

Die Zukunft der
KI mitgestalten

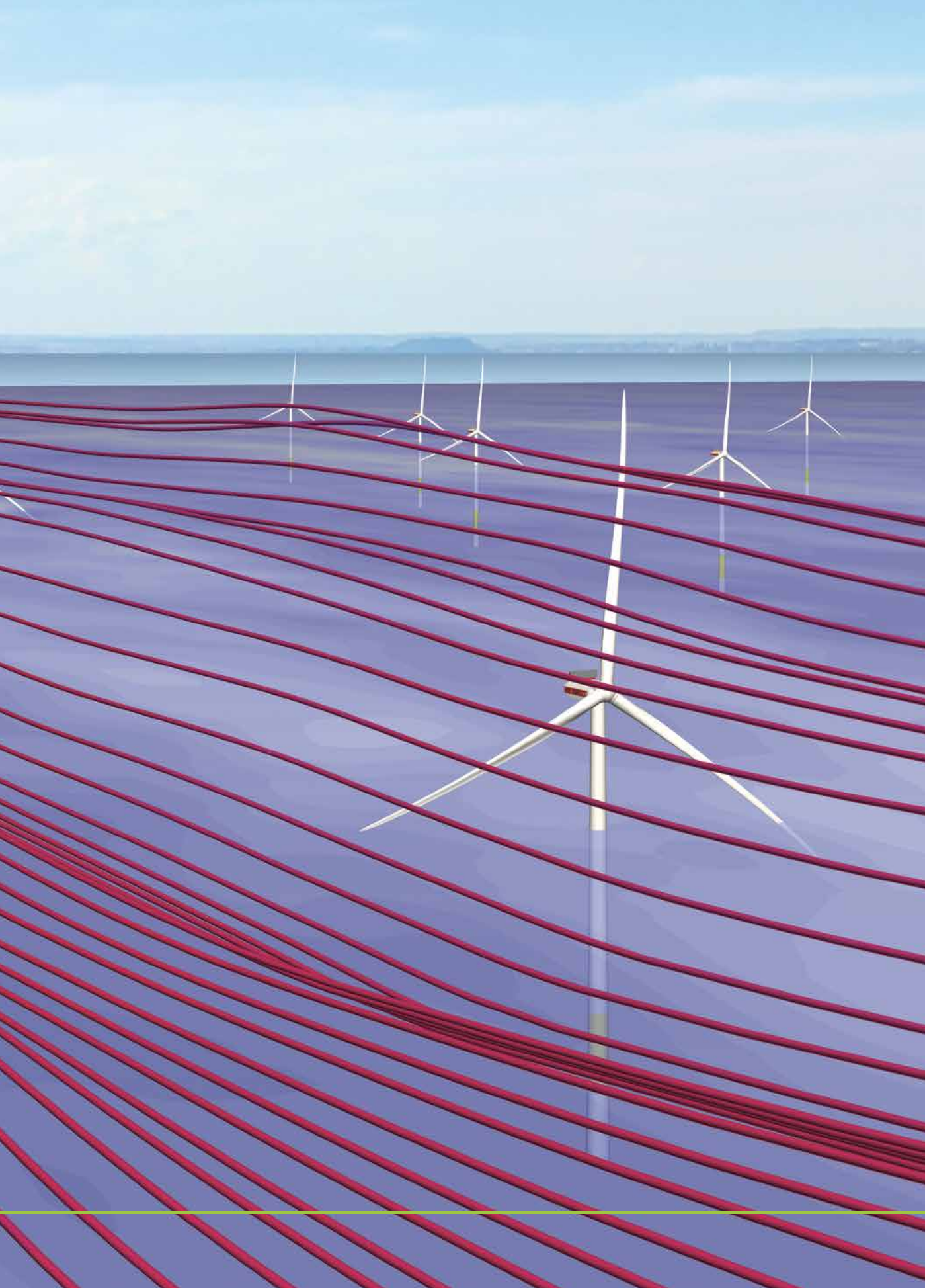
H L R I S

High-Performance Computing Center Stuttgart



2024/25

Jahresbericht

A photograph of an offshore wind farm. In the foreground, numerous thick red power cables run diagonally across the frame. In the background, several white wind turbines are visible on a calm sea under a clear blue sky.

2024/25

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.

Grußwort

Director's Welcome



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

Herzlich willkommen zum Jahresbericht 2024/25 des Höchstleistungsrechenzentrums der Universität Stuttgart (HLRS), in dem wir Ihnen die Höhepunkte eines spannenden und erfolgreichen Jahres für das Zentrum, unsere Nutzergemeinschaft und unsere Partner zeigen.

Getrieben von den aktuellen Entwicklungen im Höchstleistungsrechnen (HPC) begann im Jahr 2024 eine Übergangszeit für das HLRS, u.a. mit der Anlieferung und Installation von Hunter, unserem neuen Supercomputer. Hunter wird von Hewlett Packard Enterprise hergestellt und ist sehr wichtig für das HLRS. Es geht weg von CPU-basierten Architekturen und hin zu einem System, das auf der Accelerated Processing Unit (APU) von AMD basiert, die dank des engen Zusammenspiels zwischen CPUs und GPU-Beschleunigern eine höhere Leistung und bessere Energieeffizienz bietet. Eine der wichtigsten Aktivitäten im Jahr 2024 war die Unter-

Welcome to the 2024/25 Annual Report of the High-Performance Computing Center of the University of Stuttgart (HLRS). It is our pleasure to present the highlights of an exciting and successful year for the center, our user community, and our partners.

Driven by recent advances in high-performance computing (HPC), 2024 was an important transitional year for HLRS. One reason was the installation of Hunter, our newest flagship supercomputer. Manufactured by Hewlett Packard Enterprise, Hunter is a particularly important system for HLRS. It moves away from our longtime operation of CPU-based architectures to one based on AMD's accelerated processing unit (APU), which offers higher performance and greater energy efficiency by closely integrating CPUs and GPU accelerators. A key activity in 2024 involved supporting longtime users of HLRS's systems in porting their codes to GPUs. Helping

stützung langjähriger System-Nutzer:innen bei der Portierung ihrer Codes von CPUs auf GPUs. Hunter als Übergangssystem bereitet unsere Nutzer:innen darauf vor, später das gesamte Potenzial von Herder, unserem kommenden Supercomputer auszuschöpfen. Bei seinem Einzug im Jahr 2027 wird Herder einen großen Leistungssprung bieten.

Seit 2024 erweitert das HLRS seine langjährige Expertise in numerischen Simulationen um Kompetenzen in künstlicher Intelligenz und erschließt damit zusätzliche Anwendungsmöglichkeiten. So koordiniert das HLRS Deutschlands erste AI Factory HammerHAI, die von der EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) gefördert wird. Aufbauend auf unserer Expertise mit HPC für Industrie, Ingenieurwesen und globale Herausforderungen wird HammerHAI einen KI-optimierten EuroHPC JU-Supercomputer am HLRS installieren und Lösungen, Ressourcen, Services sowie Schulungsmöglichkeiten anbieten, die die Hürden für Industrie und Forschung bei der Nutzung von KI abbauen werden. Wir freuen uns sehr, dass wir in HammerHAI mit Partnern des Leibniz-Rechenzentrums, des Karlsruher Instituts für Technologie, der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen und SICOS BW zusammenarbeiten und dass unsere Partner des Gauss Centre for Supercomputing am Jülich Supercomputing Centre den Zuschlag für die zweite deutsche AI Factory JAIF erhalten haben. Gemeinsam werden wir die Infrastruktur und das Fachwissen schaffen, damit Deutschland und Europa in dieser sich rasch entwickelnden technologischen Landschaft global wettbewerbsfähig bleiben.

Ein Sonderteil dieses Jahresberichts widmet sich der Frage, wie sich Höchstleistungsrechenzentren seit dem Aufkommen der künstlichen Intelligenz weiterentwickeln. Über HammerHAI hinaus geht es u.a. um das Stuttgarter KI-Beratungsunternehmen Seedbox.ai, das bereits vor der offiziellen Einweihung von Hunter begann, große Sprachmodelle auf dem System zu trainieren. Als Teil unserer Partnerschaft mit Seedbox.ai entwickeln wir gemeinsam ein umfassendes Portfolio an Wissen und Services, um die Entwicklung und Skalierung von KI-Anwendungen zu unterstützen. Außerdem bietet die Zusammenarbeit ein strategisches Modell zur

them to optimize codes for the new architecture will continue to be a high priority in 2025. With Hunter serving as a "stepping-stone" system, this will put our users in an ideal position to fully leverage the possibilities of Herder, which will offer a major leap in performance when it arrives in 2027.

In another significant transition in 2024, HLRS expanded on its traditional emphasis on numerical simulation by moving boldly into the field of artificial intelligence. This included coordinating a successful proposal to the EuroHPC Joint Undertaking to establish HammerHAI, Germany's first "AI Factory." Building on HLRS's expertise in HPC for industry, engineering, and global challenges, HammerHAI will install a large-scale, AI-optimized EuroHPC JU supercomputer at HLRS, and establish a comprehensive suite of solutions, resources, and training opportunities that will lower the barriers that industry and research currently face in using artificial intelligence. We are very pleased to collaborate on HammerHAI with partners at the Leibniz Supercomputing Centre, Karlsruhe Institute of Technology, Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung Göttingen, and SICOS BW, and that our Gauss Centre for Supercomputing partners at the Jülich Supercomputing Centre will host a second German AI factory, called JAIF. Together, our efforts will establish infrastructure and expertise that Germany and Europe will need to remain globally competitive in a rapidly evolving technological landscape.

In light of these developments, a special feature section in this Annual Report focuses on how high-performance computing centers are evolving with the rise of artificial intelligence. In addition to providing more information about HammerHAI, we report on Stuttgart-based AI consultancy Seedbox.ai, who began training large language models on Hunter even before its inauguration. Our partnership with Seedbox.ai is helping HLRS to develop a comprehensive portfolio of knowledge and services to support the development and scaling of AI applications, and offers a strategically relevant model for promoting AI-based innovation in accordance with the goals and requirements of the European AI Act. These pages also include an interview

Förderung von KI-basierten Innovationen im Einklang mit den Zielen und Anforderungen des Europäischen KI-Gesetzes. Auf diesen Seiten finden Sie ein Interview mit einem langjährigen Partner des HLRS, Dr. Guy Lonsdale von der scapos AG. Guy Lonsdale befürwortet HPC in kleinen und mittleren Unternehmen (KMU) und erklärt, wie FFplus, die aktuelle Förderphase der Fortissimo-Reihe, die Entwicklung von KI-Anwendungen in europäischen KMU und Start-ups unterstützt.

Seit seiner Gründung unterstützt das HLRS die Industrie mit HPC-Leistung. Mit mehr als 70 Industriekunden stellen wir weiterhin Infrastrukturen für Unternehmen bereit. Ein Highlight in diesem Jahr war die Unterzeichnung einer formellen Partnerschaft mit TRUMPF, einem weltweit führenden Unternehmen für hochpräzise Lasertechnologien in der Fertigung. In Zusammenarbeit mit dem Media Solution Center Baden-Württemberg wandte sich auch MACK Research (eine Ausgründung des Betreibers des Europa-Parks) an das HLRS, um seine Expertise und Technologien für Visualisierung und Simulation zu nutzen. In diesem Bericht können Sie auch erfahren, wie das Dresdner KMU hydrograv GmbH mithilfe des HLRS strömungstechnische Simulationen für die Wasserwirtschaft umsetzt. Hydrograv ist ein gutes Beispiel dafür, wie HPC die Nachhaltigkeit in Städten und Gemeinden verbessern kann.

Als öffentlich gefördertes Höchstleistungsrechenzentrum evaluiert das HLRS verstärkt, an welchen Stellen öffentliche Einrichtungen von HPC-Anwendungen profitieren können. Im Juni organisierten wir eine Konferenz in Berlin, auf der wir die Ergebnisse unseres Projekts CIRCE vorstellten. Dieses befasste sich damit, wie Simulationen Naturkatastrophen wie Überschwemmungen oder Waldbrände verhindern oder bewältigen können. Im Jahr 2024 begann außerdem unsere Zusammenarbeit mit dem Landkreis Ludwigsburg, bei der ein digitaler Zwilling der Neckarterrassen die Planungs- und Naturschutzbemühungen unterstützen wird. Erfreulich war auch die rege Teilnahme an unserer Veranstaltung „Science Goes Society“ in Sersheim, bei der Vertreter:innen aus Kommunen der Region Strategien für den Umgang mit dem Klimawandel auf lokaler Ebene diskutierten.

with HLRS's longtime partner Guy Lonsdale of scapos AG. An enthusiastic advocate for HPC in small and medium-sized enterprises (SMEs), Guy explains how the latest iteration of the successful Fortissimo projects, called FFplus, is supporting the development of AI applications in European SMEs and startups.

Since its founding, supporting the use of HPC in industry has been one of HLRS's key missions, and with more than 70 industrial clients we continue to provide critical infrastructure for companies large and small. This year we were particularly pleased to sign a formal partnership with TRUMPF, a global leader in high-precision laser technologies for manufacturing. In collaboration with the Media Solution Center Baden-Württemberg, MACK Research (a spinoff of the company that runs the Europa Park amusement park) also turned to HLRS for its expertise and technologies for visualization and simulation. In this Annual Report you can read about Dresden-based SME hydrograv GmbH, which has been using HLRS's supercomputer for computational fluid dynamics simulations of water treatment facilities. Hydrograv's approach is a perfect example of how HPC can improve sustainability – both environmental and economic – in cities and communities.

As a publicly funded HPC center, HLRS intensified its efforts to explore how public sector agencies could benefit from new applications of HPC. In June we organized a conference in Berlin that presented the findings of our project CIRCE, focusing on how simulation could help prevent and manage crisis situations like floods or wildfires. In 2024 we also began a collaboration with the district of Ludwigsburg in which a digital twin of our region's beloved wine-producing landscape along the Neckar River will support planning and conservation efforts. We were also pleased with the enthusiastic turnout for our "Science Goes Society" event in Sersheim, in which community representatives from across the region discussed strategies for addressing climate change at the local level.

With all of these exciting new developments, one also can't overlook HLRS's primary role of providing state-of-the-art computational infrastructure for cutting

Bei all diesen Neuigkeiten geht der zentrale Auftrag des HLRS dennoch nicht unter, nämlich die Bereitstellung einer hochmodernen Recheninfrastruktur für die Spitzenforschung. Wie die Liste wissenschaftlicher Veröffentlichungen in diesem Jahresbericht zeigt, unterstützen wir weiterhin Forschung in einem breiten Spektrum von wissenschaftlichen Disziplinen. Außerdem berichten wir ausführlicher über zwei sehr unterschiedliche Anwendungen von HPC: die Entwicklung eines neuartigen Hubschraubers von Airbus und die Identifizierung von Wirkstoffzielen für personalisierte Krebstherapien.

In einer Zeit, in der provinzieller Nationalismus weltweit auf dem Vormarsch zu sein scheint, engagiert sich das HLRS weiterhin für die internationale Zusammenarbeit. Wir freuen uns über die Teilnahme am HANAMI-Projekt, einer EU-Initiative zur Förderung der Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan, und haben neue Absichtserklärungen mit der Technischen Universität Tallinn (Estland) sowie dem Kumoh National Institute of Technology (Südkorea) unterzeichnet.

Während ich diese Zeilen im Frühjahr 2025 schreibe, ist das HLRS-Gebäude von einem Gerüst umgeben, um die Installation von Solarzellen auf dem Dach vorzubereiten. Außerdem haben die Aushubarbeiten für den Bau von HLRS III begonnen, einem neuen Gebäude und Zuhause für unseren kommenden Supercomputer Herder. Obwohl uns ein lautes und staubiges Jahr bevorsteht, freuen wir uns, dass das HLRS weiterwächst und wertvolle Aktivitäten in Wissenschaft, Industrie und im öffentlichen Sektor ermöglicht.

Im Namen des HLRS danke ich unseren Geldgebern, Partnern und Nutzern für ihre kontinuierliche Unterstützung. Das Höchstleistungsrechnen entwickelt sich ständig weiter, und wir sind dankbar dafür, diesen Weg gemeinsam zu gehen.

Mit freundlichen Grüßen



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

edge scientific research. As the publications list in this Annual Report shows, we continue to support impactful research across a wide range of scientific disciplines. We also report in more depth on two very different applications of HPC: engineering a novel helicopter being developed by Airbus, and identifying potential drug targets for personalized cancer therapies.

At a time when provincial nationalism seems to be on the rise globally, HLRS remains committed to international cooperation. We were glad to join the new HANAMI project, an EU initiative to promote scientific collaboration between Europe and Japan, and signed new memoranda of understanding with Tallinn University of Technology (Estonia) and Kumoh National Institute of Technology (South Korea).

As I write this in the spring of 2025, the HLRS building is currently surrounded in scaffolding in preparation for the installation of solar panels on our roof. Excavation has also begun in preparation for the construction of HLRS III, a new building and power plant for our next-generation supercomputer, Herder. Although we are in for a sometimes noisy and dusty year, we are excited that HLRS continues to thrive and grow, enabling numerous valuable activities in science, industry, and in the public sector.

On behalf of all of HLRS's dedicated staff, I thank our funders, partners, and user community for your continued support, creativity, and collaboration. As the field of high-performance computing continues to evolve, we remain grateful for the chance to share in this fascinating journey with you.

With best regards,

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

2	Grußwort
8	Die Zukunft der KI mitgestalten
9	Neue Kapazitäten für künstliche Intelligenz
11	HLRS koordiniert HammerHAI, Deutschlands erste „AI Factory“
13	Anwendungen von KI für Technik und Fertigung
14	KI „made in Germany“ für kleine und mittelständische Unternehmen
16	Fortissimo im Wandel: Ein Interview mit Guy Lonsdale
20	Neuigkeiten
28	Highlights
29	Hunter geht am HLRS in Betrieb
31	HLRS gewinnt Data Center Strategy Award in der Kategorie „Transformation“
32	Supercomputing für den öffentlichen Sektor
35	Professionelle Zertifizierung im Höchstleistungsrechnen
36	User Support: Portierung von Code auf GPUs
38	Strömungssimulationen senken Betriebskosten in der Wasserwirtschaft
41	Supercomputing in der Kunst
42	Simulationswissenschaften treffen Geisteswissenschaften
43	Energieeffizienteres HPC mit dynamischem Power Capping
44	User-Forschung
45	Leisere und sicherere Hubschrauber mithilfe von HPC
47	Simulationen unterstützen die Suche nach personalisierten Krebstherapien
51	Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2024
59	HLRS Bücher
60	HLRS in Zahlen
62	Über uns
63	In unserem Rechenraum
65	Unsere Nutzer:innen
66	Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
70	HPC Fort- und Weiterbildung (2024)
72	Workshops und Konferenzen (2024)
73	Organigramm
74	Organisation



Die Zukunft der KI mitgestalten

Neue Kapazitäten für künstliche Intelligenz

Neue Rechensysteme, strategische Partnerschaften und die erste „AI Factory“ Deutschlands: Das HLRS erweitert seinen traditionellen Schwerpunkt auf Simulation um weitere Felder und baut leistungsstarke KI-Lösungen für Forschung und Industrie auf.

Am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) befindet sich seit Jahrzehnten eine der leistungsfähigsten Infrastrukturen für rechnergestützte Simulationen in Europa. In so unterschiedlichen Bereichen wie Aerodynamik, Verbrennung, Molekulardynamik sowie Klima und Wetter haben die Supercomputer des HLRS bislang groß angelegte, hochauflösende, wirklichkeitsgetreue Simulationen mit numerischen Methoden ermöglicht. Diese Methoden sind sowohl für die Wissenschaft als auch für das industrielle Ingenieurwesen nach wie vor unverzichtbar. Deswegen ist die Unterstützung solcher traditionellen HPC-Anwendungen weiterhin ein zentraler Auftrag des HLRS. Gleichzeitig verändert sich die europäische Supercomputing-Welt – sie befindet sich in einer Übergangsphase, mit der zunehmende Anforderungen an moderne Höchstleistungsrechenzentren einhergehen.

Eine wichtige Triebkraft für diesen Wandel ist das Aufkommen der künstlichen Intelligenz (KI). Seit das Unternehmen OpenAI im November 2022 das große Sprachmodell ChatGPT veröffentlichte, hat sich der globale Wettbewerb um die Nutzung von KI dramatisch beschleunigt. Auch wenn die Auswirkungen der KI noch nicht genau abzusehen sind, ist schon jetzt ein neuer Reifegrad des Feldes erkennbar und Wissenschaft sowie Wirtschaft befinden sich im Wettlauf um die Nutzung der neuen Möglichkeiten. Umfangreiche Investitionen in die Infrastruktur für das Training neuronaler Netze in den Vereinigten Staaten, China und darüber hinaus sind Zeichen für das Potenzial der KI. Aktuell wird von drastischen Auswirkungen auf allen Ebenen der Gesellschaft ausgegangen.

Das HLRS steigert seine KI-Fähigkeiten

Die Entwicklung fortschrittlicher KI-Anwendungen erfordert geeignete Rechensysteme. So betreibt das HLRS seit einigen Jahren eine KI-fähige Infrastruktur und schult sein Team zu künstlicher Intelligenz. Im Jahr 2020 setzte das Zentrum erstmals ein Cray CS-Storm-System ein, das auf maschinelles Lernen für Big Data ausgelegt ist. Im Jahr 2021 wurde der Supercomputer Hawk um eine GPU-Einheit erweitert, die KI, Höchstleistungsdatenanalyse und konvergierte Rechenansätze unterstützt, die Simulation und KI kombinieren. Erste Anwender:innen testeten diese neuen Systeme und entwickelten Modelle zur Vorhersage physikalischer Eigenschaften von Metalllegierungen, nutzten KI zur Beschleunigung rechenintensiver Strömungssimulationen und erstellten sogar KI-generierte Kunstwerke.

Im Jahr 2024 hat das HLRS weitere Schritte in Richtung KI-Zukunft unternommen: Grundsätzlich steht der neue Supercomputer Hunter für einen Wechsel in der Computerarchitektur, mit der das Zentrum KI-Anwendungen verbessern wird (siehe Seite 29). Darüber hinaus ist das Zentrum Koordinator des neuen Projektkonsortiums HammerAI, das im Auftrag der EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) Deutschlands erste „AI Factory“ aufbauen wird. Ein Teil dieser AI Factory ist ein KI-optimierter Supercomputer, der am HLRS stehen wird (siehe Seite 11). Im Jahr 2024 unterzeichnete das HLRS außerdem Kollaborationsvereinbarungen mit kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMU) im Südwesten Deutschlands zur Nutzung seiner KI-Systeme. Zu den ersten Nutzern gehört das Stuttgarter KI-Beratungsunternehmen Seedbox.ai, das bereits vor



HLRS koordiniert HammerHAI, Deutschlands erste „AI Factory“

Als Teil einer Initiative der Europäischen Union zur Steigerung der Fähigkeiten und des Einsatzes von künstlicher Intelligenz wird das HLRS einen neuen KI-optimierten Supercomputer betreiben und Lösungen entwickeln, um KI für Industrie und Wissenschaft leichter zugänglich und sicherer zu machen.

der offiziellen Inbetriebnahme große Sprachmodelle auf Hunter trainierte (siehe Seite 14). Schließlich koordiniert das HLRS das neuste Projekt der erfolgreichen Fortissimo-Reihe mit dem Namen FFplus. Das Projekt fördert seit 2024 Innovationsstudien, in denen KMU KI-Anwendungen auf Supercomputern skalieren, um ihre Geschäftsziele zu erreichen (siehe Seite 16). Dank dieser und weiterer Entwicklungen hielt KI im Jahr 2024 in großem Stil Einzug am HLRS.

Türöffner für neue Nutzer:innen

Die kürzliche Installation von Hunter markiert den Beginn eines entscheidenden technischen Wandels für das HLRS. Das Zentrum hat sich von einem hauptsächlich CPU-basierten System hin zu einer Plattform mit beschleunigten Recheneinheiten (APUs) – die CPUs und GPU-Beschleuniger auf einem einzigen Chip kombinieren – bewegt. Dank dieser Veränderung lässt sich die Leistung herkömmlicher Simulationscodes steigern und auch KI-bezogene Anwendungen wie das Trainieren großer Sprachmodelle und Höchstleistungsdatenanalysen können besser unterstützt werden. Hunter bietet eine hochmoderne Infrastruktur für neuartige konvergente Workflows, die Simulation und KI miteinander kombinieren: Erste Forschungsarbeiten haben gezeigt, dass KI das Potenzial hat, traditionelle Simula-

tionsabläufe zu beschleunigen, indem sie zeitaufwändige Komponenten von Algorithmen übernimmt. Gleichzeitig könnte Simulation genutzt werden, um riesige synthetische Datensätze zu erzeugen, die zum Trainieren von KI-Modellen benötigt werden. Letztendlich könnte dies zu Ersatzmodellen traditioneller Simulationsmethoden führen, die eine vergleichbare Genauigkeit viel schneller erreichen.

Nicht nur traditionelle HPC-Nutzer:innen werden von diesen Fähigkeiten profitieren. Dank der Architektur von Hunter kann das HLRS potenziell auch neue Nutzergruppen unterstützen. In der Vergangenheit hat sich das HLRS in erster Linie auf rechnergestützte Forschung und angewandte Wissenschaft konzentriert. Mit der zunehmenden Verbreitung von KI in der Industrie und in Behörden könnte die Infrastruktur des Zentrums jedoch eine attraktive Option für neue Bereiche sein, die an einer Ausweitung ihrer KI- und Data-Science-Anwendungen interessiert sind, z.B. im Finanzwesen, in der Rechtswissenschaft oder in der Stadtplanung und -verwaltung.

Im folgenden Sonderteil beleuchten wir die aktuellen Entwicklungen am HLRS auf seinem Weg in der sich wandelnden Landschaft des Höchstleistungsrechnens.

Derzeit sehen sich Forschende und Unternehmen europaweit mit einer Reihe von Hürden konfrontiert, die die Einführung von KI-Technologien bisher eingeschränkt haben. Dazu gehören die unerschwinglichen Kosten für die Installation eigener KI-Computing-Hardware, der Mangel an KI-Fachwissen sowie Datensicherheitsbedenken, die sich aus der derzeitigen Abhängigkeit Europas von Offshore-Cloud-KI-Dienstleistern ergeben.

Für 2024 kündigte die EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) eine große Förderinitiative an, die sich dieser Herausforderungen annehmen soll. Die sogenannten „AI Factories“ werden ein starkes europaweites Netzwerk von KI-Infrastruktur und Fachwissen aufbauen.

HammerHAI (Hybrid and Advanced Machine Learning Platform for Manufacturing, Engineering, and Research) ist eine von sieben europäischen AI Factories, die im Dezember 2024 angekündigt wurden. Das Konsortium wird vom HLRS koordiniert und die Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen, das Karlsruher Institut für Technologie, das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) und SICOS BW sind als Partner daran beteiligt.

HammerHAI war die erste deutsche AI Factory aus der ersten Förderungsrunde der EuroHPC JU. Weitere sechs AI Factories wurden im März 2025 angekündigt, darunter die JUPITER AI Factory (JAIF) unter der Leitung des Forschungszentrums Jülich.

KI-Infrastruktur für Industrie und Forschung

Für Start-ups, KMU, Großunternehmen und wissenschaftliche Einrichtungen, die leistungsstarke Rechenkapazitäten benötigen, wird HammerHAI die Hürden abbauen, die bei der Entwicklung und dem Einsatz KI-gestützter Lösungen allzu oft im Weg stehen. HammerHAI wird Innovationen beschleunigen, indem es modernste Supercomputing-Infrastruktur und Fachwissen bietet, die Aus- und Weiterbildung von KI-fähigen Arbeitskräften unterstützt und ein robustes sowie sicheres Ökosystem für KI in Deutschland und Europa fördert.

