Hand haben. Um dies zu ermöglichen, bündelt das asc(s die kritische Masse an Interessensgruppen, um Projekte starten zu können. Das kann die kritische Masse anhand der Expertise oder der Finanzierung sein. Es ist uns auch ein wichtiges Anliegen, kleinere Unternehmen (KMUs) und wissenschaftliche Institute mit abzuholen und zu integrieren. Manchmal passiert es, dass ein KMU ein sehr innovatives Softwarepaket entwickelt, aber wenn die Schnittstellen nicht richtig geschaffen werden oder der Workflow nicht passt, wird es industriell nicht eingesetzt. Wenn OEMs und KMUs zusammenarbeiten, reduziert man das Risiko, etwas in die falsche Richtung zu entwickeln. Gleichzeitig bringt man sehr früh den industriellen Bedarf mit ein und ermöglicht allgemeingültige Lösungen, die den Bedarfen unterschiedlicher OEMs gleichzeitig entsprechen.

Vor 10 Jahren war die Grundidee des asc(s sehr innovativ. Heute ist sie absolut zeitgemäß und wird morgen sicherlich unabdingbar sein, um Innovation vorantreiben zu können.

**? Welche Rolle spielt HLRS in diesem Netzwerk?**

**▶** High-Performance Computing ist ein Schwerpunkt des asc(s, was sicherlich auch für unsere

Unternehmensorganisation das Alleinstellungsmerkmal ist im Vergleich zu anderen Interessensverbänden in der Automobilindustrie. Wir können nur durch die Kooperation mit dem HLRS einen starken Fokus auf HPC behalten.

Die Kooperation mit dem HLRS ermöglicht es, dass wir immer auf der neuesten Hardwarearchitektur arbeiten. Die Architektur am HLRS ist durch seine häufigen Updates der Industrie einen Schritt voraus, weil die Taktzeiten bei der Industrie länger und die Cluster kleiner sind. Mit den Ressourcen am HLRS können wir frühzeitig zeigen, dass neue Methoden auf zukünftigen Cluster-Systemen funktionieren werden.

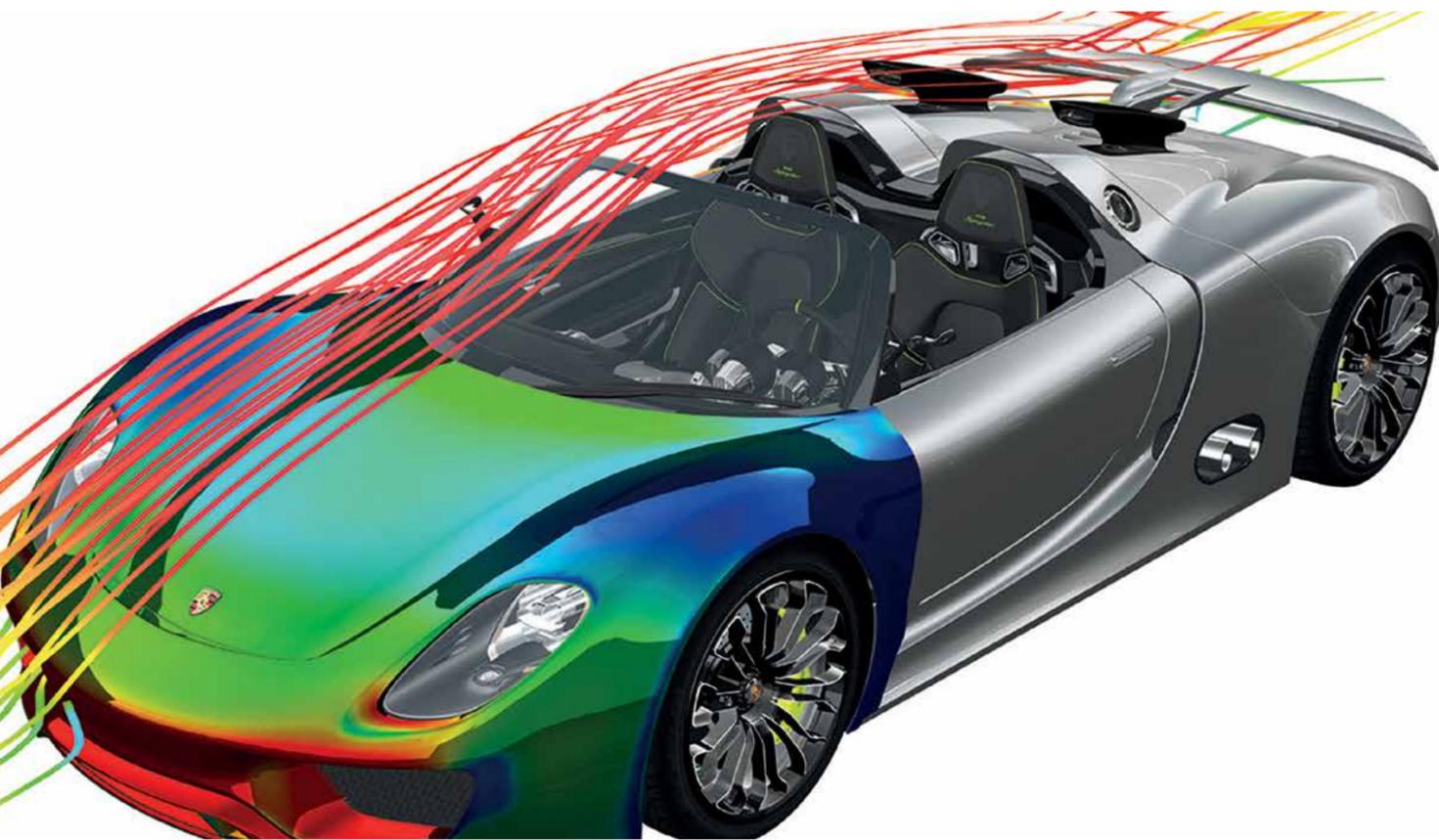
Aus Projektvorhaben mit dem HLRS erfahren wir auch die möglichen Problemstellen. Die Projekte sind sehr unterschiedlich aufgrund der Anzahl von Cores, die in einem Projekt verwendet werden, oder der Parallelisierung, die notwendig ist. Durch die Zusammenarbeit mit dem HLRS lernen wir, wie wir mit spezifischen Problemstellungen besser umgehen können.

Noch eine sehr wichtige Frage für OEMs und Kleinunternehmen ist, wie in einem modernen Workflow die Workstation unter dem Schreibtisch mit den Cluster-Systemen am HLRS gekoppelt werden können. Wir haben bereits vielfältige Workflows aufgebaut, in welchen unterschiedliche Prozesse zwischen den klassischen Workstations und dem HLRS automatisiert gekoppelt wurden. In der Praxis müssen Ingenieure nicht alles auf die Hazel Hen schieben, sondern sie können diese sehr performante Rechenunit in ihre Workflows integrieren.

**? Was sind die wichtigsten Themen in der Simulation für die Zukunft der Fahrzeugentwicklung?**

**▶** Vor 10 Jahren hat keiner über autonomes Fahren gesprochen. Elektromobilität war schon so ein bisschen in den Köpfen, aber nicht so präsent wie heute. Jetzt muss alles viel, viel schneller gehen. Der virtuelle Fahrversuch ist z.B. ein Thema, das immer wichtiger wird. Unzählige Testszenarien gilt es hierbei zu bearbeiten. Dabei eröffnet sich schnell die Fragestellung, wie wir HPC und Fahrsimulation koppeln können. Solche Themen müssen mittelfristig sicherlich auf einem Supercomputer bearbeitet werden.





Technologische Trends wie künstliche Intelligenz gewinnen zudem immer mehr an Bedeutung. Das resultiert nicht nur darin, dass Fahrzeugsysteme neueste KI-Technologien nutzen, sondern auch die Frage, wie können wir Ingenieure mit KI-Technologien im virtuellen Entwicklungsprozess unterstützen und entlasten? Wie können wir KI einsetzen, um Simulationsmodelle schneller zu erstellen? Wie können wir aus unserer großen Menge von Simulationsergebnissen mehr Erkenntnisse herausziehen?

Aufgrund dieser neuen Trends ist die horizontale Vernetzung von Automobilherstellern, die das asc(s) fördert, sehr wichtig, weil neue Key-Player auf den Markt kommen, die noch nicht klassisch in der Zulieferkette integriert sind.

**? Welche Pläne hat asc(s) um die Automobilindustrie besser auf die Zukunft der Simulation vorzubereiten?**

**▶ In der Automobilindustrie gewinnt die Simulation immer mehr an Bedeutung. Deswegen ist jetzt auch**

eine wichtige Frage, wie sieht die Qualifikation der Simulationsingenieure oder generell der Ingenieure in Zukunft aus? Am asc(s) fragen wir uns aktuell, wie wir unsere Mitglieder unterstützen können, indem wir sicherstellen, dass Universitätsabsolventen die entsprechenden Grundkenntnisse mitbringen.

Der Bedarf an Simulationsexperten steigt stetig an. Wir können durch die Förderung von Nachwuchskräften nicht nur für die Industrie einen Vorteil bieten, sondern auch den Forschungsstandort Baden-Württemberg stärken, indem wir junge Talente in unsere Verbundprojekte direkt integrieren. Wir erwarten, dass die Kooperation in diesen Punkten in Zukunft noch stärker stattfinden wird. *(CW)*

## Dank Daten entspannt mit der S-Bahn durch Stuttgart?

**Niklas Knöll ist Stipendiat des Bildungsprogramms „Simulierte Welten“ am HLRS. Ausgerüstet mit maschinellen Lernverfahren sagt der Gymnasiast dem Stuttgarter S-Bahnchaos den Kampf an.**

Auch, wenn die Apps von Deutsche Bahn, VVS und SSB Verspätungen anzeigen, haben sie einen Nachteil: es handelt sich um Aktualisierungen in Echtzeit. Doch wäre es nicht schön, von vornherein zu wissen, ob noch genug Zeit für eine Butterbrezel beim Bäcker ist? Niklas Knöll ist Stuttgarter und mit dem Problem vertraut. Der Schüler war 2018 einer von acht Stipendiaten von Simulierte Welten, einer Initiative, die inklusive des

Stipendiaten ermutigt, sich auch mit der Analyse großer Datensätze auseinanderzusetzen. Auf einem frei zugänglichen Portal stellt die Deutsche Bahn Tabellen zur Verfügung, die für einen Zeitraum von zwei Monaten die planmäßigen und tatsächlichen Abfahrtszeiten aller S-Bahnen an allen Stationen in Stuttgart aufführen, und die Niklas für seine Analyse nutzte. Am HLRS lernte er dafür den Umgang mit Python und Apache



Stipendiums in Höhe von 1.000€ pro Schülerin und Schüler vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert wird. Innerhalb eines Schuljahres bearbeiten die Schülerinnen und Schüler aus der Region Stuttgart ein wissenschaftliches Projekt rund um das Thema Simulation und Modellierung und werden dabei vom HLRS betreut und unterstützt. Das Ziel: Den wissenschaftlichen Nachwuchs für die Digitalisierung fit zu machen. Weil das Thema Big Data immer mehr an Bedeutung gewinnt, wurden die

Spark – zwei Programmierumgebungen, die häufig in Verbindung mit der Analyse großer Datensätze genutzt werden.

