

Supercomputing:
die nächste
Generation

H L R I S
Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart



2022
Jahresbericht



2022 Jahresbericht

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

Grüßwort

Director's Welcome



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

Mit diesem Jahresbericht legen wir die Bilanz eines Übergangsjahres vor. Zunächst war das Jahr 2022 weiterhin stark geprägt von der Pandemie. Sichtbar wurden diese Auswirkungen in einer Reihe von Bereichen. Die Einnahmen aus Drittmittelprojekten sind 2022 zum ersten Mal seit 2013 wieder gesunken. Ein Teil dieses

With this annual report we present the results of what was in many ways a transitional year for the High-Performance Computing Center Stuttgart (HLRS). At its start, 2022 continued to be strongly influenced by the COVID-19 pandemic, whose effects were noticeable in many areas.

Effekts geht auf die Pandemie zurück, die trotz intensiver Nutzung von Videokonferenzen die Kommunikation mit unserem nationalen und internationalen Netzwerk aus wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Partnern erschwert hat. Dieser Effekt ist aber nur kurzfristig, sodass wir für das Jahr 2023 bereits eine Erholung im Drittmittelbereich sehen und den Höchststand von 2021 entweder erreichen oder sogar übertreffen werden können.

Sehr positive Auswirkungen haben wir im Jahr 2022 im Bereich der Weiterbildung sehen können. Digitales Lernen hat dem HLRS neue Nutzergruppen erschlossen. Auch der Übergang vom reinen Vor-Ort-Lernen zu einem gemischten Konzept aus online und Vor-Ort-Lernen hat dazu geführt, dass wir im Jahr 2022 einen neuen Teilnehmerrekord von 1.400 erreicht haben. Eine Rolle spielt dabei auch, dass die Supercomputing-Akademie des HLRS nach einer Projektphase weitergeführt und verstetigt wurde.

Organisatorisch hat das HLRS sich im Jahr 2022 in seinen Strukturen teilweise neu aufgestellt. Zur Mitte des Jahres trat ein neuer Lenkungsausschuss sein Amt an. Das für die Vergabe von Rechenzeit verantwortliche Gremium wurde beinahe vollständig ausgetauscht. Der neue Lenkungsausschuss ist im Durchschnitt weiblicher, jünger und wissenschaftlich breiter ausgerichtet. Gemeinsam mit dem neuen Vorsitzenden des Lenkungsausschusses Prof. Thomas Ludwig vom Deutschen Klimarechenzentrum in Hamburg freuen wir uns auf eine neue Phase im Bereich der wissenschaftlichen Nutzung unserer Ressourcen.

Unser besonderer Dank gilt den Mitgliedern des bisherigen Lenkungsausschusses. Vor allem gebührt Prof. Wolfgang Nagel Dank, der den Lenkungsausschuss des HLRS seit fast 20 Jahren geleitet hat, und der mit seinem Engagement und seiner Umsicht erheblich zum Erfolg des HLRS in dieser Zeit beigetragen hat.

Die Ergebnisse der Nutzung des Supercomputers des HLRS wurden im Oktober beim 25. Results & Review Workshop am HLRS in Stuttgart vorgestellt. Wir heben

For one, HLRS's income from our funded research projects fell for the first time since 2013. In part, this was a result of a pandemic that, despite frequent meetings by videoconference, made communication with our national and international network of scientific and industrial partners more difficult than usual. We anticipate that this will only be a short-term effect, however, as we are already seeing a recovery of our external funding in 2023 and could once again reach, or even exceed, our peak funding level from 2021.

We saw some very positive effects in 2022 in our continuing and professional education program for high-performance computing. Digital learning has made it possible for HLRS to reach new user groups. The transition from purely face-to-face learning to a blended concept that combines face-to-face and online learning meant that in 2022 a record number of more than 1,400 course participants took advantage of our diverse course offerings. The Supercomputing Academy, our training program for industry, also played a role in this accomplishment, as it has now transitioned from its project phase to become an established and important component of our curriculum.

From an organizational perspective, HLRS underwent a partial structural reorganization in 2022, welcoming a new steering committee into service. This panel, which is responsible for managing grants of computing time, now consists almost entirely of new members. We are delighted that it includes more women, is younger on average, and brings a wider range of scientific expertise. Together with the new committee chair, Prof. Thomas Ludwig of the German Climate Computing Center, we look forward to a new phase in the scientific usage of our resources.

We extend our thanks to the members of our previous steering committee, particularly to Prof. Wolfgang Nagel, who led the body for almost 20 years. His engagement and good judgment contributed enormously to HLRS's success during this period.

in diesem Jahresbericht einige Highlights der Benutzeranwendungen heraus. Alle Beiträge des vergangenen Workshops erscheinen demnächst in den Transactions of the High-Performance Computing Center Stuttgart im Springer Verlag.

In diesem Jahresbericht werden auch Forschungsentwicklungen innerhalb unserer geförderten Projekte vorgestellt, die ein breites Spektrum an Aktivitäten abdecken. Als besonders vielseitig erweist sich der Einsatz von digitalen Zwillingen, mit denen sich hochkomplexe Systeme aller Art simulieren und visualisieren lassen. Die von der Carl-Zeiss-Stiftung geförderte Stuttgarter Forschungsinitiative DiTEnS (Discursive Transformation of Energy Systems) wird Methoden entwickeln, mit denen digitale Zwillinge Entscheidungsprozesse unterstützen, um Städte energieeffizienter zu machen. Das Projekt CIRCE (Computational Immediate Response Center for Emergencies) untersucht Szenarien für den Einsatz von digitalen Zwillingen im Krisenmanagement. Das HLRS erkundet auch gemeinsam mit Partnern das Potenzial digitaler Zwillinge für die Medizin im CASE4Med Projekt, das den Grundstein für ein neues Solution Center für medizinische Anwendungen legt.

Allen diesen Projekten ist gemeinsam, dass sie über die klassischen Simulationsbereiche hinausgehen, indem sie klassische Ansätze gezielt in neue Bereiche weiterentwickeln. Allen diesen Projekten ist aber auch gemeinsam, dass sie das am HLRS entwickelte Konzept der digitalen Konvergenz umsetzen. Dabei wird im Zusammenspiel von Techniken des Internet of Things (Datensammlung), der künstlichen Intelligenz (Analyse von Daten) und des Höchstleistungsrechnens (Simulation komplexer Systeme) das Potential aller verfügbaren digitalen Technologien zur Lösung neuartiger Probleme eingesetzt.

Weiterhin koordiniert das HLRS auch die Etablierung von HPC Kompetenzzentren der EuroHPC JU Initiative. Ende des Jahres sind die ersten Phasen von EuroCC und CASTIEL ausgelaufen und EuroCC 2 und CASTIEL 2

Results from the usage of HLRS's supercomputer were presented in October at the 25th Results & Review Workshop, and this annual report highlights a few of our users' applications. All contributions to the last workshop will also soon appear in the Transactions of the High-Performance Computing Center Stuttgart, published by Springer Verlag.

This annual report also presents new developments in our own research within the scope of our funded projects, covering a wide spectrum of activities. One approach that is proving to be particularly versatile is the use of digital twins, which make it possible to simulate and visualize all sorts of highly complex systems. The Stuttgart Research Initiative DiTEnS (Discursive Transformation of Energy Systems), funded by the Carl Zeiss Foundation, will develop methods in which digital twins support decision making processes to make cities more energy efficient. The CIRCE project (Computational Immediate Response Center for Emergencies) is investigating scenarios for the use of digital twins in crisis management. HLRS and its partners are also exploring the potential of digital twins within CASE4Med, a project that is laying the groundwork for a new Solution Center for medical applications.

What all of these projects have in common is that they extend beyond the world of classical simulation, using classical approaches in a targeted way to contribute to advances in new fields. In addition, all of these projects involve the implementation of a concept of digital convergence that has been developed at HLRS. By bringing together technologies from the Internet of things (data gathering), artificial intelligence (data analysis), and high-performance computing (simulation of complex systems), we are demonstrating the potential that exists in combining today's advanced digital tools to solve new kinds of problems.

In two other projects, HLRS continues to coordinate a Europe-wide effort that is establishing a network of national HPC competence centers within the scope of the EuroHPC Joint Undertaking. The projects EuroCC and

schließen jetzt hier nahtlos an und entwickeln sowohl das deutsche Kompetenzzentrum als auch die europäische Stärkung der Kompetenzen weiter.

Bei all den wissenschaftlichen Themen bleibt das HLRS aber auch ein nationales Betriebs- und Servicezentrum für das Höchstleistungsrechnen. Daher haben wir im Jahr 2022 zwei zentrale Projekte des HLRS vorangebracht. Die Planungen für ein neues Rechnergebäude sind gemeinsam mit dem Universitätsbauamt Stuttgart und Hohenheim, dem Wissenschaftsministerium und dem Finanzministerium des Landes Baden-Württemberg im letzten Jahr intensiv vorangetrieben worden. Ziel ist die Bereitstellung des Gebäudes Ende 2026 für eine neue Rechnergeneration. Gleichzeitig wurde im Jahr 2022 in Zusammenarbeit mit dem Lenkungsausschuss des HLRS die Ausschreibung für diese neue Rechnergeneration vorbereitet, die Anfang 2023 gestartet werden konnte.

Das HLRS steht also im Jahr 2023 vor neuen Herausforderungen, auf die es mit Hilfe seiner Fördergeber aus Land, Bund und Europa, mit Hilfe seiner nationalen und internationalen Kooperationspartner und dank des Engagements der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des HLRS sehr gut vorbereitet ist.

Mit freundlichen Grüßen,



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

CASTIEL concluded their first project phases at the end of 2022, but have transitioned seamlessly into their second project phases as EuroCC 2 and CASTIEL 2. These activities are supporting the development of a German national competence center, and continue to strengthen expertise across Europe.

In the midst of our many scientific activities, HLRS remains at its core a national operations and service center for high-performance computing, and moved forward on two key infrastructure projects in 2022. The first has involved planning a new building, which is taking place in collaboration with the University Construction Office for Stuttgart and Hohenheim, and the science and finance ministries of the State of Baden-Württemberg. Our goal is to complete construction of a new structure that will be needed to accommodate a next-generation supercomputer by the end of 2026. Working together with the HLRS steering committee in 2022, we also completed preparations for the procurement process for this new system, which began at the beginning of 2023.

This means that in 2023 HLRS will face new challenges. With the help of its sponsors at the state, federal, and European levels, with its national and international partners, and thanks to the commitment of its staff, however, it is clear that HLRS is well prepared to meet them.

With best regards,

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

2	Grußwort
8	Supercomputing an den Grenzen
9	Auf dem Weg zur nächsten HPC-Generation
14	Die Zukunft der Atmosphärensimulation: Ein Interview mit Thomas Schwitalla
18	Neuigkeiten
26	Highlights 2022
27	EuroCC und CASTIEL auf dem Weg zur zweiten Förderphase
29	Virtuelle Realität unterstützt beim Umstieg auf erneuerbare Energie
30	HPC für Nachhaltigkeit und Stadtplanung geht an die Öffentlichkeit
31	Medical Solution Center bringt Supercomputing in die Medizintechnikbranche
32	HPC für leisere Ventilatoren und Motoren
35	Neuer HLRS-Lenkungsausschuss beginnt Amtszeit
36	Stuttgarter Forschungsinitiative wird Energiewende in Kommunen unterstützen
38	Anbindung von HPC an Windparks
39	Vertrauen schaffen im Angesicht von Desinformation
40	HLRS in Zahlen
42	User-Forschung
43	Wenn Sterne zusammenstoßen
45	Simulation für bessere Batterien
48	Mit Supercomputern eine sauberere Quelle für weißes Licht entdecken
51	Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2022
58	Über uns
59	In unserem Rechenraum
61	Unsere User-Gruppen
62	Geförderte Forschungsprojekte am HLRS
66	HPC Fort- und Weiterbildung in 2022
68	Workshops und Konferenzen 2022
69	Organigramm
70	Organisation

Supercomputing an den Grenzen

Auf dem Weg zur nächsten HPC-Generation

Mehrere neue Forschungsprojekte am HLRS stellen wichtige technische Herausforderungen des Supercomputing dar und zeigen auf, wie das Zentrum an Lösungen für die Zukunft des Höchstleistungsrechnens arbeitet.

