

Auf dem Weg  
zu Exascale

H L R I S  
Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart



# 2023 Jahresbericht



# 2023 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 unterschiedlichen Forschungsgebieten mit dem Schwerpunkt auf Ingenieurwissenschaften und angewandter Wissenschaft.

# Grüßwort

## Director's Welcome



Prof. Dr.-Ing. Michael M. Resch, Director, HLRS

Dieser Jahresbericht des Höchstleistungsrechenzentrums der Universität Stuttgart umfasst die Ergebnisse eines aufregenden Jahres für das HLRS, seine Nutzerinnen und Nutzer sowie seine Partner.

Im Jahr 2023 waren die von der COVID-19-Pandemie verursachten Beeinträchtigungen weitgehend überwunden, sodass sich die Aktivitäten des Zentrums stabilisieren konnten. Unser Schulungsprogramm ist wieder vollständig im Normalbetrieb und wurde um ein umfangreiches Online-Kursangebot erweitert, das wir während der Pandemie eingeführt haben. Damit erreichen wir jetzt viele Nutzer von Höchstleistungsrechnern (HPC), die nicht nach Stuttgart reisen können. Auch die Einnahmen aus Drittmittelprojekten haben

Welcome to the 2023 Annual Report of the High-Performance Computing Center of the University of Stuttgart, presenting the results of an exciting year for HLRS, our users, and our partners.

This year the disruptions caused by the COVID-19 pandemic had largely passed, enabling our operations to stabilize. Our high-performance computing (HPC) training program has fully recovered, enhanced by a robust online curriculum launched during the pandemic that enables us to reach HPC users who cannot travel to Stuttgart. Our research project funding also returned to normal, pre-pandemic levels. Industrial usage was not affected by COVID-19, making 2023 a very good year with respect to industrial income. The number

wieder das alte Niveau erreicht. Die industrielle Nutzung wurde nicht von der Pandemie beeinträchtigt. Etwa 300 Millionen Kernstunden wurden 2023 von Industrieunternehmen gerechnet und die Anzahl an industriellen Anwendern nimmt weiter zu.

Der Höhepunkt des Jahres 2023 war die Beschaffung von zwei neuen Supercomputern, die im Dezember bei der Unterzeichnung eines Vertrags mit Hewlett Packard Enterprise (HPE) besiegelt wurde. Das erste System, Hunter, wird 2024 geliefert und als Übergangssystem für das Exascale-System Herder dienen, das im Jahr 2027 eingeführt wird. Beide Systeme werden auf AMD-Technologie und Cray-Netzwerkarchitektur basieren und den Übergang zur nächsten Stufe der Supercomputing-Technologie ermöglichen. Hier geben wir einen Ausblick auf Hunter und Herder und einige der Chancen, die diese mit sich bringen werden.

Das HLRS unterstützte 2023 mehr als 130 Forschungsprojekte. Die Ergebnisse dieser Aktivitäten wurden auf dem 26. Results & Review Workshop vorgestellt und werden in den Transactions of the High-Performance Computing Center Stuttgart (Springer) veröffentlicht. Hier werden einige Anwendungen unserer User vorgestellt, die sich mit großen Herausforderungen der heutigen Zeit befassen.

Im Jahr 2023 haben wir die wissenschaftlichen Aktivitäten des HLRS auf diverse Gebiete ausgeweitet. Künstliche Intelligenz (KI) gewinnt sowohl in unserer User Community als auch in unseren Forschungsprojekten zunehmend an Bedeutung. In Zusammenarbeit mit Dr. Andrea Beck und Mitarbeitern von HPE haben wir beispielsweise untersucht, wie physikalisch informierte Ansätze des maschinellen Lernens traditionelle Simulationsmethoden für CFD verbessern könnten. Im Interview spricht Dr. Beck über diese neuen Möglichkeiten. Wir sind auch stolz darauf, dass eines unserer gemeinsamen Projekte mit der WIKKI GmbH mit einem HPC Innovation Excellence Award ausgezeichnet wurde. Das Team hat eine Verbesserung von OpenFOAM implementiert, die CFD-Simulationen für industrielle HPC-Anwender zugänglicher machen wird.

of companies working with HLRS and its systems is still growing, and industrial usage reached about 300 million core hours this year.

The highlight of 2023 was our procurement of two new supercomputers, culminating in December with the signing of a contract with Hewlett Packard Enterprise (HPE). The first, called Hunter, will arrive in 2024. It will serve as a stepping stone to a larger system, called Herder, which will enable HLRS to reach exascale performance in 2027. Hunter and Herder will be based on AMD technology and the Cray networking architecture, enabling our users to jump to the next stage in supercomputing technology. In this annual report we preview the new systems and some of the exciting new opportunities they will offer.

HLRS provided supercomputing resources and support for more than 130 scientific research projects in 2023. Outcomes of these activities were presented at the 26th Results & Review Workshop, and will also soon appear in the Transactions of the High-Performance Computing Center Stuttgart, published by Springer Verlag. This annual report highlights several of our users' applications, demonstrating how HLRS enables scientific discovery that is addressing today's largest challenges.

2023 saw HLRS's scientific team extend our activities across a variety of fields. As the field of artificial intelligence (AI) grows, it is gaining traction in both our user community and our research projects. Working together with Dr. Andrea Beck and staff at HPE, for example, we have been exploring how physics-informed machine learning approaches could enhance traditional simulation methods for CFD. In this annual report you can find an interview with Dr. Beck about this project. We are also proud that a collaboration between HLRS scientists and WIKKI GmbH was honored with an HPC Innovation Excellence Award. The team implemented an improvement to the open-source simulation software OpenFOAM that will make CFD simulations more accessible for industrial HPC users.

Darüber hinaus ist das HLRS an Projekten beteiligt, die die Kluft zwischen Forschung und Anwendungen überbrücken, die für die Industrie und Behörden relevant sind. So untersucht das CIRCE-Projekt beispielsweise, wie digitale Zwillinge das Krisenmanagement unterstützen könnten. Das HLRS und seine Partner im Projekt CASE4Med bauen außerdem ein Medical Solution Center auf. Dieses wird HPC und KI in die Medizintechnikbranche einbringen.

Obwohl der Schwerpunkt des HLRS auf der Unterstützung der angewandten Natur- und Ingenieurwissenschaften liegt, untersuchen wir auch, wie HPC und KI die Geistes- und Sozialwissenschaften sowie Kunst unterstützen können. In Zusammenarbeit mit den Digital Humanities der Universität Stuttgart haben wir einen Stuttgarter Forschungsschwerpunkt „Re/producing Realities“ mitgeschaffen. Gemeinsam mit dem Media Solution Center Baden-Württemberg waren wir auch Gastgeber eines Treffens des European Institute of Innovation and Technology Culture & Creativity (EIT CC), einer Wissens- und Informationsgemeinschaft, die Kreative dabei unterstützt, zur Entwicklung einer nachhaltigen Gesellschaft beizutragen.

Das HLRS koordiniert weiterhin wichtige Projekte auf europäischer Ebene, die von der EuroHPC Joint Undertaking (JU) gefördert werden. Die Projekte EuroCC und CASTIEL gingen 2023 in ihre zweite Projektphase, in der das europäische Netzwerk nationaler HPC-Kompetenzzentren weiter ausgebaut wird. Ein weiteres JU-gefördertes Projekt, FF4EuroHPC, veranstaltete einen Industriegipfel in Berlin, auf dem erfolgreiche Anwendungen von HPC und KI in KMUs vorgestellt wurden. Obwohl der Gipfel anlässlich des Projektendes veranstaltet wurde, planen wir, diese Aktivitäten von 2024 an fortzusetzen. Im vergangenen Jahr haben wir auch die EuroHyPerCon-Studie mitinitiiert, die die JU zu den Anforderungen an die Hyperkonnektivität in Europa berät.

Das Ende der Pandemie ermöglichte es uns, viele unserer weltweiten Partner zu besuchen sowie unsere Kollaborationsvereinbarungen zu erneuern oder zu erwei-

HLRS also contributed to projects that are bridging the gap between research and applications that are relevant for industry and public administration. A project called CIRCE, for example, has been investigating how digital twins could support crisis management. HLRS and its partners in the CASE4Med project have also been planning the establishment of a Medical Solution Center. This will bring HPC and AI to the medical technology community, which could benefit from HLRS's expertise and support.

Although HLRS's main focus is on supporting applied science and engineering, we are also interested in exploring how HPC and AI could support the humanities, the social sciences, and the arts. In collaboration with the University of Stuttgart's program in digital humanities, we helped to create a Stuttgart Research Focus on the (Re)production of Reality. Together with the Media Solution Center Baden-Württemberg we also hosted a meeting of European Institute of Innovation and Technology Culture & Creativity (EIT CC), a knowledge and information community that supports creatives in contributing to the development of a sustainable society.

HLRS continues to coordinate a Europe-wide effort to establish a network of national HPC competence centers within the scope of the EuroHPC Joint Undertaking (JU). The projects EuroCC and CASTIEL started their second project phases in 2023. An affiliated project called FF4EuroHPC held an industry summit in Berlin that highlighted new, successful applications of HPC and AI in small and medium-sized enterprises. Although the event marked the end of the project, we will likely implement a follow-up to this valuable effort in 2024. In the past year we also launched EuroHyPerCon, which will advise the JU on hyperconnectivity requirements across Europe.

The easing of the pandemic meant that we were once again able to visit many of our partners around the world, renewing and extending our cooperation. For example, we added a workshop on Japanese theatre to our annual visit in Japan, hoping to bring together science and art in ways that strengthen our long-term

tern. So haben wir unseren jährlichen Besuch in Japan um einen Workshop über japanisches Theater erweitert, um Wissenschaft und Kunst miteinander zu verbinden. Darüber hinaus konnten wir die Zusammenarbeit mit dem Korean Institute of Science and Technology Information (KISTI) und dem Guangzhou National Supercomputing Center dank gegenseitiger Besuche kräftigen.

Inmitten zahlreicher Aktivitäten war die Zertifizierung des HLRS nach ISO 27001 eine weitere wichtige Entwicklung. Mit dieser Zertifizierung möchten wir gegenüber unseren Nutzerinnen und Nutzern sowie unseren Fördergebern die Sicherheit unserer Systeme hervorheben und unser Bestreben ausdrücken, die Qualität unserer Dienstleistungen laufend zu verbessern. Dies ist nur dank unserer ausgezeichneten Teams in Betrieb und Infrastruktur möglich.

Für die Installation von Herder im Jahr 2027 benötigt das HLRS ein neues Gebäude. Die Planung für dieses wichtige Infrastrukturprojekt ist bereits in vollem Gange. In Zusammenarbeit mit dem Universitätsbauamt Stuttgart und Hohenheim sowie dem Wissenschafts- und dem Finanzministerium des Landes Baden-Württemberg streben wir an, den Bau im Jahr 2027 abzuschließen.

Diese vielfältigen Entwicklungen stellen das HLRS im Jahr 2024 vor neue Herausforderungen. Mithilfe unserer Fördergeber auf Landes-, Bundes- und europäischer Ebene, mit unseren nationalen und internationalen Partnern und dank des Engagements unserer Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter ist das HLRS jedoch gut darauf vorbereitet.

Mit freundlichen Grüßen



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

partnership with the Cyberscience Center of Tohoku University in Sendai. We were also pleased that collaborations with the Korean Institute of Science and Technology Information (KISTI) and Guangzhou National Supercomputing Center were energized by mutual visits.

In the midst of our many activities, HLRS remains at its core a national operations and service center for high-performance computing. In one important development, we completed certification under the ISO 27001 international standard for information security management. This should give our users and supporters the confidence that our systems are as secure as possible, and will enable our outstanding operations and infrastructure team to improve the quality of our services in the coming years.

The arrival of Herder in 2027 means that HLRS will need a new data center, and planning for this key infrastructure project is well under way. Working together with the University Construction Office for Stuttgart and Hohenheim, and the science and finance ministries of the State of Baden-Württemberg, our goal is to complete construction in 2027.

These many developments mean that in 2024 HLRS will face new challenges. With the help of our sponsors at the state, federal, and European levels; with our national and international partners; and thanks to the commitment of our staff, however, it is clear that HLRS is well prepared to meet them.

With best regards,

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

<b>8</b>	<b>Auf dem Weg zu Exascale</b>
9	Exascale-Supercomputing kommt nach Stuttgart
11	HPC im Wandel: Hunter und Herder bringen Chancen und Herausforderungen
17	Planung des HLRS III
<b>18</b>	<b>Neuigkeiten</b>
<b>24</b>	<b>Highlights aus 2023</b>
25	HPC Industry Summit: Innovative HPC-Anwendungen in europäischen KMUs
27	HLRS und WIKKI GmbH gewinnen HPC Innovation Award
28	Projekt entwirft EuroHPC-Roadmap für Hyperkonnektivität
29	Maschinelles Lernen in der numerischen Strömungsmechanik: Ein Interview mit Andrea Beck
32	HLRS erhält Zertifizierung für Informationssicherheitsmanagement
33	Partnerschaft mit ukrainischer Universität auch in schweren Zeiten
34	HPC für Kultur und Kreativität in Europa
35	Die Supercomputing-Akademie: Der Weg zu HPC-Expertise
38	Ein Code wird „XXL“
<b>40</b>	<b>User-Forschung</b>
41	Hochauflösende Simulationen verbessern das Verständnis von Wetterextremen
44	Simulationen von Ammoniak-Gemischen unterstützen die Suche nach erneuerbaren Kraftstoffen
47	Vlasiator liefert ein globales Modell der Erdmagnetosphäre
51	Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2023
59	HLRS Bücher
<b>60</b>	<b>HLRS in Zahlen</b>
<b>62</b>	<b>Über uns</b>
65	Unsere Nutzer:innen
66	Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
70	HPC Fort- und Weiterbildung in 2023
72	Workshops und Konferenzen in 2023
73	Organigramm
74	Organisation



# Auf dem Weg zu Exascale

## Exascale-Supercomputing kommt nach Stuttgart

Die Universität Stuttgart und Hewlett Packard Enterprise haben die Installation von zwei neuen Supercomputern am HLRS angekündigt: Hunter und Herder.

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) bereitet sich auf die Exascale-Ära vor. Bei einer Unterschriftszeremonie im Dezember haben das HLRS und Hewlett Packard Enterprise (HPE) die beiden nächsten Supercomputer-Generationen für das HLRS angekündigt.

Im ersten Schritt wird im Jahr 2025 ein Übergangssupercomputer namens Hunter in Betrieb genommen. Im Jahr 2027 folgt dann Herder, ein Exascale-System, das die deutschen Kapazitäten im Bereich des Höchstleistungsrechnens (HPC) erheblich erweitern wird. Hunter und Herder werden Infrastrukturen für Simulationen, künstliche Intelligenz (KI) und Höchstleistungsdatenanalyse bieten und Spitzenforschung in den rechnergestützten Ingenieur- und angewandten Wissenschaften ermöglichen.

Die Gesamtkosten für Hunter und Herder belaufen sich auf 115 Millionen Euro. Die Finanzierung erfolgt über das Gauss Centre for Supercomputing (GCS), den Zusammenschluss der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren Deutschlands. Die Hälfte dieser Mittel wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) und die andere Hälfte vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg bereitgestellt.

### Von Hunter zu Herder: ein zweistufiger Weg zu Exascale

Hunter wird den derzeitigen Flaggschiff-Supercomputer des HLRS, Hawk, ersetzen. Es ist als Übergangssystem zu Herder konzipiert, um die Nutzergemeinschaft des HLRS zur Programmierung der massiv parallelen,

GPU-beschleunigten Architektur des Exascale-Rechners vorzubereiten.

Hunter wird auf einem HPE Cray EX4000-Supercomputer basieren. Die Plattform ist für Exascale-Leistung ausgelegt und unterstützt groß angelegte Workloads für Modellierung, Simulation, KI und Höchstleistungsdatenanalyse. Jeder der 136 HPE Cray EX4000-Knoten wird mit vier HPE Slingshot Interconnects ausgestattet sein. Hunter wird auch die nächste Generation von Cray ClusterStor nutzen, ein Speichersystem, das speziell für die anspruchsvollen Input/Output-Anforderungen von Supercomputern entwickelt wurde. Darüber hinaus wird Hunter eine HPE Cray Programmierungsumgebung verwenden, die Programmierer:innen ein umfassendes Set von Tools für die Entwicklung, Portierung, Fehlersuche und Optimierung von Anwendungen bietet.

Hunter wird die Spitzenleistung des HLRS auf 39 PetaFLOPS ( $39 \cdot 10^{15}$  Gleitkommaoperationen pro Sekunde) erhöhen – eine enorme Steigerung der aktuellen Spitzenleistung von Hawk (26 PetaFLOPS). Bei diesem neuen System liegt der Schwerpunkt nicht mehr wie bei Hawk auf CPU-Prozessoren, sondern auf energieeffizienteren GPU-Beschleunigern.

Hunter wird auf AMD Instinct™ MI300A APUs (Accelerated Processing Units) basieren, die CPUs und Beschleuniger sowie Speicher mit hoher Bandbreite in einem einzigen Paket vereinen. Durch die Verringerung des physischen Abstands zwischen den verschiedenen Prozessortypen und die Schaffung eines einheitlichen Speichers ermöglicht die APU eine schnelle Datenüber-



Bei einer Veranstaltung am HLRS am 19. Dezember unterschrieben Prof. Michael Resch (Direktor, HLRS), Anna Steiger (Kanzlerin, Universität Stuttgart) und Heiko Meyer (Chief Sales Officer, HPE) den Vertrag zum Ausbau von Hunter und Herder.

tragungsgeschwindigkeit, beeindruckende Leistung, einfache Programmierbarkeit und sehr gute Energieeffizienz. Der Energiebedarf für den Betrieb von Hunter wird auch im Vergleich zu Hawk bei Spitzenleistung etwa 80 Prozent niedriger liegen.

Der Exascale-Supercomputer Herder wird in der Lage sein, Geschwindigkeiten in der Größenordnung von einer Trillion ( $10^{18}$ ) Gleitkommaoperationen pro Sekunde zu erreichen – ein gewaltiger Leistungssprung, der einige neue Anwendungsfelder eröffnen wird. Die endgültige Konfiguration des auf beschleunigten Chips basierenden Rechners wird bis Ende 2025 festgelegt. Aufgrund des Schwerpunkts auf der Kombination aus CPUs und GPUs in den Systemen Hunter und Herder wird die derzeitige Nutzergemeinschaft des HLRS bestehende Codes anpassen müssen, damit sie effizient auf der neuen Technologie laufen können. Daher wird HPE zusammen mit dem HLRS seine Nutzer:innen bei nötigen Softwareverbesserungen unterstützen.

#### Unterstützung von Spitzenforschung in Stuttgart und darüber hinaus

Der Sprung des HLRS zu Exascale ist Teil der nationalen Strategie des Gauss Centre for Supercomputing zur Weiterentwicklung der drei GCS-Zentren: Der nächste

Supercomputer am Jülich Supercomputing Centre, JUPITER, wird auf maximale Leistung ausgelegt und wird im Jahr 2025 das erste Exascale-System in Europa sein. Das Leibniz-Rechenzentrum plant ein System für den breiten Einsatz im Jahr 2026. Der Schwerpunkt der Supercomputer Hunter und Herder des HLRS liegt auf Ingenieurwissenschaften und industriellen Anwendungen. Gemeinsam sollen diese Systeme sicherstellen, dass das GCS optimierte Ressourcen der höchsten Leistungsklasse für das gesamte Spektrum der rechnergestützten Spitzenforschung in Deutschland bereitstellt.

Hunter und Herder werden einige Forschungsanwendungen in den Ingenieur- und angewandten Wissenschaften unterstützen: Sie werden beispielsweise die Entwicklung von Fahrzeugen mit geringerem Kraftstoffverbrauch, produktiveren Windturbinen, neuen Materialien für die Elektronik und vieles mehr ermöglichen. Mithilfe der KI-Fähigkeiten lassen sich neue Lösungen für die Fertigung finden und innovative Ansätze entwickeln, um groß angelegte Simulationen schneller und energieeffizienter zu gestalten. Darüber hinaus werden die Systeme die Forschung zur Bewältigung globaler Herausforderungen wie des Klimawandels unterstützen und Ressourcen für Datenanalysen bereitstellen, die Behörden bei der Vorbereitung auf Krisensituationen helfen könnten. Hunter und Herder werden auch der baden-württembergischen Hightech-Ingenieurslandschaft zur Verfügung stehen, u. a. kleinen und mittelständischen Unternehmen, die das Rückgrat der regionalen Wirtschaft bilden.

## HPC im Wandel: Hunter und Herder bringen Chancen und Herausforderungen

Die kommenden Supercomputer des HLRS werden nicht nur das traditionelle Höchstleistungsrechnen auf die nächste Stufe bringen, sondern auch ergänzende Technologien wie künstliche Intelligenz, Deep Learning und Höchstleistungsdatenanalyse besser unterstützen.

Die Ankündigung der nächsten Supercomputergenerationen des HLRS, Hunter und Herder, stellt einen bedeutenden Moment in der Geschichte des Höchstleistungsrechnens (HPC) an der Universität Stuttgart dar: Sie zeigt den Weg zur Exascale-Rechenleistung auf. Mit diesem großen Sprung bleibt das HLRS seinem Ruf als eines der führenden Höchstleistungsrechenzentren Europas treu.

Zugleich hebt die Ankündigung einen bemerkenswerten technologischen Wandel hervor: Während das HLRS seit vielen Jahren eine überwiegend CPU-basierte Architektur anbietet, werden Hunter und Herder ihre Geschwindigkeitssteigerungen dank des Einsatzes von Grafikprozessoren (GPUs) erreichen. Für Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen, die numerische Methoden verwenden, werden die neuen Systeme größere und schnellere Simulationen ermöglichen. Gleichzeitig kann das HLRS mithilfe der Umstellung auf GPUs neue Ansätze der künstlichen Intelligenz, des maschinellen Lernens, des Deep Learning und der Höchstleistungsdatenanalyse besser unterstützen.

Diese Übergangsphase am HLRS ist sinnbildlich für den aktuellen Wandel in der HPC-Welt. Während sich das Zentrum auf diesem neuen Terrain bewegt, stehen für die Nutzer:innen sowohl aufregende Chancen als auch Herausforderungen bevor.

#### Warum HPC auf GPUs umgestellt wird

Als Gordon Moore 1975 sein Mooresches Gesetz formulierte, sagte er voraus, dass sich die Anzahl der Komponenten, die in einem integrierten Schaltkreis unterge-

bracht werden können, etwa alle zwei Jahre verdoppeln würde. Jahrzehntlang war der stetige Anstieg der Rechenleistung ein Beleg für diese Vorhersage. Heute sieht die Sache jedoch anders aus: Das Mooresche Gesetz scheint sich seinem Ende zu nähern.

Im Höchstleistungsrechnen wurden die meisten CPU-basierten Supercomputer auf der Grundlage einer sogenannten x86-Architektur gebaut, die jedoch an ihre Grenzen stößt. Mögliche Strategien wie das Hinzufügen weiterer Kerne, das Verkleinern von Komponenten oder das Erhöhen der Prozessorfrequenz sind entweder bereits unmöglich oder werden es wahrscheinlich bald sein. In der Zwischenzeit wäre auch der Bau größerer Supercomputer mit noch mehr CPUs aufgrund der erforderlichen Energie- und Materialressourcen finanziell und ökologisch nicht tragbar.

Computerhersteller sind sich dieser drohenden Grenzen schon seit einiger Zeit bewusst. Daher entwickeln sie neue Architekturen, um dem ständig steigenden Bedarf an höheren Rechengeschwindigkeiten nachzukommen. Eine der populärsten ist die Umstellung von CPUs auf eine Architektur, die Grafikprozessoren (GPUs) als Beschleuniger einsetzt. Die meisten der schnellsten Supercomputer der Welt enthalten inzwischen GPUs, darunter die Systeme Frontier und Aurora von Hewlett Packard Enterprise (HPE) / Cray, die derzeit auf Platz 1 und 2 der Top500-Liste stehen.

GPUs sind einfacher aufgebaut als CPUs, können aber viel schneller und energieeffizienter eine Vielzahl von Berechnungen parallel ausführen. Da die Taktraten von

GPUs niedriger sind, benötigen sie weniger Strom als CPUs. Dennoch laufen GPUs schneller, da sie viel mehr Kerne auf jedem Rechenknoten unterbringen, wodurch die Datenübertragung zwischen den Kernen deutlich effizienter wird.

Der kommende Supercomputer Hunter, der bis 2025 in Betrieb gehen soll, wird auf AMD MI300A Accelerated Processing Units (APUs) basieren, die CPU- und GPU-Prozessoren auf einem einzigen Chip mit gemeinsamem Speicher vereinen. Hunter wird gegenüber dem derzeitigen Flaggschiff-Supercomputer des HLRS, Hawk, einen Geschwindigkeitszuwachs von mindestens 50 Prozent bieten. Gleichzeitig wird das HPE Cray EX-4000-System bei Spitzenleistung nur 20 Prozent der Energie von Hawk verbrauchen. Nach der Installation im Jahr 2027 wird Herder das GPU-beschleunigte Konzept von Hunter als deutlich größerer Exascale-Rechner erweitern.

Sobald sie in Produktion gehen, kann das HLRS mithilfe von Hunter und Herder noch leistungsfähigere Simulationen unterstützen. Wissenschaftliche Nutzer:innen können dann komplexe Phänomene mit höherer Genauigkeit untersuchen, größere Systeme als bisher simulieren oder wiederholte Simulationen effizienter durchführen. So ließen sich die Auswirkungen bestimmter Parameter aufzeigen oder eine größere statistische Leistung für die Datenanalyse erzielen. Die auf APU-Chips kombinierten CPUs und GPUs können auch Simulation und Datenanalyse effizienter als bisher miteinander verbinden. Dies ermöglicht eine Reihe spannender potenzieller Anwendungen.

#### Chancen an der Schnittstelle von Simulation und KI

Beim konventionellen Höchstleistungsrechnen führen Forschende groß angelegte Simulationen durch, erhalten die Ergebnisse als Daten und suchen dann interessante Merkmale und Muster, indem sie die Daten visualisieren oder weiterverarbeiten. In den meisten Fällen dauert diese Nachbearbeitung der Daten wesentlich länger als die eigentliche Simulation. Diese Herausforderung wird sich verschärfen, wenn sich mit größeren Supercomputern noch umfangreichere Datensätze erstellen lassen.



„GPU-Systeme werden nicht nur größere Simulationen ermöglichen, sondern auch die Datennachbearbeitung und -analyse beschleunigen.“  
Xiang Xu, IMS, Universität Stuttgart

Dr. Matthias Meinke vom Institut für Aerodynamik (AIA) der RWTH Aachen nutzt die Supercomputer des HLRS seit vielen Jahren, um numerische Simulationen von turbulenten Strömungen durchzuführen. „Die Probleme, die wir untersuchen wollen, werden zunehmend komplex und erzeugen immer größere Datenmengen“, sagt er. „Daher müssen wir untersuchen, wie Höchstleistungsrechnen und künstliche Intelligenz die Forschung unterstützen können.“

Mithilfe der APUs von Hunter könnten Forschende künstliche Intelligenz in ihre Anwendungen und Arbeitsabläufe integrieren. Hier ließe sich KI einsetzen, um Simulationsdaten in Echtzeit zu durchsuchen. Dadurch verringert sich die Notwendigkeit einer späteren Nachbearbeitung der Daten.

Der Doktorand Xiang Xu vom Institut für Materialwissenschaft der Universität Stuttgart sieht die Vorteile dieses Ansatzes. Kürzlich hat er mit Hawk Molekulardynamiksimulationen von Kristallen aus Nickelaluminid durchgeführt. Superlegierungen auf Ni-Basis sind sehr beliebte Werkstoffe, insbesondere in Flugzeugtriebwerken. Xus Forschung konzentriert sich auf Eigenschaften auf atomarer Ebene, die das mechanische Verhalten solcher Legierungen beeinflussen können. Er sagt, dass Hunter und Herder nicht nur in der Lage sind, größere Atomsysteme zu simulieren, sondern auch viel Zeit bei der Analyse sparen werden.