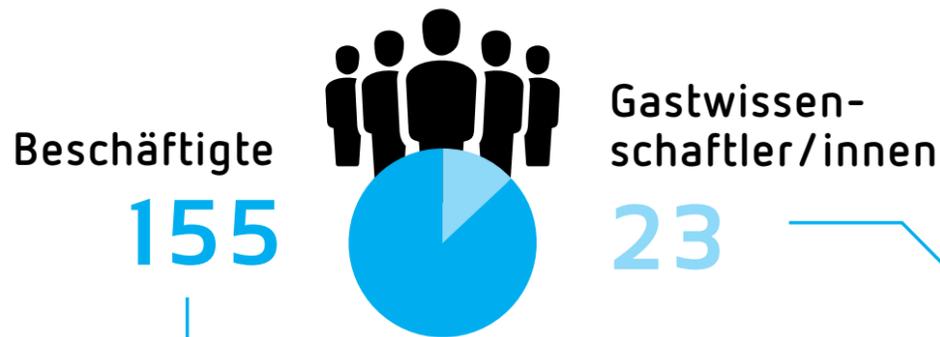
Die Modelle von Niklas wurden mithilfe maschineller Lernverfahren trainiert, um S-Bahn-Verspätungen auf die Minute genau vorhersagen zu können. Durch diese Vorgehensweise kann in 8 von 10 Fällen eindeutig vorhergesagt werden, ob ein Zug erst mit mindestens drei Minuten Verspätung abfahren wird – und Niklas könnte sich seinen 400 Meter Sprint gelegentlich sparen. *(LB)*

# HLRS in Zahlen

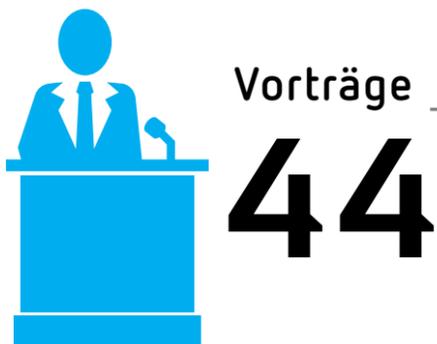
## Systemnutzung



## Aus-und Weiterbildung



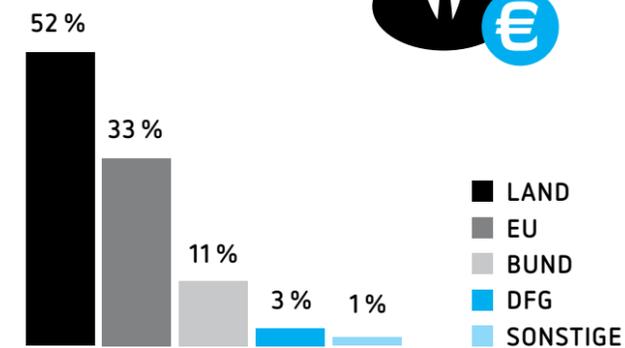
# HLRS



## Publikationen



## Drittmittel



# Leistungssteigerung der HPC-Systeme durch erweiterten Support

**Die Bereitstellung personalisierter Anleitungen für HPC-Benutzer führt zu schnelleren Codes und einer effizienteren Nutzung von Rechenressourcen.**

Seit 2007 hat das Gauss Center for Supercomputing (GCS) – das Netzwerk von Deutschlands nationalen Supercomputing-Zentren – die Installation und den Betrieb von Weltklasse-Systemen für Höchstleistungsrechner koordiniert. 2018 expandierte es in eine wichtige neue Richtung, der Implementierung weiterer Supportdienstleistungen, die es ermöglichen, die Nutzung der Systeme effizienter zu gestalten.

„Jedes Mal, wenn man einzelnen Benutzern hilft, die Maschine effizienter zu nutzen, verbessert man die Ressourcen des Computers als Ganzes“, sagt Thomas Bönisch, Leiter des HLRS User Management Teams. „Durch die Optimierung von Anwendungen für die Computerhardware, auf denen sie laufen, können wir mehr Ergebnisse aus den gleichen Rechnerressourcen herausholen.“

Der erweiterte Support umfasst mehr als nur die Unterstützung für das Upload von Codes auf HPC-Systeme oder den Transfer von Daten. Stattdessen erhalten Wissenschaftler praktische und persönliche Beratung zur Verbesserung der Leistung ihrer Codes auf HPC-Ressourcen. Dies geschieht auf verschiedenen Ebenen: Auswahl und Optimierung des besten Algorithmus für ein bestimmtes Problem und einem bestimmten Höchstleistungsrechner, Verbesserung der Skalierung parallelen Rechnens, Strukturierung des Prozesses zur Ausnutzung der einzigartigen Eigenschaften der spezifischen Prozessoren und die Beseitigung von Engpässen beim Transfer von großen Datenmengen.

Während einige Forscher ihre eigenen Tools zur Analyse von wissenschaftlichen Problemen entwickeln,

verlassen sich andere auf die herkömmlichen Codes oder Open-Source-Software. In beiden Fällen können sie von der Hilfe von HPC-Experten bei der Auswahl der besten Werkzeuge profitieren und ihre Leistung optimieren. Dies ermöglicht es neue, rechenintensive wissenschaftliche Fragen zuzulassen.

Seit 2016 veranstaltet das HLRS einen halbjährlichen Optimierungsworkshop, bei dem Benutzer des Hazel Hen sich mit Supportmitarbeitern austauschen können, um die Leistung ihrer Codes zu verbessern. Dieser Austausch ist sehr produktiv und führt zu Verbesserungen der Laufzeit und der Datenübertragungsgeschwindigkeit, in einigen Fällen können Codes sogar doppelt so schnell oder noch schneller laufen.

Mit Zuschüssen vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, hat das HLRS 2018 neue Mitarbeiter eingestellt, um sich intensiv der Unterstützung bestimmter Nutzergruppen zu widmen. So kann sich eine engere Beziehung zwischen den Forschern und Experten für Höchstleistungsrechner entwickeln, um gemeinsam die Leistung kontinuierlich zu steigern. Diese verbesserte Supportinitiative hat es auch ermöglicht, die Koordination der Support-Aktivitäten zwischen dem HLRS und seinen GCS-Partnern, dem Jülich Supercomputing Centre und dem Leibniz Supercomputing Centre, zu optimieren. Vertreter der drei Zentren treffen sich regelmäßig, um sich über die Optimierungsmöglichkeiten bezüglich der Rechnerleistungen auszutauschen. So verspricht sich die Initiative, die Performanz von Nutzercodes in der gesamten nationalen Supercomputing-Infrastruktur zu erhöhen. (CW)



# EuxDat: Big Data für die Landwirtschaft

Höchstleistungsdatenanalyse bietet enormes Potenzial zur Verbesserung der Effizienz in der Lebensmittelproduktion.

In der Vergangenheit haben Landwirte Bücher zu Rate gezogen, um zu schauen, was wann anzubauen ist und wann geerntet wird. Allerdings hat das Internet of Things auch in die Landwirtschaft Einzug gehalten. Hochauflösende Wetter- und Klimamodelle, sowie Sensoren zum Messen der Bodenfeuchtigkeit und der Zusammensetzung bieten zum Beispiel reichhaltige Datenquellen, die die Landwirtschaft produktiver machen könnten. Die Herausforderung liegt nun darin, Systeme für die Integration, Interpretation und Verarbeitung der Informationen zu entwickeln.

Im Rahmen eines interdisziplinären, von der Europäischen Union finanzierten Innovationsprojekts EUXDAT (European e-Infrastructure for Extreme Data Analytics in Sustainable Development), entwickeln Forscher am HLRS eine Software-Plattform, die hierzu benötigt wird. Das Ziel ist es, ein Produkt für die Cloud zu erstellen, um große Datenanalysen für jedermann in der Landwirtschaft zugänglich zu machen. Wird eine Analyse mit

extrem großen Datensätzen benötigt, können Benutzer bei Bedarf auf Höchstleistungsrechner-Ressourcen des HLRS über das Web zugreifen. Der Zugang zu diesen Daten könnte es den Landwirten zum Beispiel ermöglichen, den optimalen Düngezeitpunkt ihrer Pflanzen für eine optimale Ernte zu ermitteln.

Aufgrund der Expertise im Bereich Höchstleistungsrechnen, Cloud Computing und Big Data-Analyse wurde das HLRS von Atos, einem europäischen IT-Dienstleister, zur Projektteilnahme eingeladen. Michael Gienger, der die Cloud Computing-Forschungsgruppe am HLRS leitet: „Für uns ist dies das beste aller möglichen Projekte, weil es viele Schwerpunkte des HLRS verbindet und die Möglichkeit bietet, neue Ansätze für die Integration von Cloud- und HPC-Technologien in einem Bereich, der wirklich davon profitieren kann, zu testen.“ (CW)

Weitere Informationen finden Sie unter [www.euxdat.eu](http://www.euxdat.eu)

# Doktoranden 2018

Drei Studenten haben ihre Doktorarbeit 2018 erfolgreich am HLRS abgeschlossen.



**Björn Bliese**

**An Augmented Reality-System Suitable for Geometric Analysis in Product Development**

Augmented Reality bietet die Möglichkeit, geometrische Analysen zwischen physischen und virtuellen Modellen in der Produktentwicklung und in der Produktplanung durchzuführen, obwohl sie heute selten eingesetzt wird. Blieses Dissertation definiert grundlegende Anforderungen an ein verwendbares AR-System für geometrische Analysen und verbessert die gewählten Systemkomponenten. Es bietet auch eine prozessgesteuerte Benutzeroberfläche, um einen Benutzer durch eine AR-gestützte Untersuchung zu führen.



**Marius Feilhauer**

**Simulation-Supported Safeguarding of Driver Assistance Systems**

Um zu gewährleisten, dass ein autonomes Fahrzeug sicher fährt, bedarf es theoretisch ein Programm, das alle möglichen Situationen erkennt, einschließlich verschiedener Verkehrs- und Lichtbedingungen, dies ist jedoch faktisch unmöglich. Feilhauer schlägt einen erweiterbaren Katalog von Verkehrsszenarien vor, der mit den gelernten Lektionen, die auf realen oder virtuellen Fahrtestdaten beruhen, wächst. Fahrscenarien könnten in virtuellen Testfahrten auf Computern untersucht und die Ergebnisse in den Katalog zurückgespielt werden. Eine solche Ressource würde sich vorteilhaft auf das maschinelle Lernen beim autonomen Fahren auswirken.



**Matthias Nachtmann**

**Model-Centric Task Debugging at Scale**

Mit der zunehmenden Komplexität der HPC-Hardware und -Software besteht ein Bedarf an Tools, die Informatiker und Ingenieure effizient unterstützen sowie um ihre Berechnungscodes systemunabhängig zu optimieren. Darüber hinaus sind Forscher daran interessiert, ihre Anwendungen innerhalb ihrer jeweiligen Programmiermodelle zu debuggen. In seiner Doktorarbeit, konzentrierte sich Nachtmann auf die Weiterentwicklung dieses „modellzentrierten“ Debugging-Ansatzes und war federführend an der Neuentwicklung des Back-Ends des vom HLRS entwickelten TEMANEJO, eines grafischen Debugging-Tools, beteiligt.

# Einblicke in die „Black Box“ der Simulation

**Gastwissenschaftler in der Abteilung Philosophie der Computersimulation arbeiten an einem besseren Verständnis von rechnergestützter Forschung und ihren Grenzen.**

Simulationen und andere Anwendungen von Höchstleistungsrechnen sind unverzichtbare Forschungsinstrumente, sowohl für die Grundlagenforschung, als auch in den angewandten Wissenschaften. Zu den positiven Beiträgen des Höchstleistungsrechnens gehört ein besseres Verständnis unserer Welt und die Unterstützung bei der Entwicklung neuer Technologien. Mit der wachsenden Rolle der Computersimulation stellt sich jedoch die Frage, wie sie Wissenschaft, Technologie, Politik und Gesellschaft verändert und wie darauf reagiert werden sollte.

Durch seine Abteilung Philosophie der Computersimulation treibt das HLRS solche Diskussionen schon seit vielen Jahren voran. In 2018 konnte das HLRS zwei Gastwissenschaftler willkommen heißen – PD Dr. Johannes Lenhard, (Philosophie-Fakultät, Universität Bielefeld) und Prof. Dr. Nicole J. Saam (Institut für Soziologie, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg). Ihre Forschung beleuchtet einige aktuelle Schlüsselfragen über die Philosophie der Simulation, und ihre Erfahrungen am HLRS zeigen, wie wertvoll multidisziplinärer Dialog sein kann.

## Simulation gestern und heute

Johannes Lenhard beschäftigt sich seit 2001 mit den philosophischen und historischen Fragestellungen, die der zunehmende Einsatz von Computern in vielen Wissenschaftsdisziplinen aufwirft. „Eine wichtige Fragestellung für Wissenschaftsphilosophen ist, was es für einen Wissenschaftler bedeutet, etwas zu wissen“, so Lenhard. „Sind die Erkenntnisse, die sich aus

Computer-Simulationen ergeben, anders als jene, die mit älteren Methoden generiert werden? Als Historiker stellt sich außerdem die Frage, wie sich die Bedingungen über die Jahre entwickelt haben, unter denen Computersimulationen verwendet werden. So ist es möglich, ein besseres Verständnis davon zu entwickeln, wie Simulation heute eingesetzt wird.“ In seiner Forschung untersucht Lenhard, durch welche Eigenschaften sich Computersimulationen von heute von früheren mathematischen Modellen unterscheiden.

