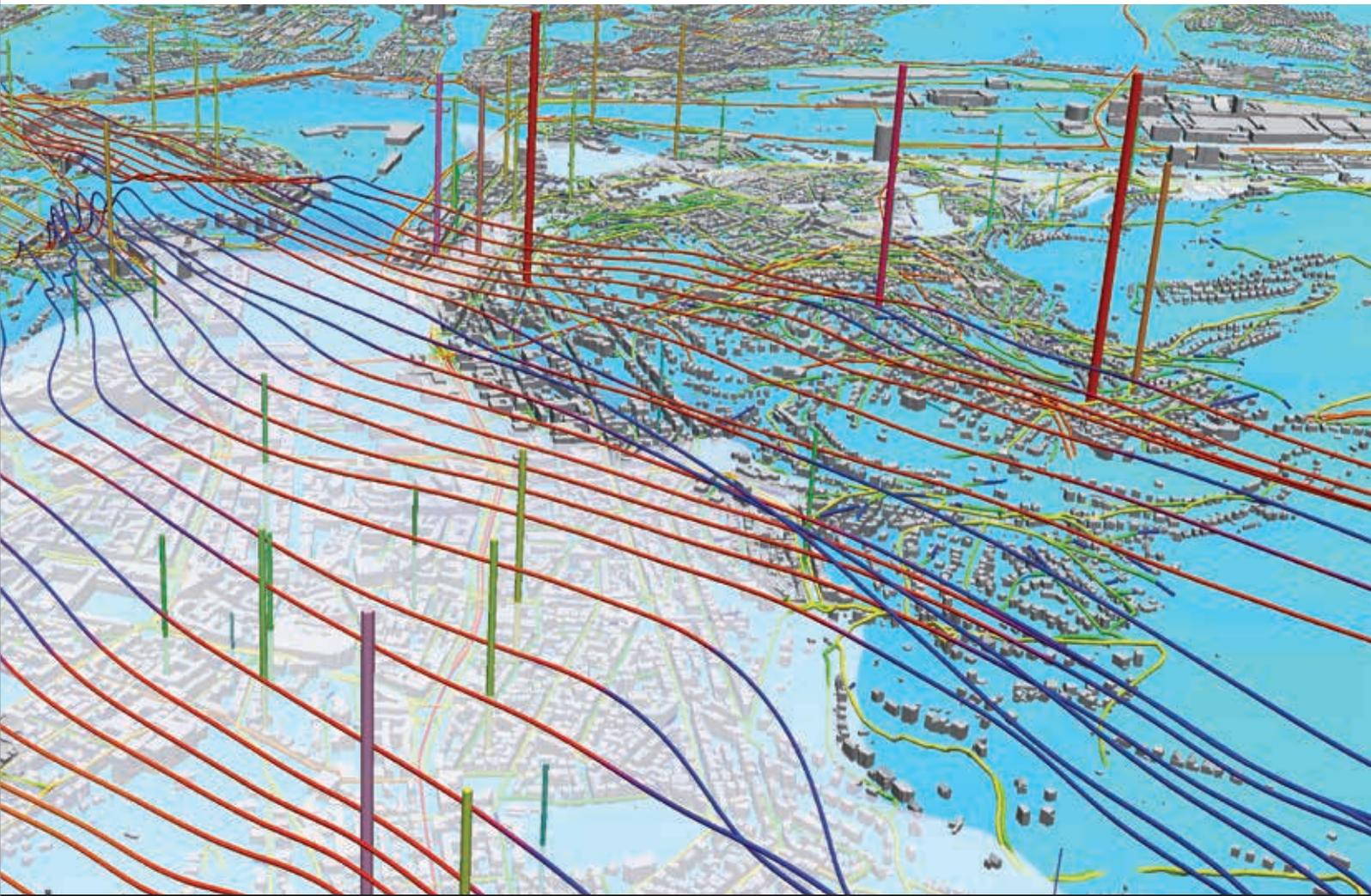


# 2019

H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart

## JAHRESBERICHT



ENERGIE

GESUNDHEIT

KLIMA

MOBILITÄT

PHILOSOPHIE



# 2019

## 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

## Director's Welcome

Willkommen beim Jahresbericht des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) für 2019. Es freut uns, Ihnen einige Höhepunkte aus dem letzten Jahr und spannende Expansionsvorhaben zu präsentieren.

Der wichtigste Trend des letzten Jahres, der uns auch auf absehbare Zeit beschäftigen wird, ist die Annäherung von Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HPC) und Künstliche Intelligenz (KI). Das HLRS hat diese Entwicklung früh aufgegriffen, was mich stolz macht, und 2019 gingen wir mehrere Partnerschaften in diesem Bereich ein.

So begannen wir ein Projekt mit dem SWR zur Entwicklung eines neuen Tools zur Musikanalyse und Empfehlung ähnlicher Titel. Diese Partnerschaft ermöglichte es dem HLRS, die Entwicklung einer praktischen Anwendung neuer KI-Technologien zu unterstützen, trägt aber auch zu anderen Medienprojekten bei.

In diesem Jahr begann auch eine Partnerschaft mit der LandesCloud zur Bereitstellung einer sicheren, cloud-basierten KI-Plattform für die Industrie. Da die LandesCloud eng mit der Landesbank Baden-Württemberg zusammenarbeitet, kann das HLRS durch dieses Projekt KI- und HPC-Ressourcen in neue Bereiche einführen.

Um unseren Nutzern Zugang zu KI-optimierten Rechner-Systemen zu ermöglichen, erwarb das HLRS Ende 2019 ein GPU-basiertes Cray CS-Storm-System; damit können KI-Aufgaben auf einem Rechen-Cluster zugeschnitten auf diese Anwendungen ausgeführt werden. In den nächsten Jahren streben wir nach einer effizienteren Zusammenführung von KI- und HPC-Systemen auf einer einzigen Plattform. Grundlage hierfür ist unser neues Hewlett Packard Enterprise Apollo 9000-System (Hawk). In diesem Jahr begann die Installation

Welcome to the 2019 annual report of the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS). We are pleased to share highlights from our activities over the past year with you, including information about some exciting expansions in our focus.

The most important trend of the last year — and one that will keep us busy for the foreseeable future — is the convergence of high-performance computing and artificial intelligence. I am proud to say that HLRS has seized upon this development early, and in 2019 we started several novel collaborations in the field.

One example is a project we undertook with broadcaster SWR to develop a new tool for analyzing music and recommending related titles. The partnership not only enabled HLRS to help develop a practical application of new AI technologies, but will also support the development of other media-related projects.

This year also saw the start of a partnership with LandesCloud to provide a secure, cloud-based platform for AI as a service for industry. Considering that LandesCloud works closely with the Landesbank Baden-Württemberg, one of Germany's largest financial institutions, the collaboration will enable HLRS to bring AI and HPC resources into new domains.

In order to provide our users with access to AI-optimized computing resources, HLRS acquired a GPU-based Cray CS-Storm system late in 2019, making it possible to run AI jobs on a computing cluster specifically designed for these applications. In the coming years we also plan to explore ways to more efficiently merge AI and HPC systems into a single platform. The foundation for this will be our new Hewlett Packard Enterprise Apollo system, called Hawk. We began Hawk's installation this year and look forward to the

von Hawk und wir freuen uns auf die neuen Möglichkeiten dieses 26-Petaflop-Supercomputers für die Forschung und Industrie ab Inbetriebnahme 2020.

2019 setzten wir mehr denn je auf Nachhaltigkeit. In den letzten Jahren hat das HLRS seine Stromversorgung, Kühlsysteme und andere Umweltfaktoren ausgiebig analysiert. Dies führte zu wesentlichen Verbesserungen, welche den Kühlaufwand und andere Umweltauswirkungen verringert haben. Nach intensiver Vorbereitung bestand das HLRS eine Umwelprüfung und ist seit November gemäß ISO 14001 und ISO 50001 zertifiziert. Es qualifizierte sich auch als erstes europäisches Höchstleistungsrechenzentrum für das Eco-Management and Audit Scheme (EMAS) der EU, dem weltweit anspruchsvollsten Rahmen für das Umweltmanagement in Organisationen.

Im vergangenen Jahr weiteten wir auch unsere internationale Zusammenarbeit aus. Wir begannen formelle Partnerschaften mit dem National Supercomputing Center an der Sun-Yat-sen-Universität in Guangzhou und dem Supercomputing Center der Chinese University for Science and Technology in Hefei. Durch diese können wir bei Themen von gemeinsamem Interesse zusammenarbeiten, wie dem Betrieb zukünftiger Exascale-Systeme und der Verknüpfung von KI und HPC. Erfreulicherweise verlängerten wir auch unsere dauerhafte Zusammenarbeit mit dem National Center for High-Performance Computing in Hsinchu, Taiwan. Zwei Workshops gilt es hier hervorzuheben, da sie wichtige Einsatzbereiche von Simulations- und Visualisierungstechnologien am HLRS aufzeigen. Im Mai trafen wir uns zwei Tage mit Stadtplanungs-Experten, um neue Anwendungsmöglichkeiten von Simulationen und KI auf diesem Gebiet zu erörtern. Im September nahmen zudem Höchstleistungsrechenzentren aus der ganzen Welt am International Industrial Supercomputing Workshop teil. Da das HLRS den dynamischen Hightech-Sektor Baden-Württembergs unterstützt, ist dieses Thema äußerst wichtig, und der Workshop hat unsere Beziehungen zu internationalen Experten in diesem Bereich gestärkt.

Die Leistungskennzahlen des HLRS sprechen für ein sehr erfolgreiches Jahr. Wir konnten die Anzahl an Wissenschaftlern um 20% erhöhen und erhöhten auch unsere wissenschaftliche Leistung. Es freute uns auch

sehr, dass sechs Doktoranden ihren Abschluss machten. Im Vergleich zum Vorjahr verzeichneten wir einen leichten Rückgang an Einnahmen aus Drittmitteln, weil ein einmaliges Large-Scale-Bundesprojekt in 2018 finanziell abgewickelt wurde. Die industrielle Nutzung unserer Systeme war auch durch die gestiegene Anzahl an Industriekunden hoch. Die Besucherzahlen unserer HPC-Schulungen gingen leicht zurück, verursacht durch derzeit laufende Neuausrichtung zur Verbesserung unseres Lehrplans.

Auch die wissenschaftlichen Nutzer unserer Supercomputer haben in 2019 Großes geleistet. Wir sind stolz, unseren Teil zum Spitzenerfolg des Event Horizon Telescope Consortium beigetragen zu haben, welches das erste Bild eines Schwarzen Lochs überhaupt erstellt hat. Dieser Jahresbericht enthält auch Berichte über Forschungsarbeiten von HLRS-Nutzern zur Entwicklung von hochauflösenden Verbrennungsmodellen und Methoden zur Optimierung des Rotorblattdesigns für Windkraftanlagen zur effizienteren Erzeugung erneuerbarer Energie.

Wir freuen uns auch über ein Interview mit Matthias Hauser, der 2019 als Leiter des Media Solution Center zu uns kam. Darin beschreibt er den einmaligen Beitrag des HLRS zur Kunst und zu den Medien und die einzigartigen Synergieeffekte aus der Zusammenarbeit von Simulationswissenschaftlern und Künstlern.

Bei dieser Gelegenheit möchte ich allen Unterstützern und Geldgebern danken, welche die Erfolge des HLRS 2019 ermöglicht haben. Wir freuen uns darauf, auch in Zukunft Höchstleistungsrechnen und andere fortschrittliche digitale Technologien innovativ einzusetzen, um die drängendsten Herausforderungen für Wissenschaft, Industrie, die HPC-Gemeinde und die Gesellschaft insgesamt anzugehen.

Mit freundlichen Grüßen,



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

new possibilities the 26-petaflop supercomputer will offer for academic and industrial research once it begins operation in 2020.

In 2019 we were also able to bring our efforts to improve sustainability to a new level. Over the last several years HLRS has intensively analyzed its energy supply, cooling activities, and other activities that affect our environment. This has enabled us to implement many substantial improvements that have reduced cooling costs and other environmental impacts. After intensive preparation, HLRS passed a demanding audit to receive ISO 14001 and ISO 50001 certifications in November, and became the first European high-performance computing center to qualify for the EU's Eco-Management and Audit Scheme (EMAS), the world's most stringent framework for environmental management in organizations.

The past year also witnessed an extension of our international collaborations. We entered formal partnerships with both the National Supercomputing Center at the Sun Yat-Sen University in Guangzhou and the Supercomputing Center of the University of Science and Technology of China in Hefei. These partnerships will enable us to work together on topics of shared interest, including the operation of future exascale systems as well as the convergence of AI and HPC. We were also pleased to extend our long-time collaboration with the National Center for High Performance Computing in Hsinchu, Taiwan.

Two workshops should be mentioned here, as they highlight important areas in which simulation and visualization technologies are being used at HLRS. In May, experts in the field of urban planning joined us for a two-day meeting focusing on new applications of simulation and artificial intelligence in city planning processes. In September, high-performance computing centers from all over the world also joined us for the International Industrial Supercomputing Workshop. Considering HLRS's support of the dynamic high-tech industry in Baden-Württemberg, the topic is of utmost importance and the workshop strengthened our ties with the international community active in this field.

HLRS's key performance indicators highlight a successful year. We were able to increase the number of scientists on staff by about 20% and increased our scientific

output. We were also delighted to see six doctoral students complete their PhD's. In comparison to 2018 we saw a decline in third-party funding, although the spike in the previous year was due to a one-time, large-scale federal government project. Industrial usage is high with an increase of companies using our systems. We saw a slight drop in the number of participants in our trainee program, though this is due to some ongoing adjustments to improve our curriculum.

Scientific users of our supercomputing resources also achieved great things this year. We were proud to have played a role in supporting the landmark achievement of the Event Horizon Telescope consortium, which produced the first ever image of a black hole. Simulations performed at HLRS by researchers at the Goethe University Frankfurt led to insights about plasma dynamics under extreme gravity conditions that were used in creating the image. This annual report also features reports on research by HLRS users to develop high-resolution models of combustion and methods for optimizing wind turbine blade designs to generate renewable energy more efficiently.

We are also pleased to present an interview with Matthias Hauser, who this year joined us as managing director of the Media Solution Center. In the conversation he describes HLRS's one-of-a-kind approach to supporting the arts and media industry, and the unique synergies that emerge when simulation scientists and artists work together.

I would also like to use this occasion to thank the supporters and funders who have made HLRS's successes in 2019 possible. At the same time, we look forward to continuing in our efforts to find innovative ways of using high-performance computing and other advanced digital technologies to address the most pressing challenges facing science, industry, the HPC community, and society at large.

## 8 Im Blickpunkt

9 Startklar für die Künstliche Intelligenz

## 14 Neuigkeiten

15 Kurze Beiträge  
 20 HLRS für Umweltschutz zertifiziert  
 21 Ein neuer Supercomputer für KI-Anwendungen  
 22 HLRS bietet Industrie System für sichere cloud-basierte KI  
 23 HiDALGO: High-Performance-Datenanalysen zur Lösung globaler Herausforderungen  
 24 Neue Visionen für HPC und Medienkunst: Ein Interview mit Matthias Hauser  
 28 Internationaler Workshop zu Trends beim HPC-Einsatz in der Industrie  
 29 HLRS entwickelt gemeinsam mit SWR Software zur Musikempfehlung  
 30 The Society of Learning Algorithms  
 31 Symposium hebt neue digitale Tools zur Stadtplanung hervor  
 32 Dark Data beleuchtet  
 34 HLRS-Support-Mitarbeiter unterstützen bei der Code-Optimierung  
 38 HLRS weiterhin führend im Schülerprogramm „Simulierte Welten“  
 39 Sicherere Operationssäle dank Simulation und Visualisierung  
 40 Promotionen 2019

## 36 HLRS in Zahlen

## 42 Highlights der Forschung

43 HLRS-Supercomputer unterstützt Erstellung des ersten Bildes eines Schwarzen Lochs  
 46 Simulationen helfen bei Erforschung von Verbrennungsprozessen  
 48 Mit HPC zu besseren Windkraftanlagen  
 50 Ausgewählte Publikationen  
 58 HLRS Bücher

## 60 Über uns

61 In unserem Rechenraum  
 63 Unsere Nutzer  
 64 Geförderte Forschungsprojekte am HLRS  
 70 HPC Fort- und Weiterbildung in 2019  
 72 Workshops und Konferenzen in 2019  
 73 Organigramm  
 74 Organisation  
 76 Impressum

Als Mitglieder des EOPEN-Projekts unterstützen Mitarbeiter des HLRS die Implementierung einer Unsupervised-Learning-Methode für die Erkennung von Reisfeldern in Südkorea. (In Grün gekennzeichnet.) Die Ergebnisse ermöglichen Experten die Gesamtfläche von Reisfeldern einzuschätzen und den Korntrag des folgenden Jahres vorherzusagen.

# IM BLICKPUNKT

## Startklar für die Künstliche Intelligenz

Die Konvergenz von Höchstleistungsrechnen und Künstlicher Intelligenz beginnt aktuell, spannende neue Möglichkeiten für eine Beschleunigung der Wissenschaften und der Entwicklung neuer Technologien zu eröffnen. Mit neuen Programmen und neuer Infrastruktur hat das HLRS eine Basis dafür geschaffen, dieses Versprechen in die Realität umzusetzen.

Auch wenn es die Idee der Künstlichen Intelligenz (KI) seit den 50er Jahren gibt, deuten jetzt die jüngsten Fortschritte in der Informatik darauf hin, dass ihre Zeit endlich gekommen ist. Günstigere und leistungsfähigere Rechner, neue Software, die Verfügbarkeit riesiger Datenmengen und die Omnipresenz von Sensoren haben die Entwicklung neuartiger ausgeklügelter automatisierter Systeme ermöglicht, die durch schnelle Datenintegration und -analyse ohne menschliches Zutun Vorhersagen treffen, Erkenntnisse liefern, Entscheidungen fällen und sogar Maßnahmen ergreifen. Angesichts der großen KI-Investitionen in den Vereinigten Staaten und China, baut nun auch Europa die KI-Infrastruktur und -Kenntnisse aus, um die Forschungsmöglichkeiten, die Industrieproduktion und die weltweite wirtschaftliche Wettbewerbsfähigkeit zu fördern. Da KI zunehmend den Alltag erobert, versuchen immer mehr Wissenschaftler und Ingenieure ihr Potenzial für ihre Forschungs- und technologische Entwicklungsarbeit aufzudecken. Mittlerweile ist KI aus gängigen Technologien in zahllosen verschiedenen Bereichen wie Landwirtschaft, Finanzwesen, Fertigung und autonomes Fahren nicht mehr wegzudenken.

Um auf den wachsenden Bedarf seiner HPC-Nutzer an Hochschulen und in der Industrie einzugehen, begann das HLRS 2019, sein KI-Potenzial zu erweitern. Das führte auch zur Anschaffung eines neuen Supercomputers, der für KI-Anwendungen optimiert ist, und zur

Beteiligung an Projekten, die praktische KI-Anwendungen testen. Zugleich entwickeln Philosophen und Sozialwissenschaftler am HLRS neue Perspektiven für die Beurteilung der Zuverlässigkeit neuer KI-Algorithmen.

Das HLRS ist im Aufbau seiner KI-Kompetenzen, hat aber bereits die Grundlage für eine weitere Annäherung von HPC, High-Performance-Datenanalyse und KI-Ansätzen wie Deep Learning gelegt. Mit dem Blick auf reale Szenarien untersucht das HLRS, wie man diese neuen Methoden und Technologien kombinieren kann, um die Nutzer des Zentrums bestmöglich zu unterstützen und neue Wege zur Bewältigung globaler Herausforderungen zu finden.

### Warum KI HPC benötigt

Der Wirbel um KI hat so manch einen glauben lassen, dass KI-Anwendungen auf Standardrechnern bald die bereits bewährten Simulationen mit Supercomputern ersetzen könnten. Die am HLRS untersuchten Forschungsmethoden deuten jedoch darauf hin, dass beide Ansätze, ergänzend eingesetzt, auf absehbare Zeit den größten Nutzen bringen werden.

In einfachen Worten: Künstliche Intelligenz ist eine Form der automatischen Erkennung von Mustern. Mit Hilfe künstlicher neuronaler Netze identifizieren und vergleichen Deep-Learning-Anwendungen Unterschiede in großen Mengen an Trainingsdaten und decken Merkmale der relevanten Daten auf. Beim

autonomen Fahren könnten dies etwa Bildverarbeitungsalgorithmen zur Erkennung von Fußgängern im Sichtfeld des Fahrzeugs sein. Sobald diese Muster klar definiert sind, nutzen KI-Systeme sie als Entscheidungsgrundlage, beispielsweise um Kollisionen während der Fahrt zu vermeiden.

Die Entwicklung eines Trainingsmodells, mit dem ein KI-Algorithmus „lernen“ kann, erfordert jedoch die Generierung und Verarbeitung einer enormen Datenmenge – eine perfekte Aufgabe für Höchstleistungsrechner. Die Simulation des Sichtfeldes eines Autos bei einer Stadtfahrt etwa erfordert, dass Millionen von Merkmalen gleichzeitig dargestellt werden, und zwar nicht nur einmal, sondern kontinuierlich im Takt von Sekundenbruchteilen. Solche Modelle kann man nur mit Höchstleistungsrechnern entwickeln.

Sobald eine KI-Anwendung große Datensätze durchgearbeitet hat, um ein Vorhersagemodell zu entwickeln, kann man sie in ein vereinfachtes KI-Tool umwandeln, das nicht den gesamten Datensatz erfordert, sondern nur ein Verständnis der Schlüsselparameter beinhaltet. Zum Beispiel können selbstfahrende Autos keinen Supercomputer an Bord haben und man kann nicht auf Cloud-Technologien setzen, um sich durch Kommunikation mit einem Remote-Supercomputer an die sich schnell verändernde Straßenverhältnisse anzupassen. Vielmehr wird das mit HPC abgeleitete Modell in ein anspruchsloseres KI-Tool umgewandelt, das lediglich anhand von Schlüsselmerkmalen in den Daten beobachtet und reagiert.

Ein solcher Ansatz gilt nicht nur für autonomes Fahren, sondern auch für viele Arten von KI-Anwendungen. In der Landwirtschaft etwa könnte KI kombiniert mit neuartigen Sensoren Landwirten helfen, Aussaat und Ernte

zeitlich zu optimieren. Im Bauwesen könnten günstige digitale Tools Brücken auf Autobahnen überwachen und auf Sanierungsbedarf hinweisen. Für jede dieser Anwendungen werden Forscher allerdings Supercomputer und Deep Learning benötigen, um die Modelle zu entwickeln, auf denen sie basieren.

