

25 Jahre
HLRS

H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart



2021
Jahresbericht



2021 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 Nutzer:innen 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 (high-performance computing, 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:innen unserer Systeme forschen auf ganz unterschiedlichen Forschungsgebieten mit dem Schwerpunkt auf Ingenieurwissenschaften und angewandte Wissenschaften.

Grußwort

Director's Welcome



Prof. Dr.-Ing. Michael M. Resch, Direktor des HLRS

Willkommen zum Jahresbericht 2021 des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS), in dem aktuelle Leistungen und Aktivitäten unserer Organisation vorgestellt werden. Wir freuen uns, dass wir diese Highlights mit Ihnen teilen können.

Welcome to the 2021 annual report of the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS), presenting recent accomplishments and activities from across our organization. We are pleased to be able to share these highlights with you.

Dieser Jahresbericht bildet den Abschluss eines für uns zentralen Ereignisses im Jahr 2021: die Feierlichkeiten anlässlich des 25-jährigen Bestehens des HLRS als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum Deutschlands. Im Oktober haben wir langjährige Partner, Unterstützer:innen, Kolleg:innen und Freunde eingeladen, nicht nur über die Geschichte des HLRS zu reflektieren, sondern auch über dessen Fortentwicklung und Bedeutung in der Supercomputing-Community auf deutscher, europäischer und internationaler Ebene. Während der Podiumsdiskussionen und der feierlichen Zeremonie war ich nicht nur von der hohen Wertschätzung beeindruckt, die so viele Mitglieder der Community dem HLRS entgegenbringen. Noch viel wichtiger war das gemeinsame Gefühl, dass die bemerkenswerten Rechenressourcen, Lösungen und Fachkenntnisse, die das HLRS bereitstellt, in den kommenden Jahrzehnten noch bedeutender für wissenschaftliche Entdeckungen, industrielle Wettbewerbsfähigkeit und die Lösung vieler gesellschaftlicher Herausforderungen wird.

In diesem Jahresbericht präsentieren wir einen Zeitstrahl der wichtigsten Ereignisse in der Geschichte des HLRS sowie ein Interview mit Dr. Monica Wierse, Leiterin des Bereichs Methoden und Model-based System Engineering bei Porsche und Zeugin des Wachstums des HLRS über viele Jahre hinweg. In dem Gespräch beschreibt sie, wie die HPC-Ressourcen des HLRS die Automobilentwicklung bei Porsche unterstützt haben und wie künstliche Intelligenz (KI) neue Möglichkeiten für die Technologieentwicklung eröffnet.

Das wachsende Engagement des HLRS hinsichtlich künstlicher Intelligenz ist auch ein Leitmotiv des diesjährigen Jahresberichts. Im September wurde unser Supercomputer Hawk um Grafikeinheiten erweitert, sodass wir nun über umfangreiche Ressourcen für maschinelles Lernen, Deep Learning, KI und Höchstleistungsdatenanalyseanwendungen verfügen. Im Dezember startete das vom HLRS koordinierte Projekt IKILeUS mit dem Ziel, KI besser in die gesamte Lehre der Universität Stuttgart zu integrieren. Damit soll sichergestellt werden, dass Absolvent:innen mit den Fähigkeiten in die Arbeitswelt eintreten, die sie für eine

This annual report concludes a central story for us in 2021: our celebration of the 25th anniversary of HLRS's founding as Germany's first national high-performance computing center. In October we invited longtime partners, supporters, colleagues, and friends to reflect not only on HLRS's history, but also on its evolution and continuing importance in the German, European, and international supercomputing communities. In the panel discussions and formal ceremony that took place, I was struck not only by the high esteem with which HLRS is held by so many in the community, but also – more importantly – by the shared sense that the remarkable computing resources, solutions, and expertise that HLRS provides are only growing in their relevance for scientific discovery, industrial competitiveness, and the solution of many challenges facing society in the coming decades.

In this annual report we present a timeline of key events in HLRS's history, as well as an interview with Dr. Monica Wierse, Manager of Methods and Model Based Systems Engineering at Porsche and a witness to HLRS's growth over many years. In the conversation she describes how HLRS's HPC resources have supported automobile development at Porsche and how artificial intelligence (AI) is opening new opportunities for technology development.

HLRS's growing engagement with AI is also a leitmotif of this year's annual report. In September our supercomputer Hawk was expanded through the addition of graphic processing units, meaning that we now offer substantial resources for machine learning, deep learning, AI, and high-performance data analytics. December saw the start of IKILeUS, a project that HLRS is coordinating to improve the integration of AI into instruction across the entire University of Stuttgart campus. This effort will help to ensure that graduates enter the workplace with the skills they need for 21st century careers. In addition, I was delighted to see the start of a new collaboration facilitated by our Media Solution Center, in which the Stuttgart Chamber Orchestra and ZKM are exploring how neural networks could be used to compose music. I look forward to hearing the results.

Karriere im 21. Jahrhundert benötigen. Darüber hinaus habe ich mich über den Beginn einer neuen Kollaboration gefreut, die von unserem Media Solution Center gefördert wird. In diesem Projekt erforschen das Stuttgarter Kammerorchester und das Zentrum für Kunst und Medien (ZKM), wie neuronale Netze für die Komposition von Musik eingesetzt werden können. Ich bin gespannt auf die Ergebnisse.

In einem Jahr, in dem Deutschland von schweren Überschwemmungen und anhaltenden Beeinträchtigungen aufgrund der COVID-19-Pandemie betroffen war, stellte sich eine weitere wichtige Frage: Wie können Höchstleistungsrechner und verwandte Technologien die öffentliche Verwaltung bei der Vorbereitung auf künftige Krisensituationen und deren Bewältigung unterstützen? In einem neuen Projekt mit der Bezeichnung CIRCE hat das HLRS den Austausch mit Regierungsbehörden begonnen, um herauszufinden, wie Simulationen die Entscheidungsfindung in Krisensituationen unterstützen könnten. Es wird viel Arbeit erfordern, potenzielle Kooperationsmöglichkeiten mit Regierungsbehörden zu ermitteln und festzustellen, welche Daten als Grundlage für Simulationen dienen könnten. Unser Ziel ist es definitiv, dass wir als Zentrum im Ernstfall schnell reagieren können.

Das HLRS feierte in diesem Jahr nicht nur den Jahrestag seiner Gründung, sondern darüber hinaus das zehnjährige Bestehen seiner Nachhaltigkeitsstrategie. Wir ruhen uns jedoch nicht auf unseren Lorbeeren aus, sondern haben zwei neue Projekte gestartet, von denen wir uns eine noch bessere Umweltleistung versprechen: ENRICH und DEGREE werden erforschen, wie wir die Energieeffizienz und das Ressourcenmanagement des Zentrums verbessern können. Parallel dazu möchten wir Kontakte zur Industrie knüpfen, um Fortschritte im nachhaltigen Betrieb von Rechenzentren in ganz Baden-Württemberg zu erzielen. Die aus den Projekten gewonnenen Erkenntnisse werden uns auch bei der Planung eines neuen Gebäudes für unseren Supercomputer der nächsten Generation helfen, dessen Eröffnung wir derzeit für das Jahr 2026 vorsehen.

In a year when Germany witnessed severe flooding and continuing disruptions resulting from the COVID-19 pandemic, another important question in 2021 was how high-performance computing could help public administration to prepare for and manage future crisis situations. Through a new project called CIRCE, HLRS has begun meeting with government agencies to identify ways in which simulation could help decision making in crisis situations. Much work is needed to identify potential collaborations with government agencies and to determine what data could form a basis for simulations, but our goal is to put HLRS in a position where it is able to respond quickly in case of an emergency.

In addition to celebrating the anniversary of its founding, HLRS this year also marked the 10th anniversary of its sustainability strategy. Far from resting on our laurels, though, we launched two new projects that we anticipate will lead to even better environmental performance. ENRICH and DEGREE will explore how we could improve energy efficiency and resource management at the center and will establish contacts with industry to help improve sustainability in data centers across Baden-Württemberg. The knowledge gained will also help us in planning for the construction of a new building for our next generation supercomputer, which we currently anticipate should open in 2026.

This year we were once again glad to see strong results in our key performance indicators. Our third-party funding saw an increase over last year, while income from industrial users of our HPC systems was again at a high level. Our HPC training program also bounced back better than ever after disruptions due to COVID in 2020, with our highest ever number of course participants, strong international participation through our increased use of online courses, and the transformation of our Supercomputing Academy into a self-sustaining business model. Reading the science stories and list of publications by our users found in this annual report, it is also clear that our computing resources have been enabling excellent research.

Auch in diesem Jahr konnten wir uns über gute Ergebnisse bei unseren Key Performance Indicators freuen. Die Drittmittelinnahmen sind im Vergleich zu letztem Jahr gestiegen, und die Einnahmen von industriellen Nutzern unserer HPC-Systeme bewegten sich erneut auf hohem Niveau. Auch unser HPC-Schulungsprogramm hat sich von den coronabedingten Unterbrechungen im Jahr 2020 mit der bisher höchsten Zahl an Kursteilnehmer:innen, einer starken internationalen Beteiligung dank des verstärkten Einsatzes von Online-Kursen und der Umwandlung unserer Supercomputing-Akademie in ein selbsttragendes Geschäftsmodell besser denn je erholt. Die wissenschaftlichen Berichte und die Liste der Veröffentlichungen unserer Nutzer:innen in diesem Jahresbericht verdeutlichen, dass unsere Rechenressourcen exzellente Forschung ermöglicht haben.

Auch in dieser Ausgabe möchte ich mich bei den Unterstützer:innen und Förder:innen bedanken, die die Erfolge des HLRS nicht nur in diesem Jahr, sondern in unserer 25-jährigen Geschichte ermöglicht haben. Wir freuen uns darauf, weiterhin mit Ihnen zusammenzuarbeiten, um innovative Wege für die Verwendung von HPC und anderen fortschrittlichen digitalen Technologien zu finden und so die globalen Herausforderungen zu bewältigen, vor denen die Wissenschaft, Industrie, die HPC-Gemeinschaft und die Gesellschaft im Allgemeinen stehen.

Während ich diesen Brief Ende März 2022 schreibe, lastet der Krieg in der Ukraine schwer auf unseren Seelen, und unsere Gedanken und unser Mitgefühl gelten allen, die von ihm betroffen sind. Hoffen wir auf den baldigen Frieden.

Mit freundlichen Grüßen,



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

As always, I extend my thanks to the supporters and funders who have made HLRS's successes possible, not just this year but throughout our 25-year history. We look forward to continuing to work with you to find innovative ways of using HPC and other advanced digital technologies to address the most pressing challenges facing science, industry, the HPC community, and society at large.

As I write this letter in late March 2022, the war in Ukraine weighs heavy on our minds, and our thoughts and sympathies are with everyone affected by it. Let us hope for peace.

2	Grußwort
8	25 Jahre HLRS
9	25 Jahre Innovation am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart
10	Das HLRS: Ein geschichtlicher Überblick
14	Unterstützer:innen gratulieren dem HLRS zum 25-jährigen Bestehen
15	Ein Buch dokumentiert die Geschichte des Supercomputing in Stuttgart
16	Neuigkeiten
24	Highlights der Forschung
25	HLRS verbessert Kapazitäten für Urgent Computing
26	Nachhaltigkeit am HLRS: Aus großer Leistung folgt große Verantwortung
28	Digitaler Zwilling für das historische Ludwigsburger Theater
29	SEQUOIA-Projekt soll Quantencomputer in die Industrie bringen
30	Supercomputing, das atmet: Ein Interview mit Monika Wierse
34	HLRS schließt Informationssicherheitsbewertung ab
35	Vertrauen in die Wissenschaft stärken
36	HLRS in Zahlen
38	Künstliche Intelligenz für eine sicherere Automatisierung
40	Anwenderforschung
41	Supercomputing ermöglicht die Analyse enormer Datensätze der Atmosphärenforschung
44	Neue Wege zur Energiespeicherung in Wasserstoff
46	Simulation könnte die Lebensdauer von Wasserkraftturbinen verlängern
49	Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2021
56	Über uns
57	In unserem Rechenraum
59	Unsere User-Gruppen
60	Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
64	HPC Fort- und Weiterbildung 2021
66	Workshops und Konferenzen 2021
67	HLRS Bücher
69	Organigramm
70	Organisation

25 Jahre HLRS



Michael Resch, Direktor des HLRS,
begrüßte Gäste bei der Jubiläumsfeier.

25 Jahre Innovation am Höchstleistungsrechen- zentrum Stuttgart

Eine Jubiläumsfeier bot die Gelegenheit, über Meilensteine in der Geschichte des HLRS und die Herausforderungen zu reflektieren, die dessen Entwicklung im kommenden Jahrzehnt bestimmen werden.

Das im Jahr 1996 als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum Deutschlands gegründete Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart hat sich nicht nur zu einer zentralen Einrichtung der Universität Stuttgart, sondern auch zu einem international bedeutenden Forschungszentrum für Simulation, Visualisierung und Datenanalyse entwickelt. Im Jahr 2021 feierte das HLRS sein 25-jähriges Bestehen mit einer ganztägigen Veranstaltung, bei der Freunde und Partner aus der gesamten Community gemeinsam über die sich entwickelnde Rolle des Zentrums bei der Förderung wissenschaftlicher Entdeckungen, der Unterstützung der industriellen Wettbewerbsfähigkeit und der Bewältigung globaler Herausforderungen reflektierten.

Die Veranstaltung umfasste Podiumsdiskussionen zu wichtigen Aspekten der Geschichte und der Aktivitäten des HLRS, gefolgt von einer offiziellen Jubiläumsfeier am späten Nachmittag. Zu den Ehrengästen (die entweder anwesend waren oder online Grüße übermittelten) gehörten der Rektor der Universität Stuttgart, Prof. Wolfram Ressel, die Bundesministerin für Bildung und Forschung, Anja Karliczek, und der Ministerialdirektor des Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, Dr. Hans Reiter. Vertreter der Europäischen Union, darunter Gustav Kalbe von der Generaldirektion Kommunikationsnetze, Inhalte und Technologie (CNECT) der Europäischen Kommission, und Anders Dam Jensen, Geschäftsführer der EuroHPC Joint Undertaking, würdigten die Beiträge des HLRS zum Supercomputing auf europäischer Ebene.

Den Abschluss der Zeremonie bildeten Kurzvorträge von hochrangigen Vertretern mehrerer internationaler Partner des HLRS, die sich auf Fragen konzentrierten, mit denen sich die HPC-Gemeinschaft in den kommenden Jahren beschäftigen wird. Dazu gehörten Prof. Dr. Jesús Labarta (Barcelona Supercomputing Center, Spanien), Prof. Horst Simon (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA) und Prof. Dr. Hiroaki Kobayashi (Tohoku University, Japan).

Mit Blick auf die Zukunft des HLRS erklärte Prof. Michael Resch, dass die Nachfrage nach größeren Supercomputern, das Aufkommen neuer Technologien wie künstlicher Intelligenz und Quantencomputern sowie die dringende Notwendigkeit, HPC umweltverträglicher zu machen, drei Schlüsselfaktoren sind, die die weitere Entwicklung des HLRS im kommenden Jahrzehnt vorantreiben werden.

„Heute ist ein Tag, an dem wir mit Stolz auf das zurückblicken können, was das HLRS und seine vielen Partner in den letzten 25 Jahren erreicht haben“, sagte Resch in einer Pressemitteilung im Vorfeld der Veranstaltung. „Gleichzeitig freuen wir uns darauf, weiterhin neue Ressourcen und Lösungen bereitzustellen, die Wissenschaftlern, Technologieentwicklern, öffentlichen Verwaltungen und anderen in unserer Gesellschaft helfen, die zahlreichen Herausforderungen zu bewältigen, mit denen wir konfrontiert sind.“ *CW*

Das HLRS: Ein geschichtlicher Überblick

Mit der Gründung des Höchstleistungsrechenzentrums (HLRS) im Jahr 1996 haben sich die Stadt Stuttgart und die umliegende Region als ein Zentrum für computergestützte Spitzenforschung in Deutschland etabliert. Seitdem hat das HLRS die Chancen genutzt, die zunehmend leistungsfähige Technologien bieten, und neue Anwendungen des Höchstleistungsrechnens für wissenschaftliche Entdeckungen, industrielle Innovationen und die Lösung wichtiger gesellschaftlicher Herausforderungen ermöglicht.

1986
Der baden-württembergische Ministerpräsident Lothar Späth bewilligt die Mittel für einen Cray-2-Supercomputer und begründet damit den Ruf Stuttgarts als Zentrum für Hochleistungsrechnen (HPC).

1996
Ministerpräsident Teufel gründet das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) an der Universität Stuttgart als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum in Deutschland. Das HLRS ist eine Abteilung innerhalb des Rechenzentrums der Universität Stuttgart (RUS) und Prof. Rühle wird zum Direktor ernannt. Bei der Gründungsfeier gibt das HLRS auch den Beginn der Produktion eines neuen Cray-Supercomputers bekannt. Zum Zeitpunkt seiner Einweihung ist das neue System der siebtschnellste Supercomputer der Welt.

Vorgeschichte

Gründung des HLRS Stuttgart

Dienstleistung und Forschung verknüpfen

Baden-Württemberg, Deutschland und Europa zusammenbringen

1995
Baden-Württembergs Ministerpräsident Erwin Teufel und Edzard Reuter, Vorstandsvorsitzender der Daimler-Benz AG, gründen die Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft GmbH (HWW). Die HWW führt erstmals Industrie und Wissenschaft in einem Unternehmen für die Nutzung von Höchstleistungsrechnern zusammen.

1998
Das HLRS initiiert das erste europäische Projekt für Meta-computing (METHODIS). Der Erfolg des Projekts überzeugt die EU, eine eigene Förderlinie für Meta-computing und Grid-Computing einzurichten, und etabliert das HLRS als führendes HPC-Forschungszentrum auf europäischer Ebene.

Im Jahr 1996 begleitete Prof. Roland Rühle Erwin Teufel, Ministerpräsident von Baden-Württemberg, bei einer Führung durch das HLRS.

1999
In Zusammenarbeit mit dem Pittsburgh Supercomputing Center (USA) verbindet das HLRS zum ersten Mal zwei Supercomputer zur Lösung eines Simulationsproblems. In Anerkennung dieser Leistung erhält das HLRS eine Auszeichnung der US National Science Foundation (NSF) für Real Distributed Supercomputing.

2003
Prof. Rühle tritt als HLRS-Direktor zurück und übergibt die Leitung an Prof. Michael Resch.

Das HLRS gewinnt die HPC Challenge auf der SC Supercomputing Conference in Phoenix, USA.

2006
Das HLRS ist Mitbegründer von D-Grid, einer Initiative zur Vernetzung aller deutschen Höchstleistungsrechenzentren.

2004
Baden-Württembergs Ministerpräsident Günther Oettinger begrüßt einen neuen HLRS-Supercomputer, einen NEC SX-8, und eröffnet das neue Gebäude des Zentrums in der Nobelstraße. Zum ersten Mal erreicht ein HLRS-Rechnersystem eine Leistung im Teraflop-Bereich.

Günther Oettinger, Ministerpräsident von Baden-Württemberg, Michael Resch, Direktor des HLRS und weitere Gäste bei der Eröffnung des Bestandsgebäudes des HLRS im Jahr 2004.



2007
Das Land Baden-Württemberg und die Bundesregierung vereinbaren, das HLRS im Rahmen des PetaGCS-Projekts mit 133 Millionen Euro über einen Zeitraum von zehn Jahren zu finanzieren.

Das HLRS, das Leibniz-Rechenzentrum und das Jülich Supercomputing Centre gründen das Gauss Centre for Supercomputing (GCS), die Allianz der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren in Deutschland. Das GCS tritt der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) bei und beginnt mit der Bereitstellung von Rechenressourcen für Wissenschaftler:innen aus der gesamten EU.

Auf Landesebene startet das HLRS das BW-Grid und finanziert Supercomputer an sechs Standorten in Baden-Württemberg.





Feier zur Eröffnung des neuen HLRS Schulungsgebäudes im Jahr 2017.

2007

Das HLRS beteiligt sich am Exzellenzcluster „Simulation Technology“ (SimTech) der Universität Stuttgart, bei dem Prof. Resch als einer der Principal Investigator fungiert.

2010

In Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie gründet das HLRS SICOS BW, um kleinen und mittelständigen Unternehmen den Zugang zu Simulationstechnologien zu erleichtern.

Neue Perspektiven für HPC in Wissenschaft, Industrie und Gesellschaft

2008

Mit der Gründung des Automotive Solution Center for Simulation (ASCS), gründet das HLRS sein erstes Solution Center. Darauf folgt 2018 das Media Solution Center.

2011

Das Energie- und Kühlgebäude des HLRS nimmt seinen Betrieb auf.

Mit Unterstützung des Landes Baden-Württemberg startet das HLRS das Projekt Simulierte Welten, um das Thema Simulation in die Schulen zu bringen.

2012

Baden-Württembergs Ministerpräsident Winfried Kretschmann feiert die Inbetriebnahme eines neuen Cray XE6 Supercomputers am HLRS. Das System wird auf den Namen Hermit (nach dem Eremiten-Käfer) getauft und erreicht am HLRS erstmals eine Leistung von 1 Petaflop. In den folgenden Jahren wird das System erweitert und in Hornet (2014) und Hazel Hen (2015) umbenannt.

Das HLRS eröffnet sein neues Forschungsgebäude.

2014

HLRS verschreibt sich der Nachhaltigkeit und startet sein erstes staatlich gefördertes Nachhaltigkeitsprojekt.

2018

Das HLRS richtet einen gesellschaftspolitischen Beirat ein, der prüft, wie das HLRS zur Bewältigung neuartiger gesellschaftlicher Herausforderungen beitragen kann.

Das HLRS übernimmt die Leitung zweier europäischer Exzellenzzentren, die sich auf die Ingenieurwissenschaften (EXCELLERAT) und Global Systems Science (HiDALGO) konzentrieren.

Das HLRS erweitert sein umfassendes HPC-Schulungsprogramm und ist Mitbegründer der Supercomputing-Akademie, welche das HPC-Fachwissen in der Industrie verbessern soll.

2015

Das HLRS stellt eine Arbeitsgruppe zusammen, die sich mit Wissenschaftstheorie und gesellschaftlicher Relevanz von Simulationen beschäftigt. Ein staatlich gefördertes Projekt zu diesen Themen beginnt 2016.

Auf dem Weg zu Exascale

2017

Das Land Baden-Württemberg und die Bundesregierung vereinbaren über das SiVeGCS-Projekt eine Finanzierung in Höhe von 153 Millionen Euro für das HLRS über die kommenden zehn Jahre.

Das HLRS feiert die Einweihung seines neuen HPC-Schulungsgebäudes.

2020

Ministerpräsident Kretschmann weiht den HLRS-Supercomputer der nächsten Generation, ein HPE Apollo-System namens Hawk, ein.

In Anerkennung seines umfassenden Umweltmanagementsystems erhält das HLRS die Zertifizierung nach dem Umweltzeichen Blauer Engel und dem Eco-Management and Audit Scheme (EMAS). Im Jahr 2022 wird das HLRS nach EMAS rezertifiziert.