Ein Beispiel ist die Veränderung von Experimenten durch den Einsatz von Simulationen. Mithilfe von Supercomputern können Wissenschaftler die Parameter mathematischer Modelle leicht so anpassen, dass sie sich an die beobachteten Daten annähern. „Deep Learning“ Algorithmen sind vielleicht die Paradebeispiele dieses Ansatzes; die Anpassung von Parametern ermöglicht es, nahezu jedes Verhalten zu modellieren. Auch, wenn diese Möglichkeit nützlich sein kann, fragt sich Lenhard: Ist das noch Wissenschaft?

„Die Idee, dass allgemeine Gesetze Ordnung im Chaos offenbaren können, ist historisch mit der Idee verbunden, dass diese Gesetze mathematisch formuliert werden können. Doch neue Computer-Modellierungsverfahren haben nichts damit zu tun, solche allgemeingültigen Gesetze zu finden“, gibt Lenhard zu bedenken. „Heute hoffen wir, die Dinge auf vorhersehbarer Weise zu beschreiben und zu steuern, auch wenn wir kein Gesetz dafür haben.“ In diesem Sinne unterscheidet sich die Computersimulation von früheren wissenschaftlichen Ansätzen, bietet jedoch völlig neue Optionen.

## Die Opazität der Simulation

Eine interessante philosophische Fragestellung zur Computersimulation ist ein Resultat dessen, was Philosophen als „Opazität“ bezeichnen. Computersimulationen führen oft zu unerwarteten Ergebnissen und häufig können die Gründe hierfür nicht gefunden werden, da es unmöglich ist, zu beobachten, wie ein Algorithmus funktioniert. „Das kehrt das Konzept der mathematischen Modellierung um, weil wir bisher geglaubt haben, dass sich mit mathematischen Modellen die Ursachen eines Verhaltens klar erkennen lassen müssten“, schließt Lenhard.

Während ihrer Gastprofessur am HLRS hat sich Nicole J. Saam mit der Entwicklung einer systematischen Methode zur Definition, Kategorisierung und Messung dieser Opazität beschäftigt.

Ein solches Modell könnte Faktoren wie Instabilitäten im numerischen Modell, den Einsatz von Verfahren der Modellvereinfachung zur Reduktion der notwendigen Rechenoperationen, sowie die Anzahl der verschiedenen an der Modellentwicklung beteiligten Teams, die jeweils nur einen kleinen Teil des Projekts verstehen, adressieren. Diese Kriterien berücksichtigen, dass Opazität in Computersimulationen technische, mathematische und soziale Ursprünge haben kann.

Basierend auf der Definition der Dimensionen von Opazität hat Saam einen wissenschaftlichen Rahmen und einen Fragebogen entwickelt. Ihr Team hat damit begonnen, Gruppen von Wissenschaftlern, die am HLRS Simulationen durchführen, zu befragen, um die vielen verschiedenen Dimensionen von Opazität besser zu verstehen.

„Für einen Principal Investigator kann sich Opazität ganz anders darstellen, als für einen Hochschulabsolventen“,



Nicole J. Saam



Johannes Lenhard

betont Saam. „Aufgrund ihrer unterschiedlichen Erfahrung kann ihre Wahrnehmung von Opazität sehr unterschiedlich sein. Ist Opazität eine objektive Eigenschaft oder ist es eine subjektive Erfahrung, die sich von Individuum zu Individuum unterscheidet? Nach der aktuellen Definition ist Opazität ein relationales Konzept. Wir würden sehr gerne einen Weg finden, dieses zu messen.“

Saam erwartet auch einen praktischen Einsatz für ein solches Vorgehen: „Wenn man vorhersagen könnte, welche Probleme Opazität bei welchen Arten von Simulationen typischerweise verursacht, wäre es vielleicht möglich, typische Probleme schon am Anfang der Modellimplementierung zu identifizieren und zu vermeiden“, glaubt sie.

## Die Bedeutung von interdisziplinärem Dialog

Die Überbrückung der konzeptionellen Distanz zwischen Naturwissenschaftlern und Geisteswissenschaftlern ist nicht einfach, aber Saams Projekt zeigt auf, wieso es so wichtig ist, daran zu arbeiten. „Manchmal dauert es Jahre oder sogar Jahrzehnte, um Wissenschaftler aus so unterschiedlichen Disziplinen wie Naturwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Geisteswissenschaften zu einem produktiven Dialog zu bewegen“, merkt Saam an. „Die Chance für mich, hier am HLRS direkt mit Simulationswissenschaftlern zusammenzuarbeiten, ist wirklich außergewöhnlich.“

Lenhard stimmt zu: „Ich finde es wunderbar, dass es am HLRS eine Gruppe gibt, deren Aufgabe es ist, mit Wissenschaftlern über ihre Arbeit zu sprechen und eine stärkere Selbstreflexion über ihre Tätigkeit zu fördern“, stellt er fest. „Das sollten Wissenschaft und die Gesellschaft insgesamt mehr tun.“

(CW)



# HIGHLIGHTS DER FORSCHUNG

## Supercomputer macht ein Prognosemodell zum Lärmschutz möglich

Forscher der TU Berlin haben die Prinzipien aus der Strömungsdynamik und der Akustik kombiniert und ein Modell entwickelt, das den Prozess für die Entwicklung von Rauschunterdrückung von Flugzeugen, Schiffen und Lüftungssystemen vereinfachen könnte.

Noise-Cancelling-Kopfhörer sind zu einem beliebten Zubehör für Vielflieger geworden. Durch die Analyse der Hintergrundfrequenzen eines Flugzeugs während des Flugs und die Erzeugung einer „Anti-Noise“-Schallwelle, eliminieren solche Kopfhörer störende Hintergrundgeräusche. Trotz beengter Sitzgelegenheiten ermöglichen die Kopfhörer es fast so angenehm wie zuhause, einen Film anzuschauen oder Musik zu hören. Um störende Geräusche, die durch Maschinen wie Autos, Schiffe und Flugzeuge erzeugt werden, zu minimieren, wenden Akustikingenieure verschiedene Strategien an. Eine als Helmholtz-Resonator bezeichnete Technologie basiert auf einem ähnlichen Konzept wie Noise-Cancelling-Kopfhörer. Hier bauen Ingenieure eine Resonanzbox, die auf einer Seite eine Öffnung hat. Wenn Luft über die Öffnung strömt, vibriert die Box wie eine Kirchenorgelpfeife und erzeugt einen Ton. Durch Anpassen der Größe und Form des Hohlraums und seiner Öffnung können Akustikingenieure einen bestimmten Ton einstellen, der wie Kopfhörer den dominanten, irritierenden Klang einer Maschine aufhebt.

In der Vergangenheit war das Feinabstimmen eines Helmholtz-Resonators ein komplexes Unterfangen mit kostspieligen und zeitaufwändigen Versuchen und Irrtümern. Die Ingenieure hatten keine andere Wahl, als viele verschiedene Geometrien zu konstruieren und zu testen, um eine optimale Form für eine bestimmte Anwendung zu finden, insbesondere in einer Umgebung mit turbulenter Strömung. Heute bieten

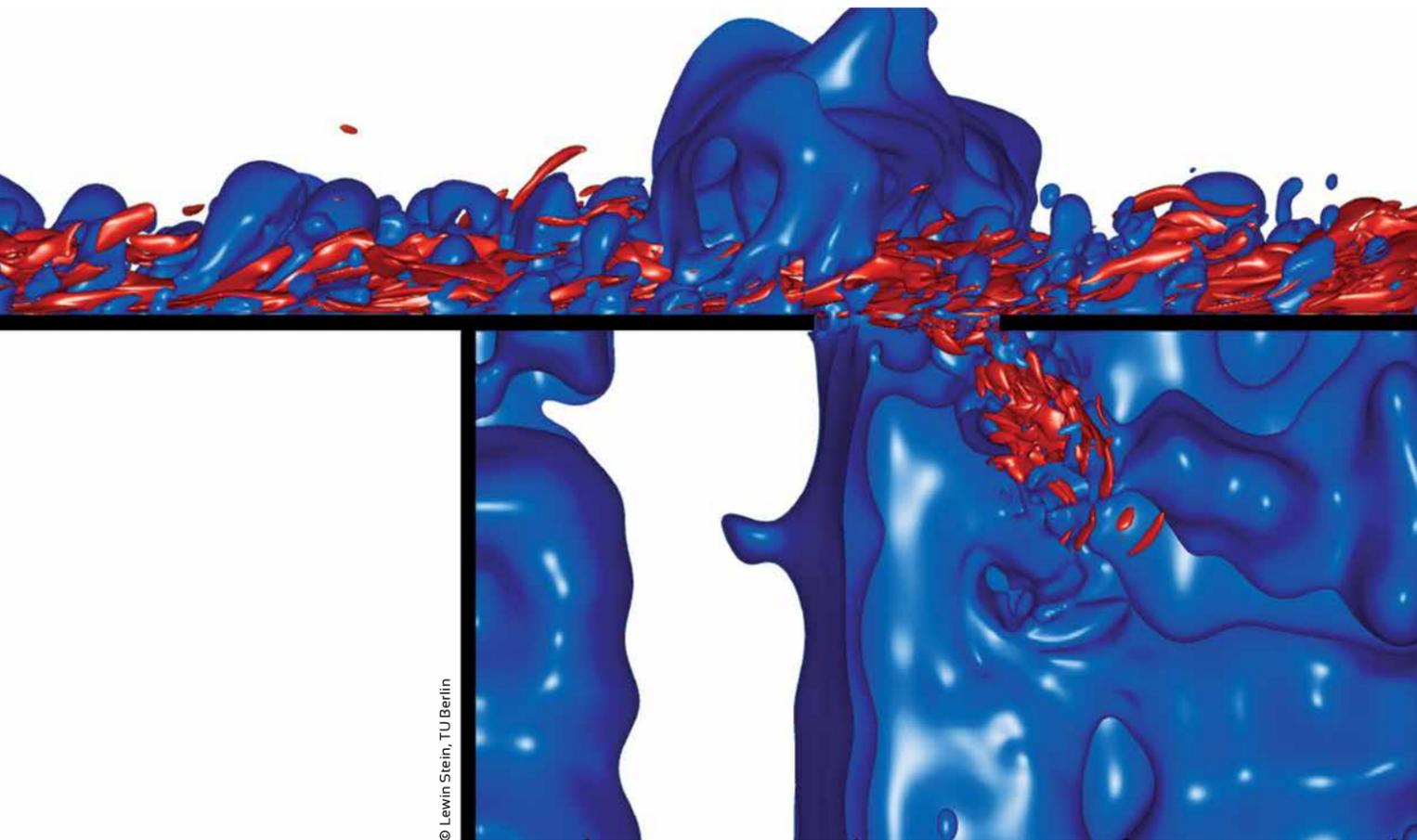
Höchstleistungsrechner jedoch die Möglichkeit, solche Tests virtuell durchzuführen, die den Konstruktionsprozess beschleunigen und vereinfachen.

In einem in der Zeitschrift Acta Mechanica veröffentlichten Artikel beschreiben Lewin Stein und Jörn Sesterhenn von der TU Berlin ein neues Analysemodell für die Klangvorhersage, das die Konstruktion von Helmholtz-Hohlkammern preiswerter und effizienter machen könnte. Die Entwicklung des Modells wurde durch einen Datensatz einer direkten numerischen Simulation, die am HLRS durchgeführt wurde, ermöglicht.

Das analytische Modell kann nun das Schallspektrum eines potenziellen Helmholtz-Resonators vorhersagen, wenn turbulente Luft über ihn hinwegströmt. Die Autoren weisen darauf hin, dass dieses Tool generell benutzt werden kann, um Helmholtz-Resonatoren so zu tunen, dass sie jegliche Störfrequenz aufheben oder verhindern können.