#### **Wie KI traditionelle HPC-Forschung beschleunigen könnte**

Während HPC zur Entwicklung von KI-Anwendungen notwendig ist, beschleunigt auch Künstliche Intelligenz die auf traditionellen Simulationsmethoden beruhende Forschung. HLRS-Leiter Dr. Bastian Koller erklärt: „HPC-Systeme werden weiter wachsen, was gut ist, weil wir dadurch größere Probleme angehen können. Problematisch ist jedoch, dass die Datenmengen, die diese größeren Systeme generieren, immer unüberschaubarer werden und es immer schwieriger wird, die nützlichen Daten herauszufiltern. Wir denken, KI könnte ein logischer Weg sein, dieses Problem zu lösen.“

In der numerischen Strömungsmechanik beispielsweise, einem Gebiet, auf dem viele Nutzer der HLRS-Computer spezialisiert sind, haben Wissenschaftler hochpräzise Rechenmodelle komplexer physikalischer Phänomene wie Turbulenzen in Luft- und Wasserströmen entwickelt. Mit den schnellen und leistungsstarken Supercomputern von heute können diese Eigenschaften bei extrem hoher Auflösung mathematisch dargestellt werden. Die Erstellung dieser präzisen Modelle ist jedoch rechenintensiv und damit ungeeignet für bestimmte Probleme bei der Designoptimierung, bei denen es wünschenswert wäre, im Sinne der besten Lösung viele verschiedene Simulationen schnell zu vergleichen.



KI ermöglicht einen anderen Ansatz. Da immer mehr Daten zur Verfügung stehen, testen Wissenschaftler jetzt synthetische Ansätze mit künstlichen neuronalen Netzen. Anstatt ein ganzes System auf der Grundlage physikalischer Prinzipien mühselig zu modellieren, entwickeln Forscher heute mit Deep Learning sogenannte Surrogate Models. Sie nutzen einen datenbasierten Bottom-up-Ansatz, um Modelle zu erstellen, welche die Beziehung zwischen den Eingabe- und den Ausgabedaten simulieren, auf denen das Modell basiert. Diese Surrogate Models ahmen das Verhalten eines traditionellen Simulationsmodells stark nach, und selbst wenn sie nicht so präzise oder aufschlussreich wie traditionelle Simulationen sind, können sie diese Ergebnisse viel schneller annähern. Für einige Probleme bietet dies enorme Vorteile.

HLRS-Wissenschaftler und KI-Spezialist Dennis Hoppe meint: „Der Einsatz neuronaler Netze kann Leistungsgewinne ermöglichen, auch wenn diese durch einen Genauigkeitsverlust etwas relativiert werden. Dies ist für manche unserer Nutzer, gerade die Ingenieure, nicht ideal. Dennoch führt dieser Ansatz bei bestimmten Problemen viel schneller zu Ergebnissen. Und wenn man etwas Interessantes findet, ist der Parameterraum bereits kleiner, was es leichter macht, bestimmte Parametersätze mit der richtigen Simulation viel gezielter neu zu berechnen.“

In Kollers Augen könnte dieser datengesteuerte Ansatz auch zu neuen Erkenntnissen führen. „Eine der tollen

KI-Einsatzmöglichkeiten zur Unterstützung traditioneller Anwendungen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens ist die Entdeckung dessen, was ich gerne das unbekannte Unbekannte nenne“, so Koller. „Manchmal gibt es bei großen Datensätzen Abhängigkeiten, die Menschen nicht sehen, weil sie nicht danach suchen. Eine Maschine, die methodisch Daten vergleicht, identifiziert oft Parameter innerhalb von Systemen, die wichtige Auswirkungen haben, die wir nicht erkannt hätten und wiederum neue Möglichkeiten bieten, an die wir nie gedacht hätten.“

Dieser Blickwinkel zeigt auf, dass sich KI und HPC in den nächsten Jahren auf einem „Kollisionskurs“ befinden, bei dem neue hybride Ansätze, die beide Bereiche kombinieren, zu neuen Möglichkeiten für die Forschung und die technologische Entwicklung führen werden. HPC wird die großen Datensätze schaffen, die für die Entwicklung zuverlässiger Modelle nötig sind, Deep Learning wird Forschern helfen, diese Daten effizienter zu analysieren, und HPC wird die Ergebnisse nutzen, um zuverlässigere Modelle zu erstellen. Ein iterativer Einsatz dieser beiden Ansätze könnte Forschern also helfen, komplexe Systeme schneller zu verstehen.

#### **Hybrid-Systeme und -Workflows sind die Zukunft**

Dieses Ziel bringt jedoch technische Herausforderungen mit sich, insbesondere da diese sehr verschiedenen Berechnungsansätze unterschiedliche Hard- und Software erfordern.

Heutzutage bestehen die für Simulation optimierten Supercomputer aus vielen Tausend Central Processing Units (CPUs), einer Art Computerprozessor, der komplexe Berechnungen schnell in Teile zerlegt, diese kleineren Berechnungen schnell parallel über viele CPUs ausführt und sie dann wieder zu einem Ergebnis zusammenfügt. Der HLRS-Supercomputer – ab 2020 ein 26-Petaflop-System namens Hawk – basiert auf diesem Modell, weil es die beste Infrastruktur bietet, um die häufigsten Simulationsprobleme der Nutzer zu lösen.

Der Erfolg von KI-Anwendungen wiederum resultiert aus der Einführung eines anderen Prozessortyps, der sogenannten Graphics Processing Unit (GPU). Ursprünglich für Videospiele entwickelt, sind diese Prozessoren am schnellsten bei iterativen Programmen,

bei denen dieselbe Operation wiederholt leicht variiert ausgeführt wird, zum Beispiel bei einem Deep-Learning-Algorithmus unter Einsatz neuronaler Netze. Neben unterschiedlicher Hardware nutzen HPC und KI auch andere Programmiersprachen. Während die Simulation auf großen HPC-Systemen zum Beispiel oft mit Fortran oder C++ erfolgt, werden KI-Anwendungen häufiger in Python oder TensorFlow entwickelt. Die Entwicklung von Workflows, die leicht zwischen verschiedenen Sprachen kommunizieren können, wird auch entscheidend sein.

2016, als das Interesse an Big Data wuchs, begann das HLRS die Möglichkeiten auszuloten, HPC und High-Performance-Datenanalyse besser zu integrieren. Im Zuge eines Gemeinschaftsprojekts namens CATALYST mit Supercomputer-Hersteller Cray Inc. testete das HLRS ein kombiniertes Hardware- und Software-Datenanalysesystem namens Urika-GX auf seine Fähigkeit hin, technische Anwendungen zu unterstützen. Die Forscher untersuchten bereits die Integrationsfähigkeit des Systems mit Hazel Hen, dem Vorgänger von Hawk.

Bis 2019 stieg die Nachfrage der HLRS-Nutzer nach konventionellem Data-Mining und maschinellem Lernen, aber auch nach Deep Learning mit GPUs. Daher kaufte das Zentrum eine neue Supercomputing-Plattform, den Cray CS-Storm. Als GPU-basiertes System, auf dem die KI-Programmier-Suite von Cray installiert ist, ermöglicht das neue System nun dem HLRS, Forschung mit HPC und KI zu unterstützen.

Derzeit verfügt das HLRS über separate spezialisierte Systeme für HPC und Deep Learning, die jeweils eine eigene Architektur, eigene Programmiergerüste und einen eigenen Job-Scheduler haben. „Für die Zukunft“, so Hoppe, „lautet das Ziel, ein integriertes, ganzheitliches System für Ressourcenmanagement und Workflow-Ausführung zu entwickeln, das alles so miteinander verbindet, dass hybride HPC/AI-Workflows auf einer einzigen Plattform ausgeführt werden können.“

### KI und Ethik

Während das HLRS seine technische KI-Infrastruktur entwickelt, befassen sich Philosophen und Sozialwissenschaftler in seinem Abteilung für Wissenschaftsphilosophie und Computersimulationstechnologie mit

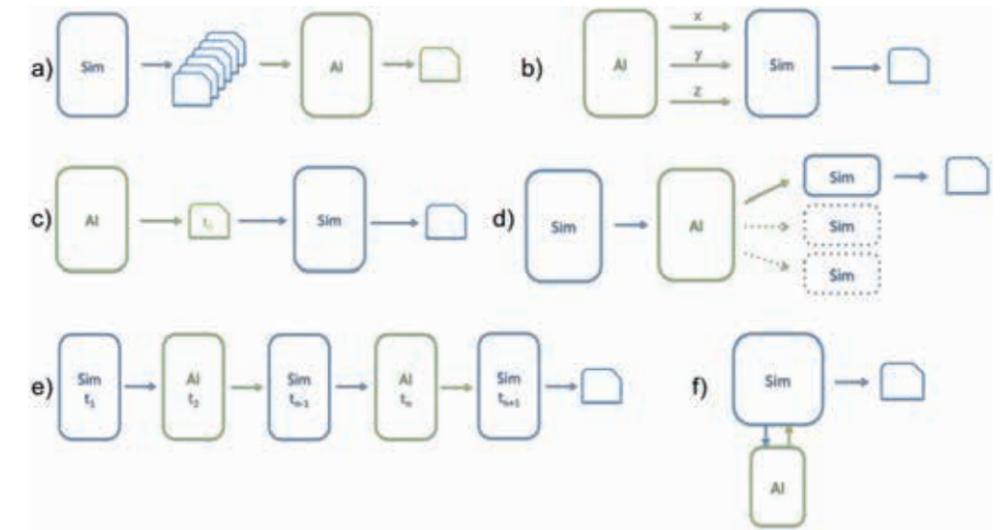
ganz anderen Fragen in diesem Bereich: Wann sollte man sich auf Systeme des maschinellen Lernens verlassen, und wie stellen wir sicher, dass KI-Entscheidungen unseren Werten entsprechen?

Deep-Learning-Algorithmen, die zum Beispiel mit neuronalen Netzen Surrogate Models entwickeln, funktionieren wie „Blackboxes“, was es extrem schwierig macht, zu rekonstruieren, wie sie zu ihren Ergebnissen kommen. Obwohl die Ergebnisse in der Praxis oft nützlich sind, stellt dies ein erkenntnistheoretisches Problem für Philosophen dar, das die Frage nach dem tatsächlichen Wissen aufdrängt, das wir haben, wenn wir solche Ergebnisse bekommen. Da KI immer gängiger wird und beispielsweise bei der Bewertung von Kreditrisiken oder der Verurteilung zu Gefängnisstrafen eingesetzt wird, wodurch sie sich direkt auf unser Leben auswirkt, sind diese Grenzen besorgniserregend, insbesondere für Nicht-Wissenschaftler, die von KI betroffen sind, aber nicht verstehen, wie sie funktioniert.

Während einer HLRS-Konferenz im November 2019 ging eine Reihe von Forschern verschiedener Fachgebiete solchen Fragen nach (Siehe Seite 30). Da bestehende Ethik-Richtlinien bisher keine große Wirkung hatten, haben sich Mitglieder der HLRS-Philosophieabteilung auch mit dem VDE, der Bertelsmann-Stiftung, dem Institut für Technikfolgenabschätzung und Systemanalyse am Karlsruher Institut für Technologie und dem Internationalen Zentrum für Ethik in den Wissenschaften der Universität Tübingen zusammengetan, um einen systematischeren Rahmen für die Umsetzung von KI-Ethikgrundsätzen in der Praxis zu schaffen. Wie bei den Normungsrahmen für andere Bereiche entwickelt diese Gruppe zur Förderung von Ethik bei KI eine durchsetzbare Reihe von ethischen Richtlinien für Wissenschaftler, Entwickler, Verbraucher und andere, die von KI betroffen sind.

„Da KI-Anwendungen immer gängiger werden, ist die Zeit reif für eine sorgfältige Untersuchung, wann der Einsatz maschinellen Lernens angebracht ist“, so Dr. Andreas Kaminski, Leiter der HLRS-Philosophieabteilung. „Dies erfordert die Zusammenarbeit zwischen Informatikern und anderen Forschern, wie Philosophen, Sozialwissenschaftlern und Wissenschaftshistorikern, die den Kontext und die Methoden für ein kritisches Verständnis dieser neuen Technologien liefern können.“

Verschiedene Interaktionsmuster zwischen KI und Simulation: a) Datengenerierung für KI-Training durch Simulationen; b) Entdeckung von Simulationsparametern durch KI; c) Generierung vorläufiger Lösungen durch KI; d) Den passenden Weg finden durch KI; e) Ersetzen von Simulationen durch KI; f) Ersetzen bestimmter Funktionen bzw. Gleichungen durch KI.



### Experimente mit neuen KI-Anwendungen

Der Einsatz von KI am HLRS werde sich mit diesem Bereich weiterentwickeln, so Koller. „Mit dem CATALYST-Projekt wollten wir Erfolgsgeschichten schreiben und verstehen, wie wir High-Performance-Datenanalyse und Deep Learning einsetzen müssen. Wir haben viel über die Herausforderungen und Probleme gelernt und sind jetzt einen Schritt weiter gegangen. Wir gehen jetzt nach vorne und decken Lücken auf, die mit KI-Lösungen geschlossen werden könnten. Dabei lernen wir in der Praxis.“

Obwohl die Anwendung von KI-Methoden am HLRS noch in den Kinderschuhen steckt, wird mit Projekten wie HiDALGO (siehe Seite 23) ein Rahmen dafür geschaffen, um zu untersuchen, wie KI Wissenschaftlern helfen könnte, die wichtigsten Parameter innerhalb großer Datensätze zu bestimmen. Indem sie Pilotstudien zu Themen wie Prognosen zu Migration und Luftverschmutzung und dem Aufspüren von

Fehlinformationen über soziale Medien durchführen, beschränken sich Forscher nicht auf die Theorie dieser Schwierigkeit im Bereich Informatik. Vielmehr arbeiten sie auch direkt an komplexen globalen Herausforderungen, auf die Hoch- und Höchstleistungsrechnen und KI einen Einfluss haben könnten.

Zugleich freut sich das HLRS darauf, seine neue KI-Computerplattform anderen Forschern zur Verfügung zu stellen, die untersuchen möchten, wie diese neuen Ansätze neue Möglichkeiten in ihren eigenen Bereichen bieten könnten.

„Für viele ist KI ein Schweizer Taschenmesser, das alle Probleme lösen wird, aber das stimmt nicht“, erklärt Koller. „Der interessante Part ist nun, herauszufinden, welche Art von Problemen mit KI gelöst werden können und wie HPC dabei hilfreich sein kann. Wir wollen anhand von echten Herausforderungen aus der Realität zeigen, wie man diese neuen Synergieeffekte am besten nutzen kann.“

(CW)

# NEUIGKEITEN



© IZKT, Nora Heinzlmann

## HLRS nimmt am ersten „Smart and Clever“-Wissenschaftsfestival teil

Das HLRS beteiligte sich am ersten Stuttgarter Wissenschaftsfestival „Smart and Clever“, einer einwöchigen Veranstaltung, welche die Bedeutung der Forschung und Technologie für die Stadt und die Region unterstrich. Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, diskutierte gemeinsam mit der baden-württembergischen Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst Theresia Bauer und weiteren Experten über Künstliche Intelligenz. Der Leiter der Wissenschafts- und Technikphilosophie am HLRS, Dr. Andreas Kaminski, nahm nach der Aufführung von Friedrich Dürrenmatts Klassiker Die Physiker am Staatstheater Stuttgart an einer Podiumsdiskussion teil, die Themen rund um die ethische Verantwortung wissenschaftlicher Forschung und disruptiver Technologien behandelte. Der Fachbereich Visualisierung des HLRS zeigte anhand eines Exponats im Stuttgarter Rathaus, wie er mit Virtual Reality die Öffentlichkeit besser in die Stadtplanung einbindet. (EG)



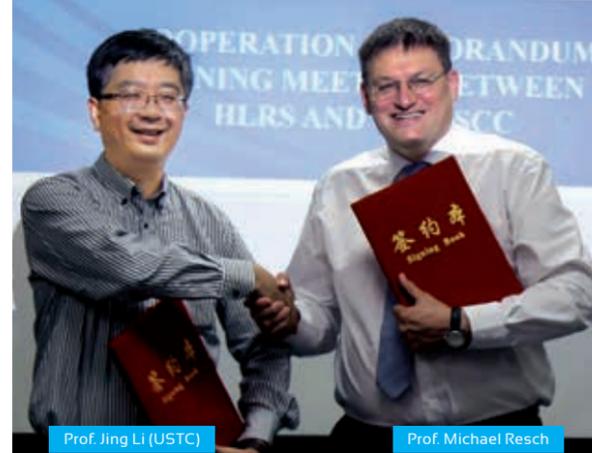
## Mobility Living Lab wird für emissionsfreies Campuskonzept ausgezeichnet

Im Zuge der Teilnahme an einem Wettbewerb des Landes Baden-Württemberg zur Entwicklung von Konzepten für einen emissionsfreien Campus haben sich HLRS-Visualisierer mit Forschern des Instituts für Straßen- und Verkehrswesen und des Instituts für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrtwesen der Universität Stuttgart in einem Projekt namens MobiLab zusammengetan. Das Visualisierungsteam entwickelte ein 3D-Modell des Campus Vaihingen der Universität Stuttgart und setzte virtuelle Verkehrsteilnehmer wie Autos, Busse und Fußgänger in Bewegung. Die Software ermöglicht es den Nutzern, Parameter anzupassen und die Auswirkungen ihrer Änderungen in Echtzeit zu beobachten. Das Team präsentierte die Technologie im September im Stuttgarter Mercedes-Benz Museum während der Veranstaltung Vision Smart City – Mobilität der Zukunft heute. Im Dezember wurde MobiLab als ein Gewinner des Wettbewerbs ausgezeichnet. (CW)



### Schüler der Kulturakademie Baden-Württembergs besuchen das HLRS

Am 6. März besuchten 19 Schüler das HLRS als Teilnehmer der Kulturakademie Baden-Württemberg. Die Veranstaltung in Zusammenarbeit mit dem Verein Deutscher Ingenieure (VDI) und der Universität Stuttgart bot den Schülern eine Einführung in Hoch- und Höchstleistungsrechnen. Während eines Workshops arbeiteten die Teilnehmer mit HLRS-Experten an der rechnerischen Optimierung der Luftströmung über einem Flugzeugflügel und visualisierten ihre Ergebnisse dann in der raumorientierten 3D-Visualisierungseinrichtung des HLRS namens CAVE. Seit 2010 bietet die Kulturakademie Baden-Württemberg talentierten Schülern die Möglichkeit, tiefer in Themen aus Kunst, Literatur, Wissenschaft und Technik einzutauchen. Ziel des Programms ist es, motivierten Schülern eine Gelegenheit zu geben, ihre Interessen zu fördern und sich beruflich zu orientieren. (EG)



### HLRS stärkt Zusammenarbeit in Asien

Das HLRS vertiefte seine Zusammenarbeit mit chinesischen Forschungseinrichtungen und unterzeichnete Kooperationsvereinbarungen mit dem Supercomputing Center der Chinese University for Science and Technology in Hefei und dem National Supercomputing Center an der Sun-Yat-sen-Universität in Guangzhou. Diese werden den Informationsaustausch durch den Austausch von Wissenschaftlern, regelmäßige Treffen und gemeinsame Forschungsprojekte erleichtern. Prof. Ming-Jyh Chen, Dekan für Maschinenbau der National Taiwan University of Science and Technology, besuchte das HLRS im Mai ebenfalls, um die bestehende Zusammenarbeit zwischen dem HLRS und seiner Einrichtung, auch durch den Austausch von Studenten und Wissenschaftlern, zu verlängern. (CW)



### HLRS sammelt Geld für Kinderhospiz

Ein vom HLRS und Partnern organisiertes Team nahm am jährlichen „Hand in Hand“-Spendenlauf teil und sammelte 860 Euro zur Unterstützung des Kinder- und Jugendhospizes des Hospizes Stuttgart. Mit insgesamt 860 Runden belegte das Team den 11. von 197 Plätzen. Hochleistungsrechner-Hersteller Cray sponserte das HLRS. Das Geld wird Programmen zugutekommen, die schwerkranken Kinder und ihren Familien helfen. (CW)



### EXCELLERAT präsentiert System zur Datenverwaltung auf SCI9

In Zusammenarbeit mit EXCELLERAT, dem European Centre for Excellence for Engineering, entwickeln das HLRS und seine Partner eine neue HPC-Plattform für den sicheren Austausch und die sichere Verwaltung von Daten. Letztlich soll die Datenübertragung für HPC-Nutzer vereinfacht werden, insbesondere für kleine und mittlere Unternehmen. Die Plattform umfasst eine benutzerfreundliche grafische Web-Oberfläche

zur Durchführung von Berechnungen, Tools zur Visualisierung von Ergebnissen, Mechanismen zur verschlüsselten Datenübertragung, Techniken zur Verringerung der Datenmenge für eine schnellere Datenübertragung, ein visuelles Dashboard für das Cluster-Management und ein Warteschlangensystem für Produktionsläufe. Das EXCELLERAT-Team stellte auf der SCI9 in Denver, Colorado, USA, einen Prototyp des Systems vor. (CW)

### Supercomputing-Akademie bietet IT-Administratoren neue Schulungsmöglichkeit

Die Supercomputing-Akademie veranstaltete im September ihren dritten Kurs, um den Einsatz und die Administration von Supercomputern Teilnehmern näherzubringen: „HPC-Cluster: Plan, Build, Run.“ Der Kurs vermittelte IT-Managern, Administratoren, Informatikern und anderen Teilnehmern, die den Einsatz von HPC-Computern in der Industrie koordinieren, grundlegendes Wissen über den Betrieb von Cluster-Systemen. Durch den „Blended Learning“-Ansatz konnten berufstätige Teilnehmer den Kurs problemlos mit ihrem Alltag kombinieren. Die 2018 gegründete Supercomputing-Akademie hat bereits andere Module zu paralleler Programmierung und Simulation veranstaltet. Weitere Module wie z. B. Performance-Optimierung, Visualisierung und Data Management folgen. (CW)

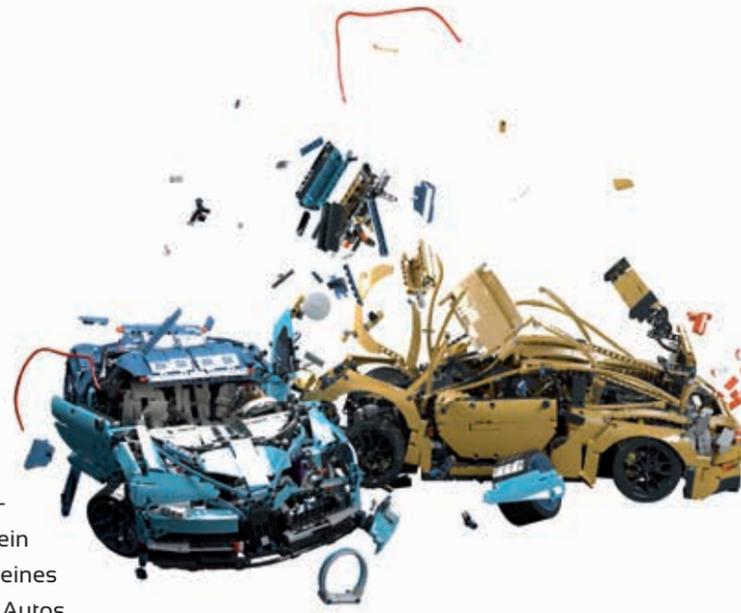


### Preisgekrönte Kunstinstallation stellt Höchstleistungsrechnen in einen historischen Kontext

Fotograf Armin Linke und Fotohistorikerin Dr. Estelle Blaschke zeigten im Rahmen ihrer Installation Image Capital im Kunstmuseum Stuttgart großformatige wissenschaftliche Visualisierungen, die am HLRS erstellt wurden, sowie Videointerviews mit HLRS-Mitarbeitern, die erklärten, wie Höchstleistungsrechnen, Datenspeicher und Visualisierung heute in Forschung und Technik eingesetzt werden. Linke und Blaschke stellten das HLRS in den Kontext anderer Beispiele aus der Geschichte der Datenspeicherung und Visualisierung. Die Ausstellung wurde im Zuge des Wettbewerbs um den Kubus. Sparda-Kunstpreis 2019 durchgeführt. Dieser wird jedes Jahr an einen herausragenden Künstler vergeben, der in Baden-Württemberg lebt oder eine enge Beziehung zum Bundesland hat. Linke wurde im Mai zum Preisträger ernannt. (CW)