„Wenn wir Molekulardynamiksimulationen durchführen, brauchen wir nicht alle Daten für alle Atome, sondern suchen nach Hinweisen auf Versetzungen, Leerstellen oder Defekte, die bereits auf der Makroebene gemessen wurden“, sagt Xu. Er geht davon aus, dass Echtzeit-Datenanalysetools dabei helfen werden, interessante Merkmale schneller zu identifizieren und zu isolieren. Dank dieser Tools wird er genau die benötigten Daten herunterladen und speichern können.

Darüber hinaus könnte künstliche Intelligenz bei der Zusammenfassung und Analyse von enormen Datensätzen helfen, die sich in einem Labor oder Forschungsinstitut über viele Jahre hinweg ansammeln. KI bietet eine globale Perspektive, die bei der Erforschung spezifischer Probleme oder Parameter oft nicht relevant ist. Das heißt, KI kann verborgene Muster in Datensätzen erkennen, die bei den ursprünglichen Simulationen nicht wichtig waren, aber im Kontext größerer Datensätze interessant werden. Mithilfe von KI könnten die über viele Jahre hinweg gesammelten Daten zu einer reichhaltigen Basis für neue Hypothesen und Entdeckungen werden.

Dr. Meinke freut sich darauf, die Möglichkeiten der Datenanalyse zu erforschen – zum Beispiel bei der Entwicklung von Ersatzmodellen für komplexe Simulationen. Gleichzeitig betont er, dass Ersatzmodelle traditionelle Methoden zwar ergänzen, aber nicht ersetzen können. „Wir müssen mit unseren Erwartungen vorsichtig sein und kritisch prüfen, ob KI eine allgemeine Lösung bietet oder nur unter bestimmten Bedingungen

funktioniert“, mahnt er. Die Forschung mit Hunter und Herder könnte dabei helfen, diese Strategien zu testen.

#### Ersatzmodelle und ihre Herausforderungen

In der Rechenzeitvergabe des HLRS geht der Löwenanteil an Wissenschaftler:innen für die Durchführung von groß angelegten Simulationen. Für Ingenieur:innen aus der Industrie ist es jedoch oft nicht möglich oder sogar wünschenswert, Simulationen in solchen großen Dimensionen durchzuführen. Aus diesem Grund untersuchen Forschende, wie maschinelles Lernen und künstliche Intelligenz eingesetzt werden können, um Ersatzmodelle („Surrogate Models“) komplexer Systeme zu entwickeln. Basierend auf Daten, die aus Simulationen nach den Grundprinzipien gewonnen wurden, bilden Ersatzmodelle relevante Merkmale komplexer Systeme auf vereinfachte Weise ab, die auf einem herkömmlichen Desktop-Computer ausgeführt werden können. Diese Modelle geben Ingenieur:innen praktische Werkzeuge an die Hand, die sich auf theoretische Forschung stützen.

Laut Prof. Bernhard Weigand, Leiter des Instituts für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) der Universität Stuttgart, lassen sich dank der Konvergenz von Supercomputerleistung, neuen experimentellen Techniken und maschinellem Lernen bessere Ersatzmodelle entwickeln. „Die Messtechniken haben sich parallel zu den Berechnungsmethoden und -technologien verbessert, sodass viele Details sichtbar werden, die wir mit numerischen Methoden nicht erkennen konnten“, sagt er. „Die spannende Herausforderung für die kom-



„Mithilfe von maschinellem Lernen könnten wir experimentelle Daten und numerische Methoden assimilieren, um bessere Modelle zu entwickeln.“  
Bernhard Weigand, ITLR, University of Stuttgart

menden Jahre besteht darin, diese Entwicklungen zu synchronisieren und maschinelles Lernen zu nutzen, um experimentelle Daten und numerische Methoden zu assimilieren und bessere Modelle zu entwickeln.“

Solche Methoden werden auch von einem neuen Ansatz profitieren, der als „physikinformierte neuronale Netze“ bezeichnet wird. Dabei werden grundlegende physikalische Gesetze in die Trainingsalgorithmen einbezogen, um sicherzustellen, dass sie auf der physikalischen Realität basieren. Dieser Ansatz stellt nicht nur sicher, dass die resultierenden Ersatzmodelle schneller sind als herkömmliche Simulationen mit HPC, sondern auch, dass die von ihnen erzeugten Vorhersagen der Realität entsprechen und in unterschiedlichen Situationen zuverlässig sind.

Selbst wenn der KI die Entwicklung breit anwendbarer Ersatzmodelle gelingt, wird das Höchstleistungsrechnen in seiner traditionellen Form nicht verschwinden. Vielmehr werden GPU-beschleunigte Systeme für hochpräzise Simulationen und fortschrittliche KI-Funktionen wichtiger denn je.

Prof. Wolfgang Schröder, Leiter des Instituts für Aerodynamik (AIA) der RWTH Aachen, sieht in KI-Methoden ein großes Potenzial, betont aber, dass numerische Methoden weiterhin der Goldstandard für rechnergestützte

„Wir brauchen große Rechenkapazitäten, um genügend Daten für das Training von KI-Modellen zu generieren. Aus diesem Grund werden Physikdisziplinen Exascale-Systeme wie Herder brauchen.“  
Wolfgang Schröder, AIA, RWTH Aachen



Forschung bleiben. Außerdem werden KI-Ansätze ihren Preis haben. „Wenn man sagt, dass in Zukunft alles mit maschinellem Lernen und KI gemacht wird, geht man davon aus, dass die notwendigen Daten vorhanden sind. In der numerischen Strömungsmechanik ist das nicht der Fall“, sagt Schröder. „Wir benötigen große Mengen an Rechenzeit, um genügend Daten zu generieren – in manchen Fällen müssen wir Tausende von Simulationen durchführen, um ein tragfähiges Ersatzmodell zu finden. Das wird nicht von alleine passieren, und das ist ein Grund, warum Physikdisziplinen Exascale-Systeme wie Herder brauchen werden.“

### Schulung und User Support helfen beim Übergang zu GPUs

Aus technischen Gründen lassen sich Algorithmen, die für CPU-basierte Architekturen geschrieben wurden, nicht einfach auf GPUs portieren. Stattdessen werden die Nutzer:innen von Hunter und Herder genau darauf achten müssen, wie ihre Codes strukturiert und geschrieben sind, um sicherzustellen, dass sie auf der neuen Hardware mit hoher Leistung arbeiten.

„In den letzten Jahren haben wir unseren Code kontinuierlich optimiert, um seine Leistung auf CPUs zu verbessern“, sagt ITLR-Wissenschaftler Matthias Ibach. „Der Zugang zu GPUs bietet uns Chancen und wird viel effizienter sein. Wir müssen allerdings das volle Potenzial des neuen Systems ausschöpfen. Wenn wir nicht umdenken, könnte dessen Leistung schlechter sein als die des jetzigen.“

Die Nutzer:innen des HLRS werden bei dieser Umstellung nicht im Stich gelassen. Ein wichtiger Aspekt bei der Entscheidung des Zentrums, einen Vertrag mit Hewlett Packard Enterprise für seine Systeme der nächsten Generation abzuschließen, ist das Engagement des Herstellers für den User Support. In den kommenden Jahren werden HPE-Mitarbeiter als Systemexperten in Zusammenarbeit mit dem User Support des HLRS seine Nutzer:innen unterstützen.

Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, weist darauf hin, dass dies nicht das erste Mal ist, dass sich die User



„GPUs bieten uns viele Chancen und werden deutlich effizienter. Aber wir müssen sicherstellen, dass wir das volle Potenzial des neuen Systems ausschöpfen.“  
Matthias Ibach, ITLR, Universität Stuttgart

Community des Zentrums an eine neue Technologie anpassen muss. „Seit seiner Gründung im Jahr 1996 ist das HLRS in regelmäßigen Abständen auf neue Supercomputing-Architekturen umgestiegen, um an der Spitze des Höchstleistungsrechnens zu bleiben“, erklärt er. „In diesem Sinne ist die Herausforderung, vor der wir derzeit mit den GPUs stehen, nicht neu. Allerdings ist die spezifische Hürde real, weil viele unserer Nutzer:innen diese Art von System noch nie zuvor verwendet haben. Daher ist Hunter als Übergangssystem konzipiert. Für uns ist es unerlässlich, unsere Nutzer:innen bei diesem Sprung zu unterstützen.“

In den vergangenen Jahren hat das HLRS bereits angefangen, die Grundlagen für den Übergang zu GPUs zu schaffen. Das HPC-Schulungsprogramm wurde erweitert, um die notwendigen Fähigkeiten und Expertise zu vermitteln. In Zusammenarbeit mit anderen HPC-Zentren in ganz Europa hat das HLRS „Bootcamp“-Kurse angeboten, in denen Programmiermodelle für die Portierung von Codes auf GPUs vorgestellt werden. Weitere Kurse legen den Fokus auf Deep Learning und künstliche Intelligenz.

Während einige Forschungsgruppen schnell feststellen dürften, dass ihre Codes auf GPUs viel schneller laufen, werden andere mehr Unterstützung benötigen. Methoden, die einfach wiederholende Berechnungen ausführen, werden es beispielsweise leichter haben als Algorithmen, die objektorientierte Programmierung verwenden. Mit Blick auf die kommenden Jahre erklärt Dr. Schröder: „Wir müssen eine Spannung zwischen den Erwartungen an unsere Forschung in der Strömungsdynamik und den Erwartungen an die numerische Analyse akzeptieren. Es wird schwierig, aber wir stellen uns

gerne der Herausforderung, weil wir wissen, dass die nächste Generation von ‚Superpower-Code‘ sowohl für uns als auch für das HLRS notwendig ist.“

### Zuverlässige Ressourcen und Chancen für die Industrie

Viele Wissenschaftler:innen entwickeln aktiv ihre eigenen fortschrittlichen Codes. Allerdings sind industrielle HPC-Nutzer:innen in der Regel auf kommerziell hergestellte Softwarepakete angewiesen, die sie für bestimmte Anwendungen modifizieren. In naher Zukunft könnte diese Situation Herausforderungen bei der Umstellung auf GPUs mit sich bringen. In manchen Fällen existieren bereits problemlos funktionierende Softwarepakete, aber das ist nicht überall der Fall.

Aus diesem Grund wird das HLRS industriellen Anwender:innen weiterhin den Zugang zu x86-Knoten auf seinem Vulcan-Cluster anbieten. Dieses seit Langem bestehende, heterogene System wurde im Laufe der Jahre aktualisiert, um der Industrie Zugriff auf eine Vielzahl von CPU-Prozessor-Generationen zu ermöglichen. Dadurch wird das HLRS auch weiterhin die Innovationskraft seiner industriellen Nutzer:innen, einschließlich kleiner und mittelständischer Unternehmen (KMUs), unterstützen.

Gleichzeitig wird die Verfügbarkeit von GPUs auf Hunter und Herder die Türen des HLRS für neue Industriekunden öffnen. Nach dem breiten öffentlichen Interesse an ChatGPT und generativer KI untersuchen derzeit viele Unternehmen, wie KI und Datenanalyse ihre Aktivitäten unterstützen könnten. Einige nutzen bereits Anwendungen, die für den Betrieb auf GPUs ausgelegt sind.



## Planung des HLRS III

Mit der Einrichtung von Herder im Jahr 2027 wird sowohl die Rechenleistung erheblich gesteigert als auch die Gebäudeinfrastruktur des HLRS erweitert. Da die größeren physikalischen und energetischen Anforderungen des Exascale-Systems die Kapazität der derzeitigen Infrastruktur des HLRS übersteigen, wird das Land Baden-Württemberg ein neues Gebäude, das HLRS III, mit einer größeren Stromversorgung errichten. Die Planungen für den Bau der Anlagen auf einem Grundstück hinter dem HLRS, das bisher für die Erweiterung des Zentrums vorgesehen war, haben bereits begonnen.

Das HLRS III wird einen Beitrag zu den Bemühungen der Universität Stuttgart leisten, einen emissionsfreien Campus zu schaffen. Dazu gehört auch die Speicherung und Nutzung der Abwärme des Exascale-Supercomputers, indem er an das Heizungsnetz der Universität angeschlossen wird. Ingenieure gehen davon aus, dass die Abwärme von Herder in den Wintermonaten etwa 35 Prozent des Heizbedarfs der Universität decken könnte und im Sommer mehr als genug Prozesswärme für den gesamten Campus liefern würde. Dies könnte dazu beitragen, den Energieverbrauch der Universität und die damit verbundenen Heizkosten zu senken.

Im Rahmen einer Bürgerbeteiligung veranstaltete das HLRS im Jahr 2023 drei Events, bei denen sich die Anwohner:innen über die Pläne des Zentrums informieren und Kommentare sowie Vorschläge zur Integration des neuen Gebäudes in die Nachbarschaft und die umgebende Landschaft einbringen konnten. Vertreter:innen des HLRS, des Hochbauamts der Universitäten Stuttgart und Hohenheim sowie die Projektarchitekten des HLRS III präsentierten erste Konzepte für die Gestaltung und Technik der neuen Einrichtungen. In der 3D-Visualisierungsanlage CAVE erlebten die Besucher:innen das neue Gebäude auch in virtueller Realität.

Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS, begrüßt diese Chancen: „Wir reden schon lange über künstliche Intelligenz, aber mit Hunter und Herder bekommt das HLRS leistungsstarke neue Plattformen dafür. Viele Anwender aus der Industrie sagen, dass sie keine riesigen Systeme brauchen. Schon der Zugriff auf relativ wenige Prozessoren könnte ihre Arbeit stark voranbringen. Der Vorteil unseres Konzepts besteht darin, dass wir in kleinem Rahmen in enger Zusammenarbeit mit unseren Technologieanbietern Lösungen für die spezifischen Probleme unserer Nutzer:innen finden können.“

### Bereit für die Zukunft

Mit Hunter und Herder wird das HLRS seiner User Community in erster Linie weiterhin Werkzeuge und Dienste für die rechnergestützte Spitzenforschung anbieten. Auch wenn der Übergang Herausforderungen mit sich

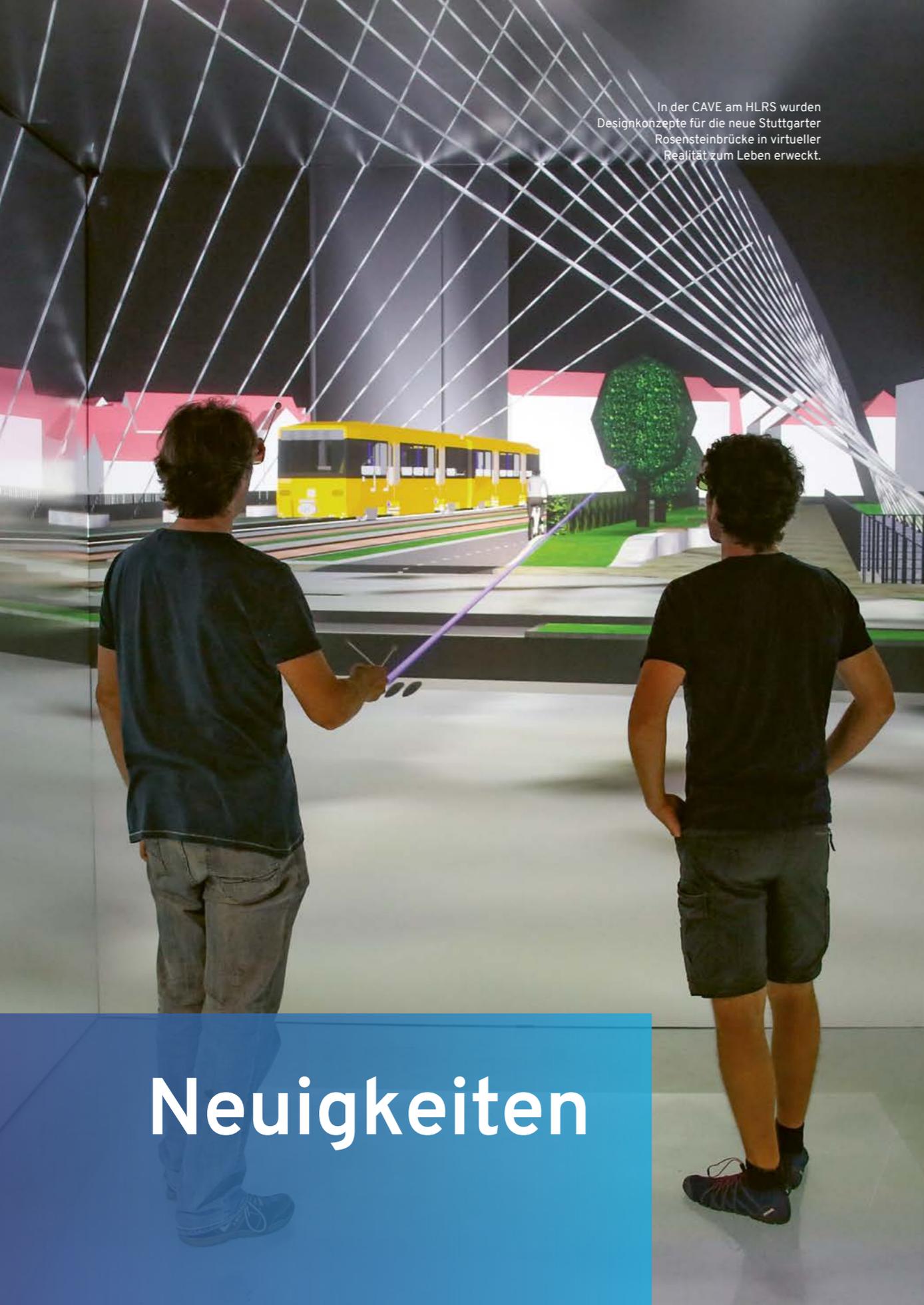
bringt, wird die Möglichkeit, Simulationen in größerem Maßstab durchzuführen und gleichzeitig Zugang zu leistungsstarken KI- und Datenanalysefunktionen zu haben, eine flexible Plattform für Wissenschaft, Industrie, Behörden und andere Gemeinschaften bieten.

„Da sich im Bereich des Höchstleistungsrechnens gerade so viel ändert, ist es schwierig, genau vorherzusagen, was unsere Nutzer:innen mit den neuen Systemen machen werden“, sagt Prof. Resch. „Wir sind aber sehr zuversichtlich, dass Hunter und Herder das HLRS auf einen guten Kurs für die Zukunft bringen. Wenn unsere Nutzerinnen und Nutzer mit uns den Übergang zum Exascale Computing vollziehen, können wir uns auf spannende neue Anwendungen und Entdeckungen freuen.“

Ein vorläufiges Rendering des HLRS III zeigt seinen Standort hinter dem derzeitigen HPC-Schulungsgebäude des HLRS.



Bei drei Veranstaltungen hatten Anwohner:innen die Möglichkeit, sich über die Pläne für das HLRS III zu informieren.



In der CAVE am HLRS wurden Designkonzepte für die neue Stuttgarter Rosensteinbrücke in virtueller Realität zum Leben erweckt.

# Neuigkeiten



Bundesministerin für Bildung und Forschung, Bettina Stark-Watzinger traf sich mit Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS.

## Bundesministerin Bettina Stark-Watzinger besucht das HLRS

Anlässlich ihrer fünftägigen Sommertour durch Deutschland besuchte die Bundesministerin für Bildung und Forschung, Bettina Stark-Watzinger, am 28. Juli das HLRS. Während der Sommertour wurden der Ministerin einige der innovativsten Forschungsprojekte, Start-ups und Unternehmen Deutschlands vorgestellt, die sich mit den Technologien der Zukunft (u. a. KI, Supercomputing, Biotechnologie) beschäftigen. Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS, begrüßte Ministerin Stark-Watzinger und führte sie zum Rechenraum des Zentrums und der CAVE-Visualisierungsanlage. Mitarbeitende des HLRS stellten Anwendungen der Simulation und der virtuellen Realität vor, unter anderem urbane digitale Zwillinge für die Stadtplanung und die Analyse der Luftqualität. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) ist ein wichtiger Fördergeber des HLRS und unterstützt gemeinsam mit dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg die Einrichtungen und den Betrieb des HLRS. Das BMBF fördert das HLRS über das Gauss Centre for Supercomputing, den Zusammenschluss der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren.

## Eine Brücke für die Zukunft

Im Jahr 2022 gab die Stadt Stuttgart bekannt, dass die Rosensteinbrücke über dem Neckar ersetzt werden soll. Anlässlich der Konferenz „Urban Future 2023“ veranstaltete die Visualisierungsabteilung des HLRS einen Hackathon, in dem Stadtplaner:innen Konzepte für die Erneuerung der Brücke entwickelten. Der Hackathon wurde auch als Teil von CapeReviso veranstaltet – einem Projekt, das Planungs- und Entscheidungshilfen für die Analyse und Reduzierung von Konflikten zwischen Radfahrer:innen und Fußgänger:innen entwickelt. Während des Hackathons stellten Gruppen Studierender unter Leitung von Dr. Peter Zeile (Karlsruher Institut für Technologie) vorläufige Designkonzepte vor. Mitarbeitende des HLRS halfen den Studierenden, ihre digitalen Entwürfe in die Visualisierungsanlage CAVE zu importieren. In der immersiven virtuellen Realität erlebten die Stadtplaner:innen, wie ihre Pläne in echt aussehen und funktionieren könnten. Die daraus entstandenen Vorschläge boten sowohl attraktive Lösungen für die Struktur der Brücke als auch für eine bessere Nutzung des Neckarufers.



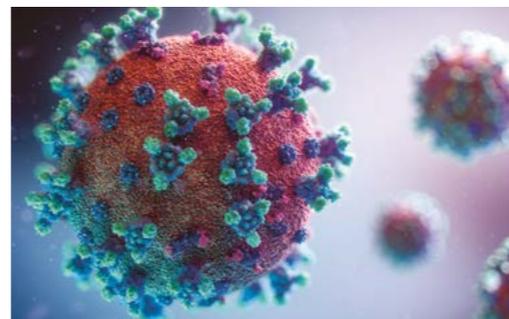
Vor dem Betreten der CAVE präsentierten die Studierenden ihre Entwürfe auf Postern und diskutierten sieben verschiedene Konzepte für die Brücke.

### User-Umfrage zeigt zukünftige Trends auf

Im Jahr 2023 führte das HLRS eine Umfrage unter seinen Nutzer:innen durch, um künftige Entwicklungen im Angebot an HPC-Ressourcen und -Diensten zu berücksichtigen. Mehr als 75 Prozent der Befragten gaben an, mit dem HLRS zufrieden zu sein. Mehr als 80 Prozent antworteten, dass sich die Ressourcen des HLRS einfach nutzen lassen. Die Fragen nach den Interessen der Nutzer:innen wiesen klare Trends auf, die das HLRS in den kommenden Jahren leiten werden. 46 Prozent der Befragten gehen davon aus, dass sie sich mit der Portierung auf Beschleuniger befassen werden, während 43 Prozent maschinelles Lernen als wichtiges Thema für ihre künftige Forschung ansehen. Im Vergleich dazu bekundeten nur sieben Prozent ihr Interesse an Höchstleistungsdatenanalyse, eine wertvolle Erkenntnis für die Weiterentwicklung des Technologiemixes des HLRS. Zwischen 60 und 70 Prozent der Befragten erwarten, dass ihre Anforderungen an Datenspeicherung und -leistung im kommenden Jahr steigen werden. Interessanterweise gingen die meisten Befragten davon aus, dass ihre Bandbreitenanforderungen gleich bleiben würden. Das HLRS wird diese Vorhersagen nutzen, um seine HPC-Ressourcen für die technologische Entwicklung der Nutzergemeinschaft zu optimieren.

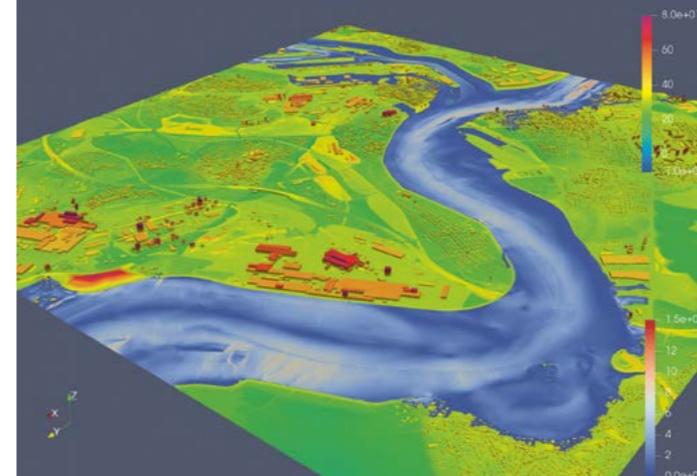
### ORCHESTRA veranstaltet COVID-19 Science Challenge

Das multinationale EU-geförderte Forschungsprojekt ORCHESTRA konzentriert sich seit 2020 auf COVID-19 und dessen Langzeitfolgen. Geleitet von Forschenden der Universität Verona entwickelte das Projekt eine Datenmanagement-Infrastruktur, die klinische SARS-CoV-2-Daten aus mehreren Ländern umfasst. Auf diese Weise stellt ORCHESTRA eine große virtuelle Kohorte für die Forschung bereit. Im Juli 2023 kündigte das Projekt eine COVID-19 Science Challenge an, bei der externe Forschende erstmals eingeladen wurden, die in dieser virtuellen Kohorte enthaltenen Daten zu nutzen. Wissenschaftler:innen des HLRS haben an der Entwicklung der Dateninfrastruktur mitgewirkt und unter anderem einen Software-Stack für die nationalen COVID-19 Data Hubs in Deutschland, Italien und Frankreich implementiert. Sie trugen auch dazu bei, die sichere Speicherung sensibler Gesundheitsdaten zu gewährleisten. ORCHESTRA implementiert standardisierte Variablen und Metadatenrahmen, die eine integrierte Analyse der Daten ermöglichen.



### Vertrauenswürdigkeit und Verlässlichkeit in der KI

Da künstliche Intelligenz alles andere als transparent ist, hat sich die Frage seiner Vertrauenswürdigkeit zu einem wichtigen Thema entwickelt. Ein allgemeingültiges Verständnis des Vertrauens gibt es allerdings noch nicht. Reicht es aus, wenn KI zuverlässige Ergebnisse liefert, die mit unseren Beobachtungen übereinstimmen? Müssen wir ein tieferes Maß an Vertrauen erreichen, das vergleichbar mit menschlichen Interaktionen auf ethischen Prinzipien beruht? Auf der von der Abteilung Philosophy of Computational Sciences des HLRS organisierten Konferenz „Reliability or Trustworthiness?“ untersuchten Forschende aus den Geistes-, Sozial- und Computerwissenschaften, was solche Konzepte für die KI bedeuten könnten. Ihre Vorträge boten neue Perspektiven für die angewandte KI sowie Erkenntnisse, die für künftige KI-Modelle und die Politik von Bedeutung sein könnten.



Eine Visualisierung zeigt Überschwemmungsgefahren am Rhein auf.

### CIRCE-Kooperation simuliert Hochwasserrisiken in Duisburg

Aufbauend auf den Erfahrungen, die das HLRS in den letzten Jahren gesammelt hat, möchte das Zentrum in dem Projekt CIRCE ein Verständnis davon gewinnen, wie Höchstleistungsrechnen (HPC) und künstliche Intelligenz (KI) Behörden bei der Bewältigung von Krisensituationen unterstützen können. Im März 2023 richtete CIRCE eine Veranstaltung aus, bei der Vertreter:innen aus Behörden und Kommunen

Einblicke in beispielhafte HPC-Anwendungen bekamen, z. B. zur Vorhersage des Bedarfs an Intensivstationsbetten während der Coronapandemie, zur Prognose von Migrationsereignissen oder zur Bewertung von Tsunami-Risiken. Die Teilnehmer:innen wurden dazu angeregt, potenzielle Anwendungen von HPC und KI in ihren eigenen Gemeinden in Betracht zu ziehen. Aus der Diskussion hat sich eine Zusammenarbeit mit der Feuerwehr der Stadt Duisburg ergeben, die sich auf ein besseres Verständnis der Hochwasserrisiken hinter einem Bahndamm in der Nähe des Rheins konzentriert. Auch wenn der Stadt bekannt ist, dass die tief gelegenen Stadtteile in der Nähe des Wassers in einem Überschwemmungsgebiet liegen, können Simulationen aufzeigen, wie sich Barrieren an Unterführungen unter der Bahnlinie auf den Wasserfluss durch das städtische Kanalnetz auswirken würden. Die Studie wird im Juni 2024 im Rahmen einer Veranstaltung in Berlin vorgestellt, bei der Behörden aus den Erkenntnissen von CIRCE lernen können. Das Projekt wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung und dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert.