### Simulation nähert sich allen Ebenen der Natur

Wenn sich die Luft über die Öffnung eines Helmholtz-Resonators bewegt, wird der Fluss gestört und die Turbulenz verstärkt. Typischerweise treten Wirbel auf, die sich von der Kante der Öffnung stromaufwärts lösen. Zusammen bilden sie Blattwirbel, die die Öffnung bedecken und mit den akustischen Schwingungen interagieren, die im Hohlraum erzeugt werden. Das Ergebnis ist eine frequenzabhängige Dämpfung oder Anregung der akustischen Welle, wenn Luft durch diese Wirbelbahn strömt.



© Lewin Stein, TU Berlin

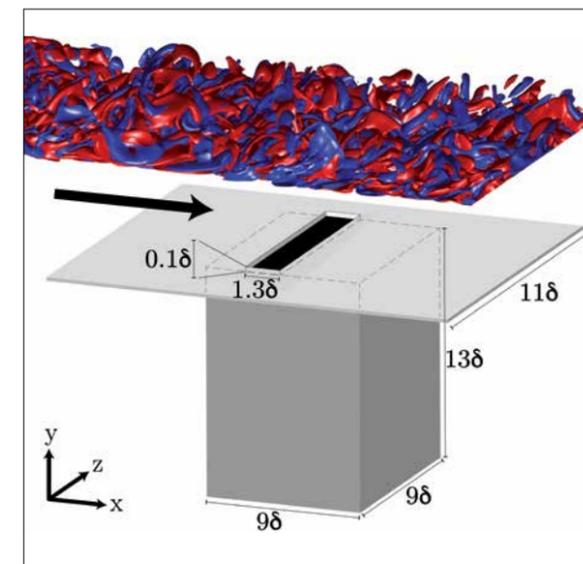
In der Vergangenheit war es schwierig, solche Wechselwirkungen und ihre Auswirkungen ohne grobe Schätzung numerisch zu untersuchen. Zum ersten Mal integriert die Simulation von Stein turbulente und akustische Phänomene eines Helmholtz-Resonators, die von einer turbulenten Strömung über der Öffnung des Resonators angeregt werden. Mit einer bisher unerreichter Auflösung kann die fließakustische

Wechselwirkung und ihre Auswirkungen auf die Resonanz des Hohlraums verfolgt werden. Diese Errungenschaft ist mit einer Methode namens Direct Numerical Simulation (DNS) möglich, die ein Gas oder eine Flüssigkeit auf grundsätzlicher Ebene beschreibt. „Ich verwende die komplexeste Form von Gleichungen für Fluide – die Navier-Stokes-Gleichungen – um den tatsächlichen Phänomenen in der Natur so nahe wie

möglich zu kommen und dabei so wenig Schätzung wie nötig zu verwenden“, sagte Stein. „Unsere DNS ermöglichte es uns, ganz neue Erkenntnisse zu gewinnen.“

Die direkte numerische Simulation von Stein unterteilt das System in ein Netz von etwa einer Milliarde Gitterpunkten und simuliert mehr als 100.000 Zeitschritte, um die Systemdynamik für nur 30 Millisekunden physikalischer Zeit vollständig aufzulösen. Jeder Lauf des numerischen Modells auf dem Höchstleistungsrechner Hazel Hen benötigte etwa vier 24-Stunden-Tage mit rund 40.000 Rechenkernen. Während ein physikalisches Experiment räumlich begrenzt ist und nur wenige physikalisch relevante Parameter nachverfolgen kann, stellt jeder einzelne DNS-Lauf ein 20-Terabyte-Dataset bereit, das alle Strömungsgrößen zu allen Zeitschritten und Räumen innerhalb des Netzes dokumentiert und eine reichhaltige Ressource liefert, die im Detail erforscht werden kann.

Stein sagte, dass das Ausführen der Simulation in diesem Zeitraum einen guten Kompromiss zwischen Auf-



bauen einer zuverlässigen Datenbank und dem Erzielen von Ergebnissen in angemessener Zeit darstellt.

### In Richtung eines allgemeinen Klangprognosemodells

Nachdem die Details des akustischen Modells entwickelt worden waren, bestand die nächste Herausforderung darin, zu bestätigen, dass es akustische Eigenschaften



anderer Helmholtz-Hohlkörpergeometrien und Luftströmungsbedingungen vorhersagen kann. Durch den Vergleich der extrapolierten Modellergebnisse mit den experimentellen Daten, die Joachim Golliard im Centre de Transfert de Technologie du Mans in Frankreich

zur Verfügung gestellt hatte, stellte Stein fest, dass das Modell mit großer Genauigkeit funktionierte.

Das in der Veröffentlichung beschriebene Modell ist für Luftströmungen mit niedriger Geschwindigkeit und für niedrige Frequenzen, wie sie in Lüftungssystemen zu finden sind, optimiert.

Es ist auch modular aufgebaut, so dass auch ein Hohlraum untersucht werden kann, der aus komplexen Materialien wie Schaumstoff anstelle harter Wände besteht. Stein geht davon aus, dass er mit mehr Rechenzeit und Zugriff auf schnellere Höchstleistungsrechner einen größeren Bereich potentieller Resonatorformen und Strömungsbedingungen numerisch vorhersagen kann.

Nachdem er kürzlich promoviert hatte und nun als Postdoc am Institut für Fluidodynamik und Technische Akustik in der Gruppe von Prof. Sesterhenn (TU Berlin) tätig ist, sieht Stein es als reizvoll an, mit industriellen Partnern zusammenzuarbeiten und eventuell sein Modell in realen Situationen anzuwenden. „Ich habe zwar theoretische Physik studiert“, erklärt er, „aber es ist erfüllend, an Problemen zu arbeiten, die über die reine akademische Forschung hinausgehen und in der Industrie angewendet werden können, wo die Menschen möglicherweise von dem, was man erreicht hat, profitieren können. Diese neueste Abhandlung ist eine Chance, den Nutzen und die Anwendbarkeit unserer Arbeit zu beweisen. Es ist ein großartiger Moment nach jahrelanger Arbeit an der Doktorarbeit.“

(CW)

# Einsatz von computergestützter Chemie zur Untersuchung neuer Halbleitertechnologien

**Forscher der Universität Marburg untersuchen, wie die Funktionalisierung von Silicium mit anderen Verbindungen den Signaltransport durch Licht anstatt Elektronen in Halbleitern ermöglichen kann.**

Nachdem neue Methoden zum Verständnis und zur Manipulation von Materie auf ihren grundlegendsten Ebenen verfügbar geworden sind, haben Forscher auf dem interdisziplinären Gebiet der Materialwissenschaft neue Materialien erfolgreich synthetisiert. Häufig besteht das Ziel darin, Materialien zu entwerfen, welche Eigenschaften enthalten, die für die Ausführung bestimmter Funktionen nützlich sein können. Solche Materialien können zum Beispiel chemisch stabiler oder bruchfester sein, vorteilhafte elektromagnetische Eigenschaften haben oder vorhersagbar auf bestimmte Umgebungsbedingungen reagieren.

Ralf Tonner und seine Forschungsgruppe an der Universität Marburg stellen sich der Herausforderung, Funktionsmaterialien auf ungewöhnliche Weise zu gestalten – mit Ansätzen aus der computergestützten Chemie. So modelliert Tonner mit Rechenressourcen des HLRS Phänomene, die auf atomarer und subatomarer Ebene auftreten, um zu verstehen, wie chemische Faktoren das Verhalten eines Materials beeinflussen.

Tonner und sein Team haben die Möglichkeiten der computergestützten Chemie und des Höchstleistungsrechnens eingesetzt, um interessante Phänomene zwischen organischen Molekülen und Oberflächen aufzudecken, und gezeigt, wie diese Wechselwirkungen in Bezug auf die molekulare und Festkörperwelt interpretiert werden können. Das so gewonnene Wissen könnte dabei helfen, strukturierte Oberflächen zu entwerfen – einem Ziel der Wissenschaftler, die an der nächsten Generation leistungsfähigerer und effizienterer Halbleiter arbeiten.

## Computergestützte Berechnungen

Atome verbinden sich zu Molekülen und anderen Verbindungen, wenn sie sich einander nähern und dann Elektronen, die sich um ihre Kerne bewegen, tauschen oder teilen. Die spezifischen Atome, die physikalischen Formen, die die Moleküle annehmen, ihre energetischen Eigenschaften und wie sie mit anderen Molekülen in der Umgebung interagieren, sind einzigartige Eigenschaften einer Verbindung. Sie können bestimmen, ob Verbindungen relativ stabil bleiben, oder ob Belastungen wie Temperatur- oder Druckänderungen ihre Reaktivität beeinflussen können.

Tonner verwendet einen rechnerischen Ansatz, die sogenannte Dichtefunktionaltheorie (DFT), um solche Eigenschaften auf der Quantenskala zu untersuchen; das heißt auf der Skala, die die Newtonsche Mechanik durch die Quantenmechanik ersetzt. DFT verwendet Informationen über Schwankungen der Elektronendichte innerhalb eines Moleküls – einer Größe, die auch experimentell mit Röntgenbeugung gemessen werden kann – um die Energie des Systems abzuleiten. Dies wiederum ermöglicht es den Forschern, auf Wechselwirkungen zwischen Kernen sowie zwischen Elektronen und Kernen zu schließen, Faktoren, die für das Verständnis chemischer Bindungen und Reaktionen von entscheidender Bedeutung sind.

DFT kann nützliche Informationen über die Energieprofile der von ihnen untersuchten Verbindungen liefern. Um ein besseres Verständnis darüber zu erhalten, wie sich Molekülsysteme bei der Interaktion mit einer Oberfläche tatsächlich verhalten, verwendet Tonners

Gruppe auch den Höchstleistungsrechner am HLRS, um Molekulardynamiksimulationen durchzuführen. Hier untersuchen die Wissenschaftler, wie sich das System der Moleküle auf dem Niveau von Atomen und Elektronen über die Zeit entwickelt.

„Durch die Steigerung der Rechenleistung ist es der computergestützten Chemie und der Quantenchemie möglich, reale molekulare Systeme zu beschreiben“, erklärt Tonner. „Mit dem Wachstum der Höchstleistungsrechner gehen wir davon aus, immer realistischere Modelle für experimentelle Systeme in der Materialwissenschaft entwickeln zu können.“

## Auf dem Weg zu lichtbasierten Halbleitern

In einem Bereich, in dem Tonner derzeit die computergestützte Chemie einsetzt, werden Möglichkeiten zur Verbesserung von Silicium für den Einsatz in neuartigen Halbleitern untersucht. Dieses Problem hat in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung gewonnen, da deutlich geworden ist, dass die Mikroelektronikbranche an ihre Grenzen stößt, Halbleiter mit Silicium allein zu nutzen.

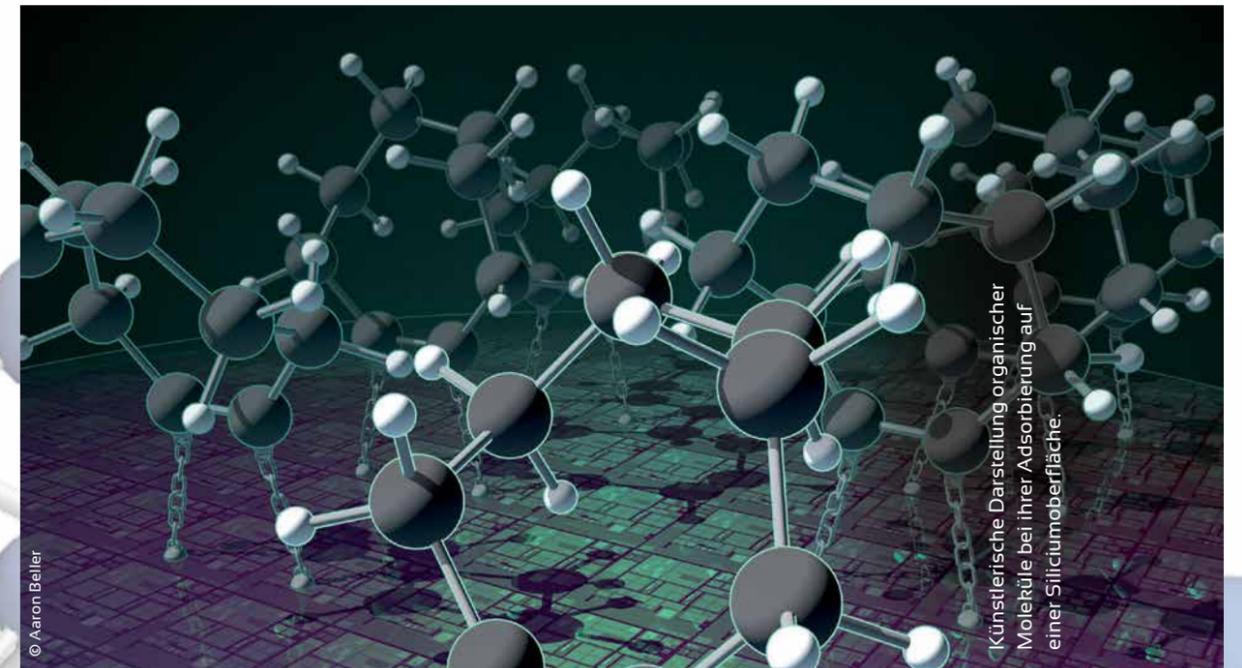
Tonner und experimentell arbeitende Kollegen untersuchten, wie die Funktionalisierung von Silicium mit Verbindungen wie Galliumarsenid (GaAs) das Design neuartiger Halbleiter verwirklichen kann.