### Simulationen mit Crash-Modellierung von LEGO-Testautos

Simulationsexperten des Softwareunternehmens DYNAmore arbeiteten mit den Sicherheitsexperten des ADAC und den Visualisierungsexperten des HLRS zusammen, um ein Experiment zur Vorhersage der Konsequenzen eines realen Unfalls zwischen zwei aus LEGO gebauten Autos durchzuführen. Obwohl das Experiment Spielzeugautos nutzte, ähnelten die Methoden denen, die bei der Entwicklung von Crashtests für echte Autos verwendet wurden. Die Forscher erstellten hochauflösende digitale Modelle eines LEGO-Porsches und -Bugattis, bei



denen jeder Block aus Tausenden von Referenzpunkten bestand. Die Forscher verglichen die Ergebnisse der virtuellen und realen Crashtests und stellten eine sehr gute Übereinstimmung fest, obwohl im physischen Crashtest mehr zerstört wurde als im virtuellen (CW)

### 3. iHURT-Meeting beleuchtet HPC-Nutzung in der Industrie

Um die speziellen Anforderungen von HPC-Nutzern in der Industrie besser bedienen zu können, luden die SICOS BW und das HLRS zum 3. Industrial HPC User Roundtable ein. Die Veranstaltung bot ein Forum für das HLRS und seine Nutzer, um sich über den Stand der Technik im Bereich Hoch- und Höchstleistungsrechnen, die spezifischen Herausforderungen von Nutzern in der Industrie und über den Beitrag auszutauschen, den das HLRS zu deren Bewältigung beisteuern könnte. Das Programm enthielt Präsentationen von Nutzern der HPC-Systeme des HLRS in der Industrie, beleuchtete neue Ansätze für den Einsatz Künstlicher Intelligenz und erörterte die jüngsten Entwicklungen am HLRS. In offener Diskussion besprachen die Teilnehmer wichtige Themen bezüglich Schulungen, der Datenübertragung, und des Zugangs zu Softwarelizenzen. (CW)



### Zusammenarbeit mit dem Deutschen Literaturarchiv für bessere digitale Recherche

Das HLRS entwickelt gemeinsam mit dem Deutschen Literaturarchiv sowie dem Institut für Literaturwissenschaft und dem Institut für Maschinelle Sprachverarbeitung der Universität Stuttgart eine neue Plattform für die Verwaltung und Analyse von Daten zur Literaturrecherche. Das Projekt konzentriert sich auf „Born-digital“-Literatur, zum Beispiel auf digitale Nachlässe und Texte von Autoren, die in Blogs und auf anderen Websites veröffentlicht werden. Es strebt ein nachhaltiges und skalierbares Archiv für die Speicherung, Organisation und den Zugriff auf digitale Daten, eine integrierte Tool-Pipeline für die digitale Literatur- und Sprachanalyse und einen Rahmen für die Bereitstellung von Forschungsergebnissen an. Das Projekt konzentriert sich auf die Bedürfnisse von Wissenschaftlern in den Digital Humanities, einem sich schnell entwickelnden Bereich, der Berechnungsmethoden verwendet, um neue Arten von Fragen in der geisteswissenschaftlichen Forschung aufzuwerfen. Das Projekt ist eines von vier neuen Science Data Centers, gefördert vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg. (CW)

### VR-Anwendungen für Architektur in Rom

Das HLRS nahm zusammen mit StudentInnen der Hochschule RheinMain an einem Virtual-Reality-Workshop an der Universität La Sapienza in Rom teil. Das Treffen setzte die bestehende Zusammenarbeit mit dem Unternehmen FENDI und der Universität La Sapienza fort. Die StudentInnen entwickelten Eingriffe in die Architektur an Orten in der Stadt, darunter der Palazzo della Civiltà Italiana, der Innenhof des Ministeriums für Infrastruktur und Transport und ein Kreuzgang an der Fakultät für Ingenieurwesen der Universität La Sapienza. Die Visualisierungsspezialisten des HLRS führten Laserscans der Orte durch und standen den StudentInnen mit Hilfe eines mobilen VR-Projektionssystems bei, ihre Konzepte mit Vertretern der teilnehmenden Organisationen zu besprechen. Als Ergebnis des Workshops ist eine zukünftige Zusammenarbeit für die Ausgrabung des Portus Romae geplant. (CW)



### Verleihung der Golden Spike Awards auf 22. jährlichen Results and Review Workshop

Zum Abschluss des 22. Results and Review Workshop des HLRS gab Dr. Dietmar Kröner, Professor an der Universität Freiburg und stellvertretender Vorsitzender des HLRS-Lenkungsausschusses, die Gewinner der Golden Spike Awards 2019 bekannt. Konstantin Fröhlich von der RWTH Aachen wurde für seine Arbeit zur Simulation von Partikelströmen ausgezeichnet, die Verbrennungsprozesse sauberer und effizienter machen soll. Thomas Kuhn von der Universität Stuttgart erhielt den Preis für seine Arbeit zur Untersuchung der Strömungsdynamik der Luftströmung über Hohlräumen in Flugzeugflügeln mit dem Ziel eines effizienteren und leiseren Flugverkehrs. Annalisa Pillepich vom Max-Planck-Institut für Astronomie und Dylan Nelson vom Max-Planck-Institut für Astrophysik wurden für ihre Simulation der Galaxienentstehung im Rahmen des Projekts Illustris ausgezeichnet. (EG)



### Tag der Wissenschaft 2019

Am 29. Juni lud das HLRS im Zuge des jährlichen Tags der offenen Tür der Uni Stuttgart die Öffentlichkeit ins Zentrum ein. Die Besucher besichtigten den Rechneraum des HLRS und informierten sich über die Fähigkeiten des Hazel-Hen-Supercomputers. Sie konnten auch die CAVE besuchen, die 3D-Virtual-Reality-Umgebung des HLRS, um virtuell eine Probefahrt in den Straßen Stuttgarts oder einen Drachenflug über den Schwarzwald zu machen. Kinder nahmen an einer Schnitzeljagd im Gebäude teil und erfuhren so mehr über die Forschung am HLRS. Darüber hinaus brachte das HLRS kleinen Kindern in einer chinesischsprachigen Vorlesung die Grundlagen der Informatik näher. (EG)



# HLRS für Umweltschutz zertifiziert

Zertifizierungen für Umwelt- und Energiemanagement erkennen die umfassenden Schritte an, die das Höchstleistungsrechenzentrum zur Kontrolle seiner Umweltauswirkungen unternommen hat.

Im November wurde das HLRS gemäß ISO 14001 (Umweltmanagement) und ISO 50001 (Energiemanagement) zertifiziert. Diese Leistung ist das Ergebnis mehrjähriger Arbeit, ein umfassendes Nachhaltigkeitskonzept zu entwickeln und umzusetzen.

Die international anerkannten Zertifizierungen bestätigen, dass das HLRS Schritte unternommen hat, um organisationsweit die Umweltbelastung zu minimieren, und bieten einen Rahmen, der die Bemühungen um weitere Verbesserungen bezüglich Nachhaltigkeit in den kommenden Jahren leiten wird.

„Da Höchstleistungsrechnen erhebliche Ressourcen erfordert“, so HLRS-Direktor Prof. Dr. Michael Resch, „haben wir vor Jahren beschlossen, dass wir tun müssen, was wir können, um unsere Aktivitäten möglichst umweltschonend zu gestalten. Diese Zertifizierungen zeigen, dass das HLRS auf dem richtigen Weg ist, auch in Zukunft eine nachhaltige Ressource für Wissenschaft, Technik und alle Bereiche der Gesellschaft zu sein.“

Die ISO 14001 ist eine internationale Norm für die Entwicklung eines Umweltmanagementsystems in Organisationen. Am HLRS zählt dazu die Berücksichtigung von Umweltauswirkungen bei Kaufentscheidungen, die Wiederverwendung von Ressourcen, die Unterstützung von nachhaltigkeitsorientierter wissenschaftlicher Forschung und die Förderung von Nachhaltigkeit bei vergleichbaren Einrichtungen.

Mit der Zertifizierung gemäß ISO 50001 werden die Bemühungen des HLRS zur Maximierung seiner Energieeffizienz anerkannt. Dies umfasst die Festlegung von Zielen zum Energieverbrauch und dessen Nachverfolgung sowie Infrastrukturverbesserungen zur Optimierung der Energieeffizienz.

Nach einem Umweltaudit wurde das HLRS auch gemäß Eco-Management and Audit Scheme (EMAS) zertifiziert, dem weltweit anspruchsvollsten System für das Umweltmanagement in Organisationen. Seit Anfang 2020 ist das HLRS das erste HPC-Zentrum mit EMAS-Zertifizierung in Europa. (CW)



Mitglieder des HLRS-Nachhaltigkeitssteam feiern ISO-Zertifizierung.

# Ein neuer Supercomputer für KI-Anwendungen

Ein neuer GPU-beschleunigter Cray CS-Storm-Supercomputer vereint Künstliche Intelligenz und Höchstleistungsrechnen am HLRS.

Im November erweiterte das HLRS mit der Installation eines neuen Cray CS-Storm-Supercomputers sein Rechnerprofil um eine wichtige Komponente. Das System wird die anderen Höchstleistungsrechner des Zentrums ergänzen – unter anderem das kurz vor der Einführung stehende Vorzeigemodell Hawk –, indem es die wachsende Nachfrage der Nutzer nach einem System bedient, das für maschinelles und Deep Learning optimiert ist.

Viele Supercomputer, auch das Modell Hawk, basieren auf einer CPU-Architektur (CPU: Central Processing Unit), die nach wie vor die treibende Kraft hinter rechenintensiven Aufgaben wie Simulationen und Modellierungen ist. Seit einigen Jahren steigt jedoch die Nachfrage nach Systemen wie dem CS-Storm, die auf Grafikprozessoren (GPUs) setzen. Ursprünglich für Videospiele und digitale Grafiken entwickelt, beschleunigen GPUs bestimmte Arten von iterativen, parallel verlaufenden Rechenoperationen, wie sie typischerweise

bei KI-Anwendungen eingesetzt werden, indem sie ein Problem in Tausende oder gar Millionen kleinere Operationen aufteilen, die gleichzeitig ablaufen.

Da das HLRS diese verschiedenen Systeme nun unter seinem Dach vereint, bieten sich den Nutzern jetzt mehr technische Möglichkeiten und Ansätze, die sie ausschöpfen und kombinieren können, um so schnellere Lösungen für die drängendsten Probleme von heute zu finden.

„Da KI Teil unseres Serviceportfolios wird, benötigen wir eine Infrastruktur, welche die Annäherung von traditionellen Höchstleistungsrechner-Anwendungen und KI-Workloads unterstützen kann, um unseren Nutzern besser zu helfen“, so HLRS-Direktor Michael Resch. „Unsere Wissenschaftler werden das neue CS-Storm-System für KI-Anwendungen einsetzen, um viel schnellere Ergebnisse zu erzielen und neue Einblicke in traditionelle Arten von Simulationsergebnissen zu gewinnen.“ (CW)



© courtesy of Cray

Das Cray-CS Storm ist für den Bereich Deep Learning und KI optimiert.

# HLRS bietet Industrie System für sichere cloud-basierte KI

Ein neues Start-up namens LandesCloud wird Unternehmen Zugang zu einer hochmodernen Plattform für Künstliche Intelligenz und High-Performance-Datenanalyse bieten.

Im November begann das HLRS eine Partnerschaft mit einem neuen Start-up namens LandesCloud, um mit Datenspeicher und Rechnerinfrastruktur eine sichere cloud-basierte Plattform für Künstliche Intelligenz zu schaffen. LandesCloud wird branchenübergreifend auf die Bedürfnisse von Kunden eingehen, deren KI-Rechnerinfrastruktur begrenzt ist, die aber sichere Datenspeicher und Höchstleistungsrechner für maschinelles Lernen benötigen. Das gilt für kleine und mittlere Unternehmen (KMU) genauso wie für Großkonzerne. Bei der LandesCloud geht Datensicherheit in allen Phasen der Übertragung, Speicherung, Verarbeitung und Analyse von Daten vor, was der Industrie sehr wichtig

ist. Sobald ein Unternehmen der LandesCloud seine Daten übermittelt, werden diese auf einen speziellen kundenspezifischen sicheren LandesCloud-Server verschoben, der beim HLRS gehostet wird. Jeder Server ist für maximale Sicherheit strikt von den anderen getrennt.

Die LandesCloud soll KI-Kooperationsprojekte wie Teamarbeit, Crowdfunding und sogar Data-Science-Wettbewerbe unterstützen. LandesCloud könnte auch eine nützliche Plattform für den Datenaustausch zwischen Organisationen bieten, unter anderem bei der Fertigung und der Lieferkette. Die cloud-basierten Lösungen von LandesCloud beinhalten gängige Softwarepakete für maschinelles Lernen und Datenanalyse und ersparen den Benutzern somit Installation, Wartung und Betrieb von komplexer Software und teuren Servern.

„LandesCloud ist dahingehend einzigartig, dass wir erstmals in Kooperation mit einem deutschen Höchstleistungsrechenzentrum derart umfassende KI-Leistungen anbieten“, so LandesCloud-Geschäftsführer und -Gründer Stefan Weingärtner. „Unseren Kunden wird auch das Know-how des HLRS zugutekommen, was die Skalierbarkeit der Anwendungen und die Komplexität der Rechenoperationen anbelangt.“ (CW)



© Simon Sommer für HLRS

# HiDALGO: High-Performance-Datenanalysen zur Lösung globaler Herausforderungen

Ein EU-finanziertes Projekt entwickelt Methoden zur effizienten Analyse großer Datensätze mit Schwerpunkt auf Problemen im Zusammenhang mit Migration, Luftverschmutzung und der Verbreitung von Informationen über soziale Medien.



Mitglieder des HiDALGO-Teams beim Treffen am HLRS.

Die umfassenden Verkehrs- und Kommunikationsnetze von heute haben viele regionale gesellschaftliche Herausforderungen global gemacht. Dadurch gibt es eine größere Nachfrage seitens Regierungen nach Werkzeugen, die Echtzeit-Prognosen liefern können, mit denen sie derartige Herausforderungen voraussehen und bewältigen können. Die Bereitstellung solcher Tools erfordert jedoch neue Methoden zur effizienten Verwaltung und Analyse der enormen Datensätze, die zur Darstellung solcher Probleme benötigt werden.

Deshalb startete das HLRS 2019 in Zusammenarbeit mit ATOS und elf weiteren Einrichtungen ein neues Forschungsprojekt namens HiDALGO. Im Rahmen des EU-Förderprogramms Horizont 2020 finanziert, entwickelt HiDALGO Berechnungsmethoden, Algorithmen und Software zur Modellierung komplexer, datenreicher Prozesse. So wird auch erforscht, wie Künstliche Intelligenz dabei helfen könnte, schneller

realistischere Modelle dieser Herausforderungen zu entwickeln. Die technische Leitung des Projekts obliegt dem HLRS.

Zugleich unterstützt HiDALGO Pilotprojekte, in denen diese Methoden einen praktischen Einfluss auf die Bewältigung bestimmter globaler Herausforderungen haben könnten: Flucht vor Krieg, Luftverschmutzung und die Verbreitung von Informationen über soziale Netzwerke. In jedem Fall soll nicht nur ein spezifisches Problem gelöst, sondern auch der Einsatz von High-Performance-Datenanalysen im HPC-Rahmen verbessert werden.

„HiDALGO zeigt, dass HPC und High-Performance-Datenanalyse nicht nur für die wissenschaftliche Forschung oder die Optimierung von technischen Entwürfen nützlich sind“, so HLRS-Geschäftsführer Bastian Koller. „HPC spielt auch eine wichtige Rolle bei der Bewältigung einiger der schwierigsten Herausforderungen unserer Gesellschaft.“ (CW)

# Neue Visionen für HPC und Medienkunst: Ein Interview mit Matthias Hauser

Das Media Solution Center fördert die Zusammenarbeit von HPC-Experten und führenden Köpfen der Kunst- und Medienindustrie.

In Zusammenarbeit mit der Hochschule der Medien und dem Zentrum für Kunst und Medien (ZKM) wurde 2018 das Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC) am HLRS gegründet. Zentrale Aufgabe des MSC ist die Innovationsförderung in der Kunst- und Medienindustrie, indem es dieser Branche Zugang zu High-Performance-Computing- und Visualisierungs-Technologien sowie dem dazugehörigen Know-how verschafft.

2019 übernahm Matthias Hauser als Direktor die Leitung des MSC. Hauser verfügt über mehr als 25 Jahre Erfahrung im Kulturmanagement und sieht im MSC eine großartige Plattform, als bindendes Glied zwischen den Wissenschaften und der Technologie, den Medien, kulturellen Organisationen, der Industrie und anderen Sektoren zu fungieren. Mit der wachsenden Zahl von Kunstorganisationen und Repräsentanten aus der Kunstindustrie, die mit dem MSC zusammenarbeiten, beweist das Center sein enormes Potenzial, der Medien- und Kunst-Landschaft gänzlich neuartige Wege eröffnen zu können. Als Schnittstelle zwischen HPC-Technologie und Kunst bringt das Center die Personen und Ressourcen zusammen, die es ermöglichen, visionäre interdisziplinäre Projekte zu unterstützen, die auf modernsten digitalen Werkzeugen aufbauen.

**?** Herr Hauser, Sie haben den Großteil Ihrer Karriere im Bereich Kulturmanagement verbracht. Was hat Sie zu einem Wechsel in ein Höchstleistungsrechenzentrum bewogen?

**▶** 2015 ist das HLRS auf meine Kunstagentur gekommen, um zu fragen, ob wir nicht ein gemeinsames Projekt realisieren wollten. Durch eine Vernetzung zwischen dem HLRS und dem Itaú Cultural in São Paulo haben wir die Künstlerin Regina Silveira vorgeschlagen. Sie besuchte daraufhin 2016 das HLRS und kreierte mit dessen Wissenschaftlern und Technikern ein Virtual-Reality-Kunstwerk namens Infinities. Das Werk wurde in der Kunstszene in Stuttgart bekannt. In 2018 entstand daraufhin im Kunstmuseum Stuttgart eine große Ausstellung über Virtual Reality in der zeitgenössischen Kunst unter der Kuratorin Frau Dr. Eva-Marina Froitzheim mit dem Titel Mixed Realities.

In diesem Kontext hatten Prof. Dr. Michael Resch und ich uns öfters getroffen. Von Anfang an haben wir uns gefragt, warum wir nicht für die Stadt Stuttgart das erste eCulture-Festival gründen könnten? Diese Idee haben wir sehr intensiv in verschiedenen Sitzungen und Konferenzen bearbeitet, und in Zusammenarbeit mit der Stadt Stuttgart, dem Kunstmuseum Stuttgart und anderen Partnern ist daraus ein großes Projekt entstanden. Anlässlich des 25-jährigen Jubiläums des HLRS 2021 wird eine Convention in Stuttgart stattfinden, der 2022 das theGATE Festival (Global Arts Technology Environment) folgen wird. theGATE ist eine Initiative für das 21. Jahrhundert, um die Konvergenz von Wissenschaft, Kunst und Gesellschaft zu erforschen.

Unsere Zusammenarbeit in diesen innovativen Projekten hat mich persönlich sehr begeistert. Als Prof. Resch mich gefragt hat, ob ich die Geschäftsführung des Media Solution Centers übernehmen würde, habe

ich sofort zugesagt, weil es mich sehr interessiert, hier direkt am HLRS zu arbeiten. Es gibt weltweit kein anderes Höchstleistungsrechenzentrum, wo ein solches Konzept angeschlossen ist. So etwas zu haben ist einmalig.

**?** Worin sehen Sie die Hauptaufgabe des Media Solution Centers?

**▶** Unser Ziel ist, High-Performance Computing (HPC) allen Bereichen in der Medien-, Kunst- und Kulturlandschaft zugänglich zu machen. Am Anfang war das Media Solution Center auf die Verschlinkung des Produktionsprozesses in der Film- und Animationsindustrie ausgerichtet aber seit unserer offiziellen Gründung ist uns Interesse aus mehreren anderen Bereichen zuteil geworden. Das Media Solution Center arbeitet jetzt z.B. an Projekten mit der Staatsoper Stuttgart, dem SWR, dem Stuttgarter Kammerorchester, der Theaterkunst in Berlin, dem ZKM, der Filmakademie Ludwigsburg, M.A.R.K. 13 Filmproduktion und anderen Partnern, und unsere Tür steht für alle Interessenten offen.

Von Anfang an habe ich das Media Solution Center als sehr zukunftsweisend gesehen, weil aufgrund der Digitalisierung viele Künstler und Kultur-Institutionen spontan neue Arten von Fragestellungen haben. Künstler haben ein Gespür für den Puls der Zeit in der Gesellschaft, sie sind nahe an den aktuellen Themen dran, wie das Leben ist oder wie es sich verändert. Viele davon nutzen schon die neue Möglichkeiten, die digitale Technologien anbieten und setzen diese in ihren Kunstwerken um.

Das bedeutet, dass wir jetzt den Aufbruch eines neuen Kulturzweiges erleben: eCulture. Deswegen ist das



Media Solution Center Geschäftsführer Matthias Hauser

MSC, auch wenn es sich noch in seiner Startphase befindet, mit all seinen Möglichkeiten nicht mehr wegzudenken. Die neuen Bewegungen in den Unternehmen, der Kultur und der Gesellschaft brauchen die Technologien und das Know-how von Wissenschaftlern, um ihre Konzepte umsetzen zu können.

Gleichzeitig ist es für die Wissenschaftler am HLRS spannend, sich mit den Künsten zu vernetzen, um wiederum ihre eigenen Fragestellungen besser lösen zu können. Dieser Austausch wird immer intensiver, weil die Kunst und die digitalen Medien oft zusammenfließen, und weil so viel Neues in Bereichen wie Augmented Reality und Virtual Reality passiert. Große Themen

der Wissenschaft bekommen einen neuen Input durch die Sichtweise der Künstler und der Kulturschaffenden. Das Besondere beim Media Solution Center ist, dass wir hier genau die richtigen Ressourcen haben, diese Vernetzung zu fördern. Am HLRS haben wir einen großen Rechner, Wissenschaftler und Experten für Visualisierung. Gleichzeitig arbeiten wir sehr eng mit Kollaborationspartnern wie der Hochschule der Medien und einem der wichtigsten Kunstmuseen weltweit, dem ZKM, zusammen. Wir sind nicht eine isolierte Institution, sondern wir nutzen praktisch die Kompetenzzentren von allen Partnern.