Das Jahr 2022 wird als Beginn der Exascale-Ära in die Geschichte des Supercomputings eingehen. In der Top500-Liste der schnellsten Höchstleistungsrechner der Welt wurde im Juni 2022 das Frontier-System am Oak Ridge National Laboratory in den Vereinigten Staaten als erste Exaflop-Maschine angekündigt – ein Sprung in die nächste Größenordnung der Rechengeschwindigkeit, der der Ausführung von mehr als einer Trillion (10^{18}) Gleitkommaoperationen pro Sekunde entspricht. Auch Europa wird diesen Punkt bald erreichen. Im August 2022 kündigte die EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) an, dass das Jülich Supercomputing Centre (JSC) bald Europas erstes Exascale-System beherbergen wird, während mehrere Pre-Exascale-Systeme derzeit auf dem gesamten Kontinent eingeführt werden. Auch die Partner des JSC im Gauss Centre for Supercomputing – das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) und das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) – bereiten sich auf ihre eigene „Exascale-Reise“ vor. Das HLRS plant derzeit, bis 2027 ein System auf diesem Niveau zu installieren.

Um diese blitzschnelle Geschwindigkeit zu erreichen, reicht es nicht aus, einfach größere Maschinen zu bauen. Denn die Pre-Exascale- und Exascale-Systeme von heute unterscheiden sich grundlegend von den Supercomputern früherer Generationen. Entscheidend ist, dass für den Betrieb und die Kühlung von Systemen dieser Größenordnung erheblich mehr Energie benötigt wird. Daher muss die Energieeffizienz bei Betrieb und Nutzung für finanzielle und ökologische Nachhaltigkeit erheblich maximiert werden. Gleichzeitig stoßen die Hardware-Hersteller an die physikalischen Grenzen der

auf jedem einzelnen Computerchip erreichbaren Leistung. Demnach hat die nach Mooreschem Gesetz erwartete Entwicklung im Grunde genommen ihr Ende erreicht. Im Hinblick auf die Systemarchitektur bedeutet dies, dass die Supercomputer einer früheren Generation wuchsen, indem eine größere Anzahl an Zentraleinheiten (CPU) hinzugefügt wurde. Dahingegen kombiniert die neue Generation zunehmend CPUs mit speziell entwickelten Beschleunigern, die häufig auf der Technologie der Grafikverarbeitungseinheiten (GPU) basieren. Diese heterogenen Systeme sind schneller und energieeffizienter, aber sie erfordern auch neue Programmiermodelle und Software, um ihre Leistung voll auszuschöpfen. Dies liegt nicht nur an der größeren Anzahl von Prozessoren, sondern auch daran, dass derzeit viele weit verbreitete Softwarepakete und wissenschaftliche Anwendungen, die für reine CPU-Systeme entwickelt wurden, auf beschleunigten Systemen kaum unterstützt, geschweige denn optimiert werden.

Die Konvergenz von Supercomputern mit anderen digitalen Technologien verschärft diese Herausforderungen zusätzlich – es entstehen zunehmend hybride Rechensysteme und Arbeitsabläufe. Sensoren, Edge und Cloud Computing, künstliche Intelligenz und Quantencomputing eröffnen der Forschung, Technologieentwicklung und öffentlichen Verwaltung Chancen, aber ihre effektive Kombination erfordert neue Programmier-Workflows und Systemabläufe. Bei HPC geht es nicht mehr nur darum, eine große Simulation auf einem einzigen Supercomputer laufen zu lassen. Zunehmend entsteht ein komplexer, verteilter Prozess, der zwi-

Treibende Faktoren	Technologische Herausforderungen	Aktuelle Forschung am HLRS
Zunehmender Bedarf an HPC-Ressourcen	Ausführung größerer, stark parallel arbeitender Systeme	Programmierung & Entwicklung von Anwendungen Code-Skalierung und Performance-Optimierung Migration von Algorithmen auf beschleunigte Systeme Entwicklung hybrider Workflows User-Training und -Unterstützung
Energieeffizienz und Anforderungen für Nachhaltigkeit	Zunehmender Energiebedarf	
Ende des Mooreschen Gesetzes	Produktion enormer Datensätze	Systemmanagement Adaptive Systemparametrisierung Optimierung der Lastverteilung Verbesserung der Input/Output-Effizienz Datenmanagement
Chancen neuer digitaler Technologien	Konvergenz von HPC mit Cloud, Edge, KI und Quantencomputing-Technologien	
	Hybride, verteilte, beschleunigte Systeme und Netzwerke	Nachhaltigkeit Monitoring und Optimierung der System-Performance Intelligente Regulierung der Betriebstemperatur Nutzung von Abwärme Lieferkettenmanagement

Ein Überblick über ausgewählte Hauptthemen und Forschungsbereiche, die die Zukunft des Höchstleistungsrechnens treiben werden.

schen Computern mit unterschiedlichen Fähigkeiten und Programmieranforderungen koordiniert werden muss, die sich oft an verschiedenen Standorten befinden. Die Steuerung der Prozesse, die erforderlich sind, damit diese Technologien miteinander kommunizieren und Daten schnell und sicher übertragen werden können, erfordert neue Ansätze für die Verwaltung von Aufgaben in diesen Netzen.

Außerdem entwickeln sich nicht alle HPC-Hardwarekomponenten in gleichem Tempo weiter. In der Vergangenheit konnte beispielsweise die Speicherhardware kaum mit den beschleunigten Systemen Schritt halten. Das heißt, dass das Schreiben und Lesen von Daten weiterhin große Simulationen verlangsamen kann. Auch die künstliche Intelligenz verändert wichtige Merkmale wissenschaftlicher Daten. Während bei klassischen Simulationen relativ wenige Eingabedaten verwendet wurden, müssen mit künstlicher Intelligenz riesige Datensätze verwaltet werden, die aus Millionen kleiner Dateien bestehen. Das bedeutet, dass die Ein- und Ausgabe (I/O) in verteilten Dateisystemen für die Datenverarbeitung optimiert werden muss. Obwohl eine höhere Verarbeitungsgeschwindigkeit beispiels-

weise komplexere Ensemblesimulationen oder Multiphysikmodelle ermöglicht, entstehen auch zunehmend große Datenberge. Die Archivierung dieser Daten zur Wiederverwendung in zukünftigen Studien, zum Training von KI-Algorithmen oder zur Überprüfung der Ergebnisse einer wissenschaftlichen Arbeit droht HPC-Zentren zu überfordern. Dies ist bedingt von dem Platz- und Energiebedarf für die Datenspeicherung als auch dem Zeitaufwand für die Sicherung oder Übertragung großer Datensätze.

„Während das Supercomputing weiterhin wächst, bringen die Veränderungen viele Herausforderungen mit sich“, sagt Prof. Dr. Michael Resch, Direktor des HLRS. „Als Bundeshöchstleistungsrechenzentrum ist es in dieser neuen Landschaft unsere Aufgabe, genau die Infrastruktur, Lösungen, Unterstützung und Ausbildung bereitzustellen, mit denen Forschende diese Veränderungen bewältigen und letztendlich effizient und nachhaltig ihre komplexen Fragen beantworten können.“

In einigen Forschungsprojekten, die Ende 2022 und Anfang 2023 anlaufen, entwickeln und testen Mitarbeitende des HLRS potenzielle Lösungen für große HPC-

Herausforderungen. Diese Projekte in Zusammenarbeit mit anderen führenden HPC-Zentren und der Industrie werden sowohl zur Entwicklung des Fachgebiets beitragen als auch sicherstellen, dass das HLRS seinen Systemnutzer:innen weiterhin Unterstützung auf dem neuesten Stand der Technik bietet. Diese Projekte bieten auch einen Einblick in die Zukunft des Höchstleistungsrechnens.

Software im Exascale-Bereich

Ein Vorteil größerer HPC-Systeme besteht darin, dass sie Simulationen ermöglichen, bei denen potenziell Milliarden von parallelen Berechnungen gleichzeitig ausgeführt werden. Bei vielen Simulationen, z. B. der numerischen Strömungsmechanik (CFD) oder der Klimamodellierung, erstellen Programmierer:innen ein Rechengitter, das eine große Simulation in kleinere Einheiten unterteilt, die einzeln berechnet und dann wieder integriert werden, um das System als Ganzes zu verstehen. Um parallele Rechensysteme möglichst effizient zu nutzen, müssen Programmierer:innen diese Einheiten basierend auf den verfügbaren Verarbeitungseinheiten umverteilen. Wenn größere Computer mit hybriden Architekturen in Betrieb genommen werden, steigt die Anzahl der CPUs. Dadurch wird es schwieriger, mit bestehenden Algorithmen eine effiziente Leistung zu erzielen. Viele Herausforderungen, die Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen aktuell lösen müssen, können nicht in vollem Umfang von der Geschwindigkeit neuer Exaflop-fähiger Systeme profitieren, wenn die Codes nicht entsprechend skaliert werden.

Als Mitglied des EuroHPC-JU-geförderten Projekts CEEC (Center of Excellence for Exascale CFD) verbessert das HLRS modernste Algorithmen und Methoden für die numerische Strömungsmechanik, sodass sie im Exascale-Bereich effizient arbeiten können. Das Projekt zielt darauf ab, Exascale-fähige Arbeitsabläufe für extrem große Rechensysteme zu entwickeln, Methoden zur Verringerung des Energieverbrauchs für die Ausführung dieser Algorithmen zu implementieren und die Wirksamkeit dieser neuen Algorithmen in Anwendungen für die akademische und industrielle Forschung zu

demonstrieren. Das Projekt konzentriert sich auf Algorithmen, die für CFD-Simulationen benötigt werden, u. a. in der Luftfahrttechnik, chemischen Industrie und Windenergie sowie in den Umwelt- und Atmosphärenwissenschaften.

Das HLRS koordiniert darüber hinaus das europäische Exzellenzzentrum für Ingenieurwissenschaften, EXCELLERAT. Das Projekt stellt Services für die Weiterentwicklung von Codes bereit und verfolgt damit eine ähnliche Strategie, um die Industrie auf die nächste Generation des Höchstleistungsrechnens vorzubereiten. Die Forschenden des Projekts haben in der ersten Phase wichtige Codes für die Automobilindustrie, die Luft- und Raumfahrt und den Energiesektor so angepasst, dass sie auf einer wesentlich größeren Anzahl von Prozessoren effizient ausgeführt werden können. So unter anderem auf Systemen, die GPUs und andere neuere Prozessortypen enthalten. Die Ergebnisse zeigen eine Steigerung der Verarbeitungsgeschwindigkeit um bis zu 90 % sowie eine deutlich verbesserte Auflösung der Simulationen. Dadurch lassen sich feinere Details in Simulationen von Luftströmungen um Flugzeugflügel oder Verbrennungsreaktionen darstellen. Gegen Ende 2022 wurde die Finanzierung der zweiten Projektphase von EXCELLERAT bestätigt. Das Exzellenzzentrum wird die Industrie auch in den kommenden Jahren bei der Vorbereitung auf die nächste HPC-Generation unterstützen.

Das HLRS ist darüber hinaus an zwei weiteren EuroHPC-Exzellenzzentren beteiligt, die sich mit Software für das Exascale Computing befassen und deren zweite Projektphase Anfang 2023 begonnen hat: ChEESE entwickelt Exascale-fähige Codes für die Geowissenschaften, die Frühwarn- und Gefahrenprognosen sowie Notfallmaßnahmen bei Risiken wie Vulkanausbrüchen, Erdbeben oder Tsunamis unterstützen könnten. Das HiDALGO-Projekt, in dem das HLRS die technische Koordination übernimmt, konzentriert sich auch in der zweiten Projektphase auf die Entwicklung von Methoden, die bei der Bewältigung globaler Herausforderungen mithilfe neuer, hybrider HPC-Systeme helfen könnten.

Intelligenter Systeme

In der Vergangenheit ließ sich der Energieverbrauch eines Supercomputers mit groben Ansätzen begrenzen, u.a. mittels Verringerung der Taktfrequenz, die die Prozessorgeschwindigkeit steuert, oder dem Abschalten von Teilen des Systems, wenn sie nicht benutzt wurden. Moderne HPC-Systeme bieten jedoch mehr Möglichkeiten mit hohem Energiesparpotenzial. Werden beispielsweise Parameter und Einstellungen in den Programmierparadigmen OpenMP und MPI angepasst, so kann die Softwareleistung verbessert werden, was zu einer effizienteren Energienutzung führt. Wenn mehrere Benutzeranwendungen gleichzeitig auf dem System ausgeführt werden, können Systemadministratoren auch mithilfe von MPI verfolgen und optimieren, wie diese Anwendungen auf einer ganzheitlicheren, systemweiten Basis laufen. Die Bestimmung der optimalen Einstellungen für diesen systemischen Ansatz kann jedoch schwierig sein, insbesondere wenn auf HPC-Systemen viele verschiedene Anwendungen gleichzeitig ausgeführt werden.

