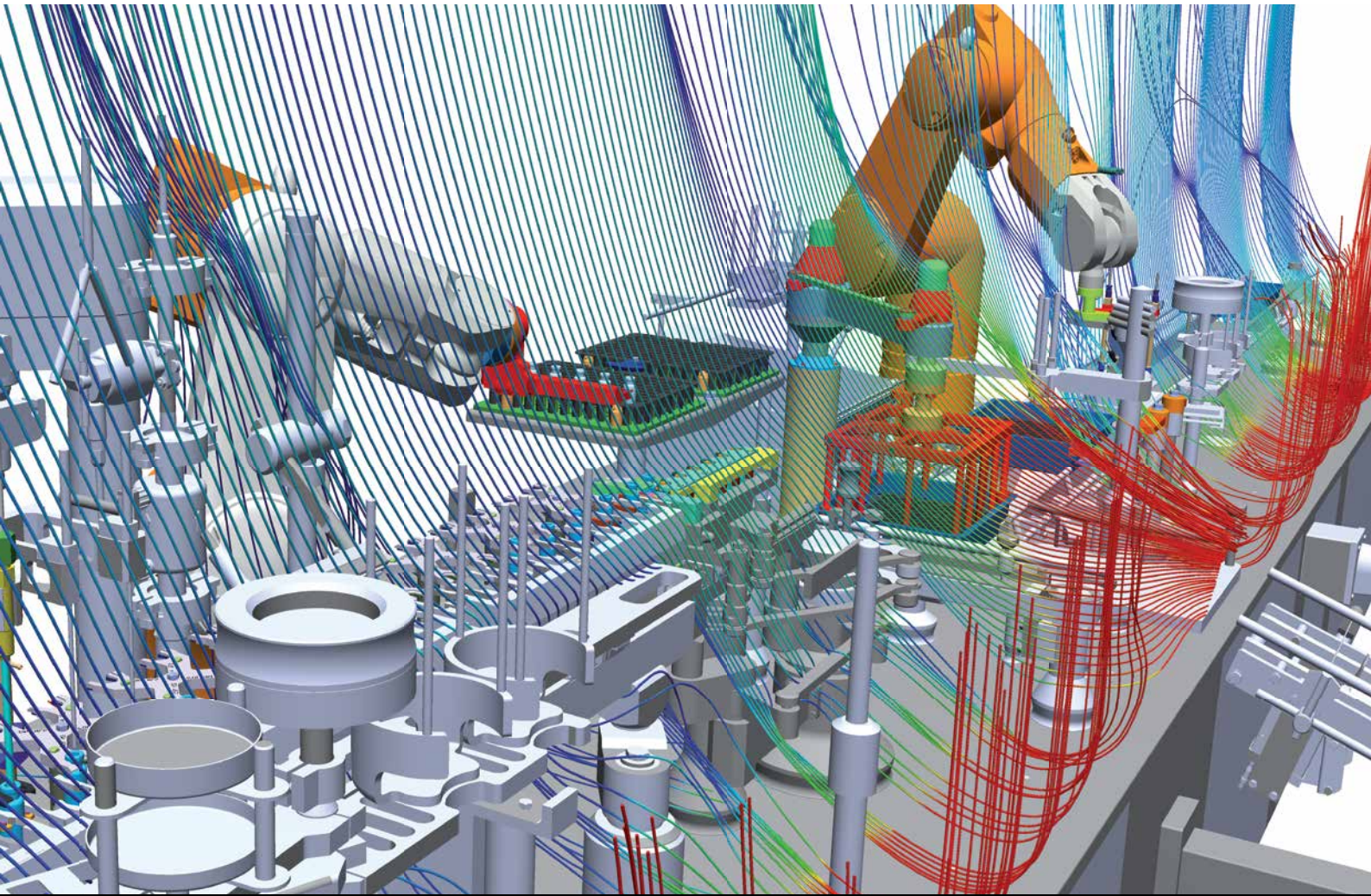


# 2020

H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart

## JAHRESBERICHT



ENERGIE

GESUNDHEIT

KLIMA

MOBILITÄT

PHILOSOPHIE



# 2020

## JAHRESBERICHT

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) wurde 1996 als erstes Bundeshöchstleistungsrechenzentrum Deutschlands gegründet. Als Einrichtung der Universität Stuttgart und Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing stellt das HLRS seine Rechenkapazitäten Nutzern aus Wissenschaft und Industrie zur Verfügung. Das HLRS betreibt modernste Höchstleistungsrechen-systeme und -technologien, bietet erstklassige Weiterbildung in den Bereichen Programmierung und Simulation und forscht an wegweisenden Fragestellungen und Technologien rund um die Zukunft des Höchstleistungsrechnens (HPC). Die HLRS-Expertise umfasst unter anderem die Bereiche parallele Programmierung, numerische Methoden für HPC, Visualisierung, Grid und Cloud Computing, Datenanalytik sowie Künstliche Intelligenz. Die Nutzer unserer Systeme forschen auf ganz unterschiedlichen Forschungsgebieten mit dem Schwerpunkt auf Ingenieurwissenschaften und angewandte Wissenschaften.



# Grußwort

## Director's Welcome

Herzlich willkommen zum Jahresbericht 2020 des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS). Wir freuen uns, Ihnen Höhepunkte aus dem vergangenen Jahr und einige spannende Projekte vorzustellen.

Die weltweite Coronavirus-Pandemie machte 2020 zu einem Jahr voller Herausforderungen für alle möglichen Einrichtungen. Auch das HLRS war keine Ausnahme. Nur zwei Wochen nach der feierlichen Einweihung unseres neuen Supercomputers Hawk im Februar trafen die COVID-19-Einschränkungen das HLRS. Die Unterbrechung von Lieferketten und Reisebeschränkungen machten die Installation unseres neuen Systems viel komplizierter als erwartet und unseren Nutzern das Leben extrem schwer. Letztlich dauerte es sechs Monate länger als geplant, Hawk in Betrieb zu nehmen. Während der Installationsphase waren wir dankbar für die Unterstützung und das Verständnis unserer Partner und Nutzer. Wir danken allen für ihre Hilfe in diesen unruhigen, komplizierten Zeiten.

Aber COVID-19 war nicht nur eine Herausforderung. Es war auch eine Chance, um aufzuzeigen, wie Computersimulationen bei der Bewältigung von Krisensituationen gut helfen können. Zwei Wochen nach der Lockdown-Einführung der Regierung zur Pandemiekontrolle wurde das HLRS vom Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung (BiB) gebeten, dessen Simulationen zu unterstützen, um den Pandemieverlauf vorherzusagen und für die kommenden Wochen und Monate zu planen. An einem Wochenende stellte das HLRS Ressourcen für die Optimierung, Parallelisierung und Operationalisierung des BiB-Codes zur Verfügung. Seitdem bietet es dem BiB Support und Rechendienstleistungen. Zudem stellte das HLRS Forschern im Zuge der europäischen und deutschen Initiativen zur Bekämpfung von

Welcome to the 2020 annual report of the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS). We are pleased to share highlights from our activities over the past year with you, including information about some exciting expansions in our focus.

The global coronavirus pandemic meant that 2020 was a challenging year for institutions everywhere, and HLRS was no exception. Just two weeks after a celebratory inauguration of our new supercomputer, Hawk, in February, restrictions caused by COVID-19 hit HLRS. Interruption of supply chains and travel restrictions not only made the installation of our new system much more complicated than we had anticipated, but also created an extremely difficult situation for our users. In the end, it took six months longer than planned to get Hawk operational. During the installation period we were grateful for the support and understanding of our partners and users, and we thank all of you who have helped HLRS through these troubling and complex times.

COVID-19 did not only pose challenges, however. It also gave us an opportunity to demonstrate important ways in which computer simulation can help in addressing crisis situations. Two weeks after the government implemented lockdown measures to control spread of the virus, HLRS was approached by the Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung (BiB, Federal Institute for Population Research) to support their simulations to predict how the pandemic would progress and to plan for the weeks and months ahead. Over a weekend HLRS made resources available to optimize, parallelize, and operationalize the BiB's code, and since then has been providing BiB with support and compute services. In addition, HLRS supplied scientific researchers compute time as part of both European and German

COVID-19 Rechenzeit zur Verfügung und wird durch den AMD COVID-19 HPC Fund unterstützt, der ab 2021 verfügbar ist und es uns ermöglicht, unsere Kapazitäten für Crisis Computing zu erhöhen.

Trotz der Pandemie setzte das HLRS seine Aktivitäten zur Unterstützung der europäischen HPC-Gemeinde fort und startete neue Projekte. Das HLRS ist Koordinator von drei europäischen Projekten – EuroCC, CASTIEL und FF4EuroHPC –, um im Rahmen von EuroHPC ein europäisches HPC-Kompetenznetzwerk zu schaffen. Durch diese Projekte übernimmt das HLRS eine Führungsrolle bei der Schaffung eines erstklassigen vernetzten europäischen HPC-Ökosystems. Nach ein paar Wochen im COVID-19-Lockdown stellten wir unsere HPC-Schulungen auf ein vollwertiges Online-Programm um und begannen mit einem umfassenden Nutzer-Support mit webbasierten Tools. Durch beide Entwicklungen können wir unser Fachwissen besser weitergeben. Zudem wurden unsere Bemühungen um ein nachhaltiges Höchstleistungsrechenzentrum durch zwei Umweltzertifizierungen (Blauer Engel und EMAS) gewürdigt.

Erfreulicherweise schaffte es Hawk bei seinem Debüt in den Top 500 der schnellsten Supercomputer der Welt auf Platz 16. Interessant ist auch unsere Partnerschaft mit Hewlett Packard Enterprise, die zur Erweiterung unseres CPU-Vorzeigesystems um Grafikprozessoren führen wird. Diese Änderung der Hawk-Systemarchitektur wird seine Simulationsleistung stärken und neue Deep-Learning- und KI-Anwendungen ermöglichen.

2020 lancierte das HLRS auch Forschungsprojekte zur Vorbereitung auf künftige Technologieentwicklungen und strategische Umfeldler. Als Teil des NFDI4Cat-Konsortiums ist das HLRS maßgeblich am Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur beteiligt. Als Partner im SEQUOIA-Projekt haben wir auch Mittel eingeworben, um die Möglichkeiten von Quantencomputern auszuloten, insbesondere für die Industrie. Zudem werden wir mit Unterstützung des Landes Baden-Württemberg unsere Forschung an der Schnittstelle von Geistes- und Sozialwissenschaften, Simulation und Digitalisierung ausbauen. Diese Projekte werden die Stellung des HLRS als eines der innovativsten HPC-Zentren Europas weiter stärken.

Da die Reisefreiheit im Jahr 2020 eingeschränkt war, beschränkte sich die internationale Zusammenarbeit auf virtuelle Vorträge und Workshops. Internationale Kooperation und Solidarität mit unseren Partnern waren 2020 jedoch wichtig für das HLRS, und wir danken allen, die in der Krise ihre Unterstützung angeboten haben. In Stuttgart freuten wir uns über die Intensivierung der Zusammenarbeit mit der Fraunhofer-Gesellschaft über eine formelle Kooperationsvereinbarung mit dem FraunhoferInstitut für Produktionstechnik und Automatisierung (IPA).

Die wichtigsten HLRS-Leistungsindikatoren bezeugen ein sehr erfolgreiches Jahr. Gegenüber den Vorjahren wurden mehr Drittmittel eingeworben, wobei die Einnahmen durch Nutzer unserer HPC-Systeme aus der Industrie erneut hoch waren. Unsere HPC-Schulungsprogramme stießen nach wie vor auf großes Interesse, wobei insbesondere die internationale Beteiligung durch unsere Online-Kurse stark anstieg. Erfreulicherweise schlossen auch zwei Doktoranden ihre Arbeit am Zentrum ab.

Abschließend möchte ich bei dieser Gelegenheit noch den Unterstützern und Förderern danken, die die Erfolge des HLRS im Jahr 2020 ermöglichten. Wir freuen uns darauf, weiterhin mit Ihnen gemeinsam innovative Einsatzmöglichkeiten für HPC und andere fortschrittliche digitale Technologien zu finden, um die drängendsten Herausforderungen für Wissenschaft, Industrie, die HPC-Gemeinde und die Gesellschaft allgemein anzugehen.

Mit freundlichen Grüßen,



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

initiatives to fight COVID-19, and received support through the AMD COVID-19 HPC Fund that will become available in 2021 and enable us to increase our capacity for crisis computing.

Despite the pandemic, HLRS maintained and initiated new activities to support the European supercomputing community. As a managing partner HLRS launched three European projects – EuroCC, CASTIEL, and FF4EuroHPC – to create a European network of HPC expertise in the framework of EuroHPC. Through these projects HLRS will take a leading role in creating a networked and world-class European HPC ecosystem. Within a few weeks of the COVID-19 lockdown, we also transformed our HPC training courses into a full-fledged online program and began providing intensive user support using web-based tools; both developments have expanded our ability to share our expertise. Furthermore, our efforts to create a sustainable high-performance computing center were honored by two environmental certifications (Blue Angel and EMAS).

We were pleased to see Hawk land in 16th place in its debut on the Top500 List of the world's fastest supercomputers. Also exciting was an agreement we reached with Hewlett Packard Enterprise to expand our CPU-based flagship system with graphic processing units (GPUs). This change in Hawk's system architecture will complement its power for simulation and open new opportunities for deep learning and artificial intelligence applications.

In 2020 HLRS also began research projects aimed at preparing for future technology developments and for future strategic settings. As part of the NFDI4CAT consortium HLRS became deeply involved in the creation of a German National Research Data Infrastructure. As a partner in the SEQUOIA project, we also acquired funding to begin exploring the possibilities of quantum computing, particularly for industry. Additionally, with the support of the State of Baden-Württemberg, we will extend our research at the intersection of the humanities, social sciences, simulation, and digitalization. These projects will help strengthen HLRS's position as one of the most innovative HPC centers in Europe.

Because travel was restricted in 2020, international collaborations were limited to giving talks and attending

workshops virtually. However, international collaboration and solidarity with our partners were important for HLRS in 2020, and we would like to thank all who offered their support during the crisis. In Stuttgart we welcomed an extension of our collaboration with the Fraunhofer Society, entering into a formal collaboration agreement with the Fraunhofer Institute for Manufacturing, Engineering and Automation (IPA).

HLRS's key performance indicators highlight a very successful year. Our third-party funding saw an increase over previous years, while our income from industrial users of our HPC systems was again at a high level. We also maintained strong participation in our HPC training programs, including a large increase of international participation due to our online courses, and were delighted to see two doctoral students complete their PhD's at the center.

Finally, I would like to use this occasion to thank the supporters and funders who have made HLRS's successes in 2020 possible. We look forward to continuing working with you to find innovative ways of using HPC and other advanced digital technologies to address the most pressing challenges facing science, industry, the HPC community, and society at large.



# INHALT

## 8 Im Blickpunkt

- 9 Höchstleistungsrechnen im COVID-19-Jahr

## 14 Neuigkeiten

- 15 Kurze Beiträge
- 20 Neuer Supercomputer Hawk im Einsatz
- 24 Neues HPC-Kompetenznetzwerk für Europa
- 26 Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Katalyseforschung
- 27 Vertrauen und Information
- 28 Virtual-Reality-Umgebungen für das Home Office
- 29 HLRS und Fraunhofer IPA beginnen Kooperation
- 30 Flexiblere Robotik durch Künstliche Intelligenz: Ein Interview mit Marco Huber
- 34 Leistungsoptimierungs-Workshop eröffnet neue wissenschaftliche Möglichkeiten
- 38 HLRS erhält zwei Umweltzertifikate
- 39 Promotionen 2020

## 36 HLRS in Zahlen

## 40 Highlights der Forschung

- 41 Maschinelles Lernen für bessere Strömungsmechanik-Forschung
- 43 Die spinnen, die Quantenpunkte
- 46 Forscher modellieren Muskeln mithilfe von HPC
- 49 Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer 2020

## 58 Über uns

- 59 In unserem Rechenraum
- 61 Unsere Nutzer
- 62 Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
- 67 Organigramm
- 68 HPC Training Courses in 2020
- 70 Organisation

- 72 Impressum

# IM BLICKPUNKT

## Höchstleistungsrechnen im COVID-19-Jahr

Die Erfahrungen des HLRS während des Coronavirus-Ausbruchs zeigten, wie fortschrittliche Computertechnologien helfen können, auf Krisensituationen zu reagieren.

Mitte Februar 2020 feierte das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) den Beginn einer neuen Ära in seiner Geschichte. Zahllose hochrangige Regierungsvertreter, Branchenvertreter, Forscher und Freunde des HLRS kamen zur Einweihung des neuen HPE Apollo Supercomputers Hawk mit einer Spitzenleistung von 26 Petaflops. Die Gäste ahnten jedoch nicht, dass solche Feiern schon wenige Wochen später unmöglich sein würden – eine völlig neue, völlig andere, völlig unerwartete Zeit stand bevor.

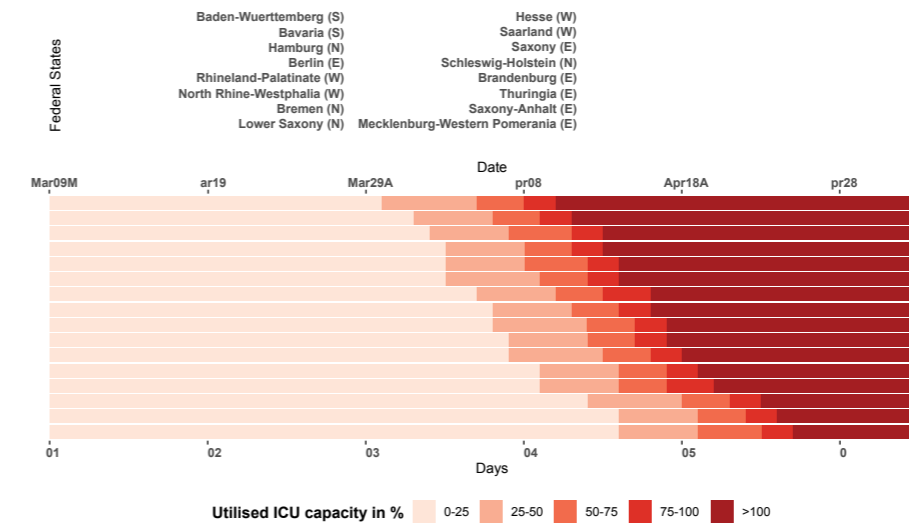
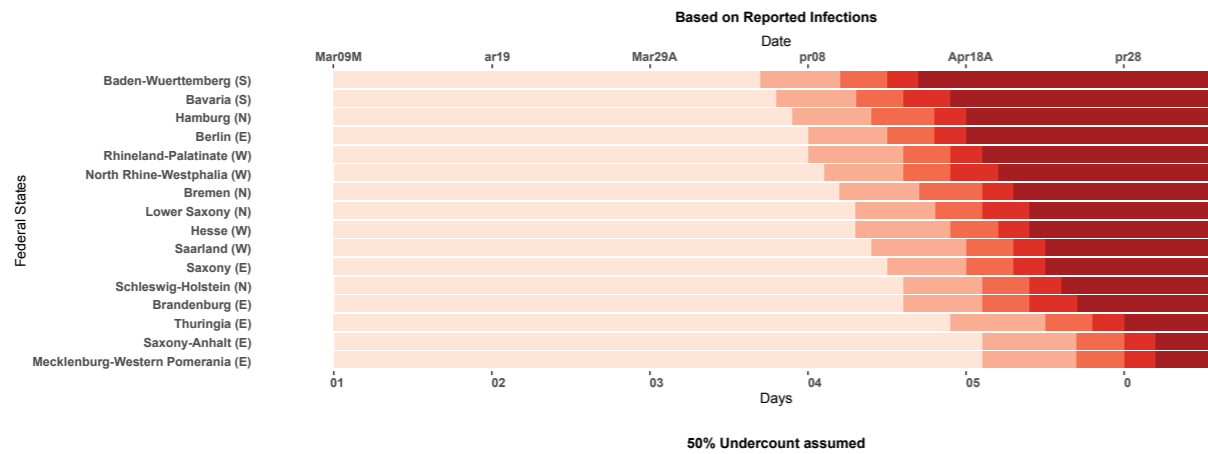
Anfang März hatte das SARS-CoV-2-Virus begonnen, sich in Deutschland auszubreiten, und schon bald wurden bis dato unvorstellbare Maßnahmen gegen eine neue tödliche Pandemie ergriffen. Am 13. März setzte Baden-Württemberg den Präsenzunterricht an allen Schulen aus, und am 16. März empfahl die Universität Stuttgart allen Mitarbeitern, die nicht vor Ort auf dem Campus sein mussten, von zu Hause aus zu arbeiten. Obwohl die Fallzahlen in Deutschland im Sommer zurückgingen, führten das Fehlen eines wirksamen Impfstoffs und eine noch gefährlichere zweite Krankheitswelle im Herbst dazu, dass viele Einschränkungen für den Rest des Jahres in Kraft blieben. Selbst Ende 2020 waren nur wenige Mitarbeiter täglich vor Ort am HLRS; die meisten arbeiteten von zu Hause aus und vernetzten sich per E-Mail und Videokonferenz.

Die beispiellosen Auswirkungen der COVID-19-Pandemie betrafen das HLRS in vielerlei Hinsicht und zwangen das Zentrum zur schnellen Anpassung an eine neue Realität. Sie verdeutlichten aber auch die wichtige Rolle, die Höchstleistungsrechnen (HPC) und andere

fortschrittliche Computertechnologien heute bei der Bewältigung von Gesundheitskrisen spielen. Für das HLRS war 2020 ein Jahr voller neuer Herausforderungen, das aufzeigte, wie sich Höchstleistungsrechnen in den nächsten Jahren entwickeln könnte, um auf andere Krisen vorbereitet zu sein.

### Bereitstellung von Computern zur Grundlagenforschung

Wissenschaftliches Rechnen spielt heute eine wesentliche Rolle in Fachbereichen wie Physiologie, Immunologie, Virologie und Medikamentenentwicklung. Wissenschaftler nutzen heute routinemäßig Simulationen, maschinelles Lernen und Hochleistungsdatenanalyse, um viele Arten von Krankheitserregern und deren Infektionswege zu erforschen und so wichtige Daten für die Entwicklung potenziell wirksamer Medikamente, Impfstoffe und anderer Strategien zur Krankheitsbekämpfung zu sammeln. Mit Algorithmen speziell für Supercomputer erstellen Wissenschaftler überprüfbare Vorhersagen zu biologischen Aktivitäten, die vom Maßstab her zu klein oder zu komplex für rein experimentelle Ansätze sind. Dies wiederum treibt die Forschung voran, da man sich so im Versuchslabor auf die erfolgversprechendsten Hypothesen konzentrieren kann. 2020 setzten Wissenschaftler in vielen Ländern Berechnungsansätze vielseitig gegen die COVID-19-Pandemie ein. Einige nutzten diese etwa, um ein besseres Verständnis der molekularen Eigenschaften des Virus zu erlangen. Andere untersuchten mit großen Datensätzen virtuell Wirkstoffe, um vorherzusagen, welche



Ein Simulationslauf des Ausmaßes, in dem die Kapazitäten der Intensivstationen durch Patienten mit COVID-19 in Anspruch genommen worden wären, wenn keine Maßnahmen zur Eindämmung der Krankheitsausbreitung ergriffen worden wären. Werte über 50 % werden als kritisch angesehen, da 50-65 % der Intensivbetten typischerweise durch Patienten mit anderen Krankheiten belegt sind. Das erste Diagramm basiert auf den gemeldeten Fallzahlen, während das zweite davon ausgeht, dass die tatsächlichen Fälle in den ersten Wochen der Pandemie um 50 % unterschätzt wurden. Quelle: RKI, Bundesagentur für Arbeit, Statistisches Bundesamt. Eigene Berechnungen.

vorhandenen Wirkstoffe eingesetzt werden könnten, um das Virus unschädlich zu machen. Klinische Forscher analysierten elektronische Krankenakten mit Berechnungsansätzen, um nach wichtigen Datenmerkmalen für personalisiertere Behandlungsstrategien zu suchen. Epidemiologen nutzten die Daten auch, um nachzuverfolgen und vorherzusagen, wie sich die Krankheit in der Bevölkerung ausbreitet, und zeigten so auf, wie sich das öffentliche Gesundheitswesen auf einen Ausbruch vorbereiten und diesen eindämmen kann. Durch eine beispiellose globale Reaktion seitens der Wissenschaft, die diese und andere Ansätze nutzte, konnte schnell umfassendes Wissen zur Suche nach Impfstoffen, Therapien und wirksamen Maßnahmen des öffentlichen Gesundheitswesens erworben werden. Als der Lockdown im März das HLRS erfasste, bot es der COVID-19-Forschung geballte Rechenkraft. Es tat sich umgehend mit seinen Partnern im Gauss Centre for Supercomputing – dem Zusammenschluss der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland – zusammen und kündigte einen beschleunigten Zugang zu seinen Systemen für Wissenschaftler an, die das Virus und seine Erkrankung untersuchen. Das HLRS mag zwar eher für seine Unterstützung im Bereich Computational Engineering bekannt sein, seine HPC-Infrastruktur eignet sich aber auch für die Gesundheitsforschung. Entsprechend meldeten sich in den folgenden Wochen und Monaten Wissenschaftler, um Hawk für den Kampf gegen das neuartige Coronavirus zu nutzen. Acht COVID-bezogene Projekte nutzten das HLRS-System im Laufe des Jahres, wobei die

Ressourcen des Zentrums auch weiterhin anderen Forschern zur Verfügung stehen. In mehreren der zugelassenen Projekte erforschten die Wissenschaftler den physischen Aufbau des Virus, einschließlich der Merkmale, welche die Infektion menschlicher Zellen betreffen. Dies umfasste die Forschung zur Modellierung des COVID-19-Spike-Proteins, das eine Infektion auslöst, wenn es mit dem menschlichen ACE2-Rezeptor auf der Zelloberfläche interagiert. Andere setzten auf einen Ansatz namens Molekulardynamik, um mit extrem hoher Auflösung zu simulieren, wie Proteine auf der Oberfläche des Virus ihre Form verändern. Ein besseres Verständnis dieser Phänomene könnte helfen, Medikamente zu entdecken, die die Interaktion zwischen Virus und Mensch beim Eindringen in die Zellen hemmen könnten. Da diese Probleme so komplex sind, erwiesen sich die HLRS-Rechnersysteme als unverzichtbar für diese Forschung.