#### Wie funktioniert das MSC in der Praxis?

Wenn man das MSC-Logo betrachtet, sieht man einen runden Kreis. Wir wollen einen großen Tisch anbieten, an dem z.B. Wissenschaftler, Techniker, Visionäre, Philosophen, Künstler, Museumsdirektoren und Schriftsteller zusammenkommen und Problemstellungen gemeinsam angehen können. Jeder ist am Media Solution Center mit seinem bestimmten Problem willkommen. Alle setzen sich dann an diesem Tisch zusammen, um ihr individuelles Wissen und die unterschiedlichen Fragestellungen untereinander zu teilen. Es wird dann gemeinsam überlegt, welche Ressourcen nötig sind, um etwas Spannendes in Angriff zu nehmen. Jeder hat eine andere Sprache und eine andere Denkweise. Wir hoffen, dass solche Projekte Symbiosen aufzeigen, die sich im Media Solution Center ergeben könnten. Am MSC können wir diese auf verschiedenen Ebenen bedienen, koordinieren und schauen, was machbar ist.

#### Wie erleben Spezialisten aus verschiedenen Disziplinen diese Art der Zusammenarbeit?

In den ersten Runden mit verschiedensten Partnern haben wir mehrmals die gleiche Aussage gehört: „WOW, ich wäre nie auf die Idee gekommen, auf ein Höchstleistungsrechenzentrum zuzugehen!“ Aber wenn sie zu uns kommen, eröffnen sich völlig neue Möglichkeiten: Ein Brainstorming auf höchster Ebene, und dann auch die Möglichkeit der Umsetzung der Ideen vor Ort. Daraus erschließen sich komplett neue Ansätze und Wege. Wenn wir den Mut haben, aus unserem täglichen Arbeitsumfeld auszubrechen und ein freieres Umfeld

zu betreten, wo nicht alles im beruflichen Kontext steht und alles bereits bekannt ist, dann haben wir den Freiraum, Neues entstehen zu lassen. Und dies kreieren wir am MSC und an anderen Orten. Wir fangen wieder an, zu experimentieren, und – sicher! – wir fahren Konzepte auch schon mal an die Wand. Daraus entsteht wieder ein anderes Selbstvertrauen, eine neue Sichtweise auf das Eigene und somit letztlich Fortschritt. Fehler sind wichtig für den Fortschritt, und wir sollten ihnen einen Freiraum geben.

Wenn man jemanden aus dem Kontext herausnimmt – zum Beispiel in einer Zusammenarbeit zwischen Ärzten und einer Performancegruppe wie mit La Fura dels

Baus, Barcelona – ist es extrem spannend zu sehen, was passiert. Die Technologie und die Wissenschaftler arbeiten dann Hand in Hand an einer Performance. Das ist auch so, wenn Experten für Augmented Reality, Virtual Reality und Simulation deren Technik außerhalb ihres normalen Arbeitskontextes einsetzen. So bekommt man neue Ideen und eine ganz neue Sichtweise. Dafür steht das Media Solution Center: diese Vernetzung zu unterstützen und diese Visionen für alle zu ermöglichen.

(CW)



Das MSC koordiniert die Zusammenarbeit zwischen dem HLRS und der Staatsoper Stuttgart, um zu erforschen, wie die Virtuelle Realität die Sanierung des Spielhauses unterstützen könnte.

# Internationaler Workshop zu Trends beim HPC-Einsatz in der Industrie

Höchstleistungsrechenzentren ergreifen eine Vielzahl von Maßnahmen, um den Zugang zu Supercomputern für kommerzielle Forschung und Entwicklung zu verbessern.

Da digitale Technologien das Sammeln von Daten erleichtern, steigt in der Industrie der Bedarf nach Lösungen, die zur Datenanalyse Höchstleistungsrechner erfordern. Insbesondere die Entwicklung hin zur Industrie 4.0 bedeutet, dass neben dem anhaltenden Bedarf an klassischen HPC-Anwendungen für die Simulation in vielen Branchen auch eine wachsende Nachfrage nach Datenanalyse, Visualisierung und Künstlicher Intelligenz besteht.

Wie sich die Bedürfnisse der Industrie entwickeln und wie HPC-Zentren dabei helfen können, diese zu erfüllen, stand im Mittelpunkt des International Industrial Supercomputing Workshop 2019 am HLRS. Diese Veranstaltung zog Führungskräfte von führenden Höchstleistungsrechenzentren in Europa, Asien und den Vereinigten Staaten an.

Obwohl viele Unternehmen standardmäßige parallele Computersysteme besitzen, bietet ihnen der Zugang zu Supercomputern einzigartige Möglichkeiten. Es können

neue rechenintensivere Methoden getestet, Erkenntnisse über fortschrittlichere Computersysteme gewonnen und Pilotprojekte ausprobiert werden, welche die wirtschaftlichen Vorteile einer Erweiterung der eigenen internen Computersysteme rechtfertigen können.

Gleichzeitig profitieren große und kleine Unternehmen von der persönlichen Unterstützung, die HPC-Zentren bieten. In einigen Zentren gehören dazu fachbereichsspezifische, wissenschaftliche Kompetenzzentren, die die Unternehmen mit ihren Kenntnissen in bestimmten HPC-Anwendungsbereichen und Methoden der Informatik unterstützen können. Wichtig sind außerdem benutzerfreundliche Systeme und ausgezeichnete technische Unterstützung.

Während der Veranstaltung stellten die Referenten Beispiele vor, wie sich HPC-fähige Technologien auf die industrielle Forschung in ihren jeweiligen Zentren auswirken, und beschrieben Programme, die die industrielle Verfügbarkeit ihrer Systeme erhöhen. (CW)

# HLRS entwickelt gemeinsam mit SWR Software zur Musikempfehlung



Die Audiodaten-Analyse ermöglichte dem SWR die Entwicklung eines neuen Software-Tools zur Feststellung von Ähnlichkeiten zwischen Musiktiteln.

Hintergrundmusik wird gern bei Filmen und im TV eingesetzt, um eine bestimmte Stimmung zu erzeugen, aber für die Redakteure von Rundfunkanstalten wie dem SWR kann es äußerst zeitraubend sein, die perfekte Auswahl zu treffen. Kürzlich stellte der SWR fest, dass KI-Algorithmen Redakteuren helfen könnten, für bestimmte Situationen geeignete Musik schneller zu finden. Auf einer Pressekonferenz am HLRS stellte die Rundfunkanstalt ein Software-Tool vor, das sie mit dem HLRS entwickelt hatte, um automatisch Ähnlichkeiten zwischen Musikstücken zu erkennen.

Die Software namens AIR bietet eine benutzerfreundliche grafische Oberfläche, in die ein Redakteur einen zu einer bestimmten Situation passenden Musiktitel eingeben kann. Das Tool durchsucht dann das Musikarchiv des SWR nach ähnlichen Musiktiteln. Während kommerzielle Musik-Streamingdienste wie Amazon oder Spotify bei ihren Empfehlungsalgorithmen stark von der Aktivität und den Likes der Nutzer abhängen,

untersucht das neue SWR-Tool den digitalen Inhalt der Musikdateien auf rund 700 Audioeigenschaften. Dazu gehört die Quantifizierung musikalischer Merkmale wie Tempo, Lautstärke, Komplexität, Ruhe und anderer Faktoren, die jedes Stück einzigartig machen. Sobald diese Merkmale für jeden Titel festgelegt sind, führt der Algorithmus eine Nächste-Nachbarn-Analyse durch und sortiert andere Dateien entsprechend der Ähnlichkeit ihrer Profile mit dem des Vorgabetitels.

Da das SWR-Musikarchiv etwa zwei Millionen Dateien enthält, hätte die Durchführung einer derart komplexen Analyse auf den eigenen Rechnern monatelang die Kapazität voll ausgelastet. Das HLRS hat einen Testlauf von circa 230.000 Musiktiteln in etwa eineinhalb Wochen durchgeführt – eine große Verbesserung. Nachdem die Analysedaten an den SWR zurückgegeben wurden, nutzten die Software-Entwickler die Ergebnisse als Grundlage für dessen KI-Algorithmus. (CW)

# The Society of Learning Algorithms

Auf einer Konferenz am HLRS erörterten Philosophen, Sozialwissenschaftler und Historiker die Auswirkungen der Verbreitung von Künstlicher Intelligenz.



Da Künstliche Intelligenz den Alltag immer mehr durchdringt, stellen sich viele Fragen. Was soll KI für uns tun und wie wird die Gesellschaft auf die Veränderungen reagieren? Wer sich mit solchen Fragen beschäftigt, muss richtig verstehen, was Lernalgorithmen sind, wie sich diese von menschlicher Intelligenz unterscheiden und was ihre Chancen, Grenzen und Risiken sind.

In einer dreitägigen Konferenz, organisiert von der HLRS-Abteilung Wissenschaftsphilosophie und Computersimulationstechnologie, besprachen Philosophen, Sozialwissenschaftler und Wissenschaftshistoriker, wie die Sichtweisen aus ihren Fachbereichen zur Klärung solcher Fragen beitragen können. Die Konferenz – Teil vier der Veranstaltungsreihe The Science and Art of Simulation – behandelte unter anderem die erkenntnistheoretischen und ethischen Auswirkungen der Künstlichen Intelligenz, den historischen Kontext des Aufstiegs von KI und die politischen Konsequenzen von KI-Modellen.

Entscheidungen, die stark in das Leben der Menschen eingreifen, basieren zunehmend auf Lernalgorithmen. In Banken helfen sie zum Beispiel bei der Bewertung von Kreditanträgen und Gerichte nutzen sie zur Vorhersage des Rückfalls bei Strafverfahren. Die Konferenzteilnehmer befassten sich mit zwei wichtigen Fragen zu diesem Trend: Wie können wir wissen, dass man den Ergebnissen von Algorithmen des maschinellen Lernens vertrauen kann? Wenn zudem bei der Konstruktion von Lernalgorithmen eine Voreingenommenheit (Bias) unvermeidlich ist, woher wissen wir dann, dass ihre Entscheidungen unseren gesellschaftlichen Werten entsprechen?

Die Konferenz bot nicht nur ein Forum für eine sachkundige, kritische Betrachtung von Lernalgorithmen, sondern zeigte auch auf, dass Experten aus Fachgebieten abseits der Informatik eine wichtige Rolle bei der Entwicklung zuverlässigerer und vertrauenswürdigerer KI-Tools spielen. (CW)

# Symposium hebt neue digitale Tools zur Stadtplanung hervor

Digitale Zwillinge, interaktive Apps und Virtual Reality Tools könnten die Städteplanung verbessern.

Digitale Technologien werden immer leistungsfähiger, was Städte vor die wichtigen Fragen stellt: Wie passt man sich an neue Interaktionsformen an und wie könnten digitale Tools die Planung und Verwaltung von Städten verbessern? Am 29. und 30. Mai veranstaltete das HLRS das internationale Symposium Urban Systems, Global Challenges, Digital Tools, das sich um diese Schlüsselfragen drehte.

Der Workshop in Zusammenarbeit mit dem bwH-PC-S5 Kompetenzzentrum für Global System Science brachte Hochschulforscher, Vertreter von Stadtverwaltungen und Stadtwerken, Aktivisten und andere im Einsatz von digitalen Tools für die Stadtplanung erfahrene Leute zusammen.

Die Veranstaltung fiel mit dem Abschluss des Projekts Reallabor Stadt:Quartiere 4.0 zusammen, einem Experiment zum Einsatz digitaler Technologien zur besseren Einbindung von Bürgern in die Stadtplanung. Als Beitrag erstellte und testete das HLRS einen digitalen Zwilling der Stadt Herrenberg.

Digitale Zwillinge sind digitale Darstellungen realer Objekte oder Umgebungen mit Modellen, Simulationen und Algorithmen, die ihre tatsächlichen Gegenstücke repräsentieren, und oftmals in Virtual-Reality umgesetzt werden.

Dieser digitale Zwilling ermöglichte die Kommunikation zwischen Stadtplanern, Architekten, Gemeindemitgliedern und anderen Beteiligten, indem er Fakten und Zahlen in beobachtbare virtuelle Aktivität umwandelte. Bei ihrer Präsentation auf dem Symposium gaben die Reallabor-Teilnehmer praktische Erfahrungen weiter, die sie bei der Kommunikation mit Stadtverwaltungen und Gemeindemitgliedern gemacht hatten.

Andere Vorträge behandelten weitere Beispiele für die Nutzung digitaler Tools zur Modellierung städtischer Umgebungen, interaktiver Technologien zur Datenerfassung, wie Menschen ihre Umgebung erleben, und Anwendungen zur Modellierung von Bevölkerungsbewegungen, Verkehrsnetzen, Luftqualität und anderen Merkmalen von Städten. (CW)



# Dark Data beleuchtet

In seiner Doktorarbeit am HLRS schlägt Informatiker Björn Schembera Strategien vor, um wertvolle Forschungsdaten produktiver und langfristiges Datenmanagement an HPC-Zentren effizienter zu machen.

Simulationen in Höchstleistungsrechenzentren (HPC-Zentren) erzeugen riesige Datenmengen. Nach einem Forschungsprojekt bleiben potenziell wertvolle Daten jedoch allzu oft ungenutzt und belasten lediglich Server zur Langzeitspeicherung, während sich die Forscher anderen Themen widmen.

2019 kategorisierten HLRS-Informatiker Björn Schembera und Wissenschaftsphilosoph Juan Durán in einer Publikation solche Daten als Dark Data. Aus der Astrophysik ist bekannt, dass dunkle Materie einen beträchtlichen Anteil der Masse des Universums ausmacht, auch wenn sich das nicht beobachten lässt; genauso kann Dark Data unmarkiert, unorganisiert und für Forscher unnütz unzählige Petabyte an Speicherplatz füllen.

Die Anhäufung von Dark Data in HPC-Zentren führt zu mehreren Problemen. So erfordert die Erstellung, Speicherung und Kuratierung großer Datensätze beträchtliche Kosten, etwa für den Bau immer größerer Datenspeicher und deren Stromversorgung. Aus wissenschaftlicher Sicht bedeutet das Verschwinden von Dark Data auf Servern einen Verlust für Informatiker und Ingenieure, die vom Zugang zu diesen Daten profitieren würden. Dark Data birgt auch sicherheitstechnische oder rechtliche Risiken, insbesondere bei persönlich identifizierbaren Daten und Dateneigentum.

„Der Begriff Dark Data wurde schon in anderen Zusammenhängen erörtert“, so Schembera, „aber wir wollten ihn speziell im Kontext des Hoch- und Höchstleistungsrechnens besser verstehen. Die Arbeit war der erste Schritt zur Aufdeckung von Strategien, um

die Anhäufung von Dark Data zu minimieren.“ In seiner kürzlich abgeschlossenen Doktorarbeit schlägt Schembera mehrere mögliche Lösungen für dieses Problem vor.

## Ursachen und Auswirkung von Dark Data

Während seiner Doktorarbeit am HLRS arbeitete Schembera in der Abteilung Project User Management & Accounting, die das Datenmanagement am Zentrum überwacht. So bekam er direkt mit, wie Daten am Zentrum erstellt, gespeichert und genutzt werden, und er deckte zwei Hauptquellen für Dark Data auf.

Oft werden Daten zu Dark Data wegen fehlender oder schwer interpretierbarer Metadaten, also standardisierter Informationen über strukturgebende Datensätze. Wissenschaftler haben meistens weder Zeit noch Interesse, ihre Daten sorgfältig zu markieren, und verwenden oft individuelle Ad-hoc-Ablagesysteme ohne systematische Kennzeichnung zur Datenorganisation. Das mag inmitten eines laufenden Simulationsprojekts ausreichen; später aber wird es häufig äußerst schwierig, zu rekonstruieren, was die Daten bedeuten, oder den Bezug zwischen ihnen und anderen relevanten Daten zu erkennen.

Dark Data entsteht auch, wenn Nutzer von HPC-Systemen inaktiv werden. Ein Beispiel: Nach Abschluss einer Simulation am HLRS speichern HPC-Systeme Daten auf einem Datenserver und verschieben diese später zur Langzeitspeicherung auf Magnetbänder. Wenn Wissenschaftler aber aus dem Zentrum ausscheiden, beansprucht oft niemand mehr die Daten.



Schembera weist darauf hin, dass die Anhäufung von Dark Data das Zentrum durch die Datenspeicherung Geld kostet. Außerdem birgt Dark Data im Falle von personenbezogenen Daten sicherheitstechnische und rechtliche Risiken und steht außerdem im Widerspruch zu den FAIR-Prinzipien (Findability, Accessibility, Interoperability und Reusability), welche die besten Praktiken zur Datenverwaltung und -wiederverwendung festlegen. Die Vermeidung von Dark Data könnte daher den Betrieb und die wissenschaftliche Produktivität von HPC-Zentren in mehrfacher Hinsicht verbessern.

## Der Scientific Data Officer (SDO)

Schemberas Argumentation: Da akademischen HPC-Nutzern das Interesse fehlt, Dark Data zu vermeiden, müssen Höchstleistungsrechenzentren das Problem lösen. In der gemeinsamen Publikation von Schembera und Durán wird vorgeschlagen, dieses Problem über eine neue Position an Höchstleistungsrechenzentren anzugehen, den wissenschaftlichen Datenbeauftragten (SDO).

Genau genommen wäre der SDO ein Experte für Datenmanagement und HPC-Tools, der zwischen Forschern,

Administratoren und der Leitung eines HPC-Zentrums als Schnittstelle fungiert, damit die besten Praktiken bei der Datenverwaltung befolgt werden. Die Aufgaben des SDO würden die Umsetzung und Pflege eines standardisierten Metadaten-Rahmens zur Kennzeichnung von Daten entsprechend den FAIR-Standards umfassen sowie die Unterstützung bei der Verwaltung und beim Abruf gespeicherter Daten.

Darüber hinaus würde der SDO dafür sorgen, dass weniger Dark Data an einem HPC-Zentrum gespeichert wird. Dazu könnte die Identifizierung von Daten in Verbindung mit inaktiven oder gelöschten Nutzern gehören, die aus dem System entfernt werden könnten, die Bewertung von den übrigen Daten hinsichtlich möglicher Speicherung, und die Entscheidungsfindung bezüglich der Datenverwaltung.

## Automatisierte Metadaten-Kuratierung

Angesichts der enormen Datenmengen, die an HPC-Zentren wie dem HLRS generiert werden, ist deren Organisation über Metadaten eine Mammutaufgabe für Forscher oder einen etwaigen SDO.

In seiner Dissertation schlägt Schembera zur Lösung dieses Problems ein Metadaten-Modell namens Eng-Meta vor, das einen standardisierten Rahmen für die Kategorisierung und Organisation von Forschungsdaten im Bereich Computational Engineering vorgibt. Er erweitert diesen Rahmen auch durch die Entwicklung von Software zur Automatisierung der Metadaten-Extraktion. Obwohl ein solches Tool derzeit die Unterstützung eines SDO oder Forschers benötigen würde, um wichtige fachgebietsspezifische Schlüsselwörter festzulegen, könnte es in seinen Augen den oft mühsamen Prozess der Metadaten-Verwaltung als automatisierter Teil des Simulations-Workflows vereinfachen.

Letztlich sieht Schembera in diesen Vorschlägen das Potenzial, die Produktivität und Effizienz von HPC-Zentren in mehrerer Hinsicht zu verbessern. Wird weniger Dark Data generiert und gespeichert, könnten Rechenzentren wirtschaftlich effizienter und – mit Blick auf den Energiebedarf großer Computerserver – umweltfreundlicher werden. Durch eine besser organisierte und zugänglichere Archivierung der richtigen Daten aus früheren Simulationen könnten diese auch besser zur Wissenschaft beitragen. (CW)

# HLRS-Support-Mitarbeiter unterstützen bei der Code-Optimierung

Support und Mentoring mit mehr Kundenorientierung wirken sich positiv auf die Produktivität der Nutzer aus.

Das Gauss Centre for Supercomputing hat im Rahmen seiner jüngsten Finanzierungsvorhaben 2017 ein Projekt zur Vereinheitlichung und Verbesserung des Nutzer-Supports an den drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren Deutschlands gestartet. Im November haben das HLRS und seine Partnerzentren dieses neue Konzept offiziell eingeführt.

Für das HLRS bedeutet dies, den Mitarbeitern bessere Rahmenbedingungen für eine enge Zusammenarbeit mit den Nutzern und langfristige Beziehungen zu schaffen. Ein Beispiel: Langjährige Nutzer des Instituts für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart haben die Leistung ihres Codes auf dem Hazel Hen-Supercomputer deutlich verbessert und sich auf Hawk vorbereitet, den Supercomputer der nächsten Generation des HLRS, der 2020 an den Start gehen wird.

Im Rahmen des von der Baden-Württemberg-Stiftung geförderten SEAL-Projekts am IAG soll erforscht werden, wie die Unwägbarkeiten, die bei Turbulenz- und Akustiksimulationen auftreten, am besten quantifiziert werden können. Dazu müssen die Forscher ihre Simulationen auf einem großen Skalenbereich berechnen und viele Iterationen einer ähnlichen Simulation mit leicht unterschiedlichen Eingaben durchführen. Dieser Ansatz bedeutet, dass sie Zugang zu HPC-Computern benötigen, und dass ihre Simulationen möglichst effizient ablaufen müssen.

„Die Kurse und Workshops, die das HLRS zum Nutzer-Support anbietet, ermöglichen es uns, unseren eigenen Code analysieren und optimieren zu lassen“, so Thomas Kuhn, akademischer Mitarbeiter der

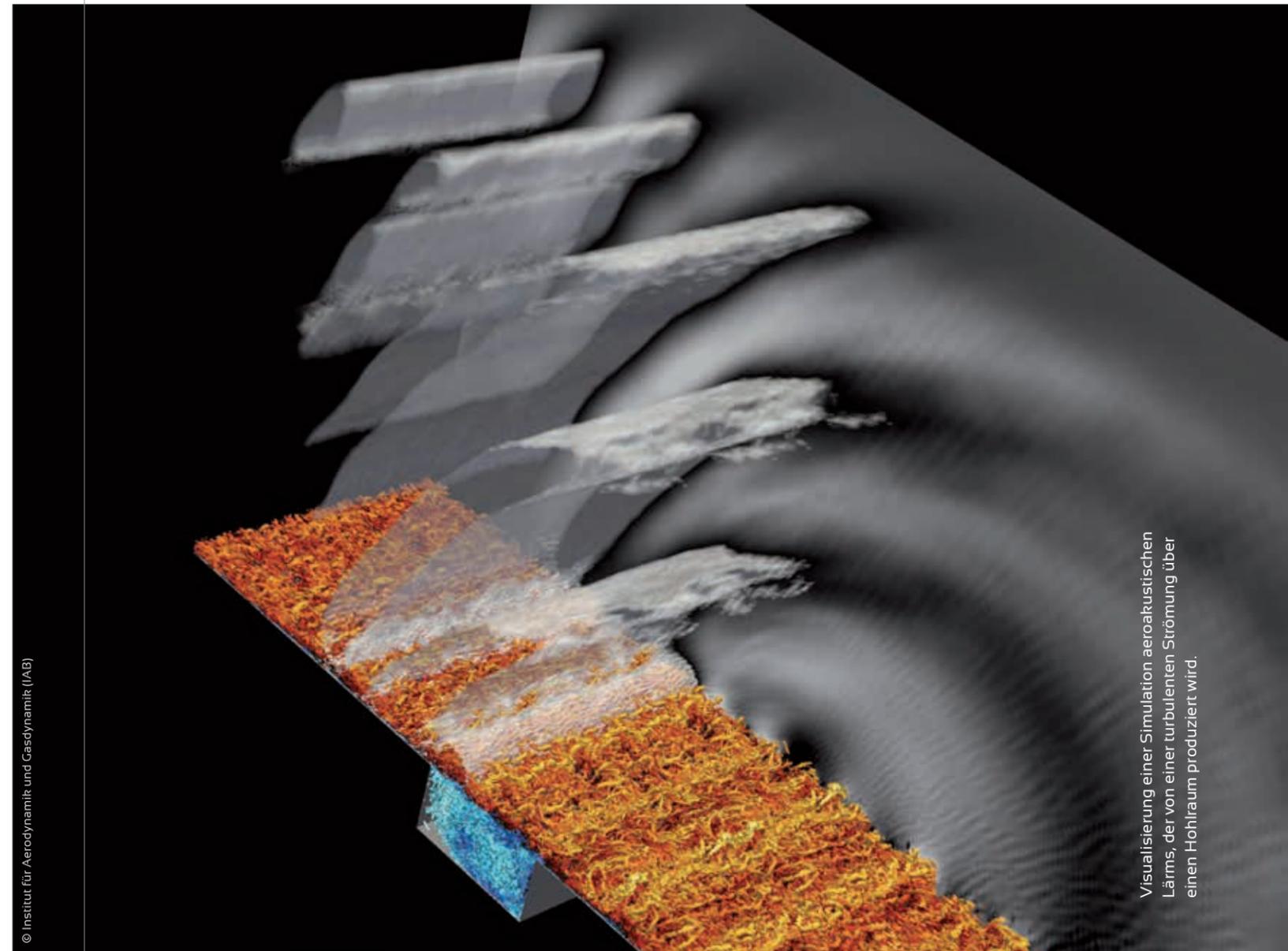
SEAL-Gruppe am IAG. Als das Team kürzlich seinen FLEXI-Code zu einem Workshop mitbrachte, arbeitete es gemeinsam mit HLRS-Mitarbeitern daran, die 1D- und 3D-Simulationen des Teams wesentlich leistungsfähiger zu machen (um 40 Prozent schneller bzw. doppelt so schnell).