Diese Forschung geht davon aus, dass solche neuen Materialien es ermöglichen würden, Licht für den Signaltransport anstelle von Elektronen zu verwenden, was die Entwicklung verbesserter elektronischer Geräte unterstützt. „Um dies zu erreichen“, erklärt Tonner,

„müssen wir wirklich verstehen, wie die Schnittstellen zwischen Silicium und diesen organischen Verbindungen aussehen und wie sie sich verhalten. Mit computergestützter Chemie können wir die elementaren Details dieser Wechselwirkungen und Prozesse betrachten.“

Um beispielsweise eine Platte aus Silicium zu bedecken, werden flüssige Vorstufen von Galliumarsenid mit einem Blasenähler versehen, wo sie dann in die Gasphase gebracht werden; dann lagern sich in einem chemischen Prozess Gallium- und Arsenidatome an das Silicium an und bilden einen GaAs-Film. Wie Atome angeordnet werden, wenn sie an eine Oberfläche adsorbieren, hängt von der chemischen Bindung ab. Wie genau dies geschieht, ist jedoch eine offene Frage. Zuvor wurde vermutet, dass abstoßende Beziehungen zwischen Atomen der wichtigste Faktor beim „Lenken“ von Atomen sind, wenn sie auf einer Oberfläche adsorbieren. Durch die Verwendung von DFT stellte Tonner fest, dass die Fähigkeit von Atomen, andere Atome auf der Oberfläche in Position zu bringen, auch durch eine anziehende dispersive Wechselwirkung entstehen kann.

Ein besseres Verständnis dieser grundlegenden Wechselwirkungen soll den Entwicklern optisch aktiver Halbleiter helfen, die Adsorption der Vorläufermoleküle auf Silicium zu verbessern. Dies wiederum würde es ermöglichen, die Lichtsignalleitung mit der Mikroelektronik auf Siliciumbasis zu kombinieren, um das Beste aus beiden Welten in der optischen und elektronischen Leitung zusammenzubringen. (CW)



# Simulation und maschinelles Lernen könnten Kraftwerke effizienter machen

Mit leistungsstarkem Höchstleistungsrechner und datengesteuertem maschinellem Lernen untersuchen Forscher der Universität Stuttgart, ob Kohlendioxid Wasser bei der Stromerzeugung ersetzen kann.

In herkömmlichen Dampfkraftwerken wird Restwasser vom Wasserdampf getrennt. Allerdings begrenzt dieser Prozess die Effizienz und in früheren Generationen führte es dazu, dass Kraftwerke unsicher waren und explodieren konnten. In den 1920er Jahren erkannte Mark Benson, dass das Risiko verringert und Kraftwerke effizienter werden könnten, wenn Wasser im superkritischen Zustand vorliegt, d.h. Gas und Flüssigkeit können nicht mehr unterschieden werden. Der Benson Boiler war zwar zur damaligen Zeit zu teuer für den Praxisgebrauch, aber er bot der Welt den ersten Blick auf superkritische Energieerzeugung.

Fast ein Jahrhundert später griffen Forscher des Instituts für Kerntechnik und Energiesysteme der Universität Stuttgart (IKE) und des Instituts für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) die Konzepte von Benson auf, um herauszufinden, wie sie die Sicherheit und Effizienz moderner Kraftwerke verbessern können. Die Forscher entwickeln mithilfe von Höchstleistungsrechnern Werkzeuge, mit denen superkritische Wärmeübertragung realisierbar wird.

Sandeep Pandey, Doktorand bei IKE, und Dr.-Ing. Xu Chu vom ITLR leiten die Berechnungen für das Projekt. In Kooperation mit Informatikforschern des Singapore Institute of Technology (SIT), setzen sie maschinelle Lerntechniken ein, die durch Simulationen informiert werden. Sie entwickeln auch ein Werkzeug, das auf einem PC problemlos verwendet werden kann.

Um diese Ziele zu erreichen, hat das Team rechenintensive direkte numerische Simulationen (DNS) auf Hazel Hen, dem Höchstleistungsrechner des HLRS, ausgeführt.

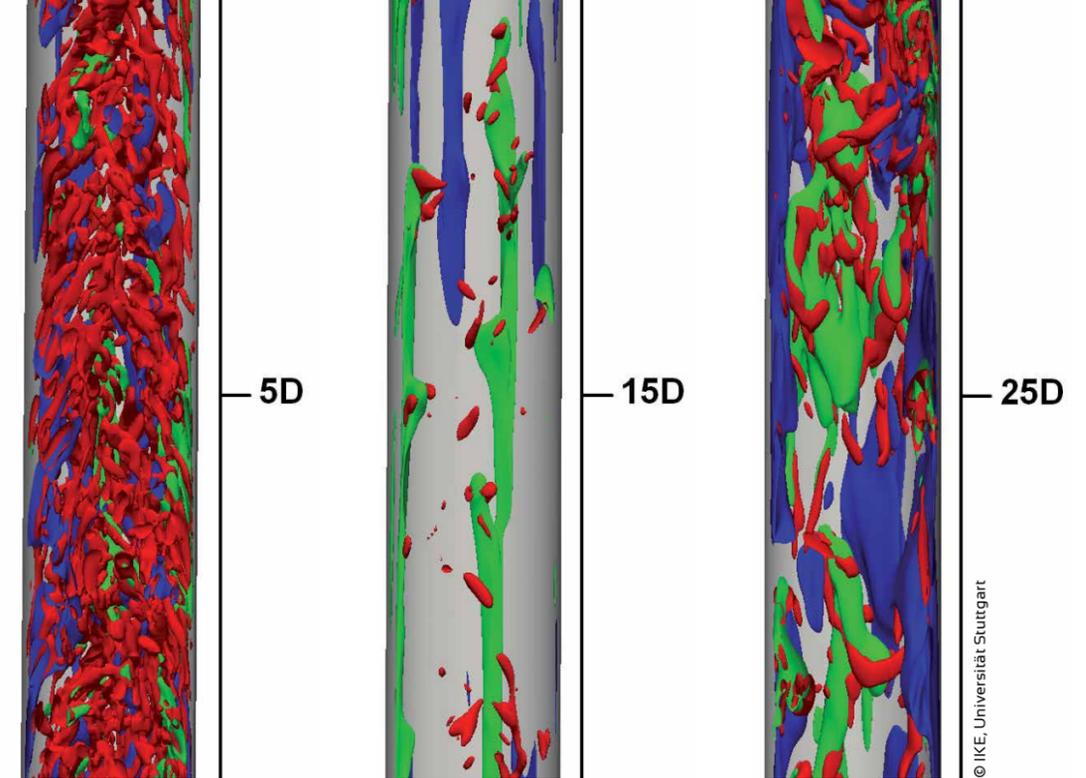
## Superkritisches Kohlendioxid

Wasser wird häufig zur Energieerzeugung und Wärmeübertragung verwendet, da es leicht zugänglich, auf chemischer Ebene verständlich und unter einem breiten Temperatur- und Druckbereich vorhersagbar ist. Um superkritisch zu werden, muss Wasser allerdings auf 374° C unter extremen Druck erhitzt werden. Weiterhin können geringfügige Änderungen der Temperatur oder des Drucks große Auswirkungen auf einen superkritischen Zustand haben. Beispielsweise überträgt überkritisches Wasser die Wärme nicht so effizient wie im flüssigen Zustand, und die zum Erreichen überkritischer Werte erforderliche extreme Wärme kann zu einer Schädigung der Rohrleitungen und infolge zu katastrophalen Unfällen führen.

Obwohl die Verwendung von Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) für ein umweltfreundlicheres Kraftwerk, zwar wie ein Widerspruch in sich klingt, prüfen Pandey und seine Kollegen dies als Alternative. Das gängige Molekül bietet eine Reihe von Vorteilen, vor allem erreicht es bei etwas über 31° C superkritische Eigenschaften und ist damit wesentlich effizienter als Wasser. Superkritisches CO<sub>2</sub> (sCO<sub>2</sub>) benötigt auch viel weniger Platz und kann mit geringerem Aufwand komprimiert werden als unterkritisches Wasser. Dies bedeutet wiederum, dass ein kleineres Kraftwerk ausreicht.

Um Wasser durch Kohlendioxid zu ersetzen, müssen die Ingenieure die Eigenschaften jedoch grundlegend verstehen. Dazu gehört auch, wie die Turbulenzen der Flüssigkeit Wärme übertragen und mit Maschinen interagieren. Dafür verwendete das Team die DNS.

Die Simulation zeigt die Struktur und die (rot) hohe und (blau) niedrige Geschwindigkeit der Flüssigkeit während eines Abkühlvorgangs. Die Forscher beobachteten stark abweichende Turbulenzen zwischen abwärts strömendem (links) und aufwärts strömendem (rechts) überkritischem Kohlendioxid.



## Neuronale Netze für kommerzielle Computer

Zusammen mit Dr. Wanli Chang vom SIT verwendete das Team Belastungs- und Wärmeübertragungsdaten seiner DNS-Simulationen, um ein Deep Neural Network (DNN) zu trainieren. Ein DNN ist ein Algorithmus für maschinelles Lernen, der nach neuronalen Netzen im Gehirn modelliert wurde.

Auf Hazel Hen führte das Team 35 DNS-Simulationen durch, von denen jede sich auf eine spezifische Betriebsbedingung fokussierte. Anschließend wurde der erzeugte Datensatz zum Trainieren der DNN verwendet. Das Team benutzt Einlasstemperatur und -druck, Wärmefluss, Rohrdurchmesser und Wärmeenergie der Flüssigkeit als Input und generiert als Ausgabe die Wandtemperatur und Wandschubspannung des Rohrs. Achtzig Prozent der in den DNS-Simulationen generierten Daten werden zufällig ausgewählt, um den DNN zu trainieren, während die anderen 20 Prozent der Daten für die gleichzeitige, aber getrennte Validierung verwendet werden. Nachdem sich das Team von der Übereinstimmung überzeugt hatte, verwendet es die Daten, um ein Tool für die kommerzielle Nutzung zu erstellen. Anhand der Ergebnisse seiner jüngsten Arbeiten konnte das Team die Wärmeenergie unter bestimmten Betriebsbedingungen in 5,4 Millisekunden auf einem normalen Laptop-Computer simulieren.

## Kritische nächste Schritte

Bis heute hat das Team OpenFOAM für seine DNS-Simulationen verwendet. Die Forscher arbeiten nun mit einer Gruppe des Instituts für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart zusammen, um den FLEXI-Code zu verwenden, der eine höhere Genauigkeit bietet und ein breiteres Spektrum an Bedingungen abdecken kann.

Pandey verwendet zusätzlich zu den DNS-Simulationen eine weitere Methode namens implizites LES. Zwar haben implizite LES-Simulationen nicht die gleiche hohe Auflösung wie die DNS-Simulationen, aber die Simulationen können mit höheren Reynolds-Zahlen durchgeführt werden. Dadurch wird ein größerer Bereich von Turbulenzbedingungen berücksichtigt.