In dem Projekt EE-HPC entwickelt und erprobt das HLRS gemeinsam mit Partnern einen neuen Ansatz, der an der Universität Erlangen-Nürnberg initiiert wurde und darauf abzielt, den Energieverbrauch zu senken und gleichzeitig die Rechenauslastung zu maximieren. Mithilfe von maschinellem Lernen wird die entwickelte Software dynamisch Systemparameter einstellen. Diese wird den Energieverbrauch der Hardware basierend auf den zu einem bestimmten Zeitpunkt laufenden Jobs und Job-Phasen optimieren. Als langjähriges Mitglied des MPI-Forums, das Standards für diesen weit verbreiteten Entwicklungsrahmen festlegt, wird das HLRS Monitoringsoftware in die Laufzeitumgebung von OpenMP und MPI integrieren. Eine grafische Benutzeroberfläche bietet Anwender:innen zudem transparente Einblicke in die Entscheidungen, die das System während der Ausführung der Software trifft.

Im Projekt targetDART verfolgt das HLRS Strategien zur Verbesserung der Skalierbarkeit und Energieeffizienz von Anwendungen mittels Optimierung der Lastverteilung. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Pro-

grammierschnittstelle OpenMP, die ein systemweites Gleichgewicht in der Verteilung und Ausführung von Rechenaufgaben über ein paralleles Rechensystem orchestriert. Die Herausforderung besteht darin, dass die Rechenaufgaben in parallelen Simulationen von der Ausgabe anderer Tasks abhängen. Die Daten müssen ständig physisch im Computer bewegt werden und die Zeit, die die Prozessoren für die Kommunikation untereinander benötigen, kann das System verlangsamen. Auf den aktuell größten Supercomputern ist die Optimierung des Lastausgleichs schwierig und in hybriden Systemen wird sie sogar noch erschwert, vor allem wenn die Größe des gesamten Systems und damit die Anzahl der zu überwachenden und zu optimierenden Komponenten zunimmt. TargetDART geht diese Herausforderung an, indem das Projekt neue Strategien für die Verwaltung von Task-Abhängigkeiten und das Monitoring sowie die Evaluation der Anwendungsleistung verfolgt. Als Mitglied des MPI-Forums wird das HLRS die in targetDART erreichten Fortschritte auch an die breitere HPC-Community weitergeben.

Digitale Konvergenz: die Puzzleteile zusammenfügen

Während sich Supercomputer in Richtung Exascale entwickeln, entstehen auch andere digitale Technologien, die den Nutzen des Höchstleistungsrechnens weit über die Grenzen des traditionellen HPC-Zentrums hinaus erweitern könnten. Beispielsweise sammeln verschiedene Sensoren Messungen, aus denen sich neue Modelle und Simulationen generieren lassen. Mit Edge Computing können Rechenaufgaben auf Standorte verteilt werden, an denen Daten gesammelt und Entscheidungen schneller getroffen werden können. Auch in den Höchstleistungsrechenzentren selbst sind neue Arbeitsabläufe erforderlich, um Simulationen und Datenanalysen zu integrieren, die auf unterschiedlichen Rechnerarchitekturen optimal laufen. All diese Teile zusammenzufügen, ist aktuell eine der größten Herausforderungen des Höchstleistungsrechnens.

Sinnbildlich für diese sich wandelnde Landschaft ist das kürzlich gestartete Projekt DECICE, das sich mit Cloud und Edge Computing befasst. Diese Architekturen sind

Innerhalb der Projekte ENRICH, DEGREE und SRI DiTEoS erforscht das HLRS neue Methoden zur Verbesserung der eigenen Energieeffizienz und Umweltleistung.



u.a. für Smart Cities, Industrieautomatisierung und Datenanalyse von Bedeutung, da diese neuen Anwendungen oft Hardware erfordern, die sich in der Nähe der Nutzer:innen befindet. Damit sich diese Hardware in Höchstleistungsrechner wie Hawk am HLRS integrieren lässt, sind niedrige Latenzzeiten und hohe Sicherheit bei der Datenübertragung sowie Standortkenntnis im gesamten Netz die Voraussetzung.

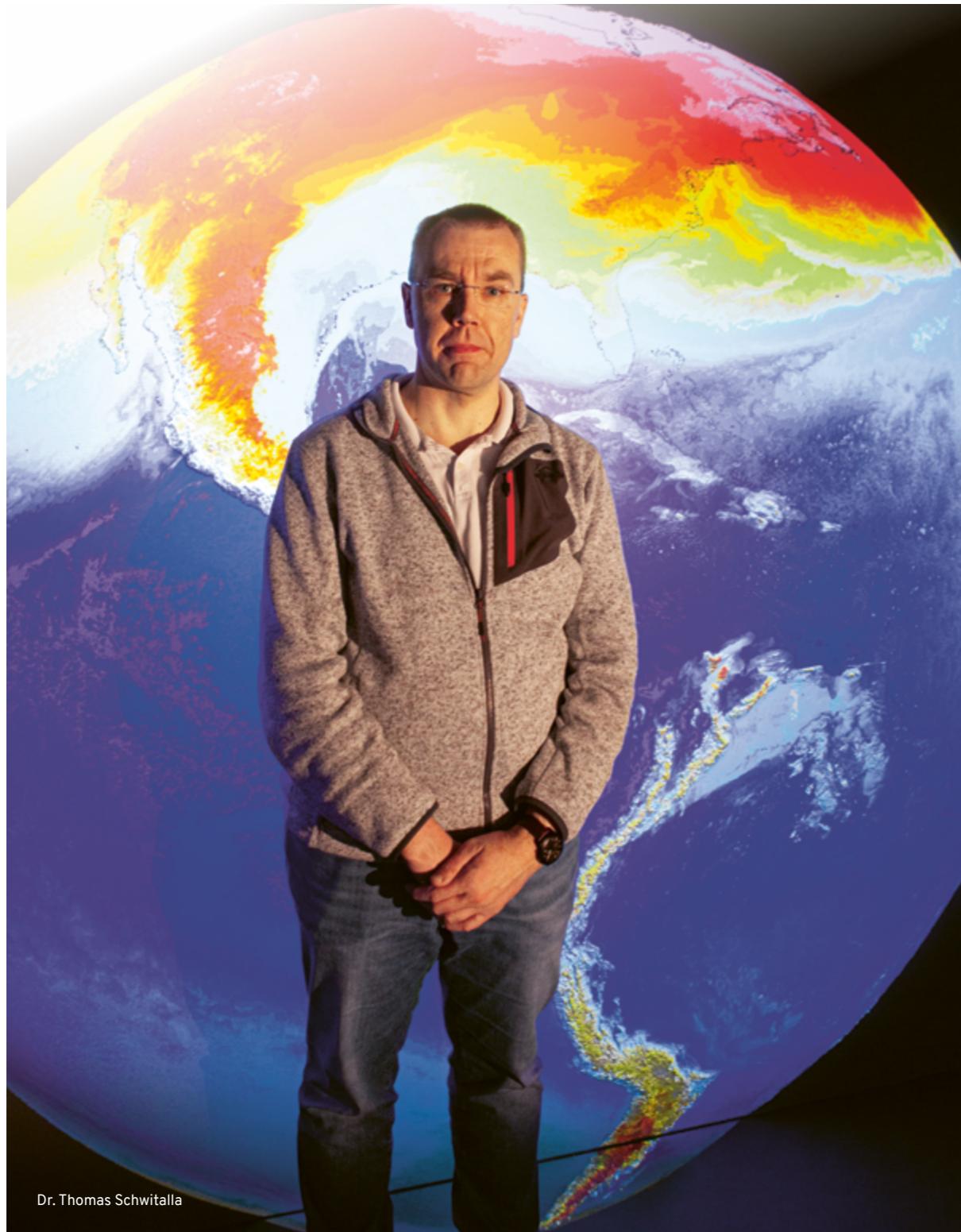
DECICE testet neue Methoden, um verteilte Netze von Geräten mit einem zentralen Steuerungscluster zu vereinen. Forschende vom HLRS werden KubeEdge verwenden – ein System, das vom Open-Source-Framework Kubernetes abgeleitet ist, das für die Bereitstellung, Skalierung und Verwaltung von Anwendungen in großen hybriden Computersystemen unter Verwendung sogenannter „Container“ konzipiert wurde. DECICE wird KubeEdge weiterentwickeln, das den containerisierten Ansatz von Kubernetes auf das Edge Computing überträgt. Dabei wird ein KI-basierter Ansatz verwendet, um Aufgaben den passenden Ressourcen in einem verteilten System zuzuweisen, das aus verschiedenen Geräten und Prozessoren besteht. Das HLRS stellt die HPC-Infrastruktur für DECICE zur Verfügung und bringt sein Fachwissen in den Bereichen Cloud Computing, HPC-Programmierung und HPC-Systembetrieb ein. Es leitet auch ein Arbeitspaket, in dem das Team einen integrierten Rahmen für die Verwaltung von Aufgaben in der Cloud, im Edge und HPC entwickeln wird.

Schulungen für die Programmierung neuer HPC-Architekturen

Da die Landschaft größerer, hybrider HPC-Systemarchitekturen zunehmend vielfältig wird, hat das HLRS auch sein Schulungsprogramm angepasst, damit die

Rechenressourcen des Zentrums möglichst effektiv genutzt werden. Zusätzlich zu dem traditionellen Kursangebot mit Fokus auf Programmiersprachen für wissenschaftliches Rechnen und parallele Programmier-Frameworks wie MPI und OpenMP hat das Zentrum sein Angebot im Jahr 2022 um Kurse zu GPU-Programmierung, Deep Learning und künstlicher Intelligenz erweitert. Dazu gehörte eine Schulungsk Kooperation mit dem Hardware-Hersteller NVIDIA, die „Bootcamp“-Workshops zur künstlichen Intelligenz in der Wissenschaft und einen tieferen Einblick in wissenschaftliches maschinelles Lernen unter Verwendung physikalischer neuronaler Netzwerke umfasste. Ein weiterer Kurs zum maschinellen Lernen unter Verwendung der Instinct-GPUs von AMD wurde in Zusammenarbeit mit dem Unternehmen abgehalten. Weitere Kurse am HLRS konzentrierten sich auf Programmiermodelle, mit deren Hilfe sich bestehende Codes an beschleunigte Architekturen anpassen lassen. Teil davon war u.a. eine Kollaboration mit INTEL zu oneAPI, SYCL2020 und OpenMP Offloading.

Anpassungsfähigkeit ist das Schlüsselwort für die Zukunft des Höchstleistungsrechnens – vor allem, da sich die Technologie auf die Grenze des bislang Möglichen zu bewegt. Ob es um die Begrenzung der Energieversorgung und der natürlichen Ressourcen, um die physikalischen Grenzen eines herkömmlichen CPU-Chips, um die Grenzen der Datenverwaltung oder der Flexibilität von bestehenden Codes geht – diese Herausforderungen zwingen das Höchstleistungsrechnen dazu, sich neu zu erfinden und potenziell noch leistungsfähiger zu werden. Mithilfe der Forschungs- und Ausbildungsinitiativen möchte das HLRS als Protagonist des Ökosystems diesen Wandel mitvorantreiben. CW



Dr. Thomas Schwitalla

Die Zukunft der Atmosphärensimulation: Ein Interview mit Thomas Schwitalla

Dr. Thomas Schwitalla, Physiker an der Universität Hohenheim, ist ein langjähriger Nutzer der HPC-Systeme des HLRS. Basierend auf dem Weather Research & Forecasting Model (WRF) und dem Model for Prediction Across Scales (MPAS) arbeitet Schwitalla an Wettersimulationen, die in den letzten Jahren immer präziser geworden sind. Kürzlich hat er mithilfe des Supercomputers Hawk am HLRS das Wetter der Erde mit einer beeindruckend hohen Auflösung von 1,5 km simuliert.