Dieser Erfolg resultiert aus der persönlichen Beziehung des Teams mit den HLRS-Mitarbeitern. Insbesondere arbeiten sie seit Langem mit HLRS-Support-Mitarbeiter Philipp Offenhäuser zusammen. „Wir arbeiten eng mit Philipp zusammen, um den FLEXI-Code zu optimieren“, so Jakob Dürrwächter, ebenfalls am SEAL-Projekt beteiligter akademischer Mitarbeiter. „Er hat uns bei der Optimierung direkt unterstützt, insbesondere während dieser Workshops, und wenn er uns nicht weiterhelfen kann, weiß er, an wen wir uns wenden müssen.“

Darüber hinaus wurde dem Team auf dem letztjährigen Results and Review Workshop Zugang zu den Early-Access-Testknoten für Hawk geboten, was ihm einen Vorsprung bei der Programmierung seines Codes für die HLRS-Architektur der nächsten Generation verschaffte.

Offenhäuser und die anderen HLRS-Support-Mitarbeiter wollen ihre Kapazitäten erweitern, um den Nutzer-Support mehr zu personalisieren. „Wir wollen Nutzern stets Support und Mentoring auf ihre Bedürfnisse zugeschnitten bieten, um das Maximum für sie herauszuholen. Jetzt geht Hawk an den Start und wir arbeiten hart daran, dass unsere Nutzer vom ersten Tag an die Vorteile des Superrechners nutzen können“, sagt Offenhäuser.

(EG)



© Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG)

Visualisierung einer Simulation aeroakustischen Lärms, der von einer turbulenten Strömung über einen Hohlraum produziert wird.

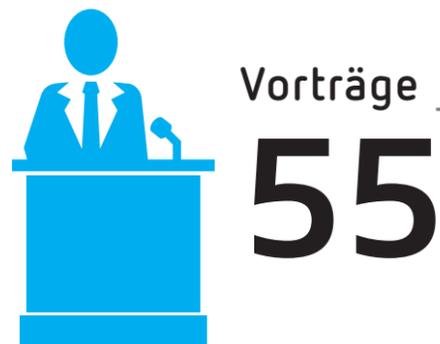
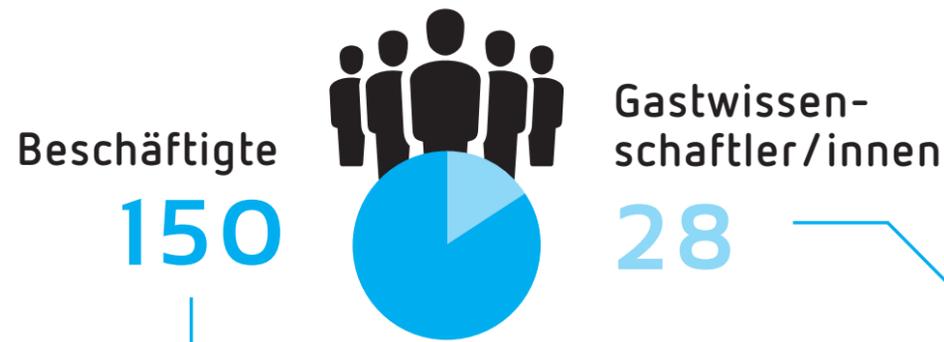
# HLRS in Zahlen

## Systemnutzung



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

## Aus-und Weiterbildung



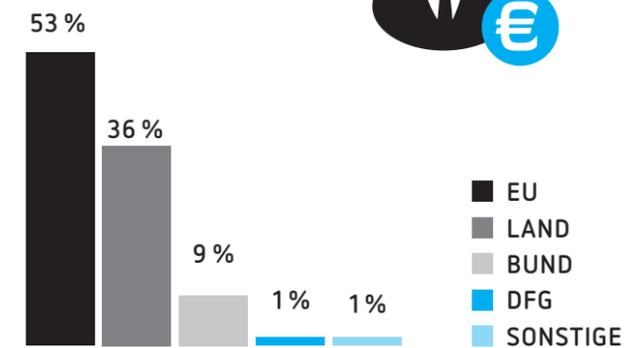
## Publikationen



# HLRS



## Drittmittel



# HLRS weiterhin führend im Schülerprogramm „Simulierte Welten“

Schüler lernen Computermodellierung kennen und werden von HLRS-Forschern in die Praxis eingeführt.



Teilnehmer in „Simulierte Welten“ bei der Preisverleihung am HLRS.

Computermodellierung und -simulation spielen im Alltag eine wichtige Rolle, aber wie diese Werkzeuge unser Leben sicherer, einfacher oder effizienter machen, erschließt sich nicht jedem Laien.

Um Schülern die Welt der Modellierung und Simulation näherzubringen und die Wissenschaftler und Programmierer von morgen zu inspirieren, lancierte das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg 2011 das Programm „Simulierte Welten“. Das HLRS hat sich von Anfang an am Projekt beteiligt, indem es Workshops für Schüler veranstaltet und ihnen Mentoring und Tutoring anbietet, wenn sie genauer wissen möchten, wie Simulation zur Lösung von Alltagsproblemen beitragen kann.

Die Schüler bekommen ein Verständnis für die Versprechungen und Herausforderungen im Zusammenhang mit Simulation: Wo stößt Simulation an ihre Grenzen? Wie vermeiden oder integrieren Programmierer Voreingenommenheit (Bias) bei Simulation? Und wie hat Simulation Technologien und Prozesse verbessert, denen die Schülerinnen und Schüler zu Hause oder in der Schule begegnen?

In diesem Jahr arbeiteten zehn SchülerInnen mit HLRS-Mitarbeitern an Projekten, die vom Einsatz maschinellen Lernens über die Vorhersage des Erfolgs eines Films bis zur rechnerischen Modellierung der Mikrostruktur menschlicher Knochen reichten. Bei der Abschlussveranstaltung im Juli stellten die Schüler ihre Projekte vor und beantworteten Fragen der Teilnehmer.

Der anhaltende Erfolg des Programms unterstreicht das wachsende Interesse daran, fortschrittlichere Technologien und digitale Tools in die Lehrpläne von Schulen einzubinden. „Wir sind stolz darauf, das Interesse der Schüler an Modellierung und Simulation aktiv zu fördern“, sagt HLRS-Projekt Koordinatorin für „Simulierte Welten“ Doris Lindner. „Indem wir Schüler in einen IT-Bereich einführen, den sie vielleicht noch nicht kannten, fördern wir HPC im Alltag und ermutigen eine neue Generation von Schülern, eine Karriere im Bereich Computational Science und Informationstechnologie einzuschlagen.“

„Simulierte Welten“ wird auch 2020 fortgesetzt, wobei bereits mehrere Infoveranstaltungen geplant sind. (EG)

# Sicherere Operationssäle dank Simulation und Visualisierung

Mit Building Information Modeling-Simulationen können Forscher die Luftströmung in sterilen Umgebungen besser verstehen.

Forscher nutzen Building Information Modeling (BIM), um Gebäude sicherer, effizienter oder komfortabler zu machen. Solche Modelle ermöglichen es Planern und Ingenieuren, die Eigenschaften eines Gebäudes besser zu verstehen und können Optimierungsstrategien für dessen verschiedene Systeme aufzeigen.

Zum Beispiel wird bei zentralen Klimaanlage viel getestet. Eine Klimaanlage macht den Sommer im Büro zwar angenehmer, in bestimmten Bereichen jedoch, wie etwa Operationssälen in Krankenhäusern, wo die Luftströmung um einen Patienten das Infektionsrisiko potenziell erhöht, spielt sie eine weitaus wichtigere Rolle.

Um dieses Problem zu lösen, simulierten die Visualisierungs-Experten des HLRS und das Medizintechnikunternehmen Dräger gemeinsam mit numerischer Strömungsmechanik (CFD) die Luftströmung in einem Operationssaal. „Eigentlich setzen wir hier auf eine

Reihe von Simulationen,“ so Dr.-Ing. Uwe Wössner, Leiter der Visualisierungsabteilung am HLRS. „Mit Augmented Reality können wir das reale Architekturmodell in der Simulation abändern, was sich auf das BIM-Modell auswirkt, das letztlich die Daten für die Simulation liefert. Dieses Prinzip des bidirektionalen BIM ermöglicht uns eine wirklich immersive Simulation, die wir quasi in Echtzeit anpassen können.“

Um diese verschiedenen Modelle zu koppeln, nutzt das Team das Revit-Softwarepaket zusammen mit dem Open-Source-CFD-Code OpenFOAM. Die Forscher koppeln dann die CFD-Simulation mit Referenzmarkierungen an den Türen und Luftschächten eines Raums, um die Luftströmung zu untersuchen.

Das Forschungsprojekt steht zwar noch am Anfang, aber der erste Testfall, bei dem das Team mit der Uniklinik Aachen die Klimaanlage in den Operationssälen optimierte, verlief sehr vielversprechend. (EG)



Im November stellte das HLRS seine Kollaboration mit Dräger auf der SCI19-Konferenz in Denver, Colorado, USA vor.

# Promotionen 2019

Sechs junge Forscher promovierten 2019 am HLRS.



## Michael Gienger

### Optimale Zuteilungsmechanismen zur Leistungssteigerung von virtuellen Maschinen in Cloud Infrastrukturen

Mit Cloud-Computing können Informations- und Kommunikationstechnikdienste flexibel und effizient angeboten werden. Die Basistechnologie hat Vor-, aber auch Nachteile. Giengers Lösungsansatz in seiner Arbeit ist die Vermeidung überladener Cloud-Computing-Umgebungen. Die Ergebnisse zeigen, dass man mit optimierten Scheduling-Strategien erhebliche Leistungsverbesserungen erzielen kann. Die von Gienger beschriebenen Methoden steigerten die Gesamtleistung einer privaten Cloud-Computing-Umgebung um über 20 %.



## Steffen Hagmann

### Adaptive Verfeinerungsverfahren in der gitterfreien Finite-Pointset-Methode (FPM)

Hagmann arbeitete an der Finite-Pointset-Methode, die sich für die numerische Simulation von Fahrzeugen eignet, die über Wasser fahren, und damit auch für die virtuelle Simulation des Wassermanagements bei Fahrzeugen. Die gitterfreie Methode kann komplexe Aufgaben mit der notwendigen physikalischen Detailtreue numerisch lösen. Im relevanten Fall einer kompletten Wasserüberfahrt konnte die Rechenzeit von knapp einer Woche auf etwas mehr als drei Tage, also um etwa 40 bis 50 % reduziert werden. Darüber hinaus wurden die Möglichkeiten der Finite-Pointset-Methode – und damit ihr Einsatzpotenzial – durch diese Arbeit erweitert.



## Dmitry Khabi

### Energieeffizienz von Prozessoren in High Performance Computinganwendungen der Ingenieurwissenschaften

In Khabis Arbeit geht es um Energieeffizienz im Höchstleistungsrechnen. Sie behandelt die Effizienz von Prozessoren und Algorithmen und trägt zur Verbesserung bestehender Methoden zur Messung des Stromverbrauchs verschiedener Hardwarekomponenten bei. Diese Verbesserung ermöglicht es, die Zusammenhänge zwischen CPU-Frequenz, Parallelisierungsgrad, Leistung und Verlustleistung zu untersuchen. Die neuen Erkenntnisse werden bei der Entwicklung eines Modells helfen, das sowohl die rechnerischen als auch die elektrischen Eigenschaften unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Betriebsfrequenzen der Hardwarekomponenten beschreibt.



## Jens Kouros

### Modellierung und Simulation Systemischer Risiken mittels Probabilistischer Programmierung auf Basis eines integrativen Rahmenmodells

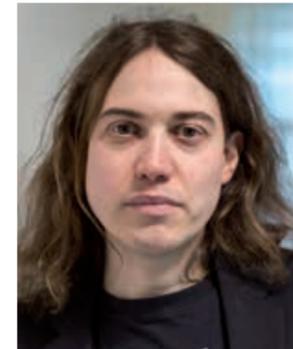
Kouros untersuchte systemische Risiken aus mehreren Perspektiven. Für die Entwicklung eines Rahmenmodells überprüfte er Vorstellungen und Definitionen von systemischen Risiken aus unterschiedlichen Bereichen. Auf der Basis dieses Modells identifizierte er drei Beispiele für systemische Risiken und entwickelte hierzu Computersimulationen. Die ersten beiden Fallstudien befassen sich mit Influenza und Epidemien und mit der Diffusion von Fake News. In der dritten Fallstudie wird ein Modell für soziale Ungleichheit entwickelt, in dem sich die Struktur des Graphen vor dem Hintergrund der Interaktion zweier verschiedener Mechanismen verändert.



## Tim Küstner

### Der Mixed Mock-Up im Toleranzmanagement der Automobilindustrie

Durch den Einsatz von Augmented Reality in der Automobilindustrie schufen Unternehmen eine neue dritte Entwicklungsplattform: den Mixed Mock-Up (MMU). In seiner Arbeit entwickelt Küstner eine Methodik für die Anwendung neuer MMU-Anwendungsbereiche. Das MMU-Konzept des Toleranzmanagements z.B., umfasst sowohl die Erweiterung bestehender Prozesse mit MMU als auch die Entwicklung neuer Methoden. Das Konzept hinter dieser Arbeit wurde anhand von Beispielen aus dem gesamten Entwicklungsprozess eines Automobilherstellers eingehend geprüft und bewertet.



## Björn Schembera

### Forschungsdatenmanagement im Kontext Dunkler Daten in den Simulationwissenschaften

Schembera weitet das Prinzip von Dark Data auf HPC aus. Dark Data entstehen aus fehlenden Metadaten oder inaktiven Nutzern, und Schemberas Dissertation stellt Konzepte zur Minimierung solcher Daten vor. Er hat ein Metadaten-Modell (EngMeta) entwickelt und hat eine automatisierte Metadaten-Extraktionsmethode entworfen und implementiert. Da solche Metadaten-Modelle ohne entsprechende Prozesse nutzlos sind, führt Schembera die Rolle des Scientific Data Officer (SDO) ein. Ein SDO setzt Kriterien um, die im Rahmen dieser Dissertation entwickelt wurden und eine Orientierungshilfe dafür bieten, welche Daten wie lange gespeichert werden sollten.



# HIGHLIGHTS DER FORSCHUNG

## HLRS-Supercomputer unterstützt Erstellung des ersten Bildes eines Schwarzen Lochs

**HLRS-Rechner tragen zu einem Riesenerfolg internationaler Forscher bei: der Visualisierung des Zentrums der Galaxie M87.**

Im April 2019 zeigte ein internationales Forscherteam das erste Bild eines Schwarzen Lochs. Dieser Meilenstein – Ergebnis der langjährigen Zusammenarbeit Hunderter Wissenschaftler im Rahmen des Event Horizon Telescope (EHT) Consortium – war für viele die Nachricht des Jahres.

Zu den Mitverfassern der ersten Ergebnisse gehörte Prof. Dr. Luciano Rezzolla von der Goethe-Universität Frankfurt. Mithilfe von Höchstleistungsrechnern am HLRS und am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) erstellte sein Team ein Modell zur Beschreibung des Plasmas um das Schwarze Loch in der Mitte der Galaxie Messier 87 (M87). Die Forscher entwickelten eine Datenbank mit synthetischen Bildern eines Schwarzen Lochs unter verschiedenen Bedingungen, die mit experimentellen Beobachtungen verglichen wurden, um ihre Genauigkeit zu testen.

Da Schwarze Löcher kein Licht reflektieren und M87 fast 55 Millionen Lichtjahre von der Erde entfernt ist, ist eine direkte Beobachtung ausgeschlossen. Stattdessen kombinierten die Forscher des EHT-Konsortiums Beobachtungsdaten von Radioteleskopen mit HPC-Simulationen von Phänomenen im Umfeld des Schwarzen Lochs M87, etwa die Eigenschaften von Plasma, um Bilder von physikalischen Phänomenen zu erstellen, die anders nicht zu erkennen sind.

Die Integration dieser Radioastronomiedaten war eine Riesenaufgabe. Da M87 so weit entfernt, das Schwarze Loch so groß und die Fluid- und Teilchendynamik, die sich aus seinem Gravitationsfeld ergibt, so komplex ist, war HPC nötig, um die Rohdaten in etwas

umzuwandeln, das die Forscher – und damit die Welt – besser verstehen konnten.

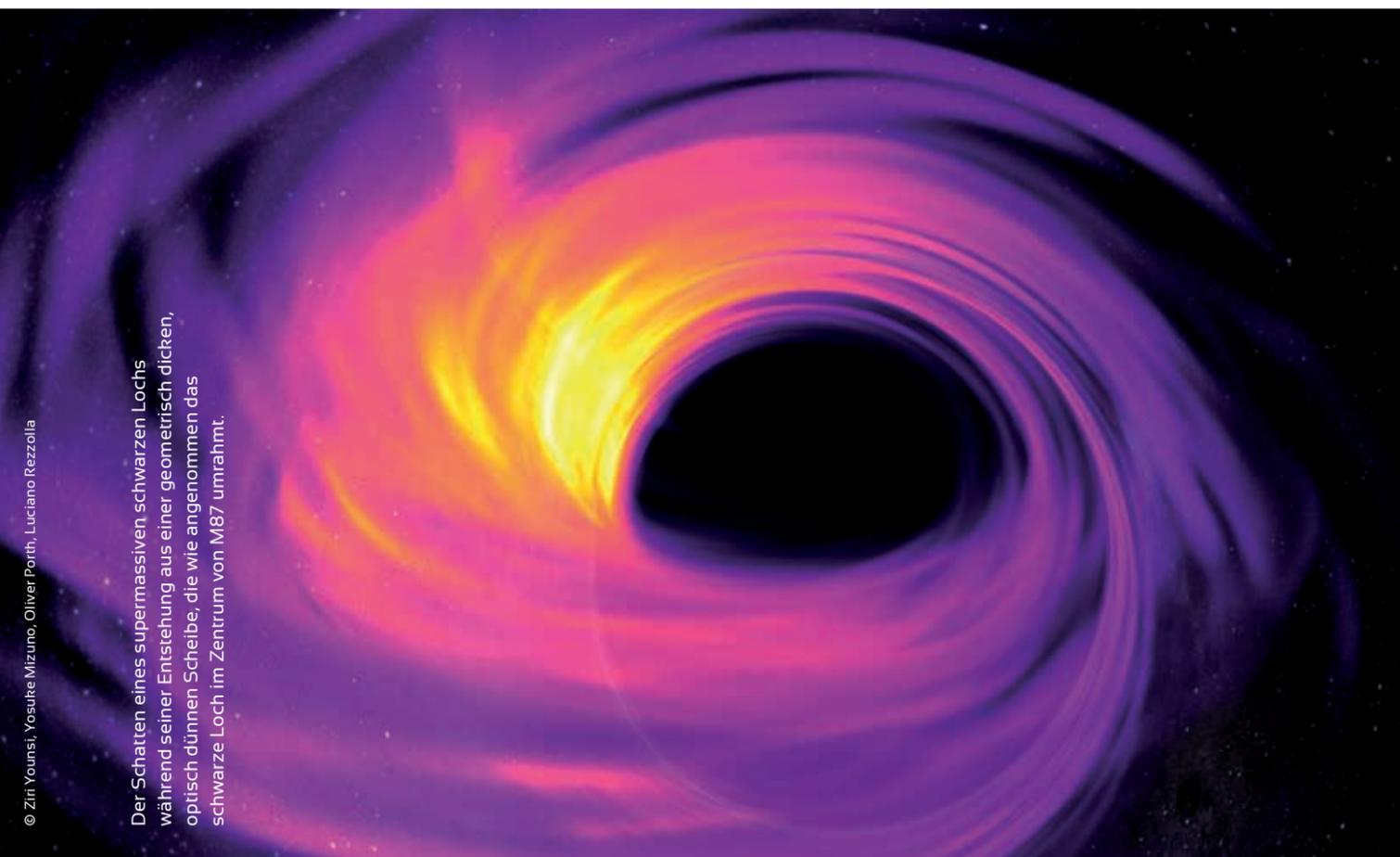
### Erste Eindrücke

Rezzollas Team möchte zum Beispiel verstehen, wie sich die Gesetze der Schwerkraft in der Nähe der extrem starken Anziehungskraft um ein Schwarzes Loch verändern. Diese Kräfte sind stark genug, um den Austritt von Licht zu verhindern, können aber auch das Verhalten von astrophysikalischen Plasmen oder anderen Stoffen beeinträchtigen, wenn sie sich dem Zentrum nähern. Das Team entwickelte drei eigene Computercodes, mit denen es nachstellen kann, wie Stoffe um ein Schwarzes Loch kreisen, während sie nach innen gezogen werden.

Das Team wusste, dass es Bilder neu erstellen musste anhand von Untersuchungen dazu, wie sich Licht und Plasma krümmen, wenn sie sich dem Ereignishorizont eines Schwarzen Lochs nähern, also der Schwelle, an der die Anziehungskraft so stark ist, dass ihr nichts mehr entkommen kann. Dieses Phänomen erzeugt einen „Schatten“, der die Umgebung einhüllt.

Der Schatten Schwarzer Löcher erschwert es Forschern, ein herkömmliches Bild zu machen, aber er hilft auch, deren starken Einfluss auf ihre Umgebung aufzudecken, und mehr über die Eigenschaften dieses Phänomens zu erfahren.