Im ersten Jahr wird HammerHAI einen neuen, großen KI-optimierten Supercomputer beschaffen, den das HLRS im Auftrag der EuroHPC JU und der Projektträger betreiben wird. Basierend auf beschleunigten Rechenknoten wird das System auf die Rechenanforderungen typischer KI-Workloads in der Industrie zugeschnitten sein, einschließlich des Trainings und der Nutzung maßgeschneiderter großer Sprachmodelle, Deep Learning und komplexer Datenanalyse.

Innerhalb der deutschen HPC-Landschaft verfolgt das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) mit seinen Mitgliedern (HLRS, LRZ und Jülich Supercomputing Centre) einen koordinierten Ansatz, um die KI-Bedürfnisse Europas zu unterstützen. HammerHAI und JAIF werden sich gegenseitig ergänzen: HammerHAI baut auf dem Fokus des HLRS auf Industrie, Ingenieurwesen und globalen Herausforderungen auf. Das System und die Dienstleistungen von HammerHAI werden insbe-



Das HammerHAI Konsortium
plane bereits Anfang 2025
am HLRS den Projektbeginn.

sondere auf die Bedürfnisse der Fertigungsindustrie, der Automobil- und Mobilitätsbranche, von Start-ups und KMUs in allen Sektoren sowie auf die Wissenschaft zugeschnitten sein. Der Schwerpunkt von JAIF liegt auf dem Gesundheitswesen, Energie, Klimawandel und Umwelt, Bildung, Medien und Kultur, öffentlicher Sektor, Finanzen und Versicherungen.

„Die Schaffung einer robusten, nativen Infrastruktur für künstliche Intelligenz wurde von der europäischen und der deutschen Regierung als hohe Priorität eingestuft. HammerHAI wird schnell helfen, diesen Bedarf zu decken“, sagte Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Gleichzeitig wird das Projekt eine wichtige Rolle bei der Umsetzung der Entwicklungsstrategie des HLRS und des Gauss Centre for Supercomputing spielen, da wir uns weiterentwickeln, um die sich verändernde Landschaft des Höchstleistungsrechnens zu unterstützen.“

Barrieren für KI verringern

Mit „Cloud-ähnlichen“ Funktionen erleichtert das HammerHAI-System den Nutzer:innen die Migration und den bedarfsgerechten Betrieb bestehender Anwendungen auf dem KI-optimierten System. Darüber hinaus wird das Serviceangebot von HammerHAI Nutzer:innen bei der Integration von Lösungen für den gesamten KI-Lebenszyklus unterstützen. Die AI Factory wird einen „Concierge“-Service anbieten, bei dem Nutzer:innen von der ersten Anfrage bis zum Einsatz der Lösung durchgängig persönlich betreut werden. Das HammerHAI Support Team wird technisch unterstützen sowie dabei helfen, die relevantesten KI-Anwendungen zu

identifizieren, Kosten abzuschätzen und die Skalierung zu optimieren. Darüber hinaus bietet die AI Factory vor-trainierte Modelle und Container-Vorlagen, die Anwender:innen einen schnellen Einstieg ermöglichen, sowie Tools für die Zusammenarbeit, die es Teams ermöglichen, Datensätze, Software und vorgefertigte Modelle gemeinsam zu nutzen und dabei eine strenge Data Governance einzuhalten.

Um die Zahl der KI-Expert:innen zu erhöhen, wird HammerHAI Weiterbildungskurse anbieten, unter anderem Workshops und Schulungen, Echtzeitexperimente sowie Hochschul- und Fortbildungsprogramme.

HammerHAI wird eine sichere, in Deutschland ansässige Plattform und einen Datenspeicher bereitstellen. Der Zugriff auf die entstehenden KI-Modelle, die ihnen zugrundeliegenden Daten und die Nutzer-Schnittstellen werden nach den Grundsätzen des KI-Gesetzes der Europäischen Union von 2023 streng kontrolliert. Dies wird es europäischen Forschenden und Unternehmen erleichtern, die Compliance-Anforderungen hinsichtlich der Datensicherheit und der ethischen Nutzung von KI einzuhalten.

Das Projektbudget von rund 85 Millionen Euro wird von der EuroHPC JU, dem Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt, dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, dem Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst und dem Niedersächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kultur kofinanziert.

Anwendungen von KI für Technik und Fertigung

Am HLRS wird erforscht, wie sich mithilfe von künstlicher Intelligenz schnellere Antworten auf komplexe technische Probleme liefern lassen.

Rechenkosten von Strömungssimulationen senken

Forschende am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart haben untersucht, wie hochauflösende Strömungssimulationen dank KI zugänglicher werden könnten. Ein Framework namens Relaxi kombiniert FLEXI, einen Solver für numerische Strömungsmechanik, mit Tensorflow, einem der beliebtesten Pakete für maschinelles Lernen. Die Simulationsdaten von FLEXI werden in einen Reinforcement-Learning-Algorithmus eingespeist und dienen als Trainingsdaten für die Parameteroptimierung in einem Turbulenzmodell. Das Turbulenzmodell sagt dann die Wirbelviskosität als Eingabedaten für die größere FLEXI-Simulation voraus, die Daten für eine weitere Trainingsrunde erzeugt. Nach mehreren Iterationen konvergiert die Optimierung des Turbulenzmodells zu einem Punkt, an dem die Simulation stabil und genau bleibt.

Metalleigenschaften für die Blechumformung leichter vorhersagen

Blechumformungsprozesse zur Herstellung von Produkten wie Autotüren erfordern ein tiefgehendes Verständnis der Materialeigenschaften der verwendeten Metalle. Normalerweise werden dazu Messungen an Testmaterialien durchgeführt, die verschiedenen Belastungsbedingungen ausgesetzt sind, und anschließend rechenintensive Simulationen durchgeführt. Um dies für Ingenieur:innen ohne Zugang zu Supercomputern praktikabler zu machen, haben Forschende des

Instituts für Umformtechnik der Universität Stuttgart zusammen mit dem HLRS zwei Milliarden Simulationen von Materialeigenschaften auf dem Supercomputer Hawk des HLRS durchgeführt. Anhand der Ergebnisse trainierten sie ein neuronales Netz, das basierend auf experimentellen Messungen beliebiger Werkstoffe schnell und genau die für Metallumformungsprozesse relevanten Parameter vorhersagen kann. Die resultierende Anwendung könnte auf einem normalen Desktop-Computer ausgeführt werden.

Sicherer automatisieren

Festo, ein Unternehmen für Industrieautomatisierung, entwickelt mithilfe der Höchstleistungsrechenressourcen des HLRS eine sicherere und effizientere Mensch-Roboter-Zusammenarbeit in Fertigungsprozessen. Die Forschenden von Festo nutzen sowohl Eingabedaten aus dem Forschungs- und Entwicklungslabor des Unternehmens als auch Video- und Sensordaten von Robotern aus realen Fertigungsumgebungen, um einen Reinforcement-Learning-Algorithmus zu trainieren, der gute Verhaltensweisen durch positives Feedback reproduziert. Die daraus resultierenden Modelle können etwa 80 Prozent der erforderlichen Leistung eines Roboters erreichen und den Designer:innen von Automaten Zeit ersparen. Diese Lösungen lassen sich an spezifische Szenarien anpassen, wodurch Festo für seine Kunden komplexere Automatisierungsabläufe entwickeln kann, die eine sichere Zusammenarbeit zwischen Menschen und Robotern ermöglichen.

KI „made in Germany“ für kleine und mittelständische Unternehmen

Das Stuttgarter KI-Entwicklungsunternehmen Seedbox.ai beschleunigt die Nutzung von künstlicher Intelligenz in der europäischen Industrie mithilfe des Supercomputers des HLRS.

Im August 2024 besiegelte das HLRS eine Partnerschaft mit Seedbox.ai, einem regionalen Startup, das maßgeschneiderte KI-Lösungen für kleine und mittelständische Unternehmen (KMU) in Deutschland entwickelt. Als Teil der Vereinbarung nutzt Seedbox.ai die Höchstleistungsrechner des HLRS und arbeitet mit dem Zentrum an der Planung eines Servicepakets, das Unternehmen bei der Nutzung von Supercomputing-Infrastrukturen für künstliche Intelligenz unterstützt.

„In vielen Unternehmen ist künstliche Intelligenz schon heute ein Synonym für ‚Innovation‘ geworden“, sagte Kai Kölsch, Gründer und Geschäftsführer von Seedbox.ai. „Durch den Einsatz von generativer KI sind wir inzwischen in der Lage, deutliche Effizienzen im Kerngeschäft zu heben und zusätzliche, nachhaltige Einnahmequellen durch die Entwicklung neuer Geschäftsmodelle zu erschließen. Mithilfe des HLRS und mit dem Zugang zu dessen Supercomputing-Infrastruktur werden wir Unternehmen in ganz Deutschland dabei unterstützen, ihre Innovationsvorhaben effizient und sicher auf das nächste Level zu bringen.“

Seedbox.ai arbeitet schwerpunktmäßig an der Beschleunigung der Einführung generativer künstlicher Intelligenz – einer Technologie, die seit dem Aufkommen großer Sprachmodelle (LLMs) wie ChatGPT explodiert ist. In der Industrie lassen sich LLMs, beispielsweise zur Erstellung von Co-Piloten und Chatbots, zur Dokumentenverarbeitung und -verwaltung, zur Analyse komplexer Datenquellen oder zur Erstellung redaktioneller Inhalte verwenden. Solche Werkzeuge könnten auch den Zeitaufwand bei strukturierten, datengetriebenen oder repetitiven Aufgaben deutlich

reduzieren und gerade in Zeiten von Fachkräftemangel, immense Effizienzgewinne realisieren. Noch relevanter wird die Integration von KI beim Einsatz in bestehende und neue Systeme, wie beispielsweise CRM- oder ERP-Schnittstellen, Wissensdatenbanken oder als integraler Baustein neuer, innovativer Softwarelösungen.

Im deutschen Mittelstand wächst das Interesse für generative KI rasant, doch in der Umsetzung wird schon bald mehr Tempo verlangt sein. Hierbei werden Lösungen benötigt, die Herausforderungen wie Datensicherheit, Datenhoheit, Performance und Kosteneffizienz zuverlässig angehen. Die Zusammenarbeit zwischen Seedbox.ai und dem HLRS zielt unter anderem darauf ab, diese Herausforderungen zu lösen und das volle Potenzial von großen Sprachmodellen für die deutsche Industrie auszuschöpfen.

Hunter unterstützt die Erstellung von großen europäischen Sprachmodellen

Zwei weitere Faktoren schränken derzeit den Fortschritt der KI in Europa ein: Die am weitesten verbreiteten LLMs werden mit englischsprachigen Texten trainiert und dessen Betreiber sind Nicht-EU Unternehmen. In einem sprachlich so vielfältigen Gebilde wie der EU wird es wichtig sein, LLMs zu entwickeln, die über nationale Grenzen hinweg funktionieren können. Die Fähigkeit, lokale Infrastrukturen zu nutzen, um lokale, kritische und geschützte Daten auf sichere Weise zu speichern und zu verarbeiten, ist sowohl aus geschäftlicher als auch aus strategischer Sicht von wesentlicher Bedeutung.

Noch bevor der neue Supercomputer Hunter des HLRS in Betrieb genommen wurde (siehe Seite 29), testete Seedbox.ai als erstes Unternehmen das System für das Training großer Sprachmodelle in 24 europäischen Sprachen. Es stellt diese Modelle auch anderen Entwickler:innen von KI-Anwendungen auf Open-Source-Basis zur Verfügung.¹ Dies wird KI-basierte Innovationen fördern – beispielsweise durch die beschleunigte Implementierung mehrsprachiger autonomer Agenten im Arbeitsalltag.

Im Gegensatz zu kommerziellen Anbietern hat die Nutzung von KI-Supercomputing-Ressourcen an einem deutschen, öffentlich geförderten HPC-Zentrum wie dem HLRS für Seedbox.ai und seine Kunden einige Vorteile. Dennis Dickmann, der sich seit 2008 intensiv mit KI beschäftigt und als Mitgründer und CTO für die Technologieentwicklung bei Seedbox.ai verantwortlich ist, begrüßte den Beginn der Partnerschaft mit dem HLRS: „Eine so leistungsfähige, sichere und regionale Supercomputing-Infrastruktur ist eine einzigartige und überaus wertvolle Ressource. In Zusammenarbeit mit dem HLRS können wir unseren Kunden dauerhaft die Sicherheit ihrer Daten garantieren und ihnen die KI-

¹ Informationen über die mehrsprachigen großen Sprachmodelle von Seedbox.ai finden Sie unter: www.kafkalm.com.



Technologien an die Hand geben, die es braucht, um weiterhin innovativ und wettbewerbsfähig zu bleiben.“

KI in der richtigen Größenordnung

Diese Kooperationsvereinbarung ist das erste Mal, dass das HLRS eine Partnerschaft mit einem KI-Startup einget. Laut Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS, ist die Zusammenarbeit ein wichtiger Schritt in der Strategie des Höchstleistungsrechenzentrums: „Mit Seedbox.ai als strategischem Partner können wir nicht nur schon jetzt zeigen, was mit unserem aktuellen System möglich ist, sondern auch, was mit unseren zukünftigen Systemen Hunter und Herder möglich sein wird. Auf diese Weise verlieren wir keine Zeit im Rennen um die bestmögliche Nutzung von KI für Wissenschaft und Industrie.“

In einer Zeit, in der große, internationale IT-Unternehmen enorme Investitionen in die KI-Infrastruktur angekündigt haben, zeigt die Partnerschaft mit Seedbox.ai auch, dass überdimensionierte Systeme für viele Anwendungen – insbesondere für KMU – nicht nötig sind. „Große Rechenleistung ist sicherlich wichtig für Anwendungen der künstlichen Intelligenz, wie z.B. das Trainieren großer Sprachmodelle von Grund auf“, so Dennis Hoppe, Leiter der HLRS-Abteilung für Converged Computing. „Für viele typische Anwendungen in Wissenschaft und Industrie kann man aber auch mit weniger Rechenressourcen sehr interessante Ergebnisse erzielen. Viele Unternehmen konzentrieren sich auf die Feinabstimmung bestehender, vorab trainierter Modelle – ein Prozess, der eine viel kürzere Trainingszeit erfordert und daher weniger Ressourcen benötigt. Das HLRS wird der wachsenden Nutzer-Community noch viele weitere Chancen eröffnen.“

Gemeinsam möchten sie HPC an KMU heranbringen (v.l.n.r.): Kai Kölsch (Gründer und CEO von Seedbox.ai), Dennis Dickmann (Gründer und CTO von Seedbox.ai), Dennis Hoppe (Leiter, Converged Computing, HLRS), Bastian Koller (Geschäftsführer, HLRS)



Fortissimo im Wandel: Ein Interview mit Guy Lonsdale

Seit mehr als zehn Jahren unterstützen die Projekte der Fortissimo-Reihe europaweit kleine und mittelständische Unternehmen (KMU), indem sie Geschäftsexperimente mit Höchstleistungsrechnern (HPC) fördern. In diesen Experimenten wird untersucht, inwieweit sich Herausforderungen von Unternehmen mit HPC lösen lassen. Das HLRS ist seit Beginn der Reihe als Projektpartner beteiligt und koordiniert nun die aktuelle Förderphase FFplus.

Eine weitere Schlüsselrolle in der Fortissimo-Geschichte spielt Dr. Guy Lonsdale, CEO der scapos AG, die auf die Vermarktung von Softwareprodukten spezialisiert ist. Lonsdale hat einen Hintergrund in numerischer Mathematik und leitet sowohl in FFplus als auch in den Vorgängerprojekten die offenen Ausschreibungen. Er ist ein großer Befürworter von HPC für kleine und mittelständische Unternehmen.

Der Beginn von FFplus im Jahr 2024 markierte ein neues Kapitel in der Geschichte von Fortissimo, da KMU erstmals Anträge für „Innovationsstudien“ einreichen durften, die sich auf die Entwicklung von Lösungen für künstliche

Intelligenz (KI) mit Schwerpunkt auf generativer KI konzentrieren. Auf die ersten beiden offenen Ausschreibungen des Projekts bewarben sich nicht nur traditionelle HPC-Nutzer:innen aus dem Maschinenbau und der Fertigungsindustrie. Die Bewerbungen stammten unter anderem aus dem Finanzwesen, der Medizinbranche oder dem Journalismus. Wir haben mit Guy Lonsdale über die Entwicklung und die Auswirkungen der Fortissimo-Projekte gesprochen. In einem Interview ging es darum, wie künstliche Intelligenz Höchstleistungsrechenzentren die Tür zu neuen Nutzergemeinschaften öffnet.

Wie hat Fortissimo angefangen und was war das initiale Ziel der Projektreihe?

Kurz nach der Finanzkrise im Jahr 2008 erkannte die Europäische Kommission den Bedarf an einem Förderprogramm für die Industrie, vor allem die Fertigungsbranche. In diesem Zuge wurde das Programm „Factories of the Future“ eingeführt. Damals erkannte man auch, dass große Unternehmen, beispielsweise aus der Automobil- und Luftfahrtindustrie, regelmäßig Höchstleistungsrechner einsetzen, während KMU vor großen



Innerhalb eines von FF4EuroHPC unterstützten Experiments entwickelte ein Team in Montenegro eine Lösung, die Bilderkennung und künstliche Intelligenz kombiniert, um kranke Hühner auf einer Geflügelfarm zu identifizieren. Dank der Ergebnisse können Landwirte die Kosten für Arbeitskräfte sowie die Sterblichkeitsrate von Hühnern senken und so jährlich Hunderttausende von Euro einsparen. Bild verwendet unter Genehmigung von FF4EuroHPC.

Herausforderungen stehen und dies in der Regel nicht tun. Die Kommission entwickelte daher ein Programm, das sich speziell an produzierende KMU richtet und im Mittelpunkt der ersten beiden Fortissimo-Projekte stand.

Das Fortissimo-Konzept bestand darin, Experimente zu unterstützen, bei denen KMU HPC zur Bewältigung einer geschäftlichen Herausforderung einsetzen konnten. Obwohl das Konzept einen Forschungsaspekt hatte, lag der Schwerpunkt vielmehr darin, die Vorteile des Einsatzes von HPC in einem kommerziellen Kontext aufzuzeigen. Die aktuellen Fortissimo-Projekte nutzen sogenannte „kaskadierende Förderungsmechanismen“, um die aus KMU bestehenden Konsortien finanziell zu unterstützen. Die EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) bezuschusst FFplus. Wir führen wettbewerbsorientierte offene Ausschreibungen durch, und evaluieren sowie wählen die besten Anträge mithilfe externer Experten aus. Die Gewinnerunternehmen erhalten Fördergelder und Unterstützung – FFplus stellt jedoch keine Rechenressourcen bereit. Stattdessen wird erwartet, dass die KMU über das Zugangssystem der EuroHPC JU Rechenzeit auf deren Höchstleistungsrechnern beantragen.

Letztendlich haben die Projekte Auswirkungen auf die Teilnehmenden und die daraus resultierenden Erfolgs-

geschichten bieten Fortissimo Möglichkeiten, das breitere Ökosystem potenzieller HPC-Nutzer:innen zu erreichen. Wie ich kleinen Unternehmen immer sage: Wenn ein ähnliches KMU HPC erfolgreich einsetzt, könnte es auch für Sie nützlich sein.

Haben Sie im Laufe der Geschichte von Fortissimo festgestellt, dass KMU Höchstleistungsrechner nun anders einsetzen?

Zu Beginn von Fortissimo wurde Höchstleistungsrechnen in der Fertigung hauptsächlich für Modellierung und Simulation eingesetzt – unter anderem in numerischer Strömungsmechanik, Strukturmechanik und molekularer Modellierung. Im FF4EuroHPC-Projekt, das FFplus unmittelbar vorausging, war es noch viel Modellierung und Simulation. Gleichzeitig gingen jedoch auch Bewerbungen für Projekte mit maschinellem Lernen, künstlicher Intelligenz und Big-Data-Analysen ein. Bei FF4EuroHPC lag der Schwerpunkt weiterhin auf der Fertigung, doch haben wir in der zweiten Ausschreibung umpriorisiert, um ein ausgewogenes Verhältnis zwischen der Fertigung und anderen Branchen zu erreichen.

Mit FFplus haben sich zwei wichtige Punkte geändert: Zum einen haben wir jetzt zwei sehr unterschiedliche Arten von Teilprojekten. Der erste Typ ist wie das klassische Fortissimo, bei dem HPC-fremde KMU in einem

Experiment HPC als Lösung ihrer geschäftlichen Herausforderungen testen. Der andere Typ konzentriert sich auf die Technologieentwicklung für künstliche Intelligenz, insbesondere für generative KI. Hierbei werden beispielsweise Basismodelle oder große Sprachmodelle (LLMs) entwickelt und abgestimmt. Diese Teilprojekte werden von Konsortien aus KMU mit Vorkenntnissen zu KI-basierten Geschäftsmodellen umgesetzt, denen bislang der Zugang zu großen europäischen HPC-Ressourcen fehlte, um die Ziele ihrer LLMs zu erreichen. Bei der ersten offenen Ausschreibung von FFplus im Jahr 2024 haben wir festgestellt, dass sich auch KMU, die neu im Bereich HPC sind, sehr oft auf KI konzentrieren. Die Mehrheit der Anträge befasste sich mit KI allein oder in Kombination mit digitalen Zwillingen, die von KI angetrieben werden und maschinelles Lernen mit Simulation kombinieren.

Inwiefern haben sich wegen des Schwerpunkts auf künstlicher Intelligenz in FFplus andere Unternehmen für eine Teilnahme beworben als früher?

Das Spannende an der künstlichen Intelligenz ist, dass sie Anwendungen ermöglicht, die für viele industrielle und wirtschaftliche Sektoren relevant sind. Bei unserer ersten offenen Ausschreibung haben wir Anträge aus einer großen Bandbreite von Branchen und aus diversen europäischen Ländern erhalten. Für die Innovationsstudien haben wir uns auf KMU mit einem bereits bestehenden KI-basierten Geschäftsmodell konzentriert. Aber insgesamt haben wir eine sehr bunte Mischung: Einige der Unternehmen entwickeln zum Beispiel medizinische Anwendungen, eine Reihe von Unternehmen aus dem Finanzwesen und Umweltbereich haben sich beworben. Wir haben auch Projekte aus der Informations- und Kommunikationstechnik sowie der Medienindustrie.

Einige Unternehmen verfügen über KI-Know-how, haben aber noch nie HPC eingesetzt und erkennen, dass sie mit dem Zugang zu Großrechnern mehr erreichen können. Andere wiederum wagen sich nur zaghaft an KI heran. Sie haben gehört, dass KI einen Einfluss haben könnte, und wissen, was sie tun wollen. Sie holen sich Unterstützung von Partnern, die sich ihre bisherigen Aktivitäten ansehen und mögliche nächste Schritte

vorschlagen. So beziehen sie beispielsweise maschinelles Lernen in ihren Modellierungs- und Simulationsansatz ein, um schnellere oder umfangreichere Ergebnisse zu erzielen.

Sie haben erwähnt, wie wichtig Erfolgsgeschichten sind, um andere Unternehmen von den Stärken des HPC zu überzeugen. Welche Rolle spielt die Kommunikation und Öffentlichkeitsarbeit in den Fortissimo-Projekten?

Eine tragende Rolle. Die nationalen Kompetenzzentren (NCC) der vom HLRS koordinierten Projekte CASTIEL 2 und EuroCC 2 haben ebenfalls dazu beigetragen. In 33 europäischen Ländern ist jedes NCC in der Regel in einem Höchstleistungsrechenzentrum angesiedelt und vermittelt HPC-Nutzern Ressourcen, die ihnen helfen können. Die NCCs sollen KMU in ihren Heimatländern erreichen und tragen dazu bei, viele der Anträge für FFplus zu unterstützen. Sie nehmen unter anderem Broschüren zu den Erfolgsgeschichten oder Fortissimo-Videos mit zu Unternehmen und sagen: „Hey, schaut euch das an. Das ist relevant für euer Unternehmen.“ Die Erfolgsgeschichten konzentrieren sich zum Beispiel auf die Beschleunigung eines Design- oder Geschäftsprozesses oder die Kosteneinsparung mit der Aussicht auf Einstellung neuer Mitarbeitender oder Umsatzsteigerung. Dies sind für KMU die entscheidenden geschäftlichen Argumente für den Einsatz von HPC.

Hat sich durch den Einsatz von KI und datengesteuerten Methoden etwas an den Bedürfnissen der Fortissimo-Community verändert – im Vergleich zu früher, als der Fokus noch auf klassischen Simulationen lag?

Wenn KMU beispielsweise HPC für Strömungssimulationen verwenden, benötigen sie Unterstützung beim Wechsel zu einem großen Cluster oder einem Höchstleistungsrechner. Zu ihren Fragen gehören: Wie verwende ich dieses Remote-System? Wenn ich Software remote ausführe, wie verwalte ich dann meine Jobs? Welche Lizenzen sind bei der Verwendung kommerzieller Software auf diese Weise relevant? In gewisser Weise geht es hier mehr um IT-Systemmanagement als um HPC. Darüber hinaus benötigen in Simulationen uner-



„Dank Erfolgsgeschichten erreicht Fortissimo das breitere Ökosystem potenzieller HPC-Nutzer:innen. Wie ich immer zu kleineren Unternehmen sage, wenn ein ähnliches Unternehmen es geschafft hat, dann könnte es für euch auch nützlich sein.“

fahrene KMU jemanden mit HPC- und Software-Erfahrung, um ihre Designherausforderung zu verstehen und sie an die Hand zu nehmen. In der Vergangenheit benötigten KMU nach Abschluss des Fortissimo-Geschäftsexperiments häufig weiterhin Unterstützung.

Mittlerweile sehen wir, dass die meisten KMU nicht viel Hilfe brauchen. Einige KI-Unternehmen wissen genau, was sie tun wollen, und brauchen nur Zugang zu größeren Systemen und Unterstützung bei der Suche nach den erforderlichen Ressourcen. Dies ist teilweise die Aufgabe von FFplus. Wir vermitteln den Kontakt zu den richtigen Ansprechpartnern für Beratung und Support. Im Anschluss ist der Zugriff auf Daten für das Trainieren der Software häufig eine Herausforderung.

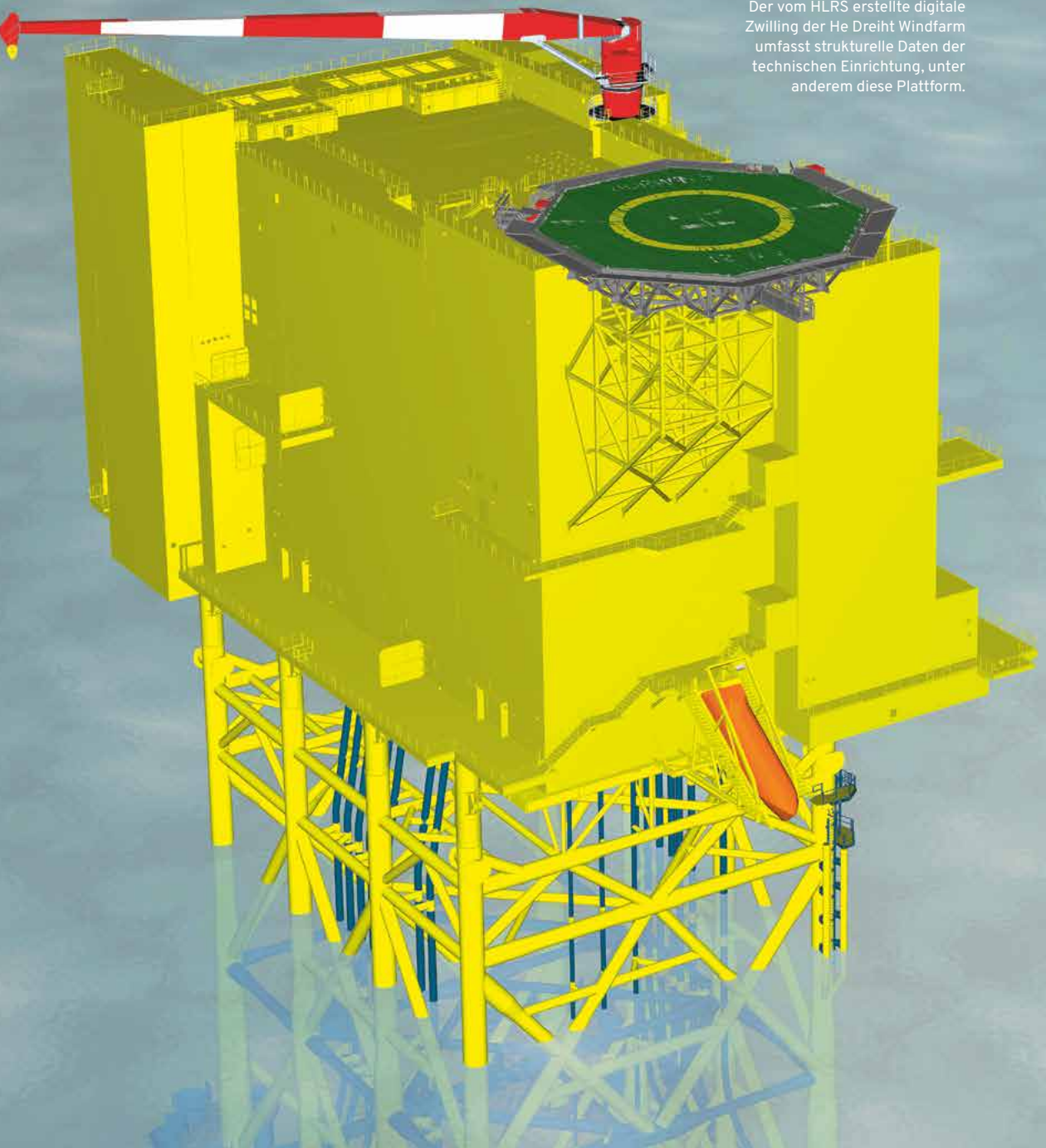
Was ist für Sie die wichtigste Errungenschaft von Fortissimo?