### KI-Allianz Baden-Württemberg will kooperative Datenplattform schaffen

Um ein international wettbewerbsfähiges Ökosystem für KI zu schaffen, haben sich im Jahr 2023 Verwaltungsorganisationen, Hochschulen und private Forschungszentren im Südwesten Deutschlands zur KI-Allianz Baden-Württemberg zusammengeschlossen. Die vom Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg geförderte KI-Allianz schafft regional verteilte, branchenspezifische Knotenpunkte, die die Entwicklung neuer KI-Anwendungen vorantreiben. Als Partner in einem Teilprojekt der KI-Allianz baut das HLRS eine technische Infrastruktur zur Vernetzung bestehender Datensammlungen aus Wirtschaft, Wissenschaft und öffentlicher Verwaltung zu einem durchsuchbaren, kooperativen Datenraum auf. Das Projekt wird Metadatenstandards implementieren und eine sichere, dezentrale Architektur entwickeln, um die Auffindbarkeit von Datenressourcen zu verbessern. Mithilfe eines weiteren Zuschusses des Ministeriums wird das HLRS außerdem Hardware installieren, die als Testumgebung für die Entwicklung von Simulations- und KI-Anwendungen genutzt werden soll. Die Ergebnisse könnten Innovationen in ganz Baden-Württemberg in Bereichen wie Gesundheit, Produktion, Mobilität, Umwelt und Smart Cities unterstützen, insbesondere für kleine und mittelständische Unternehmen. Darüber hinaus wird die KI-Allianz Anknüpfungspunkte zu verwandten Initiativen wie Gaia-X ermitteln.

### Nachhaltigkeitswochen Baden-Württemberg

Am 21. Juni öffnete das HLRS anlässlich der Veranstaltung Nachhaltigkeitswochen@Hochschulen BaWü 2023 seine Türen. Interessierte konnten sich während des Events über Nachhaltigkeit am HLRS informieren. Im Fokus standen Maßnahmen, die die Umweltbelastungen des HLRS-Betriebs begrenzen. Die Grundlage für dieses Bestreben ist das Umweltmanagementsystem des Zentrums, das nach dem Eco-Management and Audit Scheme (EMAS) zertifiziert ist. Darüber hinaus erforscht das HLRS Strategien zur Energieeinsparung im Systembetrieb, beispielsweise mittels Abwärmenutzung zur Beheizung anderer Gebäude der Universität Stuttgart. Björn Dick vom HLRS erläuterte in seinem Vortrag „Energieeffiziente Software als Beitrag zu einer nachhaltigen Digitalisierung“, wie Entscheidungen bei der Softwareentwicklung Auswirkungen auf den Energieverbrauch von HPC-Systemen haben können. Dabei stellte er Strategien bei der Programmierung vor, durch die die Nutzung des Programms weniger Energie benötigt.



Der digitale Zwilling der Anlage in Forbach visualisiert Daten zur Vorhersage von Baulärm.

### Digitaler Zwilling bei Planung und Bau einer Wasserkraftanlage eingesetzt

Bei der Planung eines neuen Pumpspeicherkraftwerks in Forbach hat sich der Energiekonzern EnBW an das HLRS als Experte für digitale Zwillinge gewandt. Die Zusammenarbeit begann im Jahr 2011, als Wissenschaftler der Visualisierungsabteilung des HLRS ein Raumordnungsverfahren unterstützten, in dem mehrere Standorte für das Kraftwerk untersucht und bewertet wurden. Der daraus resultierende digitale Zwilling des endgültigen Standorts enthält Daten, die sowohl die geplanten Gebäude und Maschinen als auch die umgebende Landschaft, die lokale Geologie und ein physikalisch basiertes Modell des Baulärms darstellen. Die Beteiligten schauten sich die 3D-Visualisierung in der CAVE am HLRS an, um die Pläne für die Anlage zu diskutieren und zu optimieren. Das HLRS präsentierte sie auch als Teil einer Bürgerbeteiligung der EnBW. Mit Beginn der Bauarbeiten im Jahr 2023 wird der digitale Zwilling weiterhin zur Unterstützung des Baumanagements eingesetzt. Die Anlage in Forbach wird ein bestehendes Wasserkraftwerk erweitern, um Wasser aufzufangen und in ein den Turbinen vorgelagertes Reservoir zu pumpen, das als Energiespeicher für ein stabiles Stromnetz dient. Nach der voraussichtlichen Fertigstellung im Jahr 2027 wird das Projekt die Energie- wende in Baden-Württemberg unterstützen.



### HLRS erneuert Kooperationsverträge mit NSCC-GZ und KISTI

Im Jahr 2023 verlängerte das HLRS seine Kooperationsvereinbarungen mit dem National Supercomputing Center Guangzhou (NSCC-GZ) und dem Korea Institute of Science and Technology Information (KISTI). Die Vereinbarungen ermöglichen die Zusammenarbeit in Forschung und Lehre und erleichtern die Organisation von gemeinsamen Workshops und Kursen sowie den Austausch von Lehrkräften, Mitarbeitenden und Doktoranden. In den Vereinbarungen werden auch wissenschaftliche Bereiche festgelegt, die den Rahmen für die Zusammenarbeit bilden. Das HLRS und das NSCC-GZ teilen z.B. ein gemeinsames Interesse an numerischen Algorithmen mit unstrukturierten Gittern, an neuen Technologien für parallele Programmierung und Vernetzung sowie an der immersiven Visualisierung numerischer Simulationen. Die beiden Zentren werden auch untersuchen, wie diese Ansätze die Entwicklung von Anwendungen für das Ingenieurwesen und Global Systems Science unterstützen können. Das HLRS und KISTI entwickeln gemeinsam Werkzeuge zur Verbesserung der Visualisierung von Simulationsergebnissen für Konstruktions- und Fertigungsprozesse in der Industrie.

### Gewinner der Golden Spike Awards 2023

Am 12. und 13. Oktober trafen sich die Nutzer:innen der Rechensysteme des HLRS zum 26. Results and Review Workshop. Dieser beleuchtet jährlich Anwendungen des Höchstleistungsrechnens am HLRS und bietet ein Forum, in dem die Nutzer:innen Erkenntnisse darüber austauschen können, wie sich die Leistung von Anwendungen optimieren lässt. Über Ansätze mit traditionellen HPC-Simulationsmethoden hinaus wurden in mehreren Vorträgen und Postern neue Anwendungen vorgestellt, die maschinelles Lernen mit traditionellen Simulationsmethoden kombinieren. Zum Abschluss der Tagung gab Prof. Dr. Thomas Ludwig (Deutsches Klimarechenzentrum), Vorsitzender des Lenkungsausschuss des HLRS, die Gewinner der Golden Spike Awards 2023 bekannt. Der Preis ehrt herausragende Leistungen aus der rechnergestützten Forschung und unter Einsatz von Höchstleistungsrechnern. Die diesjährigen Gewinner waren: Pascal Mossier (Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Universität Stuttgart) für „A High-Order Framework for Compressible Droplet Dynamics“, Theresa Pollinger (Institut für Parallele und Verteilte Systeme, Universität Stuttgart) für „The Sparse Grid Combination Technique for Higher-Dimensional Simulations at Extreme Scales“ und Maximilian Jacobi (Institut für Kernphysik, TU Darmstadt) für „Neutron Star Mergers: From Nuclei to Cosmic Explosions“.



Pascal Mossier, Theresa Pollinger und Maximilian Jacobi haben jeweils einen der drei HLRS Golden Spike Awards 2023 erhalten.



# Highlights aus 2023

Visualisierung der Luftqualität in Sofia, Bulgarien. Das HLRS unterstützte die Entwicklung von CFD-Software für die stadtphysikalische Modellierung.

## HPC Industry Summit: Innovative HPC-Anwendungen in europäischen KMUs

Auf einer zweitägigen Veranstaltung in Berlin wurden Ergebnisse erfolgreicher Experimente in Unternehmen vorgestellt, die das FF4EuroHPC-Projekt ermöglicht hatte.

Das von der EuroHPC Joint Undertaking geförderte FF4EuroHPC-Projekt wurde 2020 ins Leben gerufen, um die Nutzung von Höchstleistungsrechnern (HPC), künstlicher Intelligenz (KI) und Höchstleistungsdatenanalyse (HPDA) in kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMUs) zu fördern. Aus zwei offenen Ausschreibungen und Förderungszyklen innerhalb von FF4EuroHPC resultierten 42 Experimente in Zusammenarbeit mit 118 Experimentpartnern aus 22 europäischen Ländern, die Branchen wie Fertigung, Maschinenbau, Energie, Umwelt und Gesundheitswesen abdeckten. Ausgewählte KMUs erhielten kostenlosen Zugang zu Rechnern und User Support, um Testprojekte an HPC-Zentren im gesamten EuroHPC-Netzwerk zu realisieren.

Am 18. und 19. Oktober 2023 traf sich die FF4EuroHPC-Community in Berlin, um Ergebnisse dieser Experimente auf dem HPC Industry Summit vorzustellen. Das Treffen wurde gemeinsam von FF4EuroHPC und EuroCC 2 organisiert. EuroCC 2 ist ein vom Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) geleitetes Projekt, das die Entwicklung und Vernetzung von 32 nationalen Kompetenzzentren europaweit koordiniert.

Der HPC Industry Summit wurde als öffentliche Veranstaltung für Interessierte aus Industrie und Politik organisiert. Es brachte HPC- und Industrieexpert:innen zusammen, um sowohl die Innovationsmöglichkeiten als auch die Herausforderungen zu erörtern, vor denen KMUs beim Einsatz von Höchstleistungsrechnern stehen. Die Veranstaltung umfasste Keynote-Vorträge von

Daniel Opalka (Head of Sector Research & Innovation, EuroHPC Joint Undertaking), Javier Cordova Morey (Policy Officer, Europäische Kommission) und Michael Rafii (Bundesministerium für Bildung und Forschung, BMBF) sowie mehrere Expertenvorträge und Podiumsdiskussionen zu den Zukunftsaussichten von HPC, KI und Quantencomputing in der Industrie.

Ein weiterer Höhepunkt der Veranstaltung waren Erfolgsgeschichten aus FF4EuroHPC, die von Teilnehmenden aus den Experimenten vorgetragen wurden. Die Erfolgsgeschichten boten einen inspirierenden Einblick in verschiedene Möglichkeiten, wie HPC und verwandte Technologien zur Entwicklung besserer Produkte und Dienstleistungen beitragen können.

### Neue Anwendungen für Schifffahrt, Wasserwirtschaft, Fertigung und Stadtplanung

Das in Paris ansässige Ingenieurbüro AYRO zum Beispiel hat mit Unterstützung von FF4EuroHPC das Design seiner windunterstützten Schiffsantriebstechnologie Oceanwings verbessert. Dieser neue Ansatz stattet unter anderem Schiffe, die mit fossilen Brennstoffmotoren betrieben werden, mit segelähnlichen Strukturen aus. Eine Software mit künstlicher Intelligenz überwacht kontinuierlich die Windverhältnisse und passt die Form der Segel automatisch an, um die aerodynamische Leistung zu optimieren. Das Unternehmen schätzt, dass durch die Nutzung der Windenergie der Treibstoffverbrauch von Schiffen um bis zu 45 Prozent gesenkt werden kann. AYRO hat sich zum Ziel gesetzt, die maritime Industrie bei der Verringe-



Auf dem HPC Industry Summit diskutierten Führungskräfte kleiner Unternehmen über erfolgreiche Anwendungen von HPC, KI und Datenanalyse.

nung ihres CO<sub>2</sub>-Fußabdrucks zu unterstützen. Mit Unterstützung von FF4EuroHPC hat das Unternehmen ein Tool entwickelt, das CFD-Simulationen nutzt, um die Installation von Oceanwings auf allen Schiffstypen zu optimieren.

In einem weiteren Geschäftsexperiment hat ARESYS S.r.l. einen neuen Dienst entwickelt, der HPC und KI nutzt, um die Wasserstände in Stauseen in Echtzeit zu überwachen. Basierend auf Remote-Sensing-Daten, die vom Sentinel-2-Satellitensystem der Europäischen Weltraumorganisation gesammelt wurden, wird ein Echtzeit-3D-Modell eines gesamten Stausees erstellt. Die Technologie bietet eine kostengünstige Methode, mit der Wasserressourcenmanager auf Dürreperioden oder extreme Wetterereignisse reagieren können.

Eine Zusammenarbeit zwischen dem Produktionsmaschinenhersteller Gabler Engineering GmbH und dem Softwareentwickler Kimoknow UG konzentriert sich darauf, wie KI die Produktmontage beschleunigen könnte. Das Team hat HPC eingesetzt, um synthetische 3D-CAD-Daten zu erzeugen und einen KI-Algorithmus zu trainieren, der die für den Bau einer Maschine benötigten Teile visuell erkennt. Mithilfe der Ergebnisse hat Gabler die Produktivität der Arbeiter verbessert. Gleichzeitig hat Kimoknow ein Geschäftsmodell entwickelt, bei dem seine Software schnell und kostengünstig an Tausende potenzieller Kunden angepasst und auf Abonnementbasis verkauft werden kann.

FF4EuroHPC hat auch ein gemeinsames Projekt von SoftSim Consult und dem CFD-Softwareunternehmen Engys unterstützt, die verbesserte Simulations-Workflows für die physikalische Stadtmodellierung entwickelt haben. Die Ergebnisse werden es KMU-Dienstleistern ermöglichen, eine breitere Palette von Stadtmodellierungslösungen anzubieten und Ingenieur:innen, Architekt:innen und Bauplaner:innen helfen, anspruchsvollere Vorschriften für Nachhaltigkeit und das Wohlbefinden von Bürger:innen im urbanen Raum zu erfüllen.

#### Erfolgsgeschichten werden die Nutzung von HPC in der Industrie fördern

Da die EuroHPC Joint Undertaking europaweit größere und leistungsfähigere Supercomputer einführt, hat die Steigerung ihrer Nutzung und Wirkung in der Industrie hohe Priorität. „Die Erfolgsgeschichten, die auf dem HPC Industry Summit vorgestellt wurden, zeigen Unternehmen, wie HPC, KI und HPDA die Innovation und Konkurrenzfähigkeit verbessern können“, sagt Dr. Bastian Koller, Projektkoordinator von FF4EuroHPC und EuroCC 2. „Und wenn sie sich potenzielle Anwendungen für ihr eigenes Unternehmen vorstellen können, bieten das HLRS und andere HPC-Zentren die notwendigen Dienstleistungen und Unterstützung.“

Unter [ff4eurohpc.eu](https://ff4eurohpc.eu) können Sie mehr über FF4EuroHPC und weitere Erfolgsgeschichten erfahren.

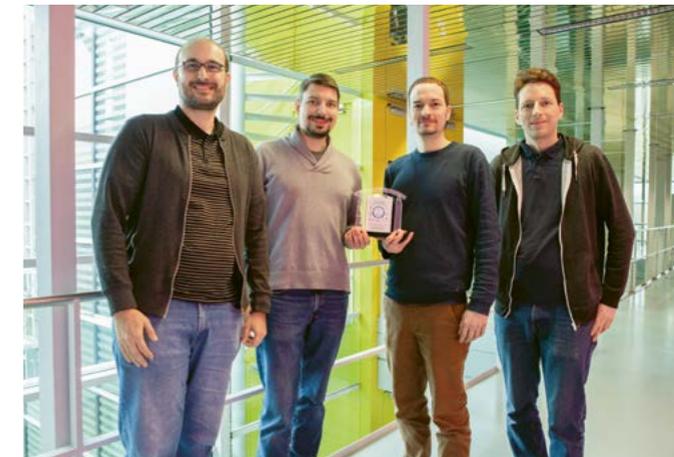
## HLRS und WIKKI GmbH gewinnen HPC Innovation Award

Mit dem Preis wird die Entwicklung des kohärenten Dateiformats gewürdigt. Die Methode macht die Simulation mit OpenFOAM schneller und leichter zugänglich für Wissenschaft und Industrie.

Das HLRS und die WIKKI GmbH, eine führende OpenFOAM-Beratungs- und Softwareentwicklungsfirma, wurden mit einem der 19. HPC Innovation Awards ausgezeichnet. Der Preis würdigt ihre Entwicklung des kohärenten Dateiformats. Der neue Ansatz ermöglicht es OpenFOAM – einem Open-Source-Programmierrahmen für paralleles Rechnen – größere Simulationen effizienter auszuführen. Mithilfe des kohärenten Dateiformats hat das Team eine groß angelegte OpenFOAM-Simulation auf 4.096 Knoten (524.288 CPU-Kerne) des Supercomputers Hawk am HLRS effizient ausgeführt. Diese Größe übertraf den bisherigen Skalierungsrekord für eine Simulation mit OpenFOAM um das Vierfache.

Diese Leistung ist auch bemerkenswert, weil das kohärente Dateiformat die Arbeitsabläufe für OpenFOAM-Nutzer:innen drastisch verkürzt. Dadurch wird die Simulation auch für Programmierer:innen aus Hochschulen und Industrie zugänglicher, die keinen Zugriff auf Supercomputer haben. Der Code ist auf Open-Source-Basis für die OpenFOAM-Gemeinschaft unter <https://code.hlrs.de/exaFOAM> verfügbar.

Das kohärente Dateiformat wurde ursprünglich von Dr. Henrik Rusche, CEO der WIKKI GmbH und einer der Hauptentwickler von OpenFOAM, konzipiert. Es beschleunigt die Simulationsabläufe, da es die Datenverwaltung vereinfacht und mehrere zeitaufwändige Schritte reduziert, die für die Verwendung der Software erforderlich sind. Die HLRS-Wissenschaftler Dr. Gregor Weiß, Dr. Andreas Ruopp und Dr. Flavio Galeazzo arbeiteten mit Dr. Sergey Lesnik und Dr. Rusche von der WIKKI GmbH zusammen, um das kohärente Dateifor-



Wissenschaftler des HLRS und der WIKKI GmbH erreichten mit der beliebten CFD-Software OpenFOAM einen neuen Skalierungsrekord.

mat für Höchstleistungsrechnersysteme zu entwickeln. Die Forschungsarbeiten wurden innerhalb des von der EuroHPC Joint Undertaking und dem Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekts exaFOAM durchgeführt.

Mit den HPC Innovation Awards werden bemerkenswerte Leistungen auf dem Gebiet des Hoch- und Höchstleistungsrechnens ausgezeichnet. Die Preise werden zweimal im Jahr verliehen und von den HPC-Marktanalysten Hyperion Research, Inc. koordiniert. Dies ist das zweite Jahr in Folge, in dem das HLRS einen HPC Innovation Award erhalten hat. Im Jahr 2022 wurden das HLRS und das Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung für die Implementierung einer Simulation ausgezeichnet, die den Bedarf an Intensivstationsbetten in Deutschland während der COVID-19-Pandemie vorhersagte.

# Projekt entwirft EuroHPC-Roadmap für Hyperkonnektivität

EuroHyPerCon wird die Konnektivitätsanforderungen des EuroHPC-Ökosystems analysieren und Spezifikationen für eine Ultrahochgeschwindigkeitsnetzinfrastruktur vorlegen, die die europäische Wissenschaft und Industrie mit der nächsten Generation von EuroHPC-Supercomputern verbindet.

Da die europäischen Supercomputer immer größer werden und künstliche Intelligenz zunehmend eingesetzt wird, explodieren die Datenmengen, die zwischen Rechenzentren übertragen werden müssen. Diese Herausforderung setzt eine modernisierte und flexible End-to-End-Infrastruktur voraus, die HPC-Nutzer:innen europaweit miteinander verbindet. Ein von der EuroHPC JU gefördertes Projekt namens EuroHyPerCon erforscht, wie sich dieser Bedarf abdecken lässt. Ein Team aus Netzwerkspezialisten Innov-Acts und Enomix gemeinsam mit dem HLRS wird Pläne für ein Ultrahochgeschwindigkeitsnetz entwickeln, das EuroHPC-Systeme mit regionalen und nationalen Rechnernetzen verbindet. Nach Abschluss des Projekts wird für die EuroHPC Joint Undertaking ein umfassender Implementierungsfahrplan als Leitfaden zum Aufbau des Netzes erstellt.

Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS, wird den Beitrag des Zentrums zu diesem Projekt leiten. „EuroHyPerCon bringt Interessenvertreter aus ganz Europa an einen Tisch“, erklärt Koller. „Ihre Erkenntnisse werden uns dabei helfen, einen realistischen und durchführbaren Implementierungsplan zu erstellen.“ Eine solche Planung bedeutet nicht nur, dass eine wachsende Zahl von HPC-Nutzer:innen und größere Datenmengen untergebracht werden müssen, sondern auch, dass die besonderen Anforderungen aufkommender Technologien wie künstlicher Intelligenz, Edge Computing und Quantencomputing berücksichtigt werden müssen. Der Fahrplan wird sich sowohl mit den technischen Merkmalen des Netzes als auch mit praktischen Erwägungen befassen, die für den Erfolg des Projekts von entscheidender Bedeutung sind, einschließlich Verwaltung und Kostenplanung.

„Die europäische Wissenschaft und Industrie ist bereits stark vernetzt, aber mit der zunehmenden Nutzung von Höchstleistungsrechnern, KI und Quantencomputern besteht die Gefahr, dass Engpässe bei der Datenübertragungskapazität alle verlangsamen“, erklärt Dennis Hoppe, Leiter der Abteilung Converged Computing am HLRS. „Das ist vergleichbar mit dem, was passiert, wenn Städte wachsen und die Straßen überlastet sind. Irgendwann wird es notwendig, eine Autobahn zu bauen. Wir wollen herausfinden, was nötig ist, um dies für HPC in Europa zu erreichen und um sicherzustellen, dass die Nutzer in ganz Europa problemlos auf die Autobahn auffahren können.“

# Maschinelles Lernen in der numerischen Strömungsmechanik: Ein Interview mit Andrea Beck

Künstliche Intelligenz bietet Möglichkeiten für die rechnergestützten Ingenieurwissenschaften, doch neue datenwissenschaftliche Ansätze müssen auf physikalischen Prinzipien beruhen.

*Prof. Andrea Beck ist stellvertretende Direktorin des Instituts für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart und leitet dort den Bereich Numerische Methoden in der Strömungsmechanik (CFD). Die Luft- und Raumfahrttechnikerin betreibt mit numerischen Methoden Grundlagenforschung zu kompressiblen Strömungen unter extremen Bedingungen, z. B. bei Überschallgeschwindigkeit von Flugzeugen.*

*Bereits als Postdoktorandin erforschte Beck als eine der ersten, wie sich Methoden des maschinellen Lernens mit groß angelegter Simulationssoftware kombinieren lassen, um die Simulation kompressibler Strömungen zu verbessern. Im Jahr 2023 brachte ihr Labor gemeinsam mit dem HLRS und Hewlett Packard Enterprise (HPE) die Methode Relexi heraus, die Reinforcement Learning nahtlos in ein Strömungssimulationsprogramm integriert. In diesem Interview spricht sie über die möglichen Anwendungen und einige Herausforderungen beim Einsatz von maschinellem Lernen in der Strömungsmechanik sowie über die Chancen, die mit den Supercomputern der nächsten Generation des HLRS für ihre Forschung einhergehen. Das Gesprächsinterview wurde zur besseren Lesbarkeit redaktionell angepasst.*

*Frau Prof. Beck, Sie beschäftigen sich mit numerischen Methoden in der Strömungsmechanik. Wie lässt sich eine kompressible Strömung simulieren?*

Viele Ingenieurwissenschaften befassen sich mit Multiskalenproblemen. Sie ähneln dem berühmten Schmetterlingseffekt, bei dem kleine, örtlich begrenzte Änderun-

gen große Auswirkungen haben können. Beispielsweise möchten wir zur Simulation eines fliegenden Flugzeugs ein sehr feines Berechnungsnetz verwenden – im Idealfall ist das gesamte Flugzeug von virtuellen 1-mm-Würfeln umgeben – um mit hoher Präzision zu simulieren, wie eine kompressible turbulente Strömung mit dem Flugzeug interagiert. In der Praxis würde eine Simulation in diesem Maßstab jedoch viel zu lange dauern – selbst mit Systemen der nächsten Generation am HLRS wie Hunter oder Herder. Stattdessen formulieren wir das Problem neu und lösen es auf einer Zwischenskala, der sogenannten Mesoskala.

Bei einer Annäherung auf diese Weise gehen Informationen verloren. Deswegen brauchen wir ein Modell, das die unerfassten, feinskaligen Effekte berücksichtigt. Dies wird manchmal als Skalenüberbrückung oder „Closure Modeling“ (Abschlussmodellierung) bezeichnet. Um ein einfaches Beispiel zu nennen: Ein Kollege hat simuliert, wie Menschen ein Fußballstadion evakuieren. Die Bewegungen der Menschen lassen sich wie ein Wasserstrom modellieren, aber es ist schwierig, einzelne miteinander zusammenstoßende Menschen zu modellieren. Dies ist jedoch wichtig, da schon ein Zusammenstoß zwischen zwei Personen an einer Tür einen Ausgang blockieren könnte. Um diese feinräumigen Effekte wiederherzustellen, verwendete der Kollege in seinem Closure Model Gaußsches Rauschen. Ähnlich verfahren wir bei der Simulation von kompressiblen Strömungen.

*Sie haben erforscht, wie sich maschinelles Lernen bei der Identifizierung von Closure Models einsetzen ließe. Was wäre der Vorteil dieses Ansatzes?*

Alle technischen Probleme lassen sich mithilfe physikalischer Gesetze beschreiben. Dazu verwenden wir komplizierte mathematische Ausdrücke, die nur mit einem Supercomputer gelöst werden können. Im Laufe der Jahre versuchten Forschende, basierend auf mathematischen und physikalischen Überlegungen Closure Models für Turbulenzen zu finden. Es gibt jedoch noch kein klares und konsistentes Modell, das turbulente Strömungen für alle Fälle umfasst. Stattdessen bestehen viele Modelle und jeder Forscher hat sein Lieblingsmodell.

Gerade bei der Ableitung solcher Modelle kann maschinelles Lernen helfen. Vor einigen Jahren wurden erstmals niedrigdimensionale Merkmale aus hochdimensionalen Datensätzen extrahiert. Wenn genügend Daten aus dem modellierten Prozess entstanden sind, sollten alle notwendigen Informationen über physikalische Gesetze in den Daten enthalten sein.

*Wo sehen Sie derzeit die Grenzen des maschinellen Lernens für CFD?*

Die Natur unterliegt zwar stets der Physik, doch maschinelles Lernen repliziert diese Daten nicht direkt, sondern nimmt nur Annäherungen auf Basis von erlernten Daten vor. Für sehr spezifische Fälle lassen sich mithilfe von maschinellem Lernen erstaunlich genaue Modelle erstellen. Für technische Anwendungen wollen wir jedoch Modelle des maschinellen Lernens, die nicht nur reproduzieren, was wir gemessen haben, sondern uns auch zuverlässige Antworten in Situationen geben, für die wir während des Lernprozesses keine Daten zur Verfügung gestellt haben.

Meiner Meinung nach haben wir etwas zu sehr daran geglaubt, dass Daten allein uns die Wahrheit vorhersagen können. Maschinelles Lernen funktioniert wie eine Black Box. Daher kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Ergebnisse gegen grundlegende physikalische Gesetze verstoßen. Die Tatsache, dass zwei Menschen beim Zusammenstoß nicht miteinander verschmelzen, ist ein physikalisches Gesetz, aber ein neuronales Netz

Prof. Andrea Beck erforscht das Potenzial der KI mithilfe der Rechenysteme des HLRS.



weiß das nicht. Oder um ein Beispiel aus der Luft- und Raumfahrttechnik zu nehmen: Ein Algorithmus für maschinelles Lernen muss wissen, dass die Schwerkraft gerade nach unten zeigt und nicht in einem leichten Winkel. Ein naiver Algorithmus kann dies jedoch nicht unbedingt allein aus den Daten erkennen. Aus diesem Grund brauchen wir Modelle, die physikalische Beschränkungen enthalten. Nur auf diese Weise wissen wir, dass das Modell die Schwerkraft korrekt wiedergibt.