„Das Plasma um ein Schwarzes Loch mit einem Modell darzustellen, ist ein hochgradig nichtlineares Problem, das eine Reihe von Instabilitäten und turbulenten



© Ziri Younsi, Yosuke Mizuno, Oliver Porth, Luciano Rezzolla

Der Schatten eines supermassiven schwarzen Lochs während seiner Entstehung aus einer geometrisch dicken, optisch dünnen Scheibe, die wie angenommen das schwarze Loch im Zentrum von M87 umrahmt.

Strömungen umfasst“, sagt Rezzolla. „Solche Phänomene sind schon unter normalen Umständen schwer zu modellieren, und diese Bedingungen werden um ein Schwarzes Loch noch verstärkt. Im Wesentlichen untersucht man Bewegungen, die sich fast mit Lichtgeschwindigkeit in einer Umgebung abspielen, die durch extreme Anziehungskraft verzerrt wird.“

Mithilfe der Supercomputer Hazel Hen am HLRS und SuperMUC am LRZ sowie des hauseigenen Clusters an der Goethe-Universität Frankfurt konnte Rezzollas Team die Plasmadynamik um das Zentrum von M87 modellieren. Etwa die Hälfte der vom EHT eingesetzten Simulationen wurde von den Frankfurter Forschern mit HPC-Computern berechnet.

Die Forscher nutzten HPC auch zur Durchführung magnetohydrodynamischer Simulationen (MHD), die elektromagnetische Eigenschaften von Stoffen wie Plasma genau modellieren können, um eine große synthetische Bilddatenbank von Schwarzen Löchern auf Grundlage von Simulationen zu erstellen. Die 60.000 Bilder in der Datenbank zeigen, wie ein Schwarzes Loch unter verschiedensten Bedingungen aussehen würde. Durch einen Vergleich mit den relativ wenigen verfügbaren Beobachtungsbildern können Forscher einzigartige Eigenschaften von M87 von allgemeinen Phänomenen Schwarzer Löcher unterscheiden.

Zu diesem Zweck entwickelte das Team GENA, einen Code, der auf einem genetischen Algorithmus (inspiriert von evolutionären Prozessen) basiert, der beim Vergleich der synthetischen Bilder mit Beobachtungen Gemeinsamkeiten zwischen beiden feststellt und diese zu einer neuen „Generation“ weiterentwickelt, die nur die besten „Gene“ enthält. Die Forscher wiederholen diesen Prozess über mehrere Generationen, bis sie die beste Übereinstimmung finden, und isolieren die synthetischen Bilder, die den Beobachtungen am ehesten entsprechen. „Das ist so, als würde man mit einem verschwommenen Foto in ein volles Stadion gehen und nach einer bestimmten Person darauf suchen“, so Rezzolla. „Wir verbessern unsere Plasmamodellierung und lernen aber auch, besser zwischen stabilen und schwankenden Merkmalen in diesen Bildern zu unterscheiden.“

#### Jenseits des Horizonts

Seinen wichtigen Beitrag zum EHT-Projekt führt das Team teilweise auch auf die erfolgreiche Zusammen-

arbeit mit HLRS- und LRZ-Mitarbeitern zurück. „Solch ein Mitarbeiter-Support ist ein echter Mehrwert für HPC-Zentren“, findet Rezzolla.

Für die Zukunft freut sich das Team auf den Einsatz modernster Supercomputer, um Bilder anderer Schwarzer Löcher, zum Beispiel des Zentrums unserer Milchstraße, besser aufzunehmen und zu verstehen. Die Herausforderung ergibt sich hier aus der Nähe und der Geschwindigkeit, mit der sich galaktische Phänomene verändern.

„Mit Blick auf unser galaktisches Zentrum gibt es ein weiteres Problem: Die Zeitspanne, in der sich das Bild verändert, ist kürzer als die, in der wir die Daten aufzeichnen können“, sagt Rezzolla. „Das ist so, als würde man versuchen, ein Bild von etwas zu machen, das sich sehr schnell hin- und herbewegt. Diese neue Herausforderung wird all unser Fachwissen in Physik und Technik erfordern.“

(EG)

# Simulationen helfen bei Erforschung von Verbrennungsprozessen

Forscher der Universität Duisburg-Essen verwenden HPC zur beispiellos detailgetreuen Modellierung von Flammen bei der Kraftstoffeinspritzung, um Experimente des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt zu verifizieren.

Eine Forschungsgruppe an der Universität Duisburg-Essen (UDE) hat mithilfe vom HLRS-Supercomputer die entscheidenden Milli- bis Mikrosekunden bei der Einspritzung von Kraftstoff in einen Motor untersucht und dabei beobachtet, wie sich die Flamme entzündet und mit der Zeit verändert. Schlussendlich möchte das Team auf die Nanosekunde genau die chemischen Reaktionen auf molekularer Ebene verstehen.

„Bei der Verbrennung haben wir mehrere verschiedene Ziele“, sagt der Hauptforscher des Projekts Prof. Dr. Andreas Kempf, der an der UDE den Lehrstuhl für Fluidodynamik innehat. „Wir wollen die benötigte Kraftstoffmenge gering halten, unverbrannte Kohlenwasserstoffe in der Verbrennungsreaktion vermeiden und natürlich auch die Emission von Distickstoffmonoxid und Kohlenstoffmonoxid minimieren.“

## Das ganze Bild

Natürlich lassen sich die kleinen kontrollierten Explosionen während der Verbrennung in einem Motor nur schwer beobachten. Sie geschehen sehr schnell in einer extrem heißen, rußigen, flüchtigen Umgebung, was es schwierig macht, den Prozess aufzunehmen oder zu fotografieren.

Forscher des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR), die mit dem UDE-Team zusammenarbeiten, nutzen jedoch eine Methode namens laserinduzierte Fluoreszenz, um ein schärferes Bild zu bekommen. Im Wesentlichen wandeln die Forscher einen Laserstrahl in ein „Laserblatt“ oder eine „Lichtklinge“. Im UV-Bereich können diese „Lichtklingen“ eine

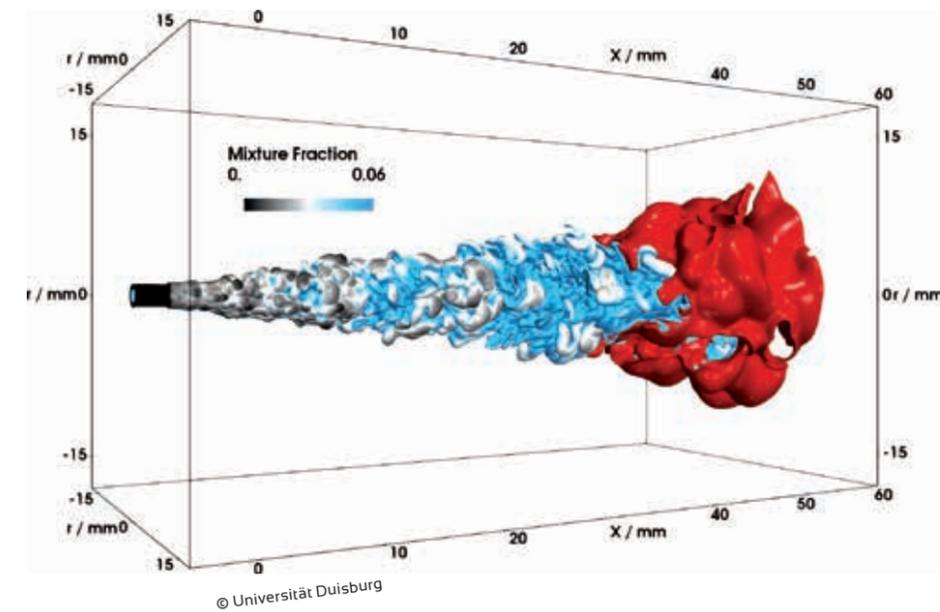
Verbrennungsreaktion durchschneiden und die vielen einzelnen Partikel beleuchten, aus denen der chaotische, turbulente Zündvorgang besteht. Im jüngsten Gemeinschaftsprojekt untersuchen die Teams der UDE und des DLR Methan, einen recht gut ausgeforschten Kraftstoff, der verglichen mit komplexeren Brennstoffen relativ einfache Reaktionen aufweist.

Aber selbst wenn man Aufnahmen im Mikrosekundenkontakt macht, können Wissenschaftler nicht das ganze Bild des Zündvorgangs erfassen. Die Situation ist vergleichbar mit der eines Fotografen, der ein Gebäude von allen Seiten einfangen will, die Bilder jeweils aber nur zu verschiedenen Zeitpunkten des Bau- und Abrissvorgangs machen kann.

Die Simulation kann jedoch Zündbedingungen in 3D nachstellen und die vielen einzelnen Partikel im Nanosekundenkontakt verfolgen, so dass die Forscher ihr Modell in Bewegung setzen und die vielen verschiedenen Partikel gleichzeitig beobachten können. Um Verbrennungsprozesse richtig optimieren zu können, müssen Forscher in hoher Auflösung sehen, wie sich Zündvorgänge abspielen, und zudem nachvollziehen können, wie einzelne Flüssigkeitspartikel und Reaktionen verschiedener chemischer Spezies die Verbrennungsreaktion insgesamt beeinflussen. So haben die Forscher bei ihren neuesten Simulationen den Einfluss von Formaldehyd, einem Nebenprodukt des Zündvorgangs bei Methan, auf den Prozess beobachtet.

„Mit Simulationen haben wir Zugang zu sämtlichen chemischen Spezies, die bei der Verbrennungsreaktion eine Rolle spielen, was sehr wichtig ist, um die Reaktion

Mit Hilfe von direkten numerischen Simulationen simuliert ein Team an der Universität Duisburg eine transiente Stichtflamme mit 40 Millionen Rechenstunden auf HazelHen.



zu verstehen“, sagt Eray Inanc, Doktorand an der UDE. „Wir können Geschwindigkeiten, Dehnung, Wärmeübertragung, Reaktionen und Speziestransfer bei großen Mengen bestimmter Stoffe in der Reaktion zu kleineren Mengen anderer Stoffe, wie etwa Formaldehyd, das eine bedeutende Rolle in der Reaktion insgesamt spielt, in Bezug setzen. Anstatt nur eine chemische Spezies zu beobachten, können wir mit Simulationen alles auf einmal sehen.“

Das Team führte zwei Simulationsreihen durch, um die Genauigkeit und die Berechnungskosten von zwei verschiedenen Modellierungsansätzen zu vergleichen. Die erste beruhte auf „tabellierter“ Chemie, was bedeutet, dass die Forscher eine Tabelle erstellen, welche die verschiedenen thermochemischen Zustände an einem bestimmten Punkt des Zündvorgangs beschreibt, etwa die Menge an Kraftstoff oder Oxidationsmitteln (Partikel, die in einer chemischen Reaktion neue Elektronen aufnehmen können). Während dieser Ansatz rechnerisch günstig ist, machen die Forscher Annahmen zu den physikalischen Aspekten der Reaktion, was Simulationen ungenauer macht.

Der zweite Ansatz, ein direkt chemischer, verfolgt die vielen einzelnen Reaktionen zu jedem Zeitpunkt. Dieser erfordert zwar die rechnerisch anspruchsvollere Aufgabe, Transportgleichungen für die chemischen Spezies in den Simulationen zu lösen, bildet den Prozess aber wesentlich genauer ab. Das Team stellte fest,

dass der Unterschied in der Genauigkeit die zusätzlichen Berechnungskosten rechtfertigte.

Kempf merkt an, dass sein Team ohne Zugang zu führenden HPC-Computern wie denen des HLRS nicht derartige Fortschritte auf seinem Gebiet erzielen könnte. „Auf dem Gebiet der turbulenten Verbrennung wendet man sich gerade völlig neuen Themen zu und die meisten Forscher in diesem Bereich kommen von weltweiten Spitzenuniversitäten“, sagt Kempf. „Um international konkurrieren zu können, brauchen wir Zugang zu den besten Supercomputern überhaupt, und zum Glück ist das in Deutschland möglich.“

## Schritte nach vorn

Nachdem das Team die Forschung zu Methan abgeschlossen hat, benötigen die Forscher nun Supercomputer der nächsten Generation, um ihr Konzept auf komplexere Kraftstoffe anzuwenden. Kempf und Inanc weisen darauf hin, dass die derzeitigen Simulationen die notwendige Auflösung für ein genaues Modell der Kraftstoffzündung bei einfachen Kraftstoffen wie Methan bieten. Mit Computern der nächsten Generation jedoch könnten die Forscher zum Beispiel Bio- und Dieselmotoren untersuchen.

Hawk, der Supercomputer der nächsten Generation des HLRS, geht im ersten Halbjahr 2020 an den Start, und Kempfs Team freut sich schon sehr auf die zusätzlichen Rechnerkapazitäten.

(EG)

# Mit HPC zu besseren Windkraftanlagen

Mithilfe eines Algorithmus des maschinellen Lernens und Supercomputern modellieren Wissenschaftler Windkraftanlagen für mehr Energieeffizienz.

Seit Jahrzehnten werden umweltfreundliche Technologien bei der Energieerzeugung immer wichtiger. Nachhaltigkeit und der Kampf gegen den Klimawandel rücken in den Mittelpunkt; daher gewinnt auch erneuerbare Energie aus Solarzellen, Windkraftanlagen und geothermischen Quellen an Bedeutung.

Um saubere Energie zu erzeugen, zielen Forscher und Unternehmen im Bereich erneuerbare Energien auf größere und effizientere Turbinen ab, die mehr Strom erzeugen.

Bis vor kurzem konstruierten Ingenieure eher kleine Windkraftanlagen. Normale Anlagen sind zwischen 50 und 150 Metern hoch, haben einen Rotordurchmesser von etwa 120 Metern und erzeugen ungefähr drei Megawatt (MW) Strom, was genug für circa 2.000 Haushalte ist. Neue Anlagen sind jedoch größer. Ingenieure konstruieren Windkraftanlagen mit einem Rotordurchmesser von 200 Metern, die 10 bis 20 MW erzeugen können. Bei solchen Größenordnungen müssen Konstrukteure sicherstellen, dass diese Großinvestitionen so effizient wie möglich Energie erzeugen, also auch Ineffizienzen durch Umweltfaktoren vermindern.

Darum hat eine Gruppe von Forschern der Universität Stuttgart den Höchstleistungsrechner des HLRS genutzt, um energieeffizientere Windkraftanlagen zu konstruieren. „Bei über zehn Megawatt Strom, führt schon eine einprozentige Effizienzsteigerung zu viel zusätzlicher Energie und großen Geldeinsparungen“,



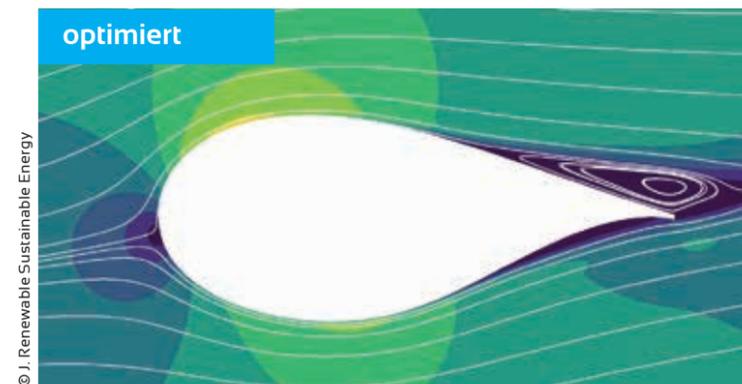
sagt Dr. Galih Bangga, Postdoc am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG). Die jüngste Forschungsarbeit des Teams wurde im Journal of Renewable and Sustainable Energy veröffentlicht.

## Das Überleben des Schnittigsten

Wenn Windkraftanlagen größer werden, um mehr Strom zu erzeugen, müssen auch ihre Komponenten wachsen. Insbesondere müssen die Rotorblätter von Windkraftanlagen dickere Wurzeln oder Profile haben, die am Turm befestigt werden und letztlich die Standicherheit der Anlage gewährleisten. Während diese dickeren Profile zu einer sicheren, stabilen Windkraftanlage führen, verringern sie aber die Effizienz wegen der suboptimalen Aerodynamik.

Das IAG-Team wollte erfahren, wie man Rotorblätter aerodynamischer machen kann, ohne die Standicherheit einer Anlage zu beeinträchtigen. Leider wären der Bau von Prototypen vieler verschiedener

Der Vergleich des gesamten Geschwindigkeitsfeldes von zwei Tragflächen. Die optimierte Tragfläche (rechts) zeigt eine geringere Strömungsablösung und eine performantere Aerodynamik.



Rotorblatt-Designs und die anschließende Durchführung experimenteller Tests an allen Modellen unerschwinglich teuer und zeitraubend.

Computersimulation bietet eine viel effizientere und kostengünstigere Möglichkeit, Rotorblatt-Designs zu optimieren. Im vorliegenden Fall erstellten die Forscher virtuell viele Profilvariationen und ließen sie durch einen genetischen Algorithmus laufen, einen Algorithmus, der auf genetischen Grundsätzen basiert, die beispielsweise ein Agrarforscher nutzt, um Pflanzen mit guten Erbeerträgen und großer Widerstandsfähigkeit zu züchten.

Ähnlich wie Gregor Mendel die Kreuzbestäubung von Erbsenpflanzen mit den besten Eigenschaften für die Züchtung besserer Pflanzen genau beschrieben hat, greift der genetische Algorithmus des Teams auf Dutzende von Rotorblatt-Designs zurück und führt grobe Turbulenzsimulationen durch, um zu vergleichen, wie die Modelle abschneiden, und setzt den Prozess fort, bis sich das am besten optimierte Design herauskristallisiert.

Nachdem der Algorithmus dem Team geholfen hat, das beste Design auszumachen, kommt HPC zum Einsatz, um Simulationen mit höherer Auflösung auf Basis von numerischer Strömungsmechanik (CFD) durchzuführen und festzustellen, ob der Algorithmus richtig lag. Das Team konnte im Zuge seiner Publikation die Aerodynamik eines sehr dicken Rotorblattwurzel-Profils untersuchen und um 2,5 bis 7 Prozent verbessern. Bangga stellte fest, dass die Optimierung zu einer Energieeinsparung von etwa 195.000 Euro pro Jahr bei jeder 10-Megawatt-Windkraftanlage mit diesem Design führen würde. Während das Team seinen genetischen Algorithmus auf PCs ausführen kann, wären die zur Verifizierung

des Modells erforderlichen hochauflösenden CFD-Simulationen ohne HPC nicht möglich. „HPC ist absolut notwendig, um die große Anzahl von Datenbeständen durch den Einsatz realitätsnaher Simulationen zu überprüfen“, so Bangga. „Der Zugang zu den Rechnern des HLRS ist ein großer Vorteil für uns und unsere Arbeit.“

## Technik für die Zukunft

Neben Profilen erörtert das Team auch die Rolle, die aktive Strömungssteuerungen (AFC) bei der Verbesserung der Effizienz von Windkraftanlagen spielen können.

Während sich kleine Konstruktionsänderungen an den Profilen der Rotorblätter geringfügig, aber spürbar auf die Energieeffizienz auswirken, ist AFC ein komplexerer und teurer Prozess, der diese noch mehr steigern kann. Aktive Strömungssteuerungen ähneln den Klappen, die den Luftstrom an einem Flugzeugflügel beeinflussen: Sie sind steuerbare Teile, welche die Luftströmung um eine Konstruktion oder Maschine lokal beeinflussen.

„Wir wollen mit unserer Arbeit Ingenieuren jeglicher Couleur helfen, nicht nur denen, die viel Geld in Forschung und Entwicklung stecken können“, sagt Bangga. „Wir wollen Möglichkeiten finden, die Energieeffizienz zu verbessern, die sich kleinere Unternehmen oder Kommunalverwaltungen leisten können; wir wollen aber auch Wege finden, die Energieeffizienz so weit wie möglich zu maximieren.“

(EG)

# Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer

Alon OE. 2019. **Analysis of a trapped Bose-Einstein condensate in terms of position, momentum, and angular-momentum variance.** Symmetry 11:1344.

Babb JF, Smyth RT, McLaughlin BM. 2019. **Radiative association of atomic and ionic carbon.** Astrophys J. 884: 2.

Bangga G, Dessoky A, Lutz T, Krämer E. 2019. **Improved double-multiple-streamtube approach for H-Darrieus vertical axis wind turbine computations.** Energy 182:673-688.

Beck A, Flad D, Munz CD. 2019. **Deep neural networks for data-driven LES closure models.** J Comp Phys. 39:108910.

Beck A, Ortwein P, Kopper P, et al. 2019. **Towards high-fidelity erosion prediction: on time-accurate particle tracking in turbomachinery.** Int. J. Heat Fluid Flow 79:108457.

Bocchini A, Neufeld S, Gerstmann U, Schmidt WG. 2019. **Oxygen and potassium vacancies in KTP calculated from first principles.** J Phys Condens Matter. 31:385401.

Boscheri W, Balsara DS. 2019. **High order direct Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE) PNPM schemes with WENO adaptive-order reconstruction on unstructured meshes.** J Comp Phys. 398:108899.

Breuer T, Bussieck M, ... Khabi D\*, et al. 2019. **BEAM-ME: ein interdisziplinärer Beitrag zur Erreichung der Klimaziele.** OR-News: das Magazin der GOR. Juli, 6-8.

Cloutier B, Muite BK, Parsani M. 2019. **Fully implicit time stepping can be efficient on parallel computers.** Supercomputing Frontiers and Innovations. 6(2):75-85.

Colmenarez L, McClarty PA, Haque M, Luitz DJ. 2019. **Statistics of correlation functions in the random Heisenberg chain.** SciPost Phys. 7:064.

Daskalakis V, Maity S, Hart CL, et al. 2019. **Structural basis for allosteric regulation in the major antenna trimer of photosystem II.** J Phys Chem B. 123:9609-9615.

Dembski F\*, Wössner U\*, Yamu C. 2019. **Digital twin, virtual reality and space systems: civic engagement and decision support for smart, sustainable cities.** Proceedings of the 12th International Space Syntax Symposium. 316.1-316.13.

Dembski F\*, Wössner U\*, Letzgus M. 2019. **The digital twin: tackling urban challenges with models, spatial analysis and numerical simulations in immersive virtual environments.** Architecture in the Age of the 4th Industrial Revolution: Proceedings of the 37th eCAADe and 23rd SIGraDi Conference, Volume 1. 795-804.

Enugala SN, Kellner M, Kobold R, et al. 2019. **Theoretical and numerical investigations of rod growth of an Ni-Zr eutectic alloy.** J Mater Sci. 54(9):12605-12622.

Event Horizon Telescope Collaboration. 2019. **First M87 Event Horizon Telescope Results. I. The Shadow of the Supermassive Black Hole.** Astrophys J Lett. 875:L1.

Fasoulas S, Munz CD, Pfeiffer M, et al. 2019. **Combining particle-in-cell and direct simulation Monte Carlo for the simulation of reactive plasma flows.** Phys Fluids. 31(7):10.1063/1.5097638.

Friedrich A, Gehring P, Hubig C, Kaminski A\*, Nordmann A, eds. 2019. **Steuern und Regeln.** Jahrbuch Technikphilosophie 5. Baden-Baden: Nomos.

Fröhlich K, Schneiders L, Meinke M, Schröder W. 2019. **Direct particle-fluid simulation of Kolmogorov-length-scale ellipsoidal particles in isotropic decaying turbulence.** Proceedings of the 11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP11).