Ich denke, dass wir mittlerweile sehr bekannt sind, nicht nur auf der Ebene der Europäischen Kommission und der EuroHPC Joint Undertaking, sondern auch in der Nutzergemeinschaft. Die nationalen Kompetenzzentren waren wegen des großen Mehrwerts sehr daran interessiert, KMU in ihren Ländern in das Programm einzubeziehen. Die KMU, die sich bewerben, kennen die möglichen Vorteile bereits. Als Ergebnis haben wir jetzt eine große Sammlung an Erfolgsgeschichten, die das Potenzial für einige Anwendungen aufzeigen. Der Fokus liegt nun nicht mehr nur auf Crash-Simulationen, Aerodynamik oder klassischer Großforschung wie Wettervorhersagen. Um nur ein Beispiel zu nennen: Wir hatten ein Projekt in Montenegro, bei dem künstliche Intelligenz auf einem HPC-System eingesetzt wurde, um den Gesundheitszustand der Hühner auf einer

Geflügelfarm zu beobachten. Auswirkungen auf die breitere Gesellschaft aufzuzeigen und Anwendungen in neuen Bereichen wie diesem zu erforschen, ist wahrscheinlich unser größter Erfolg.

Wie wird sich Fortissimo Ihrer Meinung nach in den kommenden Jahren entwickeln?

Die Gewinner-Teilprojekte der ersten offenen Ausschreibung von FFplus haben gerade erst begonnen – wir haben diesmal zwei Tranchen von Ausschreibungen vor uns, insgesamt also vier weitere Teilausschreibungen. Derzeit gehen wir davon aus, dass sich der Ansatz nicht wesentlich ändern wird, aber gleichzeitig geht mit dem zunehmenden Einsatz künstlicher Intelligenz eine rasante Weiterentwicklung des HPC einher. Auf der vergangenen ETP4HPC-Konferenz hielt Dr. Franck Capello vom Argonne National Laboratory einen Vortrag, in dem er erläuterte, wie sich große Sprachmodelle in Zukunft als Forschungsassistenten einsetzen ließen. Forschende wären demnach von der Datenanalyse befreit und könnten Hypothesen entwickeln sowie die Experimente durchführen, die zur Überprüfung dieser Hypothesen erforderlich sind. Capello erläuterte auch die Fähigkeiten der derzeitigen LLMs zur Lösung komplexer technischer Fragen, und das war ziemlich schockierend. Sie verwenden LLMs, um Probleme zu lösen, für die nur ein Doktorand oder ein Postdoc mit Fachkenntnissen auf diesem Gebiet ihre Leistung hätte erbringen können. Einerseits könnte man meinen, dass wir noch drei Jahre FFplus haben, bevor wir uns Gedanken über die Zukunft machen müssen. Wenn ich jedoch Geschichten wie diese höre, scheinen drei Jahre eine lange Zeit zu sein. Es könnte sich in der Zwischenzeit noch einiges verändern.



Der vom HLRS erstellte digitale Zwilling der He Dreiht Windfarm umfasst strukturelle Daten der technischen Einrichtung, unter anderem diese Plattform.

Neuigkeiten

HLRS schließt TISAX Level 3 Assessment für Informationssicherheit ab

Seit 2021 ist die Universität Stuttgart als übergeordnete Organisation des HLRS als Teilnehmer an der Trusted Information Security Assessment Exchange (TISAX) registriert. Im Jahr 2024 hat der Audit-Dienstleister TÜV Nord CERT GmbH das Informationssicherheitsmanagementsystem des HLRS nach dem TISAX-Prüf- und Austauschmechanismus neu bewertet, diesmal auf TISAX Level 3. Unter der Federführung der ENX Association im Auftrag des Verbandes der Automobilindustrie orientiert sich TISAX dabei stark an der internationalen Norm ISO 27001 für Informationssicherheitsmanagementsysteme. Darüber hinaus stellt TISAX weitere Mindestanforderungen, die befolgt werden müssen. TISAX Level 3 ist der umfassendste Prüfungsansatz innerhalb des Systems für Informationssicherheit. Es gewährleistet die Einhaltung von Sicherheitsstandards, die für den Umgang mit Daten mit „sehr hohem Schutzbedarf“ geeignet sind. Das TISAX-Assessment-Ergebnis des HLRS ist auf dem ENX-Portal unter der Scope-ID SP9M8V und der Assessment-ID ANCTTM verfügbar. Das HLRS ist auch nach der Norm ISO 27001 für Informationssicherheit zertifiziert.



Berthold Schmidt (Chief Technology Officer, TRUMPF) und Anna Steiger (Kanzlerin, Universität Stuttgart) unterschrieben die Kooperationsvereinbarung im Hauptsitz von TRUMPF in Ditzingen.

TRUMPF kooperiert mit dem HLRS

Das Hightechunternehmen TRUMPF unterzeichnete im März 2024 eine Kooperationsvereinbarung mit dem HLRS. Ziel der Vereinbarung ist die Bereitstellung umfangreicher Rechenkapazitäten für Mitarbeitende von TRUMPF. „Diese Kooperation zeigt, dass wir auch am Industriestandort Deutschland ein leistungsfähiges digitales Ökosystem besitzen. Unsere Entwickler können mithilfe dieser Großrechner Maschinenfunktionen schon vor dem ersten Prototypenbau virtuell nachstellen und KI-Lösungen für unsere Anlagen schneller trainieren. Wir kommen dadurch nachhaltiger und effizienter zu Innovationen“, sagte Berthold Schmidt, CTO von TRUMPF. Laut Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, werden die Höchstleistungsrechner des HLRS die Weiterentwicklung von Technologien bei TRUMPF unterstützen: „Wir sind stolz darauf, dass wir mit unserer Rechenleistung weiterhin zur Stärkung und Konkurrenzfähigkeit der Wirtschaftsregion Stuttgart beitragen können.“ Für einfachere Simulationen verfügt TRUMPF über eigene leistungsfähige Rechner. Komplexere Aufgaben mit höherer Genauigkeit lassen sich jedoch nur mit Supercomputern bearbeiten, wie sie am HLRS stehen. Ein Beispiel ist die Simulation von Quantencomputern, die so rechenintensiv ist, dass diese künftig mithilfe der Rechenkapazität des HLRS beschleunigt werden soll. Auch KI-Modelle trainiert TRUMPF künftig auf den Supercomputern des HLRS. TRUMPF bietet seinen Kunden bereits seit einigen Jahren Werkzeugmaschinen an, die künstliche Intelligenz nutzen, um schneller und besser arbeiten zu können. Künftig sollen weitere Lösungen das Angebot ergänzen.



Björn Klose, Simon Homes und Tim Niklas Uhl gewannen die Golden Spike Awards 2024.

Gewinner der Golden Spike Awards 2024

Von 10. bis 11. Oktober 2024 trafen sich Nutzer:innen der Supercomputer des HLRS und des Scientific Computing Center (SCC) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) beim 27. Results and Review Workshop. Zum ersten Mal fand das Treffen am KIT statt, wo das SCC als Partner des HLRS HPC-Ressourcen für Forschende in Deutschland bereitstellt. In 21 Vorträgen und einer Postersitzung informierten sich die Teilnehmenden über Studien aus diversen Forschungsbereichen. In den Vorträgen wurden sowohl Anwendungen traditioneller Simulationsmethoden mit HPC als auch Methoden des maschinellen Lernens und Strategien zur Verbesserung der Energieeffizienz beschrieben. Der Vorsitzende des Lenkungsausschusses des HLRS, Prof. Thomas Ludwig (Geschäftsführer des Deutschen Klimarechenzentrums), verkündete die Gewinner der HLRS Golden Spike Awards 2024, die herausragende Leistungen in der rechnergestützten Forschung und der Nutzung von HPC auszeichnen. Stellvertretend für ihre jeweiligen Projekte gingen die Golden Spike Awards an Björn Klose (DLR) für „Numerical investigation of shock-boundary layer interaction on a highly-loaded transonic compressor cascade to compare with experimental results“, Simon Homes (TU Berlin) für „Molecular simulations: A thermodynamic study of bulk and interface“ und Tim Niklas Uhl (KIT) für „Scalable discrete algorithms for big data applications“.

Neuer Kooperationsvertrag mit dem Kumoh National Institute of Technology

Das HLRS hat eine neue Kollaborationsvereinbarung mit dem Kumoh National Institute of Technology (KIT) unterzeichnet. Das in Gumi, der Wiege der südkoreanischen Elektronikindustrie, ansässige KIT ist eine ingenieurwissenschaftlich ausgerichtete Universität, die Fachkräfte für die High-Tech-Industrie ausbildet. Prof. Michael Resch, Direktor des HLRS, unterzeichnete den Kooperationsvertrag zusammen mit dem KIT-Präsidenten Ho Sang Kwak während eines Besuchs am KIT im Februar 2024. Die neue Zusammenarbeit wird die Kommunikation und den Austausch von Fachwissen zwischen Stuttgart und Gumi fördern. Schwerpunktmäßig soll der Zugang der Industrie zu HPC und dessen Nutzung verbessert werden. „Das HLRS und KIT teilen die Vision, dass Höchstleistungsrechnen Brücken zwischen universitärer Forschung und industrieller Entwicklung schlagen kann“, so Prof. Resch. Das HLRS kooperiert mit mehr als einem Dutzend führender Zentren für rechnergestützte Forschung und Höchstleistungsrechnen in Europa, Asien und Amerika.



Der Präsident des Kumoh National Institute of Technology, Ho Sang Kwak, und Michael Resch, Direktor des HLRS, unterzeichneten die Kooperationsvereinbarung bei einem Besuch am KIT.

HPC SPECTRA fördert die Entwicklung von Kompetenzen in Europa

Seit 2018 koordiniert die EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) die Entwicklung eines wettbewerbsfähigen Ökosystems für Höchstleistungsrechnen in Europa. Die EuroHPC JU beschafft neue Supercomputer und stellt sicher, dass die europäische Forschungsgemeinschaft über das Wissen und die Fähigkeiten verfügt, die für die effektive Nutzung dieser leistungsstarken Ressourcen notwendig sind. Im Jahr 2024 startete das von der EuroHPC JU geförderte Projekt HPC SPECTRA, das diese Aufgabe angeht. 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. Als Koordinator der EuroHPC JU-Projekte CASTIEL und CASTIEL 2 war das HLRS federführend bei der Entwicklung des HPC in Europe Portals (<https://hpc-portal.eu/>), einer zentralen Online-Ressource für die Suche nach HPC-Ressourcen und Fachwissen. Als Projektpartner in HPC SPECTRA hilft das Zentrum bei der Entwicklung eines umfassenden Online-Gateways, das als Teil des Portals Ankündigungen aller HPC-Schulungsmöglichkeiten in Europa an einem Ort sammelt. HPC SPECTRA koordiniert darüber hinaus die International HPC Summer School (IHPCSS). Die IHPCSS bringt HPC-Experten aus Europa, den USA, Kanada, Australien und Japan zusammen, um sich mit wissenschaftlichen und technischen Fragen des Höchstleistungsrechnens zu befassen.



Analytiker von Hyperion Research zeigten Trends in der Anwendung von HPC, KI, und Quantencomputing.

Hyperion HPC User Forum am HLRS

Das HPC User Forum wurde 1999 ins Leben gerufen, um die globale High-Performance-Computing-Industrie zu fördern und Themen von gemeinsamem Interesse zu erörtern. Es findet alle zwei Jahre statt und dient der Vernetzung von Anwendern, Anbietern, Behörden und der Industrie. Beim HPC User Forum im Oktober 2024 am HLRS erhielten um die 70 Teilnehmer:innen Einblicke in die aktuellen Trends in den Bereichen HPC, künstliche Intelligenz und Quantencomputing. Ein Industrie-panel mit Vertretern von TRUMPF, dem National Center for Supercomputing Applications, Seedbox.ai und SSC-Services bot Einblicke in die Nutzung von HPC und KI in der Industrie. Vertreter führender HPC-Zentren, darunter das National Center for Atmospheric Research, die Universität Bristol, das Argonne National Laboratory, das Europäische Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage, die DiRAC High Performance Computing Facility und die Universität Innsbruck, informierten über aktuelle Entwicklungen im Bereich der HPC- und KI-Infrastruktur sowie -Anwendungen. Vertreter von Technologieanbietern wie Lenovo, QuEra, KAYTUS und Hammerspace präsentierten darüber hinaus ihre Technologien und Dienstleistungen.



Ein lebensgroßer, funktionsfähiger Nachbau des historischen Junkers A50 Flugzeugs war das Highlight des Stands des HLRS auf der SC24.

HLRS hebt auf der SC24 ab

„Fliegen“ war das Motto des HLRS auf der SC24, der internationalen Supercomputing Conference in Atlanta, Georgia. Das Highlight des HLRS-Stands auf der Ausstellung war ein Junkers A50-Flugzeug in Originalgröße – ein Blickfang, der viele Konferenzteilnehmer dorthin lockte. Dieser funktionsfähige Nachbau eines Flugzeugklassikers entstand in Zusammenarbeit mit Junkers Aircraft und der Kasaero GmbH, die bei der Optimierung des Designs auf Visualisierungssysteme des HLRS zurückgriffen. Das HLRS trug auch zum SC24-Konferenzprogramm bei, u.a. zu einer Veranstaltung des HANAMI-Projekts, einer Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan, im Kontext von Aus- und Weiterbildung innerhalb des EuroHPC-Ökosystems und in einer Gesprächsrunde über die Aktivitäten der Abteilung Philosophy of Computational Sciences am HLRS mit dem Schwerpunkt KI und Ethik in der Medizin. Dr. Theresa Pollinger, Absolventin der Universität Stuttgart und Nutzerin des Supercomputers Hawk des HLRS, stellte ein Experiment vor, bei dem sie die Supercomputer des HLRS, des Leibniz-Rechenzentrums und des Jülich Supercomputing Centre gleichzeitig für eine einzige groß angelegte Simulation aus der Fusionsforschung nutzte. Angesichts der steigenden Nachfrage nach Rechen-, Speicher- und Ablagekapazitäten in extremen Grid-basierten Simulationen zeigte diese Testfall eine Strategie, um sie mit einer viel höheren Auflösung auszuführen, als es auf einem Supercomputer alleine möglich wäre.

Modellierung für die Politik

Wenn politische Entscheidungsträger mit komplexen Fragen konfrontiert werden, wenden sie sich häufig an Wissenschaftler:innen, um Informationen zusammenzufassen, Analysen durchzuführen und Vorhersagen zu treffen. Das Zusammentreffen dieser beiden Welten kann jedoch alles andere als einfach sein. Divergierende Erwartungen, Motivationen, Werte und wissenschaftliche Kenntnisse zwischen Wissenschaftler:innen und Entscheidungsträgern können zu Missverständnissen führen, während soziale, kulturelle, politische und praktische Erwägungen die Entwicklung, Interpretation und Verwendung von wissenschaftlichen Modellen beeinflussen. Von 25. bis 27. November 2024 veranstaltete die Abteilung Philosophy of Computational Sciences am HLRS die internationale „Modeling for Policy“-Konferenz. Während der Tagung diskutierten Philosoph:innen, Sozialwissenschaftler:innen, Wissenschaftshistoriker:innen und Anwender:innen von Modellierungstechnologien über die Praxis der Modellierung und deren Herausforderungen im Kontext von Politik. Diese Veranstaltung der Konferenzreihe „The Science and Art of Simulation“ deckte Bereiche wie die öffentliche Gesundheit, Energiewende und Klimamodellierung ab. In diesem Zusammenhang ging es darum, die Möglichkeiten und Grenzen der Simulation klarer zu definieren, das Vertrauen in Modelle bei politischen Entscheidungsträgern und in der Öffentlichkeit zu stärken sowie Empfehlungen zu einer besseren Interaktion zwischen Simulationswissenschaftler:innen und der Gesellschaft im Allgemeinen auszusprechen.



HANAMI fördert die Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan

Seit 2024 baut die HPC Alliance for Applications and Supercomputing Innovation (HANAMI) eine strategische Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan auf, um den Einsatz von Simulationen in der Wissenschaft zu fördern. Diese an der Agenda der EuroHPC Joint Undertaking orientierte Initiative konzentriert sich auf die Portierung von bestehenden Codes und die Prüfung und Bewertung der Anwendungsleistung auf neuen Rechnerarchitekturen. Außerdem wird sie europäischen Forschern den Zugang zu fortschrittlichen japanischen Supercomputing-Ressourcen erleichtern und im Gegenzug japanischen Partnern den Zugang zu EuroHPC-Systemen ermöglichen. In HANAMI untersuchen europäische und japanische Einrichtungen Synergien bei CPU-Architekturen und stärken die Partnerschaft bei der Entwicklung wissenschaftlicher Software. Im Fokus stehen wissenschaftliche Themen aus den Umweltwissenschaften, der Biomedizin und den Materialwissenschaften. In dem Projekt werden außerdem jährliche Symposien veranstaltet und eine digitale Roadmap entwickelt, die eine langfristige wissenschaftliche und wirtschaftliche Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan ermöglichen wird. Unter der Leitung der französischen Kommission für alternative Energien und Atomenergie (CEA) sind an HANAMI 14 europäische Organisationen beteiligt, die eng mit zehn japanischen Einrichtungen zusammenarbeiten. Das HLRS unterstützt in dem Projekt die Kommunikation, Verbreitung und Verwertung von Ergebnissen.



Ein Expertenpanel auf der SC24-Konferenz diskutierte Herausforderungen und Chancen für internationale Zusammenarbeit, mit einem besonderen Fokus auf die HPC-Communities in Europa und Japan.

8. iHURT-Symposium

Am 3. Dezember 2024 veranstaltete das HLRS den achten Industrial HPC User Round Table (iHURT), ein jährliches Treffen für HPC-Anwender:innen aus großen und kleinen Unternehmen. Auf der von der SICOS BW organisierten Veranstaltung tauschten sich um die 40 Industrievertreter:innen über neue Technologien und ihre Herausforderungen aus. In einem der Hauptvorträge beschrieb Gerd Büttner (Airbus Operation) die sich kommenden Herausforderungen für die Industrie, darunter die Zertifizierung von Anwendungen der künstlichen Intelligenz in streng regulierten Branchen wie der Luft- und Raumfahrt, rechtliche Fragen im Zusammenhang mit Dateneigentum und -verfügbarkeit, Einschränkungen beim Portieren von Anwendungen auf verschiedene Hardwareplattformen, den Mangel an geschultem Personal in HPC und die Nachhaltigkeit von Großrechnern. Anwendungsvorträge von Maximilian Ehrle (MANN+HUMMEL), Pavel Apanasevich (hydrograv), und Erich Jehle-Graf (Mercedes-Benz) zeigten auf, wie ihre Unternehmen HPC für die Entwicklung von Produkten und Dienstleistungen einsetzen. Dr. Thomas Bönisch vom HLRS gab einen Überblick über den Stand des Technologiemarktes für HPC sowie über die Trends, die die Branche in den kommenden Jahren prägen werden. In einer abschließenden Diskussionsrunde besprachen die Teilnehmer weitere künftige Herausforderungen, wie das Stagnieren der Leistungsverbesserung von HPC-Systemen und die Einschränkungen, die sich aus den hohen Kosten für kommerzielle Software ergeben.

HPC-AI Konvergenz auf der AISys 2024

Die Konvergenz von High-Performance Computing und künstlicher Intelligenz eröffnet der Wissenschaft und Industrie neue Chancen. Das Potenzial dieser Konvergenz kann jedoch nur mit KI-geeigneten HPC-Architekturen und Lösungen für die Integration von KI-Anwendungen und HPC-Workflows vollständig ausgeschöpft werden. Darüber hinaus müssen HPC- und KI-Expert:innen hierfür eng miteinander zusammenarbeiten und gegenseitig Wissen vermitteln. Ein spezieller Track auf der First International Conference on AI-Based Systems and Services (AISys 2024), der von Prof. Michael Resch und Dennis Hoppe vom HLRS organisiert wurde, war ein Schritt in diese Richtung. Auf der Konferenz in Venedig wurde untersucht, wie sich die HPC-Systemleistung und -effizienz mittels KI verbessern lässt, und wie KI die immensen Rechenkapazitäten von HPC nutzen kann, um zunehmend komplexe Modellierungs- und Simulationsaufgaben zu bewältigen. In einem weiteren Beitrag des HLRS präsentierte Rishabh Saxena ein Paper, das Cybersecurity-Probleme beim Einsatz von KI-Anwendungen auf HPC-Systemen zusammenfasst. Die in Zusammenarbeit mit anderen Forschenden des HLRS verfasste Arbeit wurde auf der Konferenz mit einem „Best Paper Award“ ausgezeichnet.

HLRS und TalTech unterzeichnen neuen Kooperationsvertrag

Seit September 2024 kooperiert das HLRS formell mit der School of Information Technologies der Tallinn University of Technology (TalTech). Die in Tallinn, Estland, unterzeichnete Vereinbarung sieht vor, die komplementären Stärken der beiden Einrichtungen in den Bereichen Hoch- und Höchstleistungsrechnen, Simulationsanwendungen für die Automobilforschung und die Industrie, globale Systemwissenschaften, Anwendungen für die Klimaforschung sowie Ausbildung auszubauen. Das Memorandum of Agreement wird gemeinsame Aktivitäten erleichtern, unter anderem den Austausch von wissenschaftlichem Personal, gemeinsame Forschungsprojekte, professionelle Services und Weiterbildungsprogramme, Technologietransfer sowie die Zusammenarbeit mit der Industrie. Das HLRS und TalTech haben auch vorläufige wissenschaftliche Bereiche für die Zusammenarbeit identifiziert, unter anderem die Entwicklung numerischer Algorithmen für technische Anwendungen, die Anwendung neuer Technologien für die parallele Programmierung und das Netzwerk-Computing in den Ingenieurwissenschaften und die Nutzung immersiver Visualisierungstechnologien in der numerischen Simulation. Die Vereinbarung wurde von Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS, und Dr. Erik Puura, Vice-Rector for Entrepreneurship an der TalTech, unterzeichnet.



Der Vice-Rector for Entrepreneurship der TalTech, Erik Puura, und Michael Resch, Direktor des HLRS, unterzeichneten ein Memorandum of Understanding in Tallinn.



v.l.n.r.: Prof. Dr. Bernd Eberhardt (Hochschule der Medien), Sven Meyer (Staatstheater Stuttgart), Matthias Hauser (Media Solution Center Baden-Württemberg), Alexander Bouquet (MACK One), Michael Mack (Europa-Park and MACK One).

Höchstleistungsrechnen für die Freizeitparkbranche

MACK One hat sich von einer hausinternen Agentur im Europa-Park zu einem internationalen Entwickler und Berater von innovativen Freizeitparks, medienbasierter Unterhaltung und Medieninhalten weiterentwickelt. Im Juli 2024 verkündete das Unternehmen eine neue Partnerschaft mit dem Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC), an der auch die Mitglieder des MSC, das HLRS und die Hochschule der Medien, beteiligt sind. Die neue Initiative „MACK Research“ geht über die bisherigen Aktivitäten der Mack-Gruppe hinaus. In interdisziplinären Teams werden modernste digitale Werkzeuge eingesetzt – darunter Simulationen, künstliche Intelligenz, Höchstleistungsdatenanalyse sowie Datenvisualisierung in virtueller und erweiterter Realität. Ziel ist es, innovative Lösungen für die Herausforderungen der Freizeitparkbranche zu entwickeln. Die Initiative ist als Forschungsprojekt konzipiert, in dem die Beteiligten Erfahrungen sammeln und Prototypen entwickeln, die später marktreif werden sollen. Matthias Hauser, Geschäftsführer des MSC, sieht in MACK Research großes Potenzial: „Der Europa-Park und MACK One sind weltweit führend in den Bereichen Freizeitpark und Entertainment. Der Wissenstransfer und der Zugang zu Rechenleistung, den sie durch die Gründung von MACK Research erhalten, wird zu spannenden Entdeckungen führen, von denen letztlich die gesamte Branche profitieren könnte.“

Highlights



Hunter geht am HLRS in Betrieb

Hunter verbindet höhere Leistung mit mehr Energieeffizienz und bietet eine leistungsfähigere, hochmoderne Infrastruktur für Simulationen, künstliche Intelligenz und konvergiertes Rechnen.

Anfang Oktober 2024 schauten Passanten am HLRS zu, wie ein Gabelstapler schwere Kisten durch ein Fenster des Hauptgebäudes in der Nobelstraße hob. In den Kisten befanden sich die Bestandteile von Hunter, Stuttgarts neuem und leistungsstärksten Supercomputer.

Das von Hewlett Packard Enterprise (HPE) entwickelte und hergestellte System Hunter bietet eine erstklassige Infrastruktur für groß angelegte Simulationen, künstliche Intelligenz und Datenanalyse für Wissenschaft, Wirtschaft und den öffentlichen Sektor. Mit einer theoretischen Spitzenleistung von 48,1 Petaflops (48,1 Milliarden Gleitkommaoperationen pro Sekunde) ist Hunter fast doppelt so schnell wie sein Vorgänger Hawk. Gleichzeitig verbraucht er dank der Verwendung von Prozessoren der nächsten Generation bei Spitzenleistung 80 Prozent weniger Energie als der vorherige Supercomputer.

Hunter basiert auf der gleichen HPE Cray Supercomputing EX4000-Architektur, die in den drei weltweit verifizierten Exascale-Systemen zum Einsatz kommt. Hunter stellt einen wichtigen Technologiewechsel am HLRS dar und markiert den Beginn eines neuen Kapitels in der Geschichte des Supercomputing in Stuttgart. Während in früheren Systemen für eine hohe Leistung viele CPUs eingesetzt wurden, basiert der Supercomputer auf der AMD Instinct MI300A Accelerated



Unter den Gästen bei der Einweihung Hunters waren (v.l.n.r.): Berthold Schmidt (TRUMPF), Michael Resch (HLRS), Peter Middendorf (Universität Stuttgart), Matthias Lederer (Porsche), Petra Olschowski (Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg), Tom Schneider (TRUMPF), Brad McCredie (AMD), Anna Christmann (Mitglied des Deutschen Bundestages), Heiko Meyer (HPE), Trish Damkroger (HPE), Marc Fischer (HPE) und Michael Rafii (BMBF).