### Bedarfvorhersage nach Intensivstationen in Krankenhäusern

Mit Beginn der COVID-19-Pandemie konzentrierte sich die deutschlandweite Strategie darauf, die Ausbreitung des Virus einzudämmen, um eine Überfüllung der Krankenhäuser zu verhindern. Dies beinhaltete die Umsetzung und zeitweise Lockerung vieler Maßnahmen, darunter die Schließung von Geschäften, das Verbot öffentlicher Veranstaltungen, die Anordnung, zu Hause zu bleiben, und das Tragen von Schutzmasken in der Öffentlichkeit. Im Gesamtjahr 2020 konnte diese Strategie weitgehend vermeiden, dass die Intensivstationen

überfüllt waren, obwohl die zweite Pandemiewelle dem Land wieder neue Restriktionen aufzwang, um eine Flut von schweren Fällen zu verhindern. Solange Impfaktionen noch nicht effektiv genug sind, werden solche Zyklen wahrscheinlich weitergehen. Um Tools bereitzustellen, mit denen Gesundheitsbehörden und Regierungen bestimmen können, welche Schutzmaßnahmen erforderlich sind, arbeitet HLRS-Forscher Dr. Ralf Schneider mit Wissenschaftlern des Bundesinstituts für Bevölkerungsforschung (BiB) an einer Software zur bis zu achtwöchigen Vorhersage von Nachfragespitzen bei Intensivstationen in Deutschland. Dieser COVID-„Wetterbericht“ könnte dazu beitragen, ein nachhaltiges Gleichgewicht zwischen öffentlichem Gesundheitsschutz und der Minimierung anderer sozialer, wirtschaftlicher und persönlicher Auswirkungen der Pandemie zu finden. Eine Vorabpublikation, die das Tool beschreibt, wurde im Dezember auf dem medRxiv Preprint-Server für Gesundheitswissenschaften veröffentlicht. Die Software wurde auf dem Hawk-Supercomputer des HLRS entwickelt, kann aber von Datenwissenschaftlern überall genutzt werden. Schneider erklärt: „Das Modell basiert auf epidemiologischen Parametern, die den in Deutschland verfügbaren Daten entsprechen. Der Code ist jedoch so aufgebaut, dass andere Länder ihn an ihre eigene Situation anpassen können, wenn die entsprechenden Daten verfügbar sind.“ Wichtig für den Erfolg dieser Bemühungen war auch EXCELLERAT, ein europäisches Projekt unter HLRS-Leitung, das eigentlich den Maschinenbau auf

dem Weg zu Exascale-Supercomputer-Technologien unterstützen soll. HLRS-Mitarbeiter zeigten gemeinsam mit dem EXCELLERAT-Partner SSC-Services, dass Technologien für Ingenieure auch bei Herausforderungen im Gesundheitswesen nützlich sein können. Die Mitarbeiter implementierten ein sicheres Datentransfer-Tool, mit dem BiB-Forscher Daten schnell zwischen Hawk und den Systemen in ihren Büros in Wuppertal verschieben können, sodass sie Zugang zur HLRS-Rechnerleistung für groß angelegte Datenanalysen hatten, ohne vor Ort anwesend sein zu müssen.

### Neue digitale Infrastruktur für bessere COVID-Forschung

Das HLRS stellt einzelnen Wissenschaftlern Rechenzeit zur Forschung bereit, arbeitet aber auch in Dutzenden geförderter Forschungsprojekte mit, die sich mit den technischen Herausforderungen des Höchstleistungsrechnens befassen. In einem neuen Projekt, das im Sommer durch das Programm Horizon 2020 der Europäischen Kommission genehmigt wurde, trägt das HLRS zur Entwicklung eines wichtigen Management-Tools für die öffentliche Gesundheit während Pandemien bei. Seit März 2020 haben medizinische Einrichtungen in Europa und weltweit massenhaft COVID-19-Patientendaten gesammelt, die Patientencharakteristika, Behandlungspläne und Krankheitsverläufe dokumentieren. Anfangs wurden diese Daten jedoch größtenteils von verschiedenen Gesundheitsdienstleistern in ihren eigenen lokalen Datenbanken gesammelt und

gespeichert und es gibt dazwischen kaum Verbindungen. Da moderne biomedizinische und epidemiologische Studien durch die Verwendung größerer Datensätze an statistischer Aussagekraft gewinnen, böte die Zusammenführung dieser Informationen den Forschern eine wichtige Ressource.

Das neue Projekt namens ORCHESTRA wird von Prof. Evelina Tacconelli von der Universität Verona geleitet und umfasst 27 Partnereinrichtungen aus 15 Ländern in Europa, Afrika, Südamerika und Asien. Es wird eine vielschichtige Dateninfrastruktur für die Sammlung und den Austausch COVID-bezogener Patientendaten aus ganz Europa und anderen Teilen der Welt entwickeln. Im Zuge dessen kooperiert das HLRS mit Wissenschaftlern der Hochleistungsrechenzentren CINECA (Italien) und CINES (Frankreich), um die Infrastruktur für das Datenmanagement zu entwickeln.

Nach dem ORCHESTRA-Plan werden nationale Daten-Hubs in den teilnehmenden Ländern erfasste Daten zusammentragen. Ein zentrales cloud-basiertes Portal wird es Forschern ermöglichen, auf diese zuzugreifen, sie gemeinsam zu nutzen und miteinander zu verknüpfen. Die sich ergebende virtuelle Kohorte – potenziell aus Hunderttausenden von Patienten – wird multidisziplinäre Studien, unter anderem zur Genetik, Epigenetik, Immunologie und Epidemiologie von COVID-19 ermöglichen. Das HLRS hilft bei der Infrastrukturentwicklung, bietet aber auch fachliche Unterstützung bei der Standardisierung der Datenerfassung, -speicherung und -kuratierung in allen nationalen Daten-Hubs. Eine solche Harmonisierung ist nötig, damit Datensätze verschiedensten Ursprungs nahtlos so integriert werden können, dass ihr Nutzen und ihre Wirkung maximiert werden. Das ORCHESTRA-Team rechnet damit, dass diese neue Plattform Studien zur Verbesserung der öffentlichen Gesundheit und von Impfstoffstrategien unterstützen wird. Sie könnte auch ein Modell für die Sammlung und den Austausch von Daten bei zukünftigen Pandemien sein.

#### HPC-Schulungs- und Nutzer-Supportteams entdecken neue Online-Möglichkeiten

Vor Ort wirkte sich die COVID-Krise anders auf den HLRS-Alltag aus. Aufgrund von Vorschriften zur Beschränkung sozialer Kontakte konnte das Zentrum

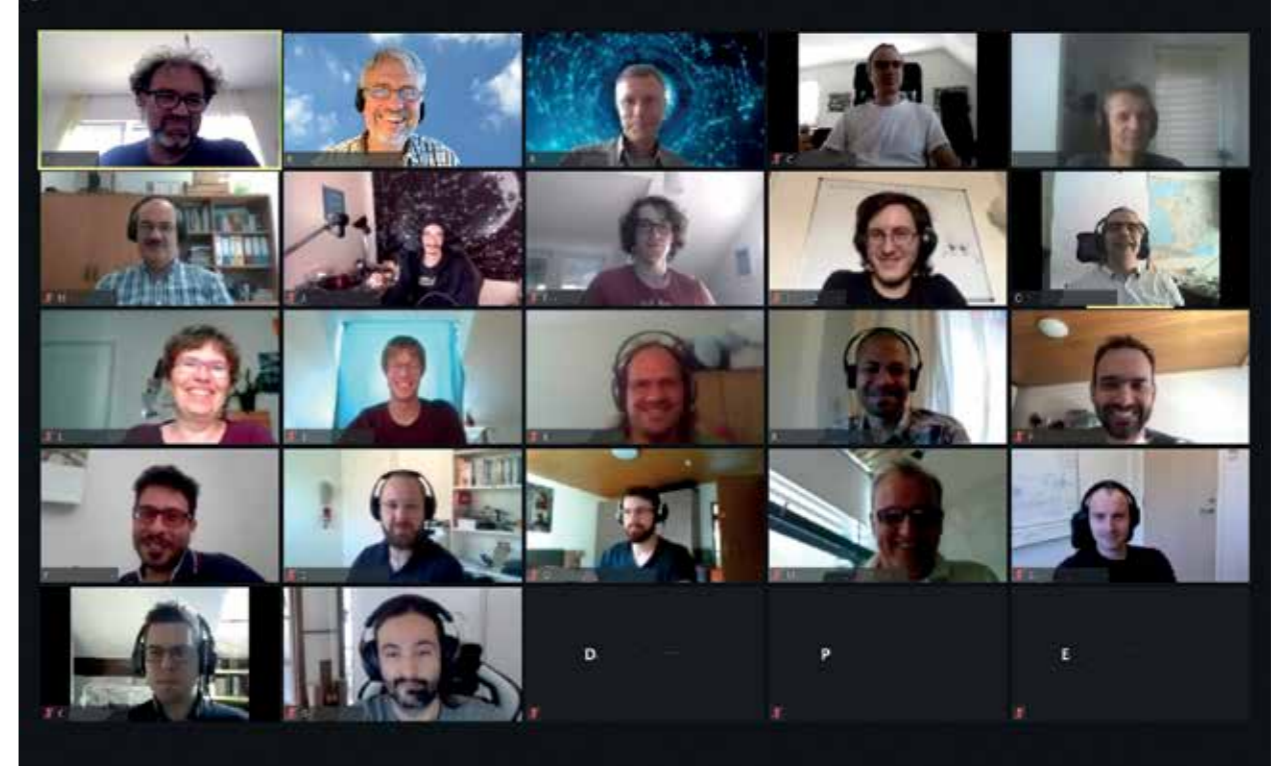
sein umfassendes HPC-Schulungsprogramm nicht mehr im Präsenzformat anbieten (siehe Seite 68-69). So begannen die Dozenten schon wenige Wochen nach Lockdown-Beginn, die Kurse auf ein Online-Format umzustellen und über die Videokonferenz-Plattform Zoom abzuhalten.

Es war zwar nicht ganz einfach, die Kurse weiterhin praxisnah und interaktiv zu gestalten, aber die Digitalisierung des HLRS-Schulungsprogramms hatte auch einzigartige Vorteile. Das Zentrum konnte einen wesentlichen Rückgang der normalen Teilnehmerzahlen vermeiden und sogar ein geographisch breiteres Publikum als üblich erreichen: 38 % aller Teilnehmer waren aus dem Ausland.

„Obwohl wir uns natürlich wieder auf den Präsenzunterricht freuen, zeigten die Erfahrungen der letzten Monate, wie Online-Kurse den HPC-Wissensstand verbessern können“, so Dr. Rolf Rabenseifner, Leiter des HLRS-Schulungsprogramms. „Derzeit rechnen wir damit, dass das HLRS möglicherweise auch nach Ende der aktuellen Pandemie Online-Kurse parallel zu seinem Haupt-Schulungsprogramm anbieten könnte.“ Dann könnte die Notwendigkeit, sich an COVID-bedingte Einschränkungen anzupassen, unerwartete Vorteile haben. In ähnlicher Weise musste das HLRS-Nutzer-Supportteam seinen Code-Portierungs- und Skalierungs-Workshop im April schnell auf ein Online-Format umstellen. Mithilfe von Videokonferenz-Software arbeiteten Experten für Computational Science and Engineering am HLRS mit einzelnen Wissenschaftlerteams in Breakout-Sessions zusammen, um Probleme mit ihren Codes zu lösen.

„In Optimierungs-Workshops halten wir nicht nur einen Vortrag oder zeigen einen Foliensatz“, sagt Björn Dick vom HLRS-Nutzer-Supportteam. „Mit diesem neuen Ansatz können wir online zusammenarbeiten, wirklich gemeinsam in den Code einsteigen und Änderungen vornehmen. Per Fernzugriff kann ich kurz die Kontrolle über den Bildschirm eines Nutzers übernehmen, Codebestandteile hinzufügen, um zu erklären, was ich meine, und der andere versteht es sofort und kann selbstständig weiterarbeiten.“

Der Erfolg der Veranstaltung inspirierte das HLRS-Team auch zum Einsatz von Videokonferenz-Tools in anderen Situationen, in denen persönliche Treffen



Während der COVID-19-Pandemie setzte das HLRS sein Schulungsprogramm mit Hilfe von Webkonferenzen fort.

unmöglich waren. „In gewisser Hinsicht zwang uns COVID zur Anpassung unserer Arbeitsweise“, so PUMA-Abteilungsleiter Dr. Thomas Bönisch, „aber es ermöglichte uns auch, eine Support-Lösung zu entwickeln, die wir vorher nicht in Betracht gezogen hatten. So können wir HLRS-Systemanwendern jetzt auch außerhalb des Leistungsoptimierungs-Workshops helfen.“

#### Crisis Computing: Vorbereitung auf eine unsichere Zukunft

COVID-19 wird wohl leider nicht die letzte Pandemie sein, mit der die Menschheit konfrontiert wird. Angesichts globaler atmosphärischer und gesellschaftlicher Instabilitäten, die der Klimawandel bestimmt mit sich bringen wird, der ständigen Gefahr chemischer oder atomarer Unfälle, der Anfälligkeit für Naturkatastrophen und anderer globaler Bedrohungen werden Simulationen und ähnliche Prinzipien wie Künstliche Intelligenz eine wichtige Rolle spielen, um schnell auf neuartige Probleme reagieren zu können. Um das HLRS bei diesen Herausforderungen zu unterstützen, kündigte der Hardwarehersteller AMD, dessen Prozessoren das „Herz“ von Hawk sind, im September 2020 im Rahmen des AMD COVID-19 High Performance Computing Fund eine Spende von zehn neuen Rechenknoten an das HLRS an. Die zusätzliche

Rechenleistung aus AMD EPYC-Prozessoren und Instinct-Beschleunigern, die Anfang 2021 ausgeliefert werden sollen, dient ausschließlich der Pandemiefor-

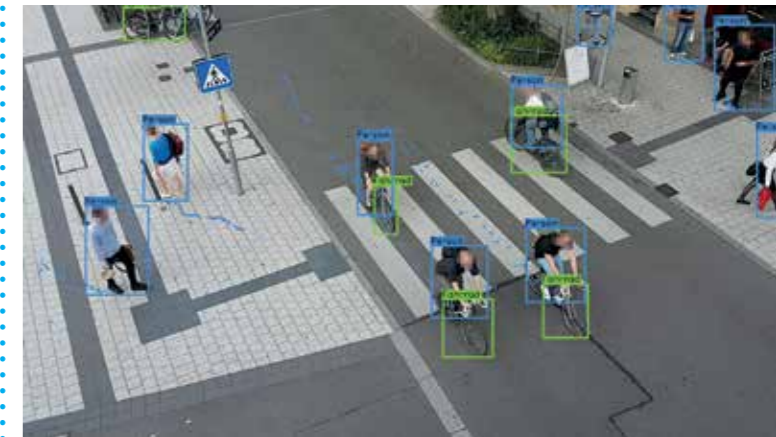
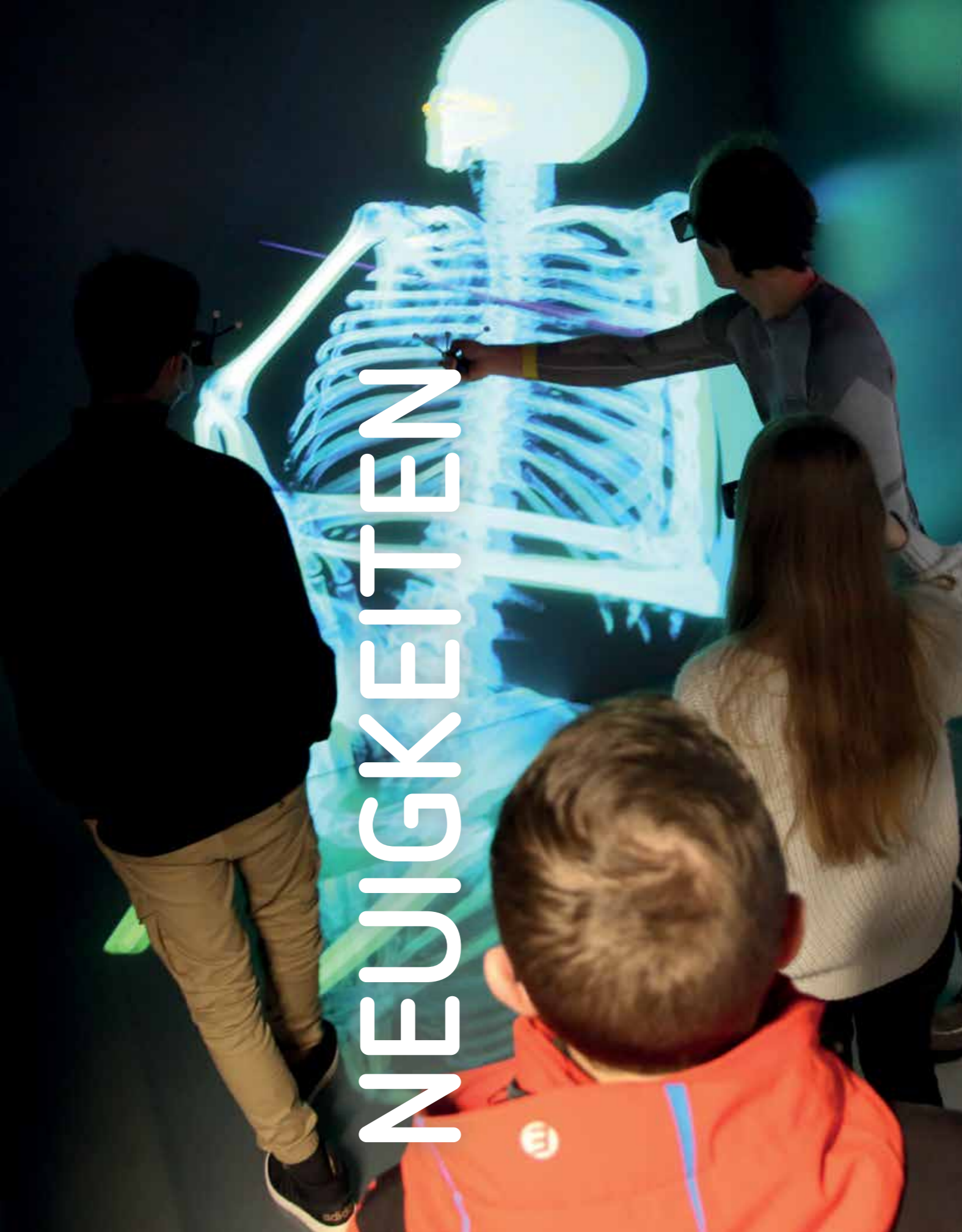
schung. In Zukunft kann das HLRS mit diesen neuen Ressourcen auch dringenden Rechnerbedarf bei plötzlichen Krisen abdecken. HLRS-Direktor Michael Resch erklärt: „Die COVID-19-Krise war ein großer Weckruf in Deutschland und Europa und hat gezeigt, dass neue Herausforderungen sehr plötzlich entstehen und gesellschaftsübergreifend große Auswirkungen haben können. Da Höchstleistungsrechnen die Basis von Tools ist, mit denen Wissenschaftler schneller diese Herausforderungen bewältigen können, müssen jetzt ganz klar Investitionen und Vorbereitungen getätigt werden, um für die nächste derartige Herausforderung gewappnet zu sein. Am HLRS und an anderen HPC-Zentren Europas wird davon ausgegangen, dass die Umsetzung neuer Ressourcen und Strategien zur Bewältigung von Notfallsituationen, in denen Simulationen und Datenanalysen helfen können, in den kommenden Jahren ein großer Schwerpunkt sein wird.“

Supercomputer werden niemals ein Allheilmittel für Bedrohungen wie die COVID-19-Pandemie sein. Aber sie werden auch in Zukunft eine wichtige Rolle dabei spielen, diese anzugehen und erfolgreich zu bewältigen.

(CW)



# NEUIGKEITEN



## Supercomputing-Akademie lanciert neue Kurse und vergibt erste Zertifikate an HPC-Experten

Die Supercomputing-Akademie bietet Anwendern in der Industrie professionelle Weiterbildung in vielen Bereichen rund um Höchstleistungsrechnen. 2020 wurden vier neue Kursmodule eingeführt: Performance Optimierung; Wirtschaftlichkeit und Nachhaltigkeit; Visualisierung sowie Daten: Management und Analyse. Ein wichtiger Meilenstein war auch die erstmalige Vergabe der höchsten Zertifizierung „HPC-Experte“ an zwei Teilnehmer. „So habe ich einen Einblick aus erster Hand in den Stand und die Probleme des Supercomputing gewonnen“, kommentiert Teilnehmer Sascha Michael Scholz seine Leistung. „Ich fühle mich in die Lage versetzt, kompetent und professionell im HPC-Bereich zu agieren.“ Nach Abschluss des MoeWE-Projekts (das die Supercomputing-Akademie entwickelt und gegründet hat) im März 2021 wird das Schulungsprogramm selbsttragend weitergeführt. (CW)

## Sichere Städte für Radfahrer und Fußgänger

Treffen Fußgänger und Radfahrer aufeinander, entsteht oft Stress. In einem vom Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur geförderten Projekt namens Cape Reviso untersucht das HLRS gemeinsam mit Partnern, wie Simulation helfen kann, solche Probleme zu lindern. Erst erfolgt eine Langzeitbeobachtung der Bewegungen von Fußgängern, Fahrrädern und motorisierten Fahrzeugen an einem stark frequentierten Ort, dann werden mit maschinellem Lernen Daten analysiert und ein Modell entwickelt. Nach der Kombination dieses Modells mit den von Forschern des Karlsruher Instituts für Technologie gesammelten Urban-Emotions-Daten wird ein digitaler Zwilling erstellt, also eine umfassende Virtual-Reality-Simulation des Ortes. Planer können dann mit dem Modell sehen, wie Radfahrer und Fußgänger interagieren, Eingriffe wie Beschilderungsänderungen virtuell testen und vor Ort Verbesserungen umsetzen. (CW)



© Fundación Épica

### Media Solution Center Baden-Württemberg baut Netzwerk auf

Das 2018 vom HLRS, ZKM und der Hochschule der Medien gegründete Media Solution Center Baden-Württemberg ist eine Mitgliedsorganisation, die Kunstorganisationen, Medienunternehmen und Technologen zusammenbringt, um kollaborative Innovation zu fördern. 2020 schoss die Mitgliederzahl in Deutschland und im Rest Europas in die Höhe. Zu Regionalgrößen wie dem Kunstmuseum Stuttgart, dem Staatstheater Stuttgart, dem Stuttgarter Kammerorchester und der Universität Tübingen stießen international anerkannte Organisationen wie die Fundación Épica La Fura dels Baus (Spanien), das Festival Quartieri dell'Arte de Viterbo (Italien), das Tschechische Nationalballett und die Kunsthochschule Utrecht (Niederlande). Die MSC-Mitgliedschaft steht interessierten Organisationen offen. Erfahren Sie mehr auf [msc-bw.com](http://msc-bw.com) (CW)



Marian Albers



Gerd Schädler



Lars Schäfer

© Bilder mit freundlicher Genehmigung der Gewinner des Golden Spike Award.