Wie andere Forschungsbereiche, die mit großen Simulationen arbeiten, sind globale Wetter- und Klimamodelle eine Herausforderung für das High-Performance Computing. Die Dateisysteme müssen in hochparallelisierten Rechen-systemen kontinuierlich eine große Anzahl an Daten zwischen Rechenknoten und Speicherplatten verschieben. Auch wenn die Rechenknoten eines HPC-Systems schneller werden, kann dieser sogenannte „Input/Output (I/O)“-Vorgang die Effizienz einer Simulation stark beeinträchtigen.

In einem neuen Projekt mit der Bezeichnung TOPIO arbeitet Schwitalla mit Wissenschaftler:innen des HLRS zusammen, um einen Ansatz zur Verbesserung des I/O bei großen Simulationen zu testen. Im folgenden Interview erörtert Schwitalla, welche Chancen und Herausforderungen die Weiterentwicklung von HPC in Richtung Exascale birgt.

Wie haben größere Supercomputer die Modellierung der Atmosphäre verändert?

In der Vergangenheit ist es sehr oft so gewesen, dass man aufgrund der verfügbaren Rechenressourcen hochaufgelöste, sub-saisonale Simulationen – Simulationen von 4 Wochen bis 2 Monate – nur als Limited-Area-Modelle (LAM) machen konnte. Das heißt, man

konnte nur einen Ausschnitt der Erde simulieren. Daraus ergab sich immer ein mathematisches Problem, weil man Randbedingungen gebraucht hat, die von einem anderen globalen Modell kamen. Es war oft so, dass sich die Physik eines LAM von der des antreibenden Modells unterschied. Wenn z. B. die Wolkendarstellung oder die Darstellung der Grenzschicht anders sind, kann das zu unerwünschten Effekten führen, in denen bei längeren Simulationen die Randbedingungen „durchscheinen“ und man nicht mehr das Modell selbst sieht.

Bei einem globalen Modell hat man den Vorteil, dass es keine Randbedingungen gibt. Und das Besondere ist eben heutzutage, dass man globale Simulationen mit einer sehr kleinen Gitterboxgröße rechnen kann – anders gesagt, mit sehr hoher Auflösung. Dafür braucht man aber enorme Rechenressourcen.

Warum ist es bei der globalen Wetter- und Klimasimulation wichtig, eine hohe Präzision zu erreichen?

Es gibt im Moment Klimasimulationen, die global mit einer Auflösung von 25 bis 50 km laufen. Das ist gut, aber wenn man auf der lokalen Ebene schaut, reichen sie nicht aus. Im Schwarzwald, zum Beispiel, gibt es viele Berge und Täler und eine Auflösung von 25 km erfasst diese komplexe Topografie nicht. Auch bei Inselgruppen wie den Philippinen, Indonesien oder den Kanaren ist eine Gitterzelle mit 25 km Auflösung nicht ausreichend, weil kleinere Inseln einfach nicht dargestellt werden.

Die Hoffnung ist, mit höher aufgelösten Modellen genauere Vorhersagen machen zu können. Man kann da-

mit atmosphärische Prozesse realitätsnäher darstellen und z. B. die Entwicklung von tropischen Stürmen oder Starkregenereignissen besser vorhersagen. Ein Zeitraum von 30 bis 60 Tagen ist auch für die Landwirtschaft interessant, weil Bauern genau wissen wollen, wann sie am besten aussäen oder ernten sollen. Im Rahmen eines EU-Projekts gibt es mit MPAS jetzt die ersten 40-Tage-Simulationen und in diesen sieht man, dass eine höhere Auflösung einen deutlich positiven Effekt auf die Niederschlagsvorhersage hat.

Welche Datenmenge wird bei hochauflösten, globalen Simulationen produziert?

Wenn man den Globus in $1,5 \times 1,5$ km Boxen einteilen würde, hätte man bei MPAS auf der Erdoberfläche 262 Millionen Gitterzellen. In meiner Konfiguration gibt es auch 75 Vertikalschichten, um die Atmosphäre zu simulieren. Das heißt, ich habe 262 Millionen mal 75 – insgesamt ca. 20 Milliarden – Gitterzellen. Um das Wetter realistisch zu modellieren, brauche ich aber für jede Gitterzelle die Temperatur, den Luftdruck, den Wind und die relative Feuchte. Zusätzlich benötigt man noch Variablen wie Wolkenwasser, Regen, Eis oder Schnee. Jede dieser Variablen hat 20 Milliarden Datenpunkte, die abgespeichert werden müssen. Auch wenn sich im einfachsten Fall mit Single Precision rechnen lässt (ein Format, in dem Gleitkommazahlen mit 32 statt 64 Bits gespeichert werden), ist die resultierende Datei etwa ein Terabyte groß pro Ausgabezeitschritt. Bei einer Simulationsdauer von 24 Stunden und stündlicher Ausgabe ergäbe das 24 Terabyte an Daten und bei 60 Tagen sogar 1,3 Petabyte. Das ist selbst für sehr große Dateisysteme extrem viel.

Eine so große Datenmenge stellt eine Herausforderung für die Dateisysteme dar. Bei Simulationen mit mehreren Zehntausend oder Hunderttausend Rechenkernen kann es passieren, dass zum einen die Kommunikation zwischen den MPI-Prozessen nicht mehr schnell genug ist, zum anderen kann das Dateisystem aufgrund begrenzter Speicherbandbreiten die Daten nicht mehr schnell genug verarbeiten.

Im Projekt TOPIO wollen Sie und Wissenschaftler:innen am HLRS das I/O Problem angehen. Was haben Sie vor?

TOPIO beschäftigt sich mit der Frage, ob sich das I/O des Dateisystems mittels eines Autotuning-Ansatzes für die Datenkompression beschleunigen ließe. Es gibt schon Algorithmen für die Datenkompression, aber sie sind noch nicht parallelisiert für HPC-Architekturen. Wir wollen untersuchen, ob es noch Optimierungsmöglichkeiten mithilfe von MPI gibt. Wissenschaftler aus dem Projekt EXCELLERAT, das vom HLRS geleitet wird, haben die Kompressionsbibliothek BigWhoop entwickelt. In TOPIO werden wir die Bibliothek auf MPAS anwenden. Das Ziel ist, die Datengrößen ohne Informationsverlust um bis zu 70 % zu reduzieren.

Dieser letzte Punkt ist für die Atmosphärenmodellierung sehr wichtig. Die Schwierigkeit ist, dass bestimmte Variablen wie Wasserdampf, Wolkenwasser oder Wolkeneis sehr kleine Werte annehmen können. Wenn ich wegen der Datenkompression eine Stelle in einer Zahl verliere, dann kann das Ergebnis einer längeren Simulation eine andere Information und daraus resultierende Statistik ergeben. Das Problem ist auch relevant, wenn man Simulationen mit Satellitendaten vergleicht. Wenn Informationen wegen der Kompression verloren gehen, sind u. U. bestimmte Features nicht mehr da.

Geringe Datenmengen sind auch für die Nutzer:innen (z. B. in der Landwirtschaft oder Hochwasservorhersagezentren) der Informationen von großer Bedeutung. Wenn die Daten groß und schwer zu übertragen sind, dann nutzt diese auch niemand. Wenn die Daten komprimiert sind, ist die Chance größer, dass sie in den Entscheidungsprozessen genutzt werden. Ein weiterer positiver Nebeneffekt ist die Energieeinsparung für das Vorhalten und Archivieren der Daten.

Was sind die nächsten großen Fragen in der Atmosphärenmodellierung und wie muss sich HPC weiterentwickeln, damit es die Forschung sinnvoll unterstützt?

In Zukunft möchten Wissenschaftler:innen Unsicherheiten in ihren Modellen besser abschätzen. Wir sehen



Dr. Schwitalla und die Visualisierungsexpertin Leyla Kern vom HLRS bilden eine Visualisierung des hochauflösenden globalen Modells in der CAVE am HLRS ab.

beispielsweise den Bedarf in der Modellierung von Wolken. Die Entstehung von Wolken ist sehr wichtig für das Klima, weil Wolken den Strahlungshaushalt stark beeinflussen. Bei einer groben Auflösung kann das Modell kleine Wolken gar nicht darstellen. Es könnte sogar passieren, dass der Strahlungshaushalt nicht korrekt simuliert wird. Wenn ein Klimaszenario auf 100 Jahre projiziert wird, kann der Fehler groß werden.

Für die Unsicherheitsabschätzung lassen sich Ensemblesimulationen berechnen. In Multi-Physics-Ensembles, zum Beispiel, können verschiedene Parametrisierungen für die Darstellung von Wolken oder atmosphärischen Grenzschichtprozessen gewählt werden. Alternativ dazu kann mit einem Time-Lagged Ensemble eine zweite Simulation (zum Beispiel) 24 Stunden später gestartet und die Ergebnisse mit denen der Ersten verglichen werden. Wenn die Ergebnisse konvergieren, ist die Vertrauenswürdigkeit besser.

Die Durchführung von Ensemblesimulationen ist allerdings sehr rechenintensiv. Wenn ich ein Ensemble von zehn Mitgliedern rechnen wollte, würde ich zehn mal so

viel Rechenzeit brauchen und die Datenmenge wäre zehnmal so groß. Rechenpower ist daher immer noch ein limitierender Faktor. Deswegen werden wir in der Zukunft einen höheren Bedarf an GPUs sehen, weil sie für Floating Point Operationen sehr gut geeignet und viel schneller als CPUs sind. Viele globale Modelle nutzen jetzt eine Kombination von CPUs und GPUs und in den kommenden Jahren ist zu erwarten, dass mehr gemischte HPC-Systeme zu sehen sind, die sowohl auf CPU- als auch GPU-Komponenten zurückgreifen.

Dieser Umstieg auf GPUs hat auch Konsequenzen für das Programmieren von Simulationssoftware. Der gleiche Code lässt sich nicht einfach direkt auf GPUs portieren, er muss an GPUs angepasst werden. Momentan gibt es hierfür verschiedene Ansätze wie OpenACC, CUDA, oder OpenMP Offloading. Auch wenn Wissenschaftler:innen erfahren im Umgang mit HPC sind, werden sie diese Methoden in den kommenden Jahren adoptieren müssen. Es freut mich, dass das HLRS dies bereits in sein Schulungsprogramm aufgenommen hat. CW



Neuigkeiten



In Zusammenarbeit mit dem Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung leitete Dr. Ralf Schneider vom HLRS die Einführung eines Tools zur Vorhersage der Belegung von Intensivstationen.

HLRS und BiB gewinnen HPC Innovation Award für Corona-Prognosemodell

In November wurden das HLRS und das Bundesinstitut für Bevölkerungsforschung (BiB) im Rahmen der 18. HPC Innovation Awards ausgezeichnet. Der Preis würdigt eine Simulation, die HLRS und BiB federführend konzipiert und implementiert haben. Die Simulation verwendet einen automatisierten, agentenbasierten Ansatz, welcher das intensivbettenrelevante Infektionsgeschehen in Deutschland erfasst. Anhand der Simulation werden Prognosen zur regionalen Auslastung von Intensivstationen erstellt. Diese Prognosen werden wöchentlich an das Bundesministerium für Gesundheit und das Bundesministerium des Innern und für Heimat geliefert, wo sie die politische Entscheidungsfindung unterstützen. „Die Zusammenarbeit des HLRS mit dem BiB war das erste Mal, dass ein deutsches Bundeshochleistungsrechenzentrum eine derartige Dienstleistung für die Bundesregierung erbrachte und demonstrierte, wie HPC für Global Systems Science Entscheidungsträger in Krisensituationen unterstützen kann“, sagte Dr.-Ing. Ralf Schneider, der an der Entwicklung des Modells beteiligt war. Die Simulation wurde u. a. auf einem System von AMD, das eine Spende aus dem COVID-19 High-Performance Computing Fund war, entwickelt und auf dem Supercomputer Hawk des HLRS implementiert. Die HPC Innovation Awards werden vom HPC-Marktanalyseunternehmen Hyperion Research koordiniert und zeichnen Spitzenleistungen von Supercomputeranwender:innen weltweit aus. [CW](#)

HLRS erhält EMAS-Rezertifizierung für Umweltmanagement

Nach einer erfolgreichen Überprüfung durch einen externen Umweltgutachter Anfang November wurde das HLRS nach dem Eco-Management and Audit Scheme (EMAS) rezertifiziert. EMAS wurde von der Europäischen Union entwickelt und ist der weltweit anspruchsvollste Rahmen für das Umweltmanagement, der strenge Normen zur Verbesserung der Umweltleistung vorgibt. Im Jahr 2020 wurde das HLRS als erstes Supercomputing-Zentrum nach EMAS zertifiziert. Diese Auszeichnung spiegelt die Umsetzung eines umfassenden Energie- und Umweltmanagementplans wider, an dem sich die Aktivitäten des HLRS orientieren – vom Betrieb der Supercomputer und der Kühlsysteme über das Lieferkettenmanagement und die Abfallwirtschaft bis hin zur Erhaltung der Artenvielfalt auf dem Campus und mehr. Eine Voraussetzung für die EMAS-Zertifizierung ist die Verpflichtung, nicht nur die gesetzlichen Anforderungen zu erfüllen, sondern sich auch kontinuierlich um eine Verbesserung der Umweltleistung zu bemühen. Um dies zu überprüfen, unterzieht sich das HLRS jährlichen Umweltaudits und durchläuft alle drei Jahre ein umfangreicheres Rezertifizierungsverfahren. In Projekten wie ENRICH, DEGREE, SRI DiTEoS und EE-HPC erforscht das Zentrum auch weiterhin neue Strategien zur Verbesserung der Energieeffizienz. Diese Bemühungen kommen sowohl dem Betrieb der eigenen Systeme zugute als auch der Entwicklung von Strategien zur Verringerung der Umweltauswirkungen in anderen Rechenzentren. [CW](#)



Prof. Dr. Michal Resch (rechts), Direktor des HLRS, begrüßte Prof. Wolfram Ressel (Rektor der Universität Stuttgart) und Petra Olschowski (Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst des Landes Baden-Württemberg) im Rechnerraum des HLRS.