Das HLRS übernimmt die Koordination der Projekte EuroCC und CASTIEL, die die Entwicklung von HPC-Fachwissen in ganz Europa fördern.

Gemeinsam mit dem Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung (BiB) erstellt das HLRS täglich Simulationen zur Vorhersage des Bedarfs an Intensivstationsbetten infolge der COVID-19-Pandemie. Mit diesem Projekt setzt zum ersten Mal ein Bundesministerium HPC für Simulationen ein.



Ehrengäste bei der Einweihung des Hawk im Februar 2020: Staatssekretärin Gisela Splett, Landtagsabgeordnete Sabine Kurtz, Parlamentarischer Staatssekretär Michael Meister, Ministerin Theresia Bauer, Ministerpräsident Winfried Kretschmann, HLRS Direktor Michael Resch, HPE Chief Sales Officer Heiko Meyer.

2021

Das HLRS feiert sein 25-jähriges Bestehen und reflektiert über die Geschichte und die zukünftigen Herausforderungen des Hochleistungsrechnens.

Unterstützer:innen gratulieren dem HLRS zum 25-jährigen Bestehen

Prof. Wolfram Ressel

Rektor, Universität Stuttgart

„Das Höchstleistungsrechenzentrum steht exemplarisch für die exzellente Forschungsinfrastruktur der Universität Stuttgart. Seit nunmehr einem Vierteljahrhundert steht das Stuttgarter Supercomputing an der Spitze des wissenschaftlich-technologischen Fortschritts und gilt als Synonym für zukunftsweisende Forschung und Lehre sowie für technologische Transferleistungen zugunsten einer prosperierenden Wirtschaft und Gesellschaft. Ich beglückwünsche zur Jubiläumsveranstaltung alle Forscherinnen und Forscher, die diese Begeisterung täglich leben, für ihre international vielbeachteten Leistungen.“



Bild: Universität Stuttgart/Max Kovalenko

Anja Karliczek

Bundesministerin für Bildung und Forschung *

„Höchstleistungsrechnen ist ein wichtiger Baustein der technologischen Souveränität Deutschlands und Europas. Mit verlässlichen Investitionen in Forschung und Entwicklung digitaler Technologien sichern wir unsere Wettbewerbsfähigkeit. An der Schnittstelle von Wissenschaft und Industrie engagiert sich das HLRS seit nunmehr 25 Jahren und ermöglicht mit Supercomputern immer wieder Bahnbrechendes, wie beispielsweise die Simulationen energieeffizienter Tragflächen. Entscheidend für diesen großen Erfolg ist das hohe Engagement der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter am HLRS: Dank ihnen werden aus Algorithmen und Superrechnern exzellente Forschung und Innovation.“

* Anja Karliczek war Bundesministerin bis Dezember 2021.



Bild: MWK / Sabine Arndt

Theresia Bauer

Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg

„Das Höchstleistungsrechenzentrum an der Universität Stuttgart zählt zu den größten und bedeutendsten Einrichtungen im Supercomputing weltweit. 25 Jahre HLRS sind eine bemerkenswerte Erfolgsgeschichte und seine internationale Sichtbarkeit ist für das Land als Forschungsstandort von elementarer Bedeutung. Als Kompetenzzentrum ist das HLRS für nahezu alle Wissenschaftsbereiche – von den Ingenieurwissenschaften bis zu den Digital Humanities – hochrelevant und leistet unverzichtbare Beiträge zu wichtigen Politikbereichen wie Energiewende und umweltverträgliche Mobilität.“

Ein Buch dokumentiert die Geschichte des Supercomputing in Stuttgart

Stuttgart gilt seit Langem als herausragendes Zentrum für Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland, aber diese Entwicklung war nicht selbstverständlich. In *An den Grenzen der Berechenbarkeit: Supercomputing in Stuttgart* (Chronos Verlag) gehen die Wissenschaftshistoriker David Gugerli und Ricky Wichum den Anfängen des Supercomputing im Südwesten Deutschlands in den 1970er Jahren und den Faktoren, die zur Gründung des HLRS als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum führten, nach. Das Buch wurde anlässlich des 25-jährigen Bestehens des HLRS veröffentlicht.

Das Buch zeichnet die Geschichte des Hochleistungsrechnens (HPC) von der Gründung des Rechenzentrums der Universität Stuttgart (RUS) im Jahr 1972 bis heute nach und fasst die entscheidenden Debatten um den Aufstieg Stuttgarts zu einem national und international bedeutenden HPC-Zentrum zusammen. Diese wurden sowohl von technologischen Fortschritten und wissenschaftlichen Bedürfnissen als auch von politischen, wirtschaftlichen und administrativen Überlegungen zur Finanzierung und Verwaltung dieser wertvollen Ressourcen bestimmt. Die Autoren beleuchten außerdem die Gründung von HWW (Höchstleistungsrechner für Wissenschaft und Wirtschaft), einer innovativen, öffentlich-privaten Partnerschaft, die Hochleistungsrechnen für die Industrie verfügbar macht, sowie den Einfluss der Bedürfnisse der Systemnutzer:innen des HLRS auf die Entwicklung der Rechenressourcen und Dienstleistungen des Zentrums. *CW*

David Gugerli | Ricky Wichum

An den Grenzen der Berechenbarkeit Supercomputing in Stuttgart



Bild: Chronos Verlag

Wissenschaftler:innen des HLRS erforschen im Projekt Cape Reviso Strategien zur Vermeidung von Konflikten zwischen Radfahrenden, Fußgänger:innen und anderen Verkehrsteilnehmer:innen am Stuttgarter Marienplatz.



Neuigkeiten



Im Jahr 2021 wurde der Flaggschiff-Supercomputer des HLRS um Einheiten für KI und Datenanalyse erweitert.

GPU-Erweiterung von Hawk geht in Betrieb

Im Jahr 2020 wurde der Flaggschiff-Supercomputer des HLRS, Hawk, zunächst als reines CPU-System installiert und war für umfangreiche Simulationen optimiert. Angesichts der sich ändernden Bedürfnisse der Systemnutzer:innen wurde Hawk 2021 um Grafikprozessoren (GPUs) erweitert, die die Leistungsfähigkeit des Supercomputers bedeutend verbessern. Vierundzwanzig HPE Apollo 6500 Gen10 Plus-Systeme mit 192 NVIDIA A100-GPUs, die auf der NVIDIA-Ampere-Architektur basieren, bieten nun 120 Petaflops an KI-Leistung. Die Erweiterung bietet Anwender:innen eine ideale Architektur für maschinelles Lernen, Deep Learning, Höchstleistungsdatenanalyse und künstliche Intelligenz (KI). Mit der Integration der GPUs in die bestehende CPU-Infrastruktur von Hawk haben Informatiker:innen des HLRS begonnen, gemeinsam mit den Nutzer:innen des Zentrums neue hybride Berechnungsabläufe zu entwickeln, die traditionelle Simulationsmethoden und KI-Ansätze miteinander verbinden. *CW*

Treffen ermöglicht die Kommunikation zwischen HLRS-Systemnutzer:innen und Mitarbeitenden

Am 22. April nahmen nahezu 100 User der HLRS-Computersysteme an einem Online-Treffen teil, das Nutzer:innen über die jüngsten für ihre Forschung relevanten Entwicklungen am Zentrum informierte. Das neue Format für den Austausch von Ideen und Erkenntnissen innerhalb der HLRS-Gemeinschaft befasste sich mit Komplikationen, die sich aus der andauernden COVID-19-Pandemie ergeben, informierte über technische Entwicklungen der Systeme und gab Nutzer:innen die Möglichkeit, Fragen zu den Ressourcen und zum Betrieb des HLRS zu stellen. Zu den Hauptthemen gehörten der aktuelle Stand der Installation des Supercomputers Hawk sowie Maßnahmen für die Rechenzeitplanung, Datenspeicherung, Sicherheit und den Stromverbrauch. Das HLRS forderte die Nutzer:innen zudem auf, enger mit dem HLRS User Support zusammenzuarbeiten, um die Leistungsfähigkeit ihrer Codes auf den Systemen des HLRS zu verbessern. Dr. Thomas Bönisch vom HLRS betonte: „Software so zu optimieren, dass sie so effizient wie möglich läuft, ist etwas Konkretes, das Forschende tun können, um unseren ökologischen Fußabdruck zu verringern.“ *CW*

Unter den Teilnehmenden der eCulture Convention befanden sich Bernd Eberhardt (HdM), Bastian Koller (HLRS), Matthias Stroezel (SSC Services), Daria Tataj (Tataj Innovation), Matthias Hauser (MSC), Uwe Wössner (HLRS), Bernd Fesel (ECBN), Clara Gonçalves (CUNY Firefly Innovations) und Ellen Seehusen (Beraterin).



eCulture Convention erforscht Zusammenspiel zwischen Kunst und digitalen Technologien

Im September veranstaltete das HLRS einen dreitägigen internationalen Kongress mit dem Titel „The Economic and Cultural Impacts of the Digital Age“. Die Veranstaltung beleuchtete aktuelle Trends in Kunst, Kultur und Wirtschaft und bot die Möglichkeit, modernste Anwendungen von Computertechnologien in der Kunst- und Kulturindustrie zu entdecken. Organisiert wurde die Veranstaltung vom Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC), einer gemeinnützigen Organisation, die im Jahr 2018 vom HLRS mitbegründet wurde, um den wachsenden Bedarf der Medienkunstbranche an Höchstleistungsrechenressourcen und -Know-how zu decken. Seitdem hat das MSC ein internationales Netzwerk von Künstler:innen und Kulturorganisationen aufgebaut, die an der Erforschung dieses Neulands interessiert sind. Dieses Netzwerk erleichtert die Zusammenarbeit mit Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen, die über die technische Expertise zur Umsetzung der gemeinsamen Visionen verfügen. Der eCulture-Kongress brachte zum ersten Mal viele Protagonist:innen des MSC-Netzwerks zusammen. **CW**

Neuer Programmierkurs für maschinelles Lernen

In Zusammenarbeit mit dem Computer-Hardware-Hersteller AMD hat das HLRS einen Online-Kurs angeboten, der sich auf die Nutzung des ROCm™-Software-Ökosystems konzentriert. ROCm ist das Programmier-Framework von AMD für maschinelles Lernen unter Verwendung der AMD Instinct™-Grafikverarbeitungseinheiten auf HPC-Systemen. Es war das erste Mal, dass AMD in Europa einen Schulungskurs mit Schwerpunkt auf Programmierung mit ROCm durchgeführt hat. Der Kurs wurde im Rahmen einer Kooperation zwischen AMD, dem HLRS und EXCELLERAT, dem European Centre of Excellence for Engineering Applications, organisiert und unter der Schirmherrschaft des bwHPC User Support Programms durchgeführt. Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS und Projektkoordinator von EXCELLERAT begrüßte die Kollaboration mit AMD: „Da sich die Hardware-Landschaft für maschinelles Lernen, Deep Learning und künstliche Intelligenz weiterentwickelt, ist es wichtig, dass wir HPC-Usern helfen, die notwendigen Fähigkeiten zu erwerben, um sie zu nutzen.“ **CW**

Der AMD/HLRS-Kurs wurde im Januar online abgehalten. Aufgrund der Nachfrage wurde ein zweiter Kurs veranstaltet.



Beginn der Zusammenarbeit mit dem Institute of Advanced Studies, Brasilien (IAS)

Aufbauend auf ihren komplementären Stärken in Themen wie der digitalen Transformation der Gesellschaft, den politischen Auswirkungen dieser Veränderungen und den aufkommenden eCultures haben das HLRS und das IAS eine dreijährige Vereinbarung getroffen. Ziel ist es, ein gemeinsames Forschungs- und Weiterbildungsprogramm zu entwickeln. Zu den Schlüsselthemen dieser Kollaboration gehören der Einsatz von Computersimulationen und maschinellem Lernen in eCultures, Fragestellungen im Zusammenhang mit Vertrauen und Desinformation, die Geschichte der Anpassung und Täuschung in Technologie und Kunst sowie der Einsatz von Visualisierung in der Kunst. Geleitet wird die Partnerschaft von Lucia Maciel Barbosa de Oliveira und José Teixeira Coelho Netto von der IEA Study Group on Computational Humanities an der Universität von São Paulo zusammen mit Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, und Andreas Kaminski, der die Abteilung Philosophy of Computational Sciences am HLRS leitet. Für das Zentrum ist dies die erste Kollaboration mit Südamerika und eine bedeutende Erweiterung seines internationalen Netzwerks, das aus mehr als einem Dutzend Partnereinrichtungen in Asien, Europa und den Vereinigten Staaten besteht. **CW**

Verleihung der Golden Spike Awards 2021 auf dem 24. jährlichen Results and Review Workshop

Aufgrund der anhaltenden COVID-19-Pandemie fand die diesjährige Leistungsschau der wissenschaftlichen Forschung, die auf den Rechner-Systemen des HLRS und des Steinbuch Centre for Supercomputing betrieben wird, erneut online statt. Das Programm bestand aus 27 Kurzvorträgen und einer virtuellen Session mit 22 Postern, die als PDF-Dateien bereitgestellt wurden. Zum Abschluss der Veranstaltung gab Dr. Dietmar Kröner, Professor an der Universität Freiburg und stellvertretender Vorsitzender des HLRS-Lenkungsausschusses, die Gewinner der Golden Spike Awards 2021 bekannt, mit denen herausragende Leistungen in der Forschung und innovative Anwendungen von HPC-Ressourcen ausgezeichnet werden. Die diesjährigen Preisträger sind Markus Scherer vom Karlsruher Institut für Technologie für seine Präsentation „Secondary flow and longitudinal sediment patterns in turbulent channel flow over a bed of mobile particles in domains of small to intermediate size“, Jakob Dürrwächter von der Universität Stuttgart für „Uncertainty quantification in high order computational fluid dynamics“ und Daniel Mohler vom GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH, Darmstadt, für „Hadronic contributions to the anomalous magnetic moment of the muon from lattice QCD.“ **CW**



Die Golden Spike Awards würdigen herausragende Forschung und die optimale Nutzung von HPC-Ressourcen.



Moderatorin Eva Wolfangel mit Autor Daniel Kehlmann und HLRS-Direktor Michael Resch auf der Bühne des Literaturhauses Stuttgart. Bild: Sebastian Wenzel

Erste Stuttgarter „Zukunftsrede“ erörtert die Grenze zwischen Mensch und Computer

Seit Jahren wird vor der Möglichkeit gewarnt, dass künstliche Intelligenz (KI) Tätigkeiten übernehmen könnte, die traditionell als speziell und grundlegend menschlich galten. In einer Zeit, in der maschinelles Lernen und künstliche Intelligenz rasch neue Fähigkeiten erlangen und in unserem täglichen Leben immer präsenter werden, stellt sich die Frage, wie nah wir dieser Zukunft gekommen sind. In der ersten Stuttgarter Zukunftsrede trug der Bestsellerautor Daniel Kehlmann (*Tyll, Die Vermessung der Welt*) ein Essay vor, in dem er die Fähigkeit von KI untersuchte, eine der größten Errungenschaften der Menschheit zu reproduzieren: die Fähigkeit, Geschichten zu erfinden und zu erzählen. Im Anschluss an die Lesung führte Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS, mit Kehlmann ein fast einstündiges Gespräch, das von der Journalistin Eva Wolfangel moderiert wurde. Die Diskussion konzentrierte sich insbesondere darauf, wie Menschen KI wahrnehmen und mit ihr interagieren, sowie auf die Unterschiede zwischen menschlicher und maschineller Kreativität. Die Veranstaltung wurde am 9. Februar online aus dem Literaturhaus Stuttgart übertragen. *CW*

IKILeUS soll KI in die Hochschulbildung integrieren

Das HLRS koordiniert ein neues, vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördertes Projekt, das die Absolvent:innen der Universität Stuttgart besser auf die Zukunft der künstlichen Intelligenz vorbereiten soll. Das Projekt mit der Bezeichnung IKILeUS verfolgt den ganzheitlichen Ansatz, sowohl KI für die Lehre als auch KI in der Lehre in die Breite der Studierendenschaft zu tragen. Das bedeutet zum einen, dass den Studierenden das Wissen und die Fähigkeiten vermittelt werden, die sie benötigen, um potenzielle Anwendungsmöglichkeiten von KI in ihrem Studienfach auszumachen und umzusetzen. Zum anderen wird IKILeUS an der Universität KI-basierte Technologien einführen, die die Lehre verbessern können, indem sie beispielsweise die Benotung von Aufgaben automatisieren oder Lehrmaterialien für Studierende mit Seh- oder Hörbehinderungen zugänglich machen. Zu den Beiträgen des HLRS gehört es auch, Student:innen zu lehren, über ethische Fragen im Zusammenhang mit KI nachzudenken, einen KI-Fortbildungskurs für Fachleute aus der Industrie zu entwickeln und Computerressourcen bereitzustellen. *CW*

Hardwarespende unterstützt COVID-bezogene Forschung

Im April erhielt das HLRS von dem Computerhardwarehersteller AMD zehn Serversysteme, die für dringenden Rechenbedarf bestimmt sind. Das HLRS setzt die neue Hardware, die innerhalb des AMD COVID-19 High Performance Computing Fund gespendet wurde, für Forschungsarbeiten des Bundesinstituts für Bevölkerungsforschung zur Vorhersage von coronabedingtem Bedarf an Intensivstationsbetten ein. Zukünftig wird sie die Aktivitäten des HLRS im Bereich der „Global Systems Science“ unterstützen und spezielle Rechenleistung für die Reaktion auf Krisensituationen bieten. „Die COVID-19-Pandemie hat Deutschland und ganz Europa wachgerüttelt und gezeigt, dass neue Herausforderungen sehr plötzlich auftreten und weitreichende Auswirkungen auf die gesamte Gesellschaft haben können“, sagte HLRS-Direktor Michael Resch. „Da HPC in wissenschaftlichen Disziplinen, die sich mit diesen Herausforderungen befassen, immer wichtiger wird, müssen HPC-Zentren über ausreichende Supercomputing-Kapazitäten verfügen, um auf plötzliche und dringende Bedarfschübe reagieren zu können.“ *CW*



Installation des neuen Systems des HLRS für Forschung im Zusammenhang mit COVID-19.

Künstliche Intelligenz in der Musikkomposition

Parallel zur Verbreitung des maschinellen Lernens in der Wissenschaft und Technik haben Musiker:innen und Komponist:innen angefangen zu erforschen, welche neuen Möglichkeiten es für die Musikkomposition bieten könnte. Für einige könnte das maschinelle Lernen sogar die Entwicklung von neuen Musikformen ermöglichen. Im Rahmen einer fortlaufenden Zusammenarbeit, die vom Media Solution Center Baden-Württemberg gefördert wird, haben Wissenschaftler:innen des HLRS ihr Fachwissen und Computerressourcen in ein innovatives Projekt gemeinsam mit dem Stuttgarter Kammerorchester (SKO) und dem Hertz-Labor des Zentrums für Kunst und Medien Karlsruhe eingebracht. Mithilfe eines neuronalen Netzwerks, das auf den Systemen des HLRS läuft, trainiert das Team einen Algorithmus für maschinelles Lernen, um Musik zu komponieren, die die Stile des klassischen Komponisten Wolfgang Amadeus Mozart und des Komponisten für serielle Musik Luigi Nono kombiniert. Das SKO plant die aus der Interaktion zwischen Menschen und leistungsstarken Supercomputern hervorgehenden Kompositionen in Zukunft aufzuführen. *CW*



Mario Silveira, Corporate Vice President EMEA von AMD und Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS, legen eine kurze Pause zur Stärkung ein.

HLRS und AMD laufen gemeinsam für den guten Zweck

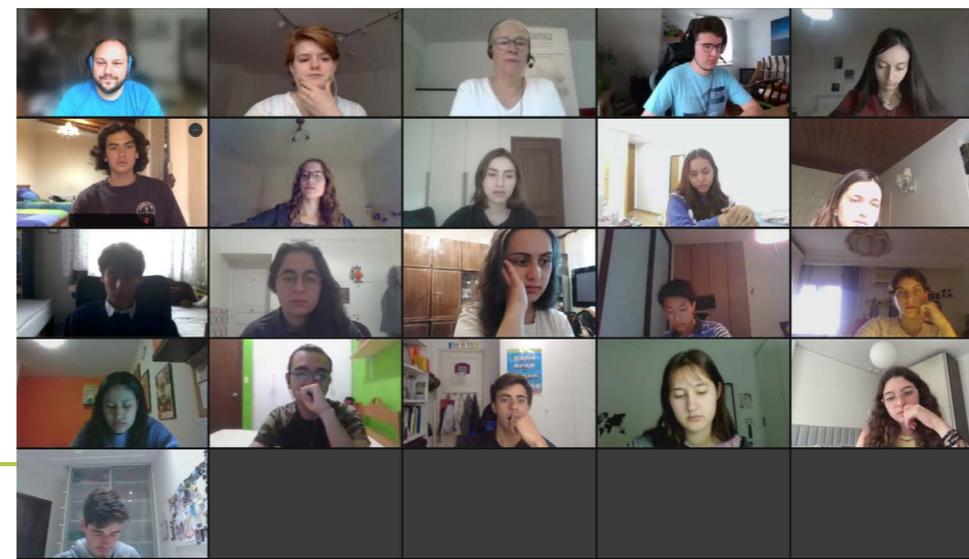
Im Juli nahm das HLRS wieder am Hand in Hand Spendenlauf teil, der jährlich zugunsten des Stuttgarter Kinder- und Jugendhospizes veranstaltet wird. In diesem Jahr beteiligten sich daran sowohl Läufer:innen aus dem HLRS-Team als auch Sportbegeisterte des HPC-Hardwareherstellers AMD. Unter dem Namen „Core Performance Unit (CPU)“ erzielten die Läufer:innen gemeinsam den zweiten Platz in der Teamwertung und absolvierten umgerechnet 1.948 Runden, rund ein Drittel mehr als im Jahr 2020. Insgesamt liefen 78 Teammitglieder von AMD und HLRS mit und drei Läufer kamen in der Einzelwertung unter die ersten zehn. Gemeinsam sammelte das Team 2.000 Euro für das Hospiz, die für den Erhalt von Programmen und Einrichtungen zur Unterstützung schwerstkranker Kinder und ihrer Familien verwendet werden. **CW**

Industrielle HPC-Anwender:innen treffen sich zum 5. iHURT-Symposium

Im Dezember trafen sich mehr als 30 Vertreter:innen von Unternehmen zum 5. iHURT Symposium. Die von der SICOS BW und dem HLRS organisierte Veranstaltung bot ein geschlossenes Forum, in dem HPC-Anwender:innen aus großen und kleinen Unternehmen ihre Herausforderungen beim Einsatz von HPC, Simulation und Datenanalyse in der industriellen Forschung und Entwicklung diskutieren konnten. Gunther Mayer von Volkswagen, Dr. Susanne Kilian von hhpberlin, Haymo Kutschbach von ILNumerics und Darko Brodarac von der Robert Bosch GmbH berichteten über aktuelle HPC-Anwendungen in ihren Unternehmen. Darüber hinaus stellten Mitarbeitende des HLRS, wie Dr. Thomas Bönisch, Dennis Hoppe und Dr. Dmitry Khabi, die aktuellen Entwicklungen des HLRS im Hinblick auf neue HPC-Technologien, Big Data, KI und Quantencomputing vor. Den Abschluss der Veranstaltung bildete eine von Dr. Andreas Wierse, Geschäftsführer der SICOS BW, moderierte Diskussionsrunde. Diese befasste sich mit Themen wie Cloud Computing, Nachhaltigkeit, Softwarelizenzen und dem Bedarf an Weiterbildungsprogrammen im HPC-Bereich. **CW**

Projekt „Simulierte Welten“ wird verlängert

In Anerkennung des Erfolges der Bildungsaktivitäten des HLRS hat das baden-württembergische Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst im Jahr 2021 zum vierten Mal die Förderung des Projektes Simulierte Welten verlängert. Dank dieser Förderung kann das Programm auch weiterhin Schüler:innen frühe Erfahrungen mit den Simulationswissenschaften bieten. In diesem Jahr nahm Simulierte Welten außerdem die Pädagogische Hochschule Ludwigsburg als neuen Projektpartner auf, wodurch das Programm auf weitere Schulformen wie Gemeinschaftsschulen und Realschulen ausgeweitet wird. Im September gestaltete Simulierte Welten einen Workshop im Rahmen der TU9-Ing Woche (MINT-Probestudienwoche), der sich an Schülerinnen und Schüler aus aller Welt richtete, die sich für ein Studium der MINT-Fächer in Deutschland interessieren. Der Workshop (do-IT Day) beschäftigte sich mit der Modellierung von Wärmediffusion und warb für den Studiengang Simulationstechnik an der Universität Stuttgart. **CW**



Schüler:innen aus aller Welt nahmen an einem Online-Workshop von Simulierte Welten teil.