Vor ein paar Jahren gingen Forschende davon aus, dass wir anstelle von Simulationen nur noch maschinelles Lernen brauchen würden. Jetzt sehen wir jedoch, dass wir von rein datengesteuerten Modellen zu physikalisch konsistenten und datengestützten oder -informierten Modellen übergehen müssen. Die Daten sollten uns dabei helfen, die Modelle in die richtige Richtung zu lenken. In meinem Labor behalten wir die ursprünglichen Simulationsmethoden bei und verwenden maschinelles Lernen als Hilfsmittel, das einige Teile der Gleichung ersetzt, wenn wir die physikalischen Eigenschaften kennen.

*Können Sie ein Beispiel für ein physikalisch konsistentes, datengesteuertes Modell aus der Praxis nennen?*

In dem gemeinsam mit dem HLRS und HPE entwickelten Ansatz Relexi kombinieren wir traditionelle Simulationsansätze und maschinelles Lernen in einer Methode. In einer Flugzeugturbine gibt es zum Beispiel langsame, heiße und kalte Strömungen, und die Turbine kann Wasser oder Dampf enthalten. Die Physik reagiert sehr empfindlich auf kleinste Veränderungen. Die Dimensionalität des Problems ist so groß, dass wir kaum

lange Listen von Datentabellen erstellen können, die dem Algorithmus sagen: „Wenn du dies siehst, gib das aus.“

Stattdessen verwenden wir weiterhin den bewährten High-Order Flow Solver FLEXI, der nun auch ein auf Reinforcement Learning basierendes Modell enthält. Dazu muss der Flow Solver mit einem Modell für maschinelles Lernen in der Programmschleife laufen. Das maschinelle Lernmodell erkennt, welche Aktionen der Solver durchgeführt und welche Ergebnisse er erzielt hat. Dies erfordert eine effiziente HPC-Implementierung – das Programm läuft auf der CPU, das maschinelle Lernmodell auf der GPU. Beide müssen ständig miteinander kommunizieren und Daten über den Lernprozess, das aktuelle Modell und die beobachteten Ergebnisse austauschen. Ich lasse meinen Solver mit meinem untrainierten maschinellen Lernmodell laufen und prüfe, ob die Ausgabe meinen Erwartungen entspricht. Ist dies nicht der Fall, so verbessert sich das maschinelle Lernmodell selbst.

Dieser Prozess ist vergleichbar damit, wie jemand Fahrradfahren lernt. Wenn Sie sich zum ersten Mal auf ein Fahrrad setzen und in die Pedale treten wollen, fallen Sie in der Regel um. Gleichzeitig spüren Sie jedoch, dass Sie etwas richtig gemacht haben. Sie können diese Strategie dann verbessern und wiederholen, bis Sie sturzfrei fahren. Übertragen auf ein physikalisches Modell würde die Simulation Komponenten des Systems umfassen, die die Konfiguration des Fahrrads, die Schwerkraft und Ihre Physiologie beschreiben. Maschinelles Lernen würde diese Informationen nutzen, um zu verstehen, wie Sie Ihre Gelenke bewegen müssen. Auf diese Weise werden auch Roboter oder selbstfahrende Autos trainiert.

*Die neuen Supercomputer am HLRS werden mehr Grafikprozessoren enthalten, die sowohl die Simulationen beschleunigen als auch die Kombination von Simulationen und maschinellen Lernmethoden erleichtern könnten. Was bedeutet das für die Zukunft Ihrer Forschung?*

Die KI-Revolution der vergangenen zehn Jahre war nur möglich, weil GPUs für die notwendigen mathemati-

schen Operationen so gut geeignet sind. Relexi läuft bereits auf den KI-Komponenten von Hawk. So haben wir schon gute Erfahrungen mit verschiedenen Architekturen gesammelt und sind uns ihrer unterschiedlichen Stärken bewusst. Uns wird zugutekommen, dass der Code und die Anwendungen des maschinellen Lernens bereits auf der GPU laufen.

Die künftige GPU-beschleunigte Architektur am HLRS ist interessant, da unser Code mit der höheren Rechenleistung um zwei Größenordnungen schneller laufen wird. Damit geht einher, dass die von uns zu lösenden Fragestellungen ebenfalls um zwei Größenordnungen zunehmen werden. Um beispielsweise das Fliegen nachhaltiger zu gestalten, wird das Flugzeug der Zukunft ganz anders aussehen als heutzutage. Die Vorhersage der Strömungsphysik von solchen Flugzeugen ist aktuell noch nicht realistisch abbildbar. Daher verwenden wir weiterhin Näherungsmethoden. Mit Herder oder vielleicht sogar Hunter werden wir in der Lage sein, schwierige Strömungssituationen über die gesamte Tragfläche eines Flugzeugs in einem bislang unmöglichen Detailgrad zu berechnen. Dadurch könnten wir auch Strömungssituationen unter gefährlichen Umständen besser vorhersagen.

Die Portierung auf die neue Architektur von Hunter und Herder wird eine Herausforderung. Wir müssen den größten Teil unseres Codes überarbeiten, die meisten Datenstrukturen und alle Schleifen überdenken, was viel Zeit und Mühe kostet. Positiv ist jedoch, dass wir einen deutlich größeren Umfang an Berechnungen durchführen können werden.

Wir freuen uns auf die Zukunftsperspektiven, die uns die neuen Supercomputergenerationen des HLRS bieten. Wir werden in der Lage sein, schneller und effizienter Ergebnisse zu erzielen. Die Luft- und Raumfahrttechnik durchlebt gerade eine aufregende Zeit: Neue Ideen und Architekturen werden unglaublich schnell erforscht, beispielsweise der Überschalldemonstrator X59 der NASA und der Vorstoß in Richtung elektrifiziertes Fliegen. Wir brauchen Simulationstools, die damit Schritt halten können!

# HLRS erhält Zertifizierung für Informationssicherheitsmanagement

Die internationale ISO 27001-Norm definiert Anforderungen sowie Best Practices für den sicheren Umgang mit geschützten Daten.



Dr. Martin Hecht (Mitte) ist für das Informationssicherheitsmanagementsystem des HLRS verantwortlich und leitete den Zertifizierungsprozess nach ISO 27001. Außerdem im Bild (v. l. n. r.): Thomas Beisel (Leiter des Bereichs Software und Systeme, HLRS), Prof. Dr. Michael Resch (Direktor, HLRS), Dr. Bastian Koller (Geschäftsführer, HLRS) und Inna Wöckener (Finanzen und Projektverwaltung, Nachhaltigkeit, HLRS).

Im Juni 2023 wurde das HLRS nach ISO 27001 für Informationssicherheitsmanagement der Internationalen Organisation für Normung (ISO) zertifiziert. Die Zertifizierung ist ein Beleg für die Wirksamkeit des umfassenden Informationssicherheitsmanagementsystems (ISMS) am HLRS. Das ISMS umfasst technische und organisatorische Maßnahmen, mit deren Hilfe sich Bedrohungen für die Sicherheit von gespeicherten Daten erkennen und Angriffe verhindern lassen, sowie darauf reagiert werden kann. Dazu gehört auch der Schutz der Höchstleistungsrechner des Zentrums vor unbefugtem Zugriff und unbefugter Nutzung.

„Mit der Zertifizierung nach ISO 27001 wird in einem externen Audit bestätigt, dass das HLRS die branchenüblichen Best Practices für das Informationssicher-

heitsmanagement anwendet“, sagt Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Sie soll den Nutzern unserer Höchstleistungsrechner die Gewissheit geben, dass ihre Daten gut geschützt sind. Darüber hinaus können wir mit der Zertifizierung unseren Fördergebern die Gewissheit geben, dass unsere Supercomputer und andere Systeme nicht in unangemessener Weise genutzt werden. Schließlich wird diese Zertifizierung sicherstellen, dass wir die Sicherheitsmaßnahmen unseres Zentrums ständig aktualisieren und verbessern, um auch künftige Bedrohungen zu bewältigen.“

Der Anwendungsbereich des ISMS beinhaltet die Bereitstellung von Rechenzeit auf seinen Höchstleistungsrechnern sowie die unterstützenden Prozesse zum Betrieb der Produktionsumgebung. Das ISMS umfasst Richtlinien, die potenzielle Sicherheitsrisiken auf allen Ebenen abdecken. So definiert es auch Verfahren zur Erkennung von Verletzungen der Informationssicherheit und angemessene Reaktionen darauf. Zudem legt das ISMS Rollen und Verantwortlichkeiten für die Verwaltung der Informationssicherheit fest. Es ermöglicht die Überprüfung der Wirksamkeit von Sicherheitsmaßnahmen und setzt voraus, dass das Personal des HLRS über die Informationssicherheitsrichtlinien informiert ist und diese befolgt.

Die Zertifizierung nach ISO 27001 ist eine Ergänzung zu der Datensicherheitsbewertung des HLRS nach TISAX (Trusted Information Security Assessment Exchange) aus dem Jahr 2021. Auditiert wurde das HLRS von der TÜV NORD CERT GmbH. Während des Audits wurden die Dokumentation gründlich überprüft. Außerdem durchlief das HLRS eine Begutachtung vor Ort und die implementierten Prozesse wurden geprüft.

# Partnerschaft mit ukrainischer Universität auch in schweren Zeiten

Bei einer Jubiläumskonferenz am 8. November feierten die Donezker Nationale Technische Universität (DonNTU) und die Universität Stuttgart 50 Jahre Zusammenarbeit.

1973 knüpften junge ukrainische und deutsche Wissenschaftler:innen erste Kontakte zwischen den Universitäten Donezk und Stuttgart. 50 Jahre danach prägen aufgrund des Krieges Solidarität und Unterstützung die Partnerschaft. Bei einer Jubiläumskonferenz im November trafen sich Forschende aus beiden Ländern am HLRS, um auf die langjährige Kollaboration zurückzublicken und künftige Perspektiven zu besprechen.

Nach einigen Jahren der Zusammenarbeit unterzeichneten die DonNTU und die Universität Stuttgart im Jahr 2000 eine Kooperationsvereinbarung über Aktivitäten in Forschung und Lehre. Seitdem folgten zahlreiche gegenseitige Besuche und 2013 eine gemeinsame Konferenz in Donezk. Bis heute wurden mehr als 100 ukrainische Forschende durch ein Stipendium im Rahmen des Leonhard-Eulers-Stipendienprogramms des DAAD gefördert.

Initiator der länderübergreifenden Vernetzung ist Volodymyr Svjatnyj, Professor für Simulationstechnik, Leiter der Abteilung Computer Engineering an der DonNTU und seit 2013 Träger der Ehrenmedaille der Universität Stuttgart. 2022 ist Prof. Svjatnyj nach Deutschland geflüchtet und arbeitet auf Einladung von Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, derzeit als Gastwissenschaftler an der Universität Stuttgart. Mit persönlicher Unterstützung für die ukrainischen Fachkolleg:innen und über die Aufnahme von geflüchteten Forschenden hilft die Universität Stuttgart der DonNTU seit 2022 insbesondere im Rahmen des DAAD-Programms „Ukraine digital“, ihren Lernbetrieb aufrechtzuerhalten.

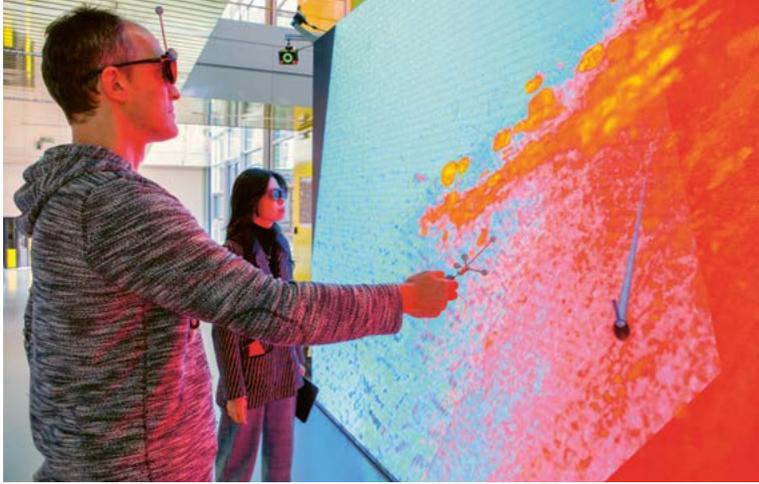
Die Konferenz am HLRS begann mit einer Eröffnungsrede des Rektors der Universität Stuttgart, Prof. Wolfram

Ressel, und Jaroslav Liaschok, Rektor der DonNTU. Dem Auftakt folgten Vorträge von Wissenschaftler:innen aus diversen Disziplinen mit dem Schwerpunkt auf aktuellen gemeinsamen Arbeiten.

Anlässlich der Veranstaltung sagte Michael Resch: „Wir sind stolz darauf, dass die Partnerschaft zwischen den Wissenschaftsgemeinschaften in Stuttgart und Donezk trotz Krisen und wechselnder politischer Verhältnisse über die Jahre hinweg Bestand hat und weiterhin stark ist. Die Wissenschaft profitiert unermesslich von einer vertrauensvollen, internationalen Zusammenarbeit, und unsere Partnerschaft mit der DonNTU hat viele Vorteile für die Forschung sowohl in Deutschland als auch in der Ukraine gebracht. Angesichts des anhaltenden Krieges ist es uns sehr wichtig, dass wir diese Zusammenarbeit fortsetzen.“



Vertreter der Donezker Nationalen Technischen Universität und der Universität Stuttgart feierten das 50-jährige Bestehen ihrer Zusammenarbeit. vlnr: Jaroslav Ljashok (Rektor, DonNTU), Prof. Volodymyr Svjatnyj (Abteilungsleiter, Computer Engineering, DonNTU), Prof. Wolfram Ressel (Rektor, Universität Stuttgart), und Prof. Michael Resch (Direktor, HLRS).



Die Künstlerin Hiên Hoàng (r) ist Stipendiatin des Projekts S+T+ARTS AIR. In Zusammenarbeit mit dem HLRS entwickelt sie ein neues, immersives Multimedia-Kunstwerk.

## HPC für Kultur und Kreativität in Europa

**Das Media Solution Center Baden-Württemberg ist an der Leitung europäischer Initiativen zur Förderung von Innovationen in der Kunst mithilfe von Supercomputern beteiligt.**

Das vom HLRS mitbegründete Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC) baut ein Netzwerk auf, um das Potenzial von Höchstleistungsrechnen (HPC) und Visualisierung für die Kunst zu erforschen. Kürzlich hat das MSC die Koordination mehrerer europäischer Projekte zur Förderung von Innovation und wirtschaftlicher Entwicklung durch die Kultur- und Kreativwirtschaft übernommen.

Das MSC ist sowohl Mitbegründer und Lead-Partner von EIT Culture & Creativity (EIT CC) als auch Co-Vorsitzender des deutschlandweiten Konsortiums Innovation by Creative Economy (ICE), einem von 50 Partnern, die an EIT CC teilnehmen. Das HLRS ist das einzige Höchstleistungsrechenzentrum, das an EIT CC beteiligt ist und Modelle für den Einsatz von HPC in der Kunst liefert.

Im September 2023 veranstaltete das MSC eine Tagung, auf der Direktoren und Beiratsmitglieder des EIT CC am HLRS Strategien für den Beginn der Initiative im Jahr 2024 diskutierten. Matthias Hauser, Geschäftsführer des MSC, erklärte: „Gemeinsam mit dem EIT wollen wir das am HLRS vorhandene Know-how mit anderen europäischen Rechenzentren vernetzen. Dank der

Unterstützung des HLRS kann sich die Kultur- und Kreativbranche die Möglichkeiten besser vorstellen.“

Parallel dazu koordiniert das MSC S+T+ARTS AIR, ein EU-weites Stipendiatenprogramm, das erstmals Rechenressourcen des HLRS und des Barcelona Supercomputing Center Künstler:innen zugänglich macht. Im Jahr 2023 ging aus S+T+ARTS AIR eine Ausschreibung hervor, bei der aus 127 Anträgen zehn Vorhaben von Künstler:innen und Kollektiven ausgewählt wurden. Zwei dieser Projekte mit dem Schwerpunkt auf Mensch-KI-Ökosystemen und urbaner Ökologie werden am HLRS durchgeführt.

Das Media Solution Center war auch an der Entwicklung der Ausstellung Renaissance 3.0 beteiligt, die den größten Teil des Jahres 2023 im Zentrum für Kunst & Medientechnologie (ZKM) in Karlsruhe zu sehen war. Die von Peter Weibel kuratierte Ausstellung erforscht neue Allianzen zwischen Künstler:innen, Wissenschaftler:innen und Ingenieure:innen, die auf gemeinsame Werkzeuge zurückgreifen, darunter auch Computertechnologien. Nach ihrer Schließung im ZKM wird die Ausstellung nach Paris und Budapest wandern.

## Die Supercomputing-Akademie: Der Weg zu HPC-Expertise

**Zwei zertifizierte HPC-Expert:innen sprechen über die Vorteile der Schulungsprogramme des HLRS für ihre Ausbildung, Forschung und berufliche Entwicklung.**

Maha Badri und Alaa Bejaoui wurden beide in Tunesien geboren, doch das ist nicht das einzige, was sie gemeinsam haben. Als junge Ingenieur:innen, die im Jahr 2023 ihr Masterstudium der Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart abgeschlossen haben, teilen sie die Leidenschaft für Mathematik, künstliche Intelligenz (KI), paralleles Programmieren und Höchstleistungsrechnen. Schon während ihres Bachelorstudiums stiegen Badri und Bejaoui in das umfassende Schulungsprogramm für Höchstleistungsrechnen (high-performance computing, HPC) am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) ein. Mit viel Begeisterung lernten sie, HPC-Systeme zu programmieren. Während ihres Masterstudiums absolvierten sie als erste Teilnehmende die Supercomputing-Akademie des HLRS mit dem Zertifikat „HPC-Expert:in“.

Schon zu Beginn ihres Studiums erkannten die Ingenieur:innen die Bedeutung des parallelen Programmierens, erhielten die notwendige Ausbildung jedoch nicht in ihren Standardkursen. „Als wir 2013 angefangen haben zu studieren, haben wir sofort gemerkt, dass bei Ingenieuren nicht viel Wert auf Programmieren gelegt wird“, erinnert sich Bejaoui. „Wir haben dann beschlossen, alle möglichen Workshops hier am HLRS zu machen.“ Zunächst belegten sie Kurse aus dem HPC-Ausbildungsprogramm des HLRS. Nach einem Aufenthalt in Kanada, wo sie an der Polytechnique Montréal künstliche Intelligenz studierten, kehrten sie im Jahr 2020 nach Stuttgart zurück und entdeckten die neu gegrün-

dete Supercomputing-Akademie des HLRS. Diese Einrichtung bot ihnen die Möglichkeit tiefer in die Thematik einzutauchen. Badri: „Wir hatten schon Vorwissen, aber wir wollten es noch erweitern und vertiefen.“

### Ein tiefer Einblick in HPC und KI

Während die HPC-Kurse, an denen sie zuvor am HLRS teilgenommen hatten, drei bis fünf Tage dauerten, erstrecken sich die Kurse der Supercomputing-Akademie in der Regel auf etwa sechs Wochen in einem Blended-Learning-Format. Dadurch können Teilnehmende parallel zu ihren anderen beruflichen Verpflichtungen von zuhause aus lernen. Grundsätzlich ist es möglich, einzelne Kurse zu belegen. Jedoch bietet die Supercomputing-Akademie für Teilnehmende, die an einer umfassenden Ausbildung interessiert sind, die Zertifizierung zum „HPC-Experten“ an. Der Inhalt des Programms ist modular aufgebaut, sodass Teilnehmende aus einem Angebot an Kursen wählen können, um ihren individuellen Bedürfnissen und Interessen nachzugehen. Badri und Bejaoui entschieden sich für eine Zertifizierung in der Kategorie „HPC Developer“. Dabei erwarben sie Kenntnisse über MPI, Open MP, Kommunikation und Rechenleistung auf Knotenebene. Aufgrund ihres Interesses an künstlicher Intelligenz belegten sie auch Kurse in Datenmanagement und Datenanalyse.

„Wir hatten immer die Promotion im Blick“, erklärte Badri. „Die Idee, die Supercomputing-Akademie-Zertifizierung anzustreben, war, dass wir uns bestens darauf



Durch die Ausbildungsprogramme des HLRS entwickelten Alaa Bejaoui und Maha Badri Kompetenzen in den Bereichen parallele Programmierung und künstliche Intelligenz, die sie in ihren Promotionsstudien weiter nutzen werden.

vorbereiten wollten. Die Prüfungen waren uns auch sehr wichtig. Wenn man an einem Kurs ohne Prüfung teilnimmt, ist das nicht das Gleiche, wie wenn man teilnimmt, um eine Prüfung zu bestehen. Man vertieft sich mehr darin und lernt intensiver.“

Da Badri und Bejaoui während der COVID-19-Pandemie in der Supercomputing-Akademie aktiv waren, hatten sie leider nicht mehr die persönlichen Kontakte zu Dozent:innen und Studierenden, die sie bei früheren Präsenzkursen am HLRS genossen. Nichtsdestotrotz war das Konzept der Supercomputing-Akademie eine ideale Möglichkeit für sie, ihre HPC-Fähigkeiten weiterzu-

entwickeln und gleichzeitig ihr Studium abzuschließen. Badri sagt: „Ich konnte mich nachmittags auf meine Masterarbeit konzentrieren. Abends habe ich die Videos der Supercomputing-Akademie angeschaut. Ich kann mir nicht vorstellen, wie das hätte funktionieren sollen, wenn alles vor Ort stattgefunden hätte.“

#### Ein starkes Fundament für die berufliche Entwicklung

Nach Abschluss des Schulungsprogramms der Supercomputing-Akademie sind sich Badri und Bejaoui darüber im Klaren, dass die Erfahrung viele Vorteile mit sich gebracht hat. „Erst seit der Supercomputing-Akademie

haben wir ein tiefgreifendes Verständnis der Hardware. Jetzt können wir bewusster programmieren“, so Badri. In der Praxis nutzten sie ihre neuen Kenntnisse, um MPI in der Python-Programmierung anzuwenden. Dadurch ließ sich ein Programm parallelisieren, das Simulation und Reinforcement Learning miteinander kombiniert.

Bei Vorstellungsgesprächen spürten sie auch, dass die von der Supercomputing-Akademie angebotene Zertifizierung sie zu attraktiveren Bewerber:innen machte. Badri erinnert sich: „Bei den Bewerbungsgesprächen, die ich hatte, war das immer ein Punkt, von dem potenzielle Arbeitsgeber sehr beeindruckt waren. Sie haben stets nach dem Zertifikat gefragt und an welchem Kurs ich für eine Woche teilgenommen habe. Als ich genauer davon erzählt habe, waren sie beeindruckt davon, wie umfangreich das Programm war.“

Aufgrund der Erfahrungen, die sie während ihres Studiums, bei der Stellensuche und bei ihrer Arbeit in einem Start-up gesammelt haben, spüren Badri und Bejaoui, dass die Nachfrage nach Ausbildungsangeboten wie der Supercomputing-Akademie wächst. „Bei Forschungsgruppen, die sich schon mit Simulationen beschäftigen – wie in Luft- und Raumfahrt, zum Beispiel – ist HPC bereits seit Langem bekannt, weil Simulationen ohne HPC-Kenntnisse nicht machbar sind. Ich glaube, KI führt dazu, dass auch weitere Arbeitsgruppen diesen Bedarf an HPC-Wissen haben“, erklärt Badri. Bejaoui stimmt dem zu und ist der Meinung, dass die Ausbildung, die sie erhalten haben, sie gut vorbereitet hat. „Das HLRS und die Supercomputing-Akademie sind gute Partner, mit denen sich diese Kompetenzen erwerben lassen“, sagt er.

Die beiden freuen sich auf den Beginn ihrer Promotion, die sie auf spannende Wege führen wird. Badri geht demnächst an das Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung, wo sie mithilfe von künstlicher Intelligenz Vegetationsmodelle entwickeln wird, die die Wechselwirkungen zwischen dem Pflanzenreich und der Atmosphäre berücksichtigen. Bejaoui hat sich eine Doktorandenstelle an der Charité in Berlin gesichert, wo er

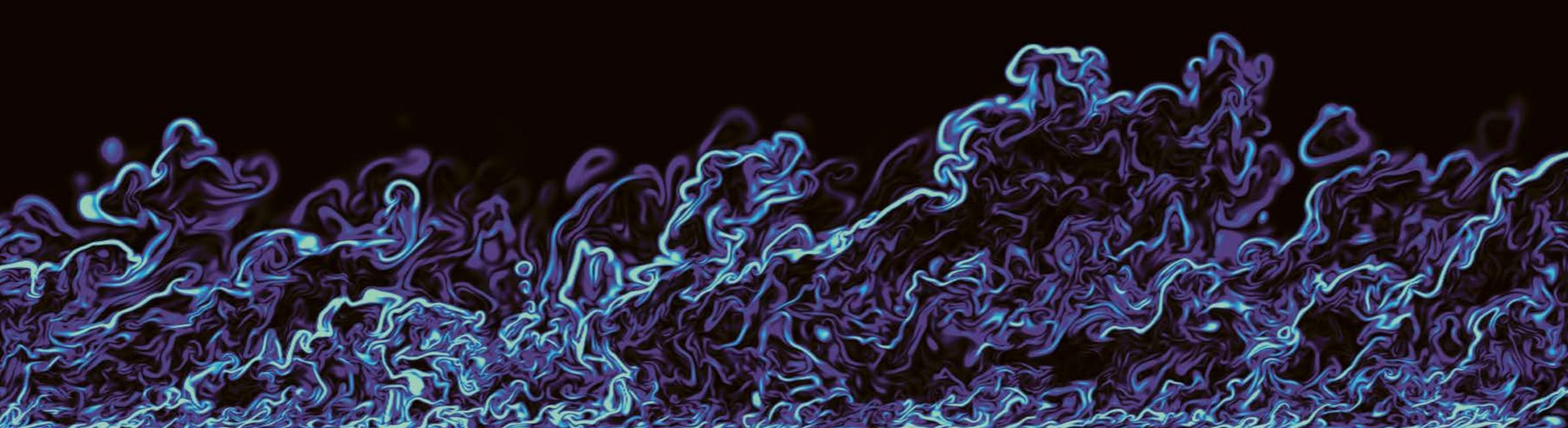
gemeinsam mit Mediziner:innen Methoden entwickeln wird, die künstliche Intelligenz für die Interpretation von CT-Scans nutzen. Die Ergebnisse könnten zu einer besseren Patientenversorgung führen. Beide gehen davon aus, dass sie das erworbene HPC-Know-how in ihren jeweiligen Projekten weiterhin benötigen werden.