### Verleihung der Golden Spike Awards auf 23. Annual Results and Review Workshop

Aufgrund der COVID-19-Pandemie fand der 23. Annual Results and Review Workshop am 8. und 9. Oktober online statt. Auf dem Programm standen 25 wissenschaftliche Vorträge und eine virtuelle Postersession mit 20 Postern im PDF-Format. Dr. Dietmar Kröner, Professor an der Universität Freiburg und stellvertretender Vorsitzender des HLRS-Lenkungsausschusses, gab außerdem die Gewinner der Golden Spike Awards 2020 bekannt, mit denen herausragende

Forschungsleistungen und innovative Anwendungen von HPC-Ressourcen ausgezeichnet werden. Die diesjährigen Preisträger waren Marian Albers von der RWTH Aachen für Turbulenzsimulationen, die bei der Konstruktion effizienterer Tragflächen helfen könnten, Gerd Schädler vom Karlsruher Institut für Technologie für die Beiträge seines Teams zu hochauflösenden Modellen der Auswirkungen des Klimawandels in Afrika und Lars Schäfer von der Ruhr-Universität Bochum für Molekulardynamiksimulationen von ABC-Transportern, einer Klasse von Zellmembranproteinen. (CW)

### Biedermeier im digitalen Zeitalter

Im Rahmen des Festivals „Unter Beobachtung: Kunst des Rückzugs“ hielt HLRS-Direktor Michael Resch einen Hauptvortrag mit dem Titel „Rückzug in die totale Öffentlichkeit – Das Paradox des digitalen Biedermeier“. Er verglich das klassische Biedermeier des 19. Jahrhunderts, geprägt von einem Rückzug ins Private, mit heutigen Trends, bei denen wir mit digitalen Medien

oft Details aus unserem Privatleben veröffentlichen. Der Vortrag bestimmte den Ton des dreiwöchigen Festivals, das sich über Kunstprojekte und Veranstaltungen im Großraum Stuttgart mit den Auswirkungen von digitaler Überwachung, Datenunsicherheit und sozialen Medien sowie Strategien und Räumen zur Flucht vor ständiger Beobachtung beschäftigte. (CW)

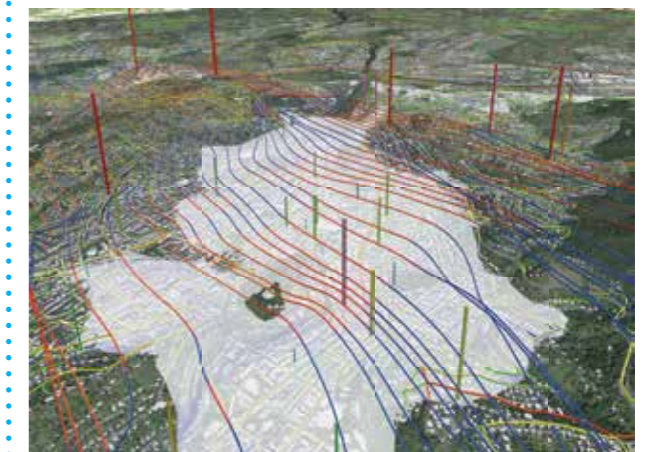


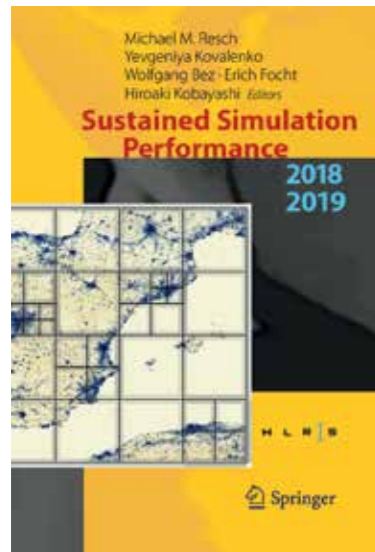
### Hochauflösende Modelle der Luftqualität

Als Mitglieder des Projekts Open Forecast haben HLRS-Forscher ein hochauflösendes Tool zur Visualisierung von Vorhersagen der Luftqualität für die Stadt Stuttgart erstellt. Das Modell, das von Forschern der Universität Hohenheim entwickelt wurde und auf dem Supercomputer des HLRS läuft, kombiniert das Weather Research and Forecasting Model zur Wettervorhersage und Klimamodellierung mit Berechnungen der Atmosphärenchemie, um aktuelle und zukünftige Konzentrationen von Feinstaub, Stickstoffdioxid und anderen Schadstoffen zu modellieren. Die Visualisierungsexperten des HLRS setzten die Simulationen in eine interaktive 3D-Projektion um, die Geodaten und Gebäudeinformationen integriert. Das Modell simuliert den 24-Stunden-Zyklus in Stuttgart mit einer Auflösung von nur 50 Metern und berücksichtigt dabei auch die komplexe Geographie der Stadt. Open Forecast soll große, öffentlich verfügbare Datensätze verständlicher und für die Entscheidungsfindung von Politikern, Regierungsmitarbeitern und der allgemeinen Öffentlichkeit nutzbar machen. (EG)

### HLRS-Läufer unterstützen Kinderhospiz

Am 25. Juli nahm das HLRS zum zweiten Mal am „Hand in Hand“-Spendenlauf zugunsten des Kinder- und Jugendhospiz Stuttgart teil. Aufgrund der COVID-19-Pandemie fand die Veranstaltung virtuell statt: 43 HLRS-Mitarbeiter und ihre Familienangehörigen protokollierten die zurückgelegten Strecken an verschiedenen Stellen mit einer mobilen App. Das HLRS-Team High-Performance Runners sammelte etwa 1.500 Euro, indem es insgesamt 580 Kilometer (entspricht 1.452 Runden) lief. Damit wurden die 860 Runden aus dem Vorjahr fast verdoppelt. Der Supercomputer-Hersteller Hewlett Packard Enterprise sponserte das Team, der Spendenbetrag fließt in Einrichtungen und Programme zur Unterstützung schwer kranker Kinder und ihrer Familien. (CW)





### Buchveröffentlichung: Sustained Simulation Performance 2018 and 2019

Dieses Buch präsentiert den Stand der Technik im High-Performance-Computing (HPC) auf modernen Supercomputer-Architekturen. Es behandelt Trends in der Hardware- und Software-Entwicklung sowie die Zukunft von HPC-Systemen und heterogenen Architekturen. Die Beiträge decken ein breites Spektrum an Themen ab, von verbessertem Systemmanagement über Computational Fluid Dynamics bis hin zu High-Performance Datenanalyse und neuartigen mathematischen Ansätzen für Großsysteme. Darüber hinaus erforschen die Artikel innovative Bereiche wie gekoppelte Multiphysik und Multiskalensimulationen. Die Beiträge basieren auf ausgewählten Vorträgen, die auf den 26. und 28. Workshops on Sustained Simulation Performance (HLRS), sowie auf den 27. und 29. Workshops on Sustained Simulation Performance (Cyberscience Center der Tohoku University, Japan), gehalten wurden. *(CW)*

### HLRS-Teilnahme an ISC- und SC-Online-Konferenzen 2020

Das HLRS nimmt regelmäßig an der jährlichen ISC High Performance (ISC) und der International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC) teil. Aufgrund der COVID-19-Pandemie fanden 2020 beide Konferenzen online statt. Das HLRS erstellte virtuelle Stände und hielt Vorträge mit Updates zu mehreren laufenden Forschungsprojekten. Auf der ISC gingen die Vorträge vor allem um

die Projekte SODALITE, HIDALGO und TalPas. Auf der SC lieferten HLRS-Vertreter und -Mitarbeiter aktuelle Infos zu den Projekten EuroHPC, CATALYST, SODALITE, HIDALGO, FF4EuroHPC, HPCWE und EXCELLERAT sowie zu neuen Smart-City-Ansätzen mit digitalen urbanen Zwillingen. Insgesamt boten die Präsentationen verschiedenste Einblicke in die HLRS-Forschung zur Entwicklung technischer Lösungen, Bewältigung globaler Herausforderungen und europaweiter HPC-Förderung. *(CW)*

### Der vierte Industrial HPC User Round Table (iHURT) als Online Event

SICOS BW und das HLRS veranstalteten ein Forum, das Anwendern von HPC aus der Industrie die Gelegenheit zum Austausch über ihre Herausforderungen bietet. Dietmar Kruse von der Porsche AG ging in seiner Keynote auf Themen in der Zusammenarbeit zwischen verschiedenen Softwarearchitekturen (firmenintern vs. HLRS) sowie den Umgang mit großen Datenmengen ein. In einem Virtual Round Table tauschten sich die Teilnehmer zu Themen wie Datenmanagement und Remote-Postprocessing, sowie Lizenzen, Cloud und Softwareherstellern z.B. hinsichtlich der Kompatibilität bei MPI aus. Dr. Thomas Bönisch vom HLRS berichtete von den neuesten Entwicklungen in der HPC-Technologie, während Dr. Andreas Wierse und Nicole Prange von SICOS BW



das Schulungsangebot der Supercomputing-Akademie für die Industrie vorstellten. Abschließend gab Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS, einen Ausblick, welchen Nutzen das Zusammenspiel von HPC und KI für den industriellen Einsatz haben wird. *(CW)*



### Schulungskurs behandelt grundlegende Probleme beim Technologietransfer

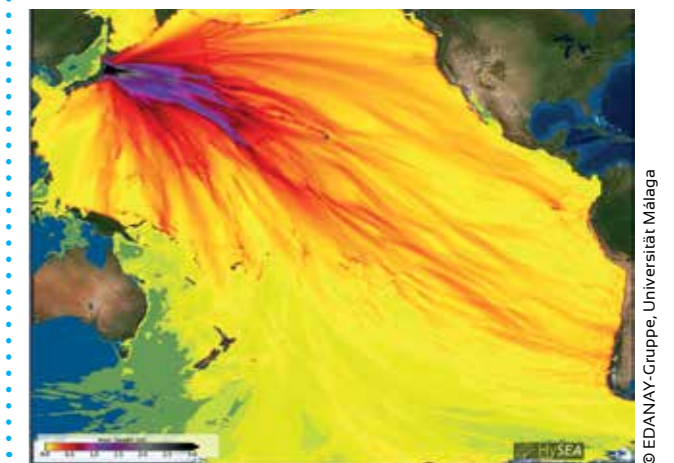
Dieser zweitägige Kurs, der vom HLRS in Zusammenarbeit mit dem Eurolab4HPC-Programm organisiert wurde, vermittelte Wissenschaftlern ein grundlegendes Verständnis des unternehmerischen Prozesses, der Strategien zur Generierung von Geschäftsmodellen und der Management-Herausforderungen im Zuge des Technologietransfers. Die Dozenten konzentrierten sich auf typische Schwierigkeiten bei der Gründung und dem Management akademischer Unternehmungen und analysierten das Umfeld des akademischen Unternehmertums und erläuterten mögliche Chancen und wie man diese nutzen kann. Sie gingen auch auf analytische und administrative Bereiche des Technologietransfers sowie auf das Managementverhalten ein. So verband der Kurs theoretische Erkenntnisse zum Unternehmertum mit praktischen Überlegungen zur Präsentation von Technologien und Geschäftsideen. *(CW)*

### Ethik und Künstliche Intelligenz vereint

Die AI Ethics Impact Group (AIEIG) schlug das erste System zur Messung und Umsetzung europäischer ethischer Prinzipien bei der Entwicklung und Nutzung von KI-Algorithmen vor. Ähnlich wie das Energieeffizienzlabel könnte ein KI-Ethik-Label verwendet werden, um zu beurteilen, wie gut KI-Tools gemeinsame Werte wie Transparenz, soziale Gerechtigkeit und ökologische Nachhaltigkeit berücksichtigen. Er legt Messgrößen

### ChEERE-Prototyp für Simulations-Workflows in den Geowissenschaften

Im Zuge eines internationalen Projekts namens ChEERE entwickelt das HLRS Tools und Workflows zur Vorhersage der Auswirkungen von Katastrophen wie Erdbeben, Tsunamis und Vulkanausbrüchen. Modelle potenzieller Risiken könnten gefährdete Städte und Regionen aufdecken und Verantwortlichen helfen, schneller auf Katastrophen zu reagieren. Da solche Modelle riesige Datenmengen verarbeiten müssen, stellte das HLRS dieses Jahr einen Prototyp vor, mit dem Geowissenschaftler wissenschaftliche Workflows integrieren und Daten zwischen verschiedenen Rechnerplattformen verschieben können. So können etwa Aufgaben koordiniert und ausgeführt werden, die auf eigene Workstations, Cluster der Einrichtung und Supercomputer verteilt sind. Im Rahmen von ChEERE optimiert das HLRS auch Codes für geowissenschaftliche Software und entwickelt Visualisierungstools, die Entscheidungsträger für die Katastrophenplanung nutzen können. *(CW)*



© EDANAY-Gruppe, Universität Málaga

zur Bestimmung fest, inwiefern solche Werte erfüllt werden, und bewertet Risiken, zu denen ein KI-Algorithmus führen könnte. Das Label soll flexibel sein und die Belange von Herstellern von KI-Systemen, Verbrauchern, Regulierungsbehörden und anderen einbeziehen. Das AIEIG wurde vom VDE mit Unterstützung der Bertelsmann Stiftung initiiert. Dr. Andreas Kaminski, Leiter des HLRS-Fachbereichs Philosophie, war ein führendes Mitglied der Gruppe. *(CW)*

# Neuer Supercomputer Hawk im Einsatz

**Das HLRS hat einen neuen Supercomputer erhalten, der weitere Chancen für die computergestützte Forschung eröffnet.**

Am 19. Februar 2020 wurde am HLRS der Supercomputer Hawk offiziell eingeweiht. Die Inbetriebnahme läutete für die Universität Stuttgart und das Land Baden-Württemberg eine neue Epoche für Forschung in den computergestützten Wissenschaften, der Simulation und der Künstlichen Intelligenz (KI), insbesondere im Hinblick auf die Ingenieurwissenschaften ein.

Hawk, ein Apollo System von Hewlett Packard Enterprise (HPE) mit einer Spitzenleistung von rund 26 Petaflops, ersetzte mit einer 3,5-fachen Geschwindigkeit den bisherigen Flaggschiff-Rechner Hazel Hen am HLRS. In Testergebnissen von November erreichte Hawk eine maximale Linpack-Leistung von 19,3 Petaflops und debütierte damit auf Rang 16 der TOP500-Liste der schnellsten HPC-Systeme der Welt. Die Mittel für Hawk wurden zur Hälfte vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg bereitgestellt. Die zweite Hälfte steuerte das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) durch das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) bei. Hawk ist Teil der nationalen Supercomputing-Infrastruktur des GCS.

Hawk wurde im Februar im Beisein hochrangiger politischer Vertreter eingeweiht, darunter der baden-württembergische Ministerpräsident Winfried Kretschmann, Dr. Michael Meister, der Parlamentarische Staatssekretär bei der Bundesministerin für Bildung und Forschung, sowie die Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst in Baden-Württemberg, Theresia Bauer.

Zudem nahmen an der Einweihungsveranstaltung teil: Dr. Wolfram Ressel, Rektor der Universität Stuttgart,

HPE Chief Sales Officer Heiko Meyer, AMD Corporate Vice-President EMEA Sales Mario Silveira, SSC-Services Direktor Matthias Stroezel, HLRS-Direktor Prof. Dr. Michael Resch und Prof. Mark Parsons, Direktor des Edinburgh Parallel Computing Centre.

## Neues Werkzeug für Spitzenforschung und Technik

Die Sprecher betonten während der Veranstaltung das Potenzial, das Hawk für die Forschung in Wissenschaft und Industrie bietet. „Mit dem Supercomputer wird die schon heute exzellente Forschungsinfrastruktur an der Universität Stuttgart um ein weiteres Flaggschiff ergänzt. Hawk ermöglicht akademische und industrielle Spitzenforschung überall dort, wo Simulationen und Big Data eine wichtige Rolle spielen. Damit leistet der neue Höchstleistungsrechner einen wichtigen Beitrag zur Umsetzung der Vision ‚Intelligente Systeme für eine zukunftsfähige Gesellschaft‘ der Universität Stuttgart“, sagte Dr. Ressel in seiner Eröffnungsrede. In einer Pressemitteilung erklärte Staatssekretär Meister: „Computer wie Hawk sind Werkzeuge der Spitzenforschung in Wissenschaft und Wirtschaft. Sie ermöglichen exzellente Wissenschaft und Innovationen und sichern Deutschlands vorderen Rang im internationalen Wettbewerb als ein Top-Standort des Supercomputings. Höchstleistungsrechner sind ein wichtiger Beitrag zur Technologiesouveränität im digitalen Zeitalter. Technologiesouveränität heißt für uns, eigene System- und Anwendungskompetenzen in Wissenschaft und Wirtschaft auf höchstem Niveau

zu entwickeln. Nur so können wir einen wechselseitigen Austausch mit den führenden Forschungseinrichtungen und Unternehmen weltweit gewährleisten. Der Hawk in Stuttgart zeigt dies sehr deutlich.“

Ministerpräsident Kretschmann ergänzte: „Mit ‚Hawk‘ können wir in Schlüsselbranchen unseres Landes, in der Mobilität, im Maschinenbau sowie in der Gesundheitsbranche in neue Simulations-Welten vorstoßen. Einer der schnellsten Rechner einer öffentlichen Einrichtung weltweit, der auch der Industrie zur Nutzung

offensteht, ist eine kluge Investition in die Zukunft unseres Wissenschafts- und Wirtschaftsstandorts. Ein großes Potential liegt darüber hinaus in der Klimasimulation. Nicht nur für Baden-Württemberg ist die Arbeit am HLRS von enormer Bedeutung: ‚Hawk‘ stärkt sowohl den bundesweiten Superrechner-Zusammenchluss als auch Europa.“

Ministerin Bauer fügte dieser Aussage hinzu: „So schnell, wie sich die Spitzenleistungen der Supercomputer erhöhen, so entscheidend sind sie sowohl für



Hawk debütierte auf Platz 16 der Top500-Liste der schnellsten Supercomputer der Welt und erhält bald neue Fähigkeiten für KI und Maschinelles Lernen.



Spitzenforschung als auch für innovative Produkte und Prozesse in den Schlüsselbereichen der Wirtschaft. Baden-Württemberg ist in Sachen Supercomputing europaweit führend und international konkurrenzfähig. Dem HLRS als Teil der Universität Stuttgart kommt hierbei eine Schlüsselrolle zu. Und es ist dabei nicht nur die beeindruckende Rechenleistung des Superrechners, sondern auch das geballte Methodenwissen vor Ort, das unserer computergestützten Spitzenforschung zu atemberaubenden Forschungsergebnissen verhilft.“

Die Inbetriebnahme von Hawk markiert auch den Beginn einer neuen Kooperation zwischen HLRS und HPE, um gemeinsam die Zukunftstechnologien für das Supercomputing zu entwickeln. Dazu zählen die Entwicklung neuer Software und Tools für das Höchstleistungsrechnen, die Leistungsoptimierung sowie KI-Anwendungen, die zur Vorbereitung der nächsten Leistungsstufe der Supercomputer, sogenannter Exascale-Rechner, dienen.

„HPE und das HLRS sind ein Traumteam“, sagte Heiko Meyer während der Einweihung. „Daher möch-

ten wir eine langfristige Partnerschaft mit dem HLRS aufbauen, in der wir Anwendungen optimieren, Zukunftstechnologien ausprobieren und diese bis zur Marktfähigkeit entwickeln.“

Hawk basiert auf EPYC Rome 7742 Prozessoren von Advanced Micro Devices (AMD). Mario Silveira, AMD Corporate Vice-President EMEA Sales, sprach über die Chancen, die die Partnerschaft mit HPE und dem HLRS dem Unternehmen in der Verbesserung von Effizienz und Leistung sowie der Nachhaltigkeitsgewinne bietet: „Wir sind stolz darauf, die Vision zu teilen, Supercomputer zur Lösung globaler Herausforderungen einzusetzen, und ein Teil von Hawk zu sein.“

#### **Ausbau von Hawk kombiniert Simulation und Künstliche Intelligenz**

Als Hawk im Februar installiert wurde, basierte das System ausschließlich auf zentralen Prozessoreinheiten, sogenannten CPUs, da diese die optimale Architektur für viele Codes aus der Numerischen Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, CFD), der



Molekulardynamik, der Klimamodellierung und anderen Forschungsbereichen bieten, in denen die HLRS-Nutzer sehr aktiv sind. In den vergangenen Jahren haben Wissenschaftler jedoch damit begonnen, auszutesten, wie Deep Learning, Hochleistungs-Datenanalyse und KI diese Art von Forschung beschleunigen und vereinfachen könnte. An dieser Stelle kommen Grafikprozessoren (GPUs) als Beschleuniger zum Einsatz.

Im Dezember hat das HLRS verkündet, dass Hawk aufgrund dieser wichtigen Entwicklung angepasst wird. Nach der Vertragsunterzeichnung mit HPE wird das HLRS seinen CPU-basierten Supercomputer um 24 HPE Apollo 6500 Gen10 Plus Systeme mit 192 NVIDIA A100 GPUs, die auf der NVIDIA Ampere-Architektur basieren, ausbauen.

Die Erweiterung um 120 Petaflops an KI-Rechenleistung wird es HLRS-Nutzern ermöglichen, Anwendungen aus dem Bereich des Deep-Learning, der Hochleistungsdatenanalyse und der KI durchzuführen, und ermöglicht hybride Rechenabläufe, die Simulation mit Big-Data-Ansätzen kombinieren.

Durch den Ausbau stehen den HLRS-Nutzern nun dreimal so viele NVIDIA-Prozessoren zur Verfügung wie in Cray CS-Storm, der am HLRS für KI-Anwendungen genutzt wird. Somit wird die Gesamtrechenleistung für KI-Aufgaben deutlich erweitert, was die Durchführung signifikant größerer Deep-Learning-Projekte ermöglicht. „Unsere Mission am HLRS war es schon immer, sich optimal an den Bedürfnissen unserer Nutzer auszurichten“, sagte Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Viele Jahre lang hat das bedeutet, dass unser Flaggschiff-Rechner auf CPUs aufgebaut sein muss. In letzter Zeit beobachten wir ein stetig wachsendes Interesse an Deep Learning und Künstlicher Intelligenz. Indem wir Grafikprozessoren der Architektur von Hawk hinzufügen, können wir Forschern aus Wissenschaft und Industrie bestmöglich dienen, die an vorderster Forschungsfront arbeiten.“

Zum Ende von 2020 freuten sich das HLRS und dessen Nutzer aus Forschung und Wirtschaft auf die Entdeckungen und Innovationen, die Hawk in den kommenden Jahren ermöglichen wird.

(CW)

# Neues HPC-Kompetenznetzwerk für Europa

## Das HLRS koordiniert in drei neuen Projekten ein bahnbrechendes, EU-weites Vorhaben für mehr HPC-Kompetenz, internationale Zusammenarbeit und industrielle Nutzung in ganz Europa.

Der Start des EuroHPC Joint Undertaking im Jahr 2018 war der Beginn eines neuen, europaweiten HPC-Ansatzes. Um eine engere Koordination auf Ebene der Infrastruktur und der Ressourcenverteilung, der Technologieentwicklung und der Erstellung moderner Software zu ermöglichen, will EuroHPC ein nachhaltiges und weltweit wettbewerbsfähiges europäisches HPC-Ökosystem aufbauen.

Bei der Einrichtung des EuroHPC zeigte sich jedoch, dass ein wesentlicher Bestandteil einer umfassenden europäischen HPC-Strategie fehlte, nämlich eine in ganz Europa einheitliche Expertise im Bereich HPC und in verwandten Disziplinen wie Hochleistungs-Datenanalyse und Künstlicher Intelligenz (KI). 2020 vergab das EuroHPC unter der Schirmherrschaft des EU-Programms Horizon 2020 drei Zuschüsse, um diesen Bedarf zu decken.

Das HLRS und seine Dachorganisation, das Gauss Centre for Supercomputing, stehen im Zentrum dieser Bemühungen und leiten die Etablierung eines europaweiten Netzwerks für mehr HPC-Kompetenz. Die drei Projekte – EuroCC, CASTIEL und FF4EuroHPC – starteten am 1. September 2020 und werden sich in den kommenden Jahren mit verschiedenen Ansätzen koordiniert diesem Ziel widmen.

Laut HLRS-Geschäftsführer und Projektleiter Dr. Bastian Koller „ist das HLRS begeistert, die Koordination eines Projekts mit enormem Potenzial für mehr Fachwissen und Kooperation innerhalb der gesamten europäischen HPC-Gemeinde zu leiten. Dies wird die wissenschaftliche Kompetenz Europas und seine globale industrielle Wettbewerbsfähigkeit steigern.“

### EuroCC: Aufbau eines europäischen HPC-Kompetenznetzwerks

Im Zentrum dieser vielfältigen Bemühungen steht EuroCC, das bereits mit dem Aufbau eines europaweiten Netzwerks nationaler HPC-Kompetenzzentren begonnen hat.

Als das Projekt Gestalt annahm, benannten 33 teilnehmende Mitgliedsstaaten je ein HPC-Zentrum als nationales Kompetenzzentrum. Etwa die Hälfte der Fördermittel zur Schaffung der Kompetenzzentren stammt von der EU, die andere Hälfte vom jeweiligen Land.

Jedes Kompetenzzentrum prüft die HPC-Expertise auf nationaler Ebene und deckt dabei landesweit die vorhandenen Kenntnisse und Wissenslücken auf. Im Laufe der Zeit werden die Kompetenzzentren zu nationalen Ressourcen für die Identifizierung und Koordinierung von technischem Wissen, Schulungsmitteln, Industriekooperation sowie HPC-Diensten und -Tools in den jeweiligen Ländern.

### CASTIEL: Förderung der grenzüberschreitenden Zusammenarbeit

Gleichzeitig leitet das HLRS ein zugehöriges Koordinations- und Unterstützungsprojekt namens CASTIEL (Coordination and Support for National Competence Centres on a European Level). Während EuroCC die HPC-Expertise in den einzelnen Mitgliedsstaaten koordiniert, fördert CASTIEL die Interaktion und den Austausch von Fachwissen innerhalb des EuroCC-Netzwerks. CASTIEL wird eine Europakarte der Kompetenzen erstellen, die Ressourcen und

Wissenslücken über alle EuroCC-Kompetenzzentren hinweg katalogisiert. Es wird dann Aktivitäten wie internationale Workshops, Mentoring- und Twinning-Partnerschaften und themenorientierte Arbeitsgruppen koordinieren, um gemeinsame Anliegen zu bearbeiten. Diese sollen den europaweiten Wissensaustausch und neue Synergieeffekte, eventuell auch neue regionale Kooperationen fördern.

CASTIEL wird auch den Bedarf an HPC-Fachwissen für die industriellen Forschung und Entwicklung adressieren. Dies könnte Mentoring durch Zentren mit Erfahrung in der Unterstützung der Industrie umfassen, aber auch internationale Treffen, bei denen HPC-Nutzer aus der Industrie Fallstudien erfolgreicher Anwendungen vorstellen.

### FF4EuroHPC: mehr HPC-Zugang für kleinere und mittlere Unternehmen

Die dritte Säule dieses europaweiten Projekts ist der Fokus auf die Bedürfnisse der kleinen und mittleren Unternehmen (KMU), die essenziell für die europäische Wirtschaft sind. Ein Konsortium namens FF4EuroHPC, ebenfalls vom HLRS koordiniert, spricht solche Unternehmen gezielt an und erleichtert ihnen im Sinne der Wettbewerbsfähigkeit den Zugang zu HPC-Technologien und -Lösungen.

Das Team, das FF4EuroHPC leitet, umfasst mehrere Zentren, die auch an den EU-geförderten Projekten Fortissimo und Fortissimo 2 beteiligt waren, die zwischen 2013 und 2020 mit den KMUs 92 neue Anwendungen testeten. FF4EuroHPC vertieft das bei Fortissimo gewonnene Wissen, um europaweit neue HPC-Anwendungen in der Industrie aufzudecken und zu testen.

FF4EuroHPC organisiert zwei offene Aufrufe zur Einreichung von Vorschlägen von KMU, die überzeugende Fälle für die Nutzung von HPC-Technologien und -Fachwissen aufzeigen können. Mögliche

Anwendungsbereiche sind Fertigung, Maschinenbau und andere innovative Wachstumsbranchen. Vorschläge können z.B. traditionelle HPC-Anwendungen zur Simulation und Modellierung sein, oder neue Anwendungen, die Datenanalyse, maschinelles Lernen und KI beinhalten.

FF4EuroHPC erwartet, dass etwa 40 KMU – allesamt HPC-Erstnutzer – „Anwendungsexperimente“ durchführen werden, von denen viele mit nationalen Kompetenzzentren im EuroCC-Netzwerk zusammengebracht oder von diesen unterstützt werden. Dieser Ansatz soll die Nutzung in der Industrie von KMU in Regionen fördern, in denen sie bisher nicht sehr verbreitet ist.

### HLRS im Zentrum der europäischen HPC-Strategie

Im Verlauf solcher Projekte werden diese Experimente zu einem Portfolio von Erfolgsgeschichten führen, die das Innovationspotenzial von HPC aufzeigen. Koller rechnet damit, dass dies sowohl das Interesse anderer KMU weckt, die von HPC profitieren könnten, als auch die Unterstützung von Regierungen und anderen Interessengruppen für die Entwicklung und Bereitstellung nützlicher HPC-Ressourcen und -Dienste fördert.

„Die Ziele von EuroCC, CASTIEL und FF4EuroHPC ergänzen einander“, sagt Koller. „Einerseits hoffen wir, dass die Länder durch ihre Teilnahme das Know-how entwickeln können, das sie für eine größere technologische Unabhängigkeit brauchen, andererseits werden auch bereits versierte Länder aus dieser internationalen Interaktion lernen. Mehr Wissen und bessere Kommunikation über Grenzen hinweg birgt großes Potenzial für mehr Produktivität und Einfluss von HPC in ganz Europa im Sinne der akademischen Forschung, der Industrie und der öffentlichen Verwaltung.“ (CW)



# Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Katalyseforschung

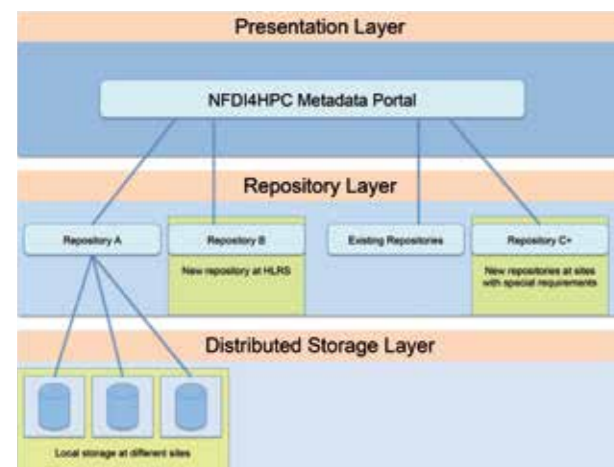
Das HLRS wird zur Basis der fachgebietsübergreifenden rechnergestützten Forschung in der Chemie und im Chemietechnik beitragen.