Das Team möchte seine Datenbank vergrößern, um sein DNN-Tool weiter zu verbessern. Darüber hinaus arbeitet sie mit IKE-Forschern zusammen, die Vorversuche durchführen und ein superkritisches Modellkraftwerk bauen, um die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie zu testen. Das ultimative Ziel ist es, ein präzises, benutzerfreundliches Tool zur Verfügung zu stellen, das Ingenieuren und Kraftwerksbetreibern hilft, Strom sicherer und effizienter zu erzeugen.

(EG)

# Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer

Ahmad N, Farooqi MN, Unat D. 2018. **Load balancing for parallel multiphase flow simulation.** Sci Programming-Neth. 2018:6387049.

Albers M, Meysonnat PS, Schröder W. 2018. **Closed-loop control of turbulent boundary layers using spanwise traveling surface waves.** Proc Appl Math Mech. 18:201800336.

Alon OE, Cederbaum LS. 2018. **Attractive Bose-Einstein condensates in anharmonic traps: Accurate numerical treatment and the intriguing physics of the variance.** Chem Phys. 515:287-298.

Babb J, McLaughlin BM. 2018. **Radiative charge transfer between the helium ion and argon.** Astrophys J. 860(2).

Bangga G, Lutz T, Krämer E. 2018. **Energy assessment of two vertical axis wind turbines in side-by-side arrangement.** J Renew Sustain Energy. 10(3):10.1063/1.5028199.

Biaostoch A, Sein D, Durgadoo JV, et al. 2018. **Simulating the Agulhas system in global ocean models — nesting vs. multi-resolution unstructured meshes.** Ocean Model. 121:117-131.

Bordia P, Alet F, Hosur P. 2018. **Out-of-time-ordered measurements as a probe of quantum dynamics.** Phys Rev A. 97:030103(R).

Börner PC, Kinyanjui MK, Björkman T, et al. 2018. **Observation of charge density waves in free-standing 1T-TaSe2 monolayers by transmission electron microscopy.** Appl Phys Lett. 113:173103.

Borsanyi S, Fodor Z, Guenther JN, et al. 2018. **Higher order fluctuations and correlations of conserved charges from lattice QCD.** J High Energy Phys. 2018:205.

Bose S, Chakravarti K, Rezzolla L, et al. 2018. **Neutron-star radius from a population of binary neutron star mergers.** Phys Rev Lett. 120:031102.

Bradley C, Emany N, Ertl T, et al. 2018. **Enabling detailed, biophysics-based skeletal muscle models on HPC systems.** Front Physiol. 9:816.

Chu X, Chang W, Pandey S, et al. 2018. **A computationally light data-driven approach for heat transfer and hydraulic characteristics modeling of supercritical fluids: From DNS to DNN.** Int J Heat Mass Tran. 123:629-636.

Coppola E, Sobolowski S, Pichelli E, et al. 2018. **A first-of-its-kind multi-model convection permitting ensemble for investigating convective phenomena over Europe and the Mediterranean.** Climate Dynamics. DOI:10.1007/s00382-018-4521-8.

Cormier M, Caboni M, Lutz T, et al. 2018. **Numerical analysis of unsteady aerodynamics of floating offshore wind turbines.** J Phys Conf Ser. 1037:072048.

Donnert J, Jang H, Mendygral P, et al. 2018. **Towards exascale simulations of the ICM dynamo with WENO-Wombat.** Galaxies. 6(4):104.

Dumbser M, Guercilena F, Köppel S, et al. 2018. **Conformal and covariant Z4 formulation of the Einstein equations: Strongly hyperbolic first-order reduction and solution with discontinuous Galerkin schemes.** Phys Rev D. 97(8):084053.

Forrey R, Babb J, Stancil P, McLaughlin B. 2018. **Rate constants for the formation of CS by radiative association.** Mon Not R Astron Soc. 479(4):4727-4734.

Fröhlich K, Schneiders L, Meinke M, Schröder W. 2018. **Validation of Lagrangian two-way coupled point-particle models in large-eddy simulations.** Flow Turbul Combust. 101(2):1-25.

Galindo-Lopez S, Salehi F, Cleary MJ, et al. 2018. **A stochastic multiple mapping conditioning computational model in OpenFOAM for turbulent combustion.** Comput Fluids. 172:410-425.

Goela S, Cross G, Stukowski A, et al. 2018. **Designing nanoindentation simulation studies by appropriate indenter choices: Case study on single crystal tungsten.** Comput Mater Sci. 152:196-210.

Harutyunyan A, Nathanail A, Rezzolla L, Sedrakian A. 2018. **Electrical resistivity and Hall effect in binary neutron-star mergers.** Euro Phys J A. 54:191.

Hötzer J, Reiter A, Hierl H, et al. 2018. **The parallel multi-physics phase-field framework PACE3D.** J Comp Sci. 26:1-12.

Jarniven R, Vainio R, Palmroth M, et al. 2018. **Ion acceleration by flux transfer events in the terrestrial magnetosheath.** Geophys Res Lett. 45(4):1723-1731.

Juusola L, Pfau-Kempf Y, Ganse U, et al. 2018. **A source mechanism for magnetotail current sheet flapping.** *Ann Geophys.* 36:1027–1035.

Kaltenbach C, Laurien E. 2018. **CFD simulation of spray cooling in the model containment THAI.** *Nucl Eng Design.* 328:359-371.

Kaltenbach C, Laurien E. 2018. **CFD simulation of aerosol particle removal by water spray in the model containment THAI.** *J Aerosol Sci.* 120:62-81.

Klyushin A, Jones T, Lunkenbein T, et al. 2018. **Strong metal support interaction as a key factor of Au activation in CO oxidation.** *ChemCatChem.* 10(18):3985-3989.

Knodel MM, Nägel A, Reiter S, et al. 2018. **Quantitative analysis of hepatitis C NS5A viral protein dynamics on the ER surface.** *Viruses.* 10(1):28.

Kohns M, Horsch M, Hasse H. 2018. **Partial molar volume of NaCl and CsCl in mixtures of water and methanol by experiment and molecular simulation.** *Fluid Phase Equilibria.* 458:30-39.

Kokh DB, Amaral M, Bomke J, et al. 2018. **Estimation of drug-target residence times by  $\tau$  random acceleration molecular dynamics simulations.** *J Chem Theory Comput.* 14(7):3859–3869.

Köster A, Thol M, Vrabec J. 2018. **Molecular models for the hydrogen age: hydrogen, nitrogen, oxygen, argon, and water.** *J Chem Eng.* 63(2):305-320.

Kühne M, Börnert F, Fecher S, et al. 2018. **Reversible superdense ordering of lithium between two graphene sheets.** *Nature.* 564:234-239.

Lesnicki D, Sulpizi M. 2018. **A microscopic interpretation of pump-probe vibrational spectroscopy using ab initio molecular dynamics.** *J Phys Chem B.* 122(25):6604–6609.

Letzgus P, Lutz T, Krämer E. 2018. **Detached eddy simulations of the local atmospheric flow field within a forested wind energy test site located in complex terrain.** *J Phys Conf Ser.* 1037:072043.

Liu X, Huang G, Hu K, et al. 2018. **Sharing of Na<sup>+</sup> by three –COO– groups at deprotonated carboxyl-terminated self-assembled monolayer-charged aqueous interface.** *J Phys Chem-US.* 122(16):9111–9116.

Lode AUJ, Diorico FS, Wu E, et al. 2018. **Many-body physics in two-component Bose-Einstein condensates in a cavity: fragmented superradiance and polarization.** *New J Phys.* 20:055006.

Luitz DJ, Lazarides A, Bar Lev Y. 2018. **Periodic and quasiperiodic revivals in periodically driven interacting quantum systems.** *Phys Rev B.* 97:020303(R).

Marquard P, Smirnov AV, Smirnov VA, Steinhauser M. 2018. **Four-loop wave function renormalization in QCD and QED.** *Phys Rev D.* 97:054032.

Nicholson CW, Lücke A, Schmidt WG, et al. 2018. **Beyond the molecular movie: dynamics of bands and bonds during a photoinduced phase transition.** *Science.* 362(6416):821-825.

Pandey S, Chu X, Laurien E, Weigand B. 2018. **Buoyancy induced turbulence modulation in pipe flow at supercritical pressure under cooling conditions.** *Phys Fluids.* 30(6):065105.

Pásztor A. 2018. **Recent results on small  $\mu\text{B}$  QCD from the lattice.** *J Phys Conf Ser.* 1024:012026.

Pecher L, Schmidt S, Tonner R. 2018. **Dispersion-mediated steering of organic adsorbates on a precovered silicon surface.** *Beilstein J Org Chem.* 14:2715-2721.

Pecher L, Tonner R. 2018. **Computational analysis of the competitive bonding and reactivity pattern of a bifunctional cyclooctyne on Si(001).** *Theor Chem Accounts.* 137:48.

Pfeiffer M. 2018. **Particle-based fluid dynamics: comparison of different Bhatnagar-Gross-Krook models and the direct simulation Monte Carlo method for hypersonic flows.** *Phys Fluids.* 30:106106.

Pietracaprina F, Macé N, Luitz D, Alet F. 2018. **Shift-invert diagonalization of large many-body localizing spin chains.** *SciPost Phys.* 5:045.

Pindzola MS, Loch SF. 2019. **Proton impact excitation of the Na atom.** *J Phys B-Atom Mol Opt.* 52:025202.

Pogorelov A, Schneiders L, Meinke M, Schröder W. 2018. **An adaptive Cartesian mesh based method to simulate turbulent flows of multiple rotating surfaces.** Flow Turbulence Combust. 100(1):19-38.

Pogorelov A, Meinke M, Schröder W. 2018. **Large-eddy simulation of the unsteady full 3D rim seal flow in a one-stage axial-flow turbine.** Flow Turbulence Combust. DOI:10.1007/s10494-018-9956-9.

Rodriguez-Gomey V, Snyder GF, Lotz JM, et al. 2018. **The optical morphologies of galaxies in the IllustrisTNG simulation: a comparison to Pan-STARRS observations.** Mon Not R Astron Soc. 483(3):4140-4159.

Roy S, Bar Lev Y, Luitz DJ. 2018 **Anomalous thermalization and transport in disordered interacting Floquet systems.** Phys Rev B. 98:060201(R).

Sanna S, Lichtenstein T, Mamiyev Z, et al. 2018. **How one-dimensional are atomic gold chains on a substrate?** J Phys Chem C. 122:25580-25588.

Saveleva VA, Wang L, Teschner D, et al. 2018. **Operando evidence for a universal oxygen evolution mechanism on thermal and electrochemical iridium oxides.** J Phys Chem Lett. 9(11):3154–3160.

Schäferlein U, Keßler M, Krämer E. 2018. **Aeroelastic simulation of the tail shake phenomenon.** J Am Helicopter Soc. 63(3):1-17.

Shterenlikht A, Margetts L, Cebamanos L. 2018. **Modelling fracture in heterogeneous materials on HPC systems using a hybrid MPI/Fortran coarray multi-scale CAFE framework.** Adv Eng Softw. 125:155-166.

Steinmetz P, Hötzer J, Kellner M, et al. 2018. **Study of pattern selection in 3D phase-field simulations during the directional solidification of ternary eutectic Al-Ag-Cu.** Comput Mater Sci. 148:131-140.

Tavelli M, Dumbster M. 2018. **Arbitrary high order accurate space-time discontinuous Galerkin finite element schemes on staggered unstructured meshes for linear elasticity.** J Comput Phys. 366:386-414.

Tsoutsanis P. 2018. **Extended bounds limiter for high-order finite-volume schemes on unstructured meshes.** J Comp Phys. 263:69-94.

Tsoutsanis P, Antoniadis AF, Jenkins KW. 2018. **Improvement of the computational performance of a parallel unstructured WENO finite volume CFD code for implicit large eddy simulation.** Comput Fluids. 173:157-170.

Wang B, Kronenburg A, Tufano GL, Stein OT. 2018. **Fully resolved DNS of droplet array combustion in turbulent convective flows and modelling for mixing fields in inter-droplet space.** Combust Flame. 189:347-366.