Neue Wissenschaftsministerin zu Gast an der Universität Stuttgart

Während ihres ersten Besuchs an der Universität seit Beginn ihrer Amtszeit als baden-württembergische Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst erhielt Petra Olschowski eine Führung durch den Rechnerraum des HLRS und die Visualisierungsanlage CAVE. Dabei informierte sie sich über die Beiträge des HLRS zur Bekämpfung von COVID-19, die Bemühungen um eine bessere Unterstützung des Krisencomputings, die Fortschritte bei der Klimasimulation mit den Rechenressourcen des HLRS und den Einsatz digitaler Zwillinge im Kulturbereich. In einer Pressemitteilung im Anschluss an den Besuch schrieb sie: „Was mir heute an meiner Alma Mater präsentiert wurde, war sehr beeindruckend und ein Beispiel für das, wofür die Universität Stuttgart steht: Spitzenforschung, Supercomputing mit internationaler Sichtbarkeit und Industriekooperationen, die schon im Studium beginnen. Beeindruckt hat mich die Demonstration im Höchstleistungsrechenzentrum, das für Baden-Württemberg als digitale Leitregion einer der Leuchttürme schlechthin ist. Die dortige Klimasimulation hat gezeigt: Digitalisierung kann und wird uns dabei helfen, die Folgen des menschengemachten Klimawandels besser antizipieren und auf sie reagieren zu können.“ *CW*

Hawk unterstützt bei Aufnahme eines Bildes des Schwarzen Lochs im Zentrum der Milchstraße

Anfang Mai 2022 gab ein internationales Forschungsteam, die Event Horizon Telescope-Kollaboration (EHT), bekannt, dass es zum ersten Mal ein Bild erstellt hat, das die Existenz des Schwarzen Lochs im Zentrum unserer Galaxie beweist. Zu den Mitwirkenden des EHT-Projekts gehört Prof. Dr. Luciano Rezzolla von der Goethe-Universität Frankfurt, dessen Team die Supercomputer des HLRS und des Leibniz-Rechenzentrums nutzte, um Simulationen durchzuführen, die die Gleichungen der allgemein-relativistischen Magnetohydrodynamik (MHD) und des Strahlungstransfers lösen. Diese Bilder wurden mit Beobachtungsdaten verglichen, die von einigen der weltweit führenden astronomischen Einrichtungen stammten. Laut Rezzolla konnte sein Team dank Hawk und der zunehmenden Leistungsfähigkeit der Supercomputer-Infrastruktur des Gauss Centre for Supercomputing im Allgemeinen mehr Modelle als in der Vergangenheit ausführen. Das führte letztlich zu einer schnelleren Analyse. Dieses Projekt ist eine Fortsetzung von Arbeiten, die zum Teil ebenfalls am HLRS durchgeführt wurden und aus denen im Jahr 2019 das erste Bild eines Schwarzen Lochs entstand. *EG*

Bild: EHT-Kollaboration

Könnte künstliche Intelligenz Mozart ersetzen?

Über das Media Solution Center Baden-Württemberg organisiert haben Wissenschaftler:innen des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart, des Stuttgarter Kammerorchesters (SKO), der Hochschule der Medien und des Hertz-Labors am Zentrum für Kunst und Medien (ZKM) in Karlsruhe ihre Expertise gebündelt und eine provokante Frage untersucht: Könnte ein Algorithmus eine neue Komposition erzeugen, die sich stilistisch nicht von einem Werk Mozarts unterscheiden lässt? Bei einer Veranstaltung am 18. Oktober in der Stadtbibliothek Stuttgart wurden erste Forschungsergebnisse des Versuchs vorgestellt. In einer Podiumsdiskussion mit dem geschäftsführenden und künstlerischen Intendanten des SKO, Markus Korselt, dem Leiter des Hertz-Labor am ZKM, Ludger Brümmer und dem KI-Experten Dennis Hoppe vom HLRS ging es unter anderem darum, wie sich künstliche Intelligenz heute auf die Musik auswirkt und welche Rolle sie in Zukunft spielen könnte. Im Anschluss an die Podiumsdiskussion kam das Publikum in den Genuss der ersten Ergebnisse dieser Zusammenarbeit zwischen Maschine und Mensch, als Mitglieder des SKO mehrere aus den KI-Experimenten gewonnene Kompositionen vorspielten. Die Veranstaltung fand im Rahmen der BMBF-geförderten Reihe „Fragen an KollegIn KI“ statt. Das HLRS war an den Forschungsarbeiten innerhalb des CATALYST-Projekts beteiligt. *CW*



Ein Konzert und eine Podiumsdiskussion über das Potenzial von KI für die Musikkomposition wurden in der Stuttgarter Stadtbibliothek veranstaltet. Podiumsteilnehmer (v.l.n.r.): Felix Heidenreich (IZKT), Markus Korselt (Stuttgarter Kammerorchester), Dennis Hoppe (HLRS), Ludger Brümmer (Hertz-Lab, ZKM). Foto: Kai Loges, © die arge iola





Dr. Rolf Rabenseifner leitete vor seinem Ruhestand die Trainingsabteilung des HLRS.

Kolloquium ehrt Dr. Rolf Rabenseifner

Tausende von Wissenschaftler:innen haben in den vergangenen Jahrzehnten an Trainingsaktivitäten des HLRS teilgenommen, wobei die meisten Dr. Rolf Rabenseifner kennen. Von 1998 an hat Rabenseifner die HPC-Schulungsaktivitäten des HLRS zum umfangreichsten Programm seiner Art in Europa ausgebaut. Unter anderem koordinierte er die Entwicklung des HLRS-Schulungsprogramms und initiierte „Train the Trainer“-Kurse, die das Fachwissen des HLRS nach ganz Europa gebracht haben. Außerdem war er im Lenkungsausschuss des MPI-Forums tätig, dem Standardisierungsgremium des weit verbreiteten parallelen Programmierens. Rabenseifner hat sich aus der organisatorischen Arbeit zurückgezogen aber am 13. Mai 2022 kehrte er zum HLRS zurück, wo sich Kolleg:innen aus der ganzen Welt zu einem Ehrenkolloquium versammelten, um seine zahlreichen Beiträge zur HPC-Gemeinschaft zu würdigen. In der nahen Zukunft wird Rabenseifner weiterhin an vielen Orten Schulungskurse über parallele Programmierung halten. *CW*

OpenBikeSensor erhält den deutschen Fahrradpreis 2022

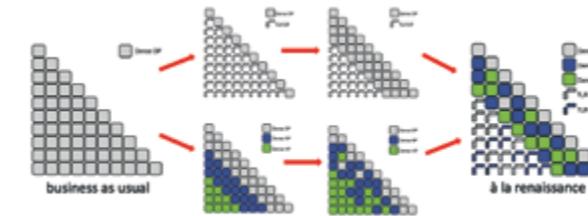
OpenBikeSensor (OBS) wurde mit dem Deutschen Fahrradpreis 2022 in der Kategorie Service & Kommunikation als Co-Gewinner ausgezeichnet. Die von dem Wissenschaftler Thomas Obst am HLRS entwickelte Technologie wird am Fahrrad befestigt und ermittelt mithilfe von GPS kontinuierlich den Standort von Radfahrenden und deren Abstand zu Gefahrenquellen wie z.B. vorbeifahrenden Autos. Die Daten aus diesen Messungen können auf ein Community-Portal hochgeladen werden, wo eine Software das Feedback der Radfahrenden auswertet und auf diesen Daten basierend eine Karte der Radwege in einer Stadt erstellt. Diese Karte zeigt Orte auf, an denen der Abstand zwischen Radfahrenden und Autos gefährlich gering ist. Die Informationen aus der Karte lassen sich von Radfahrenden und Stadtplaner:innen nutzen, denn die Daten zeigen den Bedarf an zusätzlichen Barrieren, Straßenschildern oder -markierungen auf – mit dem Ziel, das Radfahren sicherer zu gestalten. Im Oktober wurde ein solches Experiment in Zusammenarbeit mit der Stadt Herrenberg durchgeführt, und der OBS wurde auch in Cape Reviso eingesetzt. Dieses HLRS-Projekt zeigt, wie digitale Zwillinge in Städten dazu beitragen können, stark befahrene städtische Gebiete zu verbessern. OpenBikeSensor ist als Open-Source-Projekt konzipiert und das Interesse an der Initiative ist deutschlandweit stark gewachsen. Die Pläne und der Quellcode sind auf www.openbikesensor.org verfügbar, sodass Personen mit Programmier- und Elektronikgrundkenntnissen eigene Kits bauen können. *CW*

Bild: OpenBikeSensor



HLRS veranstaltet HPC User Forum

Am 6. und 7. Oktober fand am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart wieder das HPC User Forum statt. Unter den Referent:innen und Teilnehmenden des von Hyperion Research und dem HLRS organisierten Workshops befanden sich hochrangige Vertreter:innen von wichtigen HPC-Initiativen, international bekannten Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren, führenden Technologieherstellern und andere Expert:innen für neue HPC-, KI- und Quantencomputertechnologien und -anwendungen. Die Veranstaltung bot einen Überblick über die globale HPC-Marktdynamik sowie Vorträge und Diskussionen zu Trendthemen, u.a. die Zukunft der europäischen und deutschen HPC-Strategie, die Entwicklungen am HLRS, dem Jülich Supercomputing Centre und dem Leibniz Rechenzentrum, die HPC-Nutzung in der Industrie sowie Anwendungen in der Kunst- und Kulturbranche. Weitere Highlights umfassten Erkenntnisse aus dem Bau des Exascale-Systems am Argonne National Laboratory und ein Bericht über das neue System an der King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), ein Überblick über den Stand der Technik beim Quantencomputing weltweit sowie neue HPC-Produkte und -Technologien. *CW*



Weg von der globalen dichten Darstellung einer Kovarianzmatrix mit doppelter Genauigkeit (links) hin zu einer hybriden komprimierten Darstellung. Bild: KAUST

Gordon Bell Prize Finalisten entwickeln Methode für effizienteres Rechnen

Ein Team von Nutzern des HLRS-Supercomputers Hawk war unter den Finalisten für den Gordon-Bell-Preis 2022 der Association for Computing Machinery. Unter der Leitung von Dr. David Keyes, Direktor des KAUST Extreme Computing Research Center an der King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) in Saudi-Arabien haben die Forscher Methoden zur Steigerung der Rechenleistung entwickelt. Der Ansatz unterscheidet zwischen Komponenten innerhalb großer Simulationen, die eine hohe Präzision erfordern und solchen, die auf weniger präzise Weise berechnet werden können. Die Wissenschaftler nutzten den Supercomputer Hawk des HLRS, um die Wirksamkeit und Skalierbarkeit ihrer Methode zu beweisen, bevor sie die Simulationen auf dem zweitgrößten Supercomputer der Welt – Fugaku am japanischen RIKEN Center for Computational Science – laufen ließen. Das Team hat eine 12-fache Leistungsverbesserung im Vergleich zur Referenzimplementierung erzielt. In Anbetracht des großen Energiebedarfs von Höchstleistungsrechnern könnten die algorithmischen Innovationen des KAUST-Teams in Zukunft zur Verbesserung der HPC-Hardwareeffizienz beitragen. Die für den Gordon Bell Prize nominierte Arbeit konzentrierte sich auf groß angelegte Klimasimulationen, wobei das Team seinen Ansatz auf die Signaldekodierung in der drahtlosen Telekommunikation, die adaptive Optik in terrestrischen Teleskopen, die Bildgebung unter der Oberfläche und die Assoziation von Genotypen mit Phänotypen ausgeweitet hat und plant, ihn in Zukunft auch auf die Materialwissenschaft zu übertragen. Mit dem Gordon Bell Prize werden die innovativsten Arbeiten des Jahres in der Informatik gewürdigt. *EG*