Längerfristig hoffen Badri und Bejaoui auch ihr Wissen in ihr Heimatland Tunesien zurücktragen zu können. „Wir haben bei uns sehr gute Wissenschaftler, sehr kluge Köpfe [...] in der Mathematik und der Physik und jetzt kommen auch noch Informatik und HPC dazu. Ich habe das Gefühl, dass wir jetzt eine geschlossene Kette haben, von der mathematischen Modellierung bis hin zur Implementierung und zur optimalen Implementierung auf Hardware“, sagt Bejaoui. „Wir wollen Brücken zwischen Deutschland und Tunesien bauen [...] und auch Deutschland kann davon profitieren.“

#### Neues HLRS-Schulungskonzept integriert Supercomputing-Akademie und Kompaktkurse

Das HLRS entwickelt sein Schulungskonzept weiter, um den Kursteilnehmer:innen eine Auswahl an Möglichkeiten zu bieten, die ihren beruflichen Interessen und Bedürfnissen am besten gerecht werden. Laut Lorenzo Zanon, Leiter der HLRS-Abteilung Training and Scalable Algorithms, plant das Zentrum, erfolgreiche Elemente der Supercomputing-Akademie und seiner HPC-Kompaktkurse zu kombinieren: „So könnte es beispielsweise möglich sein, am Ende der Kompaktkurse Prüfungen abzulegen, die auf die HPC-Experten-Zertifizierung der Supercomputing-Akademie angerechnet werden. Umgekehrt könnten sich HPC-Nutzer:innen auch für Blended-Learning-Kurse in der Supercomputing-Akademie anmelden, ohne eine Abschlussprüfung ablegen zu müssen.“ Auf diese Weise will das HLRS ein flexibles Schulungsprogramm anbieten, das so zugänglich wie möglich ist. Weitere Neuigkeiten zu diesem Konzept sollen im Jahr 2024 angekündigt werden.

Erfahren Sie mehr über das Schulungsprogramm des HLRS unter [www.hlrs.de/training](http://www.hlrs.de/training). Weitere Informationen über die Supercomputing-Akademie finden Sie unter [www.supercomputing-akademie.de](http://www.supercomputing-akademie.de).



Mit dem Hawk-Supercomputer des HLRS erstellen Wissenschaftler hochauflösende numerische Simulationen turbulenter Strömungen innerhalb von nur 1 Millimeter einer Oberfläche.

## Ein Code wird „XXL“

Mithilfe des User Support Teams des HLRS ließen Forschende ihre Software auf der größtmöglichen Skala des Supercomputers Hawk laufen. Diese Leistung eröffnet neue Möglichkeiten für wissenschaftliche Entdeckungen.

Forschende des Instituts für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart nutzen die Supercomputer des HLRS bereits seit seiner Gründung. Seit 2008 läuft darauf unter anderem NS3D, ein Softwarecode zur Simulation kompressibler turbulenter Strömungen. Mithilfe direkter numerischer Simulation liefert NS3D hochauflösende Daten, die für die Untersuchung grundlegender physikalischer Prozesse in der Strömungsdynamik notwendig sind.

Da die Supercomputer des HLRS im Laufe der Jahre zunehmend leistungsfähig geworden sind, haben sich die Fähigkeiten von NS3D drastisch verbessert. Als NS3D entwickelt wurde, simulierten die Wissenschaftler:innen des IAG den Übergang einer geordneten, glatten laminaren Strömung in eine komplexe turbulente Strömung. Mit Hawk können sie nun wesentlich besser

aufgelöste Phänomene in der turbulenten Grenzschicht untersuchen. In diesem etwa ein Millimeter dicken Bereich wird die sich mit Überschallgeschwindigkeit bewegende Luft durch ihre Wechselwirkung mit einer Oberfläche gestört.

Mit jeder Generation von Supercomputern am HLRS haben die Programmierer:innen von NS3D ihren Code so angepasst, dass er mit der höchstmöglichen Leistung auf einer neuen Architektur läuft. Die Mitarbeitenden des User Support Teams am HLRS haben ihr Fachwissen im Bereich des Höchstleistungsrechnens und ihre umfangreichen Erfahrungen mit den Systemen eingebracht. Code-Optimierungsworkshops und die kontinuierliche Betreuung der NS3D-Programmierer ermöglichten auch den Mitarbeitenden des HLRS ein tiefes Verständnis der Software.

Im Sommer 2023 erreichte das IAG-Team einen neuen Höhepunkt in der Skalierung. Während eines „XXL-Tages“ am HLRS führten die Forschenden zum ersten Mal eine Simulation effizient auf 524.288 Rechenkernen durch. Dies ist die größtmögliche Simulationsskala im regulären Betrieb von Hawk.

Laut Björn Dick aus dem User Support Team des HLRS sei das Zentrum bestrebt darin, höchstleistungsfähige wissenschaftliche Anwendungen zu ermöglichen. „Die meisten Computer sind nicht so leistungsfähig wie Hawk. Unsere Maschine ist für die Ausführung besonders großer Aufgaben gebaut, deswegen wollen wir diese Nutzung fördern“, sagte er.

Die Code-Optimierung ist für Simulationen jeder Größe wichtig. Besonders kritisch ist sie, wenn Codes wie NS3D in großem Maßstab ausgeführt werden. Da diese Skalierungen sehr ressourcenintensiv sind, ist die Optimierung ihrer Leistung ein wichtiger Bestandteil der Verbesserung der Energieeffizienz des HLRS. Außerdem wird dadurch sichergestellt, dass die gemeinsam genutzten HPC-Ressourcen des HLRS möglichst vielen Nutzern zur Verfügung stehen. Forschende, die ihre Codes für die HLRS-Systeme optimieren, nutzen die ihnen zugewiesene Rechenzeit auch am effizientesten.

Kürzlich verbesserten der HLRS User Support und die Entwickler von NS3D die Nutzung von MPI im Code. Darüber hinaus optimierten sie die Eingabe/Ausgabe-Bandbreite für das kollektive Schreiben auf dem Lustre-Dateisystem. Das HLRS arbeitet auch eng mit Hewlett Packard Enterprise und AMD zusammen um NS3D auf Grafikprozessoren (GPUs) zu portieren. Diese Anpassung wird für die Programmierung der künftigen Supercomputer des HLRS, Hunter und Herder, erforderlich.

Diese Skalierung könnte neue Möglichkeiten für die Forschung am IAG eröffnen. Wie der Wissenschaftler Jason Appelbaum erklärte, zeige die Nutzung von NS3D auf Hawk die Beziehungen zwischen allen wichtigen Variablen in einer turbulenten Strömung auf. Dank der Softwareskalierung kann sein Team neue Erkenntnisse gewinnen. „Diese Fortschritte ermöglichen es uns, Turbulenzen bei hohen Reynoldszahlen auf langen Zeitskalen zu untersuchen. Für Forschende, die Turbulenzmodelle entwickeln, liefern die Ergebnisse nützliche Einblicke in grundlegende statistische Beziehungen der Wandturbulenz“, bemerkte er. Langfristig könnten die Erkenntnisse über die zugrunde liegende Physik Ingenieur:innen in der Industrie helfen, Flugzeugflügel mit geringerem Reibungswiderstand zu entwerfen und so die Treibstoffeffizienz im Flugverkehr zu verbessern.



## Hochauflösende Simulationen verbessern das Verständnis von Wetterextremen

Mithilfe des Supercomputers Hawk untersuchen Atmosphärenforscher präzisere Ansätze für die Modellierung von Risiken, die durch den Klimawandel entstehen.

Im Juli 2021 verursachte ein Starkregenereignis verheerende Überschwemmungen im Ahrtal in Westdeutschland. Das Wasser stieg bis zu siebenmal höher als bis dahin für ein 100-jähriges Ereignis abgeschätzt wurde, legte Kleinstädte in Schutt und Asche und tötete mindestens 135 Menschen. Die Katastrophe zeigte einen Bedarf an besseren Modellen für Hochwasserrisiken und an Krisenplanung in Gemeinden angesichts der Auswirkungen des Klimawandels auf.

„Wir gehen davon aus, dass mit der Klimaerwärmung die Intensität von Ereignissen wie dem Hochwasser im Ahrtal weiter zunehmen wird“, sagt Hendrik Feldmann, Spezialist für regionale Klimamodellierung am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). „Was nicht vorhergesagt werden kann, ist wann und wo genau Extremereignisse in Zukunft auftreten werden.“

In seiner Forschung entwickelt Feldmann Ansätze, die Gemeinden bei der Vorbereitung auf die neuen Risiken des Klimawandels helfen könnten. „Wir versuchen die Häufigkeit, Intensität und räumliche Verteilung von Wetterextremen im Klimawandel besser zu verstehen“, erklärt er. Konkret untersucht er, wie ein leistungsfähiger, hochauflösender Simulationsansatz, das sogenannte Convection-Permitting-Modelling (CPM), zu besseren Bewertungen und Abschätzungen solcher Risiken auf lokaler Ebene beitragen könnte. Mithilfe des Supercomputers Hawk am HLRS haben Feldmann und sein Team erforscht, ob CPM Vorteile gegenüber anderen Modellierungsansätzen bieten könnte. Sie haben auch begonnen, Informationen zu generieren, die bei der Anpassung an zukünftige Klimaveränderungen helfen könnten.

Hochwasser im Ahrtal im Sommer 2021.

### Klimamodellierung wird immer präziser

Die regionale Klimamodellierung (RCM) liefert nützliche Erkenntnisse über das Klima und Extremereignisse, kann aber die Eigenschaften von lokal begrenzten Starkregenereignissen mit der bisher üblichen Auflösung nicht präzise genug darstellen. Der weit verbreitete Ansatz bietet eine typische Gitterweite von 12 bis 25 km. Bei dieser Auflösung werden wichtige Merkmale nicht erfasst, die die Auswirkungen von extremen Wetterereignissen beeinflussen können. So kann RCM beispielsweise keine lokalen Details über Faktoren wie Temperatur, Niederschlag, Topografie oder Bodenbeschaffenheit auflösen, die allesamt besondere Risiken für bestimmte Gemeinden bedeuten können.

Convection-Permitting-Modelling könnte das Risiko von Extremereignissen möglicherweise genauer darstellen. Im CPM werden die atmosphärischen Bedingungen in einem Maßstab von weniger als 4 km simuliert. Das bedeutet, dass CPM nicht nur ein viel feineres Modell der Atmosphäre und ihrer Beziehung zur Landschaft erfasst, sondern auch eine ausreichende Auflösung bietet, um die Konvektion zu untersuchen – den atmosphärischen Prozess, bei dem warme, feuchte Luft aufsteigt und Regenwolken bildet. Mit diesem höher aufgelösten Ansatz lässt sich die Entwicklung konvektiver Prozesse ohne die in größeren Modellen erforderliche Parametrisierung simulieren.

Dank großer Supercomputer können Forschende CPM verwenden, um die Auswirkungen von Stürmen in bestimmten Gebieten auf Klima-Zeitskalen zu simulieren. Der Nachteil ist jedoch, dass CPM wesentlich rechenaufwändiger ist als RCM. Derzeit erfordert es einen ge-

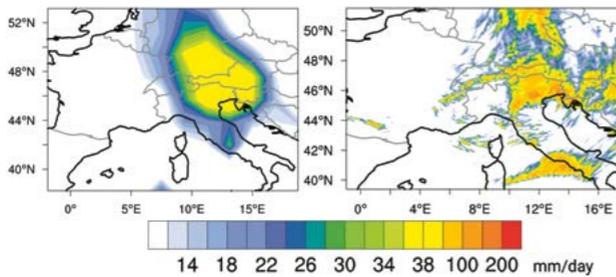
waltigen Rechenaufwand, diesen Ansatz auf globaler oder langfristiger Ebene anzuwenden. Mit Blick auf die Zukunft möchten Atmosphärenforscher daher besser verstehen, wann und wie CPM am effektivsten eingesetzt werden kann.

### Welche Faktoren verursachen extreme Niederschläge?

In einer kürzlich in der Fachzeitschrift *Weather and Climate Dynamics* veröffentlichten Arbeit vergleicht Dr. Alberto Caldas-Alvarez, ein ehemaliger Postdoktorand am KIT, der die Publikation zusammen mit Feldmann verfasst hat, die Ergebnisse des Convection-Permitting-Modelling mit denen regionaler Klimasimulationen. Das Team wollte feststellen, ob CPM tatsächlich die lokalen Eigenschaften extremer Niederschlagsereignisse besser simulieren kann als regionale Modelle.

Die Forschung wurde in dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt ClimXtreme durchgeführt, in dem Feldmann das Modul „Physik und Prozesse“ koordiniert. Das Projekt konzentriert sich auf die Identifizierung von atmosphärischen Zuständen, die mit extremen Wetterereignissen in Verbindung stehen.

Caldas-Alvarez analysierte historische Wetterdaten aus den Alpen aus dem Zeitraum von 2000 bis 2015 und identifizierte zunächst vergangene extreme Niederschlagsereignisse. Im Anschluss nutzte er einen statistischen Ansatz namens Hauptkomponentenanalyse,



Vergleich zweier Simulationen eines historischen extremen Niederschlagsereignisses mit 200 km Auflösung (links) und mit 3 km Auflösung (rechts). CPM liefert ein viel realistischeres Bild der Niederschlagsvariationen aufgrund lokaler atmosphärischer Bedingungen und der Topografie, einschließlich der Unterschiede nördlich und südlich der Alpen.

um die spezifischen atmosphärischen Bedingungen zu ermitteln, die typischerweise mit diesen Ereignissen verbunden waren. Im nächsten Schritt analysierte er RCM- und CPM-Simulationen für denselben Zeitraum, um festzustellen, wie gut deren Wiedergabe extremer Niederschlagsereignisse mit den tatsächlichen historischen Messungen übereinstimmen.

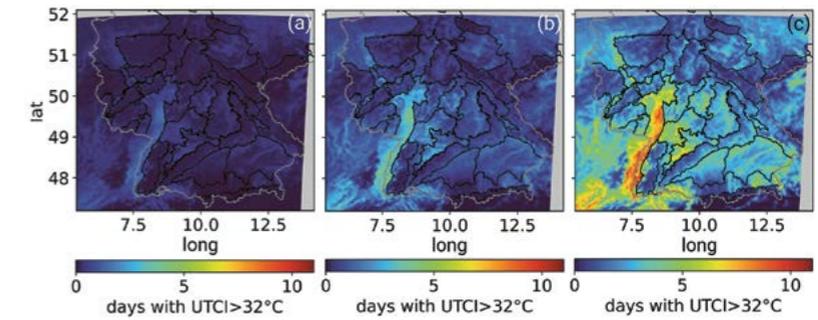
Das Team entdeckte, dass sich das Convection-Permitting-Modelling in der Tat besser als die regionale Klimamodellierung für die Identifizierung extremer Niederschlagsereignisse eignet. Gleichzeitig stellten sie aber auch relevante Unterschiede in der Art und Weise fest, wie die beiden Modellierungsansätze die verantwortlichen Prozesse simulieren. Die Ergebnisse werfen offene Fragen auf, die in der künftigen Forschung untersucht werden sollten, um die Stärken und Grenzen der beiden Ansätze besser zu verstehen.

Trotz dieser Fragen deutet die höhere Genauigkeit der CPM bei der Darstellung extremer Niederschlagsereignisse darauf hin, dass sie bei der Entwicklung regionaler Klimaanpassungsstrategien helfen könnte. „Convection-Permitting-Modelling liefert im Vergleich zu Beobachtungen eine viel realistischere Verteilung als die traditionelle regionale Klimamodellierung“, sagt Feldmann. In der zweiten Phase des ClimXtreme-Projekts wollen er und sein Team das Verständnis für Extremereignisse wie Starkniederschläge, Hitzewellen und Windstürme weiter verbessern.

### Künftige Hitzewellen in Süddeutschland

In einem zweiten BMBF-geförderten Projekt namens RegIKlim (Regionale Informationen zum Klimahandeln) entwickelt Feldmann praktisch anwendbare Klimainformationen, mit deren Hilfe Kommunen in ganz Deutschland bessere Planungs- und Risikomanagementstrategien entwickeln könnten. In Zusammenarbeit mit Projektpartnern koordiniert er das Teilprojekt NUKLEUS (Nutzbare Lokale Klimainformationen für Deutschland), dessen Ziel es ist, CPM-Klimasimulationen zu generieren, zu bewerten und zur Verfügung zu stellen, um die Entscheidungsfindung zu unterstützen. Darüber hinaus trägt er zum RegIKlim-Partnerprojekt ISAP

Ensemble-Median der Anzahl der Tage pro Jahr mit starkem Hitzestress in Süddeutschland, definiert durch den Universal Thermal Climate Index (UTCI) für 1971-2000 (a), eine globale Erwärmung von 2°C (b) und 3°C (c). Die Simulationen zeigen, dass es im Rheintal wärmer wird als in anderen Gebieten.



(Integrative stadtregionale Anpassungsstrategien für eine wachsende polyzentrische Region: Region Stuttgart) bei, das mittels hochauflösender Klimainformationen die Anpassung an den Klimawandel in der Landeshauptstadt und ihrer Umgebung unterstützt.

Für eine Veröffentlichung in der Zeitschrift *Natural Hazards and Earth Systems Sciences* erzeugten Feldmann und das ISAP/NUKLEUS-Team ein Ensemble von regionalen Klima-Simulationen für künftige Hitzewellen in Süddeutschland. Die Kombination verschiedener Convection-Permitting-Simulationen auf Hawk am HLRS ermöglichen weitere Untersuchungen der Vorteile des CPM-Ansatzes. Die Forschungsergebnisse bieten auch weitere Einblicke in eine Zukunft im Klimawandel.

So stellte das ISAP/NUKLEUS-Team fest, dass die Wahrscheinlichkeit von Hitzewellen in Deutschland zunehmen wird, insbesondere im Spätsommer. Auch ihre Schwere wird in einem wärmeren Klima deutlich zunehmen. Der daraus resultierende Temperaturstress hängt von landschaftlichen Gegebenheiten ab, wobei die stärksten Belastungen im Rheintal zu erwarten sind. Die Modellierung mithilfe von Convection-Permitting-Modelling ermöglichte die regionale Spezifität, die für diese nuancierte Projektion erforderlich ist.

### Simulationen liefern notwendige Erkenntnisse für die Planung

In einer weiteren Studie untersuchten Feldmann und Kolleg:innen den historischen Kontext des Ahr-Hochwassers und verglichen es mit Beobachtungsdaten vergangener Starkniederschlagsereignisse. Sie stellten fest, dass historische Ereignisse mit vergleichbarem Ausmaß zwar 1804 und 1910 auftraten, aber nicht in den Daten moderner Messnetze, die zur Bestimmung

des aktuellen Hochwasserrisikos verwendet werden, welche nur ca. 70 Jahre zurückreichen. Eine Lehre aus ihrer Studie ist, dass die Risikomodellierung auch hydrologische Bedingungen und die Veränderungen in der Landnutzung berücksichtigen sollte, die sich im Laufe der Jahre ergeben haben. In Zukunft wird es laut den Forschern wichtiger, solche Informationen mit optimierten Modellen der sich ändernden Klimabedingungen für bessere Risikovorhersagen zu kombinieren.

„Wir brauchen Klimadaten, um Statistiken darüber zu erstellen, wo und unter welchen Umständen Starkniederschlagsereignisse wahrscheinlicher sind, genau wie bei anderen atmosphärischen Extremen wie Hitzewellen. Dies sind wertvolle Informationen für Entscheidungsträger, Stadtplanung oder das Bauwesen“, so Dr. Caldas-Alvarez. „Mithilfe von Investitionen in Höchstleistungsrechner und hochauflösende Modelle lässt sich die große Unsicherheit verringern, die mit solchen Wetterextremen verbunden ist. Diese ermöglichen Entscheidungen, die Menschenleben, Infrastruktur und Investitionen besser schützen können.“

Heute ist Caldas-Alvarez nicht mehr am KIT, sondern arbeitet bei EDP, einem multinationalen Unternehmen für erneuerbare Energien. In dieser Funktion entwickelt er analytische Instrumente, die die Vorhersage von Solar- und Windenergieerträgen verbessern sollen. „In dieser Rolle erlebt man jeden Tag, wie wichtig der Zugang zu genauen und hochaufgelösten Simulationen ist“, sagt er.

Durch die weitere Untersuchung von Convection-Permitting-Modelling möchten Feldmann und seine Partner die wissenschaftlichen Instrumente verbessern, die für präzisere Prognosen erforderlich sind.

# Simulationen von Ammoniak-Gemischen unterstützen die Suche nach erneuerbaren Kraftstoffen

Mit dem Supercomputer Hawk des HLRS generieren Wissenschaftler der TU Berlin wertvolle thermodynamische Daten für die chemisch-technische Forschung.

Ammoniak ( $\text{NH}_3$ ) ist ein wichtiges Molekül mit vielen Anwendungen. Es ist das Endprodukt des berühmten Haber-Bosch-Verfahrens und wird häufig synthetisiert, um Stickstoff für Düngemittel abzuscheiden. Darüber hinaus wird es z. B. zur Kühlung, in Reinigungsmitteln und bei der Herstellung von Arzneimitteln verwendet. Vor Kurzem ist dieses Molekül auch als potenzielle Ressource für eine aktuelle Herausforderung in den Fokus gerückt – den Bedarf an zuverlässigen und reichlich vorhandenen erneuerbaren Kraftstoffen.

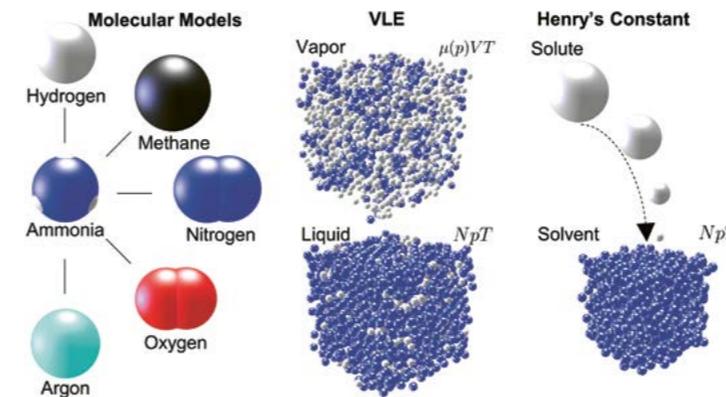
Ammoniak ist stabil und sicher in der Handhabung, es ist brennbar und enthält den größten Wasserstoffanteil aller Moleküle außer reinem Wasserstoff selbst. Daher könnte es zu einer praktikablen Alternative zu kohlenstoffbasierten Energieträgern werden, die den Klimawandel vorantreiben. Wissenschaftler:innen untersuchen derzeit, wie Ammoniak für den direkten Antrieb von Motoren, Gasturbinen und Wasserstoff-Brennstoffzellen verwendet werden könnte. Es wird auch vermutet, dass sich Ammoniak zur Speicherung von Energie für Zeiten verwenden ließe, in denen beispielsweise Wind- und Sonnenenergie die Nachfrage nicht decken können.

Über Ammoniak ist vieles bekannt, doch das Interesse an seiner Verwendung als Brennstoff hat die Suche nach neuen Ammoniaktechnologien ausgelöst. Dies hat wiederum zu einem erhöhten Bedarf an genauen Daten zur Beschreibung seiner grundlegenden thermodynamischen Eigenschaften geführt. Zu diesen Eigenschaften gehört eine Vielzahl von messbaren Merkmalen wie Phasengleichgewichte, Dichte oder Wärmekapazität,

die physikalische Systeme charakterisieren und die Funktionsweise chemischer Prozesse bestimmen. Ingenieur:innen möchten auch besser verstehen, wie sich diese Eigenschaften verändern, wenn Ammoniak mit anderen Molekülen gemischt wird. Dieses Wissen könnte ihnen dabei helfen, Prozesse und Betriebsbedingungen zu optimieren.

Dr. Jadran Vrabec, derzeit Direktor des Instituts für Prozesswissenschaften an der TU Berlin, hat einen Großteil seiner beruflichen Laufbahn damit verbracht, thermodynamische Eigenschaften auf molekularer Ebene mithilfe von Höchstleistungsrechnern (HPC) zu untersuchen. „Thermodynamische Eigenschaften werden zu 100 Prozent von molekularen Wechselwirkungen bestimmt“, erklärt er. „Weil diese Wechselwirkungen so schnell und auf einer so kleinen Skala ablaufen, lassen sie sich nur mithilfe von großen Simulationen mit Supercomputern untersuchen.“

In einer kürzlich im *Journal of Chemical & Engineering Data* veröffentlichten Arbeit berichten er und sein Mitarbeiter, Erich Mace von der TU Berlin, über die Ergebnisse von Simulationen, die sich auf die thermodynamischen Eigenschaften von ammoniakhaltigen Gemischen konzentrieren. Die mit dem Supercomputer Hawk am HLRS erstellten Ergebnisse liefern wertvolle Daten, die die Entwicklung neuer Anwendungen von Ammoniak unterstützen könnten. Die Resultate tragen auch zur Bewertung der Genauigkeit anderer Daten bei, um sicherzustellen, dass Ingenieur:innen über die passenden Informationen für die Arbeit mit dieser Substanz verfügen.



Simulationen der thermodynamischen Eigenschaften von Gemischen aus Ammoniak und anderen Molekülen lieferten Einblicke in ihre Vapor-Liquid-Equilibria und Henry-Konstanten, wichtige Faktoren bei der Vorhersage, wie sich Gase und Flüssigkeiten in chemisch-technischen Prozessen vermischen.

## Groß angelegte Simulationen bieten tiefe Einblicke

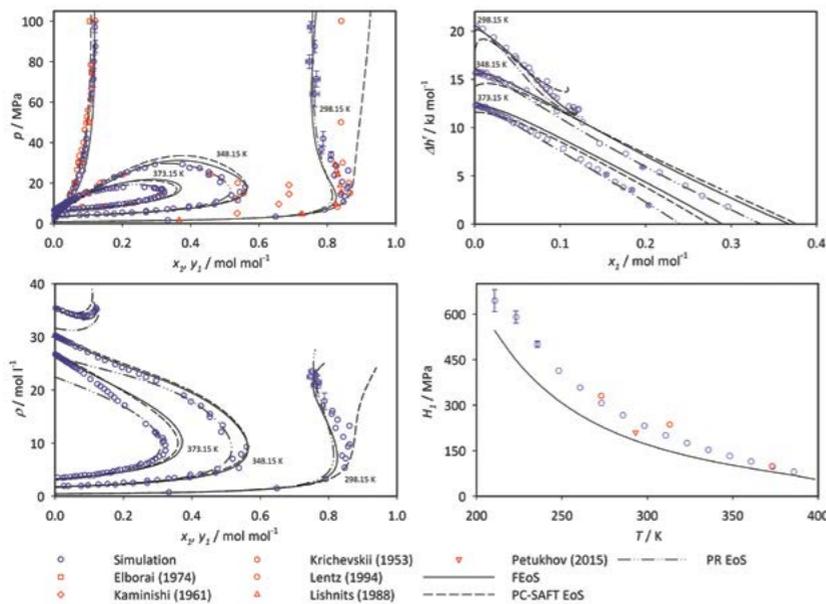
Vrabec ist langjähriger Nutzer der Supercomputerressourcen des HLRS für Molekulardynamik- und Monte-Carlo-Simulationen. Sein Ansatz beruht auf Konzepten der Thermodynamik, die erstmals von Ludwig Boltzmann im 19. Jahrhundert formuliert wurden, aber erst in den 1950er Jahren mit den ersten Computern praktisch anwendbar wurden. Seitdem hat sich das Gebiet parallel zur Entwicklung größerer und schnellerer Supercomputer weiterentwickelt, sodass Vrabecs Simulationen heute die individuellen Bewegungen und Wechselwirkungen von Milliarden oder sogar Billionen von Molekülen gleichzeitig verfolgen. Mithilfe der von seinem Labor entwickelten Software zur selektiven Erfassung von relevanten Daten kann er die thermodynamischen Eigenschaften der Moleküle untersuchen.

Vrabec verwendet zwei Simulationscodes namens ms2 und ls1, die er im Laufe einer langen Zusammenarbeit mit dem HLRS entwickelt und optimiert hat. Im Jahr 2019 stellte das Team sogar einen Weltrekord für das größte jemals mit Molekulardynamikmethoden simulierte System auf. Mit ls1 skalierten sie ihren Code effizient auf ein System mit 21 Billionen Atomen.