Die Katalyseforschung stützt sich, wie viele wissenschaftliche Bereiche, zunehmend auf rechnergestützte Methoden, die einen ständigen Austausch zwischen Theorie, Simulation und Experiment ermöglichen. Um die Entwicklung dieses Bereichs zu fördern, erhielt ein Konsortium, dem auch das HLRS angehört, von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) eine Förderung von über 10 Millionen Euro für den Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur für katalysebezogene Wissenschaften (NFDI4Cat). Das Konsortium unter der Leitung der gemeinnützigen DECHEMA (Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.) und unter Beteiligung von Vertretern aus 15 weiteren Partnereinrichtungen wird Infrastruktur, Software und Datenverwaltungs-Standards entwickeln, um die nächste Generation der chemisch-technischen Forschung zu ermöglichen.

NFDI4Cat ist eines von neun neuen Konsortien, die zum Aufbau einer deutschen nationalen Forschungsdateninfrastruktur beitragen werden.

Als eines von vier Mitgliedern der NFDI4Cat-Koordinationsgruppe wird das HLRS ein Daten-Repository für die katalysebezogene Forschung erstellen und hosten, einschließlich eines Portals für den Zugriff und die gemeinsame Nutzung von Daten, die an verschiedenen Orten gespeichert sind. Darüber hinaus wird das HLRS eine wichtige Rolle dabei spielen, standardisierte Metadaten und Ontologien für die Katalyseforschung zu etablieren, wodurch die Kompatibilität unterschiedlicher Datensätze sichergestellt, deren Verwendbarkeit verbessert und ihre potenziellen Auswirkungen auf den wissenschaftlichen Fortschritt verstärkt werden soll.

„Wir freuen uns sehr, dass sich das HLRS am Aufbau einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur beteiligen wird“, sagt HLRS-Direktor Prof. Michael Resch. „In Zusammenarbeit mit den Partnern in der Katalyseforschung-Community sollte dieses Projekt hervorragende Möglichkeiten bieten, die Forschung in einem Bereich voranzutreiben, der nicht nur wirtschaftlich wichtig ist, sondern auch den Schlüssel zur Bewältigung einiger unserer größten globalen Herausforderungen enthält.“ (CW)



Eine schematische Darstellung der vorgeschlagenen NFDI4Cat-Dateninfrastruktur.

# Vertrauen und Information

Die HLRS-Abteilung für Wissenschaft und Technikphilosophie wird dazu beitragen, Perspektiven zu entwickeln, welche die Vertrauenswürdigkeit von Computational Science beurteilen und die Verbreitung von Fehlinformationen einschränken.

Wissenschaftliches Rechnen ist wichtiger denn je. Entsprechend wächst die Sorge darüber, wie personenbezogene Daten und Künstliche Intelligenz (KI) ausgenutzt und missbraucht werden können, oder über die zersetzende Wirkung von Desinformationskampagnen in den sozialen Medien. Wie können Wissenschaftler etwa sicherstellen, dass die von ihnen entwickelten Modelle zuverlässig und eine Grundlage für öffentliche Entscheidungen sind? Und wie können Menschen, die auf digitale Informationen zugreifen, besser zwischen vertrauenswürdigen Informationen und irreführender Propaganda unterscheiden?

Ein neues, auf drei Jahre angelegtes HLRS-Projekt beschäftigt sich mit solchen Fragen. Finanziell vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert, wird ein Team der Abteilung Wissenschafts- und Technikphilosophie der Computersimulation unter der Leitung von Dr. Andreas Kaminski Philosophen, Sozialwissenschaftler, Technologen und andere Experten

zusammenbringen, um Vertrauen im IT-Kontext zu untersuchen. Das Projekt wird Erkenntnisse für mehr Vertrauenswürdigkeit in der rechnergestützten Forschung, für die Entwicklung von KI-basierten Ansätzen zur Beurteilung der Zuverlässigkeit von Informationen und für die Bekämpfung von Täuschungen in digitalen Medien liefern.

Es wird davon ausgegangen, dass mehr Vertrauenswürdigkeit digitaler Informationen nicht nur eine technische Herausforderung ist, sondern auch umfasst, wie Menschen Informationen wahrnehmen und wie Vertrauen zwischen Individuen und in Gemeinschaften aufgebaut wird. Kaminski und seine Teammitglieder werden daher multidisziplinäre Sichtweisen einbeziehen und Experten aus den Bereichen Psychologie, Soziologie, Politikwissenschaft, Wirtschaft, Pädagogik und Geschichte zusammenbringen. Durch gemeinsame Forschung werden sie eine theoretische Basis für mehr Vertrauenswürdigkeit bei Simulations- und KI-Technologien entwickeln. (CW)



Eines dieser Gesichter ist echt und das andere wurde durch KI erstellt. Welches ist welches? Anwendungen wie diese verdeutlichen Probleme bei der Vertrauenswürdigkeit digitaler Informationen.

(Quelle: Whichfaceisreal.com Verwendung genehmigt.)

# Virtual-Reality-Umgebungen für das Home Office

Eine vom HLRS und dem KoLaB Projekt entwickelte Software ermöglicht Interaktion und Kooperation in virtuellen 3D-Räumen.

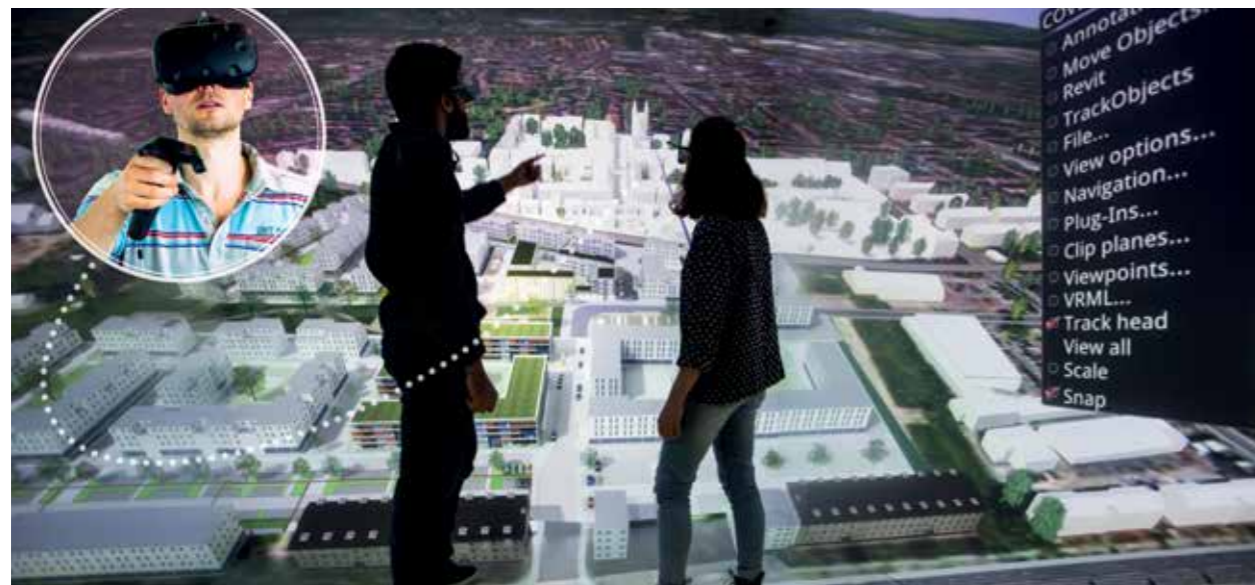
Simulationsergebnisse von Supercomputern oder Konstruktionsdaten aus CAD-Systemen werden normalerweise in einer CAVE visualisiert und analysiert. Die aufgrund der Corona-Pandemie erforderlichen Abstandsregeln können Mitarbeitende dort jedoch nicht einhalten. Visualisierungsexperten des HLRS und fünf baden-württembergischer Universitäten haben im Projekt „Virtuelle Kollaborationslabore Baden-Württemberg“ (KoLab-BW) eine neue Softwareplattform entwickelt. Diese ermöglicht die Zusammenarbeit von räumlich getrennt voneinander arbeitenden Personen in einer gemeinsamen virtuellen Umgebung (Virtual bzw. Augmented Reality, VR/AR).

Teammitglieder aus Wissenschaft, Forschung, Entwicklung und Anwendung treffen sich mithilfe der im Projekt KoLab-BW entwickelten VR-Software sowie kostengünstiger, kommerziell verfügbarer VR-Brillen und Controllern in einem virtuellen Meeting-Raum. Repräsentiert durch Avatare können die Teams in diesem

virtuellen Raum gemeinsam 3D-Modelle betrachten oder bearbeiten – direkt an ihrem Arbeitsplatz oder sogar im Homeoffice.

Insbesondere in Situationen, in denen spontane persönliche Treffen nicht möglich sind – etwa bei Mitarbeitenden an verteilten Standorten oder aufgrund der Abstandsregeln während der Corona-Pandemie – unterstützt die Technologie die Zusammenarbeit und erleichtert maßgeblich bestimmte Arbeitsprozesse. Auch nach dem Ende der Pandemie kann die Plattform weiter dazu beitragen, die Forschungsarbeit zu beschleunigen oder die Einführungszeit neuer Produkte am Markt deutlich zu verkürzen.

Im Herbst 2020 nutzten die Mitglieder des Visualisierungs-Teams am HLRS die Software auch für einen Kurs an der Technischen Universität Wien. Die Studierenden in Wien konnten dabei in einem virtuellen Vorlesungsraum mit den durch Avatare dargestellten Dozenten in Stuttgart interagieren. (CW)



Gemeinsames Arbeiten in einem virtuellen Raum.

© HLRS/Fabian Dembski

# HLRS und Fraunhofer IPA beginnen Kooperation

Ziel der Partnerschaft ist die Erforschung von Anwendungen für Höchstleistungsrechnen (High-Performance Computing, HPC), High-Performance Data Analytics (HPDA), maschinelles Lernen und Quantencomputing für die industrielle Produktion.



© Fraunhofer

Bei der Vertragsunterzeichnung im November 2020.

Das HLRS und das Fraunhofer-Institut für Produktionstechnik und Automatisierung (Fraunhofer IPA) sind bereits seit einiger Zeit Nachbarn in der Stuttgarter Nobelstraße. Die beiden Organisationen werden noch enger zusammenwachsen, da das Fraunhofer dank einer Kooperationsvereinbarung Zugang zu HPC-Systemen und -Know-how des HLRS erhält. Die Partner werden bei Themen von gemeinsamem Interesse, wie beispielsweise Anwendungen von HPC in der Industrie, zusammenarbeiten.

Das Fraunhofer IPA forscht zu organisatorischen und technologischen Themen der industriellen Produktion. Dazu zählen neue Technologien zur Verbesserung von Methoden, Komponenten, Maschinen und Produktionslinien für die Fertigung. Dank der Verfügbarkeit großer Datensätze und leistungsfähiger Tools für Simulation und Künstliche Intelligenz (KI) kann das HLRS unter Einsatz fortschrittlicher Computertechnologien

die Entwicklung von Produktionstechnologien vorantreiben. Damit lässt sich die industrielle Produktion effizienter und nachhaltiger gestalten.

Die Kooperation fokussiert sich auf HPC-Anwendungen, die für die Forschung am Fraunhofer zunehmend an Bedeutung gewonnen haben, wie zum Beispiel Analysen von großen Datensätzen, mithilfe derer sich Fertigungsprozesse verbessern lassen, oder der Einsatz von HPC zur Überprüfung der Genauigkeit von Anwendungen für Maschinelles Lernen in der Kollaboration zwischen Mensch und Roboter. Gemeinsam planen das HLRS und Fraunhofer die weitere und effizientere Erschließung des Quantencomputing.

Die Partnerschaft eröffnet dem HLRS einige Möglichkeiten: „Zusammen können wir Lösungen entwickeln, die HPC, HPDA und KI so miteinander verbinden, dass sie unsere Nutzer bestmöglich unterstützen“, sagt Dr. Bastian Koller, Geschäftsführer des HLRS. (CW)



# Flexiblere Robotik durch Künstliche Intelligenz: Ein Interview mit Marco Huber

**Forschung, die Simulation und KI kombiniert, könnte die Entwicklung von maßgeschneiderten automatisierten Fertigungssystemen beschleunigen.**

Weil sich Anwendungen, die auf Maschinellern Lernen oder Künstlicher Intelligenz basieren, immer mehr verbreiten, können neue Arten von Produktionssystemen entstehen. Als Professor für Kognitive Produktionssysteme in der Maschinenbauakademie der Universität Stuttgart und Leiter des Zentrums für Cyber Cognitive Intelligence am Fraunhofer IPA in Stuttgart untersucht Prof. Marco Huber innovative Ansätze mit Maschinellern Lernen, die diese Systeme flexibler machen können. Hubers Doppelrolle bietet optimale Bedingungen für einen produktiven Austausch zwischen Forschung und Industrie. Als Professor an der Uni erforscht er hochaktuelle Themen nicht nur aus einer rein theoretischen Perspektive, sondern auch hinsichtlich praktischer Anforderungen aus dem Produktionsumfeld. Am Fraunhofer IPA unterstützt er Unternehmen bei der Nutzung neuester Methoden der Künstlichen Intelligenz in der Produktion. „Da geht es weniger darum, neue Methoden zu entwickeln“, erklärt Huber, „sondern eher darum, die schon in der Grundlagenforschung existierenden Methoden aufzugreifen und in die Anwendungen einzubringen, um die Problemstellungen, die ein Unternehmen hat, angehen zu können.“

In November 2020 unterzeichneten das Fraunhofer IPA und das HLRS einen Kooperationsvertrag, wodurch Huber und seinen KollegInnen Zugriff auf die Rechenressourcen für Höchstleistungsrechnen (High-Performance Computing/HPC) und Simulation des HLRS bekommen. Beide Organisationen werden auch Themen erforschen, an denen sie gleichermaßen Interesse haben: Quantencomputing und Künstliche Intelligenz.

In diesem Interview erläutert Prof. Huber, wie diese Partnerschaft zustande kam und wie die Rechenressourcen des HLRS die Fähigkeiten des Fraunhofer IPA ergänzen.

**? Professor Huber, welche neuen Möglichkeiten bietet die Künstliche Intelligenz für die Robotik?**

▶ In der Industrie programmieren heutzutage noch immer primär Experten Roboter. Davon wollen wir wegkommen. Das soll kein Prozess sein, den nur Experten vornehmen können, sondern jeder sollte in der Lage sein, einen Roboter zu programmieren.

Anstatt den Roboter explizit zu programmieren, formulieren wir die Aufgabe, die es zu lösen gilt – zum Beispiel: ein Objekt aus einer Kiste zu greifen. In einer Simulation lernt der Roboter eigenständig, wie er das am besten tut. Am Anfang macht er die Aufgabe relativ schlecht, aber da es ja nur simuliert ist, ist das in Ordnung. Er kann ja nichts kaputt machen. Mithilfe eines Paradigmas aus dem Maschinellen Lernen namens „Reinforcement Learning“ wird er immer besser, bis wir sagen können, das ist für die Anwendung jetzt ausreichend. Sobald wir an diesem Punkt angelangt sind, haben wir automatisch ein Roboterprogramm, das wir in der Produktion verwenden können. Das heißt, der Roboter programmiert sich selbst.

Der Vorteil beim Einsetzen von Simulationen für die Robotik ist, dass man eigentlich keinen physikalischen Roboter braucht. Heute ist es so, dass der Roboter für den gesamten Zeitraum, währenddessen er

programmiert wird, für die Produktion nicht zur Verfügung steht. Dabei handelt es sich nicht nur um Stunden, denn es dauert eine gewisse Zeit, bis alles sicher funktioniert. Solche Unterbrechungen in der Produktion können wir vermeiden, weil alles in der Simulation passiert. In der Zeit, in der eine Produktionsmaschine ein Produkt fertigt, soll sie in der Simulation unter Nutzung unseres Ansatzes gleichzeitig lernen, wie sie das nächste Produkt zu fertigen hat. Das ist unsere Vision, die uns antreibt. Wir werden sie nicht heute oder morgen in der Realität umsetzen, aber wir denken, dass wir in den nächsten Jahren so weit sein werden.

**? Welche Vorteile könnte dieser Ansatz für die Industrie bieten?**

▶ Die Vision, die wir verfolgen, ist, den Produktionswandel sicher hin zu einer sogenannten Losgröße-1-Produktion zu begleiten. Idealerweise will man von einer Massenfertigung wegkommen, und im Stuttgarter Raum gibt es das Konzept der sogenannten „Mass Personalization“. Unternehmen möchten hochwertige, individualisierte Produkte fertigen, dies aber trotzdem zu einem günstigen Preis. Um das zu ermöglichen, muss die Produktionsmaschine in der Lage sein, sich auf jedes neue Produkt einzustellen.

Ein Beispiel ist die Herstellung von Schaltschränken, die heutzutage kundenindividuell gebaut werden. Mittlerweile ist fast schon jeder Schaltschrank ein Unikat, das Menschen herstellen. Hier gibt es beispielsweise sogenannte Hutschienen, auf die Komponenten gesteckt und dann entsprechend verkabelt werden müssen. Weil das ein sehr schwieriger und kostspieliger Prozess ist, möchten wir erreichen, dass ein Roboter durch die Simulation lernt, angepasste Schaltschränke effizient herzustellen.

**? Warum ist das Höchstleistungsrechnen bei solchen Ansätzen erforderlich?**

▶ Reinforcement Learning und andere Arten von Maschinellern Lernen leben von Daten, die oftmals jedoch nicht in der Art und Menge zur Verfügung stehen, wie es nötig wäre. Deswegen gehen wir den Weg, einen Großteil der Daten in einer hochgenauen



Professor Marco Huber

© Fraunhofer IPA

Simulation für das Training der Algorithmen bereit zu stellen. Somit ist nur noch eine geringe Anzahl realer Daten erforderlich, um eine Feintuning der Algorithmen zu ermöglichen. Am Fraunhofer IPA machen wir das schon im kleinen Stil aber wir haben nicht die benötigte Rechenkapazität, um aufwendige Simulationen durchzuführen.

Für einen einzelnen Roboter können wir das noch problemlos vornehmen, aber sobald man in größeren Skalen denkt – also mehrere Roboter oder verkettete Produktionsprozesse – würden wir das mit unseren Rechenkapazitäten nicht hinbekommen. Deswegen ist der Zugriff auf den Supercomputer des HLRS der Eckpfeiler unserer Kooperation. Die Zusammenarbeit bietet uns neue Möglichkeiten, komplexe Systeme zu simulieren, während der Simulation zu lernen und die Programme in die Industrie zu übertragen, und das im großen Stil.

**? Gibt es andere potenzielle Anwendungen von HPC im Maschinellen Lernen?**

▶ Ein anderes Thema der Kollaboration adressiert die Verifikation von neuronalen Netzen. Wenn man neuronale Netze in sicherheitskritischen Anwendungen einsetzen will, dann ist das heute immer ein Problem, weil man nie garantieren kann, ob das Netzwerk das tut, was es tun soll. Hier kommt die Verifikation ins

Spiel. Man formuliert Anforderungen, die das Netzwerk erfüllen soll, und prüft anschließend mathematisch, ob dies auch tatsächlich gewährleistet ist. Gemeinsam mit einem Unternehmen haben wir einen solchen Anwendungsfall untersucht, und in einem Testlauf haben wir bewiesen, dass es prinzipiell möglich ist.

Nichtsdestotrotz ist diese Verifikationsaufgabe unglaublich rechenaufwendig. Wir können diese Aufgabe mit unserer Rechenkapazität am Fraunhofer IPA nicht in erträglicher Zeit lösen. Wir haben uns mit dem HLRS und mit diesem Unternehmen darauf verständigt, im ersten Quartal des Jahres 2021 gemeinsam

ein Demonstrator-Projekt durchzuführen. Das HLRS stellt uns die entsprechenden Rechenressourcen zur Verfügung und wir werden diese Verifikationsaufgabe angehen.

Generell steht uns für das Thema Künstliche Intelligenz hier am Fraunhofer IPA ein GPU-Cluster zur Verfügung,

mit dem wir aktuell bereits neuronale Netze trainieren. Da mittlerweile viele meiner KollegInnen aus ganz unterschiedlichen Bereichen dieses Cluster nutzen, werden die Anforderungen immer größer und es entstehen vermehrt Engpässe. Auch hier ist die Idee, die Ressourcen des HLRS umfassend nutzen zu können.

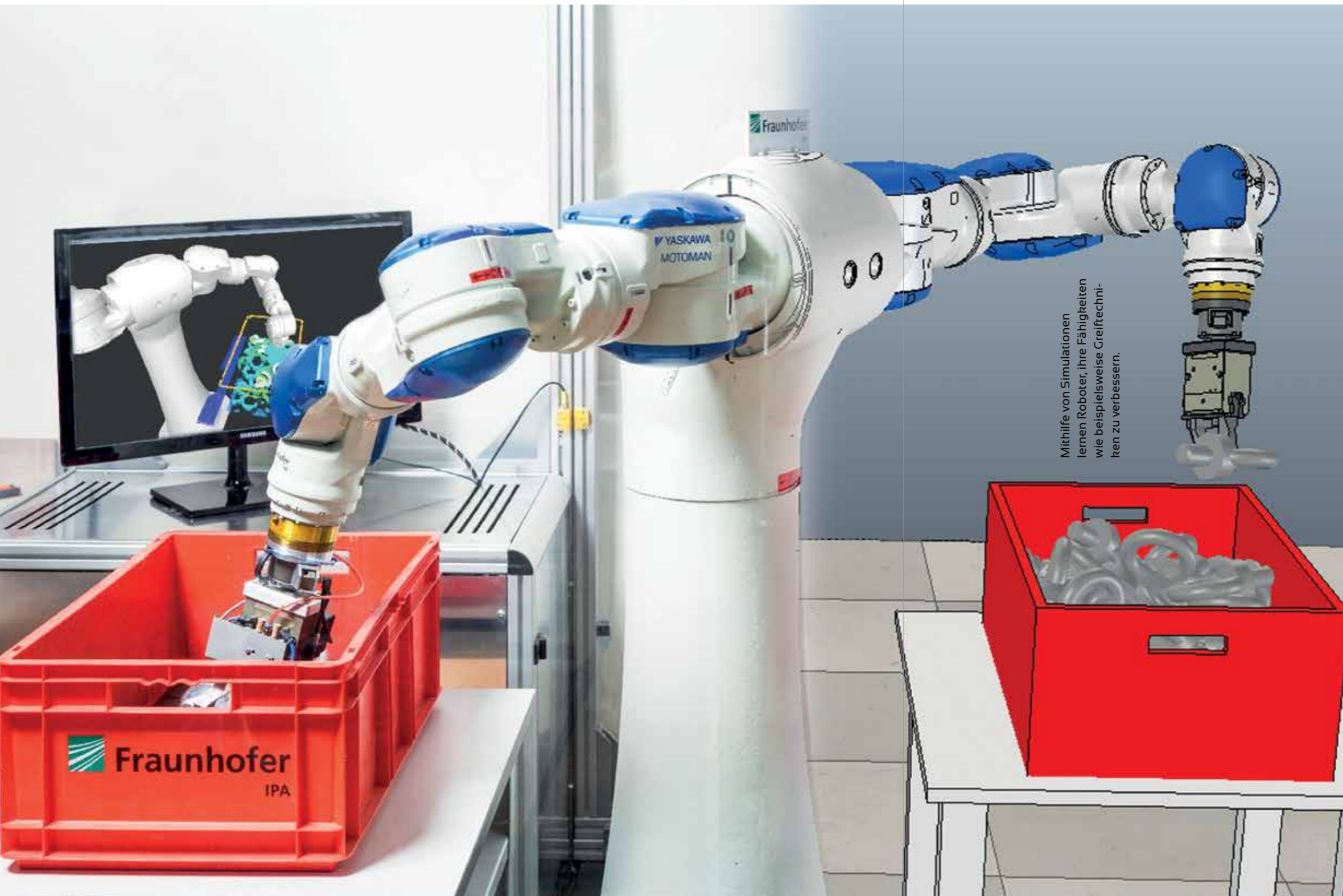
**?** Der Kooperationsvertrag geht auch um Themen aus dem Quantencomputing. Was sind Ihre Pläne in dem Bereich?

**▶** Das Fraunhofer IPA hat gemeinsam mit dem HLRS und weiteren Partnern erfolgreich einen Projektantrag namens SEQUOIA (Software-Engineering industrieller, hybrider Quantenanwendungen und -algorithmen) gestellt, der unter anderem zum Ziel hat, die zukünftigen Anwendungsmöglichkeiten des Quantencomputing zu erforschen. Diese Art von Rechnen ist immer noch neu, und deswegen gibt es wichtige Fragen: Welche praxisrelevanten Probleme lassen sich mit Quantencomputing schneller lösen, als dies ein klassischer Rechner kann? Und welche Problemstellungen werden von der sogenannten „Quantum Supremacy“ nicht profitieren?

In diesem Projekt erhalten wir Zugriff auf den Quantencomputer, den IBM der Fraunhofer-Gesellschaft in 2021 zur Verfügung stellt. Dieser bietet zwar nur vergleichsweise wenige Qubits – man wird also keine Reale-Welt-Probleme darauf lösen können – aber er erlaubt uns, Erfahrungen zu sammeln und kleine Fallbeispiele zu untersuchen, um besser zu verstehen, was möglich ist.

Momentan ist Quantencomputing – wie auch die Roboter-Programmierung – noch ein Expertengeschäft. Es gibt nur ganz wenige Experten auf der Welt, die einen Quantencomputer programmieren können. Deswegen ist unsere Idee auch, die Softwareentwicklung für solche Quantencomputer deutlich zu vereinfachen. Dadurch hoffen wir, dass Quantencomputing für Wissenschaftler und die Industrie einfacher zugänglich wird.

*(Interview: CW)*



Mithilfe von Simulationen lernen Roboter, ihre Fähigkeiten wie beispielsweise Greiftechniken zu verbessern.