Highlights 2021

HLRS verbessert Kapazitäten für Urgent Computing

Supercomputer-Infrastruktur und Fachwissen könnten Regierungsbehörden dabei unterstützen, schnell auf künftige Pandemien, extreme Wetterereignisse und andere Krisen zu reagieren.

In einem neuen Projekt mit der Bezeichnung CIRCE (Computational Immediate Response Center for Emergencies) wird das HLRS unter der Schirmherrschaft des Gauss Centre for Supercomputing eine Studie durchführen, um den Bedarf und die möglichen Anwendungen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens (HPC) in Krisensituationen zu bewerten. Im Rahmen des dreijährigen Projekts sollen Situationen wie Pandemien, Naturkatastrophen und Migrationsereignisse ermittelt werden, in denen Simulationen, Höchstleistungsdatenanalyse und künstliche Intelligenz die Entscheidungsfindung in Behörden unterstützen könnten. Außerdem soll ermittelt werden, welche organisatorischen Verfahren erforderlich sind, um sicherzustellen, dass die HPC-Ressourcen des HLRS in Notsituationen sofort verfügbar sind.

Die Notwendigkeit eines Projekts wie CIRCE wurde während der COVID-19-Pandemie deutlich, als HLRS-Mitarbeiter mit Simulationsexperten des Bundesinstituts für Bevölkerungsforschung zusammenarbeiteten, um schnell ein Modell zu implementieren, das den Bedarf an Intensivstationsbetten in ganz Deutschland vorhersagt. Dieses Tool, das weiterhin am HLRS läuft und der Bundesregierung einmal pro Woche tagesaktuelle Informationen liefert, hat den politischen Entscheidungsträgern bei der Entscheidungsfindung in Bezug auf das öffentliche Gesundheitsmanagement während der Pandemie geholfen. CIRCE baut auch auf dem Fachwissen auf, das das HLRS im Rahmen des HiDALGO-Exzellenzzentrums gesammelt hat,

Im Rahmen des CIRCE-Projekts wird das HLRS zusätzlichen Bedarf an Hoch- und Höchstleistungsrechnern und Datenanalyseressourcen für das Krisenmanagement ermitteln und kommunizieren. Durch Workshops, Interviews und Fokusgruppen wird das Zentrum engere Kontakte zu potenziellen Partnern auf Bundes- und Landesebene aufbauen. Diese Sondierungsgespräche werden es dem HLRS ermöglichen, besser zu verstehen, wie Simulationen dazu beitragen könnten, den Bedürfnissen der Behörden gerecht zu werden und welche spezifischen Arten von Prognosetools den größten Nutzen bringen würden. Zudem wird geklärt, welche Daten den Behörden zur Verfügung stehen und als Grundlage für Prognosen dienen könnten, die auf den Systemen des HLRS laufen. CIRCE wird auch spezifische Szenarien untersuchen, in denen HPC, HPDA und KI in Krisensituationen eingesetzt werden könnten. Dazu gehört auch die Durchführung von Proof-of-Concept-Tests, die sich auf repräsentative Anwendungen von HPC in Notfällen konzentrieren.

Letztendlich werden diese Bemühungen das HLRS darauf vorbereiten, Regierungsbehörden bei ihren Reaktionen auf künftige Krisen zu unterstützen und den Nutzen seiner HPC-Systeme und seines Fachwissens für die Sicherheit der Menschen und den Schutz kritischer Infrastrukturen zu maximieren.

CIRCE wird vom Bundesministerium für Wissenschaft und Bildung (BMBF) und dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg (MWK) kofinanziert. [CW](#)



Eine Kühlanlage hinter dem Hauptgebäude des HLRS schützt die Computersysteme des Zentrums vor Überhitzung.

Nachhaltigkeit am HLRS: Aus großer Leistung folgt große Verantwortung

Das HLRS feierte das zehnjährige Bestehen seiner Nachhaltigkeitsstrategie und startete zwei neue Projekte zur Verbesserung der Energieeffizienz im IT-Bereich.

Der Betrieb eines der schnellsten Supercomputer Europas bedeutete für das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) stets auch, die Infrastruktur nachhaltig zu betreiben. Vor nunmehr zehn Jahren entstand daraus ein intensives Engagement für Umweltschutz, was zu mehreren offiziellen Zertifizierungen führte. Nichtsdestotrotz lässt das Zentrum in seinen Bemühungen, weitere Fortschritte im Umweltschutz zu erzielen, nicht nach.

„Nachhaltigkeit und Klimaschutz sind für die Landesregierung zentral – das gilt auch für den IT-Bereich“, sagt die Wissenschaftsministerin des Landes Baden-Württemberg, Theresia Bauer, in einer Pressemitteilung zum zehnjährigen Bestehen. „Dass das HLRS als internationaler Leuchtturm hier mit einem gelebten Nachhaltigkeitskonzept beispielgebend vorangeht, ist mit

Blick auf den nötigen Klimaschutz bei Digitalisierung und KI besonders wertvoll.“

Das HLRS wurde als erstes Höchstleistungsrechenzentrum seiner Größe nach EMAS – dem weltweit anspruchsvollsten Programm für Umweltmanagement – und gemäß dem Umweltzeichen „Blauer Engel für den energieeffizienten Rechenzentrumsbetrieb“ zertifiziert. Zum umfassenden Umweltmanagementplan des HLRS gehört, dass die Rechen- und Kühlsysteme so effizient wie möglich betrieben werden und dass das Zentrum seine Umweltleistung kontinuierlich verbessert.

Die Zertifizierungen bedeuten auch, dass das HLRS bestrebt ist, seine Expertise mit anderen Datenzentren zu teilen. „Mit der zunehmenden Digitalisierung wird es

immer bedeutender, dass sich das HLRS sowohl in einem ambitionierten Verbesserungsprozess weiterentwickelt, als auch anderen hilft, nachhaltiger zu werden“, so Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS.

Verbesserung der Energieeffizienz im IT-Sektor

Im Jahr 2021 startete das HLRS zwei neue Forschungsprojekte, die sich auf die Verbesserung der Nachhaltigkeit sowohl im eigenen Betrieb als auch in anderen Rechenzentren konzentrieren werden. Das erste davon, das auf einer Zusammenarbeit zwischen der Universität Stuttgart und der Privatwirtschaft beruht, trägt den Namen ENRICH. Dieses wird einen Digitalisierungsatlas entwickeln, um das Wachstum des IT-Sektors in Baden-Württemberg vorherzusagen und Möglichkeiten zur Steigerung der Energieeffizienz im Land zu identifizieren. Darüber hinaus wird das HLRS Studien durchführen, die sich mit zentralen Nachhaltigkeitsfragen in Rechenzentren befassen, z. B. mit dem Lieferkettenmanagement, dem Lebenszyklus digitaler Technologien und Strategien zur Verbesserung der Energieeffizienz.

Das zweite Projekt mit der Bezeichnung DEGREE ist eine Kollaboration zwischen dem HLRS und dem Institut für Gebäudeenergetik, Thermotechnik und Energie-

speicherung der Universität Stuttgart. Erprobt wird darin ein neuer Ansatz zur Energieeinsparung bei der Kühlung von großen Supercomputern. Der Plan dazu sieht vor, die Mischung aus energieeffizienter freier Kühlung und energieintensiver aktiver Kühlung dynamisch zu regeln, um die Nutzung der freien Kühlung zu maximieren und gleichzeitig die Leistung des Rechen-systems zu optimieren.

Das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg fördert das Projekt ENRICH und unterstützte die Entwicklung des Umweltmanagementsystems des HLRS im Rahmen des Projekts „Nachhaltigkeit in HPC-Zentren“. DEGREE wird von der Deutschen Bundesstiftung Umwelt gefördert.

Gebäudeplanung im Zeichen der Nachhaltigkeit

Auch das für 2026 anvisierte neue Rechnergebäude des HLRS steht schon in der Planungsphase ganz unter dem Zeichen der Nachhaltigkeit. Vor allem die Optimierung der Energieversorgung, der Kühlung und die Nutzung der Abwärme stehen im Vordergrund der Überlegungen. *CW*

Das HLRS arbeitet weiterhin an der Verbesserung seiner Energieeffizienz, auch beim Betrieb des Kühlsystems.



Digitaler Zwilling für das historische Ludwigsburger Theater

Ein umfassendes virtuelles Modell des Theaters trägt zur Erhaltung und Erforschung des Wahrzeichens bei, das die älteste funktionsfähige Bühnenmaschinerie der Welt beherbergt.

Dr. Uwe Wössner, Leiter der Visualisierungsabteilung des HLRS, demonstriert einen digitalen Zwilling des Ludwigsburger Schlosstheaters in der CAVE.



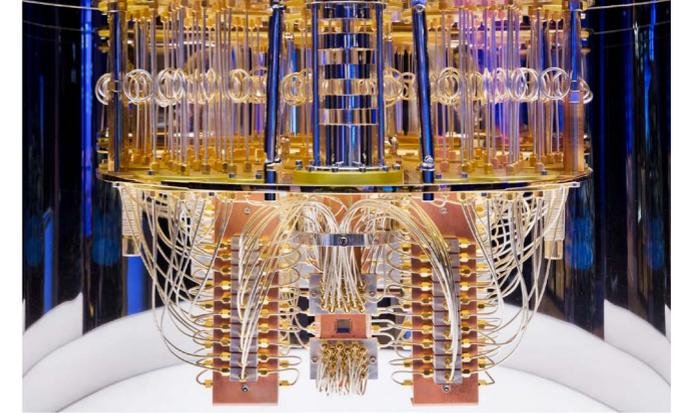
Das in der ersten Hälfte des 18. Jahrhunderts errichtete Schlosstheater im Ludwigsburger Residenzschloss ist sowohl hinsichtlich seiner opulenten barocken Architektur als auch aufgrund der innovativen Technik seiner Bühne von Bedeutung. Die von dem Ingenieur Johann Christian Keim entworfene Maschinerie aus Holz und Seilen ermöglichte es einer einzigen Person, die sich unter der Bühne befand, die Hintergrundkulissen automatisch zu bewegen, ohne den Vorhang zu schließen. Das Publikum soll mit Erstaunen beobachten haben, wie sich das Bühnenbild ohne sichtbares menschliches Zutun veränderte.

Um die Erhaltung und Erforschung des Theaters zu unterstützen, setzte die Visualisierungsabteilung des HLRS einen 3D-Scanner ein. Mithilfe dieses Scanners ließ sich systematisch ein Datensatz erfassen, der das gesamte Innere des Theaters darstellt. Anschließend nutzten die Forschenden Höchstleistungsrechner des HLRS, um die Scans in ein umfassendes Modell, einen sogenannten „digitalen Zwilling“, zu integrieren. Dieser

gibt das physische Theater in einer virtuellen Realität außerordentlich detailreich wieder. In der CAVE-Anlage des HLRS können Besucher:innen die Illusion erleben, sich durch den Raum bewegen, wie er im 18. Jahrhundert ausgesehen haben könnte, und sehen, wie die mechanische Bühnenmaschinerie funktionierte.

Stephan Hurst, Verwaltungsdirektor des Ludwigsburger Schlosses, sagte in einer Pressemitteilung: „Wir erfahren viel über die Funktionsweise und das Ineinandergreifen der Technik – ohne etwas anfassen zu müssen. Das schützt das einzigartige Denkmal.“ Er rechnet damit, dass die Besucher einen großen Nutzen aus dem virtuellen Modell ziehen werden, da „das virtuelle Modell [...] Vorführungen erlaub[e], die im fragilen Original nicht möglich sind.“ Hurst geht zudem davon aus, dass das Modell von großem Interesse für Forschende sein wird, die kontinuierlich mehr über das Schloss lernen und neue Möglichkeiten entwickeln, es anderen zu präsentieren. **CW**

SEQUOIA ist eines von mehreren Projekten, die einen IBM Q System One Quantencomputer in Ehningen nutzen werden. Bild: IBM, verwendet mit Genehmigung.



SEQUOIA-Projekt soll Quantencomputer in die Industrie bringen

Das HLRS wird neue Software für Quantencomputer entwickeln und untersuchen, wie sich diese optimal in herkömmliche Höchstleistungsrechner und künstliche Intelligenz integrieren lassen.

Das Quantencomputing verspricht Vorteile selbst gegenüber den schnellsten Supercomputern. Da die Technologie jedoch noch neu ist, muss dringend ermittelt werden, welche Anwendungen am meisten von ihrem Einsatz profitieren können. Darüber hinaus sind Forschungsarbeiten erforderlich, um die entsprechende Software, Algorithmen und IT-Infrastruktur zu entwickeln, mit denen sich die Leistungsfähigkeit von Quantencomputern vollständig ausschöpfen lässt.

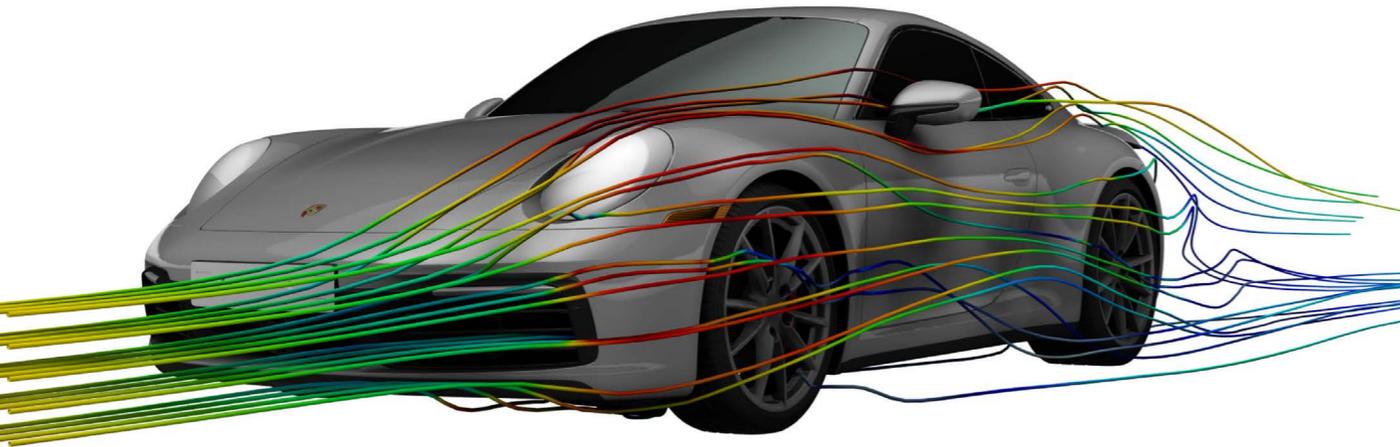
Das HLRS trägt mithilfe des Projekts SEQUOIA dazu bei, diese ehrgeizigen Ziele zu erreichen. In Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut für Arbeitswirtschaft und Organisation sowie fünf weiteren Partnern hat das HLRS mit der Forschung begonnen, um die Leistung von Algorithmen für das Quantencomputing zu verbessern. Darüber hinaus konzentriert sich das HLRS auf die Entwicklung hybrider Ansätze, die Quantencomputing mit bestehenden Methoden des Höchstleistungsrechnens (HPC) und der künstlichen Intelligenz (KI) verbinden. Die gemeinsame Forschung mit Partnern aus der Industrie soll zu Ergebnissen von Quantencomputing-Anwendungen führen, die sowohl die aktuellen Herausforderungen des Hoch- und

Höchstleistungsrechnens und der künstlichen Intelligenz lösen als auch die potenziellen Vorteile des Quantencomputings für den privaten Sektor aufzeigen.

SEQUOIA ist eines von sechs Projekten, die vom baden-württembergischen Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Wohnungsbau mit insgesamt 19 Millionen Euro gefördert werden. Es ist Teil eines Kompetenzzentrums, das die Erprobung eines IBM Q System One Quantencomputers leitet, der kürzlich in Ehningen, einem kleinen Ort südlich von Stuttgart, installiert wurde.

„Der Zugang zu Deutschlands erstem IBM-Quantencomputer macht Stuttgart und das Land Baden-Württemberg zu einem europäischen Zentrum für Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet des Quantencomputings“, sagte Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Wie bei den HPC-Systemen des HLRS ist es jedoch wichtig, dass wir sicherstellen, dass der industrielle Hightech-Sektor in unserer Region davon profitieren könnte, ebenfalls Zugang zu den benötigten Lösungen und zum Know-how zu haben. SEQUOIA wird grundlegende Fragestellungen angehen, um dieses Ziel zu erreichen.“ **CW**

Ingenieur:innen von Porsche nutzen Simulation bei der Entwicklung und beim Testen von neuen Designs, unter anderem zur Optimierung der Aerodynamik von Autos. Bild: Porsche



Supercomputing, das atmet: Ein Interview mit Monika Wierse

Schon vor der Gründung des Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) im Jahr 1996 war die Computersimulation ein wichtiges Werkzeug für die Fahrzeugentwicklung beim Automobilhersteller Porsche. Seitdem ist das Unternehmen ein enger Partner des HLRS und nutzt dessen Supercomputing-Ressourcen bis heute.

Die Mathematikerin Dr. Monika Wierse kam 2006 zu Porsche, nachdem sie zehn Jahre lang als Industrial Application Engineer und Managerin für den Supercomputerhersteller Cray am HLRS gearbeitet hatte. Derzeit ist sie beim Automobilhersteller für den Bereich Methoden und Model-based System Engineering zuständig. In dieser

Funktion beaufsichtigt sie auch die Entwicklung neuer Techniken für simulative Produkttests im gesamten Unternehmen, einschließlich rechnergestützter, hybrider sowie experimenteller Methoden.

Diese Erfahrungen haben Wierse eine einzigartige Perspektive auf die Entwicklung des HLRS gegeben, insbesondere im Hinblick auf die Unterstützung industrieller Anwendungen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens (HPC). In diesem Interview erklärt sie, wie Porsche HPC und künstliche Intelligenz (KI) für die Fahrzeugentwicklung einsetzt und reflektiert über die vielen Möglichkeiten, die die Computerressourcen des HLRS bieten.



Dr. Monika Wierse

Warum ist die Simulation für die Fahrzeugentwicklung bei Porsche so wichtig?

Bei Porsche ist die Simulation mehr und mehr die Basis der Fahrzeugentwicklung geworden. Es kommen z. B. immer mehr Steuergerätefunktionen (z. B. für assistiertes Fahren oder Connectivity) in Fahrzeuge und es ist wichtig, dass alle möglichen Konstellationen getestet werden. Die Herausforderung wird noch komplizierter, weil wir Autos nicht nur für Europa bauen, sondern auch für andere Länder, wo die Luftfeuchtigkeit, Temperaturen und Straßenverhältnisse sehr unterschiedlich sind. Es ist irre, was da alles getestet werden muss und deshalb nutzen wir die modernsten Simulationsmethoden. Wir können daher mit der Simulation ein umfassend „abgesichertes“, weil virtuell erprobtes Fahrzeug abliefern. Darüber hinaus können wir durch frühe Entscheidungen (z. B. Freigaben von Bauteilen) auf Basis der Simulation Entwicklungszeit gewinnen und Kosten sparen, da die Simulation Hardware in Form von Fahrzeugen, Prüfständen und realen Bauteilen ersetzen kann.

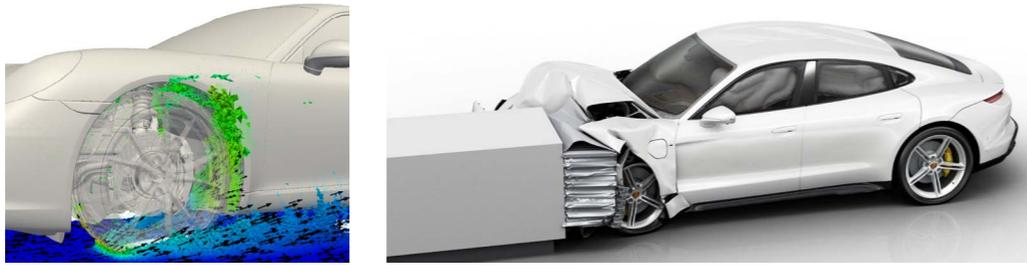
Früher hatte Porsche im Vergleich zu heute wenige Baureihen. Mittlerweile gibt es nicht nur den 911er, sondern auch den Cayenne, den Panamera, den Taycan und noch weitere. Das heißt, es gab damals Peaks, wo wir

viel Rechenpower brauchten und dann gab es ruhigere Zeiten, wo weniger gerechnet wurde. Heute ist es so, dass wir kontinuierlich viel Rechenzeit brauchen und oft am Limit unserer verfügbaren Lizenzen sind.

Porsche und das HLRS haben seit Jahren eine enge Kooperation. Was sind die Vorteile der Partnerschaft für Porsche?

Obwohl Porsche eigene Rechner im Haus hat, haben wir nichts in der Größenordnung, wie das, was das HLRS uns zur Verfügung stellt. Mit Aerodynamik sind wir schon mit mehreren tausend Cores auf Hawk unterwegs. Bei virtuellen Crashtests, in denen wir Fügetechniken modellieren müssen, ist die Skalierung allerdings ganz schwer. Was bei uns deswegen oft wichtiger ist, ist gar nicht die Skalierbarkeit, sondern der Durchsatz. Das heißt, die Rechenressourcen des HLRS bieten uns die Möglichkeit, viele kleinere Simulationen parallel laufen zu lassen.