Grandin M, Battarbee M, Osmane A, et al. 2019. **Hybrid-Vlasov modelling of nightside auroral proton precipitation during southward interplanetary magnetic field conditions.** Ann Geophys. 37:791-806.

Guevara-Carrion G, Ancherbak S, Mialdun A, et al. 2019. **Diffusion of methane in supercritical carbon dioxide across the Widom line.** Sci Rep-UK. 9:8466.

Ham J, Wössner U\*, Kieferle J, Lawrence H. **Exploring the affordances and musico-spatial performance opportunities of a virtual drumming environment.** Architecture in the Age of the 4th Industrial Revolution: Proceedings of the 37th eCAADe and 23rd SIGraDi Conference, Volume 2. 441-448.

Heinen M, Vrabec J. 2019. **Evaporation sampled by stationary molecular dynamics simulation.** J Chem Phys. 151:044704.

Herrmann J, Bangga G. 2019. **Multi-objective optimization of a thick blade root airfoil to improve the energy production of large wind turbines.** J Renew Sust Energy. 11:043304.

Hitz T, Heinen M, Vrabel J, Munz CD. 2019. **Comparison of macro- and microscopic solutions of the Riemann problem I. Supercritical shock tube and expansion into vacuum.** J Comput Phys. (ePub Oct 31).

Horsch MT, Niethammer C\*, Boccardo G, et al. 2019. **Semantic interoperability and characterization of data provenance in computational molecular engineering.** J Chem Eng Data. (ePub Dec 19).

Hummel M, Böhm C, Verestek W, Schmauder S. 2019. **Introducing a method of constructing realistic closed cell nano-porous iron crystals and MD simulations to investigate the influence of the system size on the stability and the mechanical properties.** Comput Materials Sci. 166:150-154.

Jain K. 2019. **Transition to turbulence in an oscillatory flow through stenosis.** Biomech Model Mechan. 19:113-131. (ePub 30 Jul).

Jordis H, Bangga G. 2019. **Multi-objective optimization of a thick blade root airfoil to improve the energy production of large wind turbines.** J Renew Sustain Energy. 11:043304.

Joseph T, Ghorbani-Asl M, Kvashnin AG, et al. 2019. **Nonstoichiometric phases of two-dimensional transition-metal dichalcogenides: from chalcogen vacancies to pure metal membranes.** J Phys Chem Lett. 10:6492-6498.

Kaliszan D, Meyer N, Petruczynik S, Gienger M\*, Gogolenko S\*, et al. **Comparative benchmarking of HPC systems for GSS applications.** HPC Asia 2019: Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region. 43-52.

Kaliszan D, Meyer N, Petruczynik, Gienger M\*, Gogolenko S\*. 2019. **HPC processors benchmarking assessment for global system science applications.** Supercomputing Frontiers and Innovations. 6(2):12-28.

Kaminski A\*. 2019. **Begriffe in Modellen: die Modellierung von Vertrauen in Computersimulation und maschinellem Lernen im Spiegel der Theoriegeschichte von Vertrauen.** Simulieren und Entscheiden: Entscheidungsmodellierung, Modellierungsentscheidungen, Entscheidungsunterstützung. Springer.

Kaminski A.\* 2019. **Cyborgisierungen.** Mensch-Maschine-Interaktion. Handbuch zu Geschichte – Kultur – Ethik. J.B. Metzler.

Kaminski A.\*, Glass C\* 2019. **Das Lernen der Maschinen.** Mensch-Maschine-Interaktion. Handbuch zu Geschichte – Kultur – Ethik. J.B. Metzler.

Kaminski A\*, Wackerbarth A\*. 2019. **The assemblage of the skull form. Parental decision, surgery and the normalization of the baby skull.** Monsters, Monstrosities, and the Monstrous in Culture and Society. Vernon Press.

Kempf D, Munz CD. 2019. **Towards an efficient detection of hydrodynamic-acoustic feedback mechanisms in an industrial context.** INTER-NOISE and NOISE-CON Congress and Conference Proceedings. 4112-4123(12).

Kieferle J, Wössner U\*. 2019. **Virtual reality in early phases of architectural studies: experiments with first-year students in immersive rear projection based virtual environments.** Architecture in the Age of the 4th Industrial Revolution: Proceedings of the 37th eCAADe and 23rd SIGraDi Conference, Volume 2. 99-106.

Knoch TA. 2019. **A consistent systems mechanics model of the 3D architecture and dynamics of genomes.** IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.89836.

Lampe H\*, Kaminski A\*. 2019. **Verlässlichkeit und Vertrauenswürdigkeit von Computersimulationen.** Mensch-Maschine-Interaktion. Handbuch zu Geschichte – Kultur – Ethik. J.B. Metzler.

Lautenschlaeger MP, Hasse H. 2019. **Shear-rate dependence of thermodynamic properties of the Lennard-Jones truncated and shifted fluid by molecular dynamics simulations.** Phys Fluids. 31:063103.

Malviya A, Vrabel J. 2019. **Henry's Law constant of nitrogen, oxygen, and argon in ternary aqueous alcoholic solvent mixtures.** J Chem Eng Data. 65(3):1189-1196.

Mamiyev Z, Sanna S, Ziese F, et al. 2019. **Plasmon localization by H-induced band switching.** J Phys Chem C. 124(1):958-967.

Marquard P, Smirnov AV, Smirnov VA, et al. 2019. **(g-2)SUB-MU at four loops in QED.** EPJ Web Conf. 218(3):01004.

Most ER, Papenfort LJ, Rezzolla L. 2019. **Beyond second-order convergence in simulations of magnetised binary neutron stars with realistic microphysics.** Mon Not R Astron Soc. 490(3):3588-3600.

Müller A, Schippers S, Hellhund J, et al. 2019. **Photoionization of tungsten ions: experiment and theory for W5+.** J Phys B-At Mol Opt. 52(19).

Nägel A, Logashenko D, Schroder JB, Yang UM. 2019. **Aspects of solvers for large-scale coupled problems in porous media.** Transport Porous Med. 130(1):363-390.

Nelson D, Pillepich A, Springel V, et al. 2019. **First results from the TNG50 simulation: galactic outflows driven by supernovae and black hole feedback.** Mon Not R Astron Soc. 490(3):3234-3261.

Neufeld S, Bocchini A, Gerstmann U, et al. 2019. **Potassium titanyl phosphate (KTP) quasiparticle energies and optical response.** J Phys Mater. 2:045003.

Olivares H, Porth O, Davelaar J, et al. 2019. **Constrained transport and adaptive mesh refinement in the Black Hole Accretion Code.** Astron Astrophys. 629:A61.

Pausch K, Herff S, Zhang F, et al. 2019. **Noise sources of lean premixed flames.** Flow Turbul Combust. 103(3):773-796.

Pfeiffer M, Nizenkov P, Fasoulas S. 2019. **Extension of particle-based BGK models to polyatomic species in hypersonic flow around a flat-faced cylinder.** AIP Conf Proc. 2312:100001.

Pillepich A, Nelson D, Springel V, et al. **First results from the TNG50 simulation: the evolution of stellar and gaseous discs across cosmic time.** Mon Not R Astron Soc. 490(3):3196-3233.

Pindzola MS, Loch SD. 2019. **Electron and photon ionization of the BeH molecule.** J Phys B-At Mol Opt. 52(19).

Reitzle M, Ruberto S, Stierle R, et al. 2019. **Direct numerical simulation of sublimating ice particles.** Int J Therm Sci. 145: 105953.

Resch M\*. **High performance computing and machine learning.** Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel, Distributed, GPU and Cloud Computing for Engineering. Civil-Comp Press.

Resch M\*, Boenisch T\*, Gienger M\*, Koller B\*. 2019. **High performance computing: challenges and risks for the future.** Advances in Mathematical Methods and High Performance Computing. Springer.

Resch M\*, Kaminski A\*, eds. 2019. **Special Issue: The epistemological significance of methods in computer simulation.** Minds & Machines 29(1).

Saam NJ, Kaminski A\*, Resch M\*. 2019. **Simulieren und Entscheiden.** Simulieren und Entscheiden: Entscheidungsmodellierung, Modellierungsentscheidungen, Entscheidungsunterstützung. Springer.

Sanchez PA, Vögele M, Smiatek J, et al. 2019. **Atomistic simulation of PDADMAC/PSS oligoelectrolyte multilayers: overall comparison of tri- and tetra-layer systems.** Soft Matter. 46.

Satcunanathan S, Zamponi R, Meinke M, et al. 2019. **Validation of a model for acoustic absorption in porous media.** INTER-NOISE and NOISE-CON Congress and Conference Proceedings. 4329-4344.

Schembera B\*, Durán JM\*. 2019. **Dark data as the new challenge for big data science and the introduction of the Chief Data Officer.** Philos Tech. 33:93-115.

Schembera B\*, Iglezakis D. 2019. **The genesis of EngMeta: a metadata model for research data in computational engineering.** Metadata and Semantic Research – 12th International Conference. Springer.

Schneider R\*, Kouros J\*. 2019. **Effiziente Programmierung sozialwissenschaftlicher Modelle: ein Vergleich von Net-Logo, Anglica und C++ am Beispiel der Simulation sozialer Diffusion.** Simulieren und Entscheiden: Entscheidungsmodellierung, Modellierungsentscheidungen, Entscheidungsunterstützung. Springer.

Schneiders L, Fröhlich K, Meinke M, Schröder W. 2019. **The decay of isotropic turbulence carrying non-spherical finite-size particles.** J Fluid Mech. 875:520-542.

Schuchart J\*, Gracia J\*. 2019. **Global task data-dependencies in PGAS applications.** Proceedings of ISC High Performance 2019, 312-329. (Hans Meuer Award finalist).

Schwitalla T, Branch O, Wulfmeyer V. 2019. **Sensitivity study of the planetary boundary layer and microphysical schemes to the initialization of convection over the Arabian Peninsula.** Q J Roy Meteor Soc. (ePub Nov 28).

Shamakina A\*, Tsoutsanis P. 2019. **Optimisation of the higher-order finite-volume unstructured code enhancement for compressible turbulent flows.** PRACE White Paper.

Shen B, Ye Q, Guettler N, et al. 2019. **Primary of a non-Newtonian liquid using a high-speed rotary bell atomizer for spray-painting processes.** J Coatings Technol Res. 16(6):1581-1596.

Stephan S, Dyga M, Urbassek HM, Hasse H. 2019. **The influence of lubrication and the solid–fluid interaction of thermodynamic properties in a nanoscopic scratching process.** Langmuir 35: 16948-16960.

Straub S, Forooghi P, Marocco L, et al. 2019. **The influence of thermal boundary conditions on turbulent forced convection pipe flow at two Prandtl numbers.** Int. J. Heat Mass Trans. 144:118601.

Tavelli M, Boscheri W. 2019. **A high-order parallel Eulerian-Lagrangian algorithm for advection diffusion problems on unstructured meshes.** Numerical Methods Fluids. (ePub 19 Jun).

Tchipev N, Seckler S, Heinen M, ... Bernreuther M\*, ... Niethammer C\*, ... Resch M\*, et al. 2019. **TweTriS: Twenty trillion-atom simulation.** Int J High Perform C. (ePub Jan 6).

Waldmann A, Konrath R, Lutz T, Krämer E. 2019. **Unsteady wake and tailplane loads of the common research model in low speed stall.** New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics XII. Springer.

Wang B, Kronenberg A, Stein OT. 2019. **A new perspective on modelling passive scalar conditional mixing statistics in turbulent spray flames.** Combustion Flame 208:376-387.

Yabansu YC, Rehn V, Hötzer J, et al. 2019. **Application of Gaussian process autoregressive models for capturing the time evolution of microstructure statistics from phase-field simulations for sintering of polycrystalline ceramics.** Model Simul Mater Sci. 27(8):084006.

Zeifang J, Schütz J, Kaiser K, et al. 2019. **A novel full-Euler low Mach number IMEX splitting.** Commun Comput Phys. 27(1):292-230.

Zhou H\*, Gracia J\*, Schneider R\*. 2019. **MPI collectives for multi-core clusters: optimized performance of the hybrid MPI+MPI parallel codes.** ICPP 2019: Proceedings of the 48th International Conference on Parallel Processing. 1-10.

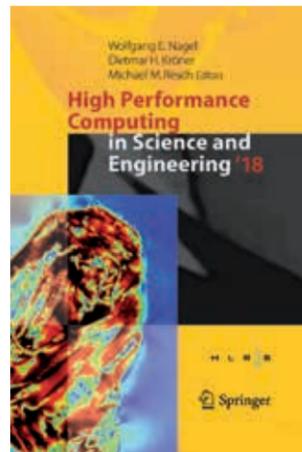
Zirwes T, Zhang F, Habisreuther P, et al. 2019. **Large-scale quasi-DNS of mixed-mode turbulent combustion.** Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics. 19(1). (ePub 18 Nov).

Zirwes T, Zhang F, Habisreuther P, et al. 2019. **Quasi-DNS dataset of a piloted flame with inhomogeneous inlet conditions.** Flow Turbulence Combust. (ePub 8 Nov).

\* zeigt HLRS-Mitarbeiter

# HLRS Bücher

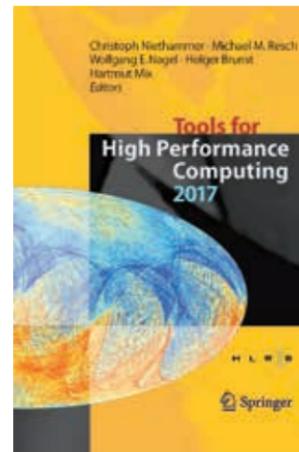
## High Performance Computing in Science and Engineering '18



Autoren:  
Wolfgang E. Nagel  
Dietmar H. Kröner  
Michael M. Resch

This book presents the state-of-the-art in supercomputer simulation. It includes the latest findings from leading researchers using systems from the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) in 2018. The reports cover all fields of computational science and engineering, ranging from CFD to computational physics and from chemistry to computer science with a special emphasis on industrially relevant applications. Presenting findings of one of Europe's leading systems, this volume covers a wide variety of applications that deliver a high level of sustained performance. The book covers the main methods in high-performance computing. Its outstanding results in achieving the best performance for production codes are of particular interest for both scientists and engineers. The book comes with a wealth of color illustrations and tables of results.

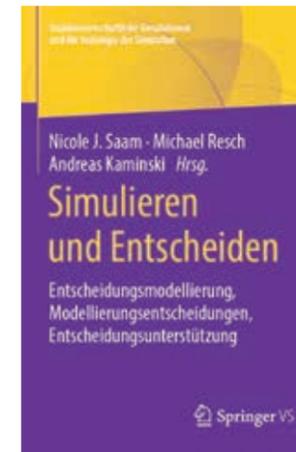
## Tools for High Performance Computing 2017



Autoren:  
Christoph Niethammer  
Michael M. Resch  
Wolfgang E. Nagel  
Holger Brunst  
Hartmut Mix

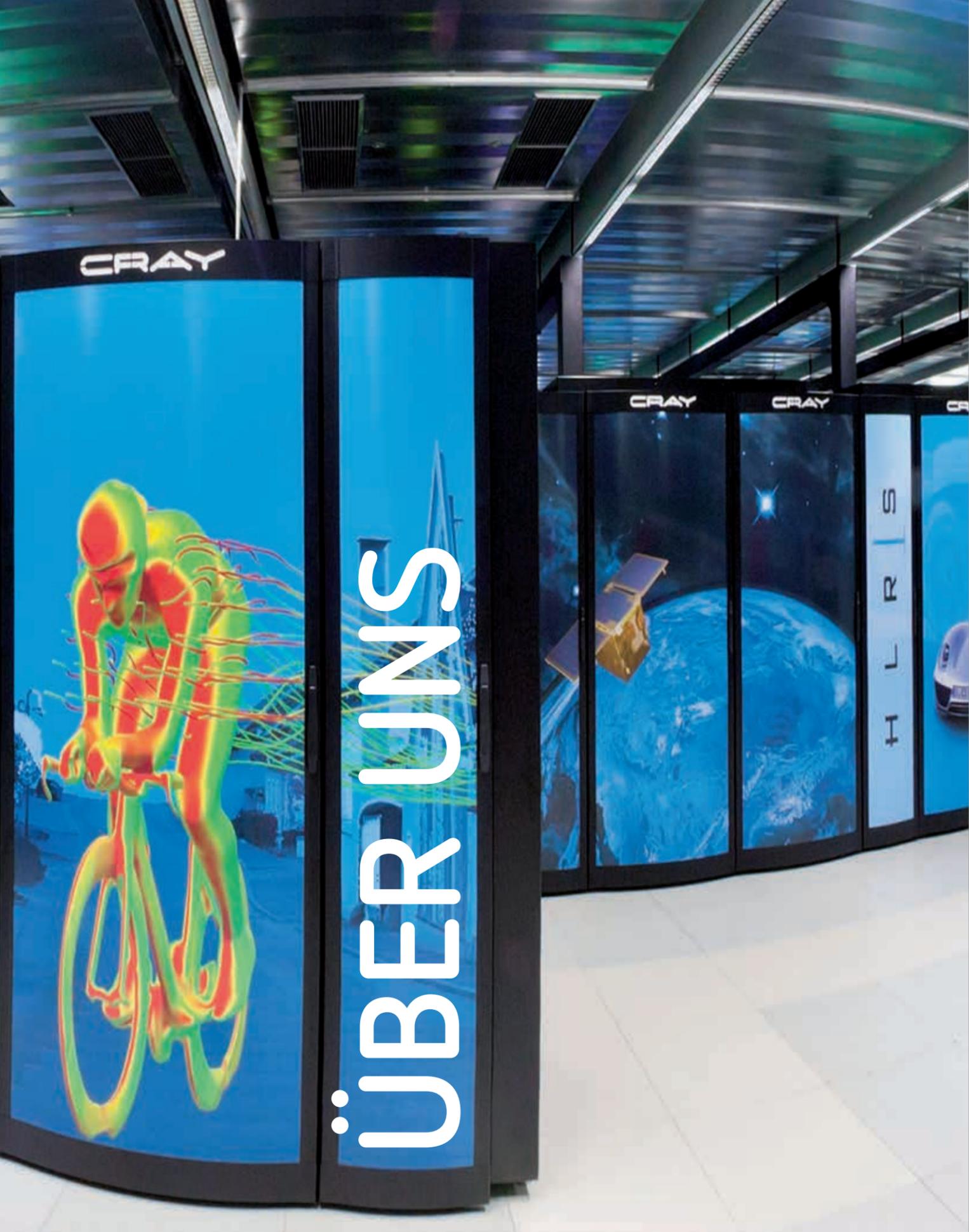
This book presents the proceedings of the 11th International Parallel Tools Workshop, held September 11-12, 2017 in Dresden, Germany. High-performance computing plays an increasingly important role for numerical simulation and modeling in academic and industrial research. At the same time, using large-scale parallel systems efficiently is becoming more difficult. A number of tools addressing parallel program development and analysis has emerged from the high-performance computing community over the last decade, and what may have started as a collection of a small helper scripts has now matured into production-grade frameworks. Powerful user interfaces and an extensive body of documentation together create a user-friendly environment for parallel tools.

## Simulieren und Entscheiden: Entscheidungsmodellierung, Modellierungsentscheidungen, Entscheidungsunterstützung



Autoren:  
Nicole J. Saam  
Michael M. Resch  
Andreas Kaminski

Simulationen geben zunehmend Orientierung für die Entscheidungsfindung in Politik, Ökonomie, Ökologie oder Medizin. Hierzu sind zunächst Modelle zu bilden, wobei die Modellierungsentscheidungen einen großen Effekt auf die Simulationsergebnisse haben. Dieses Zusammenhangs nimmt sich der vorliegende Band an und durchleuchtet Computersimulationen im Kontext von Entscheidungen aus Sicht der Soziologie, Simulationwissenschaft und Philosophie. Dabei stehen drei Fragen im Mittelpunkt: Wie werden Entscheidungen modelliert oder simuliert? Welche metatheoretischen und methodischen Entscheidungen müssen simulierende WissenschaftlerInnen im Zuge der Simulationsstudie treffen? Wie werden organisationale oder politische Entscheidungen durch Modellierungen und Simulationen unterstützt?



# ÜBER UNS

## In unserem Rechenraum

### Hewlett Packard Enterprise Apollo 9000 (Hawk)

2019 wurde mit der Installation des neuen HLRS-Supercomputers Hawk begonnen, der den bisherigen Flaggschiff-Rechner Hazel Hen ersetzen wird. Mit seiner theoretischen Spitzenleistung von 26 Petaflops wird Hawk einer der leistungsfähigsten Supercomputer der Welt und das schnellste General-Purpose-System für universelle Anwendungen im akademischen und industriellen Bereich in ganz Europa sein. Herzstück von Hawk sind EPYC-Prozessoren (II. Generation) von AMD. Der Rechner ist prädestiniert für großmaßstäbliche (large-scale) Simulationen insbesondere aus den Bereichen der Ingenieur- und angewandten Wissenschaften. Die Inbetriebnahme von Hawk ist für das erste Halbjahr 2020 vorgesehen.

<b>CPU</b>	AMD EPYC Rome 7742, 64 core, 2,25 GHz
<b>Anzahl Rechenknoten</b>	5,632
<b>Anzahl CPU-Kerne</b>	720,896
<b>Spitzenleistung</b>	26 Petaflops
<b>Hauptspeicher/Knoten</b>	256 GB
<b>Plattenspeicherkapazität</b>	25 PB

### Cray CS-Storm

Dieser Hochleistungsrechner wird am HLRS primär für Aufgaben aus den Bereichen Künstliche Intelligenz und Deep Learning eingesetzt. Das auf Grafikprozessoren basierende System ist ideal geeignet für datenstromoptimierte Frameworks und Programmbibliotheken wie TensorFlow und PyTorch, unterstützt jedoch auch klassische Machine-Learning-Werkzeuge wie Apache Spark und Scikit-Learn. Der Rechner ist mit der Cray Urika-CS Analytics Suite ausgestattet, wodurch HLRS-Kunden hochkomplexe Problemstellungen dezidiert angehen und Daten mit höherer Genauigkeit auswerten können.

<b>Deep Learning Einheit</b>	64 NVIDIA Tesla V100 GPUs
<b>Cray CS500 Spark Einheit</b>	8 CPU Knoten
<b>Software Compiler</b>	Urika-CS AI Suite
<b>Interconnect</b>	HDR100 Infiniband

### Cray Urika-GX

Das Urika-GX-System ist auf klassische Machine-Learning-Anwendungen optimiert und dient der Analyse von großen Datensätzen. Es ist ideal geeignet für Frameworks wie Apache Spark und Scikit-Learn, die für Data-Mining und Datenclustering in großen Datensätzen eingesetzt werden. Zudem spielt das Urika-System eine Schlüsselrolle im Forschungsbereich High-Performance Data Analytics.