© Fraunhofer IPA

# Leistungsoptimierungs-Workshop eröffnet neue wissenschaftliche Möglichkeiten

Der personalisierte HLRS-Nutzer-Support kommt der Forschung im Bereich numerische Strömungsmechanik in vielerlei Hinsicht zugute.

Mit den Leistungsoptimierungs-Workshops des HLRS können Nutzer der HPC-Systeme des Zentrums in enger Zusammenarbeit mit Support-Mitarbeitern die Codes für ihre Forschung verbessern. Mit einer kürzlich erfolgten Aufstockung der Mittel über das SiVeGCS-Projekt ermöglicht dieses Meeting-Format dem HLRS, zunehmend personalisierte Beratungsleistungen anzubieten. Zweimal jährlich lädt der Workshop ca. zehn Forscher-

Bei einem Workshop Anfang 2020 erläuterte ein Forscherteam des Instituts für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) der Universität Stuttgart ein Problem im Zusammenhang mit Free Surface 3D (FS3D), einem Code für Forschung im Bereich numerische Strömungsmechanik. Ursprünglich vor über 20 Jahren entwickelt, wurde FS3D stetig verbessert, wenn auch nicht immer im Sinne der Leistungsoptimierung.



teams ein, die die HLRS-Rechensysteme nutzen, und stellt ihnen jeweils einen HLRS-Experten für wissenschaftliches Rechnen zur Seite. Sie treffen sich einen ganzen Tag lang, tauchen tief in den Computercode der Forscher ein und nehmen in kürzester Zeit wichtige Änderungen vor, die dessen Leistung auf den HLRS-Supercomputern verbessert. Vertreter der Hardwarehersteller HPE und AMD sind ebenfalls anwesend, um technische Detailfragen zu ihren Produkten zu beantworten. Dieses geballte multidisziplinäre Fachwissen ermöglicht eine intensive Code-Bearbeitung und führt zu Verbesserungen, die Wissenschaftlern schneller Ergebnisse liefern und helfen, neue wissenschaftliche Fragen zu bearbeiten.

FS3D unterteilt einen Tropfen, etwa aus Wasser, rechnerisch in ein Netz aus Milliarden von Boxen, von denen jede eine hochauflösende Simulation der Flüssigkeit in diesem Tropfen enthält. Das bedeutet, dass der Code eine Vielzahl von parallelen Berechnungen koordinieren muss.

Als das Team und Dr. Martin Bernreuther vom HLRS den FS3D-Code gemeinsam betrachteten, stellten sie fest, dass der verwendete Multigrid-Solver eine große Anzahl von Berechnungen an einen einzigen Prozessor schickte, während andere Prozessoren, die bei der Berechnung hätten helfen können, inaktiv waren. Im Zuge des Workshops setzten sie eine Methode ein, die baumartig die Kommunikation zwischen den Lösungen

des Gleichungssystems während verschiedener Zyklen des Multigrid-Solvers koordiniert. Die Berechnungen nutzen jetzt die parallele Architektur des HLRS-Supercomputers wesentlich besser aus.

Nach Leistungstests stellte das Team fest, dass der verbesserte Code bei einer Skalierung auf eine große Anzahl von Rechenkernen bis zu 20 Mal schneller lief. Der ITLR-Wissenschaftler Jonas Steigerwald kommentiert den Geschwindigkeitszuwachs so: „Vorher haben wir einen starken Einbruch gesehen, wenn wir den Code über eine größere Anzahl Prozessoren laufen ließen. Den sieht man durch diese Kommunikation gar nicht mehr.“

„Wenn man mit 64 Prozessoren rechnet, dann hat es keinen großen Effekt, aber, wenn man in eine Größenordnung von 4.000 Prozessoren geht, das ist dann enorm, was es ausmacht“, fügt sein ITLR-Kollege Matthias Ibach hinzu.

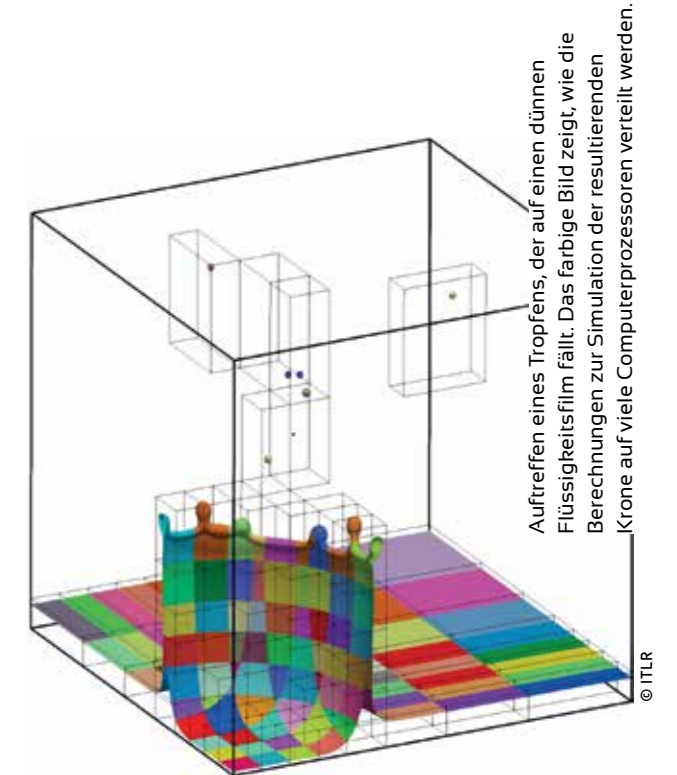
Für die Wissenschaftler machte der persönliche Kontakt im Workshop den Unterschied aus. FS3D-Teammitglied Jonathan Reutzsch erklärt: „Oft können der-



artige Probleme nur in solchen Workshops und durch solch direktes Mentoring erkannt und behoben werden. Jedes Jahr geht es einen Schritt nach vorn.“

Ibach lobte auch die Expertise des HLRS im wissenschaftlichen Rechnen für dessen Einfluss auf die Forschung seines Instituts: „Die Parallelisierung ermöglicht uns erst, in neue Bereiche vorzudringen.“

Die Wissenschaftler schätzen auch die Kontakte, die der HLRS-Workshop mit Forschern aus anderen Instituten ermöglicht. Reutzsch erklärt: „Wir haben schon viele Leute kennengelernt, die ähnliche Probleme hatten, die wir sonst nicht getroffen hätten. Das HLRS ist eine vereinende Institution, die Leute mit ähnlichen Problemstellungen zusammenbringt.“



Auftreffen eines Tropfens, der auf einen dünnen Flüssigkeitsfilm fällt. Das farbige Bild zeigt, wie die Berechnungen zur Simulation der resultierenden Krone auf viele Computerprozessoren verteilt werden.

© ITLR

Wegen der COVID-Pandemie hielt das HLRS seinen zweiten Leistungsoptimierungs-Workshop 2020 als Videokonferenz ab (siehe Seite 12). Obwohl die Wissenschaftler den persönlichen Kontakt während der Live-Veranstaltung vermissen, war das Online-Format ein Erfolg und ermöglichte es dem HLRS, neue Ansätze für den personalisierten Nutzer-Support außerhalb des Raums Stuttgart über das Internet zu entwickeln.

Neben der Unterstützung seiner wissenschaftlichen Nutzer trägt der kompetente Nutzer-Support des HLRS auch dazu bei, einen effizienteren Betrieb seiner Rechensysteme zu gewährleisten und deren Verfügbarkeit für alle Nutzer zu maximieren.

(CW)

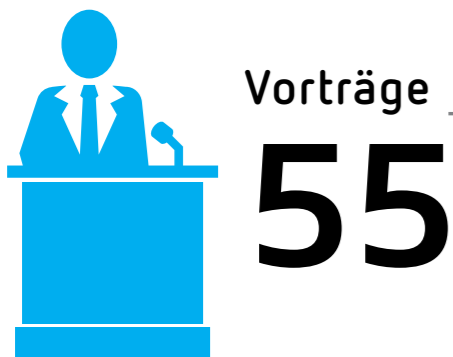
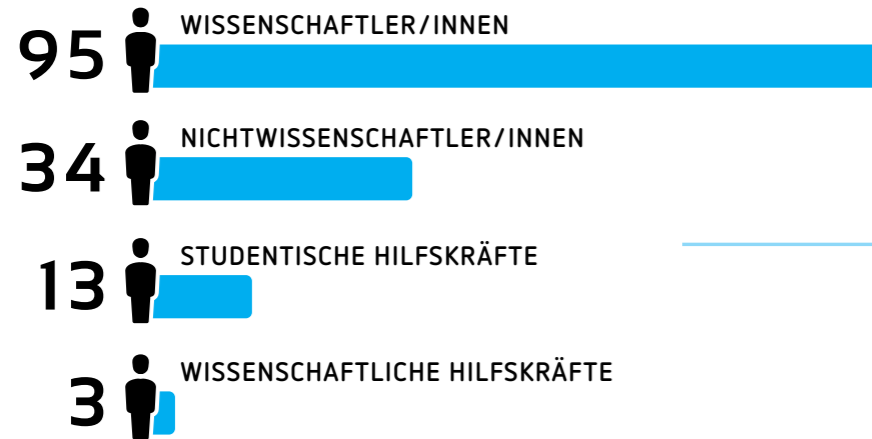
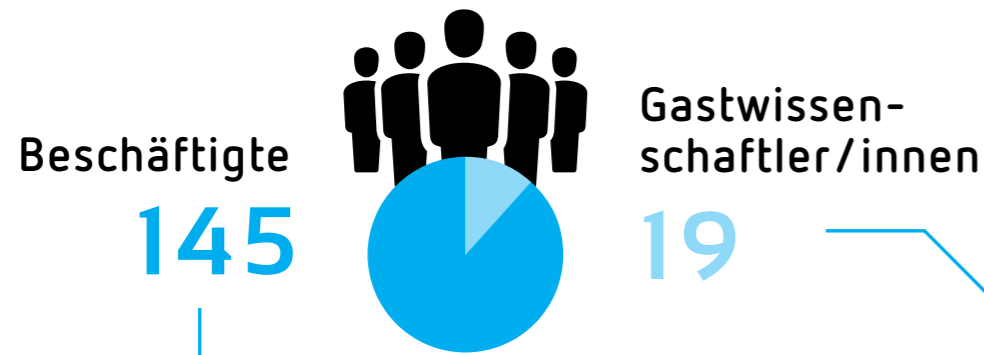
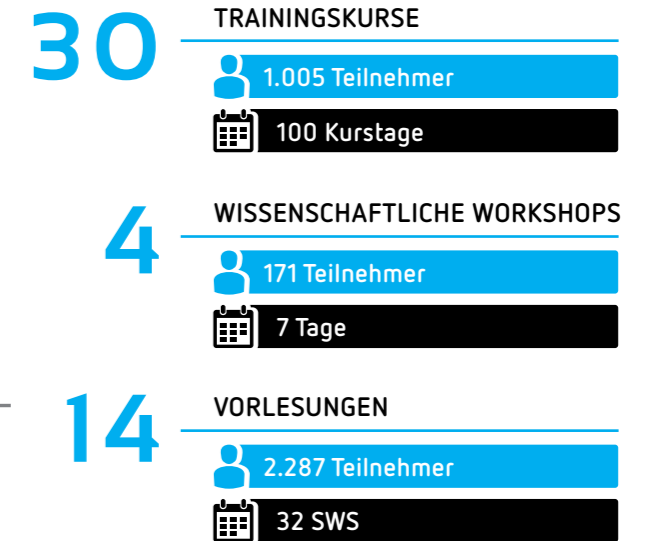
# HLRS in Zahlen

## Systemnutzung



- NUTZERPROJEKTE
- INDUSTRIELLE KUNDEN
- PUBLIKATIONEN DER NUTZER

## Aus-und Weiterbildung



## Publikationen



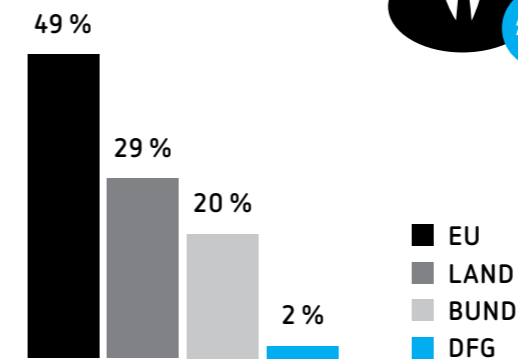
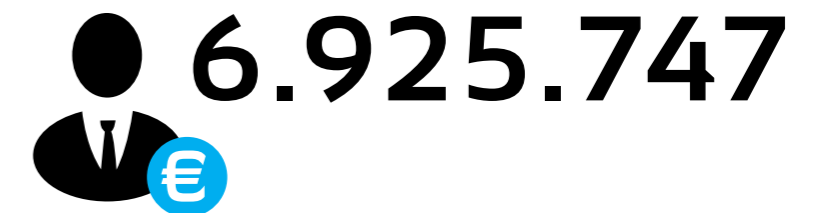
VERÖFFENTLICHUNGEN IN FACHZEITSCHRIFTEN, BÜCHERN UND KONFERENZBÄNDEN

BÜCHER

# HLRS



## Drittmittel



# HLRS erhält zwei Umweltzertifikate

Mit dem EMAS und dem Blauen Engel werden die Bemühungen des Zentrums im Umwelt- und Energiemanagement gewürdigt.

Im März wurde das HLRS als erstes großes Höchstleistungsrechenzentrum gemäß dem weltweit anspruchsvollsten System für Umweltmanagement EMAS (Eco-Management and Audit Scheme) zertifiziert. Weiterhin erhielt das Zentrum im Oktober für den nachhaltigen Betrieb seiner Einrichtungen den Blauen Engel, das Umweltabzeichen der Bundesregierung.

„Am HLRS betreiben wir einen der leistungsfähigsten Supercomputer Europas – und das heißt, wir haben einen hohen Energiebedarf,“ sagte Prof. Michael M. Resch, Direktor des HLRS. „Wir haben schon vor Jahren erkannt, dass wir alles in unserer Macht Stehende tun müssen, um unseren ökologischen Fußabdruck zu minimieren – insbesondere, was die CO<sub>2</sub>-Emissionen angeht. Der Erhalt der Zertifikate zeigt einmal mehr, dass wir am HLRS das Thema Umweltverantwortung sehr ernst nehmen.“

Das Umweltmanagementsystem am HLRS deckt alle Ebenen ab – von der Energienutzung über Ressourcenverbrauch und Entsorgung bis hin zu Aktivitäten, die der Umwelt oder menschlichen Gesundheit schaden können. Auch die Umweltauswirkungen der gesamten Beschaffung berücksichtigt das HLRS. Zudem wurden Systeme für die Erfassung und Reduktion von Energieverbrauch, der Minimalisierung von Abfällen und der Wiederverwendung von Ressourcen etabliert.

Die EMAS und Blauer Engel Auszeichnungen ergänzen die bereits vorhandenen internationalen Zertifizierungen ISO 50001 (Energiemanagement) sowie ISO 14001 (Umweltmanagement). Die Entwicklung des Umweltmanagementplans wurde vom baden-württembergischen

Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst unterstützt.

Um andere Rechenzentren bei der Verbesserung ihrer Umweltbilanzen zu unterstützen, veröffentlichte das HLRS den Leitfaden „Nachhaltigkeit in Rechenzentren: Eine praktische Anleitung“, der unter [https://www.hlrs.de/fileadmin/sys/public/aboutus/sustainability/HLRS\\_NHK\\_Praxisleitfaden-2020.pdf](https://www.hlrs.de/fileadmin/sys/public/aboutus/sustainability/HLRS_NHK_Praxisleitfaden-2020.pdf) verfügbar ist. (CW)



Die vom Supercomputer Hawk erzeugte Wärme wird zur Beheizung der Gebäude genutzt und die eingesetzte freie Kühlung benötigt deutlich weniger Energie als herkömmliche in Rechenzentren genutzte Klimaanlage.



# Promotionen 2020

Zwei junge Forscher promovierten 2020 am HLRS.



**Fabian Dembski**

**Energiebewusste Stadtentwicklung nach innen. Analytische Gestaltungsstrategien für die Post-Oil-City: Die Fallstudie des Großraums Paris .**

Eine Begrenzung des individuellen Autoverkehrs in Städten könnte den Energieverbrauch stark senken und das Leben dort gesünder und angenehmer machen. Vorteile könnten beispielsweise sein: weniger Energieverbrauch und Abgase, die Umnutzung der Verkehrsinfrastruktur, die Regeneration von Stadtteilen, die Aufwertung öffentlicher Räume und die bessere Integration isolierter Stadtteile oder Vororte in das Stadtgefüge. In seiner Dissertation nutzt Dembski eine Vielzahl von Methoden, darunter die Raumsyntax-Theorie, geografische Informationen, Promenadologie sowie die Entwicklung und das Testen von Szenarien, für eine Fallstudie über Paris; er zeigt unzählige Möglichkeiten auf, wie mit Methodensets der Weg zur Stadt der Zukunft nach dem Erdölzeitalter geebnet werden könnte. Darüber hinaus erörtert er die Erstellung des ersten europäischen digitalen urbanen Zwillinges und zeigt auf, wie modernste Digitaltechnologien Lösungsstrategien für Probleme, zur Erreichung von Zielen und zur Erfolgsbewertung in der Städteplanung bieten können.



**Joseph Schuchart**

**Globale Aufgabendatenabhängigkeiten im Partitioned Global Address Space**

Das derzeit vorherrschende Programmiermodell parallele Anwendungen ist ein zweistufiger Ansatz, der aus nachrichtenbasierter Kommunikation zwischen Prozessen mit MPI und einer statischen Thread-parallelen Ausführung auf Schleifenebene mit OpenMP-Konstrukten besteht. Mit zwei Programmiermodellen wird jedoch versucht, diesen Status quo in Frage zu stellen. Zum einen ist das PGAS-Modell ein Versuch, die Shared-Memory-Programmierung auf die Ebene verteilter Systeme zu heben und dem Anwendungsentwickler moderne Netzwerkhardware-Funktionen direkt zugänglich zu machen. Zum anderen sollen mit Task-basierter Programmierung Abstraktionen bereitgestellt werden, mit dem Ziel, mehr Nebenläufigkeit in parallelen Anwendungen aufzudecken, wodurch wiederum die vorhandenen Computer-Ressourcen besser ausgenutzt werden können. In seiner Dissertation schlägt Schuchart einen neuen Weg vor, die globale Ausführung von Tasks zu organisieren, indem er auf die verteilte Entdeckung von Task-Graphen und Datenabhängigkeiten im globalen Speicherbereich setzt. Die Ergebnisse zeigen, dass Anwendungen, die Nebenläufigkeit jenseits von Einzelschleifenparallelität aufweisen, dieses neue Modell nutzen können, um die Leistung und Skalierbarkeit deutlich zu verbessern, indem die Vorteile der Task-basierten Programmierung und der einseitigen Kommunikation im PGAS-Modell kombiniert werden.

# HIGHLIGHTS DER FORSCHUNG

## Maschinelles Lernen für bessere Strömungsmechanik-Forschung

**Genauere Large-Eddy-Simulationen könnten zur Entwicklung effizienterer Windkraftanlagen oder umweltfreundlicherer Flugzeuge beitragen.**

Seit Jahrzehnten nutzen Ingenieure und Wissenschaftler immer leistungsfähigere Supercomputer, um die turbulenten Wechselwirkungen, die Fluidströmungen beeinflussen, besser zu verstehen. Die Anwendungen reichen von mehr Sicherheit bei industriellen chemischen Prozessen bis hin zu besserer Treibstoffeffizienz und weniger Lärmbelastigung im kommerziellen Flugverkehr. Das Verständnis darüber, wie Fluide grundlegend interagieren, hat unzählige Alltagsprozesse verbessert.

Die Strömungsmechanik-Forschung eignet sich gut für Modellierung und Simulation. Viele HPC-Simulationen beginnen mit einem Rechengitter oder -netz, mit dem die Forscher ein großes, komplexes Problem in kleine Gleichungen zerlegen können, die parallel berechnet und schnell wieder zusammengefügt werden können. Da Supercomputer immer leistungsfähiger werden, können Forscher diese Netze immer feiner stricken.

Seit Supercomputer wie der Hawk des HLRS Quadrillionen von Berechnungen pro Sekunde durchzuführen können, können Wissenschaftler Direkte Numerische Simulationen (DNS) erstellen, die Fluidbewegungen ohne vereinfachende Modelle oder Annahmen „von Grund auf“ modellieren. Bei der Berechnung von Turbulenzen in Fluidströmungen ermöglicht DNS Forschern die genaue Simulation kleinster Wirbelbewegungen oder Wirbel, die die großen Bewegungen in einem Fluid beeinflussen.

Dafür braucht man jedoch regelmäßigen Zugang zu großen Supercomputern. Ist dieser nicht möglich, etwa wenn Forscher aus der Industrie die Turbulenz

untersuchen wollen, führen sie oft Large-Eddy-Simulationen (LES) durch, die nur das Verhalten der größeren Wirbelbewegungen in einem Fluid berechnen. Dieser Ansatz erfordert auch auf empirischen Daten oder auf anderen Modellen basierende Annahmen über das Verhalten der kleinsten Wirbel. Er braucht zwar weniger Rechenleistung, aber die Forscher wissen, dass selbst kleinste Wirbel stark beeinflussen, wie sich das gesamte System verhält.

Seit kurzem erforschen Forscher um Dr. Andrea Beck am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart, wie Maschinelles Lernen die Leistungsfähigkeit von DNS auch Forschern mit bescheideneren Computerressourcen zugänglich machen könnte. Als langjährige Nutzerin der HPC-Ressourcen des HLRS für traditionelle Modelle und Simulationen nutzt sie jetzt Hawk zur Erzeugung von Trainingsdaten für neuronale Netze für bessere LES-Modelle. Ihre Experimente zeigen bereits Potenzial, die Strömungsmechanik-Forschung voranzutreiben.

### Die richtige Schließungsbedingung

Der Unterschied zwischen der Modellierung von Turbulenzen mittels DNS und LES ist ähnlich wie bei Fotos. Man kann sich DNS als ein hochauflösendes Foto vorstellen und LES als eine gröbere, pixeligere Version desselben Bildes. Im Gegensatz zu einem Foto haben Forscher jedoch nicht immer Zugang zur hochauflösenden Version eines bestimmten Systems, aus der sie eine genaue Darstellung in geringerer Auflösung entwickeln können. Um diese Lücke in der Flüssigkeitsmodellierung

zu schließen, müssen Forscher nach so genannten „Schließungsbedingungen“ suchen.

„Analog zur Fotografie ist die Schließungsbedingung das, was zwischen dem grobkörnigen Bild und dem vollständigen Bild fehlt“, so Beck. „Sie ist die Bedingung, die man im Wesentlichen zu ersetzen versucht. Eine Schließung sagt einem, wie diese Information aus dem Vollbild das grobkörnige Bild beeinflusst.“ Genau wie bei einem bearbeiteten Bild gibt es jedoch viele Möglichkeiten, wie LES-Turbulenzmodelle von DNS abweichen können, und die Wahl der richtigen Schließungsbedingung ist entscheidend für die Genauigkeit von LES.

Das Team begann mit dem Training eines künstlichen neuronalen Netzes, eines maschinellen Lernalgorithmus, der ähnlich wie das menschliche Gehirn neue Informationen verarbeitet und synthetisiert. Bei diesen Methoden werden Algorithmen mit einer Sammlung großer Datensätze trainiert, die oft von HPC-Systemen generiert werden, um Verbindungen herzustellen, die denen ähneln, die im menschlichen Gehirn beim Spracherwerb oder bei der Objekterkennung entstehen. Diese Arten von Algorithmen werden in einer „überwachten“ Umgebung trainiert, also speisen die Forscher große Datenmengen ein, für die sie bereits die Lösung haben; somit ist sichergestellt, dass der Algorithmus immer die richtige Antwort oder Klassifizierung für einen gegebenen Datensatz erhält.

„Beim überwachten Lernen ist es so, als würde man dem Algorithmus 1.000 Bilder von Katzen und 1.000 Bilder von Hunden geben“, so Beck. „Hat der Algorithmus genug Beispiele von jedem gesehen, kann er auf einem neuen Bild unterscheiden, ob eine Katze oder ein Hund darauf ist.“ Für seine Arbeit führte das Team einige DNS-Berechnungen auf den HLRS-Supercomputern durch. Sie führten etwa 40 Läufe mit etwa 20.000 Kernen pro Lauf auf den Supercomputern Hawk und Hazel Hen durch und trainierten dann mit den resultierenden Daten das neuronale Netz. Da dieser Datensatz

auch anderen Forschern nutzen könnte, macht ihn das Team 2021 öffentlich zugänglich. Das Team verglich zwei verschiedene Trainingsansätze und stellte fest, dass einer bei korrekter Zuordnung der richtigen Schließungsbedingung zu einer LES-Filterfunktion eine Genauigkeit von 99 % erzielte.

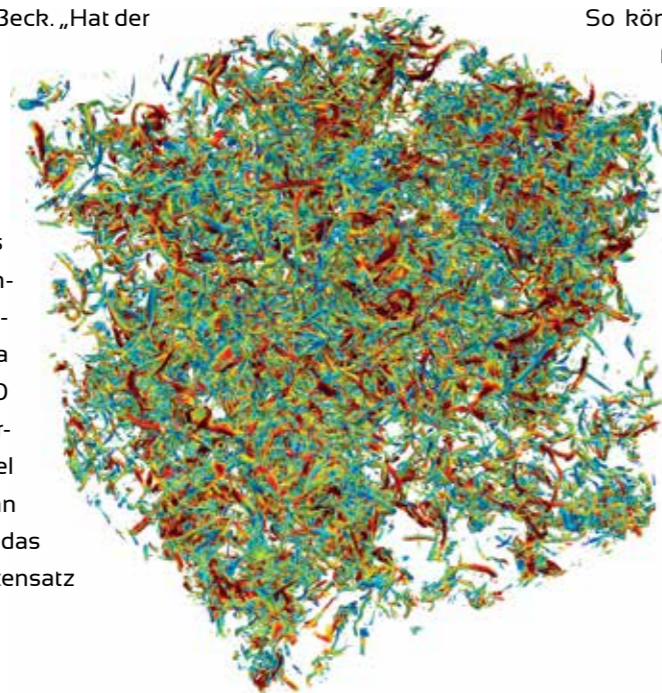
### Stets dazulernen

Dank solch vielversprechender Ergebnisse ist das Team zuversichtlich, dass diese datengesteuerten Modellierungsansätze weiter verfeinert werden können, um die Genauigkeit der HPC-gesteuerten DNS-Ergebnisse auf bescheidenere Simulationsansätze zu übertragen. Die Arbeit des Teams ist Beispiel eines neuen Trends in Wissenschaft und Technik: die Verschmelzung und Ergänzung von traditioneller Modellierung und Simulation im HPC mit KI-Anwendungen.