In ihrer aktuellen Arbeit führten Mace und Vrabec Molekulardynamik- und Monte-Carlo-Simulationen mit ms2 durch, um fünf häufig in chemisch-technischen Prozessen verwendete Mischungen zu untersuchen: Argon-Ammoniak, Methan-Ammoniak, Wasserstoff-Ammoniak, Stickstoff-Ammoniak und Sauerstoff-Am-

moniak. Für jedes Gemisch wurden bei den Simulationen Daten erzeugt, die das Vapor-Liquid-Equilibrium (VLE) – eine Messung der Verteilung der Moleküle in einem System über die Dampf- oder Flüssigphase – für einen breiten Temperatur- und Druckbereich beschreiben. In ihrem Beitrag weisen Mace und Vrabec darauf hin, dass VLE-Daten häufig bei der Entwicklung von Zustandsgleichungen für industrielle Flüssigkeiten verwendet werden, d.h. die Daten lassen sich zur Vorhersage des Zustands der Materie unter verschiedenen physikalischen Bedingungen aufgrund von Änderungen der Temperatur, des Drucks, des Volumens oder der Zusammensetzung nutzen. Solche Informationen sind für die Bestimmung optimaler Mischungen und Arbeitsbedingungen in industriellen Anwendungen unerlässlich.

Vrabecs Molekülsimulationen sind besonders wertvoll, weil mit ihnen ein viel größerer Bereich von Skalen untersucht werden kann als mit experimentellen Ansätzen. „In unseren Simulationen konnten wir die thermodynamischen Eigenschaften sogar bis zu einem Druck von 50 Megapascal messen. Das ist das 500-fache unseres Luftdrucks“, so Vrabec. „Obwohl seit mehr als einem Jahrhundert Daten für Ammoniakgemische gesammelt werden, ist die Datenabdeckung erstaunlich gering. Der Aufwand für eine experimentelle Messung ist schlichtweg unerschwinglich. Dazu wären teure und gefährliche Spezialgeräte erforderlich. Mit Computersimulationen können wir sicher und relativ kostengünstig Ergebnisse erzielen.“



Die Diagramme vergleichen Daten aus Simulationen und Experimenten für Mischungen von Ammoniak und Methan bei diversen Zusammensetzungen, Druckverhältnissen und Temperaturen. Die Simulationsdaten (dargestellt in blauen Kreisen) stimmen mit anderen experimentellen Daten überein und zeigen Ausreißer in den experimentellen Daten auf (z.B. in den roten Rauten für Kaminishis Ergebnisse aus dem Jahr 1961 in der unteren Hälfte der Abbildung oben links), die wahrscheinlich ungenau sind.

### Bessere Daten für die Ammoniakforschung

Bei der Analyse ihrer Simulationsdaten stellten Mace und Vrabec fest, dass Ammoniak zwar in allen fünf untersuchten Systemen eine Komponente ist; die Ergebnisgraphen der VLE-Werte sehen jedoch für verschiedene Molekülmischungen sehr unterschiedlich aus. Dazu Vrabec: „Das Phasenverhalten verschiedener Gemische wird stark von den Wechselwirkungen zwischen den Molekülen im System bestimmt. Man muss diese Eigenschaften verstehen, wenn man mit Ammoniakmischungen arbeitet.“

Die Forschungsarbeit und ergänzende Daten bieten mehr als 400 neue Datenpunkte für jedes untersuchte Gemisch. Mit Hawk erhielten sie die Ergebnisse für alle Gemische in jeweils nur wenigen Tagen Rechenzeit. Die Resultate sind besonders wertvoll für extreme Bedingungen, für die nur wenige Daten zur Verfügung stehen.

Die Studie umfasste sowohl neue Simulationsdaten als auch bereits veröffentlichte Daten, sodass Mace und Vrabec ihre Ergebnisse mit anderen vorhandenen Datensätzen von VLE-Werten vergleichen konnten. In den meisten Fällen stimmten ihre Ergebnisse eng mit denen früherer Studien überein. In einigen Fällen stellten sie jedoch erhebliche Abweichungen zwischen ihren Ergebnissen und den experimentellen Messungen sowie Vorhersagen anderer Forschergruppen fest. Die Auto-

ren führen diese Diskrepanzen auf Einschränkungen oder Ungenauigkeiten bei den entsprechenden Experimenten zurück. Sie empfehlen außerdem, dass bestimmte experimentelle Datenquellen in der künftigen Forschung oder bei verfahrenstechnischen Anwendungen mit Vorsicht verwendet werden sollten.

Vrabec hat sich kürzlich vor allem mit der Simulation thermodynamischer Eigenschaften molekularer Systeme im Submikrometerbereich beschäftigt. Auch wenn zwischen dieser Skala und beobachtbaren Prozessen einige Größenordnungen liegen, lassen sich mittels dieser Erkenntnisse mit genauen Methoden auf molekularer Ebene Prognosen für die Realität treffen. Vrabec geht jedoch davon aus, dass mit größeren Supercomputern sowohl Eigenschaften als auch thermodynamische Prozesse unter realitätsnahen Randbedingungen simulierbar werden. Eine gesteigerte HPC-Leistung könnte auch genauere Ergebnisse über dynamische Phänomene liefern.

In der Zwischenzeit unterstreichen die Ergebnisse seines Teams jedoch den Wert der Molekulardynamik und der Monte-Carlo-Simulation mithilfe von Höchstleistungsrechnern. Sie werden Erkenntnisse über das Phasenverhalten liefern, die Ingenieur:innen zur Entwicklung von Technologien auf Ammoniakbasis nutzen können.

## Vlasiator liefert ein globales Modell der Erdmagnetosphäre

Mithilfe des Supercomputers Hawk am HLRS untersuchen Wissenschaftler:innen unter der Leitung der Physikerin Dr. Minna Palmroth Phänomene im erdnahen Weltraum, die bisher nicht erforschbar waren.

Mit der Entwicklung wiederverwendbarer Raketen und kleinerer, günstigerer Satelliten erlebt die Raumfahrtindustrie einen Boom. Aus diesem Grund wird für wichtige Funktionen der Gesellschaft, wie Kommunikation und Navigation, zunehmend auf Satelliten zurückgegriffen. Die Sicherheit von Satelliten im Weltraum ist daher nicht nur eine Frage des Investitionsschutzes, sondern auch des reibungslosen Ablaufs des menschlichen Lebens auf der Erde.

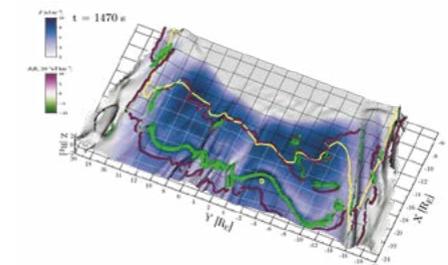
Weiterhin bedarf es jedoch eines zufriedenstellenden Verständnisses wichtiger Phänomene im erdnahen Weltraum, die die Funktion von Satelliten beeinflussen. Die Dynamik des Sonnenwindes bei seiner Annäherung an die Erde beispielsweise kann bei Satelliten verheerende Folgen haben. Trotz jahrzehntelanger Forschung bleibt es schwierig, detaillierte Modelle für solche Bedingungen zu entwickeln. Dass der Weltraum viel größer ist als alles andere auf der Erde, ist nur eines der Hindernisse. Darüber hinaus ist das Weltraumwetter physikalisch komplexer als das Wetter auf der Erde und nur eine begrenzte Anzahl von Beobachtungssatelliten lässt sich ins All schießen. In Zukunft möchten Wissenschaftler:innen das Wetter im Weltraum genauso gut vorhersagen können wie das Wetter auf der Erde. Damit dies möglich wird, ist die Simulation der Weltraumphysik mithilfe von Supercomputern erforderlich.

Dr. Minna Palmroth, Professorin in der Forschungsgruppe für Weltraumphysik an der Universität Helsinki, leitet seit mehr als zehn Jahren die Entwicklung eines Modells namens Vlasiator, das das Potenzial hat, das Verständnis der Magnetosphäre zu verbessern. Die Magnetosphäre ist die Region um die Erde, in der das elektro-

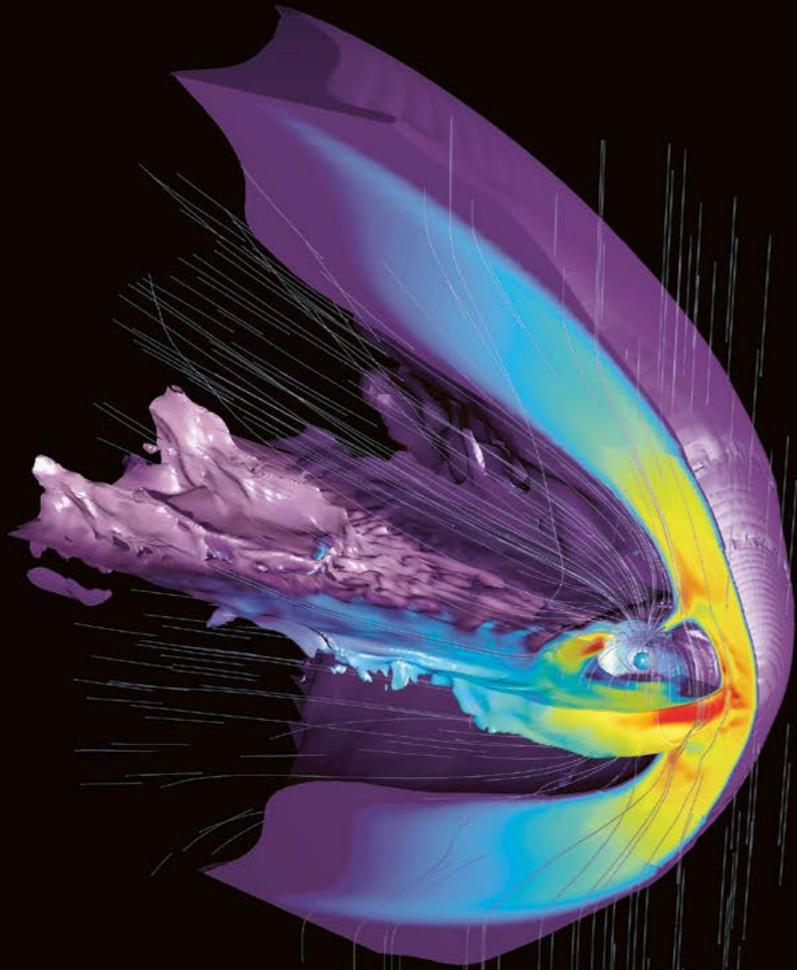
magnetische Feld des Planeten mit dem Sonnenwind in Wechselwirkung tritt. Mithilfe mehrerer Generationen von Supercomputern am HLRS – Hermit, Hazel Hen und aktuell Hawk – haben Palmroth und ihr Team die Fähigkeiten von Vlasiator verbessert. Eine aktuelle Veröffentlichung aus der Fachzeitschrift *Nature Geoscience* zeigt, dass Vlasiator einzigartige Einblicke in Phänomene bieten kann, die sich mit anderen Simulationsmethoden nicht untersuchen lassen.

### Weniger Bedarf an Annäherung bei der Teilchenmodellierung

Seit den 1970er Jahren setzen Physiker:innen Computer ein, um die Bedingungen im erdnahen Weltraum zu simulieren. Die bestehenden Algorithmen konnten sich jedoch einigen der wichtigsten Merkmale nur annähern. In der Magnetohydrodynamik (MHD), einem etablierten Ansatz zur Simulation der Magnetosphäre, enthalten die Codes die eingebaute Annahme, dass die Teilchengeschwindigkeiten im Weltraum genauso verteilt sind



Die Forscher:innen des Vlasiator-Projekts nutzten den Supercomputer Hawk des HLRS, um die erste sechs-dimensionale Simulation der Dynamik der Ionenskala im erdnahen Raum zu erstellen. In dieser Visualisierung trifft der Sonnenwind auf das Magnetfeld der Erde, was zu einer kugelförmigen Magnetosphäre führt.



Schnappschuss der Oberfläche der Plasmaschicht in der Vlasiator-Simulation, der große, schwanzbreite Plasmaausbrüche in der Stromdichte und Magnetfeldtopologie zeigt.

wie auf der Erde, d.h. einer Normalverteilung folgen. Auf der Erde gruppieren sich viele Teilchen in einem gegebenen dreidimensionalen Würfel um eine Durchschnittsgeschwindigkeit mit relativ wenigen Ausreißern. Da die Temperatur das Ergebnis von sich bewegenden Teilchen ist, gibt diese Verteilung die Temperatur der Luft im Würfel gut wieder.

Eine schon lange bekannte Herausforderung in der Weltraumphysik besteht darin, dass die Protonengeschwindigkeiten im Weltraum keiner Normalverteilung folgen, sondern viel stärker schwanken. Um das tatsächliche Verhalten von Protonen in MHD-Codes zu berücksichtigen, wäre jedoch eine unbezahlbare Rechenleistung erforderlich. Daher hatten die Modellierer des Weltraums keine andere Wahl, als die Teilchen im Weltraum genauso zu behandeln wie die Teilchen auf der Erde.

Dr. Palmroth und ihre Kollegen können dank verbesserter Algorithmen und leistungsfähigerer Supercomputer wie denen am HLRS ein Modell ohne solche Kompromisse entwickeln. „Beim Betrieb von Vlasiator am HLRS ist es möglich, alle mit Protonen zusammenhängenden Phänomene im erdnahen Weltraum so zu modellieren, wie sie sind. Die Modellierung basiert auf fundamentalen physikalischen Prinzipien ohne die Notwendigkeit einer Annäherung“, sagt Palmroth.

Um globale Simulationen der Magnetosphäre und Ionosphäre der Erde zu erstellen, berücksichtigt Vlasiator sechs verschiedene Dimensionen – drei räumliche Dimensionen und drei Dimensionen, die die Teilchenverteilung quantifizieren. Der Code modelliert nicht die Bewegung einzelner Teilchen, sondern liefert eine hochpräzise Darstellung der Veränderungen der Protonenverteilung in Raum und Zeit. (Der mathematische Ansatz, den sie verwenden, basiert auf der Vlasov-Gleichung.) „Die Form der Teilchenverteilung ist entscheidend für viele jahrzehntealte ungelöste Rätsel“, erklärt Palmroth. „Vlasiator konzentriert sich ausschließlich auf diese Herausforderung und kann Prozesse aufdecken, die bisher nicht sichtbar waren.“ Diese Fähigkeit hat ihrem Team neue Möglichkeiten für die Untersuchung der Weltraumphysik eröffnet.

#### Simulation erklärt Ausbrüche des Erdplasmas

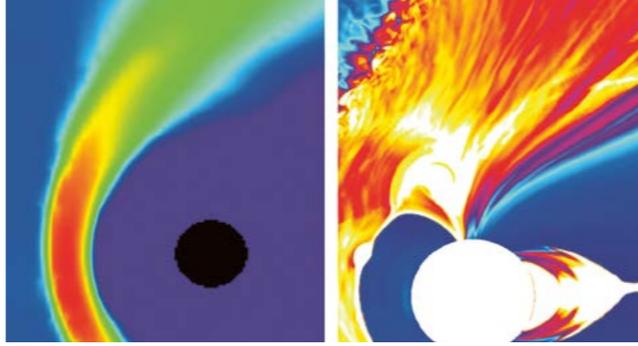
Eines der unvorhersehbarsten Phänomene in der Magnetosphäre ist ein so genannter Substurm. Hier führen die Wechselwirkungen zwischen dem Sonnenwind und dem elektromagnetischen Feld der Erde zu einer Ansammlung und einem plötzlichen Ausstoß von Plasma, einem sogenannten Plasmoid. Solche Ausbrüche finden im Magnetschweif statt, dem Teil der Magnetosphäre auf der Nachtseite der Erde. Von der Erdoberfläche aus sind diese Auswürfe als besonders spektakuläre Polarlichter sichtbar. Im Raum können sie jedoch Satelliten beschädigen oder deren Betrieb stören.

Obwohl man versucht hat, Substürme zu erklären, ließen sich ihre Ursachen bisher kaum verstehen. Eine mögliche Erklärung, die sogenannte magnetische Rekonnektion, geht davon aus, dass Veränderungen im elektromagnetischen Feld im Magnetschweif einen Teil der Magnetosphäre abtrennen, der dann als Plasmoid freigesetzt wird. Eine andere, die sogenannte kinetische Instabilität, postuliert, dass Instabilitäten im Magnetschweif Wellen erzeugen, die den Magnetschweif aufrechterhaltenden Strom unterbrechen und zum Ausstoß des Plasmoide führen.

Mit Vlasiator simulierten Palmroth und ihr Team auf dem Supercomputer Hawk des HLRS die Magnetosphäre in einem Maßstab, der die Physik aufzeigen kann, die diesen beiden Hypothesen zugrunde liegt. Überraschenderweise deuteten ihre Ergebnisse darauf hin, dass sowohl die magnetische Rekonnektion als auch kinetische Instabilitäten auftreten, jedoch nicht in der Art und Weise, wie Weltraumphysiker:innen sie in der Vergangenheit verstanden haben. Laut ihrer Veröffentlichung in *Nature Geoscience* werden Plasmoide ausgeworfen, wenn kleinere Plasmoide wegen einer von kinetischer Instabilität verursachten Störung der Strömung zu einem großen Plasmoid vereinigt werden.

Palmroth zufolge ermöglichte die globale Natur von Vlasiator diese neuen Erkenntnisse. „Vlasiator umfasst nun den stromaufwärts gelegenen Sonnenwind, die Magnetosphäre und die Ionosphäre“, erklärt sie. „Plasmaphänomene treten in einem viel kleineren Maßstab

Vergleich der Modellierungstechniken mit Magnetohydrodynamik (links) und Vlasiator (rechts). Beide Methoden modellieren Elektronen als Flüssigkeit, aber Vlasiator verwendet einen Hybrid-Vlasov-Ansatz, der die Protonengeschwindigkeiten als Verteilungsfunktionen simuliert. Vlasiator kann die kinetischen Effekte von Ionen auf einer kleineren Skala erfassen und bietet ein globales Modell, das den Sonnenwind, die Magnetosphäre und die Ionosphäre umfasst.



auf, aber da sich globale Merkmale auf lokale Merkmale auswirken und umgekehrt, braucht man ein globales Modell, um den nötigen Kontext zu schaffen. Ohne das globale Modell ist es unmöglich, die Entwicklung des gesamten Systems gleichzeitig zu verstehen.“

Beim Vergleich der Ergebnisse von Vlasiator mit verfügbaren Beobachtungsdaten stellte Palmroth fest, dass die Ergebnisse ein detailliertes und genaues Bild ergeben. Der Code ermöglicht es ihr, auch andere Merkmale der Magnetosphäre zu beobachten. In weiteren aktuellen Veröffentlichungen wurde beispielsweise über die Übertragung von Vorbebenwellen durch den Bugschock der Erde, den Niederschlag von Protonen in der Aurora und die Eigenschaften von Pc3-Wellen berichtet.

#### Erfolg dank langjähriger Partnerschaft mit dem HLRS

Als Palmroth um das Jahr 2004 herum zum ersten Mal die Idee hatte, ein globales ionenkinetisches Modell der Magnetosphäre zu erstellen, wiesen viele Kollegen sie darauf hin, dass dies rechnerisch niemals möglich wäre. Bei der Entwicklung von Vlasiator hat sie jedoch stets Code entwickelt, der nicht für die Architekturen und Fähigkeiten aktueller HPC-Systeme, sondern für zukünftige, leistungsfähigere HPC-Technologien geeignet ist.

„Diese Philosophie funktioniert nur, wenn wir eng mit Leuten zusammenarbeiten, die in die technologische Zukunft blicken“, erklärt sie. „Deshalb ist das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart eines meiner Lieblingsrechenzentren. Das HLRS verfügt über ein sehr gutes Fachwissen und Know-how, das für die Entwicklung unserer Algorithmen entscheidend ist und einen produktiven Co-Design-Prozess ermöglicht.“

Vlasiator eröffnet nicht nur neue Felder für die Weltraumforschung, sondern tut sich auch mit seiner Effizienz

bei der Ausführung auf dem Supercomputer Hawk des HLRS hervor. Laut Palmroth seien Experten auf dem Gebiet der Computermodellierung oft von der Leistung des Codes überrascht, da er bei der Ausführung auf bis zu 200.000 Rechenkernen fast linear skaliert. Palmroth führt diese Leistung auf die enge Zusammenarbeit mit dem User Support des HLRS zurück, der wertvolle Ratschläge für die Verwaltung von Themen wie Input-Output, Datenspeicherung und andere technische Fragen gegeben hat, die für eine optimale Nutzung der Supercomputer des Zentrums erforderlich sind. „Die HPC-Experten am HLRS setzen hohe Standards für die Anwendungsleistung, die wir in der Praxis versuchen umzusetzen“, sagt sie.

Da sich HPC der Exascale nähert, sehen Palmroth und ihr Team viele Möglichkeiten, die Fähigkeiten von Vlasiator zu erweitern. Sie gehen davon aus, dass sie in Zukunft in der Lage sein werden, die Auflösung ihres Modells zu verbessern, längere physikalische Zeiträume zu simulieren und mehrere Durchläufe derselben Simulation durchzuführen, um auf der Grundlage vergleichender statistischer Analysen noch bessere Modelle zu erstellen. Da Vlasiator ursprünglich für Supercomputer mit CPU-Prozessoren entwickelt wurde, arbeitet das Team derzeit auch an einer Neufassung des Vlasiator-Codes, damit die Berechnungen des Geschwindigkeitsraums auf GPU-Beschleunigern ausgeführt werden können. Da die Geschwindigkeitsberechnungen bis zu 90 Prozent der Rechenzeit beanspruchen, schätzt sie, dass der Code dadurch mindestens 20 Mal schneller laufen könnte.

Diese Pläne deuten darauf hin, dass das Palmroth-Labor mit der Weiterentwicklung des Höchstleistungsrechnens auch weiterhin neue Erkenntnisse über die Umgebung unseres Heimatplaneten liefern wird.

## Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2023

Agadjanov A, Djukanovic D, von Hippel G, et al. 2023. **Nucleon sigma terms with  $N_f = 2 + 1$  flavors of  $O(a)$ -improved Wilson fermions.** Phys Rev Lett. 131: 261902.

Agadjanov A, Djukanovic D, von Hippel G, et al. 2023. **The pion-nucleon sigma term with  $N_f = 2 + 1$   $O(a)$ -improved Wilson fermions.** Proceedings of the 39th International Symposium on Lattice Field Theory, 9th–13th August 2022.

Appel D, Jöns S, Keim J, et al. 2023. **A narrow band-based dynamic load balancing scheme for the level-set ghost-fluid method.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Badalov SV, Bocchini A, Wilhelm R, et al. 2023. **Rutile, anatase, brookite and titania thin film from Hubbard corrected and hybrid DFT.** Mater Res Express. 10: 075501.

Barnowsky T, Krasheninnikov AV, Friedrich R. 2023. **A new group of 2D non-van der Waals materials with ultra low exfoliation energies.** Adv Electron Mater. 2201112.

Bashir U, Böttcher K, Klimm D, et al. 2023. **Solid solutions of lithium niobite and lithium tantalate: crystal growth and the ferroelectric transition.** Ferroelectrics. 613: 250-262.

Bauer HS, Schwitalla T, Branch O, Thundathil R. 2023. **WRF simulations to investigate processes across scales (WRFSCALE).** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Beck A, Kurz M. 2023. **Toward discretization-consistent closure schemes for large eddy simulation using reinforcement learning.** Phys Fluids. 35: 125122.

Blind MP, Kahraman AB, Larsson J, Beck A. 2023. **Residual estimation for grid modification in wall-modeled large eddy simulation using unstructured high-order methods.** Comput Fluids. 254: 105796.

Blind MP, Kleinert J, Lutz T, Beck A. 2023. **A time-accurate inflow coupling for zonal LES.** CEAS Aeronaut J. ePub March 9.

Bocchini A, Xie Y, Schmidt WG, Gerstmann U. 2023. **Structural and electrochemical properties of F-doped RbTiOPO<sub>4</sub> (RTP:F) predicted from first principles.** Crystals. 14(1): 5.

Borgelt J, Hösgen T, Meinke M, Schröder W. 2023. **Analysis of the hot gas ingress into the wheel space of an axial turbine stage.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Bromley SJ, McCann M, Loch SD, Ballance CP. 2023. **Electron-impact excitation of Pt I–III: the importance of metastable and collision processes in neutron star merger and laboratory plasmas.** Astrophys J Suppl Series. 268(1): 22.

Bui MN, Rost S, Auge M, et al. 2023. **Optical properties of MoSe<sub>2</sub> monolayer implanted with ultra-low-energy Cr ions.** ACS Appl Mater Interfaces. 15(29): 35321-35331.

Buijse R, Parnet M, Nägel A. 2023. **Large scale simulations of partial differential equation models**

on the Hawk supercomputer. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Caldas A, Feldmann H, Lucio-Eceiza E, Pinto JG. 2023. Convection-parameterized and convection-permitting modelling of heavy precipitation in decadal simulations of the greater Alpine region with COSMO-CLM. Weather Clim Dynam. 4: 543-565.

Carbonio EA, Sulzmann F, Klyzshin AY, et al. 2023. Adjusting the chemical reactivity of oxygen for propylene epoxidation on silver by rational design: the use of an oxyanion and Cl. ACS Catal. 13: 5906-5913.

Cè M, Chao EH, Gérardin A, et al. 2023. Hadronic contributions to the anomalous magnetic moment of the muon from Lattice QCD. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Chabanov M, Tootle SD, Most ER, Rezzolla L. 2023. Crustal magnetic fields do not lead to large magnetic-field amplifications in binary neutron star mergers. Astrophys J Lett. 945 (1): L14.

Chepkasov IV, Krashneninnikov AV. 2023. Tetracene crystals as promising anode material for alkali metal ion batteries. Carbon 213: 118190.

Denev JA, Zirwes T, Zhang F, Bockhorn H. 2023. A low-pass filter for linear forcing in the open-source code OpenFOAM – Implementation and numerical performance. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Depta PN, Dosta M, Heinrich S. 2023. Data-driven multiscale modeling of self-assembly and hierarchical structural formation in biological macro-molecular systems. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Engler C, Pillepich A, Joshi GD, et al. 2023. Satellites of Milky Way and M31-like galaxies with TNG50: quenched fractions, gas content, and star formation histories. Mon Not R Astron Soc. ePub May 8.

Feichi Z, Wachter S, Zirwes T, et al. 2023. Effect of nozzle upscaling on coaxial, gas-assisted atomization. Phys Fluids 35: 043302.

Fortuni F, Merlin E, Fontana A, et al. 2023. FORECAST: a flexible software to forward model cosmological hydrodynamical simulations mimicking real observations. Astron Astrophys. 677: A102.

Funke B, García-Cosmas M, Glatthor N, et al. 2023. Michelson interferometer for passive atmospheric sounding Institute of Meteorology and Climate Research/Instituto de Astrofísica de Andalucía version 8 retrieval of nitric oxide and lower-thermospheric temperature. Atmos Meas Tech. 16(8): 2167-2196.

Gao M, Appel D, Beck A, Munz CD. 2023. A high-order fluid-structure interaction framework with application to shock-wave/turbulent boundary-layer interaction over an elastic panel. J Fluids Structures. 121: 103950.

Ganse U, Koskela T, Battarbee M, et al. 2023. Enabling technology for global 3D + 3V hybrid-Vlasov simulations of near-Earth space. Phys Plasmas. 30: 042902.

García-Comas M, Funke B, López-Puertas M, et al. 2023. Version 8 IMK-IAA MIPAS temperatures from 12-14  $\mu\text{m}$  spectra: middle and upper atmosphere modes. Atmos Measurement Techniques. 16(21): 5357-5386.

Gondrum M, Satcunanathan S, Niemöller A, et al. 2023. A direct-hybrid CFD/CAA method based on lattice Boltzmann and acoustic perturbation equations. Acta Acust. 7(5).

Grandin M, Connor HK, Hoilijoki S, et al. 2024 (ePub Jul 10, 2023). Hybrid-Vlasov simulation of soft X-ray emissions at the Earth's dayside magnetospheric boundaries. Earth Planetary Phys. 8: 70-88.

Grandin M, Luttikhuis T, Battarbee M, et al. 2023. First 3D hybrid-Vlasov global simulation of auroral proton precipitation and comparison with satellite observations. J Space Weather Space Clim. 13: 20.

Grauer M, Behar E. 2023. Absorption of gamma-ray burst x-ray afterglows by the missing baryons: confronting observations with the cosmological simulations. Astrophys J. 953: 158.