Media Solution Center beteiligt sich an EU-Initiative für Innovation in der Kultur- und Kreativbranche

Ein Konsortium mit dem Namen „Innovation by Creative Economy (ICE)“ wurde gemeinsam mit 49 weiteren als Partner für EIT Culture & Creativity auserwählt. EIT Culture & Creativity ist eine EU-weite Knowledge and Innovation Community (KIC), die vom Europäischen Institut für Innovation und Technologie (EIT) Ende Juni 2022 angekündigt wurde. EIT Culture & Creativity ist die jüngste von neun europäischen KICs, die strategisch die Entwicklung neuer Produkte und Dienstleistungen, neuer Unternehmen und Ausbildungsmöglichkeiten in Bereichen fördern, die für die wirtschaftliche Konkurrenzfähigkeit Europas wichtig sind. ICE wurde von Kunst-, Kultur- und Wirtschaftsorganisationen aus ganz Deutschland gegründet, darunter das Media Solution Center Baden-Württemberg (MSC). Das MSC wird über die Aufnahme von ICE in die EIT Culture & Creativity Generalversammlung zur Entwicklung dieser spannenden neuen Initiative auf nationaler und EU-Ebene beitragen. Matthias Hauser, Geschäftsführer des Media Solution Center Baden-Württemberg, ist Co-Vorsitzender im ICE und Vorsitzender der europäischen Plattform „The Next Renaissance“. Als Mitbegründer des Media Solution Center ist das HLRS das einzige europäische Supercomputing Center, das an der EIT Culture & Creativity teilnimmt. **CW**



Ein digitaler Zwilling der Stadt Stuttgart visualisiert die Luftverschmutzung in der Nähe des Rathauses.

Oberbürgermeister Dr. Frank Nopper besucht das HLRS

Der Besuch am 5. September unterstrich die Rolle des HLRS für den Wissenschafts- und Technologiestandort Stuttgart. Nopper erfuhr unter anderem, wie das Zentrum bei der Stadtplanung und -verwaltung unterstützen kann. In einer Pressemitteilung der Stadt Stuttgart, die im Anschluss an den Besuch erschien, bezeichnete Nopper das HLRS als ein „vorbildliches Forschungszentrum der Zukunft“ und ergänzte: „Am Höchstleistungsrechenzentrum findet international anerkannte Forschung in Stuttgart statt. Mit seinen Hochleistungsrechnern unterstützt es die natur- und ingenieurwissenschaftliche Forschung in unserer Region und weit über deren Grenzen hinaus.“ Während des Besuchs stellten Wissenschaftler des HLRS Nopper Projekte zu Herausforderungen der Stadt und der Region vor. Darunter Cape Reviso, das mit virtueller Realität und anderen Methoden gefährliche Verkehrssituationen angeht, und Open Forecast, das Methoden zur Visualisierung regionaler Klima- und Luftverschmutzungsmodelle entwickelt. Begleitet wurde Dr. Nopper von leitenden Vertreter:innen der Stadt Stuttgart, die für die Koordinierung von Stuttgart 21, des neuen Rosensteinviertels und der künftigen Stadtplanung zuständig sind. **CW**

Die Preisträger des Golden Spike Awards 2022 (v.l.n.r.): Anna Neuweiler (Universität Potsdam), Martin P. Lautenschläger (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt), Johanna Potyka (Universität Stuttgart).



Verleihung der Golden Spike Awards beim 25. Results and Review Workshop

Am 4. und 5. Oktober 2022 versammelten sich die wissenschaftlichen Nutzer:innen der Systeme des Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), um ihre jüngsten Forschungsergebnisse auf dem 25. jährlichen Results and Review Workshop zu präsentieren. Dieses Treffen, das am HLRS und online stattfand, bietet die Gelegenheit, sich über aktuelle Anwendungen des Höchstleistungsrechnens am HLRS zu informieren und Ansätze für eine möglichst effektive Nutzung des Supercomputers des Zentrums zu diskutieren. Vierundzwanzig Vorträge und eine lebhaft Postersitzung deckten ein breites Spektrum an Themen ab, unter anderem aus den Bereichen Strömungsdynamik, Klimaforschung, Informatik, Chemie und Materialwissenschaften, Bioinformatik, Strukturmechanik und Physik. Zum Abschluss der Tagung wurden die Gewinner der Golden Spike Awards gekürt, mit denen das HLRS jedes Jahr herausragende Leistungen in der Forschung und beim Einsatz von Höchstleistungsrechnersystemen würdigt. Stellvertretend für ihre jeweiligen Projekte ausgezeichnet wurden in diesem Jahr Anna Neuweiler (Universität Potsdam) für „Simulating Binary Neutron Star Mergers“, Martin P. Lautenschläger (Institut für Technische Thermodynamik, Computergestützte Elektrochemie, Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt, Ulm) für „Lattice Boltzmann Simulation of Flow, Transport, and Reactions in Battery Components“ und Johanna Potyka (Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt, Universität Stuttgart) für „Towards DNS of Droplet-Jet Collisions of Immiscible Liquids with FS3D“. **CW**

Kooperationsvereinbarungen mit Partneruniversitäten erneuert

Das HLRS ist weltweit vernetzt und hat formale Kooperationsvereinbarungen mit führenden Höchstleistungsrechenzentren und Forschungsinstituten in Europa, Asien und Amerika abgeschlossen. Im Jahr 2022 erneuerte das Zentrum seine Kooperationsvereinbarungen mit vier langjährigen Partnern: der ukrainischen Verwaltung der Nationalen Technischen Universität Donezk (DNTU) in der Ukraine, der Tohoku-Universität in Sendai, Japan, der University of Science and Technology of China in Hefei und dem Shanghai Supercomputing Center, China. Ziel der Verlängerung dieser Partnerschaften sind die weitere Förderung der Zusammenarbeit mit diesen Einrichtungen bei wissenschaftlichen Themen von gemeinsamem Interesse, gegenseitiger Wissens- und Know-how-Transfer sowie die Organisation von Tagungen und Veröffentlichungen. Die Verlängerung der Zusammenarbeit mit der DNTU wurde nur wenige Tage nach dem Einmarsch der russischen Streitkräfte in die Ukraine beschlossen und als Teil der Solidaritätsbekundung der Universität Stuttgart mit den Forschenden und Studierenden der akademischen Einrichtungen in beiden Ländern bekannt gegeben. Die Nationale Technische Universität Donezk ist mit rund 25.000 Studierenden eine der größten technischen Hochschulen der Ukraine. **CW**

Highlights 2022



Dr. Bastian Koller, Koordinator des EuroCC Projekts, begrüßte die Konferenzteilnehmer:innen und gab einen Überblick über die Ziele und Ergebnisse des Projekts. Foto: Slaven Vilus

EuroCC und CASTIEL auf dem Weg zur zweiten Förderphase

In der ersten Phase förderten EuroCC und CASTIEL erfolgreich die Zusammenarbeit zwischen nationalen Kompetenzzentren für HPC. Im September veranstaltete das HLRS nun eine erste große Projektkonferenz und bereitete den Beginn der zweiten Förderphase vor.

Seit 2020 koordiniert das HLRS EuroCC und CASTIEL, zwei von der EuroHPC Joint Undertaking (JU) finanzierte Projekte mit dem Ziel das Höchstleistungsrechnen, die Höchstleistungsdatenanalyse (HPDA) und künstliche Intelligenz (KI) in Europa zu fördern. EuroCC baute zunächst nationale Kompetenzzentren (NCCs) für HPC, HPDA und KI in 33 europäischen Ländern auf. Jedes NCC führte anschließend ein nationales HPC-Kompetenz-Audit durch und wurde zur zentralen Anlaufstelle für die HPC-Community in seinem Land. CASTIEL hat parallel als Unterstützungsprojekt gemeinsame Standards eingeführt und die internationale Zusammenarbeit sowie den Wissensaustausch und -transfer innerhalb des NCC-Netzwerks verstärkt. Diese Bemühungen tragen zu einer verbesserten Qualität von NCC-Dienstleistungen auf dem gesamten Kontinent bei – auch in Regionen, in denen Höchstleistungsrechner bislang weniger genutzt werden. CASTIEL hat zahlreiche Schulungs-, Mentoring-, Twinning- und Workshop-Aktivitäten initiiert und mit der Website EuroCC Access ein Portal geschaffen, in dem Vertreter:innen der Industrie, der öffentlichen Verwaltung und des Bildungssektors relevante HPC-Fachkenntnisse und -Ressourcen in ihren Heimatländern finden können.

Im September veranstaltete das HLRS die erste große EuroCC Konferenz in Bečići, Montenegro, unter dem Motto “Uniting Competencies for a Stronger Europe“. Während der Konferenz tauschten sich Vertreter:innen von 32 der 33 Nationalen Kompetenzzentren aus EuroCC gegenseitig über die bisherigen Erfolge, Erkenntnisse und etablierten Prozesse aus, gingen neue Kooperationen ein und planten die zweite Phase der Projekte, die Anfang 2023 beginnt.

Während der gesamten Konferenz kamen die Diskussionen immer wieder auf die Frage zurück, was die NCCs tun können, um HPC in weitere Branchen zu bringen. Wie mehrere Redner erläuterten, ist es dazu erforderlich, dass die NCCs Öffentlichkeitsarbeit betreiben: Sie sollten lernen effektiv mit der Industrie zu kommunizieren, relevante Erfolgsgeschichten präsentieren, die den potenziellen Wert von HPC aufzeigen, und (potenziellen) Nutzer:innen entsprechende Schulungen sowie Unterstützung bieten.

In einer Grundsatzrede erörterte der Executive Director der JU, Anders Dam Jensen, die Rolle von EuroCC und CASTIEL innerhalb der europäischen HPC-Strat-



In einer Podiumsdiskussion tauschten sich die Teilnehmer:innen über die Relevanz von EuroCC für die europäische HPC-Strategie aus. (v.l.n.r.): Natalie Lewandowski (HLRS), Tomas Karasek (IT4I), Daniel Opalka (EuroHPC Joint Undertaking), Espen Flage-Larsen (Universität Oslo), Milena Miljonić (Ministerium für Wissenschaft und Technologische Entwicklung, Montenegro), Guy Lonsdale (scapos AG). Foto: Slaven Vilus

tegie. „Die NCCs sind eines unserer wichtigsten Projekte“, so Jensen, der darauf hinwies, dass ein besseres Verständnis des Höchstleistungsrechnens die technologische Autonomie Europas erhöhen und zu neuen Anwendungen mit EU-weiten Vorteilen führen wird.

Daniel Opalka, Leiter des Forschungs- und Innovationssektors der EuroHPC JU, kommentierte auch die einzigartige Rolle von EuroCC innerhalb der Gesamtstrategie der JU. „Das Netzwerk der nationalen Kompetenzzentren ist ... nicht nur eines der größten Projekte, sondern auch eines der umfassendsten von der JU derzeit geförderten europäischen Projekte“, sagte er. „Die nationalen Kompetenzzentren haben eine unvorstellbare Reichweite. Mit ihnen können wir die Einführung von HPC unterstützen, insbesondere in kleinen und mittleren Unternehmen (KMUs), die bekanntermaßen schwer zu erreichen sind.“

In der nächsten Projektphase wird CASTIEL 2 nicht nur mit den NCCs zusammenarbeiten, sondern auch die strategische Zusammenarbeit zwischen den EU-geförderten Exzellenzzentren (CoEs) koordinieren. Im Gegensatz zu den NCCs, die Kompetenzen auf regionaler Ebene bündeln, entwickeln die CoEs Fachwissen nach Sektoren (z. B. Ingenieurwesen oder Biologie) und passen wichtige Codes auf künftige Exascale-Systeme an.