Die neue Erweiterung von Hawk um 192 NVIDIA-Grafikprozessoren unterstützt diese Annäherung und kommt Nutzern zugute, die große Datensätze für das Training neuronaler Netze generieren müssen, da Verzögerungen vermieden werden, die sonst durch das Verschieben von Daten zwischen verschiedenen Rechnersystemen entstehen würden (siehe Seite 22).

„Das ist ein großer Schritt nach vorne, um traditionelle HPC-Codes um neue datengesteuerte Methoden zu ergänzen, und füllt eine deutliche Lücke.“, sagt Beck. „Er wird dazu beitragen, unsere Entwicklungs- und Forschungsprozesse zu beschleunigen.

So können wir diese im großen Maßstab auf Hawk einsetzen.“ (EG)



© Marius Kurz, Universität Stuttgart

Wirbelstrukturen der abringenden homogenen Turbulenz aus DNS. Simulationen wie diese lieferten die Daten, die Beck und ihre Mitarbeiter für das Training ihrer maschinellen Lernanwendung verwenden. Bildquelle: Marius Kurz, Universität Stuttgart

## Die spinnen, die Quantenpunkte

**Ein Team der TU Dortmund modelliert mithilfe von HPC, wie Laser die Spindynamik in Quantenpunkten regulieren könnten. Diese kleinen Strukturen könnten sehr dabei helfen, Quantencomputer und andere Spitzenelektronik zu verbessern.**

Mit modernen Computertechnologien können Forscher vieler Fachbereiche Phänomene simulieren, die zu groß, zu klein, zu gefährlich oder zu schwierig für Experimente sind. Tatsächlich leiteten Supercomputer eine neue goldene Ära der Teilchenphysik ein und spielten eine unverzichtbare Rolle bei der Erforschung von Wechselwirkungen auf atomarer Ebene und darunter.

Seit den 1920er Jahren dokumentieren Wissenschaftler akribisch die Gesetze der atomaren und subatomaren Welt. Die sogenannte Quantenwelt funktioniert nicht nach den Gesetzen, die Isaac Newton zuerst aufstellte. Da moderne Forscher ein tieferes Verständnis der Quantenmechanik erlangt haben, haben sie Möglichkeiten identifiziert, die zu neuen Arten von Elektronik oder anderen Technologien führen könnten. Unter diesen vielversprechenden Fortschritten könnte das Quantencomputing, das über Quantenmechanik Informationen auf grundlegend andere Art und Weise verarbeitet als herkömmliche Computer, in der Zukunft bestimmte Forschungsbereiche und die Entwicklung neuer Anwendungen beschleunigen.

Während sich herkömmliche Computer auf umfangreiche Muster von Einsen und Nullen stützen, um Informationen in Bits zu übertragen, nutzen Quantencomputer sogenannte Qubits, Teilchen, die den Gesetzen der Quantenmechanik folgen. Jedes Qubit kann nach oben, unten oder in seiner „Superposition“ sein, das heißt, es repräsentiert gleichzeitig beide Positionen. Die Existenz dieser Zustände, bei denen Elektronen

mehrere Positionen gleichzeitig einnehmen können, könnte für datenintensive Modellierung und Simulation vorteilhaft sein aber vorher ist ein weiteres Verständnis dieser kontraintuitiven Phänomene noch erforderlich. Die Wissenschaftler müssen auch Methoden entwickeln, um Quantenteilchen zuverlässig zu manipulieren und zu kontrollieren, insbesondere im Hinblick darauf, wie einzelne Elektronen „spinnen“ oder sich unter bestimmten Bedingungen ausrichten. Um besser zu verstehen, wie sich subatomare Teilchen grundlegend verhalten und interagieren, nutzt eine multidisziplinäre Forschungskoooperation mit Sitz an der TU Dortmund die HPC-Ressourcen des HLRS, um einige dieser komplexen Wechselwirkungen zu simulieren. Das Team arbeitet mit Forschern des internationalen Sonderforschungsbereichs 160 (ICRC 160) zusammen, der in St. Petersburg und Dortmund eingerichtet wurde, um zu untersuchen, wie die Spins von Elektronen (und die Spins größerer Kerne in der Nähe in einem gegebenen System) unter bestimmten Bedingungen interagieren und wie Lasertechnologien helfen könnten, diese Systeme zu manipulieren.

Seit kurzem konzentriert sich das Team auf Quantenpunkte. Forscher fanden heraus, dass Quantenpunkte, im Rahmen von Halbleitertechnologien entwickelt, unter den richtigen Bedingungen Elektronenspins kontrollieren können, womit sie sich für die Verwendung als Qubits in zukünftigen Quantencomputern eignen. „Ein Quantenpunkt kann als Falle für ein einzelnes Elektron und damit für dessen Spin angesehen



Prof. Dr. Götz Uhrig

werden“, sagt Projektleiter Götz Uhrig, Professor an der TU Dortmund. „In einem Festkörper gibt es bis zu  $10^{20}$  Elektronen, und ihre Spins verhalten sich so, dass sich nach außen kein Nettoeffekt ergibt; der Spin eines überschüssigen Elektrons kann jedoch nachgewiesen und manipuliert werden.“

### Spins in Quantenpunkten besser verstehen

Wenn Physiker atomare Systeme untersuchen, ist ein Ansatz das strategische Hinzufügen oder Entfernen eines Elektrons, um die Eigenschaften zu bestimmen, die es dem System verleiht. Als die Forscher und Ingenieure mehr darüber lernten, wie man diese Systeme modifizieren kann, fanden sie relativ kostengünstige Methoden, Halbleiter auf Siliziumbasis herzustellen, die heute quasi überall in der Unterhaltungselektronik stecken.

In der Entwicklung neuer Arten von Elektronik, etwa Quantencomputer, setzen Wissenschaftler auf spezielle Halbleiter-Nanostrukturen, sogenannte Quantenpunkte, um Elektronen und ihre Spins besser so zu steuern, dass sie bestimmten Algorithmen folgen. Innerhalb eines Quantenpunkts können Forscher mithilfe von Lasern oder anderen Technologien die Positionen der überschüssigen Elektronen im Raum fixieren, wodurch sich ihre Spins leichter manipulieren lassen. Auf experimenteller Ebene müssen Forscher, wie bereits erwähnt, die seltsame, neuartige Physik berücksichtigen, die die Quantenspins der Elektronen in ihren „Oben“- und „Unten“-Zuständen bestimmt. Die Berücksichtigung von Superpositionen bedeutet letztlich, dass die Forscher für jeden Quantenpunkt Millionen von möglichen Zuständen der Elektronenspins berechnen müssen. Während die Simulation des

Spins eines einzelnen Quantenpunkts bei der Wechselwirkung mit ungefähr Tausenden von Kernspins rechnerisch nicht allzu anspruchsvoll sein mag, müssen bei einer aussagekräftigen Simulation oder einem Experiment Tausende von Quantenpunkten auf einmal berücksichtigt werden.

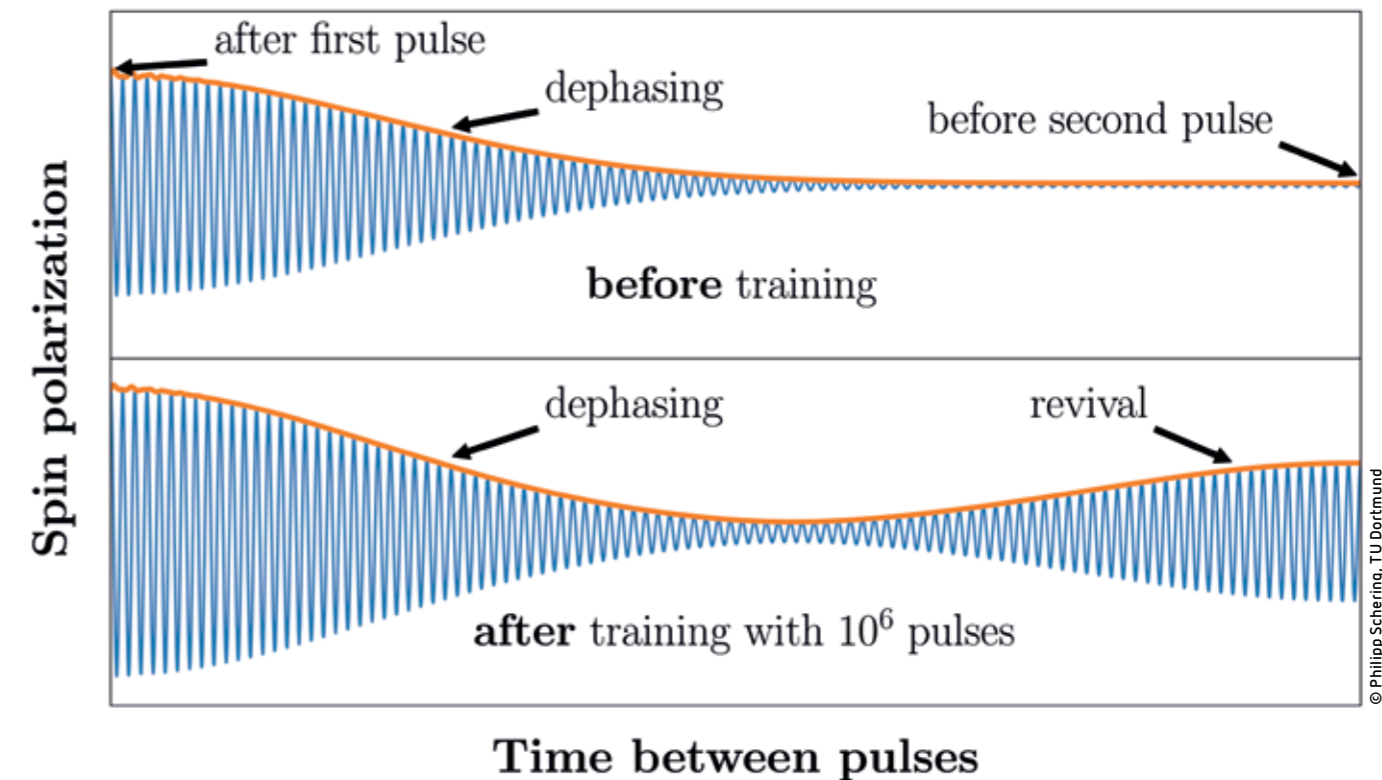
Ein gängiger experimenteller Ansatz ist die Verwendung von Laserpulsen, um Quantenpunkte so zu „trainieren“, dass sich ihre Spins synchron verhalten. „Meine Kollegen senden Pulse an das System, die den Spin eines Quantenpunkts ausrichten“, so Uhrig. „Tun sie dies über einen längeren Zeitraum, erhalten sie vor dem nächsten Impuls eine gewisse Reaktion. Man sieht also eine gewisse Polarisation, dann ebbsie ab. Aber wenn man das eine lange Zeit macht, gibt es schon ein Signal, bevor der nächste Impuls kommt. Das zeigt, dass das System erfolgreich trainiert wurde.“

In Experimenten schießen die Forscher alle paar Nanosekunden einen Laserpuls, und das „Training“ der Punkte kann Sekunden oder auch Minuten dauern. Das bedeutet, dass eine realistische Simulation einen extrem weiten Bereich von Zeitskalen abdecken muss. Die Durchführung der notwendigen Berechnungen in einer angemessenen Zeit wäre ohne große Supercomputer nicht möglich.

### Vorsprung durch Iteration

Uhrig und seine Mitarbeiter nutzen HPC in erster Linie, um Daten aus Experimenten quantitativ zu erfassen. Mit diesem Ansatz kann das Team nicht nur effizient überprüfen, wie gut ein bestimmtes Quantensystem trainiert wurde, sondern auch Vorhersagen mit dem von ihnen entwickelten physikalischen Modell treffen.

Dieses Bild zeigt die Entwicklung der elektronischen Spinpolarisation im Zeitverlauf. Jeder Puls erzeugt ein endliches Signal, das stark oszilliert, wenn der Spin um das angelegte Magnetfeld präzediert. Aufgrund der Wechselwirkung mit den ungeordneten Kernspins ebbs das Signal schnell ab (oberes Feld). Nach langen Impulserien sind die Kernspins „trainiert“ und es kommt zu einem kohärenten Wiederanstieg des Signals.



Wenn das Team das Modell richtig entworfen hat, sollten dessen neue Phänomene auch im Experiment gefunden werden.

„Dieses Hin und Her ist ein allgemeines Merkmal in der Dynamik zwischen Theorie und Experiment“, so Uhrig. „Wenn die Theorie versucht, dem Experiment nahezu kommen, müssen viele Parameter berücksichtigt werden, also muss man viel numerische Arbeit leisten, und da kommt HPC ins Spiel.“

Mit diesem inkrementellen Vorgehensmodell entdeckte das Team Strategien zur Verstärkung der Signale in den Daten, die anzeigen, wie Elektronenspins auf Laserpulse reagieren. Letztendlich könnte dieses Wissen es den Forschern erleichtern, das Verhalten auf

der Quantenskala vorherzusagen und sich darauf zu verlassen, wenn sie Aufgaben in Quantencomputern und anderer fortschrittlicher Elektronik ausführen. Das Team konnte letztes Jahr am HLRS während der Abnahmephase des neuen Hawk-Supercomputers auf eine große Anzahl von Rechenkern zugreifen, um größere Berechnungen durchzuführen. „Kurzfristig wurden uns kurze Warteschlangen für große Kernzahlen angeboten, und dadurch konnten wir ganz klar viel schneller forschen“, so Uhrig. Nachdem das Team nun seinen Code auf Hawk weiter optimieren konnte, sind die Forscher zuversichtlich, dass sie mit zukünftigen Zuweisungen auch komplexere Berechnungen für größere Systeme übernehmen können.

(EG)



# Forscher modellieren Muskeln mithilfe von HPC

Eine interdisziplinäre Forschergruppe der Universität Stuttgart entwickelt immer detailliertere Modelle von Teilen des menschlichen Körpers. Von der Zellebene aus skaliert das Team die Simulationen hoch, um einzelne Muskeln im menschlichen Arm zu modellieren.

Seit den letzten Jahrzehnten bewegt sich das Verständnis des menschlichen Körpers auf zellulärer und subzellulärer Ebene. Der menschliche Körper besteht aus Milliarden von Zellen, und obwohl die Physiologen viele Prozesse verstanden haben, die von Muskel- und Nervenzellen gesteuert werden – etwa vom Klavierspielen bis zum Gewichtheben – können die grundlegenden Prozesse, die diese Bewegungen steuern, noch nicht richtig erklärt werden.

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) weiß um die Bedeutung solcher Fragen. Daher hat sie 2020 ein Schwerpunktprogramm initiiert, das Forschung unterstützt, die Simulationen und klinische Studien mehrerer anatomischer Systeme miteinander verknüpft. Die Ergebnisse könnten sich stark auf die individualisierte Medizin und die Entwicklung effektiverer Diagnosemethoden und Behandlungen auswirken.

Eine Forschungsgruppe der Universität Stuttgart um die Professoren Dominik Göddeke, Miriam Mehl und Oliver Röhrle beschäftigt sich seit Jahren mit der computergestützten Modellierung des menschlichen Bewegungsapparates. Für Göddeke ist der komplexe und integrierte Charakter der Forschung vielversprechend, aber auch sehr herausfordernd. „Viele wissenschaftliche Bereiche werden immer spezialisierter, so dass niemand mehr bei all der notwendigen Mathematik, den Berechnungen und den biomechanischen Modellen alleine diese Probleme lösen kann“, so Göddeke. Fachgebietsübergreifende Teams sind daher unverzichtbar.

Das Team nutzt die Supercomputer am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), um hochauflösende Simulationen davon zu erstellen, wie unsere Muskeln, Knochen und unser Nervensystem grundlegend interagieren. Während die Entwicklung der meisten Therapien nach wie vor auf experimentellen Daten fußt, setzt das Team der Uni Stuttgart auf Computerberechnungen. „Zum Bewegungsapparat fehlen leider viele wichtige Informationen, und die Durchführung von Messungen kann Datensätze verfälschen, zu Gesundheitsschäden führen oder zu ungenau sein“, so Aaron Krämer, Projektbeteiligter und Forschungsassistent an der Universität Stuttgart. „Ein alternativer Weg, um mehr über diesen Bereich zu erfahren, der sich immer mehr durchsetzt, ist die Simulation des interessierenden Prozesses. In unserem Fall untersuchen wir den gesamten Aktivierungsprozess vom Nervensystem bis zur Muskelkontraktion.“

## Fitte Rechner

Zwar können Forscher den menschlichen Körper basierend auf generischen Eingabedaten aus Experimenten oder anderen Simulationen grob simulieren, aber die Erstellung eines „First-Principles“-Modells wird schnell rechenintensiv. So rechenintensiv, dass Forscher im Allgemeinen beschließen, mit einem kleinen Teil des Körpers zu beginnen – etwa einer Gruppe von Zellen oder Geweben – und dann die Simulationen zu erweitern, wenn mehr Rechenleistung verfügbar ist.

Solche Simulationen sind rechenaufwendig, da die Forscher eine große Bandbreite an Skalen berücksichtigen

müssen. Seit kurzem beschäftigen sich die Stuttgarter Forscher etwa mit der Simulation eines menschlichen Bizeps in Bewegung. Um nur einen der vielen Muskeln im Arm zu simulieren, müssen die Bewegungen für alle „Faszikel“ des Muskels genau berechnet werden. Jeder Muskel besteht aus 10 bis 100 Faszikeln, von denen jeder zwischen 10.000 und 250.000 Muskelfasern enthält. Letztendlich müssen dafür mehr als fünf Milliarden Gleichungen gelöst werden.

„Unser Modell ist ein solches Multiskalen- und Multiphysik-Problem, das zur vollständigen Simulation aller Prozesse – von der subzellulären Ebene bis zur Darstellung des menschlichen Körpers in Bewegung – Höchstleistungsrechnen benötigt“, so Mehl. „Wir wollen diese hochdetaillierten Modelle definitiv verwenden, denn phänomenologische Modelle, die auf kleineren Mengen von Eingabedaten basieren, liefern uns nicht so viele Informationen oder die Möglichkeit, Beobachtungen zu verallgemeinern, die wir in unseren Modellen sehen können.“

Um diese Simulationen zeitnah durchführen zu können, nutzt das Team 7.000 Kerne auf dem Hawk-Supercomputer des HLRS, wodurch es alle 180.000 Muskelfasern des Bizeps in einer einzelnen Simulation modellieren kann.

## Höchstleistungsrechnen unterstützt Modellierungen auf dem Weg zur individualisierten Medizin

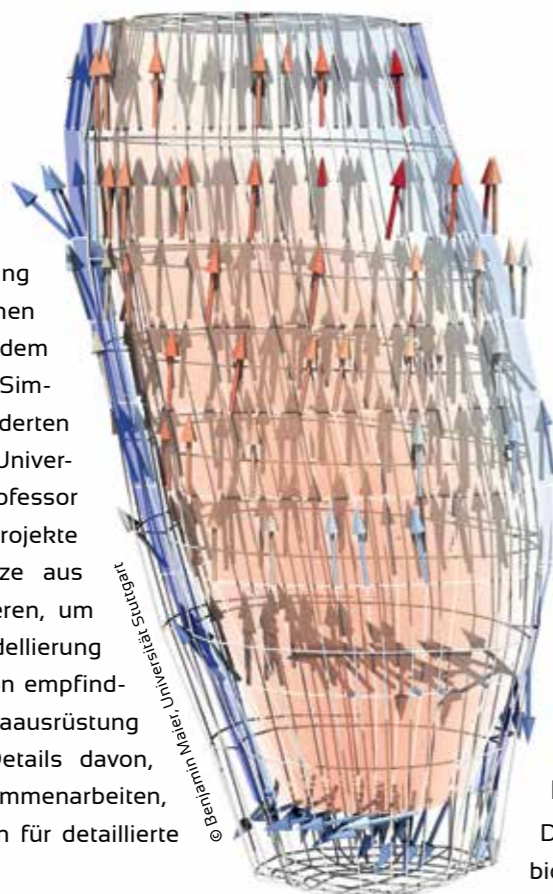
Die iterative Kombination von Computermodellierung und Experimenten hilft Wissenschaftlern bei der effizienten Entwicklung biomechanischer Modelle, die individuelle



© Benjamin Maier, Universität Stuttgart

Der Bizeps dient zur Beugung des Ellenbogens. Er ist mit der Elle (rechts) und dem Oberarmknochen (links unten) verbunden.

Simulation der Muskelkontraktion und der Richtung der inneren Kräfte.



Ansätze zur Verbesserung der Gesundheit ermöglichen könnten. Zusammen mit dem Team und als Teil von Sim-Tech, einem DFG-geförderten Exzellenzcluster an der Universität Stuttgart, leitet Professor Oliver Röhrle mehrere Projekte mit dem Ziel, Datensätze aus Experimenten zu integrieren, um die biomechanische Modellierung zu verbessern. Mithilfe von empfindlicher Sensor- und Kameraausrüstung erfasst Röhrle feinste Details davon, wie Muskelgruppen zusammenarbeiten, und nutzt die Daten dann für detaillierte Rechenmodelle.

„Bei SimTech geht es um die Integration von Daten in klassische, differenzialgleichungsbasierte Modelle“, so Röhrle. „Die Integration von experimentellen Daten und Computermodellen ist eine doppelte Herausforderung. Wenn man einerseits ein Modell hat, das durch viele experimentelle Daten gespeist wird, will man das Modell nicht zu sehr an nur einen Datensatz anpassen. Andererseits muss man, wenn man etwas ohne viele Daten modelliert, eine Art von Modell haben, weil die Datenmenge nicht ausreicht.“

Vor kurzem hat das Team seine Muskelmodelle um realitätsnahe Sehnen ergänzt. Dies erhöht zwar die Anzahl der benötigten physikalischen Berechnungen, macht die Modelle aber auch realistischer. Außerdem begann das Team mit der Simulation von Elektromyographie-Signalen, die es Medizinern ermöglichen, Erkrankungen zu erkennen, die sich auf die motorischen Fähigkeiten auswirken.

„Das ist eines der Bindeglieder zum experimentellen Teil unserer Arbeit“, sagt Benjamin Maier, Forschungsassistent an der Universität Stuttgart. „Diese sogenannten EMG-Signale messen das elektrische Potential auf der Haut. Um dies genau zu modellieren, müssen wir viele Muskelfasern in einer hochparallelen Umgebung simulieren können.“

#### Integrieren der Lösung inverser Probleme

Das gemeinsame interdisziplinäre biomechanische Forschungsprojekt an der Universität Stuttgart steht nun

vor seiner nächsten großen Herausforderung:

Simulationen zur Bestätigung der Ergebnisse aus Experimenten sollen in den Hintergrund rücken, Modellierungen und Simulationen zu deren Steuerung hingegen in den Vordergrund. „Ein wichtiger Aspekt der Simulationswissenschaft ist der Übergang von der Lösung von Vorwärtsproblemen zur Lösung inverser Probleme“, sagt Göddeke. „Wir haben jetzt erst den Punkt erreicht, an dem wir anfangen können, uns auf Inversionen zu konzentrieren.“

Während Supercomputer immer leistungsfähiger werden, freut sich das Team auch darauf, einzelne Simulationen von Muskeln miteinander zu verknüpfen. Die Modellierung eines Bizeps und eines Trizeps etwa, die sich gemeinsam in einem menschlichen Arm bewegen, könnte uns besser verstehen lassen, wie Muskelsysteme funktionieren.

(EG)

## Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer 2020

Albers M, Meysonnat PS, Fernex D, et al. 2020. **Drag reduction and energy saving by spanwise traveling transversal surface waves for flat plate flow.** Flow Turbul Combust. 105: 125-157.

Atzori M, Vinuesa R, Fahland G, et al. 2020. **Aerodynamic effects of uniform blowing and suction on a NACA4412 airfoil.** Flow Turbulence Combust. 105: 735-759.

Badalov SV, Wilhelm R, Schmidt WG. 2020. **Photocatalytic properties of graphene-supported titania clusters from density-functional theory.** J Comput Chem. 41(21): 1921-1930.

Beck A, Dürrwächter J, Kuhn T, et al. 2020. **hp-Multilevel Monte Carlo methods for uncertainty quantification of compressible Navier-Stokes equations.** SIAM J Sci Comput. 42(4): B1067-B1091.

Bellwied R, Borsanyi S, Fodor Z, et al. 2020. **Off-diagonal correlators of conserved charges from lattice QCD and experiment.** Phys Rev D. 101: 034506.

Bhowmik A, Halder SK, Alon OE. 2020. **Impact of the transverse direction on the many-body tunneling dynamics in a two-dimensional bosonic Josephson junction.** Sci Rep-UK. 10: 21476.

Biktagirov T, Schmidt WG, Gerstmann U. 2020. **Spin decontamination for magnetic dipolar coupling calculations: application to high-spin molecules and solid-state spin qubits.** Phys Rev Res. 2: 022024(R).

Bocchini A, Eigner C, Silberhorn C, et al. 2020. **Understanding gray track formation in KTP: Ti3+ centers studied from first principles.** Phys Rev Materials. 4: 124402.

Borsanyi S, Fodor Z, Guenther JN, et al. 2020. **The QCD crossover at finite chemical potential from lattice simulations.** Phys Rev Lett. 125: 052001.

Cappellini G, Bosin A, Serra G, et al. 2020. **Electronic and optical properties of small metal fluoride clusters.** ACS Omega 5(22): 13268-13277.

Chatwell RS, Vrabec J. 2020. **Bulk viscosity of liquid noble gases.** J Chem Phys. 152: 094503.

Chepkasov IV, Ghorbani-Asl M, Popov ZI, et al. 2020. **Alkali metals inside bi-layer graphene and MoS2: insights from first-principles calculations.** Nano Energy. 75: 104927.

Chiarini A, Quadrio M, Auteri F. 2020. **A direction-splitting Navier–Stokes solver on co-located grids.** J Comp Phys. ePub Nov 26.

Chu X, Liu Y, Wang W, et al. 2020. **Turbulence, pseudo-turbulence, and local flow topology in dispersed bubbly flow.** Phys Fluids. 32: 083310.

Chu X, Wang W, Yang G, et al. 2020. **Transport of turbulence across permeable interface in a turbulent channel flow: interface-resolved direct numerical simulation.** Transport Porous Media. ePub Nov. 16.

Conroy AT, Ballance CP, Ramsbottom CA, Keenan FP. 2020. **Electron-impact excitation of Fe i.** Astrophys J. 902(1): 68.