Processing Unit (APU), die CPUs, GPU-Beschleuniger und Speicher mit hoher Bandbreite in einem einzigen Paket kombiniert.

Hunter wurde wirtschaftlich und ökologisch nachhaltig konzipiert. Das System nutzt die 100 Prozent lüfterlose,



Hunter ist fast doppelt so schnell wie sein Vorgänger Hawk, verbraucht aber bei Spitzenleistung 80 Prozent weniger Energie.

direkte Flüssigkeitskühlung von HPE, die den Energiebedarf für einen Supercomputer dieser Größe erheblich reduziert. Darüber hinaus wird das System eine von HPE in Zusammenarbeit mit dem HLRS entwickelte Softwarefunktion zur dynamischen Leistungsbegrenzung nutzen, um die Rechenproduktivität und Energieeffizienz zu maximieren. Diese Funktionalität überwacht kontinuierlich die laufenden Anwendungen, optimiert die Energieverteilung an jede Anwendung auf der Grundlage ihres individuellen Energiebedarfs und stellt sicher, dass der Gesamtenergieverbrauch eine vorgegebene Leistungsgrenze nicht überschreitet (siehe Seite 43).

Mehr Leistung für künstliche Intelligenz

Die Einführung einer Architektur, die auf CPUs und APU-Beschleunigern basiert, macht Hunter zu einem leistungsstarken System für künstliche Intelligenz. Hunter wird zwar weiterhin traditionelle Anwendungen des Höchstleistungsrechnens unterstützen, bietet aber auch das Potenzial, die HLRS-Nutzergemeinschaft um Datenwissenschaftler und Spezialisten für künstliche Intelligenz zu erweitern, die an der Entwicklung maßgeschneiderter großer Sprachmodelle, Deep-Learning-Projekte und komplexer Datenanalysen interessiert sind.

Die Kombination von CPUs und GPUs in einem einzigen Paket erleichtert die Entwicklung und Ausführung

neuer Arten von Converged-Computing-Workflows, die Simulation, Datenanalyse und künstliche Intelligenz auf innovative Weise kombinieren. Simulationen könnten zum Beispiel auf Hunter verwendet werden, um synthetische Datensätze für das Training von KI-Algorithmen zu erzeugen. Umgekehrt könnte künstliche Intelligenz in Simulations-Workflows integriert werden, um rechenintensive Codes zu beschleunigen.

Sprungbrett zur nächsten Leistungsstufe

Hunter ist als Übergangssystem konzipiert, das den Weg für den nächsten Supercomputer des HLRS ebnet soll. Der kommende Höchstleistungsrechner – Herder – wird von HPE im Jahr 2027 installiert. Herder wird mit mehreren hundertden Petaflops eine weitaus höhere Spitzenleistung als Hunter erreichen. Da Hunter über eine ähnliche GPU-beschleunigte Architektur wie Herder verfügt, kann die Nutzergemeinschaft des HLRS ihre Anwendungen schon so vorbereiten, dass sich die massive Steigerung der Rechenleistung voll ausschöpfen lässt.

Finanzierung von 15 Millionen Euro

Die Gesamtkosten für Hunter betrugen 15 Millionen Euro. Die Hälfte der Mittel stellte das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg im Rahmen seiner Strategie für Höchstleistungsrechnen/Datenintensives Rechnen (HPC/DIC) zur Verfügung. Die zweite Hälfte kommt vom Bundesministerium für Bildung und Forschung innerhalb des SiVeGCS-Projekts. Die Förderung wurde vom Gauss Centre for Supercomputing (GCS), dem Zusammenschluss der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren, ermöglicht.

Das HLRS feierte die Einweihung von Hunter am 16. Januar 2025 im Beisein der baden-württembergischen Wissenschaftsministerin Petra Olschowski, des Rektors der Universität Stuttgart, Prof. Dr. Peter Middendorf, des Executive Vice President und Chief Sales Officer von HPE, Heiko Meyer, des Senior Vice President for Data Center Engineering von AMD, Brad McCredie, und vieler anderer Ehrengäste und Mitglieder der HLRS-Community.

HLRS gewinnt Data Center Strategy Award in der Kategorie „Transformation“

Der Preis würdigt das HLRS für seine nachhaltige Rechenzentrumsstrategie und sein visionäres Neubauprojekt HLRS III.

Für das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart steht eine große Erweiterung an. Im Jahr 2027 wird das HLRS den Supercomputer Herder in einem Neubau, dem HLRS III, installieren – ein großer Leistungssprung für das Zentrum.

Schon jetzt schlagen die Planungen für die Zukunft des HLRS hohe Wellen. Während des Datacenter Strategy Summit im Oktober 2024 wurde das HLRS zum Gewinner des Datacenter Strategy Award in der Kategorie „Transformation“ ernannt. Der Preis würdigt das HLRS für innovative Ansätze im Hinblick auf Energieeffizienz, nachhaltige Rechenzentrumsinfrastruktur und dynamisches Energiemanagement für das HLRS III-Bauprojekt.

„Ich freue mich sehr über diesen Award, der unser Engagement für energieeffiziente Lösungen und Nachhaltigkeit im Höchstleistungsrechnen würdigt“, sagte Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS. „Das Konzept für HLRS III zeigt, dass wir nicht nur leistungsstarke Rechenressourcen anbieten, sondern uns auch unserer Pflicht gegenüber der Gesellschaft bewusst sind. Dieser Award ist eine Anerkennung dafür, dass Technologie und Nachhaltigkeit Hand in Hand gehen können.“

Herder wird im Vergleich zum kürzlich installierten Supercomputer Hunter eine wesentlich höhere Leistung

Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS, nahm die Auszeichnung auf dem Datacenter Strategy Summit 2024 entgegen.



bieten. Das bedeutet aber auch, dass er einen viel höheren Energiebedarf haben wird – bis zu 8 MW an IT-Leistung. Bei der Planung von HLRS III wurde das Ziel verfolgt, das Rechenzentrum zukunftssicher und energieeffizient zu gestalten. Im Neubau werden nachhaltige Materialien verwendet und die Oberfläche des Gebäudes wird mit einer Photovoltaikanlage zur Erzeugung sauberer Energie bedeckt. Die von Herder erzeugte Abwärme wird aufgefangen und über den gesamten Campus der Universität Stuttgart in Vaihingen verteilt, was zu dessen Dekarbonisierung beiträgt. In Kombination mit Abwärmenutzung wird ein Systembetriebskonzept, die sogenannte dynamische Leistungsbegrenzung (siehe Seite 43), im HLRS III eine effizientere Verteilung ungenutzter Energie ermöglichen, die kontinuierlich auf Stromangebot und Nachfrage reagiert.

Seit 2022 verleiht die Vogel IT-Akademie jährlich zum Abschluss des Datacenter Strategy Summit die Datacenter Strategy Awards in den Kategorien Transformation, Nachhaltigkeit und Innovation. Der Preis in der Kategorie Transformation ehrt ein Projekt oder eine Strategie, die die digitale Transformation entscheidend voranbringt und der Organisation einen konkreten Mehrwert bietet.

Ein vorläufiges architektonisches Rendering von HLRS III zeigt das künftige Rechenzentrum und die Stromversorgungsanlage hinter dem derzeitigen HLRS-Gebäude.



Supercomputing für den öffentlichen Sektor

Mithilfe von Simulationen und digitalen Zwillingen können Gemeinden die öffentliche Sicherheit verbessern, sich an den Klimawandel anpassen und empfindliche Landschaftsbereiche erhalten.

Höchstleistungsrechnen unterstützt leistungsstarke Methoden mit dem Potenzial, Gemeinschaften nachhaltiger, widerstandsfähiger und effizienter zu gestalten. Mit bestehenden Technologien für Simulation, künstliche Intelligenz und Visualisierung lässt sich unter anderem die Energiewende beschleunigen, gesündere und lebenswertere Städte können geplant werden, die Verwaltung lässt sich effizienter gestalten und die Auswirkungen des Klimawandels sowie das Risiko von Naturkatastrophen lassen sich besser bewältigen.

Seit einigen Jahren unterstützt das HLRS Organisationen des öffentlichen Sektors bei der Bewältigung von anstehenden Herausforderungen. Diese Bemühungen bewährten sich während der COVID-19-Pandemie, als das HLRS in Zusammenarbeit mit dem Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung ein Tool zur Vorhersage der Belegung von Intensivstationen entwickelte. Im Jahr 2021 folgte der Start des CIRCE-Projekts. CIRCE wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung und dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert, um den Bedarf und die Anforderungen an ein potenzielles Computational Immediate Response Center für Notfälle zu untersuchen.

Das HLRS erweiterte diese Initiativen im Jahr 2024, indem es das Bewusstsein für Supercomputing in öffentlichen Einrichtungen schärfte. „Das HLRS ist eine öffentliche Einrichtung, die sehr wertvolle Maschinen betreibt [...] und die Gesellschaft sollte davon profitieren“, sagte Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des

HLRS, auf einem von CIRCE organisierten Symposium im Juni 2024 in Berlin. „Für uns stellt sich die Frage, wie wir intensiver mit Vertretern des öffentlichen Sektors interagieren können, damit sie die verfügbaren Ressourcen besser verstehen.“

CIRCE bewertet HPC für Krisenprävention und -management

Bei einer qualitativen, interviewbasierten Studie von CIRCE mit Vertreter:innen von Bundes-, Landes- und Kommunalbehörden sowie Krisenstäben gab der Großteil der Befragten an, dass sie Simulationen zur Bewältigung ihrer Herausforderungen nutzen könnten. Zu den von den Befragten genannten potenziellen Anwendungsbereichen gehören Migration, Pandemien, Überschwemmungen, Waldbrände, chemische oder nukleare Unfälle und Terroranschläge. Im Dialog zwischen CIRCE und Vertreter:innen des öffentlichen Sektors wurde auch auf technische und administrative Anforderungen hingewiesen, die eine Voraussetzung dafür sind, dass Supercomputing-Ressourcen und Fachwissen in Krisensituationen ohne weiteres verfügbar sind.

Im Juni 2024 veranstaltete das CIRCE-Team ein Symposium in Berlin, auf dem die vorläufigen Projektergebnisse vor Vertreter:innen aus Behörden und Expert:innen für Katastrophenschutz vorgestellt wurden. Neben allgemeinen Einblicken in die Anforderungen an ein computergestütztes Katastrophenschutzzentrum wurden in den Vorträgen Anwendungen von Simulation, KI und Datenvisualisierung für das Krisenmanagement aufgezeigt. Datenwissenschaftler der Bundesbehörden



In einer vom HLRS mitorganisierten Veranstaltung trafen sich rund 120 Vertreter:innen lokaler Gemeinschaften, um Strategien zur Anpassung an den Klimawandel zu diskutieren.

bereicherten das Treffen, indem sie beschrieben, wie Daten derzeit in der staatlichen Planung und Entscheidungsfindung eingesetzt werden, und gaben Einblicke in die praktischen Herausforderungen des komplexen föderalen Regierungssystems in Deutschland.

Eine Erkenntnis des Treffens war, dass eine enge Zusammenarbeit zwischen HPC-Zentren und engagierten Partnern auf lokaler, Landes- und Bundesebene für die Entwicklung effektiver Lösungen entscheidend ist. Des Weiteren wurde festgestellt, dass eine frühzeitige Vorbereitung auf Notfallsituationen unerlässlich ist. „Wir können nicht erwarten, dass wir Krisen ad hoc bewältigen können, sondern müssen bereits im Vorfeld aktiv werden“, sagte Dr. Juliane Braun, Chief Data Scientist des Bundesministeriums des Innern und für Kommunales (BMI). Es reicht nicht aus, die richtige Simulationssoftware zu entwickeln, sondern man müsse auch sicherstellen, dass Kontrollverfahren, Kommunikationssysteme und Richtlinien für die Entscheidungsfindung vorhanden sind, bevor eine Krisencomputeranwendung in Betrieb genommen wird.

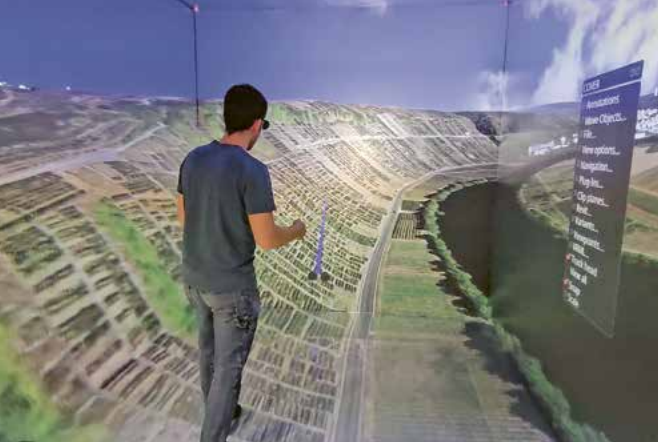
Bei 294 Landkreisen und weiteren 107 kreisfreien Städten in Deutschland ist es weder praktikabel noch effizient, wenn jede Gemeinde ihre eigenen Speziallösungen entwickelt. Stattdessen sollten sie vermehrt gemeinsam Anwendungen entwickeln, die auf breiter Basis nutzbar sind. Als Ergebnis der Aktivitäten von CIRCE hat Christian von Spiczak-Brzezinski von der Feuerwehr Duisburg zusammen mit dem HLRS ein Simulationswerkzeug für die Vorhersage von Hochwasser entlang des Rheins entwickelt. Er stellte fest, dass

öffentliche Organisationen ein besseres Verständnis dafür benötigen, was HPC bieten kann und wie sie mit Höchstleistungsrechenzentren gemeinsam HPC-basierte Lösungen so effektiv wie möglich implementieren können, damit die Simulation eine größere Wirkung entfalten kann.

Instrumente für den Umgang mit dem Klimawandel auf lokaler Ebene

Bei einer vom HLRS mitorganisierten Bürgerveranstaltung im April 2024 in der Gemeinde Sersheim (Landkreis Ludwigsburg) diskutierten rund 120 Besucher aus Baden-Württemberg über die möglichen Auswirkungen des Klimawandels auf lokaler Ebene. Unter dem Motto „Science Goes Society“ setzten sich renommierte Expert:innen aus Wissenschaft, Stadt- und Raumplanung sowie der Kommunalpraxis, darunter der Präsident des Gemeindetags Baden-Württemberg, mit den Herausforderungen für Kommunen auseinander. Anwesend waren auch Vertreter:innen von Verwaltungen, Kreis-, Stadt- und Gemeinderäte und Bürger:innen, die sich über ihre Klimazukunft Gedanken machen. Anlässlich des Symposiums wurde auf einer großen LED-Wand mit 3D-Simulationen aufgezeigt, wie unsere Dörfer, Städte, Wälder und Felder schon bald angesichts des Klimawandels aussehen könnten und wo Vorsorge im Sinne der nachhaltigen Entwicklung und Katastrophenprävention getroffen werden kann. An Mitmach- und Ausstellungsständen wurden viele konkrete Beispiele vermittelt, wie sich Kommunen bereits auf die Herausforderungen des Klimawandels mit Dürren und Hitzeperioden einerseits und Starkniederschlägen mit Hochwasser und Abschwemmungen andererseits vorbereiten.

Bei „Science Goes Society“ stellte das HLRS aktuelle Simulations- und Visualisierungstools, unter anderem Modellierungen von der Ausbreitung von Pandemien, Überschwemmungen und Waldbränden. Da die Fähigkeiten des HLRS im Bereich der künstlichen Intelligenz in den kommenden Jahren zunehmen werden, könnten leistungsstarke Tools für die Datenanalyse Verwaltungsprozesse und die Entscheidungsfindung in Echtzeit in den Gemeinden vereinfachen.



Virtuelle Realität unterstützt die Planung und den Erhalt der Weinberge am Neckar.

Mit digitalen Zwillingen Landschaft und Kultur erhalten

Digitale Zwillinge bieten detaillierte Modelle von physischen Orten in der virtuellen Realität und bereiten Daten so auf, dass sie leichter zu interpretieren sind. In den vergangenen Jahren haben die Forschenden aus der Visualisierungsabteilung am HLRS gezeigt, wie digitale Zwillinge die Entscheidungsfindung in Städten und Gemeinden unterstützen können. Zu den Vorteilen digitaler Zwillinge gehören die Bereitstellung eines datenreichen, realistischen Modells eines Ortes, die Unterstützung effektiver, datengestützter Diskussionen und partizipativer Planungsprozesse sowie die Möglichkeit, Szenarien virtuell zu simulieren.

Bei einer Bootsfahrt auf dem Neckar im April 2024 stellten Wissenschaftler:innen des HLRS führenden Vertreter:innen der Ludwigsburger Kommunen einen digitalen Zwilling der Steilhänge entlang des Flusses vor. An mehreren Stellen am Neckar befinden sich terrassenförmig angelegte Felsen und Hügel, auf denen unabhängige und genossenschaftliche Winzer Wein anbauen. Die Terrassen sind in einem prekären Zustand und die Gemeinden suchen nach Lösungen, um die Landschaft und ihre einzigartige Weinbaukultur zu erhalten.

Das HLRS präsentierte den digitalen Zwilling der Neckarterrassen zwischen Stuttgart und Besigheim und stellte eine Reihe von Anwendungsmöglichkeiten in Aussicht: So könnten beispielsweise Starkregenereig-

nisse oder Erdbeben simuliert werden, um mögliche Risiken zu ermitteln. Wenn im Laufe der Zeit neue Vermessungsdaten zur Verfügung stehen und in den digitalen Zwilling eingespeist werden, könnten auch Erosion und anderer Verfall an den Steilhängen durch den Einsatz von künstlicher Intelligenz dokumentiert werden.

Claus-Peter Hutter, Präsident der Stiftung NatureLife-International und Initiator des Projekts sagte: „Es geht darum, aus einer ganz anderen Perspektive einen besonderen Eindruck über den in Teilen schon weit fortgeschrittenen sowie drohenden Wandel der lieb gewonnenen Landschaft zu ermöglichen.“

Darüber hinaus lässt der digitale Zwilling Planungsszenarien virtuell simulieren. Mithilfe der daraus resultierenden Informationen könnten Akteure in Kommunen besser absehen, wie sich mögliche Entscheidungen auf die Landschaft auswirken. In einigen Fällen könnte der digitale Zwilling die Bewertung von Nutzungsmöglichkeiten für die großen, exponierten Flächen unterstützen, z.B. für die Erzeugung von Solarenergie. Im Idealfall könnten die so gewonnenen Erkenntnisse auch dazu beitragen, eine neue Generation von Weinbauprojekten heranzuziehen, die optimal an die örtlichen Gegebenheiten angepasst sind. Auf diese Weise wird der digitale Zwilling des HLRS die Bemühungen unterstützen, das lokale Erbe zu erhalten und sich gleichzeitig auf die Zukunft vorzubereiten.

Auf der CIRCE-Konferenz sagte Koller, dass das HLRS beim Ausbau der Notfall-Simulationsfähigkeiten in Deutschland nicht allein dastehen kann, sondern weitere datenorientierte Verbündete in der öffentlichen Verwaltung finden muss. „Ich sehe, dass ein Umdenken beginnt“, sagte er abschließend. „Wir werden weiterhin versuchen müssen, es auszubauen und kommunikativ nach außen zu tragen. Ich stelle mir ein Schneeballprinzip vor – je mehr Leute das sehen und je mehr Leute das gut finden, desto weiter werden wir kommen. Sobald dieses Bewusstsein von Entscheidungsträgern ganz oben bis auf kleinster Ebene unten angekommen ist, wird dieses Umdenken Akzeptanz in der Gesellschaft finden.“

Professionelle Zertifizierung im Höchstleistungsrechnen

Fokussierte Tracks in den Bereichen Simulation, maschinelles Lernen und KI, parallele Programmierung und HPC-Administration bieten Chancen zur beruflichen Weiterentwicklung.

Das Schulungsprogramm am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) zählt zu den am längsten bestehenden und umfangreichsten Weiterbildungsangeboten für HPC in Europa. In einer neuen Initiative bietet das HLRS nun Zertifizierungen in Schlüsseldisziplinen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens an. Das Zertifizierungsangebot des HLRS besteht aus vier Themenbereichen: Simulationsentwicklung, maschinelles Lernen und KI-Entwicklung, paralleles Programmieren und HPC-Administration. Jeder Themenbereich hat einen flexiblen Lehrplan, der es den Teilnehmenden ermöglicht, aus verschiedenen Modulen zu wählen und ihre Ausbildung an ihre beruflichen Interessen und Ziele anzupassen.

Laut Dr. Lorenzo Zanon, Leiter der Abteilung für Training and Scalable Algorithms am HLRS, ermöglicht das

Zertifizierungsprogramm den Teilnehmenden, Fachwissen in wichtigen HPC-Disziplinen zu vertiefen. „Mit unserem Zertifizierungsangebot können Sie Kenntnisse in maschinellem Lernen, KI-Algorithmen, Leistungsoptimierung, Hardware-Beschleunigern, wissenschaftlicher Visualisierung, Clusterbetrieb oder Datenmanagement erwerben“, erklärt er. „Die Kombination ausgewählter Kurse innerhalb eines strukturierten Rahmens bietet eine umfassende Erfahrung in den neuesten Technologien und Methoden.“

Die HPC-Zertifizierung basiert auf dem umfangreichen HLRS-Kurskalender mit mehr als 40 Schulungen pro Jahr. Teilnehmende müssen mindestens drei Kurse aus den Hauptthemenbereichen absolvieren und eine Prüfung bestehen. Nach Erfüllung der Anforderungen können sie ein Zertifikat beantragen, das sich aktuellen oder künftigen Arbeitgeber vorlegen lässt. Die Zertifizierung am HLRS ermöglicht es den Teilnehmern, weiterhin wettbewerbsfähig auf dem Technologiemarkt zu bleiben.

Details zur professionellen Zertifizierung, wie die Kursanforderungen und das Kursangebot, finden Sie unter: www.hlrs.de/de/training/uebersicht/professionelle-zertifizierung



Die professionelle Zertifizierung am HLRS baut auf dem umfangreichen Schulungsangebot des Zentrums mit mehr als 40 Kursen pro Jahr auf.

User Support: Portierung von Code auf GPUs

HPC-Expert:innen des HLRS unterstützten Forschende der Universität Stuttgart bei der Vorbereitung des FS3D-Codes auf den Wechsel von Hawk zu Hunter.



Dr. Karthrin Schulte (Mitte) und die Doktoranden David Gösele (links) und Jonathan Wurst (rechts) vom Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt der Universität Stuttgart nutzen den Supercomputer Hunter des HLRS zur Simulation der Tropfendynamik.

Die Mehrzahl der schnellsten Supercomputer der Welt verwenden heutzutage Grafikprozessoren (GPUs) als Beschleuniger. Die ursprünglich für Videospiele entwickelten GPUs rechnen schneller und effizienter als zentrale Recheneinheiten (CPUs), die traditionellen „Zugpferde“ des Höchstleistungsrechnens (HPC). Der Haken ist jedoch, dass Codes, die für CPUs geschrieben wurden, in der Regel nicht auf GPU-basierten Systemen laufen.

Die vorherigen Generationen von Supercomputern am HLRS – darunter Hazel Hen und Hawk – basierten hauptsächlich auf CPUs. Nach der Ankündigung von Hunter begannen die langjährigen Nutzer:innen der Systeme des HLRS jedoch im Jahr 2024 ernsthaft mit

dem Übergang zu GPUs. Obwohl das neue System bei maximaler Leistung fast doppelt so schnell ist wie Hawk, werden Nutzer:innen nur dann wirklich von der Geschwindigkeit profitieren, wenn sie ihre Codes erfolgreich für GPUs umschreiben.

Ein Forschungsteam unter der Leitung von Dr. Kathrin Schulte am Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) der Universität Stuttgart gehört zu den Nutzergruppen, die sich mit dieser Umstellung befassen. Seit mehr als 25 Jahren nutzen Forschende des ITLR die Supercomputer des HLRS, um einen Code namens FS3D (Free Surface 3D) auszuführen. FS3D ist ein umfangreicher, modularer Code mit zahlreichen Anwendungen, der direkte numerische Simulationen von grundlegenden physikalischen Prozessen in Tröpfchen durchführt. Solche Simulationen sind vielseitig anwendbar, von der Wettervorhersage über die Konstruktion von Kraftstoffeinspritzdüsen in Motoren bis hin zum Sprühen von Farbe bei der Herstellung.

Mitte 2024 veranstaltete das HLRS einen Workshop zur praktischen Code-Portierung für seine Community. Während des Workshops traf sich das ITLR-Team mit dem User Support Team des HLRS sowie mit Hardware-Expert:innen von Hewlett Packard Enterprise (HPE, Hunters Hersteller) und AMD, um die einfachsten und effektivsten Strategien für die Auslagerung von Teilen von FS3D auf GPUs zu ermitteln.

FS3D war in seinem Entwicklungsstadium für eine Vektorrechnerarchitektur optimiert. Daher hatten die Entwickler:innen bereits Erfahrung mit dem Programmiermodell OpenMP für parallele Berechnungen mit

gemeinsamem Speicher. Dies kam dem Team bei der Vorbereitung auf Hunter zugute, da das array-basierte Vektor-Computing dem Konzept von GPU-Prozessoren technisch ähnelt. Nachdem das Team die Vor- und Nachteile der verschiedenen Programmiermodelle mit HPC-Expert:innen am HLRS diskutiert hatte, entschied es sich, OpenMP für die GPU-Implementierung von FS3D zu verwenden.

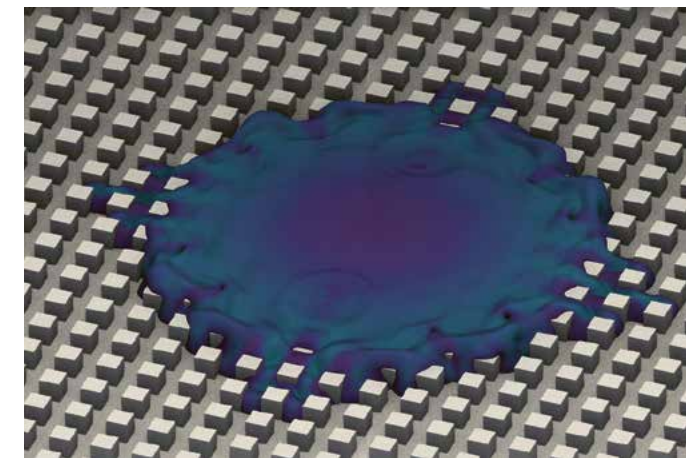
„Wir hätten auch eines der anderen Modelle verwenden können, aber wir hätten nach einer unklugen Entscheidung noch mehr Code umschreiben müssen“, erklärte Schulte. „Da wir keine Erfahrung mit GPUs hatten, hätten wir uns nicht vertraut, eine qualifizierte Entscheidung zu treffen. Das HLRS unterstützte uns bei der Wahl eines sinnvollen Ansatzes.“

Trotz der Erfahrung mit Vektorberechnungen und OpenMP war noch viel Arbeit nötig, um FS3D auf Hunter vorzubereiten. Das Team traf sich während des gesamten Jahres 2024 regelmäßig und beriet sich häufig mit dem User Support des HLRS und technischen Expert:innen von HPE. Wenn die Forschenden auf Fehler stießen oder Funktionen in FS3D identifizierten, die in der neuen Programmierungsumgebung nicht unterstützt wurden, konnten sie dank des schnellen Zugangs zu Systemexpert:innen Probleme gut lösen und Umgehungsstrategien entwickeln. „Wenn zum Beispiel ein Problem mit einem Compiler auftrat, steckten wir nicht wochenlang fest. Sie halfen uns, schnell Lösungen zu finden. Wir schätzten die ständige Unterstützung von allen Seiten – HLRS, HPE und AMD“, so Schulte.

Bevor Hunter vollständig installiert wurde, stellte HPE ein kleines Cluster am HLRS mit der gleichen Architektur zur Verfügung. Auf diesem System konnten Nutzer:innen des HLRS wie das ITLR-Team die portierten

Versionen ihrer Codes testen. Mit diesen Ressourcen war FS3D für GPUs bereit, als Hunter im Februar 2025 offiziell in Betrieb ging.