<b>Anzahl Rechenknoten</b>	41
<b>Rechenknoten-Prozessoren</b>	2 x Intel BDW 18-core, 2.1 GHz
<b>Hauptspeicherkapazität pro Knoten</b>	512 GB
<b>Plattenspeicherkapazität pro Knoten</b>	2 TB
<b>Softwarestack</b>	Spark, Hadoop, Cray Graph Engine

## NEC Cluster (Vulcan)

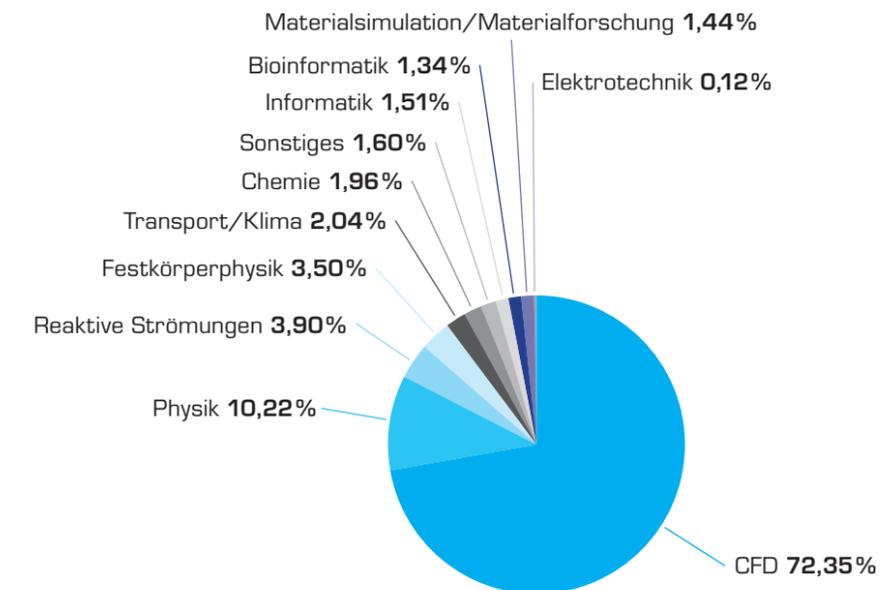
Dieser Standard-PC-Cluster ist seit 2009 am HLRS in Betrieb. Seine Konfiguration wurde fortlaufend gemäß der kontinuierlich steigenden Anforderungen angepasst, dies umfasste u. a. die CPUs, GPUs und Komponenten für das Vektorrechnen. Seine derzeitige Konfiguration gestaltet sich wie folgt:

<b>Intel Xeon Gold 6248 @2.5GHz (CascadeLake)</b>	Anzahl der Rechenknoten: 96 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 128 GB Hauptspeicher für Pre- und Postprocessing: 1 TB
<b>Intel Xeon Gold 6138 @2.0GHz (SkyLake)</b>	Anzahl der Rechenknoten: 100 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 192 GB Hauptspeicher für Pre- und Postprocessing: 1.5 TB
<b>Intel Xeon E5-2660 v3@ 2.6 GHz (Haswell)</b>	Anzahl der Rechenknoten: 88 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB Hauptspeicher für Pre- und Postprocessing: 2 TB
<b>Intel Xeon E5-2680 v3 @ 2.5 GHz (Haswell)</b>	Anzahl der Rechenknoten: 168 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 384 GB Hauptspeicher für Pre- und Postprocessing: 4 TB
<b>AMD Radeon</b>	CPU: Intel Xeon Silver 4112 @ 2.6 GHz (Skylake) Anzahl Rechenknoten: 6 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 96 GB GPU: 1 x AMD Radeon Pro WX8200 GPU Hauptspeicher: 8 GB
<b>Intel Xeon E5-2667 v4 @ 3.2 GHz (Broadwell) mit P100</b>	Anzahl Rechenknoten: 10 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB GPU: 1 x Nvidia P100 GPU Hauptspeicher: 12 GB
<b>NEC SX-Aurora TSUBASA A300-8 @ 2.6 GHz</b>	Anzahl Rechenknoten: 8 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 192 GB Vector Engines: 8 x NEC Type 10B @ 1.4 GHz Hauptspeicher pro Vector Engine: 48 GB @ 1.2 TB/second
<b>Interconnects</b>	Infiniband EDR/FDR/HDR/QDR

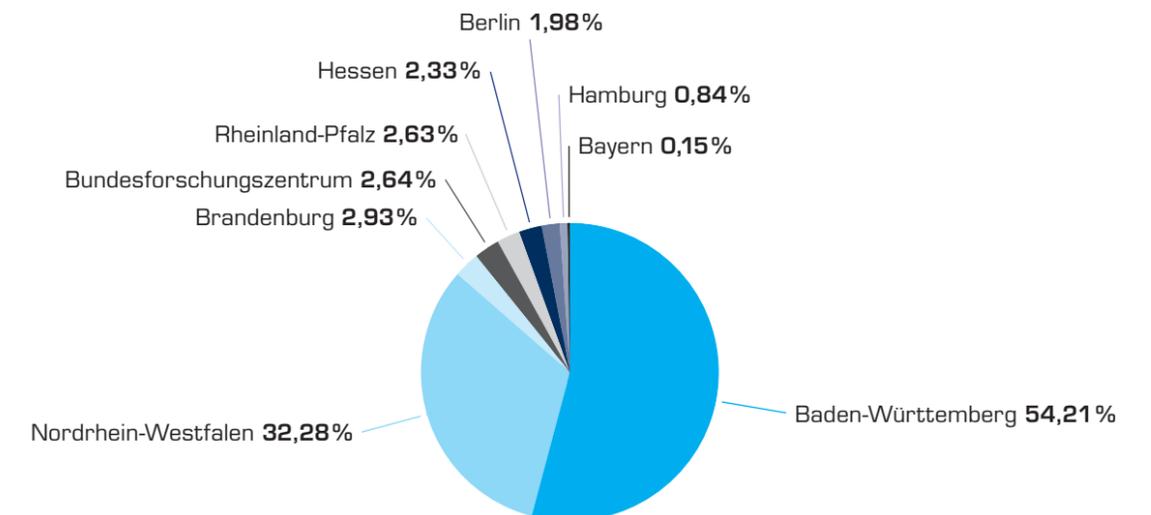
## Unsere Nutzer

2019 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hazel Hen 7 neue Forschungsprojekte („large-scale projects“: jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 878 Millionen Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS 3 internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 145 Millionen Core-Stunden. 2019 wurden auf Hazel Hen insgesamt 127 Projekte mit mehr als 1,36 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, werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS zu wichtige Themen im Hochleistungsrechnen gefördert. Diese Projekte, die meist in Zusammenarbeit mit weiteren Partnern durchgeführt werden, beschäftigen sich mit den wichtigsten Herausforderungen und neuen Anwendungen im HPC-Bereich. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2019.

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>aqua3S</b> → Entwicklung eines neuen Systems zur Erkennung von Bedrohungen der Sicherheit des Trinkwassers durch Kombination von Daten modernster Sensoren und anderen Detektionsmechanismen.	September 2019 – August 2022	EU
<b>BEAM-ME</b> → Nutzung der Möglichkeiten von Hoch- und Höchstleistungsrechnen unter Einsatz von Distributed Memory für hochauflösende Optimierungsmodelle in Energiesystemanalysen.	Dezember 2015 – Juni 2019	BMBF
<b>bwHPC-S5</b> → Koordiniert die Unterstützung der HPC-Nutzer in Baden-Württemberg und die Umsetzung der entsprechenden Maßnahmen und Aktivitäten, einschließlich Data Intensive Computing (DIC) und Large Scale Scientific Data Management (LS <sup>2</sup> DM).	Juli 2018 – Dezember 2020	MWK
<b>bw Naha 2</b> → Unterstützte die Umsetzung von Umwelt- und Energiemanagementsystemen, mit denen das HLRS gemäß ISO 14001, ISO 50001 und EMAS zertifiziert, der Ressourcenverbrauch gesenkt und die ökologische Nachhaltigkeit verbessert werden konnte.	Januar 2017 – Dezember 2019	MWK
<b>bwVisu II</b> → Entwicklung eines Dienstes zur Remote-Visualisierung wissenschaftlicher Daten, insbesondere zur Sicherstellung einer hohen Skalierbarkeit durch Cloud-Technologien.	August 2014 – Oktober 2020	MWK
<b>CATALYST</b> → Erforscht Methoden zur Analyse von Modellierungs- und Simulationsdaten für ein Rahmenkonzept, das HPC und High-Performance-Datenanalyse kombiniert.	Oktober 2016 – Dezember 2021	MWK

<b>ChEESE</b> → Bringt führende europäische HPC-Zentren, Akademiker und Hardware-Entwickler mit KMUs, der Industrie und Behörden zusammen, die auf Katastrophenschutz spezialisiert sind, um europäische Referenz-Codes für kommende Pre-Exascale- und Exascale-Supercomputersysteme vorzubereiten, explizit für Bereiche wie computer-gestützte Seismologie, Magnetohydrodynamik, physikalische Vulkanologie, Tsunamis und die Erdbebenüberwachung.	November 2018 – Oktober 2021	EU
<b>CYBELE</b> → Integriert Tools aus den Bereichen Hoch- und Höchstleistungsrechnen, High-Performance-Datenanalyse und Cloud-Computing, um die Entwicklung effizienter, datengesteuerter Methoden zur Steigerung der landwirtschaftlichen Produktivität und zur Verringerung der Nahrungsmittelknappheit zu unterstützen.	Januar 2019 – Dezember 2021	EU
<b>DIPL-ING</b> → Forscht nach Lösungen für die effiziente Verwaltung großer Datenmengen, die aus den Ausbildungsprogrammen für Ingenieure an der Universität Stuttgart hervorgehen.	April 2017 – Juni 2019	BMBF
<b>EOPEN</b> → Geht technische Hindernisse an, die sich aus den gigantischen Datenmengen von der Erdbeobachtung ergeben, und versucht skalierbare Methoden zur Harmonisierung, Standardisierung, Fusion und zum Datenaustausch sicherzustellen.	November 2017 – Oktober 2020	EU
<b>EuroLab-4-HPC 2</b> → Strebt die Einrichtung eines europäischen Exzellenzzentrums im Bereich HPC-Systeme an.	Mai 2018 – April 2020	EU





# HPC Fort- und Weiterbildung in 2019

2019 bot das HLRS 36 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprechen. Die Kurse fanden an 125 Tagen in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 838 Interessierte an den Kursen teil. Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website:

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

Datum	Ort	Thema
● Jan 28-29	Garching	Introduction to Hybrid Programming in HPC *
● Feb 4-8	Dresden	Parallel Programming (MPI, OpenMP) and Tools
● Feb 18-22	Siegen	Introduction to Computational Fluid Dynamics
● Mar 7	Stuttgart	Introduction to Cluster Filesystems
● Mar 11-15	Stuttgart	CFD with openFOAM
● Mar 25-29	Stuttgart	Iterative Linear Solvers and Parallelization
● Apr 1-5	Stuttgart	Cray XC40 Workshop on Scaling and Node-Level Performance
● Apr 8-10	Frankfurt	Parallelization with MPI and OpenMP
● May 6-10	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing *
● May 13-15	Wien	Parallelization with MPI (TtT)
● May 14-17	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
● May 16-17	Wien	Shared Memory Parallelization with Open MP (TtT)
● May 20-21	Stuttgart	Scientific Visualization
● May 22-23	Stuttgart	OpenMP GPU Directives for Parallel Accelerated Supercomputing *
● Jun 12-13	Wien	Introduction to Hybrid Programming in HPC
● Jun 25-26	Stuttgart	Cluster Workshop
● Jun 27-28	Stuttgart	Node-Level Performance Engineering *
● Jul 1-2	Stuttgart	Efficient Parallel Programming with GASPI *
● Jul 4-5	Stuttgart	Parallel Programming with HPX *
● Jul 9-12	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
● Jul 15-17	Stuttgart	Deep Learning and GPU Programming using OpenACC
● Aug 19-22	Zürich	Parallel Programming with MPI / OpenMP
● Sep 2-6	Siegen	CFD with OpenFOAM
● Sep 9-13	Stuttgart	Introduction to Computational Fluid Dynamics

● Sep 9-20	Novosibirsk	Parallel Programming with MPI / OpenMP
● Sep 16-20	Garching	Iterative Linear Solvers and Parallelization
● Oct 14-18	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (MPI, OpenMP & advanced topics) *
● Oct 24-25	Stuttgart	Scientific Visualization
● Nov 6-8	Wien	Parallelization with MPI (TtT)
● Nov 20-21	Wien	Shared memory parallelization with OpenMP
● Nov 25-27	Göttingen	Parallelization with MPI and OpenMP (TtT)
● Nov 26-29	Stuttgart	Advanced C++ with Focus on Software Engineering
● Nov 28	Heverlee	Shared Memory Parallelization with OpenMP (TtT)
● Dec 2-4	Jülich	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP
● Dec 9-13	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing
● Dec 11-12	Heverlee	Message Passing Interface (MPI) (TtT)

- Parallel Programming
- Programming Languages for Scientific Comput
- Computational Fluid Dynamics (CFD)
- Scientific Visualization
- Performance Optimization and Debugging
- Compute Cluster – Usage and Administration
- Data in HPC

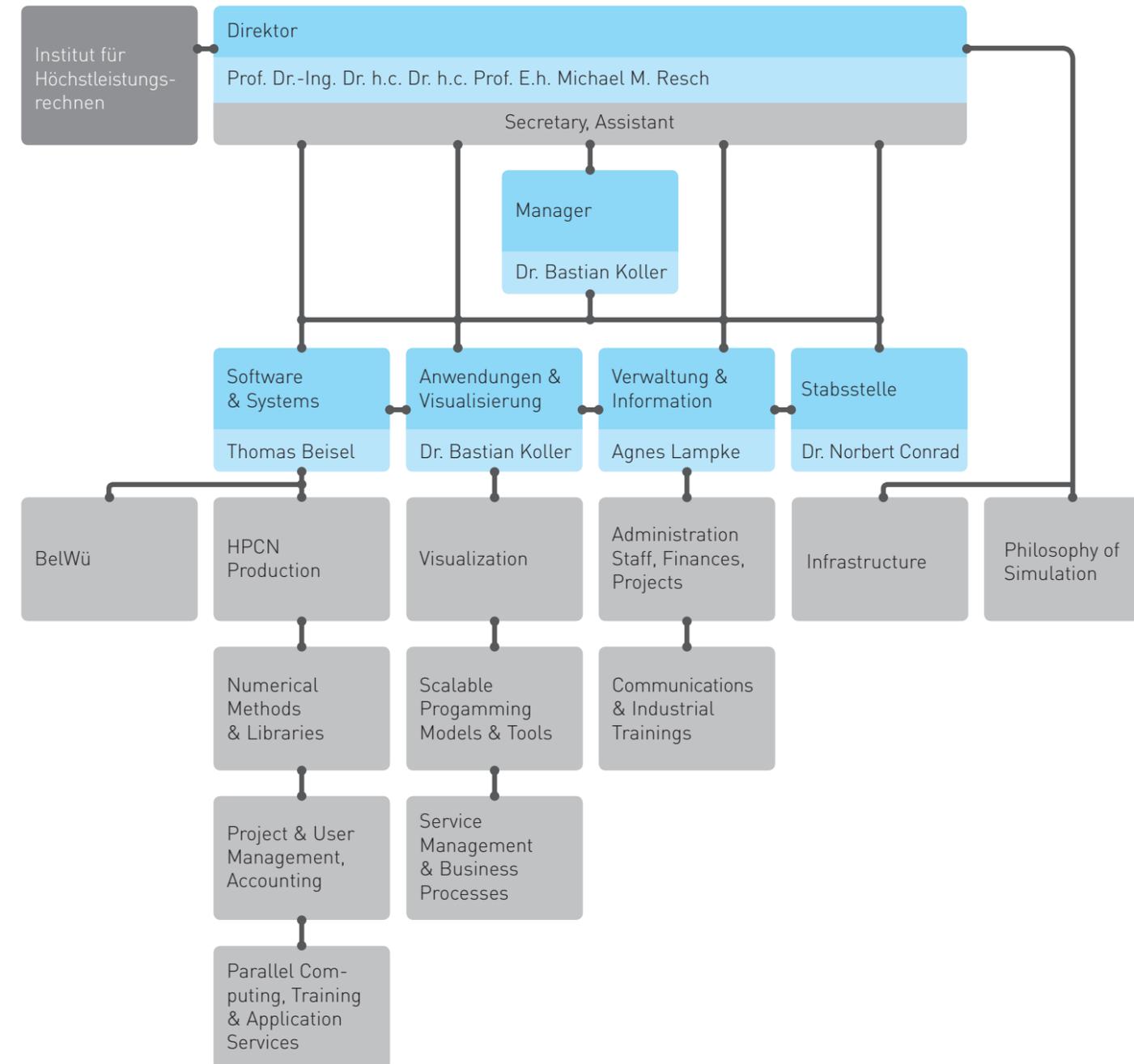
\* PRACE Kurse: Das HLRS, ein Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing, ist ein offizielles PRACE Trainingszentrum der EU.

\* TtT: Train the Trainer Kurse

# Workshops und Konferenzen in 2019

Datum	Ort	Partner	Thema
Mar 14-15	Stuttgart	FAU Institute for Sociology	Sozialwissenschaftliche Simulationen & die Soziologie der Simulation
Apr 8-10	Stuttgart		18th HLRS/hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems: "Convergence"
May 28-29	Stuttgart	Reallabor Stadt:Quartiere 4.0	International Symposium: Urban Systems / Global Challenges / Digital Tools
Sep 2-3	Dresden	ZIH, TU Dresden	13th International Parallel Tools Workshop
Sep 25-26	Stuttgart		International Industrial Supercomputing Workshop 2019
Oct 7-8	Stuttgart		High-Performance Computing in Science & Engineering: 22nd Results and Review Workshop
Oct 9-10	Stuttgart	Tohoku University	30th Workshop on Sustained Simulation Performance
Nov 11-13	Stuttgart		Science and Art of Simulation Workshop 2019: The Society of Learning Algorithms
Dec 3	Stuttgart	SICOS-BW	3rd Industrial HPC User Roundtable (iHURT)

# 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: Dennis Hoppe

Treibt die Konvergenz von Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HPC) und Künstlicher Intelligenz (KI) voran, insbesondere mit dem Ziel, hybride HPC/AI-Workflows auf einer einzigen Infrastruktur zu unterstützen. KI-Lösungen, insbesondere im geschäftlichen Kontext, werden unter Verwendung von Spitzentechnologien entwickelt: Big Data, maschinelles Lernen und Deep Learning. In diesem Zusammenhang forscht die Gruppe ebenso an Virtualisierungstechnologien wie Containern, der Orchestrierung und dem Scheduling von Workflows. Durch Nutzung von Synergien zwischen Virtualisierung und HPC besitzt die Gruppe zudem Erfahrung in der Entwicklung und dem Betrieb

von dynamischen und skalierbaren Cloud-Computing-Diensten. Dabei werden Leistungs- und Verfügbarkeitsüberwachung, elastisches Workflow-Management und ein energieeffizienter Betrieb für föderierte Cloud-Umgebungen effizient eingesetzt.

## 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 Webschnittstellen zum (Bundes-) Projektmanagement und die Informationsbereitstellung für die Nutzer. Außerdem sind in der Abteilung die Aktivitäten des HLRS mit Bezug zur europäischen Supercomputerinfrastruktur PRACE sowie das Datenmanagement gebündelt. Dazu gehören der Betrieb des High-Performance Storage Systems und dessen Weiterentwicklung, die Konzeption neuer Ansätze für das Datenmanagement der Anwender und die Aktivitäten im Bereich Forschungsdatenmanagement.

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

## Stabstellen Begleitforschung

### Philosophy of Science and Technology of Computer Simulation

Leitung: Dr. Andreas Kaminski

Untersucht, wie die Computersimulation und maschinelles Lernen Wissenschaft und Technikentwicklung verändert und wie Gesellschaft und Politik darauf reagieren: Ändern Computersimulation und maschinelles Lernen unser Verständnis von Wissen? Und wie rechtfertigen wir wissenschaftliche Ergebnisse? Wie können digitale Methoden helfen, Unsicherheiten über die Zukunft zu überwinden? Und wie gehen wir mit den Unsicherheiten von Simulation und maschinellem Lernen 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.

© 2020

**Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)**

Universität Stuttgart  
Nobelstrasse 19 | 70569 Stuttgart | Germany

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

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

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

**Leitung:** Dr. Jutta Oexle

**Redaktion:** Christopher M. Williams

**Autoren:** Christopher M. Williams (*CW*),  
Eric Gedenk (*EG*)

**Übersetzung:** Proverb oHG

**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)

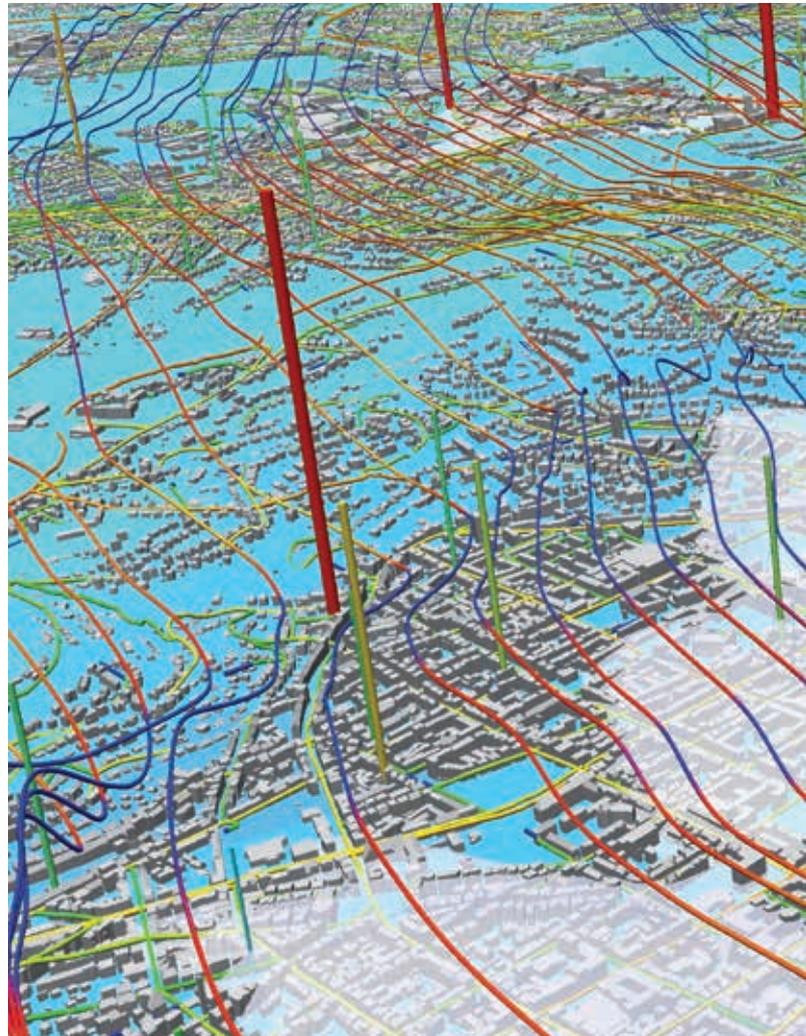
Dieser Jahresbericht wurde auf Papier gedruckt, das vom FSC, dem EU-Umweltzeichen und dem Umweltzeichen des Blauen Engels zertifiziert wurde.





Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart

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



HLRS entwickelte eine immersive, Virtual Reality-basierte Visualisierung der Ausbreitung von Feinstaub in Stuttgart. Nutzer können mit der Simulation auf verschiedenen Skalen interagieren, bis hinunter auf die Ebene einzelner Straßen.