Cormier M, Bühler M, Mauz M, et al. 2020. **CFD prediction of tip vortex aging in the wake of a multi-MW wind turbine.** J Phys Conf Ser. 1618: 06029.

Dehnhardt N, Luy JN, Klement P, et al. 2020. **Mixed group 14-15 metalates as model compounds for doped lead halide perovskites.** Angew Chem Int Ed. 10:1002/anie.202014696.

Diewald F, Lautenschlaeger MP, Stephan S, et al. 2020. **Molecular dynamics and phase field simulations of droplets on surfaces with wettability gradient.** Comp Methods Appl Mechan Eng. 361: 112773.

Donnari M, Pillepich A, Nelson, et al. 2021. **Quenched fractions in the IllustrisTNG simulations: comparison with observations and other theoretical models.** Mon Not R Astron Soc. 599(3): 4004-4024. (ePub Oct 10, 2020).

Dovesi R, Pascale F, Civalleri B, et al. 2020. **The CRYSTAL code, 1976-2020 and beyond, a long story.** J Chem Phys. 152: 204111.

Dürrwächter J, Kurz M, Kopper P, et al. 2020. **An efficient sliding mesh interface method for high-order discontinuous Galerkin schemes.** Comput Fluids. ePub Dec 30.

Ehrle M, Waldmann, A, Lutz T, Krämer E. 2020. **Simulation of transonic buffet with an automated zonal DES approach.** CEAS Aeronautical J. 11: 1025-1036.

Encinar JA, Menendez JA. 2020. **Potential drugs targeting early innate immune evasion of SARS-coronavirus 2 via 2'-O-methylation of viral RNA.** Viruses. 12(5): 525.

Evrin C, Chu X, Laurien E. 2020. **Analysis of thermal mixing characteristics in different T-junction configurations.** Int J Heat Mass Tran. 158: 120019.

Evrin C, Laurien E. 2020. **Numerical study of thermal mixing mechanisms in T-junctions.** Appl Therm Eng. 116155.

Fernex D, Semaan R, Albers M, et al. 2020. **Actuation response model from sparse data for wall turbulence drag reduction.** Phys Rev Fluids. 5: 073901.

Flad D, Beck A, Guthke P. 2020. **A large eddy simulation method for DGSEM using non-linearly optimized relaxation filters.** J Comput Phys. 408: 109303.

Frey F, Thiemeier J, Öhrle C, et al. 2020. **Aerodynamic interactions on Airbus Helicopters' compound helicopter RACER in cruise flight.** J Am Helicopter Soc. 65(4): 1-14.

Ghaderzadeh S, Ladygin V, Ghorbani-Asl M, et al. 2020. **Free-standing and supported MoS monolayers under cluster irradiation: insights from molecular dynamics simulations.** ACS Appl Mater Interfaces. 12(33): 37454-37463.

Grandin M, Turc L, Battarbee M, et al. 2020. **Hybrid-Vlasov simulation of auroral proton precipitation in the cusps: comparison of northward and southward interplanetary magnetic field driving.** J Space Weather Space Clim. 10: 51.

Guettler N, Knee P, Ye Q, Tiedje O. 2020. **Initial droplet conditions in numerical spray painting by electrostatic rotary bell sprayers.** J Coatings Technol Res. 17: 1091-1104.

Guevara-Carrion G, Fingerhut R, Vrabec J. 2020. **Fick diffusion coefficient matrix of a quaternary liquid mixture by molecular dynamics.** J Phys Chem B. 124(22): 4527-4535.

Guo Z, Kloker MJ. 2020. **Effects of low-frequency noise in crossflow transition control.** J Am Inst Aeronaut Astronaut. 58(3).

Hajian CSS, Haringa C, Noorman H, Takors R. 2020. **Predicting by-product gradients of baker's yeast production at industrial scale: a practical simulation approach.** Processes 8: 1554.

Hanau K, Schwan S, Schäfer MR, et al. 2020. **Towards understanding the reactivity and optical properties of organosulfur sulfide clusters.** Angew Chem Int Ed. 10.1002/anie.202011370.

He Q, Li H, Li R, et al. 2020. **Constraining the inner density slope of massive galaxy clusters.** Mon Not R Astron Soc. 496(4): 4717-4733.

Heilmann N, Wolf M, Kozłowska M, et al. 2020. **Sampling of the conformational landscape of small proteins with Monte Carlo methods.** Sci Rep-UK. 10: 18211.

Herff S, Pausch K, Nawroth H, et al. 2020. **Impact of burner plenum acoustics on the sound emission of a turbulent lean premixed open flame.** Int J Spray Combust. 12(1): 1-20.

Hitz T, Jöns S, Heinen M, et al. 2020. **Comparison of macro- and microscopic solutions of the Riemann problem II. Two-phase shock tube.** J Comput Phys. ePub Nov 27.

Hitz T, Keim J, Munz CD, Rohde C. 2020. **A parabolic relaxation model for the Navier-Stokes-Korteweg equations.** J Comput Phys. 421: 109714.

Holtgrewe K, Mahatha SK, Sheverdyayeva PM, et al. 2020. **Topologization of  $\beta$ -antimonene on Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> via proximity effects.** Sci Rep-UK. 10: 14619.

Homes S, Heinen M, Vrabec J, Fischer J. 2020. **Evaporation driven by conductive heat transport.** Mol Phys. e1836410.

Huang X, Albers M, Meysonnat, et al. 2020. **Analysis of the effect of freestream turbulence on dynamic stall of wind turbine blades.** Int J Heat Fluid Flow. 85: 108668.

Kashi A. 2020. **Wind collision and accretion simulations of the massive binary system HD 166734.** Mon Not R Astron Soc. 492(4): 5261-5270.

Kijanski N, Krach D, Steeb H. 2020. **An SPH approach for non-spherical particles immersed in Newtonian fluids.** Materials. 13(10): 2324.

Kim Y, Madsen HA, Aparicio-Sanchez M, et al. 2020. **Assessment of blade element momentum codes under varying turbulence levels by comparing with blade resolved computational fluid dynamics.** Renew Energ. 160: 788-802.

Klein BP, Harman SE, Ruppenthal L, et al. 2020. **Enhanced bonding of pentagon–heptagon defects in graphene to metal surfaces: insights from the adsorption of azulene and naphthalene to Pt(111).** Chem Mater. 32(3): 1041-1053.

Kohns M, Marx J, Langenbach K. 2020. **Relative permittivity of Stockmayer-type model fluids from MD simulations and COFFEE.** J Chem Eng Data. 65(12): 5891-5896.

Krenz M, Gerstmann U, Schmidt WG. 2020. **Photochemical ring opening of oxirane modeled by constrained density functional theory.** ACS Omega 5(37): 24057-24063.

Kretschmer S, Lehnert T, Kaiser U, Krasheninnikov AV. 2020. **Formation of defects in two-dimensional MoS<sub>2</sub> in the transmission electron microscope at electron energies below the knock-on threshold: the role of electronic excitations.** Nano Lett. 20(4): 2865-2870.

Kulkarni A, Garcia EJ, Damone A, et al. 2020. **A force field for poly(oxymethylene) dimethyl ethers (OMEn).** J Chem Theory Comput. 16(4): 2517-2528.

Kuschel M, Takors R. 2020. **Simulated oxygen and glucose gradients as a prerequisite for predicting industrial scale performance *a priori*.** Biotech Bioeng. 117(9): 2760-2770.

Lamoth M, Jones T, Plodinec M, et al. 2020. **Nanocatalysts unravel the selective state of Ag.** Chem Cat Chem. 12: 1-13.

Lechte C, Conway GD, Görler T, Happel T, and the ASDEX Upgrade team. 2020. **Fullwave Doppler reflectometry simulations for density turbulence spectra in ASDEX Upgrade using GENE and IPF-FD3D.** Plasma Sci Technol. 22: 064006.

Lesnicki D, Zhang Z, Bonn M, et al. 2020. **Oberflächenladungen an der CaF<sub>2</sub>-Wasser-Grenzfläche erlauben eine sehr schnelle intermolekulare Übertragung von Schwingungsenergie.** Angew Chem Int Ed. 59: 13116-13121.

Letzgus J, Heßler M, Krämer E. 2020. **Simulation of dynamic stall on an elastic rotor in high-speed turn flight.** J Am Helicopter Soc. 65(2): 1-12.

Letzgus P, El Bahlouli A, Leukauf D, et al. 2020. **Microscale CFD simulations of a wind energy test site in the Swabian Alps with mesoscale based inflow data.** J Phys Conf Ser. 1618: 062021.

Lintermann A, Schröder W. 2020. **Lattice-Boltzmann simulations for complex geometries on high-performance computers.** CEAS Aeronautical J. 11: 745-766.

Lipkowitz JT, Nativel D, Cooper S, et al. 2020. **Numerical investigation of remote ignition in shock tubes.** Flow Turbul Combust. ePub Oct. 3.

Lode AUJ, Lévêque C, Madsen LB, et al. 2020. **Colloquium: multiconfigurational time-dependent Hartree approaches for indistinguishable particles.** Rev Mod Phys. 92: 011001

Loureiro DD, Reutzsch J, Kronenburg, et al. 2020. **Primary breakup regimes for cryogenic flash atomization.** Int J Multiphase Flow. 132: 103405.

Mausbach P, Fingerhut R, Vrabec J. 2020. **Structure and dynamics of the Lennard-Jones fcc-solid focusing on melting precursors.** J Chem Phys. 153: 104506.

Moghadam SMA, Loosen S, Meinke M, Schröder W. 2020. **Reduced-order analysis of the acoustic near field of a ducted axial fan.** Int J Heat Fluid Flow. 85: 108657.

Mohapatra CK, Schmidt DP, Sforzo BA, et al. 2020. **Collaborative investigation of the internal flow and near-nozzle flow of an eight-hole gasoline injector (Engine Combustion Network Spray G).** Int J Engine Res. ePub Jun 10.

Mori P, Schwitalla T, Ware M, et al. 2020. **Downscaling of seasonal ensemble forecasts to the convection-permitting scale over the Horn of Africa using the WRF model.** Int J Climatology. Epub Aug 22.

Mustafa G, Nandekar PP, Mukherjee G, et al. 2020. **The effect of force-field parameters on cytochrome P450-membrane interactions: structure and dynamics.** Sci Rep-UK. 10: 7284.

Nathanail A. 2020. **A toy model for the electromagnetic output of neutron star merger prompt collapse to a black hole: magnetised neutron star collisions.** Astrophys J. 892(1): 35.

Nathanail A, Fromm CM, Porth O, et al. 2020. **Plasmoid formation in global GRMHD simulations and AGN flares.** Mon Not R Astron Soc. 495(2): 1549-1565.

Nathanail A, Gill R, Porth O, et al. 2020. **On the opening angle of magnetised jets from neutron-star mergers: the case of GRB170817A.** Mon Not R Astron Soc. 495(4): 3780-3787.

Navickas M, Giriunas L, Kalendra V, et al. 2020. **Electron paramagnetic resonance study of ferroelectric phase transition and dynamic effects in a Mn<sup>2+</sup> doped (NH<sub>4</sub>)(Zn(HCOO)<sub>3</sub>) hybrid formate framework.** Phys Chem Chem Phys. 22: 8513-8521.

Oman KA, Bahe YM, Healy J, et al. 2020. **A homogeneous measurement of the delay between the onsets of gas stripping and star formation quenching in satellite galaxies of groups and clusters.** Mon Not R Astron Soc. ePub Dec 14.

Pausch K, Herff S, Schröder W. 2020. **Noise sources of an unconfined and a confined swirl burner.** J Sound Vibr. 475: 115293.

Pindzola MS, Colgan J, Ciappina MF. 2020. **Neutron ionization of helium near the neutron-alpha particle collision resonance.** J Phys B: At Mol Opt Phys. 53(29): 205201.

Pindzola MS, Colgan JP. 2020. **Electron-impact double ionization of He (1s2s 3S).** J Phys B: At Mol Phys. ePub Dec 23.

Pinzon J, Siebenborn M, Vogel A. 2020. **Parallel 3d shape optimization for cellular composites on large distributed-memory clusters.** J Adv Simul Sci Eng. 7(1): 117-135.

Ren W, Reutzsich J, Weigand B. 2020. **Direct numerical simulation of water droplets in turbulent flow.** Fluids 5(3): 158.

Repetto P. 2020. **Tensorial solution of the Poisson equation and the dark matter amount and distribution of UGC 8490 and UGC 9753.** Mon Not R Astron Soc. 499(3): 3381-3398.

Reutzsich J, Kieffer-Roth C, Weigand B. 2020. **A consistent method for direct numerical simulation of droplet evaporation.** J Comput Phys. 413: 109455.

Schäfer F, Bastarrachea-Magnani MA, Lode AUJ, et al. 2020. **Spectral structure and many-body dynamics of ultracold bosons in a double-well.** Entropy-Switz. 22(4): 382.

Shang Z, Hashemi A, Berencén Y, et al. 2020. **Local vibrational modes of Si vacancy spin qubits in SiC.** Phys Rev B. 101: 144109.

Scheufele K, Subramanian S, Mang A, et al. 2020. **Image-driven biophysical tumor growth model calibration.** SIAM J Sci Comput. 42(3): B549-B580.

Schnücke G, Kraiss N, Bolemann T, Gassner GJ. 2020. **Entropy stable discontinuous Galerkin schemes on moving meshes for hyperbolic conservation laws.** J Sci Comput. 82: 69.

Schröder M. 2020. **Transforming high-dimensional potential energy surfaces into a canonical polyadic decomposition using Monte Carlo methods.** J Chem Phys. 152: 024108.

Schwitalla T, Warrach-Sagi K, Wulfmeyer V, Resch M\*. 2020. **Near global scale high-resolution seasonal simulations with WRF-NOAHMP v.3.8.1.** Geosci Model Dev. 13: 1959-1974.

Sebastian R, Lürkens T, Schreyer AM. 2020. **Flow field around a spanwise-inclined jet in supersonic crossflow.** Aerosp Sci Technol. 106: 106209.

Shen X, Vogelsberger M, Nelson D, et al. 2020. **High-redshift JWST predictions from IllustrisTNG: II. Galaxy line and continuum spectral indices and dust attenuation curves.** Mon Not R Astron Soc. 495(4): 4747-4768.

Stephan S, Hasse H. 2020. **Interfacial properties of binary mixtures of simple fluids and their relation to the phase diagram.** Phys Chem Chem Phys. 22: 12544-12564.

Svyantyy VA, Kushnarenko VG. 2020. **Ein Ansatz zur gleichmässigen Lastverteilung zwischen Prozessoren des Mind-Simulators der dynamischen Netzobjekte mit verteilten Parametern.** Problems of Modeling and Design Automatization 1(15): 5-14.

Théveniaut H, Lan Z, Meyer G, Alet F. 2020. **Transition to a many-body localized regime in a two-dimensional disordered quantum dimer model.** Phys Rev Res 2: 033154.

Thiele L, Villaescusa-Navarro F, Spergel DN, et al. 2020. **Teaching neural networks to generate Fast Sunyaev-Zel'dovich Maps.** Astrophys J. 902: 129.

Thundathil R, Schwitalla T, Berhrendt A, et al. 2020. **Assimilation of Lidar water vapour mixing ratio and temperature profiles into a convection-permitting model.** J Meteorol Soc Japan. 98(5): 959-986.

Übler H, Genel S, Sternberg A, et al. 2021. **The kinematics and dark matter fractions of TNG50 galaxies at z=2 from an observational perspective.** Mon Not R Astron Soc. 500(4): 4597-4619. (ePub Nov 10, 2020).

von der Grün M, Zamre P, Chen Y, et al. 2020. **Numerical study and LiDAR based validation of the wind field in urban sites.** J Phys Conf Ser. 1618: 042009.

Wei Y, Ghorbani-Asi M, Krasheninnikov A. 2020. **Tailoring the electronic and magnetic properties of hematene by surface passivation: insights from first-principles calculations.** J Phys Chem C. 124(41): 22784-22792.

Weih LR, Olivares H, Rezzolla L. 2020. **Two-moment scheme for general-relativistic radiation hydrodynamics: a systematic description and new applications.** Mon Not R Astron Soc. 495(2): 2285-2304.

Weih LR, Gabbana A, Dimeoni D, et al. 2020. **Beyond moments: relativistic Lattice-Boltzmann methods for radiative transport in computational astrophysics.** Mon Not R Astron Soc. 498(3): 3374-3394.

Wenz F, Boorsma K, Lutz T, Krämer E. 2020. **Cross-correlation-based approach to align turbulent inflow between CFD and lower-fidelity-codes in wind turbine simulations.** J Phys Conf Ser. 1618: 062005.

Wenzel C, Gibis T, Kloker M, Rist U. 2020. **Reynolds analogy factor in self-similar compressible turbulent boundary layers with pressure gradients.** J Fluid Mech. ePub Dec 2.

Wittig H, Gérardin A, Cé M, et al. 2020. **Lattice calculation of the hadronic leading order contribution to the muon g-2.** EPJ Web Conf. 234: 01016.

Wragg J, Ballance C, van der Hart H. 2020. **Breit-Pauli R-matrix approach for the time-dependent investigation of ultrafast processes.** Comput Phys Commun. 254: 107274.

Wu Z, Bangga G, Lutz T, et al. 2020. **Insights into airfoil response to sinusoidal gusty inflow by oscillating vanes.** Phys Fluids. 32: 125107.

Wu Z, Wang Q, Bangga G, et al. 2020. **Responses of vertical axis wind turbines to gusty winds.** P I Mech Eng A-J Pow. ePub March 12.

Zamre P, Dessoky A, von der Grün M, et al. 2020. **Numerical study of the impact of urban terrain on the loads and performance of a small vertical axis wind turbine.** J Phys Conf Ser. 1618: 042005.

Zeman J, Kondrat S, Holm C. 2020. **Bulk ionic screening lengths from extremely large-scale molecular dynamics simulations.** Chem Commun. 56: 15635-15638.

Zirwes T, Zhang F, Habisreuther P, et al. 2020. **Identification of flame regimes in partially premixed combustion from a quasi-DNS dataset.** Flow Turbul Combust. ePub Oct 29.

\* zeigt HLRS-Mitarbeiter



## In unserem Rechenraum

### Hewlett Packard Enterprise Apollo (Hawk)

2020 installierte das HLRS seinen neuen Flaggschiff-Supercomputer, genannt Hawk. Mit einer maximalen LINPACK-Benchmark-Leistung von 19,3 Petaflops ist Hawk in November 2020 bei seinem Debüt auf der Top500-Liste der schnellsten Supercomputer der Welt auf Platz 16 gelandet. Das System basiert auf EPYC-Prozessoren der zweiten Generation von AMD und ist für die anhaltende Anwendungsleistung und hohe Skalierbarkeit optimiert, die für groß angelegte Simulationen, insbesondere für Ingenieur- und angewandte Wissenschaften, erforderlich sind. Im Dezember 2020 kündigte das HLRS die bevorstehende Erweiterung von Hawk um HPE Apollo-Systeme mit NVIDIA-Grafikprozessoren (GPUs) an. Die Erweiterung wird die Kapazität des Zentrums für Deep-Learning- und Künstliche-Intelligenz-Anwendungen erhöhen und neue Arten von Hybrid-Computing-Workflows ermöglichen, die HPC mit Big-Data-Methoden integrieren.

#### System: Hewlett Packard Enterprise Apollo

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

#### System: Apollo 6500 GenIO Plus (wird in 2021 installiert)

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

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

### Cray CS-Storm

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

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

## Cray Urika-GX

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

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

## NEC Cluster (Vulcan)

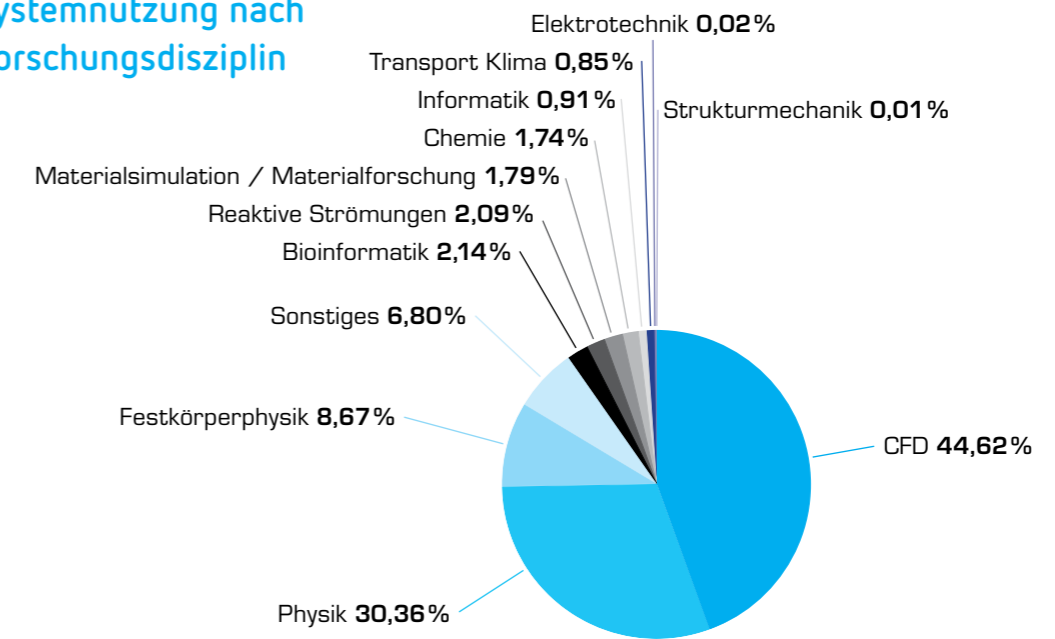
Dieser Standard-PC-Cluster ist seit 2009 am HLRS in Betrieb. Seine Konfiguration wurde fortlaufend gemäß der kontinuierlich steigenden Anforderungen angepasst, dies umfasste u. a. die CPUs, GPUs und Komponenten für das Vektorrechnen. Seine derzeitige Konfiguration gestaltet sich wie folgt:

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

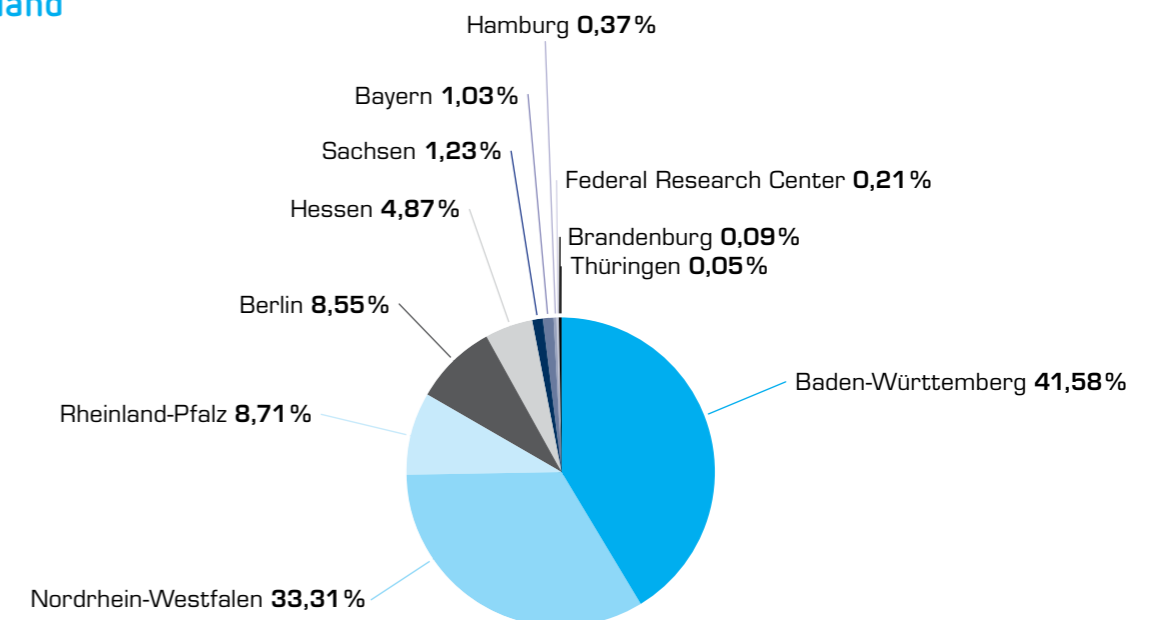
## Unsere Nutzer

2020 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Flaggschiff-Supercomputer acht neue Forschungsprojekte („large-scale projects“: jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 2,72 Milliarden Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS acht internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 440 Millionen Core-Stunden. 2020 wurden auf Hazel Hen und Hawk insgesamt 129 Projekte gerechnet.

### Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



### Systemnutzung nach Bundesland





# Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Zusätzlich zur Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Forscher und Ingenieure aus Wissenschaft und Industrie werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS in den Bereichen Höchstleistungsrechnen, Künstlicher 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 in Deutschland, Europa und weltweit zu bewältigen. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2020.