Aus dieser Perspektive ist es uns immer zum Vorteil gewesen, dass wir am HLRS so eine atmende Ressource haben. Einerseits hat das HLRS einen hochskalierenden Rechner, andererseits betreibt es auch Systeme mit unterschiedlichen Architekturen, inklusive Systeme mit GPUs (Graphic Processing Units) für KI.



Porsche nutzt Simulation zur Untersuchung des Wassermanagements (links) und für virtuelle Crashtests (rechts).
Bild: Porsche

Heute ist die Rede oft vom Thema Cloud-Computing, wobei man sich Ressourcen dann zieht, wenn sie gebraucht werden. Es hat nie einer so genannt, aber das haben wir mit dem HLRS schon immer gemacht. Wir haben eine direkte und sichere Anbindung, der Datentransfer ist weitgehend automatisiert. Wir haben schon alles gelöst und deswegen sage ich, unsere HPC-Cloud steht am HLRS.

Gibt es weitere Dimensionen der Zusammenarbeit mit HLRS neben der Bereitstellung von Computerressourcen?

Obwohl wir schon vieles simulieren können, gibt es immer noch Lücken. Witterungseinflüsse oder die Auswirkungen von Verschmutzung, zum Beispiel, sind sehr wichtig für die Akzeptanz eines Fahrzeugs, aber schwierig zu modellieren. Deswegen finde ich es sehr gut, dass viele akademische Forschungsprojekte am HLRS laufen. Die Ergebnisse kommen uns irgendwann auch in einem kommerziellen Code zugute.

Wir haben auch immer wieder Industriepromotionen mit dem HLRS laufen, wo wir uns Simulationsthemen mit HPC-Bezug in der Fahrzeugentwicklung anschauen. Vor sechs Jahren, zum Beispiel, wollten wir das Wassermanagement besser verstehen. Wo läuft das Wasser im Fahrzeug überall hin, wenn man durch ein tieferes Tauchbecken fährt? Oder wird es nach dem Regen in

den Kofferraum tropfen, wenn du die Kofferraumklappe hebst? Ein Kollege hier bei Porsche hat mit Unterstützung von Prof. Michael Resch und mit den Rechenressourcen des HLRS das Thema erforscht. Jetzt sind die Ergebnisse bei uns im Einsatz und wir können relativ früh in der Entwicklung Probleme erkennen. Die Kooperation hat uns schon einen ganzen Schritt weiter gebracht.

Kürzlich hat das HLRS seine Systeme mit Grafikprozessoren ausgestattet, um KI zu unterstützen. Wie nutzt Porsche diese neuen Ansätze?

Künstliche Intelligenz ist ein Riesenthema in der Methodenentwicklung von Porsche geworden. Beim HLRS rechnen wir zehntausende von Crash-Simulationen von einem Gesamtfahrzeug. Das ist großartig, aber bringt auch ein großes Problem mit sich: der Aufwand, sich die Tausenden von kleinen Bauteilen anzuschauen, um festzustellen, ob irgendwo ein Blech eingeknickt ist, wird immer größer. Da wollen wir jetzt KI einsetzen um dies einfacher zu machen.

Es gibt auch viele andere Anwendungen. Mit Hilfe von KI entwickeln wir zum Beispiel sogenannte Metamodelle, um Berechnungen schneller zu machen. Wir setzen KI auch an Prüfständen ein, um Fehler in Messungen früh zu erkennen. Zusätzlich können wir mit KI

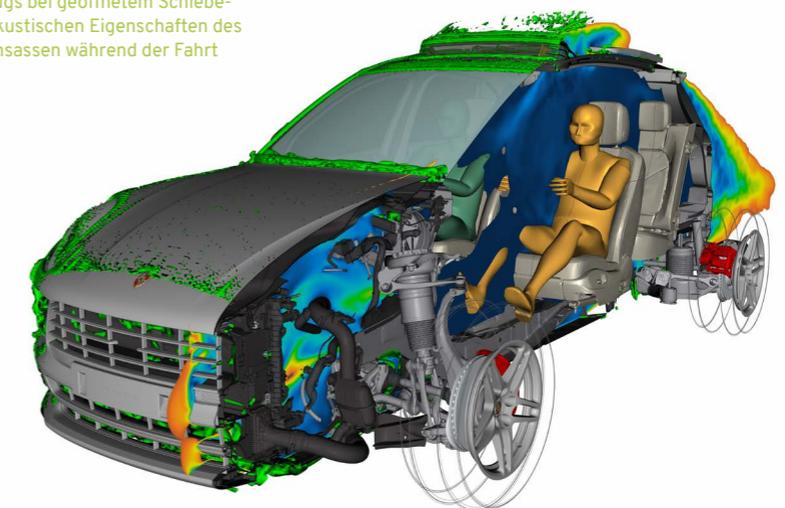
auch Situationen vermeiden, wo wir ein Fahrzeug auseinander bauen müssten, um einen Sensor anzubringen.

Solche Anwendungen sind nicht nur eine Frage der Datenanalytik, sondern wir brauchen auch viel IT-Unterstützung. Das HLRS kann uns auch bei diesen neuen Herausforderungen helfen.

Im Jahr 2021 feierte das HLRS sein 25-jähriges Bestehen. Wie hat sich das HLRS aus Ihrer Sicht im Laufe der Jahre verändert?

Das HLRS und Porsche haben gefühlt einen großen Technologiewandel mitgemacht. Bevor ich bei Cray anfing, war der Fokus von Höchstleistungsrechnern ganz klar bei Vektor-Architekturen. Als die Cray T3E kam, hatten wir plötzlich deutlich mehr Mikroprozessoren und es wurde wichtig, dass man in Bezug auf Latenz und Bandbreite ein leistungsfähiges Netzwerk hat. Das bedeutete auch, dass die ganzen Simulationscodes umgestellt werden mussten. Solche Themen wie Skalierbarkeit und Leistungsoptimierung bleiben immer noch bei Hawk wichtig.

Ein Gesamtfahrzeugmodell des Porsche Macan umfasst nicht nur die Strömung um und durch das Fahrzeug, sondern berechnet auch die Strömung im Inneren des Fahrzeugs bei geöffnetem Schiebedach. Damit ist es möglich, die aeroakustischen Eigenschaften des Schiebedachs und den Komfort der Insassen während der Fahrt virtuell zu evaluieren. Bild: Porsche



Die Verfügbarkeit von kommerziellen Codes ist auch für Porsche immer ein Thema gewesen. Da die Supercomputer nicht immer für alle bei Porsche relevanten Simulationscodes geeignet sind, hat das HLRS im Laufe der Zeit zunehmend auch Standard Cluster aufgebaut und Porsche für die Nutzung bereitgestellt. Damit haben wir inzwischen neben dem hochskalierenden Rechner auch normale Cluster in ausreichender Stückzahl zur Verfügung. Auch hier hat das HLRS reagiert, um unsere Bedarfe decken zu können.

Seit meiner Zeit bei Cray ist das HLRS in seinen Rechenressourcen sehr gewachsen. Die Anbindung, Firewalls, und Netzwerkbandbreite mussten auch alle mitwachsen. Auch die kleineren Cluster sind parallel mit dem Superrechner hochgezogen worden. Ich bin begeistert, welche tolle Kooperation Porsche zusammen mit dem HLRS in diesen 25 Jahren aufgebaut hat und bin jeden Tag aufs Neue gespannt zu sehen, welche Simulationsmöglichkeiten HPC und KI uns noch eröffnet werden. CW

HLRS schließt Informations-sicherheitsbewertung ab

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart bekräftigt das Informationssicherheitsmanagement seiner Systeme formell nach dem TISAX-Prüf- und Austauschmechanismus.

Im Jahr 2021 registrierte sich die Universität Stuttgart im Namen des HLRS als Teilnehmer am Trusted Information Security Assessment Exchange (TISAX). Die Einhaltung dieses internationalen Standards für Datensicherheit bedeutet, dass das HLRS den Datenschutz für Nutzer seiner Rechensysteme versichert.

TISAX, das von der ENX Association im Auftrag des Verbandes der Automobilindustrie (VDA) verwaltet wird, deckt eine Reihe bewährter Praktiken für Datensicherheit ab, einschließlich des Schutzes des physischen Zugangs zu Computereinrichtungen, der Definition von Sicherheitsverantwortlichkeiten für Technologieanbieter und Lieferantenpersonal sowie der Implementierung formeller Prozesse für das Management von Sicherheitsrisiken und Verletzungen des Datenschutzes. Darüber hinaus werden die Verantwortlichkeiten der Mitarbeitenden von Rechenzentren für die Datensicherheit detailliert beschrieben, relevante Erwägungen bei der Beschaffung neuer Systeme dargelegt und formale Überprüfungsprozesse vorgesehen. Diese Vor-

gänge bestätigen, dass das Rechenzentrum alle relevanten rechtlichen Anforderungen erfüllt.

Nach der Registrierung bei TISAX wurden die Datensicherheitspraktiken des HLRS von einem unabhängigen, akkreditierten Audit-Anbieter bewertet. Das Ergebnis der TISAX-Bewertung des HLRS ist auf dem ENX-Portal unter der Scope-ID S55W0V und der Assessment-ID AC6GXZ verfügbar.

„Die Sicherheit der Daten unserer Nutzerinnen und Nutzer hat für uns seit jeher höchste Priorität“, sagte Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Obwohl TISAX in erster Linie für die Automobilindustrie formuliert wurde, bedeutet der Abschluss dieser Bewertung, dass alle akademischen und industriellen Nutzer der Computersysteme des HLRS darauf vertrauen können, dass wir ihre vertraulichen Informationen vor Zugriff, Veränderung und Manipulation schützen und dass Redundanzen vorhanden sind, um Datenverluste zu verhindern.“ *CW*



Das Hochleistungsspeichersystem des HLRS sorgt für die Datensicherheit der HLRS-Systemnutzer:innen.

Vertrauen in die Wissenschaft stärken

Zwei Veranstaltungen brachten Wissenschaftler:innen zusammen, um Fragen über das öffentliche Vertrauen in computergestützte Wissenschaft nachzugehen.

Die von der Abteilung Philosophy of Computational Sciences des HLRS organisierte Workshop-Reihe „The Science and Art of Simulation“ (SAS) untersucht, inwiefern und weshalb Menschen Informationen vertrauen. Das Ziel der Reihe ist es, ein theoretisches Rahmenkonzept zur Verbesserung des Vertrauens in die Wissenschaft zu schaffen. Konkret soll dieses Konzept dazu beitragen, dass Menschen aus allen Gesellschaftsschichten vertrauenswürdige wissenschaftliche Erkenntnisse erkennen können und auf Basis dieses Wissens handeln.

Im sechsten SAS-Workshop im Februar ging es um dieses Thema aus verschiedensten Gesichtspunkten. Die Veranstaltung konzentrierte sich auf Konzepte wie Imitation, Anpassung und Täuschung, die unsere Wahrnehmung von Vertrauenswürdigkeit beeinflussen. In den Vorträgen wurden diese Themen aus historischer Perspektive heraus betrachtet, die die Geschichte der Technologie mit ihren Anwendungen in einer parallel verlaufenden Geschichte der Täuschung verband. Der Workshop stellte Beispiele für Illusion und Täuschung in der Vergangenheit – etwa die Gestaltung von Kirchenaltären, Renaissance-Gärten und Theaterkulissen – zeitgenössischen Phänomenen wie der Verbreitung von Desinformation über das Internet, Deepfakes und dem KI-Sprachmodell GPT-3 gegenüber. Die Teilnehmenden reflektierten über die Art und Weise, wie sich verändernde soziale und kulturelle Annahmen gleichermaßen die Praxis und Erfahrung der Täuschung geformt haben. Daraus erschlossen sie sich Perspektiven, um besser zu verstehen, wie Täuschung heute funktioniert.

Eine SAS-Konferenz, die Ende Oktober stattfand, befasste sich speziell mit der Frage, wie und auf welcher Grundlage ein angemessenes Vertrauen in die Wissenschaft geschaffen werden kann. Das Vertrauen in die Wissenschaft ist für die politische Entscheidungsfindung von höchster Bedeutung, kann jedoch von vielen Faktoren untergraben werden: von Desinformation bis hin zur Undurchschaubarkeit von „Black Box“-Modellen aus dem maschinellen Lernen. Darüber hinaus sind Debatten und sogar Kontroversen unter Wissenschaftler:innen zwar ein gesunder Bestandteil des wissenschaftlichen Betriebs, sie können jedoch die öffentliche Diskussion über die Wissenschaft erschweren und dazu benutzt werden, Zweifel an grundlegenden wissenschaftlichen Fakten zu säen. Auf der Konferenz erörterten die Wissenschaftler:innen Strategien zur Stärkung des Vertrauens in vertrauenswürdige Wissenschaft in einer Zeit, in der die wissenschaftliche Landschaft sowohl komplex als auch in schnelllebige Kommunikationssysteme eingebettet ist. *CW*

Theatralische Illusion in Pierre Corneilles *Andromède*, im Jahr 1650 in Paris uraufgeführt. Bild: Wikimedia Commons



HLRS in Zahlen

153 Beschäftigte

2 Gastwissenschaftler:innen

 108 Wissenschaftler:innen

 37 Nichtwissenschaftler:innen

 5 Studentische Hilfskräfte

 3 Wissenschaftliche Hilfskräfte

60
Vorträge von
Mitarbeitenden
des HLRS

Systemnutzung

4,339 Milliarden
Core-Stunden

130
Nutzerprojekte

61
Industrielle Kunden

139
Publikationen der Nutzer:innen

Publikationen



43 Veröffentlichungen in Fachzeitschriften, Büchern und Konferenzen

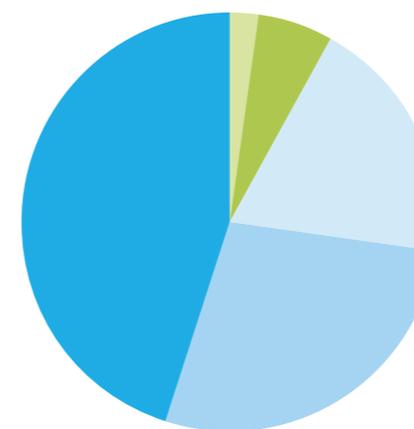
4 Bücher

Aus- und Weiterbildung



 **223** 
Gäste am HLRS

Drittmittel



7.333.300 €



Im Forschungs- und Entwicklungslabor von Festo kommen Experiment und „Verstärkungslernen“ zusammen, um Roboter so zu trainieren, dass sie sicher mit Menschen zusammenarbeiten können. Bild: Festo

Künstliche Intelligenz für eine sicherere Automatisierung

Wissenschaftler:innen von Festo arbeiten mit dem HLRS zusammen, um Robotern „beizubringen“, effizienter mit Menschen zu interagieren.

Festo, der Hersteller von Industriesteuerungen, unterstützt große und kleine Unternehmen bei der Verbesserung ihrer Effizienz durch die Bereitstellung von Technologien zur Automatisierung schwieriger Arbeitsabläufe. Da die Fertigungsprozesse jedoch immer komplexer werden, setzt Festo auf die Leistungsfähigkeit des High-Performance Computing (HPC), um Lösungen besser auf die individuellen Bedürfnisse von Kunden zuzuschneiden.

„Angesichts künstlicher Intelligenz (KI) und anderer neuer Technologien wünschen sich die Menschen

immer häufiger maßgeschneiderte Lösungen für ihre Fabriken“, sagte Dr. Shahram Eivazi, Forscher bei Festo. „Diese Systeme müssen anpassungsfähig sein, damit sie sich verändern können, und gleichzeitig sicher im Zusammenspiel mit den Menschen sein, die am Herstellungsprozess beteiligt sind.“

Im Rahmen des CATALYST-Projekts begann Festo mit dem HLRS zusammenzuarbeiten und die HPC-Ressourcen des Zentrums zu nutzen, um gemeinsam einen KI-Workflow für das Training von Robotern zu entwickeln, der auf biologischen Lernprinzipien basiert.

Wie Roboter neues Verhalten erlernen

Wenn eine Maschine ein neues Verhalten „erlernen“ soll, setzen Forscher:innen hauptsächlich drei verschiedene Methoden ein. Bei den ersten beiden, dem überwachten und dem unüberwachten Lernen, setzen sie große Datenmengen ein, um einen Algorithmus so zu trainieren, dass er effektiv Muster erkennt.

Bei Robotern, die komplexe Aufgaben automatisieren sollen, ist jedoch ein genaueres Training erforderlich. Aus diesem Grund setzt das Team von Festo auf das sogenannte „Verstärkungslernen“, ein Verfahren der künstlichen Intelligenz, die sich stark an Methoden aus der frühkindlichen Entwicklung orientiert. Vereinfacht gesagt, trainieren die Wissenschaftler:innen den Algorithmus, indem sie eine Mischung aus Eingabedaten aus dem Forschungs- und Entwicklungslabor von Festo sowie Video- und Sensordaten aus Produktionsstätten verwenden. So erhält der Algorithmus Feedback und wird „gezwungen“, aus Versuchen und Fehlern zu lernen.

Durch die Anpassung dieser Methode an spezifische Szenarien kann Festo Kunden bei der Entwicklung komplexer Automatisierungsabläufe helfen, die Interaktionen zwischen Menschen und Robotern erfordern. „Wir möchten diese Art von Interaktion sicherer machen, damit wir keine Barrieren zwischen Robotern und Arbeitern errichten müssen“, sagte Eivazi.

Datengesteuerte Trainingsmethoden bedürfen einer HPC-Infrastruktur von Weltklasse

Das Team von Festo benötigt etwa 70 bis 100 Terabyte an Daten, um seinen Algorithmus zu trainieren; eine Menge, die die hauseigenen Computerressourcen übersteigt. Durch die Zusammenarbeit mit dem HLRS konnte Festo die Vorteile der GPU-basierten Cray CS-Storm-Anlage des Zentrums nutzen. „Durch die Zusammenarbeit mit dem HLRS können wir die Frage beantworten: Was wäre, wenn wir stattdessen Zugang zu Tausenden von CPUs hätten?“, sagte Eivazi.

Um diese Leistungsstärke zu nutzen, müssen die Forschenden ihre Software auf ein größeres System

anpassen. Mit Unterstützung von Dennis Hoppe und Oleksandr Shcherbakov vom HLRS hat das Team die bisherige Anwendung so portiert, dass sie auf den HLRS-Systemen effektiv läuft.

Reine Rechenleistung hilft jedoch nicht viel, wenn Forschende nicht in der Lage sind, große Datensätze effizient zu bewegen und zu speichern. Mit einer robusten Speicherinfrastruktur kann das HLRS die Daten von Festo in einer sicheren Umgebung effektiv verwalten, die mit verschiedenen Simulations- und Datenanalyse-tools kompatibel ist.

Weiterführende Pläne für eine fruchtbare Zusammenarbeit

Festo hat drei wesentliche Herausforderungen genannt, die das Team während der weiteren Zusammenarbeit bewältigen muss.

Erstens muss das Team seinen Algorithmus effektiv trainieren, damit er mit der Zeit „intelligenter“ wird. Dies könnte durch die Wiederverwendung von Datensätzen für spätere Trainingsmöglichkeiten erreicht werden.

Zweitens ist es eine Herausforderung, aussagekräftige Datensätze zu sammeln. Simulationen können so schnell ablaufen, wie es die Rechenleistung zulässt. Wenn Festo allerdings Experimente in seinem eigenen Forschungs- und Entwicklungslabor durchführt, bedeutet das, dass sich die Roboter mit realen Geschwindigkeiten bewegen müssen, die aus Sicherheitsgründen nicht zu schnell sein dürfen.

Schließlich muss das Team die Bewegung der Daten vom HLRS optimieren, um die gewonnenen Erkenntnisse schnell in realen Fertigungsszenarien anwenden zu können. Hier wird sich das HLRS auf seine Erfahrungen beim Aufbau seiner Datenübertragungsfähigkeiten im Rahmen der InHPC-DE-Initiative des Gauss Centre for Supercomputing stützen, die die Entwicklung seiner Hochgeschwindigkeits-Datenübertragungsinfrastruktur unterstützt hat. **EG**

Forscher des Vlasiator-Projekts nutzten den Supercomputer Hawk des HLRS, um die erste sechsdimensionale Simulation der Ionendynamik im erdnahen Raum zu entwickeln. In dieser Visualisierung trifft der Sonnenwind auf das Magnetfeld der Erde, was zu einer kugelförmigen Magnetosphäre führt. Bild: Universität Helsinki, verwendet mit Genehmigung.



User- Forschung

Supercomputing ermöglicht die Analyse enormer Datensätze der Atmosphärenforschung

Das HLRS unterstützte Forschende des Karlsruher Instituts für Technologie und des Instituto de Astrofísica de Andalucía des spanischen Forschungsrats (CSIC) bei der Verarbeitung und Analyse von Daten, die für ein Jahrzehnt im Rahmen eines umfangreichen Weltraumprojekts gesammelt wurden.

Am 1. März 2002 blickten europäische Forschende in den Himmel, als die Satellitenmission Envisat begann. Envisat war mit neun Instrumenten ausgestattet, die Informationen über die Erdatmosphäre in noch nie dagewesener Detailgenauigkeit sammeln sollten. 2012 verloren die Mitarbeiter:innen der Europäischen Weltraumorganisation (ESA) schließlich den Kontakt zum Satelliten und erklärten die Mission für beendet. Bis dahin hatte der Satellit täglich Daten zur Erde gesendet.

Eines der Instrumente an Bord von Envisat war das Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS), mit dem die von der Erdatmosphäre abgegebene Infrarotstrahlung gemessen wurde. Diese Messungen helfen Wissenschaftler:innen dabei, die Rolle der Treibhausgase in unserer Atmosphäre besser zu verstehen.

Da viele der in der Atmosphäre vorkommenden Gase in diesen hochauflösenden Spektren charakteristische „Fingerabdrücke“ aufweisen, können Forschende mit jedem Satz von Spektren, die an einem bestimmten Ort aufgenommen wurden, die vertikalen Profile von mehr als 30 wichtigen Gasen erfassen.

Während jeder der 14 täglichen Umrundungen des Satelliten nahm das Instrument Messungen an bis zu 95 verschiedenen Orten vor, von denen jeder eine Anzahl an 17 bis 35 verschiedenen Spektren aufweist, die Höhen von zwischen fünf und 70 Kilometern, manchmal aber auch bis zu 170 Kilometern entsprechen.

Ein Jahrzehnt komprimierter MIPAS-Spektraldaten füllt insgesamt etwa zehn Terabyte. Um eine so große Datenmenge zeitnah zu analysieren, setzen Forscher:innen des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) und des Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA-CSIC) Höchstleistungsrechner (HPC) ein. Das Team ging eine Partnerschaft mit dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart ein, um seinen großen Datensatz sicher speichern und die Supercomputing-Ressourcen des Zentrums zur Modellierung und Analyse der Infrarotspektren von MIPAS nutzen zu können.