Um die Leistung von FS3D zu verbessern, sind noch weitere Optimierungen erforderlich. Daher arbeitet das ITLR-Team weiterhin mit den Mitarbeitenden des HLRS, von HPE und AMD an der Weiterentwicklung des Systems. Dadurch wird das ITLR-Team das nächstleistungsfähigere, kommende System des HLRS, Herder, nutzen können, sobald es im Jahr 2027 verfügbar ist. Dies wird Schulte und ihrem Labor dabei helfen, schneller Ergebnisse zu erzielen und neuartige Phänomene der Tröpfchendynamik zu untersuchen.



Kürzlich hat das Schulte-Labor FS3D für hochauflösende Simulationen des Verhaltens von Tröpfchen beim Aufprall auf eine strukturierte Oberfläche verwendet.

Strömungssimulationen senken Betriebskosten in der Wasserwirtschaft

Mithilfe von CFD-Simulationen auf den Supercomputern des HLRS optimiert das Dresdner Ingenieurbüro hydrograv GmbH die Effizienz von wasserwirtschaftlichen Anlagen.

Die Bereitstellung von sauberem Wasser ist für jede Gemeinde unerlässlich und benötigt große Mengen an Energie. Für viele Städte und Kommunen in Deutschland sind die Kosten für den Strom zum Betrieb der Wasserinfrastruktur sogar der größte Einzelposten für Energie in ihrem Jahreshaushalt.

Kläranlagen werden in der Regel von Bauingenieuren geplant und konstruiert. Dabei arbeiten sie eng mit Maschinenbauingenieuren zusammen, die sich um die mechanischen und prozesstechnischen Komponenten der Anlagen kümmern. Zusätzlich sind Umwelt- und Verfahreningenieure sowie Biotechnologen beteiligt, die sich mit der biologischen Abwasserreinigung befassen. Sie sorgen für die optimale Versorgung der Mikroorganismen, die organische Stoffe im Abwasser abbauen und damit die Reinigungsleistung der Anlage sicherstellen.

Eine höchstrelevante Disziplin, die bei solchen Projekten aber allzu oft fehlt, ist die numerische Strömungsmechanik (CFD) – die Wissenschaft der Vorhersage von Strömungen und deren Inhaltsstoffen. Nach Ansicht von Dr. Martin Armbruster, Geschäftsführer der hydrograv GmbH, ist dies eine zu oft verpasste Chance. „Mercedes-Benz oder Porsche würden sich nicht trauen, ein Automobil auf die Straße zu stellen, ohne es heftig strömungsoptimiert zu haben“, stellt er fest. „In unserer Branche ist man aber ein Exot, wenn man das Ingenieursgebilde strömungsoptimiert. Weil das selten passiert, bauen wir oft zu groß und ineffizient.“

Hydrograv wurde im Jahr 2004 als Spin-off des Karlsruher Instituts für Technologie und der Technischen

Universität Dresden gegründet und ist auf CFD-Simulationen für die Wasserwirtschaft spezialisiert. Mithilfe einer speziell weiterentwickelten Open-Source-Software berät hydrograv Anlagenbetreiber dabei, Ineffizienzen zu beseitigen und die Wasserqualität zu verbessern. Gleichzeitig unterstützt das Unternehmen auch Ingenieure bei der Planung neuer Anlagen, wobei Simulationen dazu beitragen, die Effizienz bereits bei der Auslegung zu maximieren. So können mögliche Schwachstellen in Prozessen wie der mechanischen oder biologischen Reinigung frühzeitig erkannt und behoben werden – lange bevor der erste Kubikmeter Beton gegossen wird.

CFD-Simulationen von wasserwirtschaftlichen Anlagen modellieren komplexe Mehrphasenströmungen, deren Berechnung erst durch den Einsatz von Höchstleistungsrechnen (High-Performance Computing, HPC) praktikabel wird. Zwar betreibt hydrograv eigene Computerserver für kleinere Simulationen, doch Simulationen in diesem Umfang könnten allein damit nicht bewältigt werden. Daher nutzt das Unternehmen seit 2019 die Supercomputing-Ressourcen des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) als integralen Bestandteil seiner Simulationspipeline.

„In Anbetracht der Menge an parallelen Simulationen, die wir jetzt durchführen, wäre unsere Arbeit ohne das HLRS als Partner nicht möglich“, sagte Dr. Armbruster. Die Partnerschaft zeigt eindrucksvoll, welche Möglichkeiten kleine Unternehmen durch die Nutzung der Rechnersysteme des HLRS erschließen können. Darüber hinaus verdeutlichen sie, wie HPC einen Beitrag zu Nachhaltigkeit leisten kann.

Belüftung in Belebungsbecken effizienter gestalten

Eine zentrale Komponente einer Kläranlage ist das Belebungsbecken, in dem Mikroorganismen organische Schmutzstoffe im Abwasser abbauen. Damit diese Mikroorganismen optimal arbeiten können, ist eine gleichmäßige Versorgung mit gelöstem Sauerstoff notwendig. Dies wird in der Regel durch Gebläse und feinblasige Belüftungssysteme gewährleistet, die den Sauerstoff effizient ins Becken eintragen. Das Prinzip ähnelt der Sauerstoffanreicherung in Aquarien, jedoch in weitaus größerem Maßstab und mit speziell ausgelegten technischen Systemen zur Energieeffizienz und Prozesskontrolle.

Die Platzierung der Belüftungselemente (Belüfter) im Belebungsbecken ist von entscheidender Bedeutung für die Effizienz des Sauerstoffeintrags. „Obwohl es die kostengünstigste und wartungsärmste Lösung sein mag, die Belüfter in einem einzigen Bereich zu platzieren, ist dies aus Strömungssicht nicht optimal“, erklärt Dr. Armbruster. Eine ungünstige Platzierung der Belüfter im Becken kann dazu führen, dass Luft zu schnell an die Wasseroberfläche gelangt und in die Atmosphäre entweicht. Dadurch löst sich nicht genügend Sauerstoff im Wasser, sodass mehr Luft als nötig eingebracht werden muss. Dies führt zu einem ineffizienten Prozess und einem unnötig hohen Energieverbrauch.



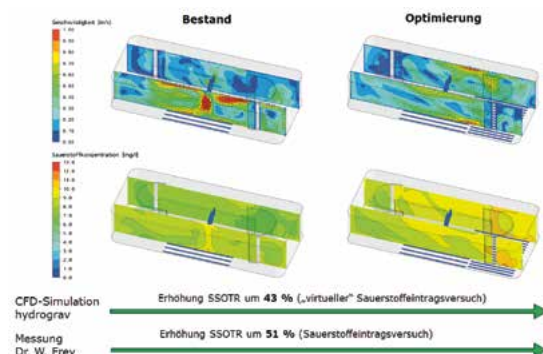
Mithilfe von Simulationen kann hydrograv realistisch prognostizieren, wie sich der Sauerstoff im Becken verteilt – abhängig von der Platzierung der Belüfter und den verschiedenen Betriebsszenarien. Eine praxisnahe Studie hat gezeigt, dass durch die Optimierung der Belüftung der Sauerstoffeintrag um mehr als 40 Prozent erhöht werden konnte. „Wenn man bedenkt, dass der Betrieb von Belüftern der größte Kostenfaktor in einer Kläranlage ist, die ihrerseits oft der größte städtische Energieverbraucher ist, wird deutlich, warum die Optimierung von CFD äußerst wichtig ist“, so Dr. Armbruster.

Neben der Optimierung der Belüftung kann CFD auch zur Verbesserung der Pumpenauslegung sowie zur Optimierung der Geometrie von Becken und Kanälen eingesetzt werden. Eine nicht optimierte Zirkulation kann zur Bildung von Totzonen führen, in denen das Abwasser nicht gleichmäßig verteilt wird, was eine uneinheitliche Wasseraufbereitung zur Folge hat. Zudem können ungünstige Strömungsverhältnisse Ablagerungen begünstigen, die den Durchfluss behindern und das Risiko eines Beckenumlaufs erhöhen. Infolgedessen müssen die Pumpen mit höherer Leistung arbeiten, was den Energieverbrauch und die Betriebskosten steigert. Darüber hinaus kann eine ungünstige Anströmung die Lebensdauer der Pumpen verringern, da sie zu erhöhtem Verschleiß und mechanischer Belastung führt.

Mithilfe von CFD-Simulationen kann hydrograv gezielte Vorschläge für bauliche Anpassungen erarbeiten, beispielsweise zur optimalen Platzierung von Leitwänden, um den Wasserfluss zu lenken und die Durchmischung zu verbessern. Solche Optimierungen tragen dazu bei, komplexe Reinigungsprozesse effizienter zu gestalten und den Energieverbrauch zu reduzieren. In einem Projekt mit dem Entwässerungsbetrieb der Stadt Erlangen führte hydrograv am HLRS CFD-Simulationen

Bei komplexen Mehrphasenströmungen ist die Validierung von CFD-Modellen ein essenzieller Bestandteil, um belastbare Simulationsergebnisse zu erzielen. In einem Vergleich von simulierten und gemessenen Geschwindigkeiten in einem Belebungsbecken zeigt die Abbildung eine enge Übereinstimmung.

Die Abbildung zeigt ein Simulationsprojekt, in dem der Sauerstoffeintrag in einem Belebungsbecken durch Strömungsoptimierung mittels CFD-Simulationen um 43 Prozent gesteigert werden konnte. Die Simulationsergebnisse wurden durch Messungen von W. Frey bestätigt.



durch, die die Leistung der Nachklärstufe erheblich steigerten. Der Ansatz war so erfolgreich, dass ein zuvor notwendiges Filtersystem zur Einhaltung der Abwasserablaufwerte vollständig abgeschaltet werden konnte. Diese Optimierung senkte den Energieverbrauch um 500.000 kWh pro Jahr.

In einem weiteren Projekt unterstützte hydrograv die Stadt Hanau bei der Optimierung ihres Nachklärbeckens. Um zu vermeiden, dass die Stadt 35 Millionen Euro für den Umbau der Anlage ausgeben muss, bot hydrograv eine effiziente Lösung für die Regulierung des Zuflusses an, die nahtlos ins bestehende Becken integriert werden konnte. Mit Investitionskosten von lediglich 1,5 Millionen Euro sparte die Stadt nicht nur erhebliche finanzielle Mittel, sondern erreichte auch erstmals die anspruchsvollen Ziele zur Reduzierung der Phosphorkonzentration im Abwasser. Hydrograv GmbH wurde für ihren herausragenden Beitrag zum Umweltschutz mit dem Sächsischen Umweltpreis ausgezeichnet.

Leistungsstarke, flexible Simulationsmöglichkeiten am HLRS

Seit seiner Gründung hat hydrograv mehr als 1.000 Simulationsprojekte für Kunden in Deutschland, Europa und weltweit erfolgreich durchgeführt. Mittlerweile übersteigt der Bedarf an Simulationen die Kapazitäten der eigenen Server bei Weitem. Ein Rechenzeitliefervertrag mit dem HLRS ist daher zu einem unverzichtbaren Bestandteil der Unternehmensarbeit geworden.

Mithilfe eines Knotens auf dem Supercomputer des HLRS können die Simulationen von hydrograv oft 24 Stunden dauern – große Simulationsprojekte benötigen sogar bis zu eine Woche. Bei einigen Projekten muss das Unternehmen auch mehrere Simulationen dieser Größenordnung durchführen, um eine optimale Lösung

zu finden. Mit der am HLRS installierten Software kann hydrograv von Dresden aus auf das System zugreifen und verfügt damit über ein leistungsfähiges und flexibles Instrument, das nun in seine Simulationsabläufe integriert ist.

„Es kann vorkommen, dass wir in einem Monat drei oder vier Kunden haben, für die jeweils fünf bis zehn Simulationen durchgeführt werden müssen. Wenn wir jedoch im nächsten Monat nicht den gleichen Bedarf haben, wäre es schwierig zu entscheiden, wie viele Computer wir in unserem Serverraum aufstellen sollen“, so Dr. Armbruster. „Das ist der Vorteil, wenn man diese Simulationen am HLRS durchführt. Wir können genau die Menge an großer Rechenleistung abrufen, die wir brauchen, in dem Moment, in dem wir sie brauchen.“

Für hydrograv ist es von großer Bedeutung, dass ihre Software und Daten in einer sicheren Umgebung geschützt sind. „Durch das Rechnen an einem Bundeshochleistungsrechenzentrum können wir und unsere Kunden sicher sein, dass unser Know-how im Land bleibt“, so Dr. Armbruster.

Der Einsatz von CFD in der Wasserwirtschaft ist noch ungewöhnlich. Angesichts der Vielzahl an Anlagen in Deutschland und Europa und der Tatsache, dass die Kosten für die Simulation viel geringer sind als die Kosten für die Energieverschwendung, hofft Dr. Armbruster, dass dieser Ansatz künftig häufiger zum Einsatz kommt. Dies könnte den Gemeinden nicht nur dabei helfen, Kosten zu senken, sondern auch die Abwasserentsorgung und die Energieinfrastruktur nachhaltiger zu gestalten.

Supercomputing in der Kunst

Das HLRS begleitet zusammen mit dem Media Solution Center Baden-Württemberg Gastkünstler:innen, um kreativ mit Anwendungen des Höchstleistungsrechnens zu experimentieren.

Das Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC) ist ein gemeinnütziger Verein, der im Jahr 2018 vom HLRS mitbegründet wurde, um die Zusammenarbeit zwischen der Kultur- und Kreativwirtschaft sowie Expert:innen für Höchstleistungsrechnen zu fördern. Das MSC ist europaweit in der Kulturbranche sehr gut vernetzt und bringt auch das HLRS als Partner mit in EU-Initiativen zur Förderung der digitalen Innovation in der Kunst ein.

Gemeinsam mit dem MSC beteiligte sich das HLRS an S+T+ARTS (Science, Technology, and the Arts), einer im Jahr 2016 von der Europäischen Kommission ins Leben gerufenen Initiative, die Residenzprogramme zur Förderung der multidisziplinären Zusammenarbeit organisiert. Das MSC koordinierte im Projekt S+T+ARTS AIR eine offene Ausschreibung und ein Residenzprogramm, in dem zehn Gaststipendien vergeben wurden, wovon zwei im Jahr 2024 am HLRS stattfanden. Die

Ergebnisse dieser und anderer S+T+ARTS AIR-Projekte wurden im Oktober in Barcelona während eines zweitägigen Festivals präsentiert, das vom MSC in Zusammenarbeit mit der Fundación Épica La Fura dels Baus organisiert wurde. Die Veranstaltung war einer der Hauptprogrammpunkte des zweimonatigen Festivals „Future Boundaries“, das von the GATE (Global Art-Science and Technology Development) organisiert wurde.

Das HLRS beteiligt sich weiter an S+T+ARTS. Im Jahr 2025 wird das HLRS innerhalb des Residenzprogramms S+T+ARTS EC(H)O vier neue Gastkünstler betreuen. Die Projekte der Künstler befassen sich mit digitalen Technologien zur Erkundung des europäischen Kulturerbes, mit technologischen Lösungen, die von der Natur inspiriert sind, mit immersiven visuellen datenbasierten Erzählungen und der Frage, wie digitale Zwillinge soziokulturelle und ökologische Dimensionen des städtischen Umfelds zum Leben erwecken können.

Er-

Über die Beteiligung am S+T+ARTS-Programm hinaus war das HLRS im September 2024 Gastgeber des ReACH II Workshops (Research and Creation Center for eCulture and the Humanities). Während des vom MSC organisierten dreitägigen Treffens informierten sich Kunst- und Kulturschaffende über neue Anwendungen digitaler Technologien in der Kunst und erlangten ein besseres praktisches Verständnis dafür, wie man ein künstlerisches Konzept zu einer erfolgreichen wissenschaftlichen Zusammenarbeit entwickelt.

Ergebnisse aus dem S+T+ARTS Projekt wurden während des TheGATE Festivals in Barcelona vorgestellt.



Simulationswissenschaften treffen Geisteswissenschaften

Zwei multidisziplinäre Konferenzen untersuchten, wie computergestützte Forschung und Bereiche wie Literaturwissenschaft, Theater und Architektur voneinander profitieren könnten.

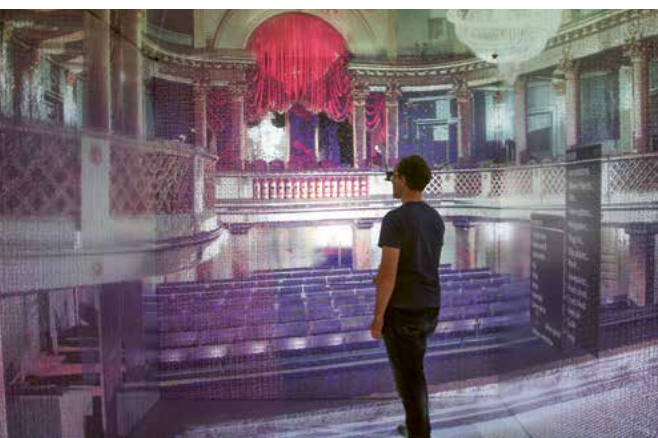
Simulation lässt sich nicht nur als Werkzeug für Wissenschaft und Technik einsetzen, sondern auch um in die Realität zu blicken und mit ihr zu interagieren. Am HLRS werden Simulationskonzepte aus verschiedenen Blickwinkeln betrachtet, um ein besseres Verständnis von computergestützter Forschung zu erhalten.

So beteiligt sich das HLRS seit 2023 am Stuttgart Research Focus (SRF) „(Re-)Producing Realities“ (Re²). Expert:innen aus den digitalen Geisteswissenschaften, den Sozialwissenschaften, den Produktionstechnologien und den Simulationswissenschaften der Universität Stuttgart und der Stuttgarter Kulturszene entwickeln hierbei gemeinsam ein strukturiertes Verständnis digitaler Realitäten. Re² nutzt das Theater als strukturelles Modell, um zu untersuchen, wie Repräsentation unsere Wahrnehmung und unser Verständnis der Welt formt. Während eines Auftaktsymposiums am 26. Juni 2024 wurden die Ziele von Re² vorgestellt. In einem Ansatz erforscht Re² das Potenzial des Einsatzes digitaler Technologien zur Nachbildung historischer Realitäten. Am HLRS haben Visualisierungswissenschaftler:innen beispielsweise digitale Zwillinge des Ludwigsburger Schlosstheaters und des Théâtre des Tuileries in Paris geschaffen. Simulationen können zum Erhalt historisch bedeutsamer Bühnenmaschinen beitragen und der Forschung neue Chancen eröffnen.

In einem weiteren Ansatz wird Re² die Rolle der Performance bei der Herstellung von Realitäten untersuchen. Wie im Theater kann Computersimulation Realitäten schaffen oder erweitern, indem sie Beweise liefert oder nicht wahrnehmbare Merkmale der Welt sichtbar macht. Durch die Betrachtung der digitalen Welt durch die Linse der theatralischen Performance könnte Re² daher ein tieferes Verständnis für die Annahmen bieten, die der Technologieentwicklung und -nutzung zugrunde liegen. Bei der Re²-Auftaktveranstaltung wurden in drei Vorträgen repräsentativ für das Projekt Forschungsbeispiele vorgestellt, die sich mit der Schnittstelle von Theater und Technologie befassen.

Auf einer internationalen Konferenz mit dem Titel „Reality in Science, Art, and the Humanities“ im Oktober 2024 am HLRS ermittelten Forschende weitere Gemeinsamkeiten und Unterschiede in den Realitätskonzepten der Natur- und Geisteswissenschaften. Wissenschaftler:innen aus Deutschland, Japan und Saudi-Arabien untersuchten vielfältig angewandte Simulationskonzepte und konzentrierten sich dabei auf die inhärenten Annahmen und Lücken, die ihre Beziehung zur Realität problematisieren. Die Vorträge befassten sich mit wissenschaftlichen und technischen Anwendungen wie Strömungsmechanik und einem Frühwarnsystem für Naturkatastrophen, aber auch mit kulturellen Anwendungen wie einer virtuellen Rekonstruktion des Schlosses von Versailles und einer textuellen Rekonstruktion der Schriften von Franz Kafka.

Das HLRS erstellte einen digitalen Zwilling des Ludwigsburger Schlosstheaters, mit dem die historisch bedeutsame Bühnenmaschinerie in der virtuellen Realität erforscht werden kann.



Energieeffizienteres HPC mit dynamischem Power Capping

Eine intelligente Lösung regelt die Energieverteilung in einem HPC-System, um seine Leistung innerhalb eines Energiebudgets zu optimieren.

Mithilfe eines von Hewlett Packard Enterprise in Zusammenarbeit mit dem HLRS auf dem Supercomputer Hawk bis Februar 2024 entwickelten Ansatzes, dem so-dynamischen Power Capping, senkte das Zentrum den Gesamtstromverbrauch der Anwendungen um etwa 20 Prozent ohne erhebliche Leistungseinbußen. Die Stromeinsparung ist vergleichbar mit dem jährlichen Verbrauch von etwa 1.500 Einfamilienhäusern.

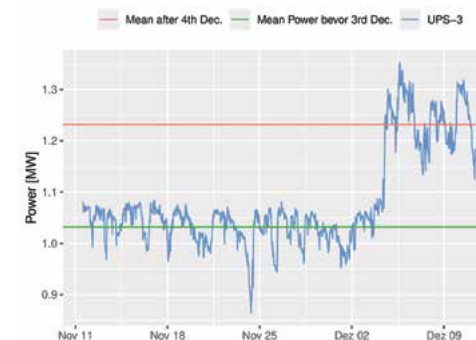
Herkömmliche Ansätze zur Begrenzung des Stromverbrauchs drosseln normalerweise die Prozessorgeschwindigkeit, sodass das System langsamer läuft. Diese Methode kann zwar den absoluten Stromverbrauch reduzieren, schränkt aber auch die Hauptfähigkeit von Supercomputern ein: das Rechnen von massiv parallelen Simulationen in Spitzengeschwindigkeit.

Die dynamische Leistungsbegrenzung berücksichtigt hingegen, dass verschiedene Codes unterschiedliche Leistungsanforderungen haben. Bei rechengebundenen Codes läuft ein Algorithmus besser, wenn die Systemgeschwindigkeit höher ist. Bei speichergebundenen Codes hingegen hängt die benötigte Zeit für die Ausführung weniger von der Prozessorgeschwindigkeit als

von den Speicher- und Datenübertragungsmöglichkeiten eines HPC-Systems ab. Hier führt eine Maximierung der CPU-Geschwindigkeit nicht zu einer Leistungssteigerung, da der Algorithmus erst nach der Datenübertragung seine nächste Berechnung durchführen kann.

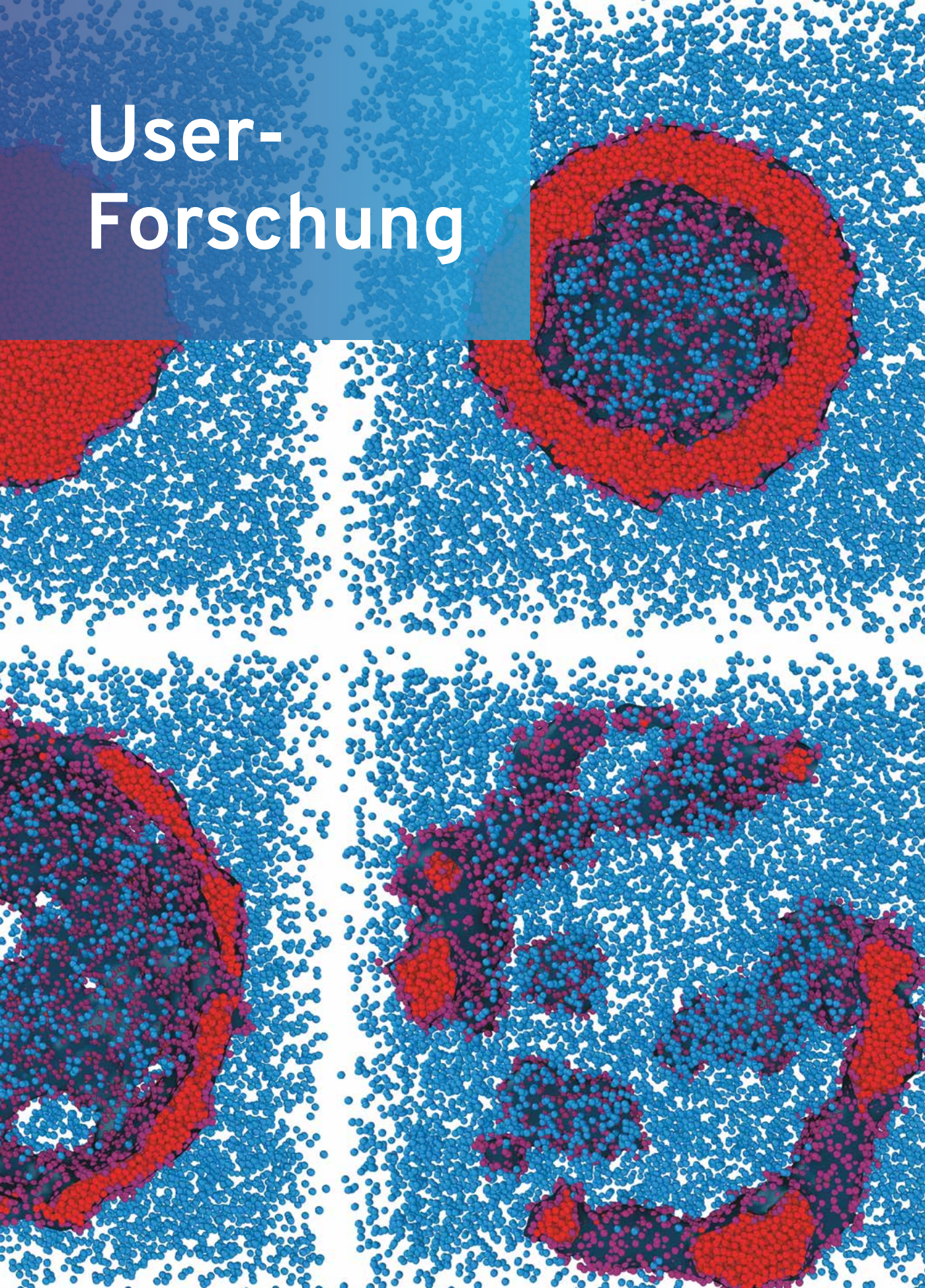
„Das dynamische Power Capping von HPE ist insofern einzigartig, als dass es die unterschiedlichen Leistungsanforderungen dieser beiden Kategorien von Codes innerhalb eines bestimmten verfügbaren Leistungsbudgets ausgleicht“, erklärt Dr. Christian Simendinger, HPC Performance Engineer bei HPE. „Für speichergebundene Codes kann die verfügbare Leistung deutlich gedeckelt werden, was ohne negative Auswirkungen auf die Anwendungsleistung zu erheblichen Energieeinsparungen führt. Die Leistungsbegrenzung wird automatisch in regelmäßigen Abständen optimiert, um auf sich ändernde Phasen im Betrieb einer Anwendung zu reagieren.“

Der Ausgleich der verfügbaren Leistung zwischen rechengebundenen und speichergebundenen Codes reduziert plötzliche Spitzen und Einbrüche im Gesamtenergieverbrauch. Er ermöglicht ein konsistentes, stabiles Leistungsniveau. Das Power Capping kann auch dynamisch reagieren, wenn das HLRS seine gewünschte Leistungsgrenze ändert. Das HLRS und HPE planen, dynamisches Power Capping auch auf Hunter und Herder zu erweitern.



Die grüne Linie zeigt den mittleren Stromverbrauch bei Dynamisches Power Capping. Die rote Linie zeigt den mittleren Stromverbrauch während eines Versuchsbetriebs ohne Leistungsbegrenzung im Dezember 2024. Der Versuchsbetrieb zeigte, dass die dynamische Leistungsbegrenzung eine Energieeinsparung von etwa 20 % ohne erkennbaren Leistungsabfall ermöglichte.