Erfahren Sie mehr über unsere aktuellen Projekte auf: [www.hlrs.de/about-us/research/current-projects/](http://www.hlrs.de/about-us/research/current-projects/)

Projekt	Dauer	Gefördert durch
<b>aqua3S</b> → Entwickelt ein neues System zur Erkennung von Bedrohungen der Sicherheit des Trinkwassers durch Kombination von Daten modernster Sensoren und anderen Detektionsmechanismen.	<b>September 2019 – August 2022</b>	<b>EU</b>
<b>bwHPC-S5</b> → Koordiniert die Unterstützung der HPC-Nutzer in Baden-Württemberg und die Umsetzung der entsprechenden Maßnahmen und Aktivitäten, einschließlich Data Intensive Computing (DIC) und Large Scale Scientific Data Management (LS <sup>2</sup> DM).	<b>Juli 2018 – März 2021</b>	<b>MWK</b>
<b>bwVisu II</b> → Entwickelt einen Dienst zur Remote-Visualisierung wissenschaftlicher Daten, insbesondere zur Sicherstellung einer hohen Skalierbarkeit durch Cloud-Technologien.	<b>August 2014 – Oktober 2020</b>	<b>MWK</b>
<b>Cape Reviso</b> → Entwickelt mithilfe von Maschinellem Lernen, der Sensortechnik, Netzwerkanalyse und der Virtuellen Realität ein Werkzeug für die Stadt- und Verkehrsplanung, das Konflikte zwischen Fußgängern und Radfahrenden im Stadtraum analysieren und reduzieren kann.	<b>Juli 2020 – Juni 2023</b>	<b>BMVI</b>
<b>CASTIEL</b> → Koordiniert und unterstützt die Aktivitäten des EuroCC Projekts durch die Förderung von Zusammenarbeit sowie Austausch von Wissen und Fähigkeiten zwischen nationalen HPC Kompetenzzentren in ganz Europa.	<b>September 2020 – August 2022</b>	<b>EU</b>
<b>CATALYST</b> → Erforscht Methoden zur Analyse von Modellierungs- und Simulationsdaten für ein Rahmenkonzept, das HPC und High-Performance-Datenanalyse kombiniert.	<b>Oktober 2016 – Dezember 2021</b>	<b>MWK</b>

<b>ChEESE</b> → Bereitet europäische Referenz-Codes für kommende Pre-Exascale- und Exascale-Supercomputersysteme vor, explizit für Bereiche wie computergestützte Seismologie, Magnetohydrodynamik, physikalische Vulkanologie, Tsunamis und die Erdbebenüberwachung.	<b>November 2018 – Oktober 2021</b>	<b>EU</b>
<b>CYBELE</b> → Integriert Tools aus den Bereichen Hoch- und Höchstleistungsrechnen, High-Performance-Datenanalyse und Cloud-Computing, um die Entwicklung effizienter, datengesteuerter Methoden zur Steigerung der landwirtschaftlichen Produktivität und zur Verringerung der Nahrungsmittelknappheit zu unterstützen.	<b>Januar 2019 – Dezember 2021</b>	<b>EU</b>
<b>EOPEN</b> → Geht technische Hindernisse an, die sich aus den gigantischen Datenmengen von der Erdbeobachtung ergeben, und versucht skalierbare Methoden zur Harmonisierung, Standardisierung, Fusion und zum Datenaustausch sicherzustellen.	<b>November 2017 – Oktober 2020</b>	<b>EU</b>
<b>EuroCC</b> → Baut als vom HLRS koordiniertes Projekt europaweit nationale HPC Kompetenzzentren auf und erzielt ein gemeinsames hohes Maß an Expertise in den Bereiche Hoch- und Höchstleistungsrechnen, High-Performance-Datenanalyse und Künstlicher Intelligenz.	<b>September 2020 – August 2022</b>	<b>EU</b>
<b>EuroLab-4-HPC 2</b> → Strebt die Einrichtung eines europäischen Exzellenzzentrums im Bereich HPC-Systeme an.	<b>Mai 2018 – April 2020</b>	<b>EU</b>
<b>EUXDAT</b> → Bietet eine Plattform, die HPC- und Cloud-Infrastrukturen vereint, um große Mengen heterogener Daten zu verwalten und zu verarbeiten. Ein Schwerpunkt des Projekts ist die Förderung nachhaltiger Entwicklung in der Landwirtschaft.	<b>November 2017 – Oktober 2020</b>	<b>EU</b>
<b>EXCELLERAT</b> → Unterstützt die Entwicklung wichtiger Codes für High-Tech-Engineering, einschließlich der Maximierung ihrer Skalierbarkeit auf immer größere Rechnerarchitekturen, und fördert den Technologietransfer in die Industrie.	<b>Dezember 2018 – November 2021</b>	<b>EU</b>
<b>EXPERTISE</b> → Ein europäisches Ausbildungsnetzwerk für die nächste Generation von Ingenieuren in den Bereichen Maschinenbau und IT. Das Ziel ist, die Entwicklung fortschrittlicher Tools zur Analyse der Strömungsdynamik in großen Modellen von Turbinenkomponenten und schließlich das virtuelle Testen einer ganzen Maschine zu ermöglichen.	<b>März 2017 – Februar 2020</b>	<b>EU</b>

**FF4EuroHPC**                      **September 2020 – August 2023**                      **EU**  
→ Richtet sich an kleine und mittelständische Unternehmen (KMUs) in Europa und unterstützt diese, damit sie von den Vorteilen der Höchstleistungsrechen-Technologien und Services profitieren können.

**FocusCoE**                      **Dezember 2018 – November 2021**                      **EU**  
→ Koordiniert die strategische Zusammenarbeit zwischen EU-geförderten Exzellenzzentren und sensibilisiert die Wissenschaft und Wirtschaft für die Vorteile extremer Skalierung, um sie für die Bewältigung wissenschaftlicher, industrieller oder gesellschaftlicher Herausforderungen zu nutzen.

**HiDALGO**                      **Dezember 2018 – November 2021**                      **EU**  
→ Entwickelt neue Methoden, Algorithmen und Software für HPC und High-Performance-Datenanalyse, um die komplexen Prozesse im Zusammenhang mit großen globalen Herausforderungen wie Flucht, Luftverschmutzung und der Verbreitung von Desinformation über soziale Medien zu modellieren und zu simulieren.

**HPC-Europa 3**                      **Mai 2017 – Oktober 2021**                      **EU**  
→ Fördert die länderübergreifende Zusammenarbeit zwischen EU-Wissenschaftlern (insbesondere Nachwuchsforschern), die an HPC-bezogenen Themen wie Anwendungen, Tools und Middleware arbeiten.

**HPCWE**                      **Juni 2019 – Mai 2021**                      **EU**  
→ Ein Konsortium aus akademischen Einrichtungen, HPC-Zentren und Partnern in der Industrie in Europa und Brasilien, das neuartige Algorithmen und modernste Codes entwickelt, um die Entwicklung effizienterer Windenergietechnologien zu unterstützen.

**HyForPV**                      **September 2018 – August 2021**                      **BMWi**  
→ Beabsichtigt die Entwicklung und den Einsatz neuer Prognose-Software zur Einbindung von Photovoltaik (PV) auf dem Energiemarkt und in intelligente Netze durch Simulation der PV-Stromproduktion bei hoher Auflösung.

**InHPC-DE**                      **November 2017 – Dezember 2021**                      **BMBF**  
→ Koordiniert die Integration zwischen den drei deutschen Tier-1-Höchstleistungsrechenzentren, um ein standardisiertes und abdeckendes HPC-Umfeld zu schaffen. Es finanziert 100-Gbit-Netze und bietet Möglichkeiten zur Hochgeschwindigkeits-Datenverwaltung und -visualisierung.

**MoeWe**                      **Juli 2016 – März 2021**                      **ESF, MWK**  
→ Um der Nachfrage an Supercomputer-Experten, insbesondere in der Industrie, entgegen zu kommen, wird in diesem Projekt ein modulares, flexibles Ausbildungsprogramm entwickelt, die „Supercomputing-Akademie“.

**NFDI4Cat**                      **Oktober 2020 – September 2025**                      **DFG**  
→ Schafft eine Deutsche nationale Forschungsdateninfrastruktur für Katalyse und chemisch-technische Forschung.

**OpenForecast**                      **September 2019 – Mai 2021**                      **EU**  
→ Entwickelt Ansätze zur Kombination frei verfügbarer Daten und Supercomputing-Ressourcen, um eine neue Generation von durchsuchbaren Datenprodukten für Bürger, Behörden, Wirtschaftsakteure und Entscheidungsträger in Europa zu schaffen..

**ORCHESTRA**                      **Dezember 2020 – November 2023**                      **EU**  
→ Schafft eine vernetzte Datentransferplattform, die den Aufbau einer pan-europäischen Kohorte ermöglicht, wodurch die Forschung und Maßnahmen zur Corona-Pandemie verbessert und ein Modell für künftige Gesundheitsbedrohungen entwickelt wird.

**OSCCAR**                      **Juni 2018 – Mai 2021**                      **EU**  
→ Verwendet einen neuartigen simulationsbasierten Ansatz zur Entwicklung neuer Systeme zum Schutz von Fahrzeuginsassen bei Unfällen.

**POP2**                      **Dezember 2018 – November 2021**                      **EU**  
→ Ein Exzellenzzentrum, das Leistungsoptimierungs- und Produktivitätsdienstleistungen für HPC-Nutzer an Hochschulen und in der Industrie anbietet.

**PRACE**                      **Mai 2019 – Dezember 2021**                      **EU**  
→ Unterstützt wichtige wissenschaftliche Forschung und technische Entwicklung, um die europäische Wettbewerbsfähigkeit zum Vorteil der Gesellschaft zu verbessern.

**SDC4Lit**                      **Mai 2019 – April 2023**                      **MWK**  
→ Organisiert als Wissenschaftsdatenzentrum für Literatur und interdisziplinäres Forschungsprojekt nachhaltig den Datenlebenszyklus digitaler Literatur. Die daraus resultierende Infrastruktur wird zu einer Datenablage und Forschungsplattform für digitale Geisteswissenschaften.

**SimTech**                      **Oktober 2019 – März 2023**                      **DFG**  
→ Dieser fachgebietsübergreifende Exzellenzcluster an der Universität Stuttgart entwickelt Simulationstechnologien, um eine integrative Systemwissenschaft zu ermöglichen. Das HLRS unterstützt die Entwicklung effizienter Methoden zur Quantifizierung und zum Management von Unsicherheit.

**Simulierte Welten**      **Februar 2011 – Juni 2021**      **MWK**  
 → Bietet Schülern die Möglichkeit, in Zusammenarbeit mit HLRS-Wissenschaftlern 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 des Nutzer-Supports der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren Deutschlands.

**Smart-DASH**      **August 2016 – Januar 2020**      **DFG**  
 → Führt die Entwicklung der C++-Template-Library DASH weiter, die verteilte Datenstrukturen mit flexiblen Datenpartitionierungs-Schemata und einem Satz paralleler Algorithmen bietet.

**SODALITE**      **Februar 2019 – Januar 2022**      **EU**  
 → Strebt die Bereitstellung einer optimierten, robusten, heterogenen Ausführungsumgebung an, die eine operative Transparenz zwischen Cloud- und HPC-Infrastrukturen ermöglicht.

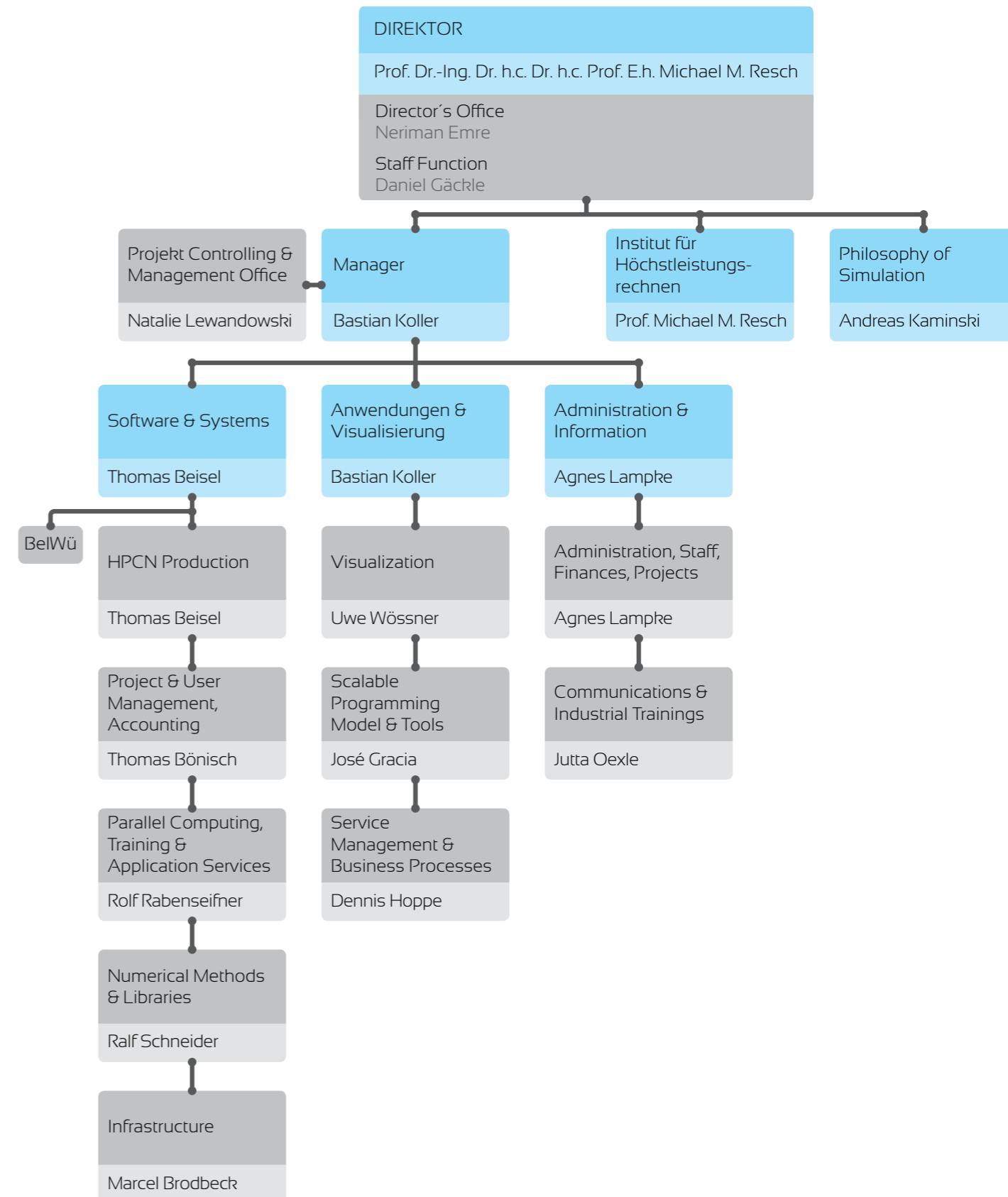
**TranSim**      **Januar 2016 – Februar 2020**      **MWK**  
 → Beim Projekt Transforming Society – Transforming Simulation wird untersucht, wie sich Computersimulationen auf Wissenschaft, Arbeitswelt, Kenntnisse und Werte auswirken.

**Vertrauen in Information**      **August 2020 – Juli 2023**      **MWK**  
 → Entwickelt als multidisziplinäres Forschungsprojekt, das von der Abteilung für Philosophie am HLRS geleitet wird, Methoden, die die Vertrauenswürdigkeit von Computerwissenschaften messen und die Verbreitung von Fehlinformationen begrenzen können.

**Förderorganisationen**

- BMBF**      Bundesministerium für Bildung und Forschung
- BMVI**      Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur
- BMWi**      Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
- DFG**      Deutsche Forschungsgemeinschaft
- ESF**      European Social Fund
- EU**      European Union
- MWK**      Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden Württemberg

# Organigramm



# HPC Fort- und Weiterbildung 2020

2020 bot das HLRS 30 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprechen. Die Kurse fanden an über 100 Tagen in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 1.005 Interessierte an den Kursen teil. Erfahren Sie mehr über bevorstehende Kurse auf unserer Website: [www.hlrs.de/training](http://www.hlrs.de/training)

Date	Location	Topic
● Jan 27-28	Stuttgart	Introduction to Hybrid Programming in HPC
● Jan 29-31	Stuttgart	HPE Porting and Optimization Workshop
● Feb 10-14	Dresden	Parallel Programming (MPI, OpenMP) and Tools
● Feb 24-28	Siegen	Introduction to Computational Fluid Dynamics
● Mar 3-6	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Intermediate) <sup>NEU</sup>
● Mar 5-6	Stuttgart	HPC Technology Transfer Training Course <sup>NEU</sup>
● Mar 9	Stuttgart	Introduction to NEC SX-Aurora TSUBASA Vector Platform <sup>NEU</sup>
<b>Mar 13: Beginn des COVID-19-Lockdowns. Die folgenden Kurse fanden online statt:</b>		
● Apr 20-24	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing <sup>(c)</sup> *
● Apr 20-30	Stuttgart	MOOC: A Short Introduction to MPI One-Sided Communication <sup>(c)</sup> * <sup>NEU</sup>
● Apr 27-30	Stuttgart	Hawk Porting and Optimization Workshop <sup>(c)</sup>
● May 4-5	Wien	Shared Memory Parallelization with OpenMP <sup>(c)</sup> TtT *
● May 5-8	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Advanced) <sup>(c)</sup>
● May 6-8	Wien	Parallelization with MPI <sup>(c)</sup> TtT *
● Jun 9-12	Amsterdam	Parallel Programming with OpenMP and MPI <sup>(c)</sup> TtT *
● Jun 17-19	Wien/Stuttgart/Garching	Introduction to Hybrid Programming in HPC (MPI + X) <sup>(c)</sup> *
● Jun 18-19	Stuttgart/Kaiserslautern	Efficient Parallel Programming with GASPI <sup>(c)</sup> *
● Jun 29 - Jul 1	Stuttgart/Erlangen	Node-Level Performance Engineering <sup>(c)</sup> *
● Jul 7-10	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Intermediate) <sup>(c)</sup> <sup>NEU</sup>
● Jul 14-17	Stuttgart/Garching	Deep Learning and GPU Programming Using OpenACC <sup>(c)</sup> <sup>NEU</sup>
● Aug 24-27	Zürich	Parallel Programming with MPI / OpenMP <sup>(c)</sup>
● Sep 14-18	Stuttgart	35th VI-HPS Tuning Workshop <sup>(c)</sup> *
● Sep 28 - Oct 2	Stuttgart	Computational Fluid Dynamics <sup>(c)</sup>
● Oct 12-16	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (MPI, OpenMP & Advanced Topics) <sup>(c)</sup> *

● Oct 21-23	Stuttgart	ChESEE Advanced Training on HPC for Computational Seismology <sup>(c)</sup> * <sup>NEW</sup>
● Oct 26 - Nov 6	Stuttgart	MOOC: A Short Introduction to MPI One-Sided Communication <sup>(c)</sup> *
● Nov 5-6	Wien	Shared Memory Parallelization with OpenMP <sup>(c)</sup> TtT *
● Nov 23-27	Wien	Parallelization with MPI <sup>(c)</sup> TtT
● Nov 24-27	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Advanced) <sup>(c)</sup>
● Nov 30 - Dec 2	Jülich/Stuttgart	Advanced Parallel Programming with MPI / OpenMP <sup>(c)</sup>
● Dec 7-11	Stuttgart	Fortran for Scientific Computing <sup>(c)</sup>

- Parallel Programming
- Programming Languages for Scientific Computing
- Computational Fluid Dynamics (CFD)
- Training for Special Communities
- Performance Optimization and Debugging
- Data in HPC / Deep Learning / Machine Learning

<sup>(c)</sup> Online Kurse

TtT: Train the Trainer Kurse

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

# Organisation

## Verwaltung und Information

→ Leitung: Agnes Lampke

### Administration

Leitung: Agnes Lampke

Die Verwaltung kümmert sich um alle administrativen Aufgabengebiete des HLRS. Zu den Verantwortungsbereichen gehören insbesondere die Finanzplanung, Controlling und Buchführung, Finanzprojekt- und Projektcontrolling, Rechtsfragen, Personalverwaltung, Personalentwicklung, Beschaffung und Inventarisierung und Unterstützung bei der Vorbereitung von Veranstaltungen.

### Communication und industrielle Trainings

Leitung: Dr. Jutta Oexle

Konzipiert und führt die Kommunikation des HLRS mit der Öffentlichkeit und den Medien aus. Die Abteilung stellt die zentrale Anlaufstelle für alle Fragen zum Zentrum und seiner wissenschaftlichen Arbeit dar und publiziert neue Erkenntnisse, Erfolge und andere Neuigkeiten rund um das Zentrum. Darüber hinaus werden Trainings und Workshops entwickelt und der Industrie und dem Dienstleistungssektor angeboten. So wird breites Interesse geweckt und die Zugänglichkeit zu HPC-Technologien und -lösungen über die traditionelle Gemeinschaft wissenschaftlicher Nutzer hinaus verbessert.

## Anwendungen und Visualisierung

→ Leitung: Dr. Bastian Koller

### Visualization

Leitung: Dr.-Ing. Uwe Wössner

Unterstützt Ingenieure und Wissenschaftler bei der visuellen Analyse von Daten, die durch Simulation auf Höchstleistungscomputern erzeugt werden. Durch die Bereitstellung von Technologien, die Benutzer in visuelle Darstellungen ihrer Daten eintauchen lassen, ermöglicht die Abteilung den Benutzern die direkte Interaktion mit ihnen, wodurch die Analysezeit verringert und neue Arten von Erkenntnissen ermöglicht werden. Die Abteilung verfügt über Expertisen in Tools wie Virtual Reality, Augmented Reality und hat darüber hinaus eine

Methode entwickelt, um Verarbeitungsschritte, die über mehrere Hardwareplattformen verteilt sind, in eine nahtlos verteilte Softwareumgebung zu integrieren.

### Scalable Programming Models and Tools

Leitung: Dr. José Gracia

Führt Forschung zu parallelen Programmiermodellen und Werkzeugen zur Entwicklung paralleler Anwendungen in HPC durch. Derzeit liegt der Fokus auf transparenten globalen Adressräumen mit Hintergrunddatenübertragungen, Task-Parallelismus basierend auf verteilten Datenabhängigkeiten, kollektiven I/O-Operationen und parallelem Debugging. Als Service für HLRS-Nutzer wartet die Gruppe auch den Teil des Software-Stacks, der sich auf Programmiermodelle, Debugging- und Performance-Analyse-Tools bezieht.

### Service Management and Business Processes

Leitung: Dennis Hoppe

Treibt die Konvergenz von Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HPC) und Künstlicher Intelligenz (KI) voran, insbesondere mit dem Ziel, hybride HPC/AI-Workflows auf einer einzigen Infrastruktur zu unterstützen. KI-Lösungen, insbesondere im geschäftlichen Kontext, werden unter Verwendung von Spitzentechnologien entwickelt: Big Data, Maschinelles Lernen und Deep Learning. In diesem Zusammenhang forscht die Gruppe ebenso an Virtualisierungstechnologien wie Containern, der Orchestrierung und dem Scheduling von Workflows. Durch Nutzung von Synergien zwischen Virtualisierung und HPC besitzt die Gruppe zudem Erfahrung in der Entwicklung und dem Betrieb von dynamischen und skalierbaren Cloud-Computing-Diensten. Dabei werden Leistungs- und Verfügbarkeitsüberwachung, elastisches Workflow-Management und ein energieeffizienter Betrieb für föderierte Cloud-Umgebungen effizient eingesetzt.

## Projektcontrolling und -Management

→ Leitung: Dr. Natalie Lewandowski

### Project Controlling and Management Office

Leitung: Dr. Natalie Lewandowski

Das Project Controlling and Management Office (PCMO) ist verantwortlich für das Controlling und die Qualitätssicherung laufender Forschungsprojekte am HLRS sowie für das Management von großen

Drittmittelprojekten, einschließlich Koordinations- und Business Development-Aufgaben. Das PCMO bietet außerdem koordinierende Unterstützung bei der Antragsplanung und -erstellung und fungiert als unterstützende und koordinierende Instanz zwischen der HLRS-Geschäftsführung, den Abteilungsleiter\*innen und der HLRS-Administration in projektbezogenen Angelegenheiten.

## Software und Systeme

→ Leitung: Thomas Beisel

### High-Performance Computing Network – Produktion (HPCN-Production)

Leitung: Thomas Beisel

Ist verantwortlich für den Betrieb aller Plattformen in der Compute Server-Infrastruktur. Diese Abteilung betreibt auch die für die HPC-Systemfunktion erforderliche Netzwerkinfrastruktur und ist für die Sicherheit in Netzwerken und bereitgestellten Plattformen zuständig.

### Numerical Methods and Libraries

Leitung: Dr.-Ing. Ralf Schneider

Stellt numerische Bibliotheken und Compiler für HLRS-Computing-Plattformen bereit. Die Abteilung verfügt über Erfahrung in der Implementierung von Algorithmen auf verschiedenen Prozessoren und HPC-Umgebungen, einschließlich der Vektorisierung basierend auf der Architektur moderner Computer. Sie führt auch Forschungen zur Simulation von Blutfluss und Knochenfrakturen im menschlichen Körper durch und ist verantwortlich für Schulungen, die sich auf Programmiersprachen und numerische Methoden konzentrieren, die für HPC wichtig sind.

### Project & User Management, Accounting

Leitung: Dr.-Ing. Thomas Bönisch

Verantwortet das Nutzermanagement und das Accounting am HLRS. In diesen Bereich fallen auch die Erstellung und die Pflege der Webschnittstellen zum (Bundes-)Projektmanagement und die Informationsbereitstellung für die Nutzer. Außerdem sind in der Abteilung die Aktivitäten des HLRS mit Bezug zur europäischen Supercomputerinfrastruktur PRACE sowie das Datenmanagement gebündelt. Dazu gehören der Betrieb des High-Performance Storage Systems und dessen Weiterentwicklung, die Konzeption neuer Ansätze für das

Datenmanagement der Anwender und die Aktivitäten im Bereich Forschungsdatenmanagement.

### Parallel Computing, Training und Anwendungsdienste

Leitung: Dr. Rolf Rabenseifner

Organisiert das akademische Fortbildungsprogramm des HLRS im Bereich Hoch- und Höchstleistungsrechnen mit den Schwerpunkten Parallele Programmierung, Strömungssimulation, Leistungsoptimierung, wissenschaftlicher Visualisierung, Programmierungssprachen für wissenschaftliches Rechnen und Data in HPC. Des Weiteren organisiert das Team den Review-Prozess der Simulationsprojekte auf dem Bundeshöchstleistungsrechner. In der Betreuung der akademischen Kunden und der damit verbundenen Installation von Software-Paketen liegen die Schwerpunkte im Bereich Strukturmechanik und Chemie. Diese ist auch in den Service für Industriekunden integriert.

## Stabstellen Begleitforschung

### Philosophy of Science and Technology of Computer Simulation

Leitung: Dr. Andreas Kaminski

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

### Infrastructure

Leitung: Marcel Brodbeck

Plant und betreibt Einrichtungen und Infrastruktur am HLRS. Dieser Bereich stellt den zuverlässigen und effizienten Betrieb der HLRS-High-Performance Computing-Systeme sicher, bietet eine komfortable Arbeitsumgebung für HLRS-Wissenschaftler und die Verwaltung und fördert alle Aspekte des energieeffizienten HPC-Betriebs. Das Team ist auch verantwortlich für das Nachhaltigkeitsprogramm des HLRS, das das gesamte HLRS-Personal dabei unterstützt nach zertifizierten Prinzipien der Nachhaltigkeit zu handeln.

© 2021

**Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)**

Universität Stuttgart  
Nobelstrasse 19 | 70569 Stuttgart | Germany

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

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

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

**Leitung:** Dr. Jutta Oexle

**Redaktion:** Christopher M. Williams

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

**Übersetzung:** Proverb oHG

**Produktionsmanager:** F. Rainer Klank

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

**Druck:** Nino Druck GmbH

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

**Institutionelle Zugehörigkeit:**



**Finanzierung für Hawk bereitgestellt von:**



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



# H L R I S

Höchstleistungsrechenzentrum | Stuttgart



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



Simulation der Luftzirkulation in einem automatisierten Reinraum für die Verpackung von Medikamenten.