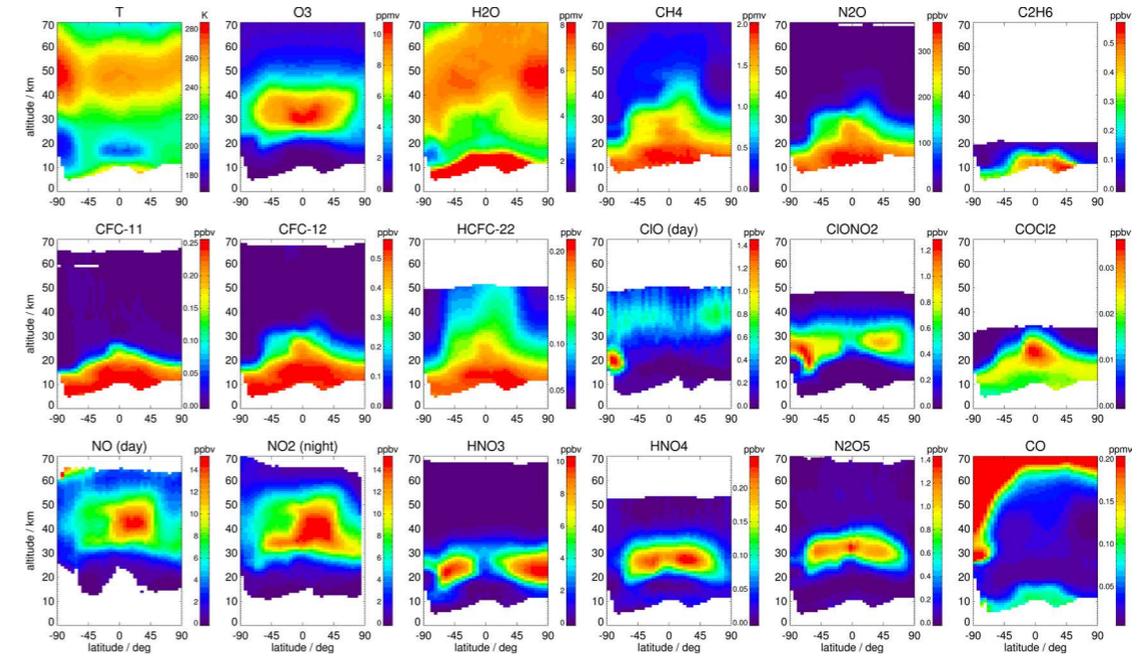
„Mit dem Supercomputer des HLRS konnten wir schnell und gründlich einen kompletten Datensatz für unsere zehnjährige Zeitreihe zusammenstellen“, sagt Dr. Michael Kiefer, Forscher am KIT und Leiter des Projekts. „Wir könnten versuchen, diese Arbeit auf Cluster-Computern vorzunehmen, aber wir würden erst nach Jahren ein Ergebnis erhalten, da die Verarbeitung so rechenintensiv ist. Mit HPC können wir unsere Ergebnisse schnell betrachten und eine größere Vielfalt an chemischen Spezies aus den gemessenen Spektren herausarbeiten. Dies ist nicht nur eine quantitative, sondern auch eine qualitative Verbesserung.“

Eine zunehmend größer werdende Datenflut

In den vergangenen Jahren hat die wissenschaftliche Datenverarbeitung eine neue Entwicklungsphase erreicht. Jahrzehntelang beruhten die Fortschritte in der Datenverarbeitung auf der Idee des Mooreschen Gesetzes – einer Vorhersage von Gordon Moore, wonach sich



Ein Rendering des Envisat-Satelliten, der das MIPAS Erfassungssystem getragen hat. Bild: European Space Agency



Monatliche zonale Mittelwerte von Temperatur und Volumenmischungsverhältnis (vmr) verschiedener chemischer Spezies, berechnet aus den vom MIPAS-Instrument im September 2009 gemessenen Spektren. Die Abszisse gibt den Breitengrad von -90 Grad (Südpol) bis 90 Grad (Nordpol) und die Ordinate die geometrische Höhe an. Die vmr-Werte sind in Teilen pro Million (ppmv) oder Teilen pro Milliarde (ppbv) angegeben, die Temperaturen in Kelvin. Bild: Michael Kiefer/KIT

die Anzahl der Transistoren auf einem Computerchip aufgrund der schrumpfenden Größe der Transistoren alle zwei Jahre verdoppeln würde. Dies, so vermutete er im Jahr 1965, würde in den kommenden Jahrzehnten zu einem nahezu exponentiellen Anstieg der Rechenleistung führen. Obgleich Moore über Jahrzehnte hinweg Recht behalten sollte, wurde diesem Trend in den vergangenen zehn Jahren ein Ende gesetzt.

Wie es der Zufall wollte, war die reine Rechenleistung allerdings nicht mehr das, was viele Wissenschaftler:innen am dringendsten benötigten. Heute wird die Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen häufig nicht mehr von der Verarbeitungsgeschwindigkeit begrenzt, sondern der Notwendigkeit, große Datenmengen effizient zu übertragen, analysieren und zu speichern.

Dies gilt auch für die MIPAS-Forscher:innen, die ein Jahrzehnt an Daten zu 36 verschiedenen chemischen Spezies und Temperaturen verarbeiten und analysieren müssen. Die komplexe Beziehung von Spurengasen in größeren Höhen erschwert die Arbeit des Teams – die Forschenden müssen das Zusammenspiel von Temperatur, Strahlung, Konzentrationen anderer Chemikalien und Wechselwirkungen untereinander erfassen. Infolgedessen führte das Team rechenaufwändige Berech-

nungen des nichtlokalen thermodynamischen Gleichgewichts (non-local thermodynamic equilibrium, NLTE) für diese Spezies durch. Allein die Berechnungen für den Wasserdampf beanspruchten etwa eine Million Kernstunden sowie die Modellierung von neun Spezies mittels NLTE-Methoden.

Obwohl sich diese Simulationen einzeln auf kleineren Anlagen hätten berechnen lassen, würden sie ohne Zugang zu HPC-Ressourcen insgesamt viel zu lange dauern. „Zu Beginn des Projekts arbeiteten wir auf nur einem lokalen Cluster, um einen Monat lang Daten aus der oberen Atmosphäre zu berechnen, für die diese komplexe NLTE-Methode erforderlich ist“, so Dr. Bernd Funke, Forscher am IAA und Mitarbeiter aus dem Projekt. „Um Ergebnisse für einen Monat Daten zu erhalten, brauchte es fast einen Monat an Berechnungen. Jetzt können wir diese Vorgänge in zwei oder drei Nächten durchführen. Aus wissenschaftlicher Sicht ist dieser schnelle Zugriff auf die Daten äußerst wertvoll.“

Sowohl Kiefer als auch Funke wiesen darauf hin, dass die Rechenressourcen des HLRS – sowie die Möglichkeit, die Daten auf dem schnellen und sicheren Höchstleistungsspeichersystem des HLRS zu speichern – dem Team eine schnelle Analyse der Daten ermöglichten.

Experimentelle Methoden der nächsten Generation erfordern die nächste Generation von HPC

Nach Beendigung ihrer Analyse des MIPAS-Datensatzes gehen die Wissenschaftler:innen davon aus, dass es in naher Zukunft neue Weltraummissionen im mittleren Infrarotbereich geben wird. In Anbetracht der riesigen Datensätze, die bei diesen Missionen anfallen werden, werden HPC-Zentren wie das HLRS weiterhin eine wichtige Rolle bei der Speicherung, Verarbeitung und Analyse der Daten spielen.

Künftige Missionen wie die kürzlich von der ESA für Vorstudien zur Durchführbarkeit ausgewählte Earth Explorer-Kandidatenmission CAIRT werden bildgebende Verfahren verwenden, die die Anzahl der Messungen pro Umrundung erhöhen und die Daten um zwei zusätzliche Dimensionen erweitern. Dies wird den

Forschenden sowohl einen noch detaillierteren Blick auf die Prozesse in und die Zusammensetzung der Atmosphäre ermöglichen als auch die Komplexität und den Umfang der erforderlichen Datenanalyse erheblich steigern. Die Wissenschaftler:innen schätzen, dass eines der geplanten Instrumente zu einer bis zu tausendfachen Steigerung der erfassten Datenpunkte führen könnte.

Das Team wies auch darauf hin, dass sich das HLRS dem relativ „untraditionellen“ Bedarf an Supercomputing-Ressourcen schnell angenommen hat. Die derzeitige Umstellung in der Wissenschaft auf noch stärker datenzentrierte HPC-Anwendungen unterstreicht die Notwendigkeit für HPC-Zentren, eine Reihe von Tools im Bereich der Datenspeicherung und -verwaltung anzubieten. EG

Neue Wege zur Energiespeicherung in Wasserstoff

Mithilfe von HPC suchen Wissenschaftler:innen bessere Materialien und Methoden für die Wasserelektrolyse, einen vielversprechenden Ansatz zur Entwicklung von Technologien für erneuerbare Energie.

Technologische Fortschritte führen die Menschheit näher an eine Welt heran, in der erneuerbare Energie sauber und sicher erzeugt wird. Dennoch stehen wir weiterhin vor einer großen Herausforderung: Der Mensch hat keinen Einfluss darauf, wann der Wind weht oder die Sonne scheint. Um die Nutzung erneuerbarer Energien auf globaler Ebene zu ermöglichen, sind Methoden zur effizienteren Speicherung der in Hochphasen erzeugten Energie notwendig, damit die Energieproduktion mit der Nachfrage kontinuierlich Schritt halten kann.

Unter den vielversprechenden Kandidaten für die Speicherung überschüssiger Energie ist Wasserstoff einer der beliebtesten. Mithilfe der sogenannten Wasserelektrolyse erzeugen Wissenschaftler:innen chemische Reaktionen, um die Wassermoleküle in ihre Bestandteile Wasserstoff und Sauerstoff aufzuspalten. Die dabei entstehenden Wasserstoffmoleküle können dann in Speicherbehälter verdichtet werden, wo sie sich als Ersatz für umweltschädliche Energiequellen einsetzen lassen.

Die Wissenschaft hat zwar einige Fortschritte hinsichtlich der Elektrolyse in der industriellen Anwendung erzielt, aber eine Hürde besteht weiterhin: Derzeit ist Iridium der einzige Katalysator, der nachweislich sowohl aktiv als auch stabil genug ist, um die Oxidation von Wasser zu ermöglichen. Leider sind die natürlichen Iridiumvorkommen auf der Erdoberfläche gering. Aus diesem Grund müssen Forschende entweder nach einem völlig neuen Material suchen oder Metalllegierungen entwickeln – Mischungen aus zwei oder mehr Metallen,

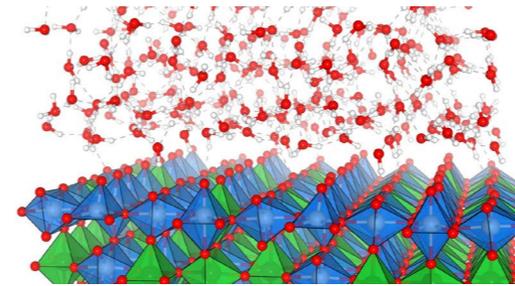
die bestimmte Eigenschaften der einzelnen Materialien beibehalten – um die Wasserelektrolyse zu verbessern.

Wissenschaftler:innen des Fritz-Haber-Instituts in Berlin haben den Hawk-Supercomputer des HLRS genutzt, um die komplexen chemischen Reaktionen, die während der Elektrolyse ablaufen, auf molekularer Ebene zu modellieren. Das Team hofft, ein besseres Verständnis der Besonderheiten von Iridium zu erhalten, um eine effiziente Methode zur Nutzung von Wasserstoff als Energiespeicher im globalen Maßstab zu entwickeln.

„Es ist die entscheidende Frage, warum Iridium so besonders ist“, sagt Dr. Travis Jones, Wissenschaftler am Fritz-Haber-Institut und Mitwirkender an dem Projekt. „Viele Theorien drehen sich um die Idee, dass die Absorptionsenergie der verschiedenen Zwischenprodukte in der Reaktion ideal abgestimmt ist. Allerdings fehlt ein tieferes Verständnis dafür. Wir können nicht einfach auf das Periodensystem der Elemente schauen und sagen, dass Iridium für die Elektrolyse geeignet ist, weil es eine bestimmte Anzahl von Elektronen hat. Wir würden gerne wissen, warum Iridium in diesem Zusammenhang so gut passend ist.“

Betrachtung genauer Wechselwirkungen durch zwei verschiedene Linsen

Um einen grundlegenden Einblick in das Verhalten von Molekülen bei der Elektrolyse zu erhalten, müssen Wissenschaftler:innen diese chemischen Reaktionen auf atomarer Ebene beobachten, indem sie die Bewegun-



Die Fest-Flüssig-Grenzfläche an der iridiumreichen Oberfläche eines Ir-Nb-Mischoxidkatalysators zur Wasseroxidation. Die Iridiumatome sind blau, die Niobatome grün, der Sauerstoff rot und der Wasserstoff weiß dargestellt. Bild: Travis Jones

gen der Elektronen einzelner Atome aufzeichnen und gleichzeitig mehrere hundert Atome bei ihren Wechselwirkungen miteinander beobachten. Außerdem möchten sie diese Phänomene unter verschiedenen Bedingungen untersuchen, was experimentell unmöglich wäre, aber mit Hilfe von Computermodellen praktikabel ist. Hierfür stellen Computerwissenschaftler:innen diese Modelle den Experimentatoren zur Verfügung und liefern so weitere Erkenntnisse für Experimente mit der Spektroskopie.

Dies ist jedoch nur der erste Punkt, an dem HPC eine wichtige Rolle spielt. „Die Simulation der Elektronen durch Lösen der Schrödingergleichung ist der erste Schritt. Hier raten wir im Grunde, was sich in unserem System befindet, indem wir die atomare Struktur der Katalysatoren während der Experimente aufdecken“, so Jones. „Die Experimente können uns jedoch nicht zeigen, wie der Reaktionsmechanismus auf atomarer Ebene funktioniert – Simulationen schon.“

Die erste Phase der Modellierung und experimentellen Arbeit ermöglicht es den Wissenschaftler:innen, auf atomarer Ebene Details der Wasseratome auf der Oberfläche des Katalysators zu erhalten. Sobald sich die Forschenden sicher sind, dass sie ein genaues Bild haben, beginnen sie mit der zweiten Phase, in der sie leichte Änderungen an den Eingaben vornehmen und modellieren können, wie die Reaktion unter verschie-

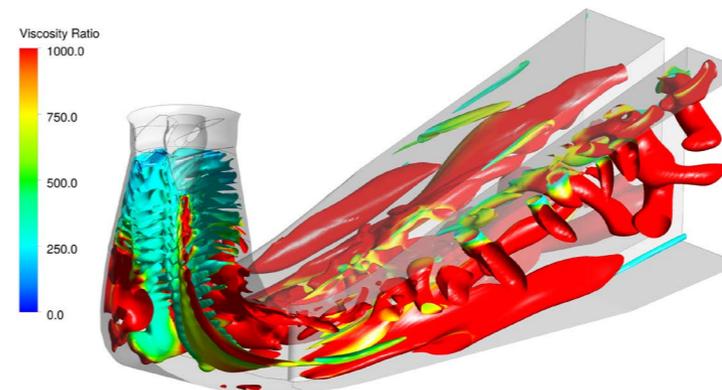
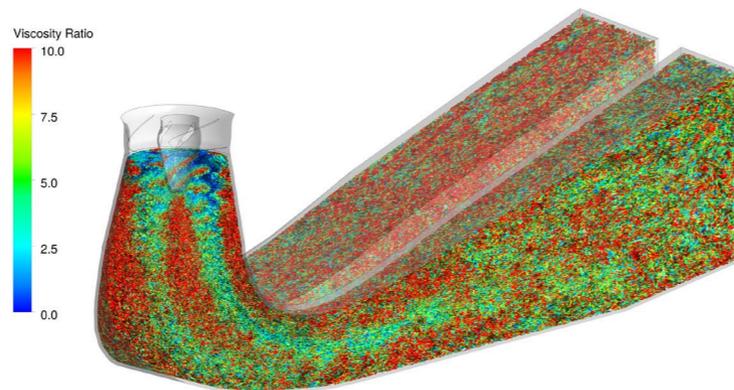
denen Bedingungen abläuft. Mit diesem Schnellverfahren können sie beobachten, wie sich die Reaktion unter anderem durch kleine Spannungsänderungen oder Variationen in der Zusammensetzung der als Katalysator verwendeten Metalllegierungen verändert.

Durch die Forschungsarbeit identifizierte das Team eine bestimmte Legierung, Iridiumoxid gemischt mit Niob ($\text{Ir}_{60}\text{Nb}_{40}\text{O}_x$), die sich fast so stabil wie reines Iridium verhält, aber 40 Prozent weniger des Edelmetalls benötigt. Obwohl die Identifizierung von anderen Materialien, die sich als Elektrokatalysator eignen könnten, weitere Forschung voraussetzt, ist das Team zuversichtlich, dass die Kombination aus spektroskopischen Experimenten und groß angelegten Simulationen die Forschung vorantreiben wird.

Die Supercomputer von heute für das neu konzipierte Energienetz von morgen

In einer großen, internationalen Kollaboration wurde der von Jones und seinen Kolleg:innen verwendete Code kürzlich so modifiziert, dass er auf hybriden Supercomputer-Architekturen ausgeführt werden kann, d.h. auf Rechnern, die zusätzlich zu herkömmlichen CPUs auch Grafikprozessoren (GPUs) verwenden. Das Team begann auch mit der Skalierung seiner Anwendung. Dadurch kann die Gruppe die zunehmend leistungsfähigen Rechnerarchitekturen, wie sie vom HLRS zur Verfügung stehen, voll ausnutzen.

Auch wenn Wasserelektrolyse nicht unmittelbar die vorherrschende Methode zur Veränderung des weltweiten Energienetzes sein wird, ist Jones davon überzeugt, dass sich Wasserstoff als bahnbrechende Neuerung bei der Speicherung und Umwandlung elektrischer Energie erweisen wird. „Die elektrolytische Wasserspaltung verbindet den elektrischen mit dem chemischen Sektor. Wenn wir bis 2050 klimaneutral werden möchten, wird diese Verbindung entscheidend sein“, sagte Jones. „Wir müssen uns sowohl um die Energiespeicherung als auch um die nachhaltige chemische Produktion Gedanken machen. Grüner Wasserstoff könnte zur Lösung dieser beiden Probleme beitragen.“ EG



Joßbergers LES-Simulation (links) einer Wasserturbine berechnet die Energieübertragung aufgrund von Turbulenzen auf einer viel feineren Skala als dies bei einer herkömmlichen RANS-Simulation (rechts) möglich ist. Bild: Universität Stuttgart, Institut für Strömungsmechanik und Hydraulische Maschinen

Simulation könnte die Lebensdauer von Wasserkraftturbinen verlängern

Kaplanturbinen gehören zu den am weitesten verbreiteten Turbinen für die Generierung von Wasserkraft. Forschende der Universität Stuttgart nutzen den Supercomputer des HLRS, um genauer zu verstehen, wie sie unter verschiedensten Betriebsbedingungen noch zuverlässiger eingesetzt werden können.

Seit James Francis Mitte des 19. Jahrhunderts seine Francis-Turbine patentieren ließ, ist Wasserkraft eine der zuverlässigsten, sichersten und saubersten Stromquellen der Welt. Im Zuge des technischen Fortschritts ermöglichten neue Turbinenmodelle Ingenieur:innen die Anpassung von Staudämmen an ein breiteres Spektrum von Landschaften, Klimazonen und Wasserläufen.

Die 1913 von Viktor Kaplan entwickelte Kaplan-Turbine war komplexer als die Francis-Turbine, bot Ingenieur:innen jedoch mehr Spielraum, da sie in der Lage war, mit unterschiedlichsten Durchflussmengen effizient Strom

zu erzeugen. Dies ist insbesondere im Hinblick auf Flüsse von Bedeutung, in denen der Wasserdruck schwankt oder kein ausreichend starkes Gefälle an Dämmen erreicht werden kann, wie z. B. an Flüssen mit geringen Höhenunterschieden.

Die Francis- und Kaplan-Turbinen sind zusammen mit dem Pelton-Rad die überwiegende Mehrheit der heutzutage in Wasserkraftwerken eingesetzten Turbinen. Obwohl diese Anlagen äußerst widerstandsfähig sein können – gut gewartete Kaplan-Turbinen können in manchen Fällen mehr als 50 Jahre lang genutzt wer-

den – führen die Anforderungen, die die sich wandelnde Energielandschaft der Menschheit an sie stellt, zu häufigeren Ausfällen und dem vermehrten Austausch von Turbinen. Insbesondere da manche Länder andere erneuerbare Energiequellen wie Wind- oder Solarenergie ausbauen, müssen diese Turbinen häufiger gestartet, gestoppt und die Durchflussmenge geändert werden, was zu deren Abnutzung führt.

In dem Bemühen, die Auswirkungen der Strömungsbedingungen auf die Zuverlässigkeit von Turbinen besser zu verstehen, haben Wissenschaftler:innen am Institut für Strömungsmechanik und Hydraulische Maschinen (IHS) der Universität Stuttgart die Supercomputing-Ressourcen des HLRS genutzt, um diese Maschinen auf einer grundlegenden Ebene zu untersuchen.

„Kaplanturbinen haben einen großen Einsatzbereich, was auch bedeutet, dass man verschiedene Arten von Flüssigkeitsverhältnissen und das, was in der Turbine passieren kann, berücksichtigen muss“, sagt Simon Joßberger, Doktorand an der Universität Stuttgart und Wissenschaftler in diesem Projekt. „Die Simulationsergebnisse sind beim Testen unter Ausgangsbedingungen normalerweise in Ordnung. Es ist aber schwierig zu wissen, ob die Simulationen für eine bestimmte Turbine

richtig oder falsch sind, wenn man andere Betriebspunkte simuliert, zum Beispiel bei höheren und niedrigeren Durchflussraten und/oder größeren und kleineren Fallhöhen. Wir brauchen zuverlässige Ergebnisse für Kaplan-Turbinen über das gesamte Betriebskennfeld und wir benötigen diese Ergebnisse während des Entwurfsprozesses, damit wir die Turbine an die spezifischen Bedingungen am Einsatzort anpassen können.“

Mit dem Strom schwimmen

Um die Bedingungen in einer Turbine mithilfe von Simulationen genau zu modellieren, müssen Forschende die chaotischen, turbulenten Bewegungen der durch die Turbine strömenden Flüssigkeit berücksichtigen. Bei der Simulation von Flüssigkeitsströmungen auf einem Supercomputer teilen Wissenschaftler:innen den zu untersuchenden Bereich häufig in ein Gitter ein und berechnen dann das Flüssigkeitsverhalten innerhalb der einzelnen Gitterfelder für jeden „Zeitschritt“. Wenn die Größe des Gitters feiner wird, der Abstand zwischen den Zeitschritten verringert wird oder die Flüssigkeit schneller fließt (oder bei jeder beliebigen Kombination dieser Faktoren), wird die Simulation rechenintensiver.