Weeber R, Kreissl P, Holm C. 2018. **Studying the field-controlled change of shape and elasticity of magnetic gels using particle-based simulations.** Arch Appl Mech. 1.

Weir DJ. 2018. **Gravitational waves from a first order electroweak phase transition: a brief review.** Philos Trans A Math Phys Eng Sci. 376(2114).

Wyrwich R, Jones TE, Günther S, et al. 2018. **LEED-I/(V) structure analysis of the  $(7\times\sqrt{3})$ rect SO<sub>4</sub> phase on Ag(111): precursor to the active species of the Ag-catalyzed ethylene epoxidation.** J Phys Chem C 122:26990-27004.

Zhu Q, Xu D, Gaspari M, et al. 2018. **Formation of a Malin I analogue in IllustrisTNG by stimulated accretion.** Mon Not R Astron Soc. 480(1):L18-L22.



## In unserem Rechenraum

### Cray XC40 Hazel Hen

Der Supercomputer Hazel Hen ist das Herzstück der HPC-Systeminfrastruktur des HLRS. Mit einer Spitzenleistung von 7,42 Petaflops stellt er eines der leistungsstärksten HPC-Systeme der Welt (Platz 30 in den TOP500, November 2018) 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.

<b>CPU</b>	Intel® Xeon CPU E5-2680 v3 12 core @ 2.5 GHz
<b>Number of nodes / cores</b>	7,712 / 185,088
<b>Peak performance</b>	7.42 PFLOPS
<b>Memory</b>	128 GB/node
<b>Disk storage</b>	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.

<b>Optimized software for</b>	Spark Hadoop CGE (CrayGraph Engine)
<b>Number of nodes</b>	48 + 16
<b>Kooperationen mit akademischen und industriellen Partnern</b>	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.

<b>CPU</b>	NEC Vector CPU, 4 cores @ 1.0 GHz
<b>Number of nodes / cores</b>	64 / 256
<b>Peak performance</b>	~16 TFLOPS
<b>Memory</b>	4 TB
<b>Memory BW per node</b>	220 GB/s (single core), 256 GB/s (4 cores)
<b>Interconnect</b>	NEC IXS

## NEC Cluster

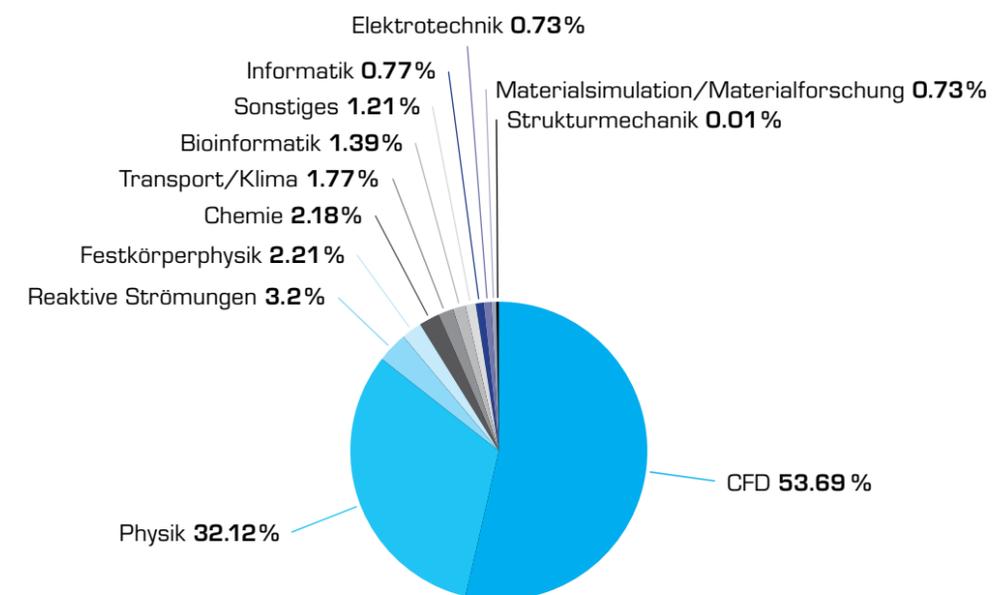
Dieser Standard-PC-Cluster wurde im Frühjahr 2009 installiert. Um den steigenden Anforderungen an Rechenressourcen gerecht zu werden, wurde seine Konfiguration ständig angepasst. Die aktuelle Konfiguration ist wie folgt:

<b>Node type</b>	Intel Xeon E5-2670 (SandyBridge)	124
<b>Node type</b>	Intel Xeon E5-2660 v3 @ 2.6 GHz (Haswell)	88
<b>Node type</b>	Intel Xeon E5-2680 v3 @ 2.5 GHz (Haswell)	360
<b>Memory per node</b>	32 / 64 / 128 / 256 GB	
<b>Interconnect</b>	Infiniband QDR/FDR	

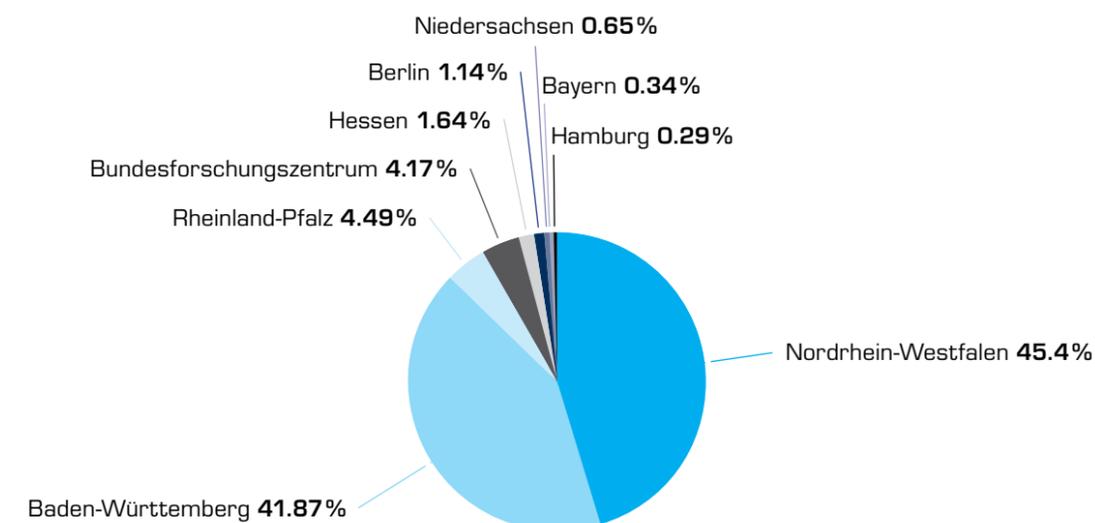
## Unsere Nutzer

2018 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hazel Hen 10 neue Forschungsprojekte ("large-scale projects": jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 766 Millionen Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS 4 internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 113 Millionen Core-Stunden. 2018 wurden auf Hazel Hen insgesamt 129 Projekte mit 1,28 Milliarden Core-Stunden gerechnet.

### Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



### Systemnutzung nach Bundesland



# 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 2018.

Erfahren Sie mehr über unsere aktuellen Projekte auf unserer Website:

[www.hlrs.de/about-us/research/current-projects/](http://www.hlrs.de/about-us/research/current-projects/)

Projekt	Dauer	Gefördert durch
<b>BEAM-ME</b> → Ziel ist das Ausschöpfen des Potenzials, welches parallelisiertes Rechnen auf Hochleistungsrechnern mit verteiltem Arbeitsspeicher für die hochaufgelösten Optimierungsmodelle der Energiesystemanalyse bietet.	<b>Dezember 2015 – November 2018</b>	<b>BMBF</b>
<b>bw Naha 2</b> → 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.	<b>Januar 2017 – Dezember 2019</b>	<b>MWK</b>
<b>BW Stiftung II</b> → Die BW Stiftung unterstützt baden-württembergische Hochschulen und gemeinnützige außeruniversitäre Forschungseinrichtungen bei der Nutzung der Rechner des HLRS und berät ggf. hinsichtlich möglicher Optimierungen.	<b>Oktober 2016 – September 2019</b>	<b>MWK</b>
<b>bwHPC-S5</b> → Das Projekt koordiniert die Unterstützung von Nutzern des High-Performance Computing (HPC) in Baden-Württemberg und die Umsetzung aller damit verbundenen Maßnahmen und Aktivitäten, einschließlich dem Management umfangreicher wissenschaftlicher Daten.	<b>Juli 2018 – Dezember 2020</b>	<b>MWK</b>
<b>bwVisu II</b> → bwVisu entwickelt einen Service zur Fernvisualisierung von wissenschaftlichen Daten, der eine hohe Skalierbarkeit durch Cloud-Technologien gewährleistet.	<b>August 2014 – Oktober 2020</b>	<b>MWK</b>
<b>CATALYST</b> → CATALYST untersucht Methoden zur Analyse von Modellierungs- und Simulationsdaten mit dem Ziel, HPC und Datenanalyse zu verknüpfen.	<b>Oktober 2016 – September 2019</b>	<b>MWK</b>

<b>CheeSE</b> → In CheESEE arbeiten europäische Höchstleistungsrechenzentren und Hochschulen mit Hardware-Entwicklern, der Industrie und öffentlichen Einrichtungen wie dem Katastrophenschutz zusammen, um mit modernen Codes die globalen Herausforderungen im Bereich der festen Erde zu meistern.	<b>Dezember 2018 - November 2021</b>	<b>EU</b>
<b>DIPL-ING</b> → Ziel des Projekts ist es, ein effizientes Datenmanagement im Hinblick auf große Mengen wissenschaftlicher Daten aus den ingenieurwissenschaftlichen Studiengängen der Universität Stuttgart zu untersuchen.	<b>April 2017 – März 2019</b>	<b>BMBF</b>
<b>EOPEN</b> → EOPEN nimmt sich den massiven Datenströmen aus Erdbeobachtungsdaten an, um die Methoden zu Datenharmonisierung, Standardisierung, Fusion und Austausch skalierbar zu machen.	<b>November 2017 – Oktober 2020</b>	<b>EU</b>
<b>EuroLab-4-HPC 2</b> → Ziel von EuroLab-4-HPC ist die Einrichtung eines europäischen Exzellenzforschungszentrums für Höchstleistungsrechner.	<b>Mai 2018 – April 2020</b>	<b>EU</b>
<b>EUXDAT</b> → 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.	<b>November 2017 – Oktober 2020</b>	<b>EU</b>
<b>ExaFLOW</b> → ExaFLOW adressiert algorithmische Herausforderungen der numerischen Strömungsmechanik, um Simulationen in Exascale zu ermöglichen. Für die Bereitstellung von Open-Source-Anwendungen werden industrielle Anwendungsfälle durchgeführt.	<b>Oktober 2015 – September 2018</b>	<b>EU</b>
<b>Exasolvers</b> → 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.	<b>Mai 2016 – April 2019</b>	<b>DFG</b>
<b>EXCELLERAT</b> → Das Ziel von EXCELLERAT ist es, die Skalierbarkeit wichtiger Codes für das High-Tech Engineering auf immer umfangreichere Rechnerarchitekturen zu ermöglichen und Unterstützung des Technologietransfers in die Industrie zu erleichtern.	<b>Dezember 2018 - November 2021</b>	<b>EU</b>

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

**FocusCoE** Dezember 2018 - November 2021 EU  
 → FocusCoE unterstützt EU-finanzierte Exzellenzzentren bei der Ausschöpfung der Vorteile von HPC-Anwendungen zur Bewältigung wissenschaftlicher, industrieller oder gesellschaftlicher Herausforderungen. Für die Koordination strategischer Zusammenarbeit in den CoEs und die Öffentlichkeitsarbeit stellt FocusCoE eine Plattform zur Verfügung.

**FORTISSIMO 2** November 2015 – Dezember 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.

**HiDALGO** Dezember 2018 - November 2021 EU  
 → HiDALGO bewertet globaler Herausforderungen mithilfe von präzisen Simulationen, Datenanalysen, künstlicher Intelligenz und Datenvisualisierung und vermittelt Wissen zur Integration verschiedener Workflows und Daten.