User- Forschung



Leisere und sicherere Hubschrauber mithilfe von HPC

Forschende der Universität Stuttgart haben Airbus bei der Entwicklung der nächsten Generation des RACER-Hubschraubers unterstützt.

Mit dem Aufkommen von Lufttaxi und drohnen-
gestützten Lieferdiensten wächst die Nachfrage nach einer neuen Generation von möglichst sicheren, leisen und energieeffizienten Hubschraubern. Eine Forschungsgruppe um Prof. Manuel Keßler am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart hat sich dieser Aufgabe angenommen. Keßlers Team arbeitet seit Langem an der Verbesserung von Hubschraubern. Die Supercomputer am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) setzen die Forschenden ein, um die komplexe Aerodynamik von Hubschrauberrotoren zu verstehen.

„Meine Gruppe beschäftigt sich seit zweieinhalb Jahrzehnten mit diesem Thema und in dieser Zeit haben wir eng mit der Industrie zusammengearbeitet“, so Keßler. „Sie kommen mit Fragen zu uns, bei denen sie Unterstützung brauchen. Wir liefern ihnen Wissen und Erkenntnisse sowie Simulationen zur Beantwortung dieser Fragen. Wir arbeiten seit Langem mit Airbus Helicopters zusammen und sie verwenden in ihrer Forschung häufig die gleichen Werkzeuge wie wir. Die Ergebnisse unserer Forschung fließen also direkt in industrielle Produkte ein.“

Kürzlich arbeiteten Keßler und sein Team mit Airbus an Modellierungs- und Simulationsprojekten. Das Ziel: die Geräuschemissionen des neuen RACER-Prototyps verringern und dessen Flugdynamik besser verstehen. RACER, der im April 2024 seinen ersten Testflug absolvierte, ist ungewöhnlich, insofern er sowohl Hub-

schrauberrotorblätter als auch Flugzeugpropeller an den Tragflächen hat. Dank dieser Merkmale lässt sich das neue Flugzeug in Notsituationen schneller einsetzen. Die Zusammenarbeit zur Verbesserung von RACER ist ein Beispiel dafür, wie öffentliche HPC-Zentren zur wirtschaftlichen Entwicklung und Wettbewerbsfähigkeit Europas beitragen.

Modellierung und Simulation verkürzen die Zeit bis zur Marktreife

Hubschrauber sind zwar keine neue Erfindung, aber um sie effizienter, sicherer oder leiser zu gestalten, müssen komplexe physikalische Phänomene auf einer grundlegenden Ebene verstanden werden. Forschende müssen die komplexe Geometrie des Hubschraubers in ein sehr feines Rechengitter von etwa 200 Millionen Gitterzellen zerlegen, damit sie Modelle für diese Phänomene entwickeln können. In einer Standardsimulation berücksichtigen sie zehn Umdrehungen des Hubschrauberrotors. Um die kleinräumigen Veränderungen zu erfassen, die sich auf die Flugdynamik oder die Akustik auswirken können, unterteilen sie jede Umdrehung in 720 kleine Zeitschritte. Das bedeutet, dass sie mehr als eine Billion Einzelberechnungen durchführen, verfolgen und analysieren müssen. „Diese Simulationen sind zu groß, als dass wir sie auf einem kleineren Cluster durchführen könnten; nur auf Supercomputern können wir diese Berechnungen effizient durchführen“, so Keßler.

In Zusammenarbeit mit Airbus und als Teil des Projekts CA³TCH (gefördert innerhalb des Programms „Clean Sky 2“ der Europäischen Union) modellierte das Team um Keßler das neue RACER-Design, um die Lärmbelastung zu reduzieren und ein umfassenderes Verständnis

◀ Forschende des Labors für Technische Thermodynamik an der RPTU Kaiserslautern führten am HLRS Molekulardynamiksimulationen durch, um zu untersuchen, wie Tröpfchen explodieren – ein Prozess, der z.B. bei Verbrennungsanwendungen wichtig ist.

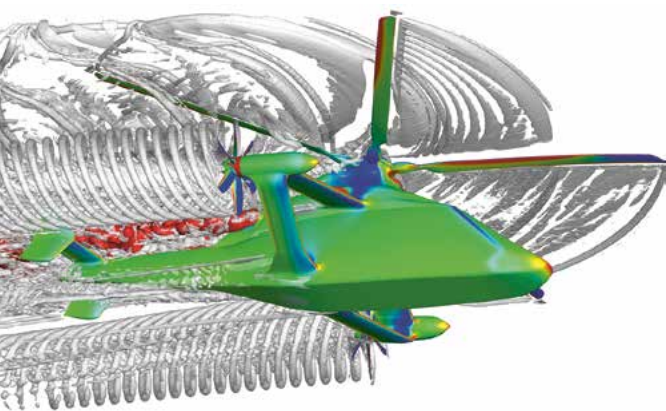
der Flugdynamik zu erlangen. Dadurch wollten sie das Risiko vor dem ersten Flug des Helikopters verringern.

Das Team führte eine Reihe von Simulationen unter verschiedenen Bedingungen durch, z.B. im Schwebeflug bei Seitenwind und zur Bestimmung des sogenannten „Rollwinkels“, d.h. des maximalen seitlichen Neigungswinkels, den der Hubschrauber erreichen kann, bevor die Propeller den Boden berühren. Da RACER sowohl einen herkömmlichen Rotor als auch Flügel hat, gibt es nur sehr wenige experimentelle Daten, auf die Forschende sich stützen können. Das macht den Bedarf an Modellierung und Simulation noch größer.

„Aufgrund unserer routinierten Arbeitsabläufe und der etablierten Beziehungen, die wir zu unseren Industriepartnern aufgebaut haben, vertrauen sie auf unsere Simulationen, wenn wir darauf hinweisen, dass ein Modell ein Stabilitätsproblem haben könnte“, sagt Keßler. „Ich habe immer gesagt, dass es unsere Aufgabe ist, dafür zu sorgen, dass die Piloten nach dem ersten Testflug eines Flugzeugs mit einem Grinsen im Gesicht aussteigen und während des Flugs nicht ins Schwitzen geraten.“

Herausforderungen und Chancen für die Entwicklung der nächsten Flugzeuggeneration

Die Umstellung des HLRS von Hawk auf den neuen Supercomputer Hunter bringt für das Forschungsteam von Keßler sowohl Chancen als auch Herausforderungen mit sich. Hunter ist das erste System am HLRS, das eine große Anzahl von GPU-Beschleunigern enthält.



Während sich mithilfe von GPUs die Leistung beschleunigen und die Energieeffizienz in den schnellsten Computern der Welt verbessern lassen, stellen sie für einige wissenschaftliche Nutzer:innen von HPC eine neue Technologie dar. Forschende, die bisher noch keine GPU-basierten Supercomputer einsetzen, müssen ihre Code-Pakete – manchmal stark – modifizieren, um die Vorteile der Systemarchitektur voll ausschöpfen zu können. Sobald ein Forschungsteam die Technologie von Hunter gut beherrscht, kann es mehr hochauflösende Simulationen durchführen, was die Produktionszeiten weiter verkürzt und die Sicherheit im Prozess erhöht.

Keßler weist darauf hin, dass das User Support Team des HLRS proaktiv dazu beigetragen hat, dass sein Team Hunter direkt nach seiner Einweihung nutzen kann. „Das Zentrum hat uns bei dieser Umstellung bereits sehr unterstützt“, betont Keßler. „Wir wurden kürzlich zu einem Treffen eingeladen, bei dem wir die verschiedenen Optionen mit Mitarbeitenden aus allen Bereichen, einschließlich des Hardwareherstellers, diskutierten. Das HLRS kam aktiv auf uns zu und sagte: ‚Wir werden diese Umstellung künftig vornehmen, wie können wir Ihnen also jetzt schon bei der Vorbereitung helfen?‘“

Keßler hält diese frühe Zusammenarbeit für wesentlich. Denn selbst wenn die Mitarbeiter:innen des HLRS weder über detaillierte Kenntnisse des Codes seines Teams noch sämtliche Codes für alle Forschungsprojekte des Zentrums umschreiben können, wird die Unterstützung dazu beitragen, dass sein Team weiterhin Simulationen für Industriepartner bereitstellen kann. Die Ergebnisse liefern Erkenntnisse für Hubschraubersdesigns der nächsten Generation. Die Kollaboration ermöglicht eine nahtlose, sichere, zuverlässige und effiziente Produktion europäischer Hubschrauber.

EG

Das Team von Dr. Manuel Keßler nutzt Supercomputing-Ressourcen des HLRS, um Airbus Helicopters bei der Simulation ihres neuen RACER-Hubschraubers unter verschiedenen Flugbedingungen zu unterstützen.

Simulationen unterstützen die Suche nach personalisierten Krebstherapien

Mithilfe groß angelegter Molekulardynamiksimulationen am HLRS unterstützen Forschende genetische Mutationen, die mit aggressiven Krebsarten in Verbindung stehen.

In den vergangenen Jahrzehnten ist das Supercomputing zu einem unverzichtbaren Werkzeug für die biomedizinische Wissenschaft geworden. In der Krebsforschung zum Beispiel können Berechnungsmethoden mithilfe von Supercomputern Details auf molekularer Ebene aufdecken, ohne die sich Krankheiten kaum verstehen und behandeln ließen. Solche Methoden sind besonders wichtig im Bereich der personalisierten Medizin. Bei diesem Ansatz versuchen Forschende wirksamere Medikamente zu entwickeln, die auf spezifische molekulare Merkmale der Tumore einzelner Patienten abzielen.

„Mit der Verbesserung der rechnergestützten Methoden in den letzten 40 Jahren sind Berechnungen zu einem wichtigen Hilfsmittel für die Biophysik und die pharmazeutische Forschung geworden“, sagt Dr. Giovanni Settanni, der an der Ruhr-Universität Bochum und der Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU) in computergestützter Biophysik forscht. „Simulationen können als eine Art In-silico-Mikroskop mit einer Auflösung auf molekularer Ebene angesehen werden. Sie helfen bei der Interpretation experimenteller Daten, die kaum die gleiche Auflösung erreichen können.“

Settanni ist Experte für Molekulardynamiksimulation (MD). Dieser Forschungsbereich entwickelt anhand von

Prinzipien aus der Biophysik Modelle von Molekülen auf atomarer Ebene. MD-Methoden werden in der biomedizinischen Forschung u.a. zur Vorhersage von Veränderungen in der Proteinstruktur eingesetzt. Solche Veränderungen wirken sich auf die Fähigkeit eines Proteins aus, mit anderen Molekülen zu interagieren und sich an sie zu binden. Wegen ihrer extrem hohen Auflösung und weil sie zeigen, wie sich die Form von Proteinen im Laufe der Zeit verändern kann, können MD-Simulationen nur mit Supercomputern durchgeführt werden. Kürzlich zeigte Settanni, wie sich anhand von Simulationen auf dem Supercomputer Hawk am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart neue Behandlungsmöglichkeiten gegen Krebs entdecken lassen.

p53, ein wichtiges Protein bei Krebserkrankungen

Dr. Settanni hat mit der Gruppe des Strukturbologen Dr. Andreas Joerger von der Goethe-Universität Frankfurt zusammengearbeitet, um ein wichtiges Protein namens p53 zu untersuchen. In einem gesunden menschlichen Körper dient p53 als Bollwerk gegen Krebs, indem es reguliert, wie sich Zellen teilen und wie sie DNA-Schäden reparieren. Wenn jedoch eine Mutation in p53 entsteht, kann sich wegen einer Veränderung des genetischen Codes die Aminosäuresequenz ändern, die auch die 3D-Struktur des Proteins beeinflusst.

Dies kann dazu führen, dass das Protein seine normalen regulatorischen Fähigkeiten verliert. Beim Ausfall dieser Bremse können sich Krebszellen unkontrolliert teilen und ausbreiten. Etwa die Hälfte aller Krebsfälle geht auf Mutationen zurück, die das p53-Protein deaktivieren.

Bei einem Ansatz in der Krebsforschung suchen Wissenschaftler:innen nach Medikamenten, die schädliche Mutationen neutralisieren können, indem sie sich mit Proteinen verbinden. Im Fall von p53 suchen sie nach kleinen Molekülen, die die Mutationen stabilisieren und die ursprüngliche Form des Proteins wiederherstellen können. Wenn ein geeignetes Molekül gefunden würde, könnte p53 wieder normal funktionieren. Bis vor Kurzem hielten Krebsforschende p53 jedoch für unangreifbar, da seine Oberfläche für die Bindung mit kleinen Molekülen praktisch überall ungeeignet zu sein schien.

In früheren Forschungsarbeiten zeigte Joerger, dass es möglich sei, eine bestimmte Mutation namens Y220C zu behandeln. Die Y220C-Mutation verursacht eine spezifische physikalische Veränderung, die einen destabilisierenden Spalt in der Oberfläche von p53 erzeugt. Die Veränderung führt dazu, dass das Protein bei Körpertemperatur seine normale Form verliert. Joergers Labor identifizierte ein kleines Molekül, das sich an die Oberfläche des Y220C-Hohlraums bindet und so p53 wieder in seine richtige Form bringt. Im Labor zeigten die Forschenden auch, dass der Ansatz die Anti-Krebs-Funktion des Proteins wiederherstellt. Dieses Ergebnis führte zu einem klinischen Versuch, um die Sicherheit und Wirksamkeit dieser Strategie am Menschen zu testen.

Angesichts dieses Erfolgs sucht Joerger nun nach anderen potenziell behandelbaren Mutationen in p53. Er möchte auch im Allgemeinen verstehen, ob mutations-spezifische, kleine Moleküle einen wirksamen Weg zur Wiederherstellung der Funktion des kritischen Proteins bieten. Hier leisten Simulationen nun einen wichtigen Beitrag.

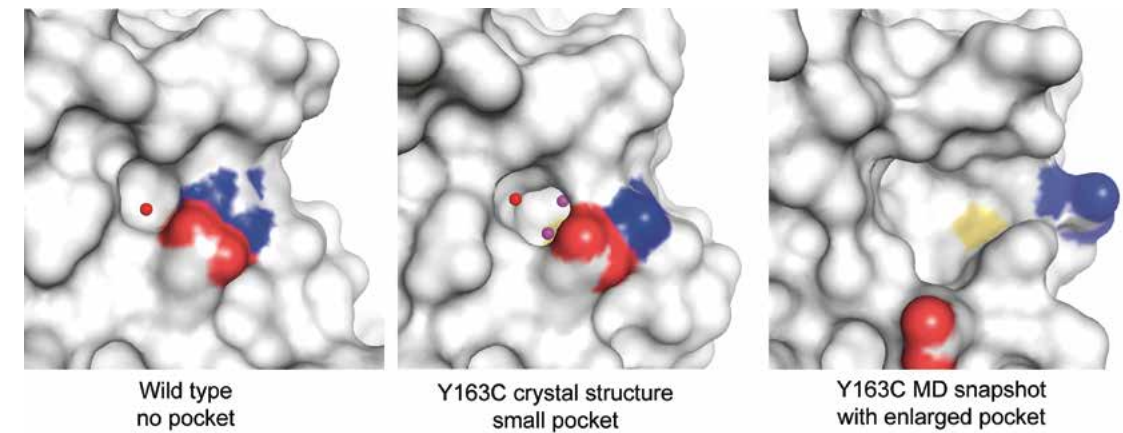
MD-Simulationen unterstützen die Erforschung anderer p53-Mutationen

Früher arbeitete Joerger hauptsächlich mit Röntgenkristallografie im Labor, um die Proteinstruktur zu verstehen. Diese Technologie funktioniert wie ein hochauflösendes Mikroskop, bei dem ein kristallisiertes Protein bestrahlt wird, um eine Momentaufnahme auf atomarer Ebene zu erstellen. Kürzlich hat er jedoch mit Settanni zusammengearbeitet, um Molekulardynamiksimulationen in seine Forschung einzubeziehen. MD-Simulationen ergänzen die Röntgenkristallografie, indem sie ein umfassenderes und detaillierteres Verständnis dafür liefern, wie sich die Form von Proteinen im Laufe der Zeit verändern kann. Der Ansatz kann neue Einblicke in das Verhalten eines Proteins und in seine Anfälligkeit für Medikamente unter verschiedenen Bedingungen liefern.

Wie in einem Artikel in der Fachzeitschrift *Cell Death and Disease* berichtet, untersuchte das Team eine bestimmte Klasse von strukturell instabilen, krebserzeugenden Mutationen in p53. In diesem Zusammenhang nutzte Settanni den Supercomputer Hawk des HLRS, um mehrere Simulationen verschiedener Mutanten von p53 durchzuführen. Die Simulationen, die auch das umgebende Lösungsmittel einschließen, enthalten zwischen 36.000 und 39.000 Atome und ermöglichen es, die zeitliche Entwicklung jeder Mutante kumulativ für 0,8 Mikrosekunden zu verfolgen.

„Simulationen halfen, das Verhalten der weniger stabilen Mutanten von p53 zu charakterisieren, die experimentell schwer zu handhaben sind“, so Settanni. „Simulationen können das Vorhandensein von Hohlräumen identifizieren, die sich auf der Oberfläche des mutierten Proteins bilden können. Diese Hohlräume können mit Medikamenten angegriffen werden, um das Protein zu stabilisieren.“

Laut der Studie erwies sich eine Mutation namens Y163C als besonders interessant. Am Anfang deutete ein Röntgenkristallografie-Bild darauf hin, dass Y163C kein gutes Ziel sein würde, weil der durch die



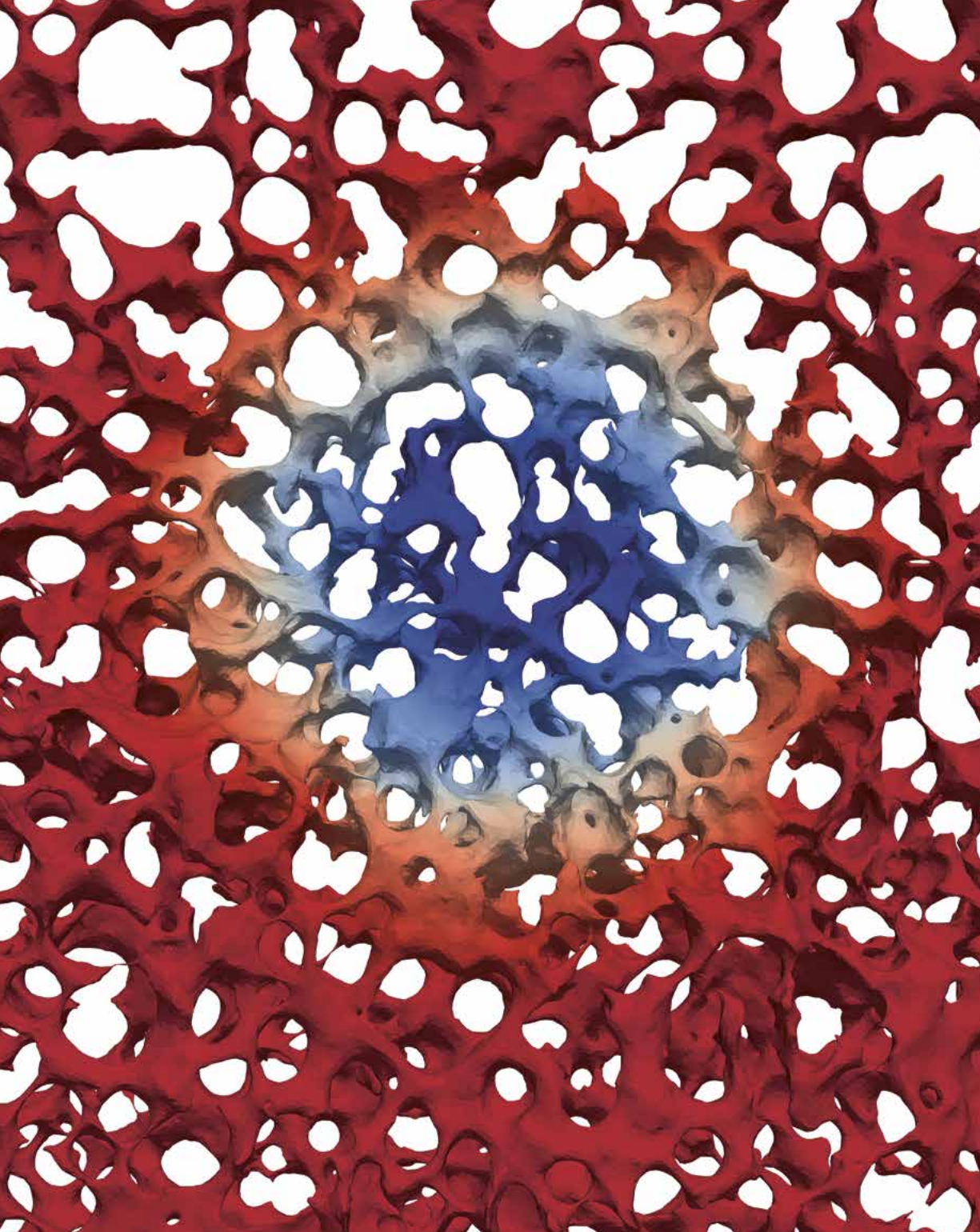
Drei Bilder der gleichen Stelle auf dem p53-Protein. Das erste Bild zeigt die Stelle ohne Mutation. Das mittlere Bild zeigt die Kristallstruktur der Y163C-Mutante mittels Röntgenkristallografie. Ein repräsentativer Schnappschuss mithilfe von Molekulardynamiksimulationen (rechts) zeigt, dass sich der Hohlraum erheblich erweitern kann und damit eine potenzielle Bindungsstelle für kleine Moleküle bietet.

Mutation entstandene Hohlraum sehr klein ist. MD-Simulationen zeigten jedoch, dass sich die Form dieses Hohlraums drastisch vergrößern lässt, was reichlich Platz für ein kleines Molekül zur Bindung an das Protein bietet. Nach dieser Erkenntnis konzentrierten sich die Forschenden auf Y163C statt auf andere Mutationen, die laut MD und anderen Ansätzen resistenter gegen die Bindung sind.

Die MD-Simulationen lieferten auch strukturelle Details des Y163C-Hohlraums, die bei der Suche nach bindefähigen kleinen Molekülen für p53 helfen könnten. Diese Informationen können das virtuelle Wirkstoffscreening, einen weiteren Ansatz in der computergestützten Biologie, unterstützen. Hier werden Datenkataloge, die viele tausend verschiedene Arten von kleinen Molekülen beschreiben, mit den molekularen und strukturellen Merkmalen einer potenziellen Bindungsstelle verglichen. Anhand eines virtuellen Screenings kann schnell festgestellt werden, welche kleinen Moleküle am ehesten kompatibel sind. Dieser Ansatz spart viel Zeit und

Arbeit, da nun nicht mehr jede potenzielle Interaktion im Labor zu testen ist. Für die relativ geringe Anzahl an kleinen Molekülen, die mit hoher Wahrscheinlichkeit mit p53 interagieren, können anschließend in Labor-experimenten schnell die rechnerischen Vorhersagen untersucht werden. Wenn diese Experimente letztendlich erfolgreich sind, ließen sich klinische Versuche mit den Ergebnissen rechtfertigen. Forschende könnten dann untersuchen, ob die Verwendung eines kleinen Moleküls zur Bekämpfung von Y163C in Menschen sicher und wirksam ist.

Es gibt keine Garantie dafür, dass sich Y163C als wirksames Zielmolekül zur Bekämpfung von Krebs erweist. Die Zusammenarbeit zwischen Joerger und Settanni zeigt jedoch, wie Molekulardynamiksimulationen mithilfe von Höchstleistungsrechnern einen wichtigen Beitrag zur Krebsforschung leisten und den Fortschritt in der personalisierten Krebsmedizin beschleunigen können.



Mithilfe des Supercomputers des HLRS entwickeln Forschende ein „In-silico-Mikroskop“, das experimentelle Ergebnisse und Simulationen biophysikalischer Modelle vergleicht, um besser zu verstehen, wie sich Viren in Zellen vermehren. Diese Simulation enthält eine Farbkodierung, die die Dichte der Oberflächenproteine des Hepatitis-C-Virus am endoplasmatischen Retikulum während der Infektion vorhersagt.

Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2024

Albanesi S, Bernuzzi S, Daszuta B, et al. 2024. **INTRHYGUE: Simulations of hyperbolic binary black-hole mergers.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 35-48.

Albers M, Shao X, Schröder W. 2024. **Energy efficient actuated drag reduced compressible turbulent flat plate flow.** Int J Heat Fluid Flow. 106: 109314.

Aleksa P, Ghorbani-Asl M, Iqbal S, et al. 2024. **Transition from fractal-dendritic to compact islands for the 2D-ferroelectric SnSe on graphene/Ir(111).** Nanotechnology. 35(17): 175707.

Ansorge C, Kosteletzky J. 2024. **Closing the scale gap for resolved-turbulence simulations in meteorology.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 315-335.

Antolovic I, Vrabec J, Klajmon M. 2024. **COSMO-Pharm: Drug-polymer compatibility of pharmaceutical amorphous solid dispersions from COSMO-SAC.** Mol Pharmaceutics. 21(9). 4395-4415.

Appelbaum J, Kloker M, Wenzel C. 2025. **A systematic DNS approach to isolate wall-curvature effects in spatially developing boundary layers.** Theor Comput Fluid Dyn. 39: 10.

Balourdas DI, Markl AM, Krämer A, et al. 2024. **Structural basis of p53 inactivation by cavity-creating cancer mutations and its implications for the development of mutant p53 reactivators.** Cell Death Disease. 15: 408.

Bernhardt F, Gharat S, Kapp A, et al. 2024. **Lattice dynamics of $\text{LiNb}_{1-x}\text{Ta}_x\text{I}_3$ solid solutions: theory and experiment.** Phys Status Solidi A. 2300968.

Bernhardt F, Sanna S. 2024. **Modeling WO_3 beyond the harmonic approximation: theoretical characterization and thermal expansion.** J Phys Chem C. 129(1): 580-590.

Beyer J, Nizenkov P, Fasoulas S, Pfeiffer M. 2024. **Simulation of radiating non-equilibrium flows around a capsule entering Titan's atmosphere.** AIP Conf Proc. 2996: 2000002.

Bhowmik A, Alon OE. 2024. **Interference of longitudinal and transversal fragmentations in the Josephson tunneling dynamics of Bose-Einstein condensates.** New J Phys. 26: 123035.

Bilinskaya Y, Hughes M, Mollignini P. 2024. **Realizing multiband states with ultracold dipolar quantum simulators.** Phys Rev Research. 6: L042024.

Blind M, Kopper P, Kempf D, et al. 2024. **Performance improvements for large simulations using the discontinuous Galerkin framework FLEXI.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 249-264.

Borsanyi S, Fodor Z, Günther J, et al. 2024. **Bulk features of the quark gluon plasma at finite density.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 77-86.

Branch O, Bauer HS. 2024. **WRF simulations to investigate processes across scales (WRFSCALE)**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 337-352.

Branch O, Jach L, Schwitalla T, et al. 2024. **Scaling artificial heat islands to enhance precipitation in the United Arab Emirates**. Earth Syst Dynam. 15: 198-129.

Chabanov M, Cruz-Osorio A, Ecker C, et al. 2024. **Microphysical aspects of binary neutron star mergers**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 19-34.

Chu X, Wang W, Weigand B. 2024. **An investigation of information flux between turbulent boundary layer and porous medium**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 183-196.

Depta PN, Dosta M, Heinrich S. 2024. **Data-driven multiscale modeling of self-assembly and hierarchical structural formation in biological macro-molecular systems: Pyruvate dehydrogenase complex**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 355-370.

Depta PN, Dosta M, Heinrich S. 2024. **Multiscale model-based investigation of functional macromolecular agglomerates for biotechnological applications**. In: Kwade A, Kampen I. Dispersity, Structure and Phase Changes of Proteins and Bio Agglomerates in Biotechnological Processes. Springer Nature Switzerland.