Guenther JN, Borsanyi S, Fodor Z, et al. 2023. Resummed lattice QCD equation of state at finite baryon density: strangeness neutrality and beyond. 39th International Symposium on Lattice Field Theory, LATTICE 2022 8th-13th August, 2022 Bonn, Germany.

Hespe D, Hübner L, Hübschle-Schneider L, et al. 2023. Scalable discrete algorithms for big data applications. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Homes S, Fingerhut R, Guevara-Carrion G, et al. 2023. Scaling in the context of molecular dynamics simulations with ms2 and ls1 mardyn. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Homes S, Heinen M, Vrabec J. 2023. Influence of molecular anisotropy and quadrupolar moment on evaporation. Phys Fluids. 35: 052111.

Hundhausen M, Feldmann H, Laube N, Pinto JG. 2023. Future heat extremes and impacts in a convection-permitting climate ensemble over Germany. Nat Hazards Earth Syst Sci. 23: 2873-2893.

Jones T. 2023. Electro-catalysis for H<sub>2</sub>O oxidation. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Kellers B, Lautenschlaeger MP, Rigos N, et al. 2023. Systematic workflow for efficient identification of

local representative elementary volumes demonstrated with lithium-ion battery cathode microstructures. Batteries 9(7): 390.

Kempf D, Gao M, Beck A, et al. 2023. Development of turbulent inflow methods for the high order HPC framework FLEXI. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Kiefer M, Funke B, García-Comas M. 2023. Global long-term MIPAS data processing. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Kleinert J, Ehrle M, Waldmann A, Lutz T. 2023. Wake tail plane interactions for a tandem wing configuration in high-speed stall conditions. CEAS Aeronautical J. ePub Jun 14.

Klimach H, Masilamani K, Roller S. 2023. Exploiting hybrid parallelism in the LBM implementation of Musubi on Hawk. In: Resch MM, Gebert J, Kobayashi H, Bez W, eds. Sustained Simulation Performance 2021. Springer.

Knodel MM, Di Stefano S, Nägel A, Grillo A. 2022. An efficient algorithm for biomechanical problems based on a fully implicit nested Newton solver. Theor Appl. 49(2): 183-221

Knodel MM, Nägel A, Herrmann E, Wittum G. 2023. PDE models of virus replication coupling 2D manifold and 3D volume effects evaluated at realistic reconstructed cell geometries. In: Franck E, Fuhrmann J, Michel-Dansac V, Navoret L, eds. Finite Volumes for Complex Applications X—Volume 1, Elliptic and Parabolic Problems. FVCA 2023. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, vol. 432.

Köster J, Kretschmer S, Storm A, et al. 2023. Phase transformations in single-layer MoTe<sub>2</sub> stimulated by electron irradiation and annealing. Nanotechnology. ePub Dec 14.

- Kretschmer S, Joseph T, Ghaderzadeh S, et al. 2023. **Production of defects in two-dimensional materials under ion and electron irradiation: insights from advanced first-principles calculations annual report on 'Bundesprojekt' ACID 44172 (Def-2-Dim)**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Kromer J, Potyka J, Shulte K, Bothe D. 2023. **Efficient sequential PLIC interface positioning for enhanced performance of the three-phase VoF method**. Comput Fluids. ePub Sep 1.
- Lewis JSW, Pillepich A, Nelson D, et al. 2023. **The signature of galaxy formation models in the power spectrum of the hydrogen 21cm line during reionization**. Mon Not R Astron Soc. ePub Dec 19.
- Li J, Ghorbani-Asl M, Lasek K, et al. 2023. **A van der Waals heterostructure with an electronically textured moiré pattern: PtSe<sub>2</sub>/PtTe<sub>2</sub>**. ACS Nano 17(6): 5913-5920.
- Li Y, Ries F, Sun Y, et al. 2023. **Direct numerical simulation of atomization characteristics of ECN spray-G injector: in-nozzle fluid flow and breakup processes**. Flow Turbul Combust. ePub Dec 15.
- Liu Q, Lin YC, Kretschmer S, et al. 2023. **Molybdenum chloride nanostructures with giant lattice distortions intercalated into bilayer graphene**. ACS Nano, ePub Nov 26.
- Liu Y, Wang W, Yang G, et al. 2023. **The interfacial modes and modal causality in a dispersed bubbly turbulent flow**. Phys Fluids. 35: 083309.
- Lode AUJ, Alon OE, Arnold J, et al. 2023. **Quantum simulators, phase transitions, resonant tunneling, and variances: a many-body perspective**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Long F, Ghorbani-Asl M, Mosina K, et al. 2023. **Ferromagnetic interlayer coupling in CrSBr crystals irradiated by ions**. Nano Lett. 23(18): 8468-8473.
- Mace EJ, Vrabec J. 2023. **High-pressure fluid-phase equilibria and Henry's constants of supercritical gases in ammonia**. J Chem Eng Data. ePub Oct 2.
- Maier B, Schneider D, Schulte M, Uekermann B. 2023. **Bridging scales with volume coupling – Scalable simulations of muscle contraction and electromyography**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Mallor F, Semprini-Cesari G, Mukha T, et al. 2023. **Bayesian optimization of wall-normal blowing and suction-based flow control of a NACA 4412 wing profile**. Flow Turbul Combust. ePub Sep 5.
- Markin I, Neuweiler A, Abac A, et al. 2023. **General-relativistic hydrodynamics simulation of a neutron star-sub-solar-mass black hole merger**. Phys Rev D. 108: 064025.
- Martins FF, Krewald V. 2023. **Cooperative dinitrogen activation: identifying the push-pull effect of transition metals and Lewis acids in molecular orbital diagrams**. Eur J Inorg Chem. 26(35): e202300268.
- Marx J, Kohns M, Langenbach K. 2023. **Co-oriented fluid functional equation for electrostatic interactions (COFFEE) for mixtures: molecular orientations**. J Chem Eng Data. ePub Aug 25.
- Marx J, Kohns M, Langenbach K. 2023. **Vapor-liquid equilibria of binary mixtures containing Stockmayer-type model fluids from Monte-Carlo simulations**. Fluid Phase Equilib. 568: 113742.
- Mäteling E, Albers M, Schröder W. 2023. **How spanwise travelling transversal surface waves change the near-wall flow**. J Fluid Mech. 957: ePub Feb 23.
- Meier L, Schmidt WG. 2023. **Adsorption of cyclic (alkyl) (amino) carbenes on monohydride Si(001) surfaces: interface bonding and electronic properties**. J Phys Chem C. 127(4): 1973-1980.
- Meller D, Engelmann L, Baik S-J, Kempf AM. 2023. **A four mixture fraction FPV-LES for the co-firing of coal and ammonia**. In Marchioli C, Salvetti MV, Garcia-Villalba M, Schlatter P, eds. Direct and Large Eddy Simulation XIII. DLES 2023. ERCOFTAC Series, vol. 31. Springer.
- Meller D, Engelmann L, Stein OT, Kempf AM. 2023. **Exhaust gas recirculation (EGR) analysis of a swirl-stabilized pulverized coal flame with focus on NOx release using FPV-LES**. Fuel 343: 127939.
- Meringolo C, Cruz-Osorio A, Rezzolla L, Verdivio S. 2023. **Microphysical plasma relations from special-relativistic turbulence**. Astrophys J. 94(2): 122.
- Mpisketzis V, Duqué R, Nathanail, et al. 2023. **Impact of anisotropic ejecta on jet dynamics and afterglow emission in binary neutron-star mergers**. Mon Not R Astron Soc. ePub Dec 6.
- Mulone A, Awad S, Chiarugi D, Aldinucci M. 2023. **Porting the variant calling pipeline for NGS data in a cloud-HPC environment**. 2023 IEEE 47th Annual Computers, Software, and Applications Conference COMPSAC.
- Nanni L, Thomas D, Trayford J, et al. 2023. **iMaNGA: mock MaNGA galaxies based on Illustris TNG and MaStar SSPs – II. The catalogue**. Mon Not R Astron Soc. 522(4): 5479-5499.
- Nelson D, Byrohl C, Ogorzalek A, et al. 2023. **Resonant scattering of the OVII X-ray emission line in the circumgalactic medium of TNG50 galaxies**. Mon Not R Astron Soc. 522(3): 3665-3678.
- Neumann P, Wittmer N, Jafari V, et al. 2023. **Dynamic molecular dynamics ensembles for multiscale simulation coupling**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Nitzke I, Vrabec J. 2023. **Numerical discrimination of thermodynamic Monte Carlo simulations in all eight statistical ensembles**. J Chem Theory Comput. 19(12): 3460-3468.
- Oelschläger F, Klein D, Müller S, Roth J. 2023. **Molecular dynamics simulation of selective laser melting**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Ohno D, Greiner M, Müller J, Rist U. 2023. **Numerical investigations of laminar separation bubbles under the influence of periodic gusts**. AIAA J. ePub Mar 16.
- Ohno D, Selent B, Kloker MJ, Rist U. 2023. **Direct numerical simulation of bypass transition under free-stream turbulence for compressible flows**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.
- Owen E, Han Q, Wu K. 2023. **Effects of large-scale magnetic fields on the observed composition of ultrahigh-energy cosmic rays**. Phys Rev D. 103027.
- Palmroth M, Pulkkinen TI, Ganse U, et al. 2023. **Magnetotail plasma eruptions driven by magnetic reconnection and kinetic instabilities**. Nat Geosci. 16: 570-576.
- Pathirage V, Lasek K, Krasheninnikov AV, et al. 2023. **Mirror twin boundaries in WSe<sub>2</sub> induced by vanadium doping**. Mater Today Nano. 22: 100314.
- Paul S, Hanlon AD, Hörz B, et al. 2023. **The long-distance behavior of the vector-vector correlator from  $\pi\pi$  scattering**. 39th International Symposium on Lattice Field Theory, LATTICE 2022 8th-13th August, 2022 Bonn, Germany.
- Pfeiffer M, Beyer J, Vaubaillon J, et al. 2023. **Numerical simulation of an iron meteoroid entering into earth's**

- atmosphere using DSMC and a radiation solver with comparison to ground testing data. *Icarus*. 115768.
- Pieck F, Luy JN, Kreuter F, et al. 2023. **Reactivity of organic molecules on semiconductor surfaces revealed by density functional theory**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Pinzon J, Siebenborn M, Vogel A. 2023. **Scalable multigrid algorithm for fluid dynamic shape optimization**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Pionteck MN, Bernhardt F, Bilk J. 2023. **Dynamical properties of the Si(553)-Au nanowire system**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Pohl S, Fingerhut R, Thol M, et al. 2023. **Equation of state for the Mie ( $\lambda, 6$ ) fluid with a repulsive exponent from 11 to 13**. *J Chem Phys*. 158: 084506.
- Potyka J, Schulte K. 2024 (ePub Oct 26, 2023). **A volume of fluid method for three dimensional direct numerical simulations of immiscible droplet collisions**. *Int J Multiphase Flow*. 170: 104654.
- Potyka J, Schulte K, Planchette C. 2023. **Liquid distribution after head-on separation of two colliding immiscible liquid droplets**. *Phys Fluids*. 35: 102125.
- Prather BS, Dexter J, Moscibrodzka M, et al. 2023. **Comparison of polarized radiative transfer codes used by the EHT collaboration**. *Astrophys J*. 950: 35.
- Ramaswamy DP, Sebastian R, Schreyer AM. 2023. **Effects of jet-injection-pipe length on the flow-control effectiveness of spanwise-inclined jets in supersonic crossflow**. *Phys Rev Fluids*. 8: 113902.
- Ramesh R, Nelson D, Heesen V, Brüggem M. 2023. **Azimuthal anisotropy of magnetic fields in the circumgalactic medium driven by galactic feedback processes**. *Mon Not R Astron Soc*. 526(4): 5483-5493.
- Rist U, Weinschenk M, Wenzel C. 2023. **Investigation of Lagrangian areas of minimal stretching (LAMS) in a turbulent boundary layer**. *J Fluid Mechan*. 970, A31.
- Rose H, Kunert N, Dietrich T, et al. 2023. **Revealing the strength of three-nucleon interactions with the proposed Einstein Telescope**. *Phys Rev C*. 108: 025811.
- Ruiz Alvarado IA, Zare Pour MA, Hannapel T, Schmidt WG. 2023. **Structural fingerprints in the reflectance anisotropy of AlInP(001)**. *Phys Rev B*. 108: 045410.
- Ryu T, Krolik J, Piran T, et al. 2023. **Shocks power tidal disruption events**. *Astrophys J*. 957: 12.
- Sabater E, Solà M, Salvador P, Andrala DM. 2023. **Cage-size effects on the encapsulation of P<sub>2</sub> by fullerenes**. *Comput Chem*. 44(3): 268-277.
- Saeed MS, Gugliuzza JM, Leibl M, et al. 2023. **Parameter study and optimization of forming simulations for tape-based fiber layups**. In: Kiefl N, Wulle F, Ackermann C, Holder D, eds. *Advances in Automotive Production Technology – Towards Software-Defined Manufacturing and Resilient Supply Chains*. SCAP 2022. ARENA2036. Springer.
- Saric D, Guevara-Carrion G, Gaponenko Y, et al. 2023. **Diffusion of hydrocarbons diluted in supercritical carbon dioxide**. *Sci Rep*. 13: 16107.
- Schäfer T, Joerger AC, Spencer J, et al. 2023. **Ligand-induced protein stabilization and enhanced molecular dynamics sampling techniques**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Schaefer D, Kohns M. 2023. **Molecular dynamics study of ion clustering in concentrated electrolyte solutions for the estimation of salt solubilities**. *Fluid Phase Equilib*. 571: 113802.
- Schaefer D, Kohns M, Hasse H. 2023. **Molecular modeling and simulation of aqueous solutions of alkali nitrates**. *J Chem Phys*. 158: 134508.
- Schlottke A, Ibach M, Steigerwald J, Weigand B. 2023. **Direct numerical simulation of a disintegrating liquid rivulet at a trailing edge**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Schneider M, Ertl B, Diekmann C, Khosrawi F. 2023. **The HPC project GLOMIR+ (GLOBAL MUSICA IASI Retrievals – plus)**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Schollenberger M, Beckers MF, Lutz T. 2023. **Validation of ACD and ACL propeller simulation using blade element method based on airfoil characteristics**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Schoof E, Mitnacht T, Seiz M, et al. 2023. **High-performance multiphase-field simulations of solid-state phase transformations using Pace3D**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Schuchart J, Bosilca G. 2023. **MPI Continuations and how to invoke them**. In: Resch MM, Gebert J, Kobayashi H, Bez W, eds. *Sustained Simulation Performance 2021*. Springer.
- Schwagerus A, Habisreuther P, Zarzalis N. 2023. **Numerical calculation of the lean-blow-out in a multi-jet burner**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Sebastian R, Ramaswamy DP, Schreyer AM. 2023. **Spanwise-inclined jets in supersonic crossflow: effects of injection pressure and separation-control effectiveness**. *AIAA J*. ePub Jun 5.
- Sebastian R, Schreyer AM. 2023. **Forced injection of a spanwise-inclined jet in supersonic crossflow**. *AIAA J*. ePub Sep 25.
- Seel F, Lutz T, Krämer E. 2023. **Numerical study of the unsteady blade root aerodynamics of a 2 MW wind turbine equipped with vortex generators**. *Wind Energ Sci*. 8: 1369-1385.
- Seibold F, Weigand B. 2023. **Numerical investigation of the flow and heat transfer in convergent swirl chambers**. In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. *High Performance Computing in Science and Engineering '21*. Springer.
- Seiz M, Hierl H, Nestler B. 2023. **An improved grand-potential phase-field model of solid-state sintering for many particles**. *Modelling Simul Mater Sci Eng*. 31: 055006.
- Seiz M, Hierl H, Nestler B. 2023. **Unravelling densification during sintering by multiscale modelling of grain motion**. *J Mater Sci*. 58: 14051-14071.
- Seiz M, Kellner M, Nestler B. 2023. **Simulation of dendritic-eutectic growth with the phase-field method**. *Acta Mater*. 254: 118965.
- Settanni G. 2023. **Computational approaches to lipid-based nucleic acid delivery systems**. *Eur Phys J E*. 46: 127.
- Sheina V, Lang G, Stolyarov V, et al. 2023. **Hydrogenic spin-valley states of the bromine donor in 2H-MoTe<sub>2</sub>**. *Communications Phys*. 6: 135.
- Singh E, Pionteck MN, Reitzig S, et al. 2023. **Vibrational properties of LiNbO<sub>3</sub> and LiTaO<sub>3</sub> under uniaxial stress**. *Phys Rev Materials* 7: 024420.
- Skopinski L, Kretschmer S, Ernst P, et al. 2023. **Velocity distributions of particles sputtered from supported two-dimensional MoS<sub>2</sub> during highly charged ion irradiation**. *Phys Rev B*. 107: 075418.

Sofieva VF, Szilag M, Tamminen, et al. 2023. **Updated merged SAGE-CCI-OMPS+ dataset for the evaluation of ozone trends in the stratosphere.** Atmos Meas Tech. 16(7): 1881-1899.

Sotillo-Ramos D, Bergemann M, Friske JKS, Pillepich A. 2023. **On the likelihoods of finding very metal-poor (and old) stars in the Milky Way's disc, bulge, and halo.** Mon Not R Astron Soc: Lett. ePub Jul 27.

Storm A, Köster J, Ghorbani-Asl M, et al. 2023. **Electron-beam- and thermal-annealing-induced structural transformations in few-layer MnPS<sub>3</sub>.** ACS Nano. ePub Feb 20.

Storm A, Köster J, Ghorbani-Asl M, et al. 2023. **Structural transformations in few-layer MnPS<sub>3</sub> stimulated by thermal annealing and electron irradiation.** J Phys Chem C. 127(51): 24713-24723

Subakti S, Daquqshirazi M, Wolf D, et al. 2023. **Electron holographic mapping of structural reconstruction at mono- and bilayer steps of h-BN.** Phys Rev Res. 5: 033137.

Suni J, Palmroth M, Turc L, et al. 2023. **Local bow shock environment during magnetosheath jet formation: results from a hybrid Vlasov simulation.** Annales Geophys. 41(2): 551-568.

Ujevic M, Gieg H, Schianchi F, et al. 2023. **Reverse phase transitions in binary neutron-star systems with exotic-matter cores.** Phys Rev D. 107: 024025.

Verestek W, Kaiser J, Bonten C, Schmauder S. 2023. **Molecular dynamics investigations on the influence of solutes on the tensile behavior of Polyamide6.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Walzer U, Hendel R. 2023. **Natural climate change and glaciations.** Earth Sci Rev. ePub Apr 29.

Wack J, Zorn M, Riedelbauch S. 2023. **Numerical simulation of vortex induced pressure fluctuations in the runner of a Francis turbine at deep part load conditions.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Wellinger P, Weigand B. 2023. **On the validity of the linear Boussinesq hypothesis for selected internal cooling features of gas turbine blades.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

Wenz F, Maas O, Arnold M, et al. 2023. **Assessment of low-frequency aeroacoustic emissions of a wind turbine under rapidly changing wind conditions based on an aero-servo-elastic CFD simulation.** Wind Energy. ePub May 1.

Wenzel P, Radgen P. 2023. **Extending effectiveness to efficiency: comparing energy and environmental assessment methods for a wet cooling tower.** J Indust Ecol. 27(3): 693-706.

Wollny P, Engelmann L, Loewenich M, et al. 2023. **The role of phase transition by inception and surface reactions for the synthesis of silicon nanoparticles in a hot-wall reactor – simulation and experiment.** Chem Eng J. ePub Mar 9.

Ye Q, Dreher M, Shen B. 2023. **Numerical simulation of flake orientation during droplet impact on substrates in spray painting processes.** In: Nägel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '21. Springer.

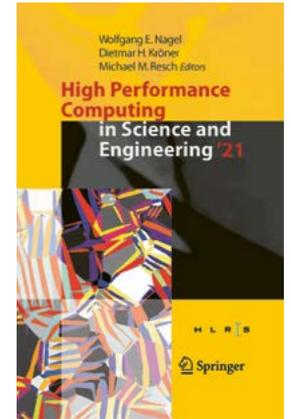
Zvejnieks G, Mastrokov Y, Gryaznov D. 2023. **Jahn-Teller distortion in Sr<sub>2</sub>FeO<sub>4</sub>: group-theoretical analysis and hybrid DFT calculations.** Sci Rep. 13: 16446.

## HLRS Bücher

### High Performance Computing in Science and Engineering '21

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 2021 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 Ergebnisse in der Erreichung von Höchstleistung für Produktionscodes werden sowohl für Wissenschaftler:innen als auch für Ingenieur:innen von besonderem Interesse sein. Das Buch ist mit einigen farbigen Abbildungen und Ergebnistabellen versehen.



### Sustained Simulation Performance 2021

Herausgeber: Michael M. Resch, Johannes Gebert, Hiroaki Kobayashi, Wolfgang Bez

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 auf ausgewählten Veröffentlichungen, die im Jahr 2021 auf dem 31. Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP) in Stuttgart und dem 32. WSSP an der Tohoku Universität in Sendai (Japan) vorgestellt wurden.



# HLRS in Zahlen

**153** Beschäftigte

**12** Gastwissenschaftler:innen

**113** Wissenschaftler:innen

**32** Nichtwissenschaftler:innen

**7** Studentische Hilfskräfte

**1** Wissenschaftliche Hilfskraft

## Systemnutzung

**4,928** Milliarden  
Core Stunden

**68**  
Vorträge von  
Mitarbeitenden  
des HLRS

## Forschung

**4,662** Milliarden  
Core Stunden

**131** Nutzer-Projekte **132** Nutzer-Publikationen

## Industrie

**325** Milliarden  
Core Stunden

**74** Industrielle Kunden

## Publikationen



**35** Veröffentlichungen in Fachzeitschriften, Büchern und Konferenzen

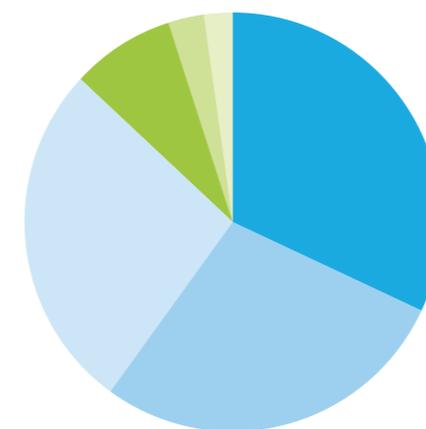
**2** Bücher

## Aus- und Weiterbildung



**784**  
Gäste am HLRS

## Drittmittel



**7.345.882 €**

# 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 der Rechenknoten:* 5.632  
*Anzahl der CPU-Kerne:* 720.896  
*Spitzenleistung:* 26 Petaflops  
*Hauptspeicherkapazität:* ~ 1.44 PB  
*Plattenspeicherkapazität:* ~ 25 PB

#### System: Apollo 6500 Gen10 Plus

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

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.



### 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

CPU: 1 × Nvidia P100

CPU 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

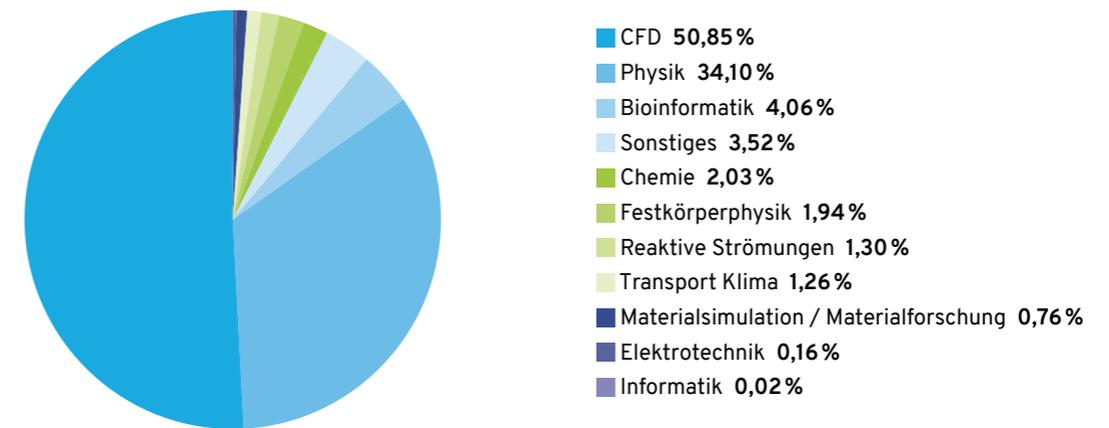
#### Interconnects

Infiniband EDR/FDR/HDR/QDR

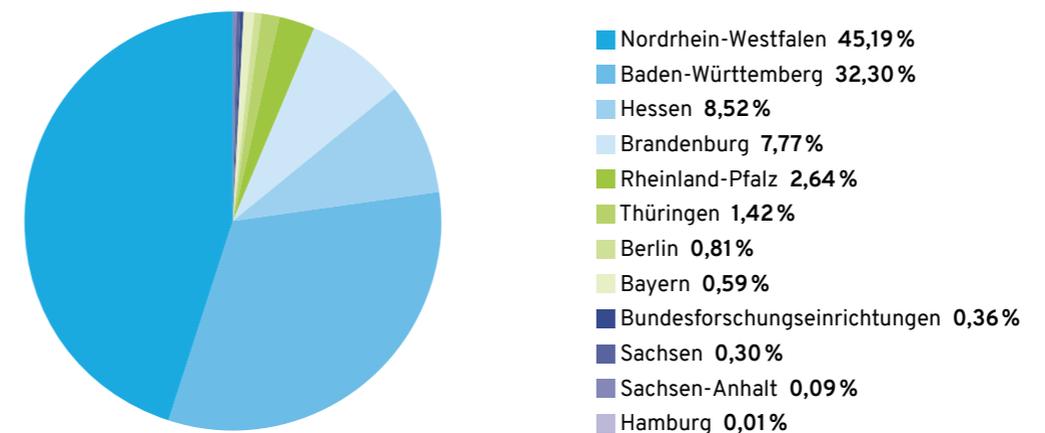
## Unsere Nutzer:innen

2023 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hawk zehn neue Forschungsprojekte („large-scale projects“: jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 3,64 Milliarden Core-Stunden. 2023 wurden auf Hawk insgesamt 131 Projekte mit 4,454 Milliarden Core-Stunden gerechnet.

### Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



### Systemnutzung nach Bundesland



# Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Zusätzlich zur Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Forschende und Ingenieur:innen aus Wissenschaft und Industrie werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS in den Bereichen Höchstleistungsrechnen, künstliche Intelligenz, Visualisierung und Höchstleistungsdatenanalyse 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 2023.

Erfahren Sie mehr über unsere aktuellen Projekte unter <https://www.hlrs.de/de/projekte>.

## 3xa

**November 2022 – Oktober 2025 BMBF**

Entwickelt skalierbare Methoden für die Simulation von Dreikörperwechselwirkungen in Partikelsystemen unter Einsatz von vektorisierenden Kernen, dynamischen Lastverteilungsansätzen und adaptiven Verfahren für die Partikeldarstellung.

## bwHPC-S5

**Juli 2018 – Januar 2026 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 (LS<sup>2</sup>DM).

## Cape Revisio

**Juli 2020 – Dezember 2023 BMVI**

Mithilfe einer Kombination aus maschinellem Lernen, Sensortechnologie, Netzwerkanalyse und virtueller Realität in digitalen Zwillingen entwickelte das HLRS Planungs- und Entscheidungshilfetools für die Analyse und Reduzierung von Konflikten zwischen Radfahrer:innen und Fußgänger:innen.

## CASTIEL 2

**Januar 2023 – Dezember 2025 JU**

Fördert die Zusammenarbeit zwischen den nationalen Kompetenzzentren von EuroCC 2 und den Exzellenzzentren der EuroHPC Joint Undertaking. Ziel ist der Aufbau von HPC-Fachwissen und die Übernahme führender Codes in ganz Europa.

## CEEC

**Januar 2023 – Dezember 2026 JU**

Das Center of Excellence in Exascale CFD wird moderne europäische Algorithmen der numerischen Strömungsmechanik verbessern, sodass sie dazu fähig sind, effizient auf Exascale-Supercomputern laufen zu können.