**HPC-Europa 3** 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.

**HyForPV** Oktober 2018 - September 2021 BMWi  
 → Das Ziel von HyForPV besteht in der Entwicklung neuer Prognosemethoden für die Systemintegration von Photovoltaik (PV) in den Energiemarkt und in intelligente Netze. Diese werden durch hochaufgelöste, räumliche und zeitliche Simulationen der PV-Ausgangsleistung operationalisiert.

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

**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 Simulation Exzellenzcluster 2** 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.

**OpenForecast** September 2019 – August 2020 EU  
 → Ziel ist die Bereitstellung eines neuartigen Service für die Public Open Data Digital Service Infrastructure der EU, der öffentliche zugängliche Datenquellen mit High-Performance Computing (HPC) kombiniert.

**OSCCAR** Juni 2018 – Mai 2021 EU  
 → Das Projekt Future Occupant Saftety for Crashes in Cars entwickelt einen neuen, simulationsbasierten Ansatz, um in Zukunft an Verkehrsunfällen beteiligte Fahrzeuginsassen zu schützen.

**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 koordiniert.

**PHANTOM** Dezember 2015 – November 2018 EU  
 → PHANTOM untersucht die Entwicklung energieeffizienter paralleler Infrastrukturen in Bereichen wie Internet der Dinge und Hochleistungsrechnen, die auf beschleunigender heterogener Hardware wie GPU und CPU basieren.

**Pop-CoE** Oktober 2015 – November 2018 EU  
 → POP-CoE bewertet die Leistung von Computeranwendungen jeder Art und zeigt den Benutzern spezifische Probleme auf, die die Leistung ihres Codes beeinflussen und stellt die beste Möglichkeit zur Behebung vor.



# HPC Fort- und Weiterbildung in 2018

2018 bot das HLRS 41 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprachen. Die Kurse fanden an 129 Tagen in Deutschland und anderen Ländern statt. Knapp 1.000 Interessierte nahmen an den Kursen teil. Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website:

[www.hlrs.de/training](http://www.hlrs.de/training)

Date	Location	Topic
Jan 18	Garching	Introduction to Hybrid Programming in HPC (MPI+X) *
Feb 5-7	Paderborn	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Feb 5-7	Amsterdam	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Feb 12-16	Dresden	Parallel Programming & Parallel Tools
Feb 19-23	Siegen	Computational Fluid Dynamics
Mar 5-9	Stuttgart	CFD with OpenFOAM®
Mar 12-13	Stuttgart	OpenMP + OpenACC GPU Directives for Parallel Accelerated Super computers *
Mar 19-23	Stuttgart	Iterative Linear Solvers and Parallelization
Apr 9-12	Mainz	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Apr 9-13	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing *
Apr 11-13	Innsbruck	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Apr 23-26	Stuttgart	Optimization of Scaling and Node-Level Performance on Hazel Hen
Apr 26-27	Vienna	Parallel Programming with MPI and OpenMP
May 7-8	Stuttgart	Scientific Visualization
May 14-17	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
May 15-17	Vienna	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Jun 6-7	Vienna	Introduction to Hybrid Programming in HPC (MPI+X)
Jun 12-13	Stuttgart	Fortran Modernization Workshop
Jun 14-15	Stuttgart	Node-Level Performance Engineering *
Jun 19	Stuttgart	Introduction to Hybrid Programming in HPC (MPI+X)
Jun 20-21	Stuttgart	Cluster Workshop
Jul 2-3	Stuttgart	Concepts of GASPI and Interoperability with Other Communication APIs *
Jul 5-6	Stuttgart	Introduction to UPC and Co-Array Fortran *

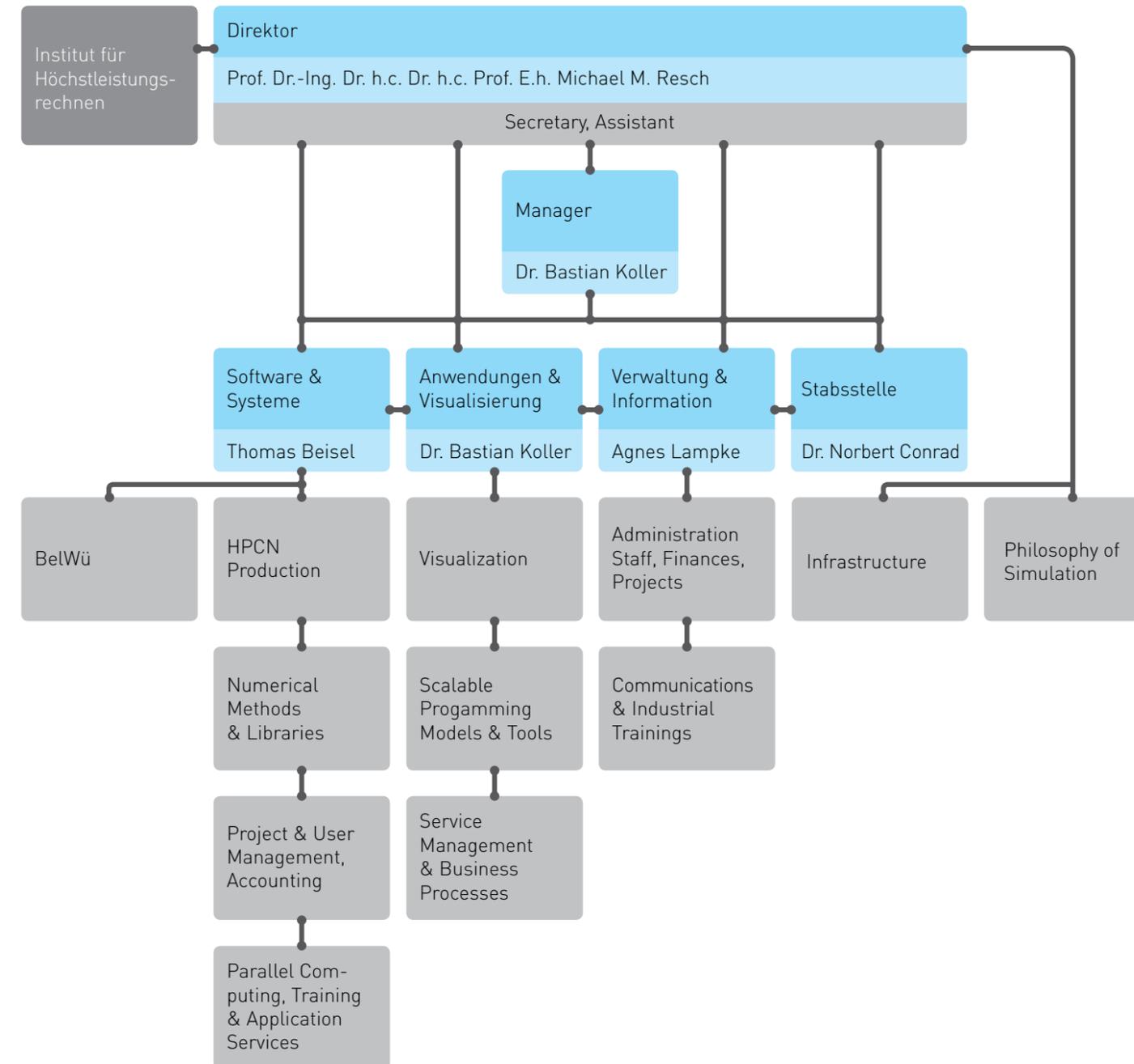
Jul 10-13	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
Aug 20-23	Zürich	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Sep 10-11	Innsbruck	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Sep 10-14	Garching	Iterative Linear Solvers and Parallelization
Sep 10-14	Stuttgart	Computational Fluid Dynamics
Sep 12-14	Innsbruck	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Sep 19	Stuttgart	Deep Learning Workshop
Sep 24-28	Siegen	CFD with OpenFOAM®
Oct 15-19	Stuttgart	Parallel Programming and Advanced Topics in Parallel Programming *
Oct 25-26	Stuttgart	Scientific Visualization
Nov 5-6	Vienna	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Nov 5-9	Stuttgart	Optimization of Scaling and Node-Level Performance on Hazel Hen
Nov 7-9	Vienna	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Nov 19-22	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
Nov 26-28	Jülich	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP
Nov 27 + 30	Heverlee	Parallel Programming with MPI and OpenMP
Dec 3-7	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing
Dec 13	Heverlee	Parallel Programming with MPI and OpenMP

\* PRACE Kurse: Das HLRS ist Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing (GCS), einem der zehn PRACE Training Centers in der EU. Die gekennzeichneten Kurse sind teilweise von PRACE gesponsert und Teil des PRACE Kursprogramms.

# Workshops und Konferenzen in 2018

Date	Location	Partners	Topic
Mar 9-10	Erlangen	FAU Institute for Sociology	Simulation in the Social Sciences and the Sociology of Simulation
Apr 16-18	Stuttgart		17th HLRS/hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems
Apr 23-26	Kaliningrad	Russian Academy of Sciences, Keldysh Institute	Third Annual German-Russian Workshop
June 7-8	Stuttgart		Nachhaltigkeitstage (Sustainability Days)
Sep 17	Stuttgart	ZIH, TU Dresden	12th International Parallel Tools Workshop
Oct 1-2	Stuttgart	Hyperion Research	HPC User Forum
Oct 4-5	Stuttgart		High-Performance Computing in Science & Engineering: 21st Results and Review Workshop
Oct 9-10	Stuttgart	Tohoku University	28th Workshop on Sustained Simulation Performance
Oct 23-24	Stuttgart		Workshop on Sustainable HPC Infrastructure
Nov 26-27	Stuttgart	HPC-Europa3, Sicos BW	1st HPC-Europa Workshop for Small and Medium Enterprises
Nov 28-30	Stuttgart		Science and Art of Simulation Workshop 2018
Dec 11	Stuttgart		2nd Industrial HPC User Roundtable

# Organigramm



# 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 Unterstützung bei der Vorbereitung von Veranstaltungen.

### Communication und industrielle 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 der Industrie und dem 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.-Ing. 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 and 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-Parallelismus basierend auf verteilten Datenabhängigkeiten, kollektiven I/O-Operationen und parallelem Debugging. Als Service für HLRS-Nutzer wartet die Gruppe auch jenen Teil des Software-Stacks, der sich auf Programmiermodelle, Debugging- und Performance-Analyse-Tools bezieht.

### Service Management and 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 – Produktion (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.-Ing. 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.-Ing. Thomas Bönisch

Verantwortet das Nutzermanagement und das Accounting am HLRS. In diesen Bereich fallen auch die Erstellung und die Pflege der Web-Schnittstellen 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 und dessen Weiterentwicklung, sowie die Konzeption neuer Ansätze für das Datenmanagement der Anwender und Projekte im Bereich Data Analytics.

### Parallel Computing, Training und Anwendungsdienste

Leitung: Dr. Rolf Rabenseifner

Organisiert das akademische Fortbildungsprogramm des HLRS im Bereich Hoch- und Höchstleistungsrechnen mit den Schwerpunkten Parallele Programmierung, Strömungssimulation, Leistungsoptimierung, wissenschaftlicher Visualisierung, Programmierungssprachen 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.

## Stabsstellen Begleitforschung

### Philosophy of Science and 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?

### Infrastructure

Leitung: Marcel Brodbeck

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.

© 2019

**Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)**

Universität Stuttgart  
Nobelstrasse 19 | 70550 Stuttgart | Deutschland

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

email [info@hls.de](mailto:info@hls.de)  
web [www.hls.de](http://www.hls.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

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

**Übersetzung:** Samantha Siegert

**Produktionsmanager:** F. Rainer Klank

**Fotos und Abbildungen:** Bildrechte aller nicht  
gekennzeichneten Bilder: HLRS

**Druck:** Nino Druck GmbH

**Design:** Zimmermann Visuelle Kommunikation  
[www.zimmermann-online.info](http://www.zimmermann-online.info)

Dieser Jahresbericht wurde auf Papier gedruckt, das vom FSC, dem EU-Umweltzeichen und dem Umweltzeichen des Blauen Engels zertifiziert wurde.



H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart

Dieser Jahresbericht ist auf Papier gedruckt, das vom FSC, dem EU-Umweltzeichen und dem Umweltzeichen des Blauen Engels zertifiziert wurde.

© Mathis Bode, Institut für Technische Verbrennung