Die Kombination aus CoEs und NCCs soll dazu beitragen, dass das Bewusstsein für die technischen Errungenschaften der CoEs europaweit verbreitet wird und die CoEs direkter mit den NCCs zusammenarbeiten. Das ermöglicht eine verbesserte Umsetzung in Forschung und Industrie. CASTIEL 2 wird auch die Verfügbarkeit der verbesserten HPC-, KI- und Datenanalyseanwendungen der CoEs auf der nächsten Generation von EuroHPC-Petascale-, Pre-Exascale- und Exascale-Supercomputern unterstützen und die Reichweite des EuroCC-Netztes nutzen, um sicherzustellen, dass HPC-Nutzer:innen in ganz Europa darauf zugreifen und davon profitieren können. **CW**



Anders Dam Jensen, Executive Director der EuroHPC Joint Undertaking, gab einen Überblick über die europäische HPC-Strategie. Foto: Slaven Vilus



Ein detailliertes 3D-Modell des ElbX-Tunnels in virtueller Realität erleichtert Ingenieuren, Architekten und anderen Fachleuten die Planung aller Aspekte des Entwurfs und des Baus des Bauwerks.

Virtuelle Realität unterstützt beim Umstieg auf erneuerbare Energie

Das HLRS war an der Planung eines Tunnels unter der Elbe beteiligt, der grüne Energie nach Süddeutschland transportieren soll.

Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart war ein wichtiger Partner bei der Planung und Visualisierung eines Großprojekts, das die Energiewende Deutschlands unterstützt. In Zusammenarbeit mit TenneT und dem Architekturbüro Kieferle & Benk hat ein Team um Dr.-Ing. Uwe Wössner, Leiter der Visualisierungsabteilung des HLRS, ein Modell des sogenannten ElbX Tunnels und seiner Betriebsanlagen in virtueller Realität erstellt. Das Sonderbauwerk ist ein Bestandteil des SuedLink Projekts, das laut TenneT und TransnetBW vier Gigawatt Strom unterirdisch über eine Strecke von fast 700 Kilometern aus Norddeutschland in den Süden transportieren wird. ElbX, das größte Sonderbauwerk im SuedLink Projekt, unterquert mit einer Länge von mehr als fünf Kilometern die Elbe.

Der am HLRS entwickelte digitale Zwilling von ElbX integriert Computer Aided Design (CAD), Building Information Management (BIM), Geoinformationssysteme (GIS) und Simulationen in ein immersives Modell, das sich in der Visualisierungsanlage CAVE am HLRS abbilden lässt. Über mehrere Monate hinweg besuchten

viele an der Planung des Tunnels beteiligte Expert:innen das HLRS. Mit 3D-Brillen konnten sie sich durch eine detaillierte, realistische Darstellung des Bauwerks bewegen und unter anderem die Verkabelung, Kommunikation, Beleuchtung und Belüftung untersuchen. Dank des realistischen Modells und der interdisziplinären Diskussionen konnten die Projektpartner während des gesamten Prozesses Verbesserungsmöglichkeiten frühzeitig erkennen, das Budget, den Terminplan sowie die Qualität des Bauwerks einhalten. Die Projektbeteiligten gehen davon aus, dass der digitale Zwilling von ElbX auch nach Baubeginn eine wertvolle Ressource für die Bauplanung und das -management sein wird.

„Die Beiträge des HLRS zu ElbX untermalen, wie sinnvoll virtuelle Realität und digitale Zwillinge bei der Planung komplexer technischer Projekte sein können“, sagte Wössner. „Das HLRS war gerne Teil dieses Projekts und hat letztlich die Bemühungen von Baden-Württemberg und Deutschland zur Erreichung der Klima- und Nachhaltigkeitsziele unterstützt.“ **CW**

HPC für Nachhaltigkeit und Stadtplanung geht an die Öffentlichkeit

In mehreren öffentlichen Veranstaltungen diskutierte das HLRS mit interessierten Bürger:innen, Bürgermeister:innen, Stadtplaner:innen und führenden Persönlichkeiten in Kommunen über Supercomputer und deren Anwendungen.

Der Wert von Höchstleistungsrechnern (HPC) steckt nicht in der Technologie dahinter, sondern in ihrem Einsatz – mit ihnen lassen sich u.a. gesellschaftliche Herausforderungen lösen. Im Jahr 2022 organisierten Vertreter:innen des HLRS mehrere Veranstaltungen für eine breitere Öffentlichkeit, um das Bewusstsein für das Supercomputing-Zentrum und das Verständnis für einige Anwendungen zu steigern.

Im März leitete Dr. Karin Blessing vom HLRS ein Online-Seminar, in dem mehr als 60 Teilnehmende aus der Region und ganz Deutschland erfuhren, wie digitale Zwillinge die Planung in Städten und Gemeinden unterstützen können. „Digitale Planung ist in vielen Bereichen ein wichtiges Thema“, sagte Blessing, „und ob es nun um die Entwicklung großräumiger Stadtpläne, die Neugestaltung eines öffentlichen Platzes oder die Bewältigung von Verkehrsstaus geht – moderne Ansätze mit Simulation und virtueller Realität bieten eine hervorragende Möglichkeit, die Auswirkungen von Planungsentscheidungen zu verstehen und zu diskutieren.“

Blessing vertrat das HLRS auch bei der Roadshow „Gesellschaft und Natur“ der Baden-Württembergischen Gesellschaft, die im Sommer den öffentlichen Dialog über Natur, Artenschutz, Klima und Nachhaltigkeit förderte. An einem Stand an zentralen Orten in fünf Städten des Landes diskutierte das HLRS mit Anwohner:innen und Behördenvertreter:innen über die Nachhaltigkeitsbemühungen des Höchstleistungsrechenzentrums und zeigte, wie HPC zur Entwicklung nachhaltigerer Technologien und Kommunen beiträgt.

Ende Juni beteiligte sich das HLRS am Wissenschaftsfestival der Stadt Stuttgart im Stuttgarter Rathaus in Form von „digitalen Zwillingen im Einsatz“. Die Themenpalette reichte von BIM (Building Information Management), DSGVO-konformer Verkehrserfassung, mobilen Sensoren über Verkehrssimulation und Partizipation bis hin zu Umweltsimulation und interaktiven Verkehrssimulatoren.

Im September nahm das HLRS auch an der zweiten Stuttgarter Mobilitätswoche teil, einer stadtweiten Veranstaltung zum Thema „nachhaltige Verkehrsmittel“. An einem Stand am pulsierenden Stuttgarter Marienplatz stellte das Visualisierungsteam des Zentrums einen digitalen Zwilling des Standorts vor, den es innerhalb des Projekts Cape Reviso entwickelt hat. Stuttgarts Oberbürgermeister Dr. Frank Nopper eröffnete das Fest mit einem Besuch am Stand des HLRS und die Wissenschaftler:innen informierten Anwohner:innen darüber, wie sich mithilfe der vom HLRS entwickelten Forschungsmethoden Konflikte zwischen Radfahrer:innen und Fußgänger:innen reduzieren lassen. *CW*



Medical Solution Center bringt Supercomputing in die Medizintechnikbranche

CASE4Med wird Entwicklern und Herstellern von Medizinprodukten den Zugang zu Ressourcen für Simulation, Datenanalyse und künstliche Intelligenz erleichtern.

Baden-Württemberg weist eine große und wirtschaftlich starke medizintechnische Gemeinschaft auf, wobei die Branche von Simulationen, maschinellem Lernen oder künstlicher Intelligenz auf High-Performance-Computing-Systemen (HPC) bisher kaum Gebrauch gemacht hat. Um dieses technologische Potenzial ausschöpfen zu können, hat das HLRS ein neues Medical Solution Center namens CASE4Med ins Leben gerufen. Unterstützt durch eine Förderung des baden-württembergischen Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst wird das HLRS über einen Zeitraum von fünf Jahren – in Kooperation mit dem Innovations- und Forschungszentrum Tuttlingen der Hochschule Furtwangen und der SICOS BW GmbH – ein Modell ausbauen, das es bereits in der Vergangenheit umgesetzt hat, um branchenspezifische HPC-Lösungen anzubieten.

CASE4Med wird ein Netzwerk aufbauen, das Akteur:innen der baden-württembergischen Medizintechnikgemeinschaft und Expert:innen für die Entwicklung IT-gestützter und datengesteuerter Ansätze für medizinische Anwendungen umfasst. Die Teilnehmenden werden ermitteln, welche Arten von HPC-basierten Lösungen der Gemeinschaft am meisten nützen könnten und welche Ressourcen und Fähigkeiten erforderlich wären, um sie zu verwirklichen. Durch die Pflege von Kontakten und die Durchführung von Pilotprojekten, die relevante Anwendungen demonstrieren, soll CASE4Med stetig wachsen und bis zum Ende des Förderzeitraums zu einer sich selbst tragenden Mitgliedervereinigung werden.

Wie in anderen technischen Bereichen könnte Simulation Unternehmen der Medizintechnik Werkzeuge an

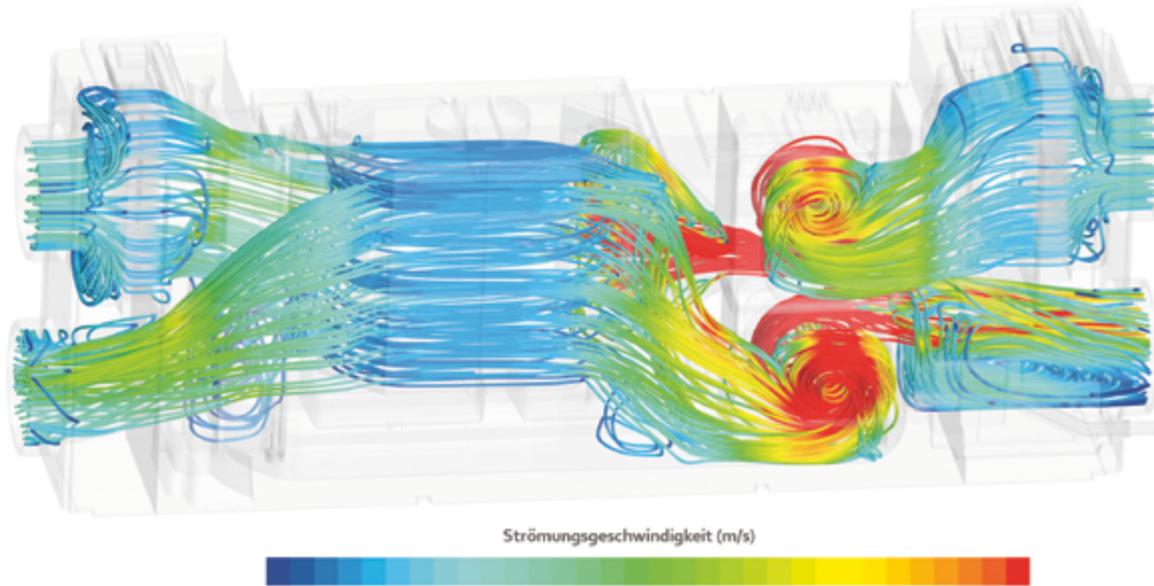
die Hand geben, die die Entwicklung und Prüfung neuer Produkte schneller und kostengünstiger machen. Simulationen könnten beispielsweise eingesetzt werden, um die Eignung von Materialien oder Komponenten für medizinische Instrumente und Implantate einzuschätzen. Sie könnte dazu beitragen, das Design von Elektronik- und Softwarekomponenten zu optimieren, die Lebensdauer der Geräte zu verbessern oder Qualitätskontrollprozesse zu verbessern. Neue Anwendungen der systematischen Datenerfassung und -analyse könnten zudem Einblicke in Produktions- oder Qualitätskontrollprozesse geben oder datengesteuerte Abläufe für die Entwicklung neuer Produkte oder Geschäftsmodelle unterstützen.