Diederich J, Velazquez Rojas J, Paszuk A, et al. 2024. **Ultrafast electron dynamics at the P-rich indium phosphide/TiO₂ interface**. Adv Func Materi. 2409455.

Diederich J, Velazquez Rojas J, Zare Pour MA, et al. 2024. **Unraveling electron dynamics in p-type indium phosphide (100): a time-resolved two-photon photoemission study**. J Am Chem Soc. 146(13): 8649-8960.

Dietrich T, Biswas P, Brüggemann B, et al. 2024. **Simulating binary neutron star mergers**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 5-18.

El Azzouzi FE, Klimm D, Kapp A, et al. 2024. **Evolution of the electrical conductivity of LiNb_{1-x}Ta_xO₃ solid solutions across the ferroelectric phase transformation**. Phys Status Solidi A: 2300966.

Erisis S, Hörning M. 2024. **Self-organization of PIP₃ waves is controlled by the topology and curvature of cell membranes**. Biophys J. 123(9): P1058-1068.

Fekri Z, Chava P, Hlawacek G, et al. 2024. **Tuning the electronic characteristics of monolayer MoS₂-based transistors by ion irradiation: The role of the substrate**. Adv Electron Mater. ePub May 13.

Feldmann H, Hundhausen M, Kohlhepp R, Breil M. 2024. **Impact of land-use change and user-tailored climate change information from a high-resolution climate simulation ensemble**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 299-314.

Franzke KL, Schmidt WG, Gerstmann U. 2024. **Relativistic calculation of the orbital hyperfine splitting in complex microscopic structures**. J Phys Conf Ser. 2710: 012094.

Fröde F, Desjardins O, Bieber M, et al. 2024. **Multiscale simulation of spray and mixture formation for a coaxial atomizer**. Int J Multiphase Flow. ePub Sep 3.

Gagnon L, Donners L, Zimmer F, Keßler M. 2024. **Aerodynamic performance of a hovering cycloidal rotor: a CFD study with experimental validation**. J Amer Helicopter Soc. 69(3): 1-19.

Genuit F, Keßler M, Krämer E. 2024. **Applications of a discontinuous Galerkin chimera method on 3D flow problems**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 265-280.

Geppert AK, Stober JL, Steigerwald J, et al. 2024. **Analyzing the early impact dynamics of single droplets impacting onto wetted surfaces**. Phys Fluids. 36: 012005.

Gibis T, Sciacovelli L, Kloker M, Wenzel C. 2024. **Heat-transfer effects in compressible turbulent boundary layers – a regime diagram**. J Fluid Mech. 995: A14.

Gondrum M, Meinke M, Schroeder W, et al. 2024. **Porous fairings for landing gear noise mitigation**. 30th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. ePub May 30.

Groll M, Bürger J, Caltzidis I, et al. 2024. **DFT-assisted investigation of the electric field and charge density distribution of pristine and defective 2D WSe₂ by differential phase contrast imaging**. Small. 2311635.

Herz MA, Hübner JM, Sichelschmidt J, et al. 2024. **Heavy atom cluster chains with strong spin-orbit coupling and magnetic cations in Mn(PtBi₆I₁₂)**. Inorg Chem. 63(59): 23867-23876.

Hillebrand M, Breitenstein C, Lutz T. 2024. **Aeroelastic effects of a load alleviation system on a high aspect ratio wing based on CFD-CSM simulations**. AIAA Aviation Forum and Ascend 2024. ePub Jul 27.

Homes S, Antolović I, Fingerhut R, et al. 2024. **High-performance computing as a key to new insights into thermodynamics**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 399-413.

Homes S, Vrabec J. 2024. **Resistivities across the vapor-liquid interface of a simple fluid: an assessment of methods**. Phys Fluids. 36: 022122.

Hösken T, Meinke M, Schröder W. 2024. **Analysis of ingress into the downstream wheel space of a 1.5-stage turbine by full circumference and single blade passage large-eddy simulation**. J Turbomach. 146(9): 091006.

Hristozova L, Sebastian R, Schreyer AM. 2024. **Flow fields around asymmetrical micro vortex generators in supersonic flow**. Aerospace Sci Tech. 145: 108838.

Iskakov S, Katsnelson MI, Lichtenstein AI. 2024. **Perturbative solution of fermionic sign problem in quantum Monte Carlo computations**. npj Comput Mater. 10: 36.

Jafari V, Jarmatz P, Wittenberg H, et al. 2024. **Fault tolerant molecular-continuum flow simulation**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 463-475.

Jacobi M, Guercilena FM, Huth S, et al. 2024. **Effects of nuclear matter properties in neutron star mergers**. Mon Not R Astron Soc. 527(3): 8812-8828.

Jain M, Kretschmer S, Meyer J, Krashennnikov AV. 2024. **Adatom-mediated damage of two-dimensional materials under the electron beam in a transmission electron microscope**. Phys Rev Materials 8: 054004.

Jones T. 2024. **Electro-catalysis for H₂O oxidation and chlorine evolution**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 89-100.

Knodel MM, Wittum G, Vollmer J. 2024. **Efficient estimates of surface diffusion parameters for spatio-temporally resolved virus replication dynamics**. Int J Mol Sci. 25(5): 2993.

Koehn H, Wouters T, Rose H, et al. 2024. **Classification of compact objects and model comparison using EOS knowledge**. Phys Rev D. 110: 103015.

Kofahl C, Ganschow S, Bernhardt F, et al. 2024. **Li-diffusion in lithium niobate – tantalate solid solutions**. Solid State Ionics 409: 116514.

Kofahl C, Uhlendorf J, Muscutt BA, et al. 2024. **Oxygen diffusion in Li(Nb,Ta)O₃ single crystals**. Phys Status Solidi A. 2300959.

Kostecky J, Ansoerge C. 2024. **Simulation and scaling analysis of periodic surfaces with small-scale roughness in turbulent Ekman flow**. J Fluid Mech. 992: A8.

Kostecky J, Ansoerge C. 2024. **Turbulent Ekman flow with cubic small-scale roughness under stable stratification (Re=1000). Dataset. Turbulent wall-bounded flows**. Repositorium der Freien Universität Berlin.

Krenz M, Bocchini A, Biktagirov T, et al. 2024. **Polaron formation dynamics in lithium niobite from massively parallel ab-initio simulations**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 115-127.

Krenz M, Gerstmann U, Schmidt WG. 2024. **Defect-assisted exciton transfer across the tetracene-Si(111):H interface**. Phys Rev Lett. 132: 076201.

Kuberski S. 2024. **Muon g-2: Lattice calculations of the hadronic vacuum polarization**. Proceedings of Science, Vol 453. The 40th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2023).

Kuberski S, Cè M, von Hippel G, et al. 2024. **Hadronic vacuum polarization in the muon g - 2: the short-distance contribution from lattice QCD**. J High Energy Phys. 2024: 172.

Kunert N, Gair J, Pang PTH, Dietrich T. 2024. **Impact of gravitational waveform model systematics on the measurement of the Hubble constant**. Phys Rev D. 110: 043520.

Lagemann C, Lagemann K, Mukherjee S, Schröder W. 2024. **Challenges of deep unsupervised optical flow estimation for particle-image velocimetry data**. Exp Fluids. 65: 30.

Laguarda L, Hickel S, Schrijer FFJ, van Oudheusden BW. 2024. **Reynolds number effects in shock-wave/turbulent boundary-layer interactions**. J Fluid Mech 989: A20.

Lautenschlaeger MP, Weinmiller J, Kellers B, et al. 2024. **Lattice Boltzmann simulation of flow, transport, and reactions in battery components**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 449-462.

Li Y, Börrnert F, Ghorbani-Asl M, et al. 2024. **In situ TEM investigation of the lithiation and delithiation process between graphene sheets in the presence of atomic defects**. Adv Funct Mater. 2406034.

Lode AUJ, Alon OE, Bhowmik A, et al. 2024. **Correlations, shapes and fragmentations of ultracold matter**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 63-75.

Magistrelli F, Bernuzzi S, Perego A, Radice D. 2024. **Element formation in radiation-hydrodynamics simulations of kilonovae**. Astrophys J Lett. 974(1): L5.

Marx J, Langenbach K, Kohns M. 2024. **Assessment of approaches towards the relative permittivity of mixtures**. J Chem Eng Data. ePub Mar 28.

Menczer A, Legeza Ö. 2024. **Tensor network state algorithms on AI accelerators**. J Chem Theory Comput. 20(20): 8897-8910.

Molignini P, Chakrabarti B. 2024. **Unbounded entropy production and violent fragmentation for repulsive-to-attractive interaction quench in long-range interacting systems**. New J Phys. ePub Sep 27.

Mondal B, Khan RU, Kreuter F, et al. 2024. **Organic functionalization on solid surfaces**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 101-113.

Moriaux OK, Zamponi R, Satcunanathan S, et al. 2024. **Experimental and numerical investigation of the turbulent boundary layer of a grazing flow over porous materials**. 30th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. ePub May 30.

Munoz Lopez EJ, Hergt A, Klinger J, et al. 2024. **The unsteady shock-boundary layer interaction in a compressor cascade – part 3: mechanisms of shock oscillation**. Proceedings of ASME Turbo Expo 2024, June 24-28, 2024. London, England.

Müller J, Lutz T. 2024. **Numerical studies on the impact of atmospheric turbulence on aircraft loads**. In: Heinrich R, ed. Advanced Aircraft Understanding via the Virtual Aircraft Model. Springer. 99-119.

Neuweiler A, Dietrich T, Brüggmann B, et al. 2024. **General relativistic magnetohydrodynamic simulations with BAM: implementation and code comparison**. Phys Rev D. 110: 084046.

Palmetshofer P, Geppert AK, Steigerwald J, et al. 2024. **Thermocapillary central lamella recess during droplet impacts onto a heated wall**. Sci Reports. 14: 1102.

Palmetshofer P, Wurst J, Geppert AK, et al. 2025. **Wetting behavior in the inertial phase of droplet impacts onto sub-millimeter microstructured surfaces**. J Colloid Interface Sci. 682: 413-422.

Panos E, Hassan A. 2024. **Accelerating the performance of large-scale TIMES models in the modelling of Sustainable Development Goals**. In Labriet et al, eds. Aligning the Energy Transition with the Sustainable Development Goals: Key Insights from Energy System Modelling. Springer. 67-95.

Paraschos GF, Kim JY, Wielgus M, et al. 2024. **Ordered magnetic fields around the 3C 84 central black hole**. Astron Astrophys. 682: L3.

Peter JMF, Gibis T, Kloker MJ. 2024. **Favorable-pressure-gradient influence on supersonic film cooling with turbulent main flow**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 167-182.

Pfannstiel A, Hehemann T, Schäfer NA, et al. 2024. **Small electron polarons bound to interstitial tantalum defects in lithium tantalate**. J Phys Condens. Matter 36(35): 355701.

Pinzon J, Siebenborn M, Vogel A. 2024. **Geometric constrained scalable algorithm for PDE-constrained shape optimization**. In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 415-428.

Pionteck MN, Bernhardt F, Dues C, et al. 2024. **Hyperpolarizabilities of LiNbO₃, LiTaO₃ and KNbO₃ calculated from first principles.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 129-143.

Pionteck MN, Sanna S. 2024. **Photoelastic properties of stoichiometric lithium niobate from first-principles calculations.** Phys Status Solidi A. ePub Mar 11.

Pollinger T, Van Craen A, Offenhäuser P, Pflüger D. 2024. **Realizing joint extreme-scale simulations on multiple supercomputers – two superfacility case studies.** In: 2024 SC24: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis.

Potyka J, Schulte K. 2024. **A volume of fluid method for three dimensional direct numerical simulations of immiscible droplet collisions.** Int J Multiphase Flow. 170: 104654.

Potyka J, Stober J, Wurst J, et al. 2024. **Towards DNS of droplet-jet collisions of immiscible liquids with FS3D.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 197-212.

Rentschler T, Berkemeier MB, Fraas S, et al. 2024. **Multi-criteria hydraulic turbine optimization using a genetic algorithm and trust-region postprocessing.** Proc Appl Math Mech. 202400126.

Roccon A, Zonta F, Soldati A. 2024. **Turbulent drag reduction in water-lubricated channel flow of highly viscous oil.** Phys Rev Fluids. 9: 054611.

Rodekamp M, Engelhardt M, Green JR, et al. 2024. **Moments of nucleon unpolarized, polarized and transversity patron distribution functions from lattice QCD at the physical point.** Phys Rev D. 109: 074508.

Ruiz Alvarado IA, Dreßler C, Schmidt WG. 2025. **Band alignment at InP/PiPO₂ interfaces from density-functional theory.** J Phys Condens Matter. 37: 075001. ePub Dec 5, 2024.

Santra P, Ghaderzadeh S, Ghorbani-Asl M, et al. 2024. **Strain-modulated defect engineering of two-dimensional materials.** npj 2D Mater Appl. 8: 33.

Schaefer D, Kunstmann B, Schmitt S, et al. 2024. **Explosions of nanodroplets studied with molecular dynamics simulations.** Phys Fluids. 36: 037129.

Schianchi F, Ujevic M, Neuweiler A, et al. 2024. **Black-hole formation in binary neutron star mergers: the impact of spin on the prompt-collapse scenario.** Phys Rev D. 109: 123011.

Schubert S, Steigerwald J, Geppert AK, et al. 2024. **Micro-PIV study on the influence of viscosity on the dynamics of droplet impact onto a thin film.** Exp Fluids. 65: 69.

Sciotto R, Ruiz Alvarado IA, Schmidt WG. 2024. **Substrate doping and defect influence on P-rich InP(001):H surface properties.** Surfaces. 7(1): 79-87.

Sebastian R, Schreyer AM. 2024. **Design considerations for efficient spanwise-inclined air-jet vortex generators for separation control in supersonic and hypersonic flows.** Aerosp Sci Technol. 147: 109033.

Seitz T, Gerlinger P. 2024. **Investigation and assessment of production- and dissipation-limited DDES methods for rocket combustion chamber simulations.** Comput Fluids. 275: 106252.

Seiz M, Hierl H, Nestler B, Rheinheimer W. 2024. **Revealing process and material parameter effects on densification via phase-field studies.** Sci Rep-UK. 14: 5350.

Settanni G, Schmid F. 2024. **Molecular dynamics simulations of the structure of lipid-based nano-materials.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 49-51.

Sokolov M, Mastrikov YA, Bocharov D, et al. 2024. **Computational study of oxygen evolution reaction on flat and stepped surfaces of strontium titanate.** Catalysis Today. 114609, ePub Mar 2.

Strobel KR, Schlegel M, Jain M, et al. 2024. **Temperature-dependence of beam-driven dynamics in graphene-fullerene sandwiches.** Micron. 184: 103666.

Su Y, Daric D, Guevara-Carrion G, et al. 2025. **Fick and Maxwell-Stefan diffusion of the liquid mixture cyclohexane + toluene + acetone + methanol and its subsystems.** Chem Eng Sci. 301: 120662.

Tan Q, Hosseini SA, Seidel-Morgenstern, et al. 2024. **Thermal effects connected to crystallization dynamics: a lattice Boltzmann study.** Int J Multiphase Flow. 171: 104669.

Tan Q, Hosseini SA, Thévenin D. 2024. **Simulations of crystal growth using lattice Boltzmann formulation.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 387-398.

Tandiana R, Barletta GP, Soler MA, et al. 2024. **Computational mutagenesis of antibody fragments: disentangling sidechains from $\Delta\Delta G$ predictions.** J Chem Theory Comput. 20(6): 2630-2642.

Topolski K, Tootle SD, Rezzolla L. 2024. **Post-merger gravitational-wave signal from neutron-star binaries: a new look at an old problem.** Astrophys J. 960(1): 86.

Tuppurainen V, Fleitmann L, Kangas J, et al. 2024. **Conceptual design of furfural extraction, oxidative upgrading and product recovery: COSMO-RS-based process-level solvent screening.** Comput Chem Eng. 191: 108835.

Ullah J, Hillebrand M, Ehrle M, et al. 2024. **On the effects of wing-gust interactions and wing flap deflections on the HTP aerodynamics.** In: Nagel WE, Kröner DH, Resch MM, eds. High Performance Computing in Science and Engineering '22. Springer. 213-232.

Verhoff LM, Pionteck MN, Rüsing M, et al. 2024. **Two-dimensional electronic conductivity in insulating ferroelectrics: peculiar properties of domain walls.** Phys Rev Research. 6: L042015.

Wegmann T, Meinke M, Schröder W. 2024. **Dynamic load balancing of a coupled Lagrange particle tracking solver for direct injection engine application.** In: Resch M, Gebert J, Kobayashi H, Takizawa H, Baz W, eds. Sustained Simulation Performance 2022: Proceedings of the Joint Workshop on Sustained Simulation Performance. Springer. 41-60.

Xu X, Zhang X, Ruban A, et al. 2024. **Accurate complex-stacking-fault Gibbs energy in Ni₃Al at high temperatures.** Scripta Materialia 242: 115934.

Yakhnevych U, Sargsyan V, El Azzouzi F, et al. 2024. **Acoustic loss in LiNb_{1-x}Ta_xO₃ at temperatures up to 900 °C.** Physica status solidi.

Yang Z, Meinke M, Schroeder W. 2024. **Numerical analysis of a propeller-airfoil interaction in a distributed propulsion system using a hybrid LES and FW-H approach.** 30th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. ePub May 30.

Ye Q, Shen B, Tiedje O, et al. 202. **On charging and breakup of paints using a high-speed rotary bell atomizer with internal charging system.** Int J Multiphase Flow. 180: 104955.

Zhang F, Tavakkol S, Dercho S, et al. 2024. **Assessment of dynamic characteristics of fluidized beds via numerical simulations.** Phys Fluids. 36: 023348.

Ziese F, Sanna S. 2024. **Nonlinear optical response of tetrel-modified tetraphenyl-adamantane clusters.** ACS Omega. 9(50): 49816-49824.

Ziese F, Wang J, Rojas León I, et al. 2024. **Origin of the nonlinear optical response in organotetrel molecules, (hetero)adamantane-type clusters with organic substituents, and related species.** J Phys Chem A. 128(39): 8360-8372.

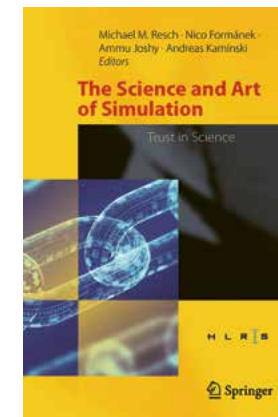
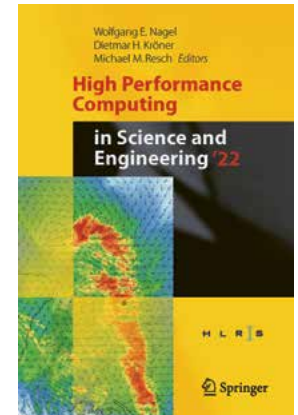
Zimmer DN, Schmid F, Settanni G. 2024. **Ionizable cationic lipids and helper lipids synergistically contribute to RNA packing and protection in lipid-based nanomaterials.** J Phys Chem B. 128(41).

HLRS Bücher

High Performance Computing in Science and Engineering '22

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

Dieses Buch präsentiert den neuesten Stand der Supercomputer-Simulation und konzentriert sich auf Ergebnisse führender Forscher, die Systeme des HLRS im Jahr 2022 nutzten. Die Berichte decken alle Bereiche der rechnergestützten Natur- und Ingenieurwissenschaften ab, von CFD bis Computational Physics und von Chemie bis Informatik, mit Schwerpunkt auf industriell relevanten Anwendungen. Das Buch stellt Resultate vor, die auf einem der führenden europäischen Höchstleistungsrechner berechnet wurden, und behandelt zentrale Methoden des Höchstleistungsrechnens. Herausragende Ergebnisse bei Spitzenleistungen für Produktionscodes sind für Forschung und Industrie von Interesse.



The Science and Art of Simulation: Trust in Science

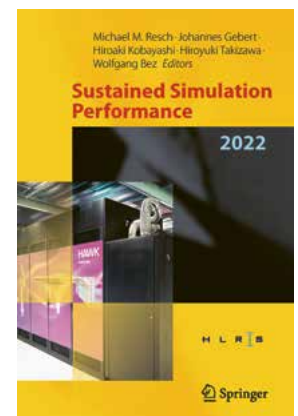
Herausgeber:innen: Michael M. Resch, Nico Formanek, Ammu Joshy, Andreas Kaminski

Vertrauen ist ein zentraler Pfeiler des wissenschaftlichen Betriebs. Ein Großteil der Wissenschaftsphilosophie befasst sich damit, Vertrauen in Theorien, Modelle oder die Wissenschaft als Ganzes zu ermöglichen. Dieses Vertrauen ist jedoch durch verschiedene Entwicklungen bedroht. Komplexere Modelle und der verstärkte Einsatz computergestützter Methoden wie maschinelles Lernen und Simulation erschweren es zunehmend, Vertrauen aufzubauen. Doch wie und auf welcher Grundlage kann ein angemessenes Vertrauen entstehen? Uns interessiert, wie in solchen Fällen wachsender Komplexität (bei Modellen und Kommunikation) Vertrauen entsteht und welche Maßnahmen geeignet wären, um Zweifel zu verringern.

Sustained Simulation Performance 2022

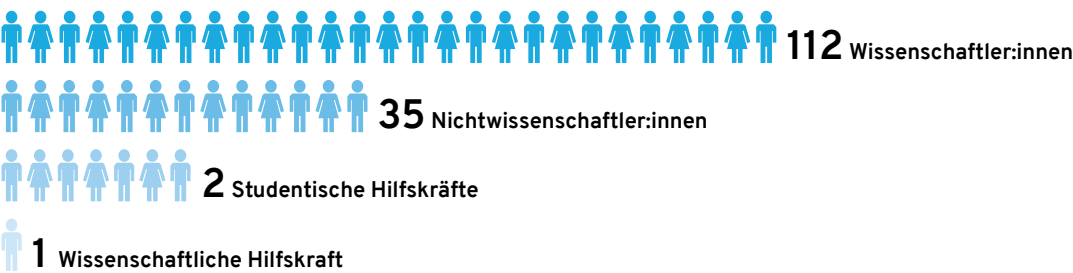
Herausgeber: Michael M. Resch, Johannes Gebert, Hiroaki Kobayashi, Hiroyuki Takizawa, Wolfgang Bez

Dieses Buch zeigt den aktuellen Stand des Höchstleistungsrechnens auf modernen Supercomputerarchitekturen. Es behandelt allgemeine Trends in Hard- und Softwareentwicklung. Die Beiträge decken ein breites Themenspektrum ab – von Leistungsbewertungen zur Energieeffizienz bis hin zu numerischer Strömungsmechanik und Höchstleistungsdatenanalyse. Auch neue Felder wie der Einsatz von Supercomputern in künstlicher Intelligenz und maschinellem Lernen werden behandelt. Grundlage sind ausgewählte Beiträge des 33. WSSP-Workshops 2022 am HLRS in Stuttgart und des WSSP34 an der Tohoku Universität in Sendai, Japan.



HLRS in Zahlen

150 Beschäftigte



Systemnutzung



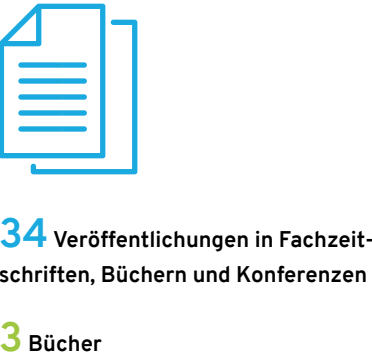
Forschung



Industrie



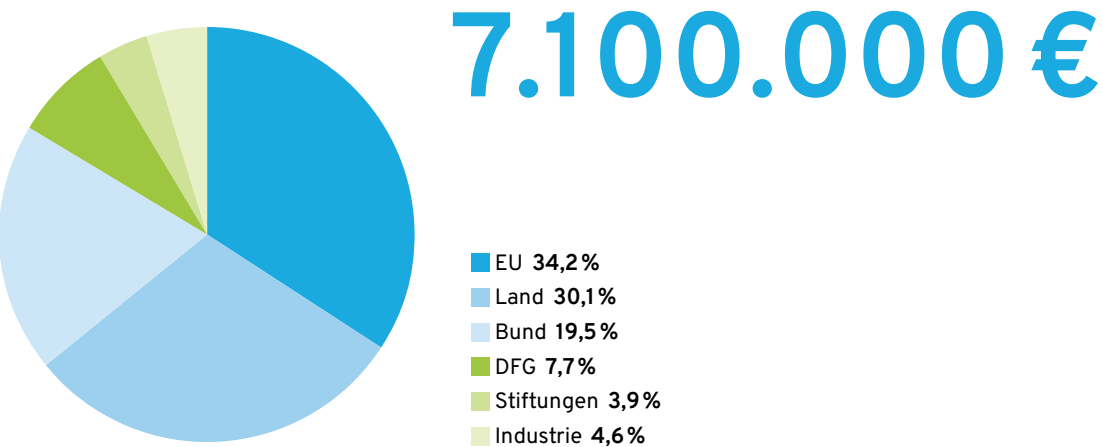
Publikationen



Aus- und Weiterbildung



Drittmittel



Über uns



In unserem Rechenraum

HPE Cray EX4000 (Hunter)

Hunter ist seit Februar 2025 der neueste Flaggschiff-Supercomputer des HLRS. Er basiert auf der gleichen Technologie wie die drei weltweit verifizierten Exascale-Systeme und ermöglicht groß angelegte, hochmoderne Anwendungen für Simulation, künstliche Intelligenz und Datenanalyse, einschließlich hybrider Rechenansätze, die verschiedene Methoden zu leistungsstarken Workflows kombinieren. Sein Herzstück ist die AMD Instinct™ MI300A Accelerated Processing Unit (APU), die CPUs, GPUs und Speicher mit hoher Bandbreite in einem einzigen Paket kombiniert. Mit einer theoretischen Spitzenleistung von 48,1 Petaflops ist Hunter fast doppelt so schnell wie sein Vorgänger Hawk, während der Energiebedarf bei Spitzenleistung um etwa 80 Prozent gesenkt wurde. Hunter ist als Übergangssystem für Herder, den für 2027 geplanten Supercomputer des HLRS konzipiert.

Prozessoren:

APUs: 752 AMD Instinct MI300A

CPUs: 512 AMD EPYC 9374F

Speichertechnologie:

APU: 512 GB HBM3 (~5.3 TB/s)

CPU: 768 GB DDR5-4800

Speicher:

Cray ClusterStor E2000 (25 PB Kapazität auf 2120 Disks)

Netzwerk:

HPE Slingshot 11 Dragonfly (APU: 4 x 200 Gbps pro Knoten)

Spitzenleistung:

48.1 Petaflops

Hawk KI Erweiterung (HPE Apollo 6500 Gen10 Plus)

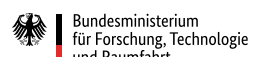
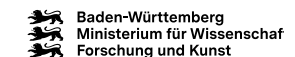
Diese Partition wurde ursprünglich im Jahr 2021 als Teil des früheren HLRS-Flaggschiffsystems Hawk installiert. Obwohl Hawk mit der Installation von Hunter teilweise außer Betrieb genommen wurde, bietet die KI-Erweiterung weiterhin NVIDIA-GPUs, die für maschinelles Lernen und Anwendungen der künstlichen Intelligenz geeignet sind.

GPU: NVIDIA A100

Anzahl GPUs: 192

Leistung: 120 Petaflops KI-Rechenleistung

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



NEC Cluster (Vulcan)

Dieser Standard-PC-Cluster wurde 2009 installiert. Seine Konfiguration wurde kontinuierlich angepasst, um den steigenden Anforderungen gerecht zu werden und bedarfsoptimierte Lösungen zu bieten, einschließlich CPU-, GPU- und Vektorrechner-Komponenten. Die aktuelle Konfiguration sieht wie folgt aus.