Im Wesentlichen möchten Forscher:innen das Verhalten von Flüssigkeiten auf der Grundlage fundamentaler

physikalischer Prinzipien und mit so wenig Annahmen wie möglich berechnen. Doch selbst die leistungsfähigsten Computer sind oft nicht dazu in der Lage, das Verhalten von Flüssigkeiten auf allen erforderlichen Längen- und Zeitskalen vollständig zu berechnen. Daher enthalten bestimmte Simulationsmethoden Annahmen darüber, wie sich Strömungen auf den feinsten Skalen verhalten.

Bei der grundlegendsten Klasse von Turbulenzsimulationen, den Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS), reduzieren Wissenschaftler:innen die Berechnungskomplexität, indem sie Durchschnittswerte verwenden, die annähernd das Verhalten in turbulenten Strömungen abbilden. Dies ermöglicht es ihnen, sich auf bestimmte Berechnungen zu konzentrieren und gleichzeitig zuverlässige Annahmen darüber zu treffen, wie sich andere Aspekte der Flüssigkeit verhalten könnten.

Eine andere Art von Simulationen vermittelt einen unverfälschten Eindruck größerer turbulenter Bewegungen beziehungsweise Wirbel im Fluid. Diese treffend als „Large-Eddy-Simulationen (LES)“ bezeichneten Verfahren ermöglichen es Forschenden, ihre Rechenressourcen auf die Aspekte des Fluids zu konzentrieren, die für den Wirkungsgrad der Turbine, die Belastungspunkte oder den Verschleiß während des Turbinenbetriebs die größte Rolle spielen.

Mithilfe des Hawk-Supercomputers des HLRS erstellt Joßberger eine möglichst detaillierte Simulation der Kaplan turbine. Dazu führt er hochauflösende Large-Eddy-Simulationen durch und ergänzt die Ergebnisse in Bereichen, in denen eine LES-Simulation zu rechenintensiv wäre, mit RANS.

Dank der Rechenleistung von Hawk kann Joßberger die Strömung durch die Turbine in höherer Auflösung untersuchen als üblicherweise möglich. „Für eine nach meinem Verständnis normale instationäre Simulation einer Kaplan turbine würde man normalerweise 50 bis 100 Zeitschritte für eine einzige Umdrehung der Turbine verwenden“, sagt Joßberger. „Derzeit führen wir

etwa 1.600 Zeitschritte für eine Umdrehung aus. In Kombination mit dem deutlich feineren Berechnungsgitter bedeutet dies, dass unser Detaillierungsgrad um vier bis fünf Größenordnungen höher ist als das, was man normalerweise tun würde.“

Individualisierte Erkenntnisse für die Industrie

Zusätzlich zu RANS und LES nutzen Ingenieurwissenschaftler:innen Supercomputer, um viel komplexere direkte numerische Simulationen (DNS) durchzuführen, die nahezu keine Annahmen zur Modellierung des Strömungsverhaltens verwenden. Eine aussagekräftige DNS, die der Komplexität realer Bedingungen oder Geometrien nahe kommt, lässt sich jedoch nur mit den schnellsten Computern der Welt durchführen. Das gelingt nur mit einem Fokus auf kleine Bereiche oder einfache Konstruktionen. Joßberger sieht seine Arbeit als Beitrag zum Informationsgewinn und zur Verbesserung der Modellierung und Simulation, die auf kommerzieller Ebene durchgeführt wird.

„Das ultimative Ziel ist es, zu verstehen, was in der Turbine passiert. Diese Informationen können wir im Anschluss mit weniger komplexen Simulationen vergleichen, um zu sehen, welche Effekte bei der Modellierung wirklich wichtig sind“, sagt er. „Mit diesem Ansatz lernen wir, was wir berücksichtigen müssen und was wir mit kleineren oder weniger komplexen Simulationen aus der Industrie erreichen können. Die Ergebnisse dieser Arbeit können als Benchmark für die Bewertung der Qualität weniger komplexer Modelle dienen.“

Nachdem er die Simulationen für 25 Umdrehungen der Turbine abgeschlossen hat, ist Joßberger zuversichtlich, dass er die realen Bedingungen für die Kaplan turbine unter einer Vielzahl von Bedingungen genau modellieren kann. Letztendlich könnte seine Arbeit dazu beitragen, dass Wasserkraftwerke eine zuverlässige, kostengünstige Quelle grüner Energie bleiben, die Stromnetze auf der ganzen Welt unterstützt. **EG**

Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2021

Ahad SL, Bahé YM, Hoekstra H, et al. 2021. **The stellar mass function and evolution of the density profile of galaxy clusters from the Hydrangea simulations at $0 < z < 1.5$** . Mon Not R Astron Soc. 504(2): 1999–2013.

Albers M, Schröder W. 2021. **Lower drag and higher lift for turbulent airfoil flow by moving surfaces**. Int J Heat Fluid Flow. 88: 108770.

Aouane O, Scagliarini A, Harting J. 2021. **Structure and rheology of suspensions of spherical strain-hardening capsules**. J Fluid Mech. 911: A11.

Appelbaum J, Ohno D, Rist U, Wenzel C. 2021. **DNS of a turbulent boundary layer using inflow conditions derived from 4D-PTV data**. Exp Fluids. 62: 194.

Arámbuco-García A, Bondarenko K, Boyarsky A, et al. 2021. **Magnetization of the intergalactic medium in the IllustrisTNG simulations: the importance of extended, outflow-driven bubbles**. Mon Not R Astron Soc. 505(4): 5038-5057.

Armas MC, Fabian D. 2021. **Do MURaM and STAGGER simulations of solar faculae match observational signatures from magnetic structures?** Astrophys J. 923: 207.

Arnold J, Schäfer F, Zonda M, Lode AUJ. 2021. **Interpretable and unsupervised phase classification**. Phys Rev Research 3: 033052.

Atzori M, Vines R, Stroh A, et al. 2021. **Uniform blowing and suction applied to nonuniform adverse-pressure-gradient wing boundary layers**. Phys Rev Fluids. 6: 113904.

Ayromlou M, Nelson D, Yates RM, et al. 2021. **Comparing galaxy formation in the L-GALAXIES semi-analytical model and the IllustrisTNG simulations**. Mon Not R Astron Soc. 502(1): 1051-1069.

Bahé YM. 2021. **Strongly lensed cluster substructures are not in tension with CDM**. Mon Not R Astron Soc. 505(1): 1458–1463.

Bangga G, Hutani S, Heramarwan H. 2021. **The effects of airfoil thickness on dynamic stall characteristics of high-solidity vertical axis wind turbines**. Adv Theory Simul. 2000204.

Bangga G, Lutz T. 2021. **Aerodynamic modeling of wind turbine loads exposed to turbulent inflow and validation with experimental data**. Energy 223: 120076.

Battarbee M, Brito T, Alho M, et al. 2021. **Vlasov simulation of electrons in the context of hybrid global models: an eVlasiator approach**. Ann Geophys. 39: 85–103.

Beck A, Kurz M. 2021. **A perspective on machine learning methods in turbulence modelling**. GAMM – Mitteilungen. 44: e202100002.

- Bode M, Gauding M, Lian Z, et al. 2021. **Using physics-informed enhanced super-resolution generative adversarial networks for subfilter modeling in turbulent reactive flows.** *Proc Combust Inst.* 38(2): 2617–2625.
- Borsanyi S, Fodor S, Guenther JN, et al. 2021. **Lattice QCD equation of state at finite chemical potential from an alternative expansion scheme.** *Phys Rev Lett.* 126: 232001.
- Burkhardt P, Fleischmann M, Wegmann T, et al. 2021. **On the use of active pre-chambers and bio-hybrid fuels in internal combustion engines.** In Kalghatgi G et al, eds. *Engines and Fuels for Future Transport.* Springer. p. 205–231.
- Buttari A, Huber M, Leleux P, et al. 2021. **Block low-rank single precision coarse grid solvers for extreme scale multigrid methods.** *Numer Linear Algebra Appl.* e2407.
- Carvalho HF, Ferrario V, Pleiss J. 2021. **Molecular mechanism of methanol inhibition in CALB-catalyzed alcoholysis: analyzing molecular dynamics simulations by a Markov state model.** *J Chem Theory Comput.* 17(10): 6570–6582.
- Chakroun Y, Bangga G. 2021. **Aerodynamic characteristics of airfoil and vertical axis wind turbine employed with gurney flaps.** *Sustainability.* 13(8): 4284.
- Chao EH, Hudspith RJ, Gérardin A, et al. 2021. **Hadronic light-by-light contribution to $(g-2)_\mu$ from lattice QCD: a complete calculation.** *Eur Phys J C.* 81: 651.
- Chatwell RS, Guevara-Carrion G, Gaponenko Y, et al. 2021. **Diffusion of the carbon dioxide-ethanol mixture in the extended critical region.** *Phys Chem Chem Phys.* 23: 3106–3115.
- Chaurasia SV, Dietrich T, Rosswog S. 2021. **Black hole–neutron star simulations with the BAM code: first tests and simulations.** *Phys Rev D.* 104: 084010.
- Daszuta B, Zappa F, Cook W, et al. 2021. **GR-Athena++: puncture evolutions on vertex-centered oct-tree AMR.** *Astrophys J.* 257: 25.
- Deason AJ, Oman KA, Fattahi A, et al. 2021. **Stellar splashback: the edge of the intracluster light.** *Mon Not R Astron Soc.* 500(3): 4181–4192.
- Dessoky A, Lutz T, Krämer E. 2021. **Aerodynamic and aeroacoustic performance investigations on modified H-rotor Darrieus wind turbine.** *Wind Engineering.* ePub Mar 29.
- Djukanovic D, Harris T, von Hippel G, et al. 2021. **Isovector electromagnetic form factors of the nucleon from lattice QCD and the proton radius puzzle.** *Phys Rev D.* 103: 094522.
- Dumitrasc A, Leleux P, Popa C, et al. 2021. **Extensions of the augmented Block Cimmino method to the solution of full rank rectangular systems.** *SIAM J Sci Comput.* 43(5): S516–S539.
- Dunleavy NL, Ballance CP, Ramsbottom CA, Jeffery CS. 2021. **Electron-impact excitation of Ge III and photoionization of Ge II.** *Mon Not R Astron Soc.* 506(4): 5398–5409.
- Dunleavy NL, Ramsbottom CA, Ballance CP. **Electron-impact excitation of Ni II.** *Astron Astrophys.* 648: A67.
- Eberhart M, Loehle S, Offenhäuser P. 2021. **3-D visualization of transparent fluid flows from snapshot light field data.** *Exp Fluids.* 62: 165.
- Eisfeld E, Förster D, Klein D, Roth J. 2021. **Atomistic simulation of ultra-short pulsed laser ablation of Al: an extension for non-thermalized electrons and ballistic transport.** *J Phys D: Appl Phys.* 55: 135301.
- Emami R, Genel S, Hernquist L, et al. 2021. **Morphological types of DM halos in Milky Way-like galaxies in the TNG50 simulation: simple, twisted, or stretched.** *Astrophys J.* 913: 36.
- Engler C, Pillepich A, Pasquali A, et al. 2021. **The abundance of satellites around Milky Way- and M31-like galaxies with the TNG50 simulation: a matter of diversity.** *Mon Not R Astron Soc.* 507(3): 4211–4240.
- Evrin C, Chu X, Silber FE, et al. 2021. **Flow features and thermal stress evaluation in turbulent mixing flows.** *Int J Heat Mass Tran.* 178: 121605.
- Evrin C, Laurien E. 2021. **Effect of the Reynolds and Richardson numbers on thermal mixing characteristics.** *Int J Heat Mass Transfer.* 168: 120917.
- Fahland G, Stroth A, Frohnepfel B, et al. 2021. **Investigation of blowing and suction for turbulent flow control on airfoils.** *AIAA J.* ePub Jul 5.
- Franz M, Chandola S, Koy M, et al. 2021. **Controlled growth of ordered monolayers of N-heterocyclic carbenes on silicon.** *Nat Chem.* 13: 828–835.
- Fröhlich F, Farmand P, Pitsch H, et al. 2021. **Particle Reynolds number effects on settling ellipsoids in isotropic turbulence.** *Int J Multiphase Flow.* 139: 103566.
- Gadeschi GB, Schilden T, Albers M, et al. 2021. **Direct particle–fluid simulation of flushing flow in electrical discharge machining.** *Eng Appl Comp Fluid Mech.* 15(1): 328–343.
- Ghaderzadeh S, Kretschmer S, Ghorbani-Asl M, et al. 2021. **Atomistic simulations of defect production in monolayer and bulk hexagonal boron nitride under low- and high-fluence ion irradiation.** *Nanomaterials-Basel.* 11: 1214.
- Gimferrer M, Danés S, Andrada DM, Salvador P. 2021. **Unveiling the electronic structure of the Bi(+1)/Bi(+3) redox couple on NCN and NNN pincer complexes.** *Inorg Chem.* ePub Nov 12.
- Guandalini A, Cocchi C, Pittalis S, et al. 2021. **Nonlinear light absorption in many-electron systems excited by an instantaneous electric field: a non-perturbative approach.** *Phys Chem Chem Phys.* 23: 10059–10069.
- Guenther JN, Boršanyi S, Fodor Z, et al. 2021. **The crossover line in the (T, μ) -phase diagram of QCD.** *Nucl Phys A.* 1005: 121782.
- Guevara-Carrion G, Fingerhut R, Vrabec J. 2021. **Density and partial molar volumes of the liquid mixture water + methanol + ethanol + 2-propanol at 298.15 K and 0.1 MPa.** *J Chem Eng Data.* 66(6): 2425–2435.
- Guevara-Carrion G, Fingerhut R, Vrabec J. 2021. **Diffusion in multicomponent aqueous alcoholic mixtures.** *Sci Rep-UK.* 11: 12319.
- Hanauske M, Weih LR. 2021. **Neutron star collisions and gravitational waves.** *Astron Nachr.* 342: 788–798.
- Hanauske M, Weih PR, Stöcker H, Rezzolla L. 2021. **Metastable hypermassive hybrid stars as neutron-star merger remnants.** *Eur Phys J-Spec Top.* 230: 543–550.
- Heier M, Diewald F, Müller R, et al. 2021. **Adsorption of binary mixtures of the Lennard-Jones truncated and shifted fluid on planar walls.** *J Chem Eng Data.* 66(19): 3722–3734.
- Heier M, Stephan S, Diewald F, et al. 2021. **Molecular dynamics study of wetting and adsorption of binary mixtures of the Lennard-Jones truncated and shifted fluid on a planar wall.** *Langmuir.* 37(24): 7405–7419.

- Herff S, Niemöller A, Meinke M, Schröder W. 2021. **LES of a turbulent swirl flame using a mesh adaptive level-set method with dynamic load balancing.** *Computers Fluids*. 221: 104900.
- Herff S, Pausch K, Loosen S, Schröder W. 2021. **Impact of non-symmetric confinement on the flame dynamics of a lean-premixed swirl flame.** *Combust Flame*. ePub Sep 1.
- Holtgrewe K, Hogan C, Sanna S. 2021. **Evolution of topological surface states following Sb Layer Adsorption on Bi₂Se₃.** *Materials*. 14: 1763.
- Ilmjärvi S, Abdul F, Acosta-Gutiérrez S, et al. 2021. **Concurrent mutations in RNA-dependent RNA polymerase and spike protein emerged as the epidemiologically most successful SARS-CoV-2 variant.** *Sci Rep-UK*. 11: 13705.
- Isaev A, Felbinger J, Laurien E. 2021. **Numerical investigation on similarity of isothermal and thermal flow mixing in a horizontal T-junction configuration.** *Int J Heat Fluid Fl*. 92: 108861.
- Issakhov A, Alimbek A, Zhandaulet Y. 2021. **The assessment of water pollution by chemical reaction products from the activities of industrial facilities: numerical study.** *J Cleaner Product*. 282: 125239.
- Janssen M, Falcke H, Kadler M, et al. 2021. **Event Horizon Telescope observations of the jet launching and collimation in Centaurus A.** *Nat Astron*. 5: 1017–1028.
- Jöns S, Müller C, Zeifang J, Munz CD. 2021. **Recent advances and complex applications of the compressible ghost-fluid method.** In: Muñoz-Ruiz et al, eds. *Recent Advances in Numerical Methods for Hyperbolic PDE Systems*. 155–176.
- Kiefer M, von Clarmann T, Funke B, et al. 2021. **IMK/IAA MIPAS temperature retrieval version 8: nominal measurements.** *Atmos Meas Tech*. 14: 4111–4138.
- Kloss T, Weston J, Baury B, et al. 2021. **TKWANT: a software package for time-dependent quantum transport.** *New J Phys*. 23: 023025.
- Koch T, Weishaupt K, Müller J, et al. 2021. **A (dual) network model for heat transfer in porous media.** *Transport Porous Media*. 140: 107–141.
- Köster J, Ghorbani-Asl M, Komsa HP, et al. 2021. **Defect agglomeration and electron-beam-induced local-phase transformations in single-layer MoTe₂.** *J Phys Chem C*. 125(24): 13601–13609.
- Kotov AY, Nogradi D, Szabo KK, Szikszai L. 2021. **More on the flavor dependence of m/frt .** *J High Energy Phys*. 202(2021).
- Krais N, Beck A, Bolemann T, et al. 2021. **FLEXI: a high order discontinuous Galerkin framework for hyperbolic-parabolic conservation laws.** *Comput Math Appl*. 81: 186–219.
- Krampf A, Imlau M, Suhak Y, et al. 2021. **Evaluation of similarities and differences of LiTaO₃ and LiNbO₃ based on high-T-conductivity, nonlinear optical fs-spectroscopy and ab initio modeling of polaronic structures.** *New J Phys*. 23: 033016.
- Lagemann C, Lagemann K, Mukherjee S, Schröder W. 2021. **Deep recurrent optical flow learning for particle image velocimetry data.** *Nat Mach Intell*. 3: 641–651.
- Lee J, Moon JS, Ryu S, Yoon SJ. 2021. **Detection of the mass-dependent dual type transition of galaxy spins in IllustrisTNG simulations.** *Astrophys J*. 922: 6.
- Li J, Kolekar S, Ghorbani-Asl M, et al. 2021. **Layer-dependent band gaps of platinum dichalcogenides.** *ACS Nano*. 15(8): 13249–13259.
- Li ZZ, Han J. 2021. **The outermost edges of the Milky Way halo from galaxy kinematics.** *Astrophys J Lett*. 915: L18.
- Lin R, Georges C, Klinder J, et al. 2021. **Mott transition in a cavity-boson system: a quantitative comparison between theory and experiment.** *SciPost Phys*. 11: 030.
- Lode AUJ, Dutta S, Lévêque C. 2021. **Dynamics of ultracold bosons in artificial gauge fields: angular momentum, fragmentation, and the variance of entropy.** *Entropy*. 23(4): 392.
- Lode AUJ, Lin R, Büttner M, et al. 2021. **Optimized observable readout from single-shot images of ultracold atoms via machine learning.** *Phys Rev A*. 104: L041301.
- Loureiro DD, Kronenburg A, Reuttsch, et al. 2021. **Droplet size distributions in cryogenic flash atomization.** *Int J Multiphase Flow*. 142: 103705.
- Mamiyev Z, Fink C, Holtgrewe K, et al. 2021. **Enforced long-range order in 1D wires by coupling to higher dimensions.** *Phys Rev Lett*. 126: 106101.
- Meier L, Schmidt WG. 2021. **GaNP/ AlIn(001) interfaces from density functional theory.** *Phys Status Solidi B*. ePub Nov 9.
- Mosnier JP, Kennedy ET, Bizau JM, et al. 2021. **Photoionization cross sections of carbon-like N⁺ near the K-edge (390 eV – 440 eV).** *Atoms*. 9(2): 27.
- Most ER, Papenfort LJ, Tootle S, Rezzolla L. 2021. **Fast ejecta as a potential way to distinguish black holes from neutron stars in high-mass gravitational-wave events.** *Astrophys J*. 912: 80.
- Nathanail A, Gill R, Porth O, et al. 2021. **3D magnetised jet break-out from neutron-star binary merger ejecta: afterglow emission from the jet and the ejecta.** *Mon Not R Astron Soc*. 502(2): 1843–1855.
- Neufeld S, Bocchini A, Schmidt WG. 2021. **Potassium titanyl phosphate Z- and Y-cut surfaces from density-functional theory.** *Phys. Rev. Mater*. 5: 064407.
- Neufeld S, Schindlmayr A, Schmidt WG. 2021. **Quasiparticle energies and optical response of RbTiOPO₄ and KTiOAsO₄.** *J Phys Mater*. 5: 015002.
- Nowicki M, Górski L, Bała P. 2021. **PCJ Java library as a solution to integrate HPC, big data, and artificial intelligence workloads.** *J Big Data*. 8: 62.
- Pallero D, Gómez FA, Padilla ND, et al. 2021. **Too dense to go through: the role of low-mass clusters in the pre-processing of satellite galaxies.** *Mon Not R Astron Soc*. ePub Nov 17.
- Palmroth M, Raptis S, Suni J, et al. 2021. **Magnetosheath jet evolution as a function of lifetime: global hybrid-Vlasov simulations compared to MMS observations.** *Ann Geophys*. 39: 289–308.
- Pang PTH, Tews I, Coughlin MW, et al. 2021. **Nuclear-physics multi-messenger astrophysics constraints on the neutron-star equation of state: Adding NICER's PSR J0740+6620 measurement.** *Astrophys J*. 922: 14.
- Papenfort LJ, Tootle SD, Grandclément P, et al. 2021. **New public code for initial data of unequal-mass, spinning compact-object binaries.** *Phys Rev D*. 104: 024057.
- Plaickner J, Speiser E, Braun C, et al. 2021. **Surface localized phonon modes at the Si(553)-Au nanowire system.** *Phys Rev B*. 103: 115441.
- Ren W, Foltyn P, Geppert A, Weigand B. 2021. **Air entrapment and bubble formation during droplet impact onto a single cubic pillar.** *Sci Rep-UK*. 11: 18018.