## ChEESE-2P

**Januar 2023 – Dezember 2026 JU**

Dieses EuroHPC JU Centre of Excellence konzentriert sich auf kritische Anwendungen für die Vorhersage von Georisiken und soll zu einem zentralen Knotenpunkt für HPC-Software innerhalb der Solid Earth Community werden.

## 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.

## DECICE

**Dezember 2022 – November 2025 EU**

Entwickelt ein offenes und portables Cloud-Management-Framework, das die automatische und adaptive Optimierung von Softwareanwendungen für heterogene Rechnerarchitekturen ermöglicht.

## DEGREE

**Juni 2021 – April 2024 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.

## EE-HPC

**September 2022 – August 2025 BMBF**

Testet einen Ansatz zur Verbesserung der Energieeffizienz von HPC-Systemen durch die automatische, jobspezifische Regulierung von Systemparametern und -einstellungen.

## ENRICH

**April 2021 – März 2023 UM**

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

## EuroCC 2

**Januar 2023 – Dezember 2025 EU**

Das von der EuroHPC Joint Undertaking unterstützte Vorhaben koordiniert ein europäisches Netzwerk nationaler Kompetenzzentren (NCC) für Höchstleistungsrechnen (HPC) und verwandten Technologien.

Es fördert ein gemeinsames Niveau von Kompetenzen über die teilnehmenden Länder hinweg.

## EuroHyPerCon

**Oktober 2023 – Juni 2024 EU**

EuroHyPerCon zielt darauf ab, die Zukunft des HPC in Europa zu gestalten, indem es eine langfristige Hyperkonnektivitätsspezifikation und einen Implementierungsfahrplan festlegt, um die künftigen Anforderungen Europas an Ultrahochgeschwindigkeitsnetze zu erfüllen.

## 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 P2

**Januar 2023 – Dezember 2026 JU**

EXCELLERAT P2 entwickelt fortschrittliche Anwendungen für die Technik in den Bereichen Fertigung, Energie, Luft- und Raumfahrt sowie Mobilität und konzentriert sich dabei auf Anwendungsfälle, die die Bedeutung von HPC, HPDA und KI für die europäische Wettbewerbsfähigkeit aufzeigen.

## FF4EuroHPC

**September 2020 – Oktober 2023 EU, JU**

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

## Gaia-X4ICM

**Mai 2022 – Dezember 2024 MWK, ICM**

Das Ziel von Gaia-X4ICM ist eine skalierende Produktionsplattform auf Basis des Gaia-X Ökosystems für den InnovationsCampus Mobilität der Zukunft (ICM) zu realisieren, um Gaia-X für die Produktion nutzbar zu machen.

■ Neues Projekt ■ Zuschuss bewilligt, Beginn im Jahr 2024

Abkürzungen Förderorganisationen

BMBF – Bundesministerium für Bildung und Forschung | BMVI – Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur | BMWi – Bundesministerium für Wirtschaft und Energie | CZS – Carl-Zeiss-Stiftung | DBU – Deutsche Bundesstiftung Umwelt | DFG – Deutsche Forschungsgemeinschaft | EC – European Commission | EU – European Union | ICM – InnovationsCampus Mobilität der Zukunft | JU – EuroHPC Joint Undertaking | 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

## HANAMI ■

**März 2024 – Februar 2027** JU

HANAMI fördert die Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan bei der Entwicklung von Anwendungen für künftige Generationen von Supercomputern.

## HiDALGO 2 ■

**Januar 2023 – Dezember 2026** BMBF, JU

HiDALGO2 befasst sich mit den Auswirkungen des Klimawandels und widmet sich dabei technischen Fragen über die Skalierbarkeit von HPC- und KI-Infrastrukturen. Zudem werden Methoden der numerischen Strömungsmechanik und der Unsicherheitsanalyse eingesetzt.

## HPC SPECTRA ■

**Januar 2024 – Dezember 2025** JU, EU

HPC SPECTRA fördert die Entwicklung von HPC-Fachwissen in Europa. Das Projektteam baut eine umfangreiche Online-Plattform mit Schulungsangeboten auf, die es Interessierten erleichtert, ihren Bedürfnissen entsprechende Kurse zu finden.

## IKILeUS

**Dezember 2021 – November 2024** BMBF

Das HLRS koordiniert dieses Projekt zur Integration von Themen der KI in die Lehrpläne der Universität Stuttgart und zur Implementierung von KI-Technologien zwecks Verbesserung der Lehre.

## InHPC-DE

**November 2017 – Juni 2024** BMBF

InHPC-DE treibt das Bündnis der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren voran, adressiert neue Anforderungen wie Sicherheit und evaluiert das Gaia-X-Ökosystem für Höchstleistungsrechnen.

## Inno4scale ■

**Juli 2023 – März 2025** JU

Inno4scale unterstützt und fördert die Entwicklung fortschrittlicher Algorithmen und Anwendungen für künftige europäische Exascale-Systeme.

## KI-Allianz BW ■

**August 2023 – März 2026** MWK

Die KI-Allianz hat das Ziel, eine Datenplattform für den KI-relevanten Datenaustausch zwischen akademischen und industriellen Akteuren zu entwickeln.

## KoLabBW

**März 2021 – Dezember 2024** MWK

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

## MERIDIONAL

**Oktober 2022 – September 2026** EU

Entwickelt Ansätze zur Bewertung der Leistung und der Belastungen von Windenergieanlagen an Land, auf See und in der Luft.

## NFDI4Cat

**Oktober 2020 – September 2025** DFG

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

## ORCHESTRA

**Dezember 2020 – November 2024** EU

Schafft eine vernetzte Datentransferplattform, die den Aufbau einer umfassenden pan-europäischen Kohorte ermöglicht, wodurch die Forschung und Maßnahmen zur Bewältigung der SARS-CoV-2-Pandemie verbessert und ein Modell für künftige Gesundheitsbedrohungen entwickelt wird.

## S+T+ARTS AIR ■

**April 2023 – September 2024** EC, MWK

S+T+ARTS AIR ermöglicht mithilfe von Supercomputing-Technologien und -Fachwissen innovative Kooperationen zwischen Kunst, Wissenschaft und Technologie.

## SDC4Lit

**Mai 2019 – April 2023** MWK

Organisierte als Wissenschaftsdatenzentrum für Literatur und interdisziplinäres Forschungsprojekt

nachhaltig den Datenlebenszyklus digitaler Literatur. Die daraus resultierende Infrastruktur wird zu einer Datenablage und Forschungsplattform für digitale Geisteswissenschaften.

## SEQUOIA End-to-End ■

**Januar 2023 – März 2024** WAT

Das SEQUOIA End-to-End Projekt zielt darauf ab, transparente, automatisierte und kontrollierbare End-to-End-Lösungen für den industriellen Einsatz von hybriden Quantenanwendungen und -algorithmen durch ganzheitliches Quanten-Software-Engineering zu entwickeln.

## SERRANO

**Januar 2021 – Dezember 2023** EU

Ziel war es, ein neuartiges Ökosystem cloudbasierter Technologien einzuführen, das von spezialisierten Hardwareressourcen bis hin zu Software-Tools reicht, um eine anwendungsspezifische Dienstinstanziierung und optimale kundenspezifische Anpassung zu ermöglichen.

## SimTech

**Juli 2023 – Juni 2025** DFG

Dieser fachübergreifende Exzellenzcluster an der Universität Stuttgart entwickelte Simulationstechnologien, um eine integrative Systemwissenschaft zu ermöglichen. Das HLRS unterstützte die Entwicklung effizienter Methoden zur Quantifizierung und zum Management von Unsicherheiten.

## 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.

## SRI DiTeNS ■

**April 2023 – März 2029** CZS

Erforscht, wie sich mithilfe von urbanen digitalen Zwillingen – auf der Grundlage von virtueller Realität – ein diskursiver Transformationsprozess mit den Stakeholdern in der Energieversorgung gestalten lässt.

## TargetDART

**Oktober 2022 – September 2025** BMBF

Erarbeitet einen Task-basierten Ansatz für hochskalierbare Simulationssoftware, der auf heterogenen Exascale-Systemen unvorhersagbare Lastungleichgewichte mittels dynamisch adaptiver und reaktiver Verteilung von Rechenaufgaben zwischen den Rechenknoten ausgleicht.

## TOPIO

**November 2022 – Oktober 2025** BMBF

Mithilfe eines globalen, hochauflösenden Modells des Erdsystems untersucht TOPIO die Lese- und Schreibgeschwindigkeiten für große Datenmengen auf Höchstleistungsdateisystemen sowie Ansätze, die die Datenmenge durch Komprimierung reduzieren, ohne dass dabei ein erheblicher Informationsverlust entsteht.

## Trust in Information

**August 2020 – Juni 2024** MWK

Entwickelt als multidisziplinäres Forschungsprojekt, das von der Abteilung für Philosophie am HLRS geleitet wird, Methoden, die die Vertrauenswürdigkeit von Computerwissenschaften bewerten und die Verbreitung von Fehlinformationen begrenzen können.

## WindHPC

**Oktober 2022 – September 2025** BMBF

Als erstes Projekt, das Computer in Windparks mit einem HPC-Zentrum verbindet, zielt WindHPC darauf ab, den Energieverbrauch durch die Verbesserung der Effizienz von Simulationscodes, HPC-Workflows und Datenmanagement zu senken.

# HPC Fort- und Weiterbildung in 2023

2023 bot das HLRS 41 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprachen. Die Kurse fanden an 161 Tagen online und in Stuttgart und in Zusammenarbeit mit Instituten in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 1.154 Interessierte an den Kursen teil.

Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website: [www.hlrs.de/training](http://www.hlrs.de/training)

Datum	Ort	Thema	Veranstalter
■ 23. Jan–24. Feb	online/gemischt	HPC-Cluster – Auslegung, Kosten & Nachhaltigkeit	HLRS (SCA)
■ 13.–17. Feb	online	Fortran for Scientific Computing	HLRS
■ 20.–24. Feb	online	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS/DLR
■ 7.–10. März	online	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
■ 13.–17. März	Stuttgart	CFD with OpenFOAM	HLRS
■ 20.–24. März	Stuttgart	Iterative Solvers and Parallelization	HLRS
■ 27.–31. März	Dresden	Parallel Programming with MPI & OpenMP and Tools	ZIH/HLRS
■ 11.–14. Apr	Mainz	Parallelization with MPI and OpenMP	ZDV/HLRS
■ 17.–18. Apr	online	AI for Science Bootcamp *	NVIDIA/HLRS/JSC/LRZ/VSC
■ 17. Apr–15. Mai	online/blended	Datenmanagement	HLRS (SCA)
■ 24. Apr–5. Mai	online/blended	Paralleles Programmieren mit OpenMP	HLRS (SCA)
■ 26.–27. Apr	online	NVIDIA/HLRS SciML GPU Bootcamp	HLRS/NVIDIA
■ 9.–12. Mai	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
■ 15.–16. Mai	online	N-Ways to GPU Programming Bootcamp *	NVIDIA/HLRS/LRZ/JSC/VSC
■ 22.–26. Mai	Stuttgart/online	Optimization of Node-level Performance and Scaling on Hawk	HLRS
■ 5.–7. Jun	online	From Machine Learning to Deep Learning: a concise introduction	HLRS
■ 5. Jun–17. Jul	online/blended	HPC-Cluster – Aufbau & Betrieb	HLRS (SCA)
■ 12.–13. Jun	online	Efficient Parallel Programming with GASPI	HLRS/Fraunhofer-ITWM
■ 12.–14. Jun	online	Data analytics for engineering data using machine learning	Fraunhofer-SCAI/HLRS
■ 15.–16. Jun	online	Introduction to NEC SX-Aurora TSUBASA vector platform	HLRS/NEC
■ 19.–23. Jun	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing	HLRS
■ 27.–30. Jun	online	Node-Level Performance Engineering	HLRS/NHR@FAU
■ 4.–7. Jul	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
■ 11.–13. Jul	Stuttgart	Deep Learning and GPU programming using OpenACC <sup>NEU</sup>	HLRS/LRZ
■ 26.–28. Jul	Stuttgart	Summer School: Trust and Machine Learning <sup>NEU</sup>	HLRS
■ 16.–24. Aug	online	Six-day course in parallel programming with MPI/OpenMP	ETH/HLRS

Datum	Ort	Thema	Veranstalter
■ 11. Sep–13. Okt	online/blended	Performance Optimierung – Kommunikation	HLRS (SCA)
■ 13.–15. Sep	online	Introduction to oneAPI, SYCL2020 and OpenMP offloading *	HLRS/INTEL
■ 18.–22. Sep	Stuttgart	CFD with OpenFOAM	HLRS
■ 25.–28. Sep	online	AMD Instinct GPU Training <sup>NEU</sup>	HLRS/AMD
■ 25.–29. Sep	Stuttgart	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS/DLR
■ 25. Sep–27. Okt	online/blended	Linguistische Datenverarbeitung & Zeitreihenvorhersage	HLRS (SCA)
■ 9.–10. Okt	Stuttgart	Scientific Visualization	HLRS
■ 16.–20. Okt	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (with TtT)	HLRS
■ 23.–27. Okt	Stuttgart	Julia for High-Performance Computing	HLRS
■ 30. Okt–4. Dez	online/blended	Datenanalyse mit HPC	HLRS (SCA)
■ 6.–10. Nov	Stuttgart/online	Optimization of Scaling, I/O and Node-level Performance on Hawk	HLRS
■ 21.–24. Nov	Stuttgart/online	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
■ 27.–30. Nov	online	Advanced parallel programming with MPI and OpenMP (online)	JSC/HLRS
■ 4.–7. Dez	online	Introduction to GPU Programming using CUDA <sup>NEU</sup>	HLRS
■ 11.–15. Dez	Stuttgart/online	Fortran for Scientific Computing	HLRS

- Paralleles Programmieren
- Numerische Strömungsmechanik
- Performance Optimierung und Debugging
- Data in HPC, Deep Learning, Machine Learning and AI
- Programmiersprachen für wissenschaftliches Rechnen
- Wissenschaftliche Visualisierung
- HPC-Cluster: Nutzung und Betrieb
- Community- und bereichsspezifische Inhalte
- GPU Programmierung

\*EuroCC 2 Kurse: Das HLRS ist Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing (GCS). EuroCC@GCS ist das deutsche nationale Kompetenzzentrum (NCC) für High-Performance Computing. Dieser Kurs wird im Rahmen von EuroCC 2 angeboten.

TtT: Train the Trainer Kurse | NEU: Neuer oder erheblich geänderter Kurs

#### Institute Abbreviations

AMD – Advanced Micro Devices, Inc. | DLR – Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt | ETH – Scientific IT Services, ETH Zürich | F. ITWM – Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik | F. SCAI – Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen | HLRS (SCA) – Supercomputing Academy des HLRS | INTEL – Intel Corporation | JSC – Jülich Supercomputing Centre | LRZ – Leibniz Rechenzentrum | NEC – Nippon Electric Company | NHR@FAU – Erlangen National High Performance Computing Center | NVIDIA – Nvidia Corporation | VSC Vienna – Vienna Scientific Cluster | ZDV – Zentrum für Datenverarbeitung (Universität Mainz) | ZIH – Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (TU Dresden)

# Workshops und Konferenzen in 2023

## 29. März Höchstleistungsrechnen im Krisenfall

In dieser an Behörden gerichteten Veranstaltung stellte das HLRS Fallstudien vor, die zeigten, wie HPC und KI Krisenmanagement und die Bewältigung globaler Herausforderungen unterstützen können.

## 31. März Abschlussveranstaltung: Projekt ENRICH

Auf dieser Abschlussveranstaltung wurden die Ergebnisse eines zweijährigen Forschungsprojekts vorgestellt, das Entwicklungen im Bereich der Informationstechnologien und der Rechenzentren auf Ressourceneffizienz und deren Nachhaltigkeitspotential untersucht.

## 13.-14. April 35. Workshop on Sustained Simulation Performance

Dieser in Zusammenarbeit mit NEC organisierte Workshop vereinte internationale Wissenschaftler:innen, Anwendungsentwickler:innen und Hardware-Designer:innen miteinander. Hardware-Architekturen, Programmierstile und Strategien zur Erreichung der höchstmöglichen Anwendungsleistung wurden diskutiert.

## 17. Juli Erklären, verstehen, optimieren: Die Rolle der KI im Höchstleistungsrechnen

CIRCE hat einen digitalen Workshop organisiert, in dem sowohl grundlegende Techniken zur Erklärbarkeit von KI-Modellen als auch Möglichkeiten aufgezeigt wurden, wie sich KI für Simulationen einsetzen lässt.

## 26.-28. Juli Trust and Machine Learning

Bei dieser dreitägigen Summer School wurden ethische, epistemische und praktische Facetten des maschinellen Lernens diskutiert. Der Fokus lag auf der Herausforderung, die Vertrauenswürdigkeit dieser Methoden zu bewerten.

## 27. September Digitaler CIRCE-Workshop

Das Projekt CIRCE prüft, welche Maßnahmen erforderlich sind, um HPC zur Unterstützung der Entscheidungsfindung in Krisensituationen verfügbar zu machen. In dem Workshop wurden die Grundlagen der Datenverarbeitung und Simulation mit HPC-Systemen beleuchtet.

## 12.-13. Oktober 26. Results and Review Workshop

Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen präsentierten Forschungsergebnisse und diskutierten Best Practices beim Einsatz von HPC-Systemen.

## 18.-19. Oktober HPC Industry Summit

Diese Konferenz stellte Erfolgsgeschichten vor, in denen Simulation, KI und Höchstleistungsdatenanalyse zu bahnbrechenden Innovationen führten, Prozesse rationalisieren und die Produktivität in KMUs maximieren konnten.

## 8. November 50 Jahre der Wissenschaftlichen Zusammenarbeit

Diese internationale wissenschaftliche Konferenz wurde anlässlich des Jubiläums der Partnerschaft zwischen der Universität Stuttgart und der ukrainischen Nationalen Technischen Universität Donezk (DonNTU) veranstaltet.

## 27.-28. November CapeReviso Abschluss-symposium

Das Projekt CapeReviso entwickelte digitale Methoden für die Reduzierung von Konflikten zwischen Radfahrer:innen und Fußgänger:innen in Städten. Auf diesem Symposium stellten die Forschungspartner ihre Ergebnisse vor.

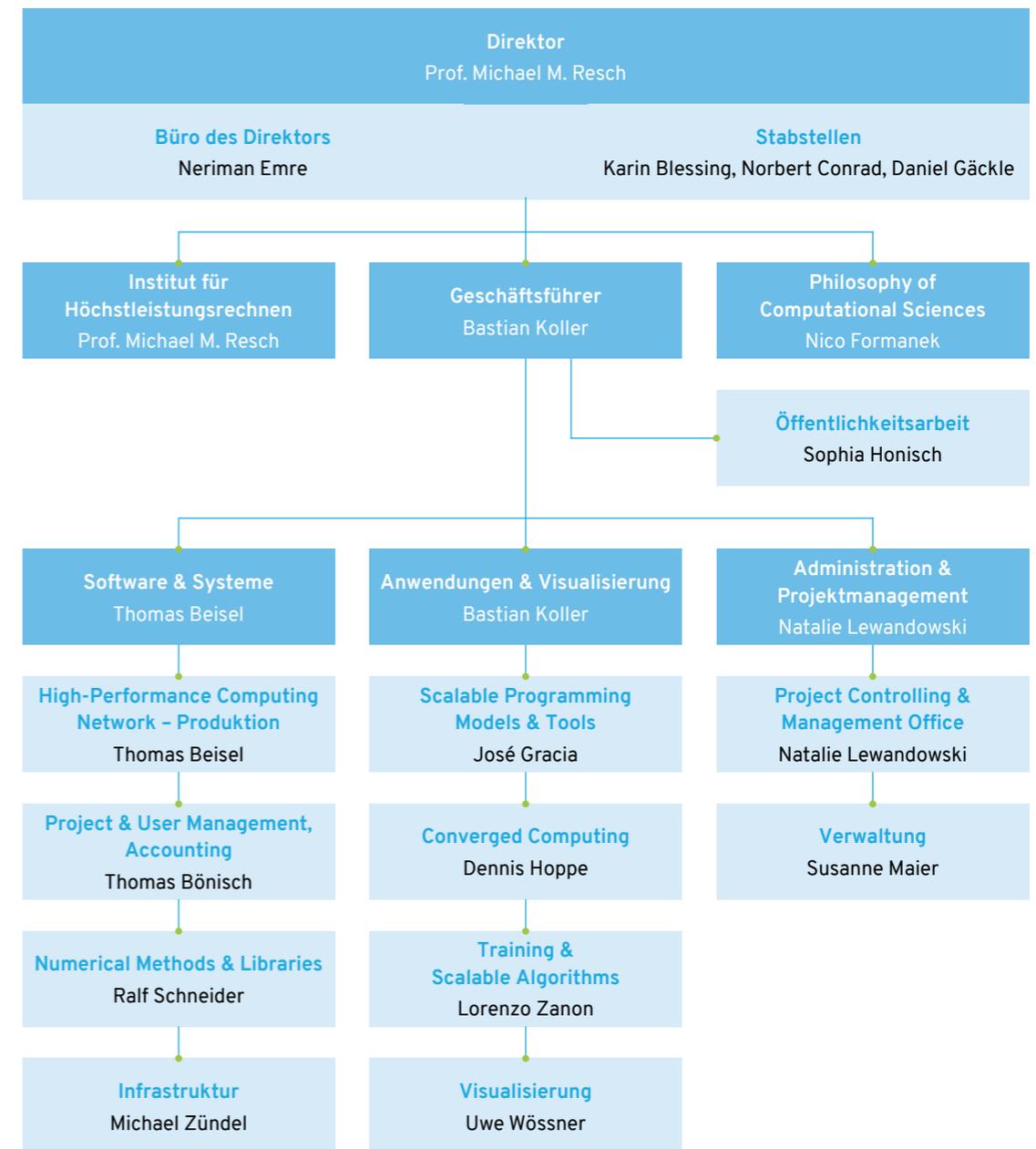
## 30. November-1. Dezember SAS23 - Reliability or Trustworthiness?

Obwohl Vertrauen in Debatten über KI zu einem zentralen Thema geworden ist, hat die Philosophie des Vertrauens unterschiedliche Vorstellungen davon entwickelt, was dies bedeutet. Auf dieser Konferenz wurde untersucht, ob Zuverlässigkeit oder Vertrauenswürdigkeit das Ziel von KI und Simulationsmodellen sein sollte.

## 5. Dezember 7. Industrial HPC User Round Table (iHURT)

Das jährliche iHURT-Treffen förderte den Austausch zwischen dem HLRS und seinen Industrienutzer:innen. Der Fokus lag auf innovativen HPC-Anwendungen sowie auf den Herausforderungen, vor denen HPC-Nutzer aus der Industrie stehen.

# Organigramm



# Organisation

## Verwaltung

Leitung: *Susanne Maier*

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.

## Converged Computing

Leitung: *Dennis Hoppe*

Die Arbeitsgruppe erforscht die Konvergenz von künstlicher Intelligenz (KI), Cloud-, Edge- und Quantencomputing mit Höchstleistungsrechnen (HPC). Ziel ist es, HPC für neue Anwendungsdomänen zugänglicher zu machen, indem traditionelle Betriebsmodelle überdacht und nahtlose Workflows entlang des gesamten Computing-Kontinuums ermöglicht werden. Diese Integration ermöglicht hybride HPC/KI-Workflows, die klassische Simulationen mit KI-Techniken kombinieren, einschließlich Big Data, maschinelles Lernen und Deep Learning. Darüber hinaus arbeitet die Abteilung daran, die Hürden bei der Nutzung von Höchstleistungsrechnern zu senken und das HPC-Ökosystem durch den Einsatz von Virtualisierungstechnologien wie Container, Workflow-Orchestratoren und intelligenten Schedulingalgorithmen für neue Anwendungsgruppe zu öffnen. In diesem Rahmen haben wir eine langjährige Expertise im Betrieb von dynamischer, skalierbarer und föderierter Cloud-Computing-Lösungen wie Gaia-X entwickelt.

## 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: *Michael Zündel*

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: *Nico Formanek*

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 das Accounting 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 Hauptanlaufstelle 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.

## Training and Scalable Algorithms

Leitung: *Dr.-Ing. Lorenzo Zanon*

Die Abteilung Training and Scalable Algorithms (TASC) 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 möchte das TASC-Team eine exzellente Lernerfahrung ermöglichen, indem es Schulungen zu relevanten Themen mit aktuellen und zielgruppengerechten Inhalten anbietet, die von hochqualifizierten Dozent:innen durchgeführt werden.

## Visualisation

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 Anwender:innen die direkte Interaktion mit ihnen, wodurch die Analysezeit verringert und neue Arten von Entwicklungsprozessen ermöglicht werden. Die Abteilung entwickelt Tools für die Visualisierung in Virtual Reality, Augmented Reality und hat darüber hinaus Softwaresysteme entwickelt, um Verarbeitungsschritte, die über mehrere Hardwareplattformen verteilt sind, in eine nahtlos verteilte Simulations- und Visualisierungsumgebung zu integrieren.

Mithilfe von Höchstleistungsrechnern erhalten Ingenieur:innen hochauflösende Erkenntnisse darüber, wie Wasser durch eine Pumpe fließt. Dadurch gelangen sie schneller zu effizienteren Produkten.

© 2024

#### Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Universität Stuttgart  
Nobelstraße 19  
70569 Stuttgart, Deutschland

Tel: +49 711 685-87269  
Fax: +49 711 685-87209  
Email: [info@hlrs.de](mailto:info@hlrs.de)  
Web: [www.hlrs.de](http://www.hlrs.de)

#### Direktor, HLRS

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

#### Leitung, Öffentlichkeitsarbeit

Sophia Honisch

#### Redaktion

Christopher M. Williams

#### Übersetzung

Sophia Honisch

#### Fotos und Abbildungen

Bildrechte aller nicht gekennzeichneten Bilder: HLRS  
S. 8 ©HLRS/generiert mit Firefly von Groothuis; S.12 Foto mit freundlicher Genehmigung von Xiang Xu; S.13 Foto mit freundlicher Genehmigung von Bernhard Weigand; S.14 Foto mit freundlicher Genehmigung von Wolfgang Schröder; S.15 Foto mit freundlicher Genehmigung von Matthias Ibach; S.16 Birk Heilmeyer und Frenzel Architekten; S.20 Fusion Medical Information / Unsplash; S.22 National Supercomputer Center in Guangzhou; S.24 Soft-Sim Consult; S.26 Sandra Ritschel; S.28 Florian Steciuk / Unsplash; S.30 Foto mit freundlicher Genehmigung von Andrea Beck; S.36 Yüksel Patir; S.38–39 IAG, Universität Stuttgart; S.40 stock.adobe.com / Christian; S.42, 43 Karlsruher Institut für Technologie; S.45–46 TU Berlin; S.47, 48, 50 Universität Helsinki; S.59 Springer Verlag

#### Druck

gutenberg beuys, Feindruckerei GmbH, Langenhagen

#### Design

GROOTHUIS. Gesellschaft der Ideen und Passionen mbH  
für Kommunikation und Medien, Marketing und Gestaltung;  
[groothuis.de](http://groothuis.de)

#### Institutionelle Zugehörigkeit



#### Hawk wird gefördert von:



Dieses Magazin wurde klimaneutral auf Papier gedruckt,  
das nach dem FSC® Standard zertifiziert ist.



Folgen Sie uns auf:



LinkedIn



X (Twitter)

**Höchstleistungsrechenzentrum  
Stuttgart**

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

Cover:

Zwei am HLRS entwickelte digitale Zwillinge unterstützten Junkers Aircraft und Kasaero GmbH bei der Gestaltung einer modernisierten Version des kultigen Flugzeugs A50 Junior, und das Energieunternehmen EnBW bei der Planung und dem laufenden Bau eines neuen Pumpspeicherkraftwerks im Schwarzwald.

Das HLRS ist für sein Umweltmanagement nach dem Eco-Management Audit Scheme (EMAS) zertifiziert. Dieses Magazin wurde klimaneutral auf Papier gedruckt, das mit dem FSC® zertifiziert wurde.