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

AMD Radeon

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

AMD Genoa

CPU: AMD Genoa EPYC 9334 @ 2.7 GHz base, 32 cores
Anzahl Rechenknoten: 156
Hauptspeicher pro Rechenknoten: 768 GB

NVIDIA A30

Anzahl Rechenknoten: 24
CPU: 2 x AMD EPYC 9124 Genoa, 3.0 GHz base, 16 core
Hauptspeicher pro Rechenknoten: 768 GB DDR5
GPU: 1 x NVIDIA A30
GPU Hauptspeicher: 24 GB HBM2e

Large Memory Nodes

Anzahl Rechenknoten: 2
CPU: 2 x AMD EPYC 9124 Genoa, 3.0 GHz base, 16 core
Hauptspeicher pro Rechenknoten: 3,072 GB DDR5

Interconnects

Infiniband EDR / HDR

Unsere Nutzer:innen

Es folgt eine Zusammenfassung der Nutzung der Supercomputer des HLRS im Kalenderjahr 2024.

Gauss Centre for Supercomputing (GCS)

Bewilligte large-scale Projekte *	
Anzahl neuer large-scale Projekte (>100 Million Core-Stunden)	11
Hawk (Million Core-Stunden)	1.320
Hunter (Tausend Knoten-Stunden)	394

GCS Projekte – Systemnutzung 2024

Anzahl aktive GCS-Projekte	121
Core-Stunden	4.275
Knoten-Stunden für KI (Tausend)	31

Sonstige wissenschaftliche Nutzung

Core-Stunden (Millionen)	49,84
--------------------------	-------

Systemnutzung vonseiten der Industrie

Industriekunden am HLRS	
Anzahl der Industriekunden	74
Aktive Nutzer:innen im Jahr 2024	43
Core-Stunden (Millionen)	87,07

HWW-Nutzung

Core-Stunden (Millionen)	222,14
--------------------------	--------

Gesamte Systemnutzung vonseiten der Industrie

Core-Stunden (Millionen)	309,21
--------------------------	--------

Gesamte Systemnutzung im Jahr 2024

Core-Stunden (Millionen)	4.634
Prozentzahl Wissenschaft	93,3 %
Prozentzahl Industrie	6,7 %

Systemnutzung nach Forschungsdisziplin

CFD	53,8 %
Physik	38,6 %
Chemie	3,6 %
Mobilität und Klima	1,5 %
Reaktive Strömungen	0,8 %
Festkörperphysik	0,6 %
Materialsimulation / Matrialforschung	0,5 %
Informatik	0,2 %
Sonstiges	0,2 %
Elektrotechnik	0,1 %

Systemnutzung nach Bundesland

Nordrhein-Westfalen	45,91 %
Baden-Württemberg	30,58 %
Rheinland-Pfalz	7,91 %
Hessen	5,68 %
Brandenburg	3,84 %
Bayern	2,52 %
Thüringen	1,54 %
Berlin	0,74 %
Bundesforschungseinrichtungen	0,57 %
Sachsen	0,33 %
Hamburg	0,23 %
Sachsen-Anhalt	0,15 %

* Im Jahr 2024 war Hawk noch in Betrieb. Die Zuschüsse für seine Nutzung wurden in Core-Stunden berechnet. Der zweite Large-Scale-Call im Jahr 2024 betraf die Nutzung von Hunter, der erst 2025 in Betrieb gegangen ist. Die Rechenzeitzuschüsse für Hunter werden in Knotenstunden berechnet.

Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Zusätzlich zur Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen aus Wissenschaft und Industrie werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS in den Bereichen Höchstleistungsrechnen, künstliche Intelligenz, Visualisierung und High-Performance-Datenanalyse gefördert. Diese meist in Zusammenarbeit mit Partnern aus Forschung und Industrie umgesetzten Aktivitäten beschäftigen sich mit den wichtigsten HPC-Themen und tragen dazu bei, Herausforderungen für Deutschland, Europa und die Welt zu bewältigen. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2024.

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.

BEGIN HPC+ ■

Mai 2024 – April 2027 MWK

Zusätzliche Finanzierung zur Durchführung von EuroCC 2 und CASTIEL 2, für Aktivitäten, die nicht über EU/BMBF finanziert werden, z.B. für Dissemination Events des Nationalen Kompetenzzentrums Deutschland (NCC), Proof-of-Concept-Studien des deutschen NCC, aber auch zusätzliches Personal für das technisch-wissenschaftliche Management der beiden Gesamtvorhaben.

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 (LS²DM).

■ Neues Projekt ■ Zuschuss bewilligt, Beginn im Jahr 2025

Abkürzungen Förderorganisationen

BMBF – Bundesministerium für Bildung und Forschung (Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt ab Mai 2025) | CZS – Carl-Zeiss-Stiftung | DBU – Deutsche Bundesstiftung Umwelt | DFG – Deutsche Forschungsgemeinschaft | ESF – European Social Fund | EU – European Union | ICM – InnovationsCampus Mobilität der Zukunft | JU – EuroHPC Joint Undertaking | MSA – Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst | MWK – Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg | NMWK – Niedersächsisches Ministerium für Wissenschaft und Kultur | SIH – Stiftung Innovation in der Hochschullehre | WAT – Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg

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 – April 2025 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.

DimensionLab3

September 2022 – September 2024 SIH

Durch spannende, immersive Erlebnisse von aktuellen Ingenieurthemen in Virtual Reality und Augmented Reality stärkt DimensionLab3 das Interesse, die Motivation und die Begeisterung der Schüler:innen für technische Fragestellungen.

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.

EuroCC 2

Januar 2023 – Dezember 2025 EU

Koordiniert ein europäisches Netzwerk nationaler Kompetenzzentren für Höchstleistungsrechnen. Das von der EuroHPC JU unterstützte Vorhaben fördert ein gemeinsames Niveau von Kompetenzen in HPC

und verwandten Technologien über die teilnehmenden Länder hinweg.

EuroHyPerCon

Oktober 2023 – Juni 2024 EU

Gestaltet die Zukunft des HPC in Europa mit, indem es eine langfristige Hyperkonnektivitätsspezifikation und einen Implementierungsfahrplan festlegt, um die künftigen Anforderungen Europas an Ultrahochgeschwindigkeitsnetze zu erfüllen.

EVITA ■

April 2025 – März 2029 JU

Ziel ist es, ein einheitliches, qualitatives europaweites Schulungsangebot für HPC und neue Technologien zu schaffen, das anerkannte Qualifikationen und modulare Lerninhalte bietet.

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.

FFplus ■

Mai 2024 – April 2028 JU

FFplus unterstützt europäische kleine und mittlere Unternehmen (KMUs) sowie Start-ups bei der Erprobung neuer Anwendungen des Höchstleistungsrechnens und der künstlichen Intelligenz.

Gaia-X4ICM

Mai 2022 – Dezember 2024 MWK, ICM

Zielt auf eine skalierende Produktionsplattform auf

Basis des Gaia-X Ökosystems für den Innovations-Campus Mobilität der Zukunft (ICM) zu realisieren, um Gaia-X für die Produktion nutzbar zu machen.

HammerHAI ■

April 2025 – März 2028 JU, BMBF, MWK, MSA, NMWK
Eine hochmoderne „AI Factory“ wird europäischen Unternehmen und Forschern sichere, skalierbare und leicht zugängliche KI-Ressourcen und -Unterstützung zur Verfügung stellen.

HANAMI ■

März 2024 – Februar 2027 JU
HANAMI fördert die Zusammenarbeit zwischen Europa und Japan bei der Entwicklung von Anwendungen für künftige Generationen von Supercomputern in Forschungsbereichen wie Klimaforschung, Biomedizin und Materialwissenschaften.

HiDALGO 2

Januar 2023 – Dezember 2026 BMBF, JU
Befasst sich mit den Folgen des Klimawandels und widmet sich technischen Fragen über die Skalierbarkeit von HPC- und KI-Infrastrukturen.

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.

IKILeUS

Dezember 2021 – November 2024 BMBF
Das HLRS ist das koordinierende Zentrum für dieses Projekt zur Integration von Themen der künstlichen Intelligenz (KI) in die Lehrpläne der Universität Stuttgart und zur Implementierung von KI-Technologien zwecks Verbesserung der Lehre.

InHPC-DE

November 2017 – Dezember 2026 BMBF
InHPC-DE treibt das Bündnis der drei nationalen HPC-Zentren in Deutschland voran, adressiert neue Anforderungen wie Sicherheit und evaluiert das Gaia-X-Ökosystem für Höchstleistungsrechnen.

Inno4scale

Juli 2023 – Juni 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
Zielt auf die Entwicklung einer Datenplattform für den KI-relevanten Datenaustausch zwischen akademischen und industriellen Akteuren ab.

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 für die COVID-19 Forschung und ein Modell für die Forschung an künftigen Pandemien und gesundheitlichen Bedrohungen.

POP3 ■

November 2024 – Dezember 2026 EU, JU
Das HPC-Exzellenzzentrum für Leistungsoptimierung und Produktivität bietet Dienstleistungen für akademische und industrielle Codes zur Bewertung und Verbesserung ihrer Effizienz auf Großrechnersystemen.

S+T+ARTS AIR

April 2023 – November 2024 EU, MWK
Ermöglicht mithilfe von Supercomputing-Technologien und -Fachwissen innovative Kooperationen zwischen Kunst, Wissenschaft und Technologie.

S+T+ARTS ECHO ■

Januar 2024 – Dezember 2026 EU
Dieses Projekt für Künstler:innen unterstützt die Zusammenarbeit mit Expert:innen aus Wissenschaft und Technik. Der Schwerpunkt liegt auf nachhaltigen digitalen Technologien.

SEQUOIA End-to-End

Januar 2023 – März 2024 WAT
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.

SimTech

Juli 2019 – Juni 2025 DFG
Dieser fachübergreifende Exzellenzcluster an der Universität Stuttgart entwickelt Simulationstechnologien, um eine integrative Systemwissenschaft zu ermöglichen.

Simulierte Welten

Januar 2011 – August 2028 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
Untersucht die Lese- und Schreibgeschwindigkeiten für große Datenmengen auf Höchstleistungsdateisystemen sowie effizientere Ansätze für die Datenkomprimierung.

URBANOME

März 2021 – August 2025 EU
Ziel ist die Förderung der Gesundheit, des Wohlbefindens und der Lebensqualität in Städten durch die systematische Einbeziehung von Gesundheitsbelangen in die Stadtpolitik und die Aktivitäten der Stadtbewohner:innen.

Vertrauen in Information

August 2020 – Juni 2024 MWK
Entwickelt als multidisziplinäres Forschungsprojekt 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 (2024)

Im Jahr 2024 bot das HLRS 46 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprachen. Die Kurse fanden an 182 Tagen online und in Stuttgart und in Zusammenarbeit mit Instituten in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 1354 Interessierte an den Kursen teil.

Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website: www.hlrs.de/training

Date	Location	Topic	Host
12. Jan–19. Feb	online/self-paced	HPC-Cluster – Auslegung, Kosten & Nachhaltigkeit	HLRS (SCA)
23.–25. Jan	Stuttgart/online	Hybrid Programming in HPC - MPI+X * ^{NEW}	HLRS
5.–9. Feb	online	Introduction to Computational Fluid Dynamics	ZIH/HLRS/DLR
5. Feb–1. März	online/self-paced	Visualisierung – Grundlagen & Anwendung	HLRS (SCA)
19.–23. Feb	online	Iterative Solvers and Parallelization	HLRS
5.–8. März	Stuttgart/online	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
11.–15. März	Stuttgart	CFD with OpenFOAM(R)	HLRS
11.–15. März	Dresden	Parallel Programming with MPI & OpenMP and Tools	ZIH/HLRS
26.–28. März	Stuttgart	From Machine Learning to Deep Learning: a concise introduction	HLRS
3.–5. Apr	online	N-Ways to GPU Programming Bootcamp *	EuroCC/NVIDIA
8. Apr–3. Mai	online/self-paced	Datenmanagement	HLRS (SCA)
15.–26. Apr	online/self-paced	Paralleles Programmieren mit OpenMP	HLRS (SCA)
16.–19. Apr	Mainz	Parallelization with MPI and OpenMP	ZDV/HLRS
22.–25. Apr	online	AMD Instinct GPU Training	HLRS/AMD
6.–7. Mai	online	Multi-GPU Programming Bootcamp * ^{NEW}	EuroCC/NVIDIA
13.–17. Mai	Stuttgart/online	Fortran for Scientific Computing	HLRS
21. Mai–14. Jun	online/self-paced	IKILeUS: Natural Language Processing ^{NEW}	HLRS (SCA)
27.–28. Mai	online	Efficient Parallel Programming with GASPI	HLRS/F.ITWM
3. Jun–12. Jul	online/self-paced	HPC-Cluster – Aufbau & Betrieb	HLRS (SCA)
5.–7. Jun	Stuttgart/online	Hackathon by HiDALGO2, CIRCE and SEAVEA projects ^{NEW}	HLRS/HiDALGO2/CIRCE/SEAVEA
10.–19. Jun	online/self-paced	Simulation – Grundlagen & CFD	HLRS (SCA)
11.–14. Jun	Stuttgart/online	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
18.–21. Jun	online	Node-Level Performance Engineering	HLRS/NHR@FAU
25.–26. Jun	online	AI for Science Bootcamp *	EuroCC/NVIDIA
2.–5. Jul	Stuttgart	Multi-GPU Deep Learning ^{NEW}	HLRS

Date	Location	Topic	Host
9.–12. Jul	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
15.–19. Jul	Stuttgart/online	Hunter Code Preparation Workshop ^{NEW}	HLRS
21.–30. Aug	online	Six-day Course in Parallel Programming with MPI/OpenMP	ETH/HLRS
10.–13. Sep	Stuttgart	Julia for High-Performance Computing	HLRS
16.–20. Sep	Stuttgart	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS/DLR
17.–18. Sep	Garching	Iterative Solvers for Linear Systems	LRZ/HLRS
23.–31. Sep	online/self-paced	Simulation – Grundlagen & Strukturmechanik	HLRS (SCA)
23.–25. Sep	online	Introduction to oneAPI, SYCL2020 and OpenMP offloading	HLRS/INTEL
7.–11. Okt	Stuttgart	CFD with OpenFOAM(R)	HLRS
14.–18. Okt	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (with TtT)	HLRS
14.–31. Okt	online/self-paced	IKILeUS: Time Series Forecasting ^{NEW}	HLRS (SCA)
22. Okt	online	Introduction to OpenMP Offloading with AMD GPUs ^{NEW}	HLRS/AMD
23.–25. Okt	Dresden/online	alpaka and openPMD Workshop and Hackathon ^{NEW}	HZDR/Plasma-PEPSC/ENCCS/HLRS
28.–29. Okt	Stuttgart	Scientific Visualization	HLRS
4.–6. Nov	online/self-paced	Parallel Programming with MPI ^{NEW}	HLRS (SCA)
4. Nov–13. Dez	online/self-paced	Data Analysis with HPC	HLRS (SCA)
4.–8. Nov	online	Introduction to GPU Programming using CUDA ^{NEW}	HLRS
11.–15. Nov	Stuttgart/online	Hunter Code Preparation Workshop ^{NEW}	HLRS
19.–22. Nov	Stuttgart/online	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
2.–5. Dez	online	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP	JSC
9.–1. Dez	online	Fortran for Scientific Computing	HLRS

- Paralleles Programmieren

■ Simulation und Numerische Strömungsmechanik

■ Performance-Optimierung und Debugging

■ Daten in HPC, Deep Learning, Machine Learning und KI

■ Programmiersprachen für wissenschaftliches Rechnen
- Wissenschaftliche Visualisierung

■ HPC-Cluster: Nutzung und Betrieb

■ Community- und bereichsspezifische Inhalte

■ Hardware-Beschleuniger

*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. | CIRCE – Computational Immediate Response Center for Emergencies | DLR – Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt | ENCCS – EuroCC National Competence Center Sweden | ETH – Scientific IT Services, ETH Zürich | EuroCC – EuroCC | F. ITWM – Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik | HiDALGO 2 – HiDALGO Centre of Excellence | HLRS – Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart | HLRS (SCA) – Supercomputing-Akademie des HLRS | HZDR – Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf | INTEL – Intel Corporation | JSC – Jülich Supercomputing Centre | LRZ – Leibniz-Rechenzentrum | NHR@FAU – Erlangen National High Performance Computing Center | NVIDIA – Nvidia Corporation | Plasma-PEPSC – Plasma-PEPSC Centre of Excellence | SEAVEA – Software Environment for Actionable & VVUQ-Evaluated Exascale Applications | ZDV – Zentrum für Datenverarbeitung (Universität Mainz) | ZIH – Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (TU Dresden)

Workshops und Konferenzen (2024)

19. April: **ReACH Advanced School**

Diese vom Media Solution Center Baden-Württemberg organisierte Auftaktveranstaltung der Initiative ReACH fokussierte auf Anwendungen von KI und virtueller Realität in Kunst und Kreativwirtschaft.
25. April: **Science Goes Society**

Bei dieser gemeinsam mit der Gemeinde Sersheim veranstalteten Diskussion ging es um neue Ansätze für Risikobewertung, Katastrophenprävention und Umweltschutz in Kommunen angesichts des Klimawandels.
11. Juni: **Potenziale der Computersimulation für den öffentlichen Sektor in Krisensituationen**

Im Zentrum der Veranstaltung standen die Ergebnisse des HLRS-Projekts CIRCE zur Nutzung von Höchstleistungsrechnen bei der Krisenbewältigung und zur Sicherstellung schneller Verfügbarkeit von HPC-Ressourcen im Notfall.
- 17 – 18. Juni: **37. Workshop on Sustained Simulation Performance**

Dieses jährlich mit NEC und der Tohoku University organisierte Treffen bringt internationale Expert:innen zusammen, um über Hardware, Programmierung und Strategien für dauerhafte HPC-Performance zu diskutieren.
16. Juli: **GCS-Industrieveranstaltung – Erfolgreiche Innovation mit Supercomputern, Simulation und KI**

Unternehmen erhielten Einblick in HLRS-Ressourcen, trafen HPC-Expert:innen und lernten, wie Supercomputing industrielle Innovationen voranbringen kann – mit zahlreichen Anwendungsbeispielen.
- 25 – 27. September: **REACH II-Workshop**

Diese vom Media Solution Center organisierte Veranstaltung bot der Kultur- und Kreativwirtschaft praxisnahe Einblicke in den Einsatz von HPC-Technologien.
29. September – 4. Oktober: **Erste Internationale Konferenz zu KI-basierten Systemen und Services**

Ein vom HLRS organisierter Special Track in Venedig untersuchte, wie KI die Leistung und Effizienz von HPC steigern kann – und umgekehrt, wie HPC die wachsenden Anforderungen komplexer KI-Modelle unterstützt.
10. – 11. Oktober: **27. Results and Review Workshop**

Wissenschaftler:innen und Nutzer:innen der HLRS-Infrastruktur präsentierten Forschungsergebnisse, Herausforderungen und bewährte Praktiken in der HPC-Nutzung.
- 21 – 22. Oktober: **Realität in den Wissenschaften**

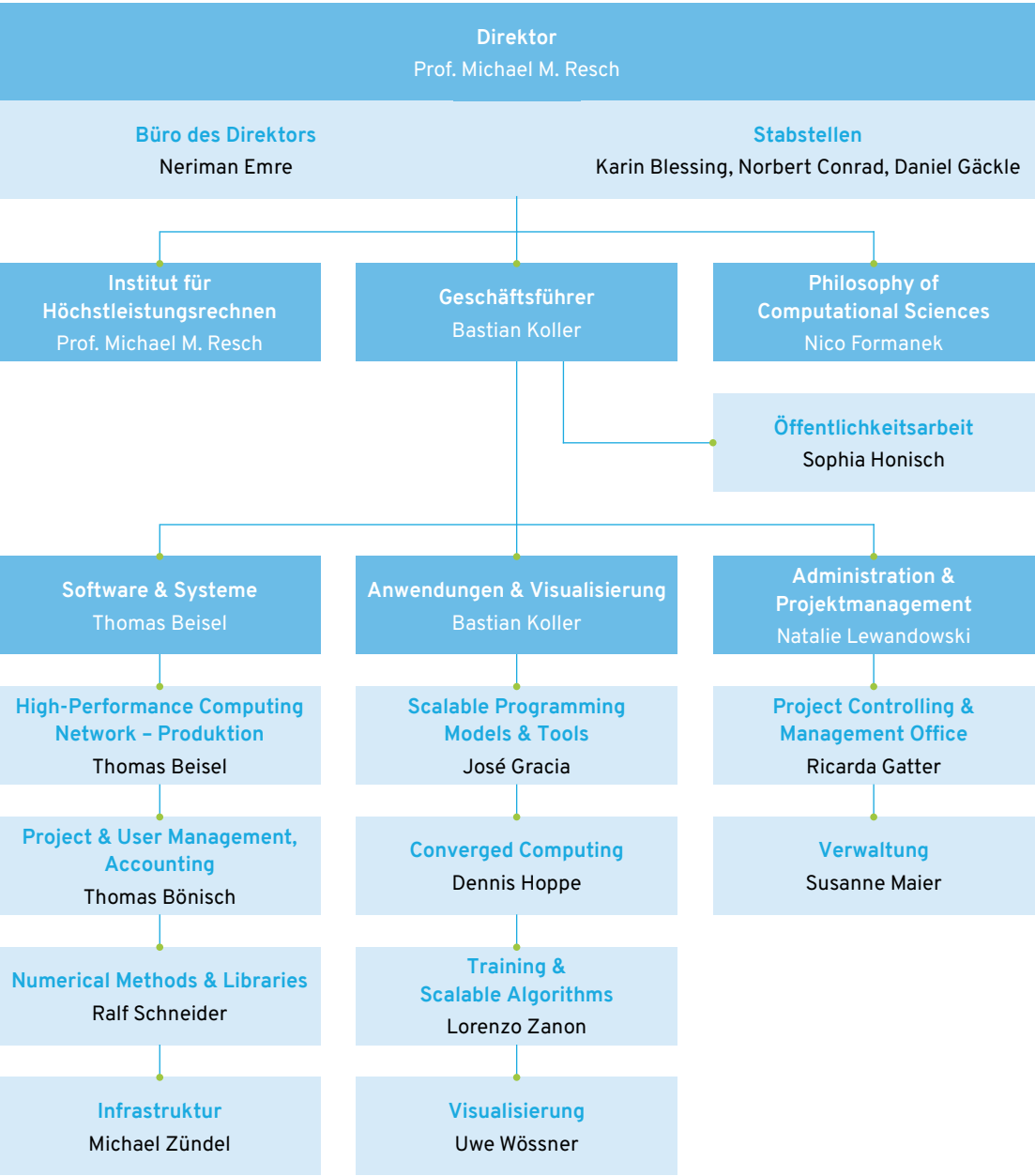
Ein interdisziplinärer Workshop zu Realitätskonzepten in unterschiedlichen Wissenschaften und ihren Gemeinsamkeiten, Unterschieden und Wechselwirkungen.
- 24 – 25. Oktober: **HPC User Forum**

Die gemeinsam mit Hyperion Research organisierte Veranstaltung vereinte internationale HPC-Zentren, Technologiehersteller und Expert:innen aus Bereichen wie KI und Quantencomputing.
- 25 – 27. November: **SAS24 – Modeling for Policy**

Die vom HLRS organisierte Konferenz diskutierte Möglichkeiten und Grenzen der Simulation, Wege zum Aufbau von Vertrauen in Modelle und zur besseren Interaktion mit der Gesellschaft.
3. Dezember: **8. Industrial HPC User Round Table**

Das jährliche iHURT-Treffen stärkt den Austausch mit der Industrie zu innovativen HPC-Anwendungen in Forschung und Entwicklung sowie zu Herausforderungen beim Einsatz von Supercomputing.

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

Evaluiert neuartige Technologien, die einen wesentlichen Impuls für die künftige Nutzung von Höchstleistungsrechnern geben könnten. Zu diesen Technologien gehören künstliche Intelligenz, Cloud- und Edge-Computing sowie Quantencomputing. Das Team untersucht beispielsweise die Konvergenz von HPC und KI mit dem Ziel, KI-Methoden im Sinne hybrider HPC/AI-Workflows in klassische Simulationen einzubinden. Dazu gehört auch die Entwicklung von KI-Lösungen unter Verwendung von Spitzentechnologien aus den Bereichen Big Data, maschinelles Lernen und Deep Learning. Das Team erforscht auch Virtualisierungstechnologien wie Container, Orchestrierung und Job Scheduling.

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, entwickelt und betreibt die gebäudetechnischen Anlagen und die Infrastruktur des HLRS. Diese Abteilung stellt den zuverlässigen und effizienten Betrieb der

High-Performance Computing-Systeme des HLRS sicher, bietet eine komfortable Arbeitsumgebung für Forschende und die Verwaltung des HLRS und unterstützt alle Aspekte des energieeffizienten HPC-Betriebs. Das Team unterstützt auch das Nachhaltigkeitsprogramm des HLRS. Es sammelt und überwacht die Energieverbrauchsdaten und bringt kontinuierliche Verbesserungen durch Energieeffizienzmaßnahmen voran.

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. Ricarda Gatter

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.-Ing. 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 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 transparen-

ten 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. Über das Schulungsangebot hinaus forscht TASC an der Entwicklung effizienter Algorithmen für wissenschaftliche Berechnungsanwendungen.

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

© 2025

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Universität Stuttgart
Nobelstraße 19
70569 Stuttgart, Deutschland

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

Direktor, HLRS

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

Leitung, Öffentlichkeitsarbeit

Sophia Honisch

Redaktion

Christopher M. Williams

Autoren

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

Übersetzung

Sophia Honisch

Fotos und Abbildungen

Bildrechte aller nicht gekennzeichneten Bilder: HLRS
S. 8, 10 stock.adobe.com / DZIKRA; S. 16 mit freundlicher
Genehmigung von Guy Lonsdale; S. 17 FF4EuroHPC; S. 19 Sandra
Ritschel; S. 22 Kumoh Institute of Technology (unten);
S. 26 Courtesy of Taltech; S. 27 MACK One; S. 28 Julian
Holzwarth / HLRS; S. 29 Max Kovalenko / Universität Stuttgart;
S. 30 Julian Holzwarth / HLRS; S. 31 Manuel Emme Fotografie
(oben); Benthem Crouwel Architects, in Zusammenarbeit mit
Birk Heilmeyer und Frenzel Architekten (unten); S. 37 ITLR,
Universität Stuttgart; p. 39 stock.adobe.com / Werner; S. 40 hy-
drograv GmbH; S. 41 Fundación Épica La Fura dels Baus.;
S. 43 HPE / HLRS; S. 44 Schaefer et al. Phys Fluids. 2024;
S. 46 Manuel Keßler, University of Stuttgart; p. 49 Balourdas et
al. 2024.; S. 50 Knodel et al. Int J Mol Sci. 2024; S. 59 Springer
Verlag; S. 62 Julian Holzwarth / HLRS

Druck

gutenberg beuys, Feindruckerei GmbH, Langenhagen

Design

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

Institutionelle Zugehörigkeit



Universität Stuttgart



Hunter und Hawk werden gefördert von:



Baden-Württemberg
Ministerium für Wissenschaft,
Forschung und Kunst



Bundesministerium
für Forschung, Technologie
und Raumfahrt



RECYCLED
Papier aus
Recyclingmaterial
FSC® C009051



Druckprodukt mit finanziellem
Klimabeitrag
ClimatePartner.com/10951-2505-1003

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

Folgen Sie uns auf:



LinkedIn



Bluesky

**Höchstleistungsrechenzentrum
Stuttgart**
www.hlrs.de

Cover:

Im EU-geförderten Projekt MERIDIONAL unterstützen Wissenschaftler:innen des HLRS die Planung des größten deutschen Offshore-Windparks He Dreht. Sie entwickeln interaktive 3D-Visualisierungen, die naturgetreue Simulationen komplexer Windströmungen sichtbar machen, um die Effizienz des Windparks zu optimieren. Die Anlage, die 2025 in Betrieb gehen soll, wird voraussichtlich das Äquivalent von 1,1 Millionen Haushalten mit erneuerbarer Energie versorgen.

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.