- Ruiz Alvarado IA, Karmo M, Runge E, Schmidt WG. 2021. **InP and AlInP(001)(2 × 4) surface oxidation from density functional theory.** ACS Omega. 6(9): 6297–6304.
- Rusevich LL, Tyunina M, Kotomen EA, et al. 2021. **The electronic properties of SrTiO₃ – with oxygen vacancies or substitutions.** Sci Rep-UK. 11: 23341.
- Santini P, Castellano M, Merlin E, et al. 2021. **The emergence of passive galaxies in the early universe.** Astron Astrophys. 652: A30.
- Schneider S, Vorspohl J, Frerichs F, et al. 2021. **Investigation on residual stress induced by multiple EDM discharges.** Procedia CIRP. 102: 482–487.
- Schwitalla T, Bauer HS, Warrach-Sagi K, et al. 2021. **Turbulence-permitting air pollution simulation for the Stuttgart metropolitan area.** Atm Chem Phys. 21: 4575–4597.
- Seiz M, Nestler B. 2021. **Modelling and simulation of the freeze casting process with the phase-field method.** Comp Materials Sci. 193: 110410.
- Shamooni A, Debiagi P, Wang B, et al. 2021. **Carrier-phase DNS of detailed NO_x formation in early-stage pulverized coal combustion with fuel-bound nitrogen.** Fuel. 291: 119998.
- Sørland SL, Brogli R, Pothapakula PK, et al. 2021. **COSMO-CLM regional climate simulations in the Coordinated Regional Climate Downscaling Experiment (CORDEX) framework: a review.** Geosci Model Dev. 14: 5125–5154.
- Spöri C, Falling LJ, Kroschel M, et al. 2021. **Molecular analysis of the unusual stability of an IrNbO_x catalyst for the electrochemical water oxidation to molecular oxygen (OER).** ACS Appl Mater Interfaces. 13(3): 3748–3761.
- Sukhov A, Hubert M, Grosjean G, et al. 2021. **Regimes of motion of magnetocapillary swimmers.** Eur Phys J E. 44: 59.
- Thorp MD, Bluck AFL, Ellison SL, et al. 2021. **Towards robust determination of non-parametric morphologies in marginal astronomical data: resolving uncertainties with cosmological hydrodynamical simulations.** Mon Not R Astron Soc. 507(1): 886–903.
- Truong N, Pillepich A, Nelson D, et al. 2021. **Predictions for anisotropic X-ray signatures in the circumgalactic medium: imprints of supermassive black hole driven outflows.** Mon Not R Astron Soc. 508(2): 1563–1581.
- Uddin N, Neumann SO, Weigand B, Younis BA. 2021. **LES investigation of a passively excited impinging jet.** Intl J Heat Mass Trans. 165(B): 120705.
- von Bardeleben HJ, Cantin JL, Gerstmann U, et al. 2021. **Spin polarization, electron-phonon coupling, and zero-phonon line of the NV center in 3C-SiC.** Nano Lett. 21(19): 8119–8125.
- Velasco-Vélez JJ, Carbonio EA, Chuang CH, et al. 2021. **Surface electron-hole rich species active in the electrocatalytic water oxidation.** J Am Chem Soc. 143(32): 12524–12534.
- Wack J, Riedelbauch S. 2021. **On the physical mechanisms that cause the full load instability in Francis turbines.** IOP Conf Ser: Earth Environ Sci. 774: 012022.
- Walters D, Woo J, Ellison SL, Hani MH. 2021. **The structural evolution of isolated galaxies at low redshift in the IllustrisTNG simulation.** Mon Not Roy Astron Soc. 504(2): 1677–1693.
- Wang B, Shamooni A, Stein OT, et al. 2021. **Investigation of turbulent pulverized solid fuel combustion with detailed homogeneous and heterogeneous kinetics.** Energy Fuels. 35(9): 7077–7091.
- Wang W, Yang G, Evrim C, et al. 2021. **An assessment of turbulence transportation near regular and random permeable interfaces.** Phys Fluids. 33: 115103.
- Wenzel C, Gibis T, Kloker M. 2021. **About the influences of compressibility, heat transfer, and pressure gradients in compressible turbulent boundary layers.** J Fluid Mech. ePub Nov 3.
- Wu Y, Axtmann G, Rist U. 2021. **Linear stability analysis of a boundary layer with rotating wall-normal cylindrical roughness elements.** J Fluid Mech. 915: A132.
- Zeifang J, Beck A. 2021. **A low Mach number IMEX flux splitting for the level set ghost fluid method.** Comm App Math Com. ePub Jul 28.
- Zeman J, Kondrat S, Holm C. 2021. **Ionic screening in bulk and under confinement.** J Chem Phys. 155: 204501.
- Zhong H, Wang M, Ghorbani-Asl M, et al. 2021. **Boosting the electrocatalytic conversion of nitrogen to ammonia on metal-phthalocyanine-based two-dimensional conjugated covalent organic frameworks.** J Am Chem Soc. ePub Nov 16.
- Zhu Z, Rezzolla L. 2021. **Fully general-relativistic simulations of isolated and binary strange quark stars.** Phys Rev D. 104: 083004.

Über uns



In unserem Rechenraum

Hewlett Packard Enterprise Apollo (Hawk)

Hawk, der Flaggschiff-Supercomputer des HLRS, hat bei seinem Debüt im November 2020 Platz 16 der Top500-Liste der schnellsten Supercomputer der Welt belegt. Das System basiert auf EPYC-Prozessoren der zweiten Generation von AMD und ist für anhaltende Anwendungsleistung und hohe Skalierbarkeit optimiert. Hawk ist für groß angelegte Simulationen geeignet, insbesondere im Bereich der Ingenieur- und angewandten Wissenschaften. Im September 2021 kündigte das HLRS den Produktionsbeginn einer Erweiterung von Hawk an, die HPE Apollo-Systeme mit NVIDIA-Grafikprozessoren (GPUs) umfasste. Die Erweiterung erhöht die Kapazität des Zentrums für Deep-Learning- und KI-Anwendungen und ermöglicht neue Arten von Hybrid-Computing-Workflows, die HPC mit Big-Data-Methoden verbinden.

System: Hewlett Packard Enterprise Apollo

CPU: AMD EPYC Rome 7742, 64 core, 2,25 GHz
Anzahl Rechenknoten: 5.632
Anzahl CPU-Kerne: 720.896
Spitzenleistung: 26 Petaflops
Hauptspeicherkapazität: ~ 1.44 PB
Plattenspeicherkapazität: ~ 25 PB

Finanziert wurde Hawk vom baden-württembergischen Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst (MWK) sowie vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), vermittelt durch das Gauss Centre for Supercomputing (GCS). Hawk ist Teil der nationalen Supercomputing-Infrastruktur des GCS.

System: Apollo 6500 Gen10 Plus

GPU: NVIDIA A100
Anzahl GPUs: 192
Rechenleistung: 120 Petaflops KI-Rechenleistung



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 Kunden des HLRS hochkomplexe Problemstellungen dezidiert angehen und Daten mit höherer Genauigkeit auswerten können.

Deep Learning Einheit: 64 NVIDIA Tesla V100 GPUs
Cray CS500 Spark Einheit: 8 CPU-Rechenknoten
Software compiler: Urika-CS AI Suite
Interconnect: HDR100 Infiniband

AMD GPU System

Dieses im Jahr 2021 installierte GPU-basierte System wurde dem HLRS vom Hardwarehersteller AMD im Rahmen des COVID-19 High-Performance Computing Fund gespendet. Das System dient der Bereitstellung von Rechenressourcen für die medizinische Forschung im Zusammenhang mit der COVID-19-Pandemie und anderen Krankheiten und bietet Datenanalysekapazitäten zur Bewältigung unerwarteter Bedarfe an Simulationen und Datenanalysen, die in Krisensituationen auftreten können. Das System ist in den Vulcan-Cluster des HLRS integriert.

Prozessoren: 10 × AMD EPYC
 Beschleuniger: 80 × AMD Instinct
 Rechenleistung: 530 TFlops, 64-bit

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, CPUs und Komponenten für das Vektorrechnen. Seine derzeitige Konfiguration gestaltet sich wie folgt:

Intel Xeon Gold 6248 @2.5GHz (CascadeLake)

Anzahl Rechenknoten: 96
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 128 GB

Intel Xeon Gold 6138 @2.0GHz (SkyLake)

Anzahl Rechenknoten: 100
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 192 GB

Intel Xeon E5-2660 v3 @ 2.6 GHz (Haswell)

Anzahl Rechenknoten: 88
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB

Intel Xeon E5-2680 v3 @ 2.5 GHz (Haswell)

Anzahl Rechenknoten: 168
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 384 GB

AMD Radeon

CPU: Intel Xeon Silver 4112 @ 2.6 GHz (Skylake)
 Anzahl Rechenknoten: 6
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 96 GB
 CPU: 1 × AMD Radeon Pro WX8200
 CPU Hauptspeicher: 8 GB

Intel Xeon E5-2667 v4 @ 3.2 GHz (Broadwell) mit P100

Anzahl Rechenknoten: 10
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB
 GPU: 1 × Nvidia P100
 GPU Hauptspeicher: 12 GB

NEC SX-Aurora TSUBASA A300-8 @ 2.6 GHz

Anzahl Rechenknoten: 8
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 192 GB
 Vector engines: 8 × NEC Type 10B @ 1.4 GHz
 Hauptspeicher pro Vector Engine: 48 GB @ 1.2 TB/Sekunde

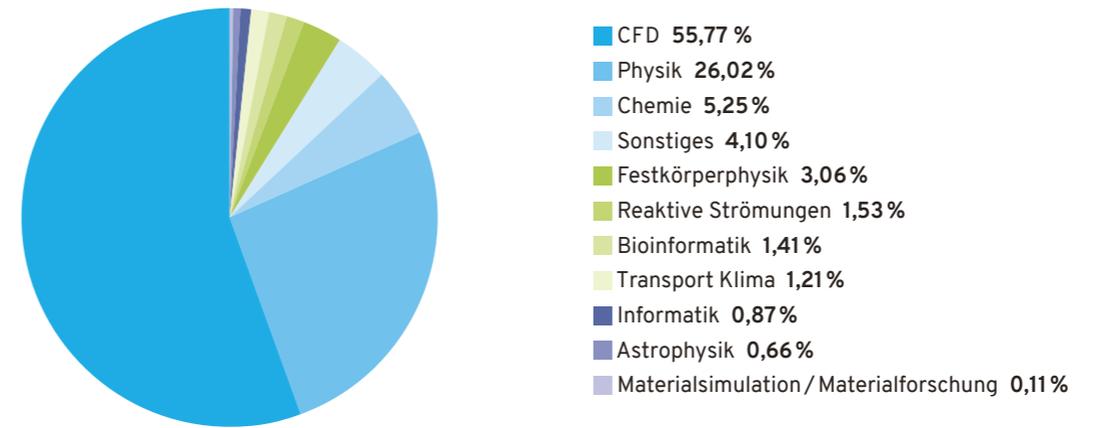
Interconnects

Infiniband EDR/FDR/HDR/QDR

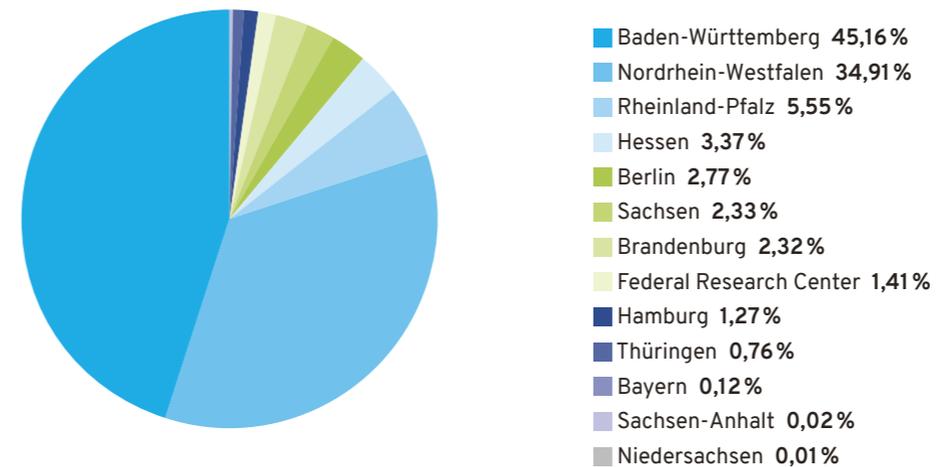
Unsere User-Gruppen

2021 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hawk 8 neue Forschungsprojekte („large-scale projects“: jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 1,946 Milliarden Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS 6 internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 526 Millionen Core-Stunden. 2021 wurden auf Hawk insgesamt 130 Projekte mit 4,339 Milliarden Core-Stunden gerechnet.

Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



Systemnutzung nach Bundesland



Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Zusätzlich zur Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen aus Wissenschaft und Industrie werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS in den Bereichen Höchstleistungsrechnen, künstliche Intelligenz, Visualisierung und High-Performance-Datenanalyse gefördert. Diese meist in Zusammenarbeit mit Partnern aus Forschung und Industrie umgesetzten Aktivitäten beschäftigen sich mit den wichtigsten HPC-Themen und tragen dazu bei, Herausforderungen für Deutschland, Europa und die Welt zu bewältigen. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2021.

Erfahren Sie mehr über unsere aktuellen Projekte unter www.hlrs.de.

aqua3S

September 2019 – August 2022

EU

Entwickelt ein neues System zur Erkennung von Bedrohungen der Sicherheit des Trinkwassers durch Kombination von Daten modernster Sensoren und anderen Detektionsmechanismen.

bwHPC-S5

Juli 2018 – Juni 2023

MWK

Koordiniert die Unterstützung von HPC-Nutzer:innen in Baden-Württemberg und die Umsetzung der entsprechenden Maßnahmen und Aktivitäten, einschließlich Data Intensive Computing (DIC) und Large Scale Scientific Data Management (LS²DM).

Cape Reviso

Juli 2020 – Juni 2023

BMVI

Entwickelt mithilfe von maschinellem Lernen, der Sensortechnik, Netzwerkanalyse und der virtuellen Realität ein Werkzeug für die Stadt- und Verkehrsplanung, das Konflikte zwischen Fußgängern und Radfahrenden im Stadtraum analysieren und reduzieren kann.

CASTIEL

September 2020 – August 2022

EU

Koordiniert und unterstützt die Aktivitäten des EuroCC Projekts durch die Förderung von Zusammenarbeit und Austausch von Wissen und Fähigkeiten zwischen nationalen HPC Kompetenzzentren in ganz Europa.

CATALYST

Oktober 2016 – Dezember 2021

MWK

Erforschte Methoden zur Analyse von Modellierungs- und Simulationsdaten, mit dem Ziel, ein Rahmenkonzept zu implementieren, das HPC und High-Performance-Datenanalyse kombiniert.

ChEESE

November 2018 – März 2022

EU

Bereitet europäische Referenz-Codes für kommende Pre-Exascale- und Exascale-Supercomputersysteme vor, explizit für Bereiche wie computergestützte Seismologie, Magnetohydrodynamik, physikalische Vulkanologie, Tsunamis und die Überwachung der Erdbebenaktivität.

CIRCE

November 2021 – Oktober 2024

BMBF, MWK

Ein Projekt zur Bewertung potenzieller Anwendungen des Höchstleistungsrechnens (HPC) in Krisensituationen sowie der organisatorischen Verfahren, die erforderlich sind, um die unmittelbare Verfügbarkeit von HPC-Ressourcen zu gewährleisten.

CYBELE

Januar 2019 – März 2022

EU

Integriert Tools aus den Bereichen Hoch- und Höchstleistungsrechnen, High-Performance-Datenanalyse und Cloud-Computing, um die Entwicklung effizienterer, datengesteuerter Methoden zur Steigerung der landwirtschaftlichen Produktivität und zur Verringerung der Nahrungsmittelknappheit zu unterstützen.

DEGREE

Juni 2021 – Juni 2023

DBU

Untersucht eine Methode zur Steigerung der Energieeffizienz in Rechenzentren durch dynamische Steuerung der Kühlkreislauftemperaturen und Entwicklung von Richtlinien zur Umsetzung der daraus resultierenden Konzepte.

ENRICH

April 2021 – März 2023

UM

Untersucht aktuelle Entwicklungen in der IT-Branche und den Betrieb von Höchstleistungsrechenzentren hinsichtlich ihrer Ressourceneffizienz und ihres Nachhaltigkeitspotenzials.

EuroCC

September 2020 – August 2022

EU

Baut als vom HLRS koordiniertes Projekt europaweit nationale HPC Kompetenzzentren auf und erzielt ein gemeinsames hohes Maß an Expertise in den Bereichen Hoch- und Höchstleistungsrechnen, High-Performance-Datenanalyse und künstlicher Intelligenz.

Neu
2021

exaFOAM

April 2021 – März 2024

EU

Arbeitet an der Verringerung von Engpässen bei der Leistungsskalierung für Anwendungen der numerischen Strömungsmechanik auf massiv parallelen Höchstleistungsrechnersystemen.

EXCELLERAT

Dezember 2018 – Mai 2022

EU

Unterstützt die Entwicklung wichtiger Codes für High-Tech-Engineering, einschließlich der Maximierung ihrer Skalierbarkeit auf immer größere Rechnerarchitekturen, und fördert den Technologietransfer in die Industrie.

FF4EuroHPC

September 2020 – August 2023

EU

Richtet sich an kleine und mittelständische Unternehmen (KMUs) in Europa und unterstützt diese, damit sie von den Vorteilen der Höchstleistungsrechen-Technologien und -Services profitieren können.

FocusCoE

Dezember 2018 – März 2022

EU

Koordiniert die strategische Zusammenarbeit und den Kontakt zwischen von der EU geförderten Exzellenzzentren, sodass die Vorteile extremer Skalierung für die Bewältigung wissenschaftlicher, industrieller oder gesellschaftlicher Herausforderungen effektiver genutzt werden.

HiDALGO

Dezember 2018 – Februar 2022

EU

Entwickelt neue Methoden, Algorithmen und Software für HPC und High-Performance-Datenanalyse, um die komplexen Prozesse im Zusammenhang mit großen globalen Herausforderungen wie Vertreibung, Luftverschmutzung und der Verbreitung von Desinformation über soziale Medien zu modellieren.

Neu
2021

HPC-Europa 3

Mai 2017 – April 2022

EU

Fördert die länderübergreifende Zusammenarbeit zwischen EU-Wissenschaftler:innen (insbesondere Nachwuchsforscher:innen), die an HPC-bezogenen Themen wie Anwendungen, Tools und Middleware arbeiten.

HPCWE

Juni 2019 – November 2021

EU

Ein Konsortium aus akademischen Einrichtungen, HPC-Zentren und Partnern in der Industrie in Europa und Brasilien, das Algorithmen und Codes entwickelt, um die Entwicklung effizienterer Windenergietechnologien zu unterstützen.

HyForPV

September 2018 – Oktober 2021

BMWi

Entwicklung und Einsatz neuer Prognose-Software zur Einbindung von Photovoltaik (PV) auf dem Energiemarkt und in intelligente Netze durch Simulation der PV-Stromproduktion bei hoher Auflösung.

IKILeUS

Dezember 2021 – November 2024

BMBF

Das HLRS ist das koordinierende Zentrum für dieses Projekt zur Integration von Themen der künstlichen Intelligenz (KI) in die Lehrpläne der Universität Stuttgart und zur Implementierung von KI-Technologien zwecks Verbesserung der Lehre.

InHPC-DE

November 2017 – Dezember 2021

BMBF

Koordiniert die Integration zwischen den drei deutschen Tier-1-Höchstleistungsrechenzentren, um ein standardisiertes und abdeckendes HPC-Umfeld zu schaffen. Es finanziert 100-Gbit-Netze und bietet Möglichkeiten zur Hochgeschwindigkeits-Datenverwaltung und -visualisierung.

KoLab BW

März 2021 – Dezember 2024

MWK

Entwickelt Tools, die Treffen und Zusammenarbeit in dreidimensionalen VR-Umgebungen, selbst von entfernten Standorten aus, ermöglichen.

MoeWe

Juli 2016 – März 2021

ESF, MWK

Um der Nachfrage an Supercomputer-Expert:innen, in der Industrie nachzukommen, wurde in diesem Projekt ein modulares, flexibles Ausbildungsprogramm entwickelt: die „Supercomputing-Akademie“.

NFDI4Cat

Oktober 2020 – September 2025

DFG

Schafft eine deutsche nationale Forschungsdateninfrastruktur für Katalyse und chemisch-technische Forschung.

OpenForecast

September 2019 – Mai 2021

EU

Entwickelte Ansätze zur Kombination frei verfügbarer Daten und Supercomputing-Ressourcen, um eine neue Generation von durchsuchbaren Datenprodukten für Bürger:innen und Entscheidungsträger:innen in Europa zu schaffen.

ORCHESTRA

Dezember 2020 – November 2023

EU

Schafft eine vernetzte Datentransferplattform für die SARS-CoV-2-Forschung und ein Modell für die Bewältigung künftiger Gesundheitsbedrohungen.

OSCCAR

Juni 2018 – November 2021

EU

Verwendete einen neuartigen simulationsbasierten Ansatz zur Entwicklung neuer Systeme zum Schutz von Fahrzeuginsass:innen bei Unfällen.

Neu
2021

POP2

Dezember 2018 – Mai 2022

EU

Ein Exzellenzzentrum, das Leistungsoptimierungs- und Produktivitätsdienstleistungen für HPC-Nutzer:innen an Hochschulen und in der Industrie anbietet.

PRACE

Mai 2019 – Juni 2022

EU

Unterstützt wissenschaftliche Forschung und technische Entwicklung, um die europäische Wettbewerbsfähigkeit zu verbessern.

SDC4Lit

Mai 2019 – April 2023

MWK

Organisiert als Wissenschaftsdatenzentrum für Literatur und interdisziplinäres Forschungsprojekt nachhaltig den Datenlebenszyklus digitaler Literatur.

SEQUOIA

Januar 2021 – Dezember 2022

WAT

Entwickelt neue Software für Quantencomputer und untersucht Möglichkeiten zur Integration dieser Software in herkömmliche Systeme für Höchstleistungsrechnen und künstliche Intelligenz.

SERRANO

Januar 2020 – Dezember 2022

EU

Führt ein neuartiges Ökosystem cloudbasierter Technologien ein, das von spezialisierten Hardware-Ressourcen bis hin zu Software-Tools reicht, um eine anwendungsspezifische Dienstinstanziierung und optimale kundenspezifische Anpassung zu ermöglichen.

Abkürzungen Förderorganisationen:

BMBF – Bundesministerium für Bildung und Forschung | BMVI – Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur | BMWi – Bundesministerium für Wirtschaft und Energie | DBU – Deutsche Bundesstiftung Umwelt | DFG – Deutsche Forschungsgemeinschaft | ESF – European Social Fund | EU – European Union | MWK – Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg | UM – Ministerium für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg | WAT – Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg

SimTech

Juli 2019 – März 2023

DFG

Dieser fachübergreifende Exzellenzcluster an der Universität Stuttgart entwickelt Simulationstechnologien für eine integrative Systemwissenschaft.

Simulierte Welten

Januar 2011 – August 2024

MWK

Bietet Schüler:innen die Möglichkeit, in Zusammenarbeit mit HLRS-Wissenschaftler:innen Simulationsprojekte zu entwickeln und durchzuführen.

SiVeGCS

Januar 2017 – Dezember 2025

BMBF / MWK

Koordiniert und gewährleistet die Verfügbarkeit der HPC-Ressourcen des Gauss Centre for Supercomputing und befasst sich mit Fragen der Finanzierung, des Betriebs, der Ausbildung und Anwenderunterstützung der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren Deutschlands.

SODALITE

Februar 2019 – Januar 2022

EU

Strebt die Bereitstellung einer optimierten, robusten, heterogenen Ausführungsumgebung an, die eine operative Transparenz zwischen Cloud- und HPC-Infrastrukturen ermöglicht.

Trust in Information

August 2020 – August 2023

MWK

Entwickelt als multidisziplinäres Forschungsprojekt unter Leitung der Abteilung für Philosophie am HLRS, um Methoden, die die Vertrauenswürdigkeit von Computerwissenschaften zu bewerten und die Verbreitung von Fehlinformationen begrenzen zu können.

HPC Fort- und Weiterbildung 2021

Im Jahr 2021 bot das HLRS 36 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprechen. Die Kurse fanden an 122 Tagen online und in Stuttgart und in Zusammenarbeit mit Instituten in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 1.196 Interessierte an den Kursen teil.

Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unsere Webseite: www.hlrs.de/training.

Datum	Ort	Thema	Gastgeber
■ 20. Jan	Online	Machine Learning with AMD GPUs and ROCm Software ^{NEW}	HLRS / AMD
■ 21. Jan	Online	Machine Learning with AMD GPUs and ROCm Software ^{NEW}	HLRS / AMD
■ 8.-12. Feb	Online	Parallel Programming (MPI, OpenMP) and Tools	ZIH / HLRS
■ 22.-26. Feb	Online	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS / STS / IAG
■ 2.-5. März	Online	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
■ 8.-10. März	Online	Iterative Linear Solvers	HLRS
■ 23.-26. März	Online	Parallelization with MPI and OpenMP	ZDV / HLRS
■ 12.-16. Apr	Online	Fortran for Scientific Computing *	HLRS
■ 19.-22. Apr	Online	Parallelization with MPI ^(TTT)	VSC / HLRS
■ 4.-7. Mai	Online	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
■ 5.-6. Mai	Online	Shared memory parallelization with OpenMP (with VSC Vienna) ^(TTT)	VSC / HLRS
■ 25.-27. Mai	Online	Introduction to MPI ^(TTT)	IT4I / VSC / HLRS
■ 7.-11. Jun	Online	Parallel Programming with MPI and OpenMP ^(TTT)	SURFsara / HLRS
■ 11. Jun	Online	Introduction to NEC Sx-Aurora TSUBASA Vector Platform	HLRS
■ 15.-17. Jun	Online	Introduction to Hybrid Programming in HPC	VSC / LRZ / HLRS / NHR@FAU
■ 21.-22. Jun	Online	AMD GPU Training ^{NEW}	HLRS / AMD
■ 24.-25. Jun	Online	Efficient Parallel Programming with GASPI *	HLRS / F. ITWM
■ 28.-30. Jun	Online	From Machine Learning to Deep Learning: A Concise Introduction ^{NEW}	HLRS
■ 6.-9. Jul	Online	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
■ 12.-15. Jul	Online	Node-Level Performance Engineering & Tools *	HLRS / NHR@FAU / ZIH
■ 19.-22. Jul	Online	Deep Learning and Acceleration with OpenACC on NVIDIA GPUs ^{NEW}	HLRS / NVIDIA
■ 26.-30. Jul	Online	Optimization of Scaling and Node-Level Performance on Hawk	HLRS
■ 23.-26. Aug	Online	Parallel Programming with MPI / OpenMP	ETH / HLRS
■ 20.-24. Sep	Stuttgart	CFD with OpenFOAM®	HLRS
■ 30. Sep-1. Okt	Stuttgart	Scientific Visualization	HLRS

Datum	Ort	Thema	Gastgeber
■ 11.-15. Okt	Online	Parallel Programming Workshop (MPI, OpenMP & advanced topics) *	HLRS
■ 19.-21. Okt	Online	ChESEE Advanced Training on HPC for Computational Seismology *	HLRS / ChESEE
■ 19.-21. Okt	Online	Advanced MPI ^(TTT)	IT4I / VSC / HLRS
■ 28.-29. Okt	Online	Shared Memory Parallelization with OpenMP ^(TTT)	VSC / HLRS
■ 8.-12. Nov	Online	Optimization of Scaling and Node-Level Performance on Hawk	HLRS
■ 15. Nov-10. Dez	Online	MOOC: One-Sided Communication and the MPI Shared Memory Interface ^{NEW}	HLRS / SURFsara / Astron
■ 23.-26. Nov	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
■ 23.-26. Nov	Online	Parallelization with MPI ^(TTT)	VSC / HLRS
■ 29. Nov-1. Dez	Online	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP	JSC / HLRS
■ 6.-10. Dez	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing	HLRS
■ 13.-14. Dez	Online	Data Analytics for Engineering Data Using Machine Learning ^{NEW}	HLRS / F. SCAI

- Paralleles Programmieren
- Programmiersprachen für wissenschaftliches Rechnen
- Numerische Strömungsmechanik
- Wissenschaftliche Visualisierung
- Performance-Optimierung und Debugging
- HPC-Cluster: Nutzung und Betrieb
- Daten in HPC
- Community-spezifische Kurse

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

TtT: Train the Trainer Kurse

Astron - Netherlands Institute of Radio Astronomy | ChESEE - Center of Excellence in Solid Earth | ETH - Scientific IT Services, ETH Zürich | HLRS - Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart | IAG - Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (Universität Stuttgart) | IT4I - IT4Innovations National Supercomputing Center (TU Ostrava) | JSC - Jülich Supercomputing Centre | LRZ - Leibniz-Rechenzentrum | NHR@FAU - Erlangen National High Performance Computing Center | F. SCAI - Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen | F. ITWM - Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik | STS - Simulationstechnik und Wissenschaftliches Rechnen (Universität Siegen) | SURFsara - SURFsara (Niederländisches Nationales Supercomputing-Zentrum) | VSC - Vienna Scientific Cluster | ZDV - Zentrum für Datenverarbeitung (Universität Mainz) | ZIH - Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (TU Dresden)

Workshops und Konferenzen 2021

16.–17. Februar

SAS Workshop 2021: Nachahmung, Anpassung, Täuschung

Wissenschaftler:innen untersuchten interdisziplinär die Geschichte und Systematik von Nachahmung, Anpassung und Täuschung sowie die Frage, wie sich die Relevanz und das Verständnis dieser Konzepte im Laufe der Zeit und in unterschiedlichen Kontexten verändert haben.

16.–19. März

31st Workshop on Sustained Simulation Performance

Dieser in Zusammenarbeit mit NEC organisierte Workshop vereint Wissenschaftler:innen, Anwendungsentwickler:innen und Hardware-Designer:innen verschiedener Kontinente, sodass sie über Hardware-Architekturen, Programmierstile und Strategien zur Erreichung der höchstmöglichen Anwendungsleistung diskutieren können.

10. Mai

19th HLRS / hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems

Der 19. Workshop dieser Reihe konzentrierte sich auf wichtige Fragen und Entwicklungen im Zusammenhang mit der Entwicklung globaler paralleler Dateisysteme und Höchstleistungsdatenspeicherung, einschließlich neuer Anforderungen im Zusammenhang mit der Verwaltung von Forschungsdaten.

15.–17. September

The Economic and Cultural Impacts of the Digital Age

In diesem Kongress versammelten sich Expert:innen aus Europa und Amerika, um neue Entwicklungen in Kunst, Kultur und Wirtschaft zu diskutieren. Dies dient als Grundlage zukünftiger Forschung und Projekte für das Media Solution Center Baden-Württemberg.

7.–8. Oktober

24th Results and Review Workshop

Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen präsentieren Anwendungen von Höchstleistungsrechnen sowie daraus resultierende Forschungsergebnisse und diskutierten Herausforderungen sowie Best Practices beim Einsatz von HPC-Systemen.

27.–29. Oktober

SAS Conference 2021: Trust in Science

Diese interdisziplinäre Konferenz befasste sich mit der Frage, wie und auf welcher Grundlage angemessenes Vertrauen in die Wissenschaft aufgebaut und Zweifel ausgeräumt werden können, insbesondere angesichts der zunehmenden Komplexität von Wissenschaft und Herausforderungen in der Wissenschaftskommunikation.

1. Dezember

5th Industrial HPC User Round Table (iHURT)

Das jährliche iHURT-Treffen fördert den Austausch zwischen dem HLRS und seinen industriellen Nutzer:innen. Der Fokus liegt auf innovativen HPC-Anwendungen für Forschung und Entwicklung sowie auf den Herausforderungen, vor denen Nutzer:innen von Höchstleistungsrechnern aus der Industrie stehen.

HLRS Bücher

High Performance Computing in Science and Engineering '20

Herausgeber: Wolfgang E. Nagel, Dietmar H. Kröner, Michael M. Resch

Dieses Buch präsentiert den neuesten Stand der Technik in der Supercomputer-Simulation. Es enthält die aktuellen Ergebnisse von führenden Forscher:innen, die die Systeme des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) im Jahr 2020 nutzten. Die Berichte decken alle Bereiche der rechnergestützten Natur- und Ingenieurwissenschaften ab, von numerischer Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, CFD) bis hin zur Computerphysik und von der Chemie bis hin zur Informatik, mit besonderem Schwerpunkt auf industriell relevante Anwendungen. Dieser Band stellt die Ergebnisse eines der führenden europäischen Systeme vor und berücksichtigt ein breites Spektrum von Anwendungen, die ein hohes Maß an Sustained Performance bieten. Das Buch behandelt die wichtigsten Methoden des Höchstleistungsrechnens. Herausragende Leistung und Ergebnisse von Produktionscodes sind sowohl für Wissenschaftler:innen als auch für Ingenieur:innen von besonderem Interesse. Das Buch ist mit einigen farbigen Abbildungen und Ergebnistabellen versehen.

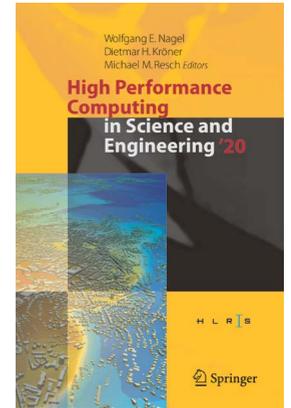


Bild: Springer Verlag

Sustained Simulation Performance 2019 and 2020

Herausgeber:innen: Michael M. Resch, Manuela Wossough, Wolfgang Bez, Erich Focht, Hiroaki Kobayashi

Dieses Buch stellt den aktuellen Stand der Technik im Bereich des Höchstleistungsrechnens auf modernen Supercomputerarchitekturen vor. Es behandelt Trends in der Hardware- und Softwareentwicklung im Allgemeinen. Die Beiträge decken ein breites Spektrum an Themen ab, von Leistungsbewertungen im Zusammenhang mit der Energieeffizienz bis hin zu Computational Fluid Dynamics und Höchstleistungsdatenanalyse. Darüber hinaus erforscht das Buch neue Themen, wie den Einsatz von Höchstleistungsrechnern für Anwendungen künstlicher Intelligenz und des maschinellen Lernens. Alle Beiträge basieren zum einen auf ausgewählten Veröffentlichungen, die auf dem 30th Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP), der im Oktober 2019 am Höchstleistungsrechenzentrum der Universität Stuttgart stattfand, vorgestellt wurden. Zum anderen handelt es sich um Veröffentlichungen für den ursprünglich im März 2020 vorgesehenen Workshop on Sustained Simulation, der aufgrund der COVID-19-Pandemie abgesagt wurde.

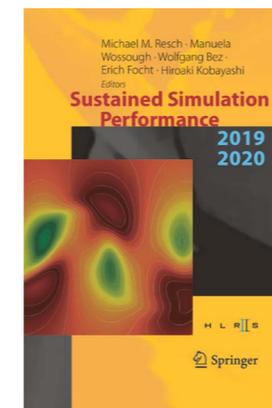


Bild: Springer Verlag

Tools for High Performance Computing 2018 / 2019

Herausgeber:innen: Hartmut Mix, Christoph Niethammer, Huan Zhou, Wolfgang E. Nagel, Michael M. Resch

Dies ist der Konferenzband des 12th International Parallel Tools Workshop, der vom 17. bis 18. September 2018 in Stuttgart veranstaltet wurde, sowie des 13th International Parallel Tools Workshop vom 2. bis 3. September 2019 in Dresden. Die Workshops bieten ein Forum, um die Fortschritte in Bezug auf parallele Tools für das Höchstleistungsrechnen zu diskutieren. Höchstleistungsrechnen spielt eine zunehmend wichtige Rolle für die numerische Simulation und Modellierung in der akademischen und industriellen Forschung. Gleichzeitig wird es immer schwieriger, große parallele Systeme effizient zu nutzen. In den vergangenen zehn Jahren ist eine Reihe von Tools für die parallele Programmentwicklung und -analyse aus der High-Performance Community hervorgegangen; was als Sammlung kleiner Hilfskripte begann, ist inzwischen zu produktionsreifen Frameworks gereift. Leistungsstarke Benutzeroberflächen und eine umfangreiche Datenbank schaffen eine benutzerfreundliche Umgebung für parallele Tools.

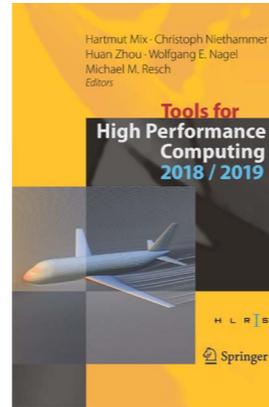
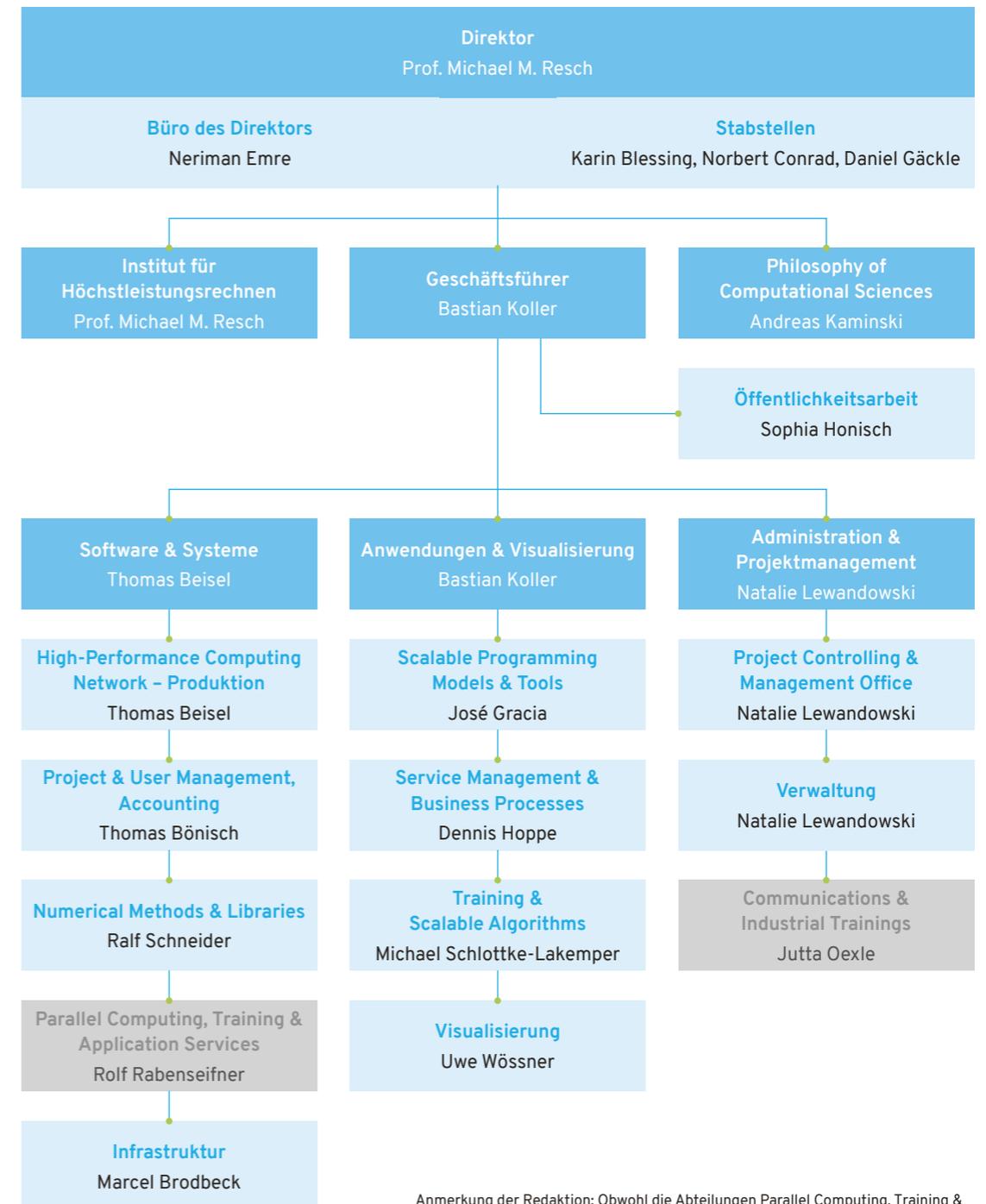


Bild: Springer Verlag

Organigramm



Anmerkung der Redaktion: Obwohl die Abteilungen Parallel Computing, Training & Application Services und Communications & Industrial Trainings im Jahr 2021 aktiv waren, wurden sie zum Zeitpunkt der Veröffentlichung dieses Jahresberichts in der neuen Abteilung Training & Scalable Algorithms zusammengelegt.

Organisation

Verwaltung

Leitung: *Dr. Natalie Lewandowski*

Die Verwaltung bearbeitet alle administrativen Aufgabengebiete des HLRS. Zu den Verantwortungsbereichen gehören insbesondere die Finanzplanung, Controlling und Buchhaltung, Finanzprojekt- und Projektcontrolling, Rechtsfragen, Personalwesen und -entwicklung, Beschaffung und Inventarisierung sowie Unterstützung beim Veranstaltungsmanagement.

High-Performance Computing Network – Produktion (HPCN Production)

Leitung: *Thomas Beisel*

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.

Infrastruktur

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 Forschende und die Verwaltung des HLRS und fördert alle Aspekte des energieeffizienten HPC-Betriebs. Das Team ist auch verantwortlich für das Nachhaltigkeitsprogramm des HLRS. Dieses unterstützt das HLRS-Team dabei, nach zertifizierten Prinzipien der Nachhaltigkeit zu handeln.

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. Das Team forscht auch

an der Simulation von Blutfluss und Knochenfrakturen im menschlichen Körper und ist verantwortlich für Schulungen, die sich auf Programmiersprachen und numerische Methoden konzentrieren, die für HPC wichtig sind.

Philosophy of Computational Sciences

Leitung: *Dr. Andreas Kaminski*

Untersucht, wie Computersimulation und maschinelles Lernen Wissenschaft und Technikentwicklung verändern und wie Gesellschaft und Politik darauf reagieren: Verändern Computersimulation und maschinelles Lernen unser Verständnis von Wissen? Und wie rechtfertigen wir wissenschaftliche Erkenntnisse? 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?

Project Controlling and Management Office

Leitung: *Dr. Natalie Lewandowski*

Das Project Controlling and Management Office (PCMO) ist verantwortlich für das Controlling und die Qualitätssicherung laufender Forschungsprojekte am HLRS sowie für das Management von großen Drittmittelprojekten, einschließlich Koordinations- und Business Development-Aufgaben. Das PCMO bietet außerdem koordinierende Unterstützung bei der Antragsplanung und -erstellung und fungiert als unterstützende und koordinierende Instanz zwischen der HLRS-Geschäftsführung, den Abteilungsleiter:innen und der HLRS-Administration in projektbezogenen Angelegenheiten.

Project and User Management, Accounting

Leitung: *Dr. Thomas Bönisch*

Verantwortet das Management und Buchhaltung der Systemnutzung am HLRS. In diesen Bereich fallen auch die Erstellung und die Pflege der Webschnittstellen zum (Bundes-) Projektmanagement und die Informationsbereitstellung für die Nutzer:innen. Außerdem sind in der Abteilung die Aktivitäten des HLRS in Bezug auf die europäische 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:innen und die Aktivitäten im Bereich Forschungsdatenmanagement.

Öffentlichkeitsarbeit

Leitung: *Sophia Honisch*

Zuständig für alle Bereiche der externen Kommunikation des HLRS, von der Pressearbeit bis zur Betreuung des Webauftritts und der Social-Media-Profile des HLRS. Die PR-Abteilung ist die Hauptlaufstelle für die Presse und die breitere Öffentlichkeit. Sie kommuniziert über das ganze Spektrum der natur- und ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen des HLRS, seine Forschung (Projekte) sowie seine Services und veröffentlicht daraus resultierende Forschungsergebnisse, Erfolge und gewonnene Erkenntnisse.

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:innen wartet die Abteilung auch den 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. Die Gruppe forscht 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.

Training and Scalable Algorithms

Leitung: *Dr. Michael Schlottke-Lakemper*

Organisiert und veranstaltet die Schulungsaktivitäten am HLRS zu diversen Themen aus den Bereichen Höchstleistungsrechnen, künstliche Intelligenz sowie Modellierung und Simulation. Dazu gehören kompakte, hochintensive Kurse, Blended-Learning-Module und Angebote für die breitere Öffentlichkeit. In jedem Bereich möchten wir eine exzellente Lernerfahrung ermöglichen, indem wir Schulungen zu relevanten Themen mit aktuellen und zielgruppengerechten Inhalten anbieten, die von hochqualifizierten Dozenten durchgeführt werden. Über unser Schulungsangebot hinaus forschen wir an der Entwicklung effizienter Algorithmen für wissenschaftliche Berechnungsanwendungen.

Visualisierung

Leitung: *Dr.-Ing. Uwe Wössner*

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

© 2022

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Universität Stuttgart
Nobelstraße 19
70569 Stuttgart, Deutschland

Tel: +49 711 685-87269
Fax: +49 711 685-87209
Email: info@hlrs.de
Web: www.hlrs.de

Direktor, HLRS

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

Leitung, Öffentlichkeitsarbeit

Sophia Honisch

Redaktion

Christopher M. Williams

Autoren

Christopher M. Williams (CW)
Eric Gedenk (EG)

Übersetzungssupport

Jouli Yono

Produktionsmanager

F. Rainer Klank

Fotos und Abbildungen

Bilderrechte aller nicht gekennzeichneten Bilder: HLRS

Druck

oeding print GmbH, Braunschweig

Design

GROOTHUIS. Gesellschaft der Ideen und Passionen mbH
für Kommunikation und Medien, Marketing und Gestaltung;
groothuis.de

Institutionelle Zugehörigkeit



Finanzierung von Hawk bereitgestellt von:



Dieses Magazin wurde auf Papier gedruckt, das mit dem FSC®-Zertifikat, dem EU Ecolabel und dem Blauen Engel ausgezeichnet ist.



Folgen Sie uns auf Twitter: @HLRS_HPC

High-Performance Computing
Center Stuttgart
www.hlrs.de

Cover:

In Kollaboration mit dem Projekt MPAS (Model Prediction Across Scales) nutzen Wissenschaftler:innen der Universität Hohenheim den Hawk-Supercomputer des HLRS für skalenübergreifende Simulationen von Erdsysteme, um die möglichen Auswirkungen des Klimawandels vorherzusagen.

HLRS ist für sein Umweltmanagement nach dem Eco-Management Audit Scheme (EMAS) und dem Umweltzeichen Blauer Engel zertifiziert. Dieses Magazin wurde auf Papier gedruckt, das mit dem FSC®, dem EU Ecolabel und dem Blauen Engel zertifiziert wurde.