Prof. Dr.-Ing. Martin Haimerl, wissenschaftlicher Leiter des Innovations- und Forschungszentrums Tuttlingen, sieht großes Potenzial in CASE4Med. „In der Medizintechnik ist der Einsatz von Simulation und High-Performance Computing unüblich und muss systematisch aufgebaut werden“, erklärt er. „Das kollaborative Netzwerk, das das Medical Solution Center aufbauen will, könnte die Medizintechnik im ganzen Bundesstaat auf eine neue Ebene heben.“ *CW*

Simulation und künstliche Intelligenz könnten die Entwicklung und Prüfung von Geräten und Medikamenten in der baden-württembergischen Medizintechnik revolutionieren. Foto: Marcel Scholte, Unsplash



Stromlinien aus der Simulation eines Belüftungsgerätes mit zwei Radialventilatoren. Bild: ebm-papst



HPC für leisere Ventilatoren und Motoren

Ingenieure des Herstellers ebm-papst führen aeroakustische Simulationen auf dem Hawk-Supercomputer des HLRS durch, um die Produktentwicklung zu beschleunigen.

Das in einer kleinen Stadt im Jagsttal im Norden Baden-Württembergs angesiedelte Unternehmen ebm-papst ist einer der weltweit führenden Hersteller von hochwertigen Ventilatoren und Elektromotoren. Zu den Industriekunden zählen Hersteller von Heizungs-, Klima- und Kälteanlagen. Die Produkte des Unternehmens werden weltweit vertrieben.

Da viele Produkte von ebm-papst in unmittelbarer Nähe zu Menschen eingesetzt werden, liegt ein Fokus auf der Entwicklung geräuscharmer Ventilatoren. Für diese Forschungs- und Entwicklungsarbeit hat sich das Unternehmen an das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) gewandt, um Zugang zu Supercomputern zu erhalten. Mit Hawk, dem Flaggschiff-Rechner des Zentrums, führen Ingenieure von ebm-papst hochauflösende Aeroakustik-Simulationen durch. Diese hel-

fen ihnen dabei, ein tieferes Verständnis der komplexen Schallentstehungsmechanismen von Ventilatoren zu erlangen.

Betreut wird diese Arbeit von Dr. Andreas Lucius, einem Ingenieur in der Vorentwicklungsabteilung von ebm-papst, der Berechnungsmethoden für die aeroakustische Simulation bewertet und entwickelt. Zwar setzt das Unternehmen seit vielen Jahren Simulationen zur Modellierung der Aerodynamik auf dem firmeneigenen Rechencluster ein, die aeroakustische Simulation stellt jedoch andere Anforderungen, für die ein Supercomputer wie Hawk die idealen Voraussetzungen liefert.

„Wir haben ein kleineres Computercluster im Haus, das für viele herkömmliche Aerodynamiksimulationen ausreicht, aber aeroakustische Simulationen erfordern

mehr Leistung“, erklärt Lucius. „Wir brauchen für die Auflösung kleiner turbulenter Strukturen ein sehr feines Rechengitter und andere Modellierungsansätze. Dies kann schnell mehr als 10.000 CPU-Stunden in Anspruch nehmen, erfordert hochparallele Hardware und dauert auf unseren eigenen Systemen zu lange. In diesen Situationen erhalten wir dank des HLRS-Supercomputers unsere Ergebnisse viel schneller.“

Simulation ergänzt Messungen bei der Lokalisierung von Schallquellen

Bevor sie auf den Markt kommen, müssen die Ventilatoren von ebm-papst strenge Tests durchlaufen. Dazu gehören experimentelle Untersuchungen in einem Windkanal am Firmensitz in Mulfingen. Zusätzlich zu einer standardisierten Messung der Schalleistung ist ein Array hochempfindlicher Mikrofone, eine sogenannte „akustische Kamera“ im Einsatz. Damit können die Ingenieure den Ort der Schallentstehung auf der rotierenden Ventilatorschaufel bestimmen. Dieses System ist sehr hilfreich in der Entwicklung, benötigt aber viele hochwertige und teure Mikrofone, die innerhalb des Messraumes platziert werden müssen. In einer aeroakustischen Simulation lassen sich hingegen beliebig viele virtuelle Mikrofone frei im Raum ohne großen Mehraufwand platzieren. Damit lässt sich die Qualität der Lokalisation von Schallquellen verbessern.

Bei der Simulation eines sich drehenden Ventilators verwenden Ingenieure die Konstruktionsdaten der Maschine und unterteilen den umgebenden Bereich rechnerisch in ein feinmaschiges Gitter. Mit kommerzieller Software berechnen sie dann, wie sich die Luft in jeder dieser Zellen im Lauf der Zeit bewegt. Auf der Grundlage physikalischer Prinzipien helfen die Simulationen den Ingenieuren, Stellen zu identifizieren, an denen unerwünschte Turbulenzen oder Druckschwankungen auftreten könnten. Beides erzeugt Druckwellen in der Luft, die das menschliche Ohr als Schall wahrnimmt.

Bei ebm-papst wird die aeroakustische Simulation iterativ ergänzend zu Experimenten eingesetzt. Bei der Entwicklung eines neuen Ventilators können Simulationen beispielsweise frühzeitig Informationen liefern, mit

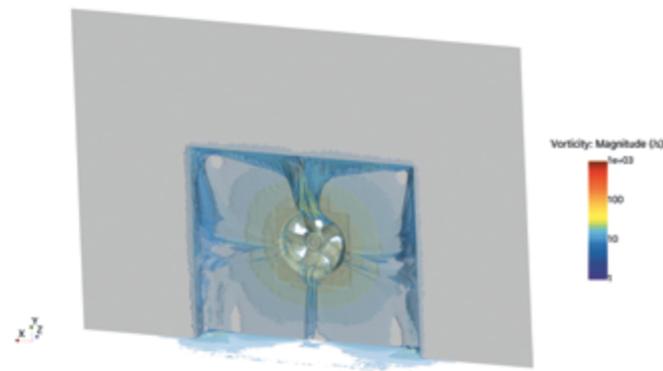
deren Hilfe Ingenieure schneller zu leiseren Designs gelangen. Gleichzeitig lassen sich die aus Experimenten gewonnenen Daten zur Validierung und Verbesserung der Präzision und Zuverlässigkeit von Berechnungsmodellen verwenden.

Dieser Ansatz hat dem Unternehmen auch bei der Optimierung des Normprüfstandes geholfen. Bei Messungen im Labor werden Töne mit der Blattfolgefrequenz und deren Vielfache gemessen, die in der Theorie für die ungestörte Windkanalströmung nicht signifikant sein sollten. In einem Fall jedoch wurden bei der Messung unerwartete Töne festgestellt. Als Lucius eine Simulation mit Hawk durchführte, die den Ventilator und das umgebende Labor berücksichtigte, konnte die Geräuschquelle eindeutig als eine Turbulenzstruktur identifiziert werden. Die Simulation zeigte, dass das Geräusch oberhalb des Ventilators durch eine Wechselwirkung zwischen der sich bewegenden Luft und den Schalldämmplatten des Windkanals entstand. Beim Vergleich mit den experimentellen Daten, die mit dem Mikrofonarray erfasst wurden, bestätigten die Techniker die Ergebnisse der Simulation und änderten die Form der Dämmplatten, um die Töne zu beseitigen. In der standardisierten Schalleistungsmessung ließ sich der Pegel der Töne um bis zu 10 dB und der Pegel der Schalleistung um bis zu 1 dB(A) reduzieren.

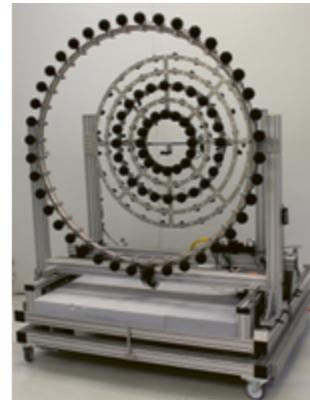
Von Vorteil sind für das Unternehmen die geringeren Kosten für die Nutzung des Systems des HLRS im Vergleich zu kommerziellen Cloud-Anbietern. „Für jedes Experiment müssen wir einen Prototyp bauen, den Windkanal betreiben und Messungen durchführen. Das kostet Zeit und Geld“, erklärt Lucius. „Wenn wir die Simulationengenauigkeit verbessern können, hilft uns das weiter in der Geschwindigkeit des Entwicklungsprozesses und hat ein enormes Einsparungspotential.“

Die Zukunft der aeroakustischen Simulation

Lucius erwartet, dass neue Methoden und der Zugang zu größeren und vielfältigeren HPC-Systemen neue Möglichkeiten für die Forschung und Entwicklung bei ebm-papst eröffnen könnten.



Visualisierung der Strömungsstrukturen im Windkanal mit Hilfe der Wirbelstärke. Bild: ebm-papst



Mikrofon Array zur experimentellen Lokalisierung von Schallquellen im ebm-papst Windkanal. Foto: ebm-papst

Maßgeschneiderte Lösungen für Hersteller sind bereits ein Markenzeichen des Unternehmens. Wenn ein Kunde beispielsweise einen seiner Ventilatoren in ein bestimmtes Klimagerät einbauen möchte, kann ein Prototyp experimentell im Windkanal getestet werden. Bei diesen komplexen Systemen ist die aeroakustische Simulation aber derzeit sehr rechenintensiv. „Wir reden hier nicht mehr von 10.000 CPU-Stunden, sondern eher von 100.000 CPU-Stunden“, sagt Lucius. „Das sind Fälle, die durchaus interessant sind und wir suchen im Moment nach Methoden die Rechenzeiten auch für solche komplexen Fälle zu reduzieren. Unser Ziel ist es, auch solche komplexen Einbaufälle strömungsakustisch nicht nur zu analysieren, sondern mit vielen Simulationsläufen mathematisch zu optimieren.“

Lucius führt seine Berechnungen hauptsächlich auf CPUs durch, den traditionellen Arbeitspferden für HPC-Simulationen. Mit der wachsenden Verfügbarkeit von GPU-geeigneten Strömungslöser lassen sich in der Zukunft Rechnungen schneller durchführen. Für die aeroakustische Simulation ist ein solcher relevanter Ansatz die Lattice-Boltzmann-Methode, die sich aufgrund der Architektur der Prozessoren für GPUs gut eignet. Wenn solche Methoden ausgereifter werden, könnten sie große Potenziale für die Modellierung komplexer

aeroakustischer Systeme bieten. Darüber hinaus ist der Stromverbrauch von GPUs wesentlich niedriger im Vergleich zu traditionellen CPUs, ein wichtiges Kriterium für ebm-papst.

Lucius sieht auch Chancen auf dem neuen Gebiet der künstlichen Intelligenz. „Durch unsere Experimente hat ebm-papst Messungen aller Art gesammelt, einschließlich Daten aus der Strömungsdynamik, Aeroakustik, Elektrik und Thermik“, sagt er. „Jetzt stehen wir vor der Frage, wie diese Daten für die Zukunft genutzt werden können.“ Auch hier könnte der Zugang zu Höchstleistungsrechnern hilfreich sein, da Algorithmen mit neuronalen Netzen Datenanalysen durchführen könnten, die eine schnellere Bewertung von Designs im Rahmen der Entwicklung ermöglichen. Mithilfe von KI ließe sich eine Vielzahl an Optimierungssimulationen durchführen – ein Ansatz, der derzeit mit CPU-basierten Systemen sehr rechenintensiv ist.

Auch wenn die Entwicklung dieser Methoden noch einige Zeit benötigt, zeichnet sich ab, dass das Höchstleistungsrechnen weiterhin wichtige Werkzeuge für Unternehmen bereitstellen wird, die ebenfalls Vorreiter des Engineerings sind. *CW*

Neuer HLRS-Lenkungsausschuss beginnt Amtszeit

Ein multidisziplinäres Gremium von Beratern wird dazu beitragen, die weitere Entwicklung des Zentrums zu gestalten.

Der Lenkungsausschuss der HLRS setzt sich aus Mitgliedern der Nutzergemeinschaft des Zentrums und anderen Expert:innen für Höchstleistungsrechnen und -Anwendungen zusammen. Er berät die Führungskräfte des HLRS und ist für wichtige Entscheidungen verantwortlich. Dazu zählen unter anderem die Überwachung der Systemnutzung, die Festlegung von Richtlinien für die Zuteilung von Rechenzeit und die Beteiligung an der Entscheidungsfindung bei der Auswahl von Hardware und Software.

Während seiner ersten Sitzung im Oktober wählte der neue Lenkungsausschuss Prof. Dr. Thomas Ludwig, Direktor des Deutschen Klimarechenzentrums, zum Vorsitzenden des Ausschusses. Prof. Dr. Peter Bastian, Gruppenleiter für Wissenschaftliches Rechnen an der Universität Heidelberg, wurde zum stellvertretenden Vorsitzenden gewählt. Die Amtszeit der beiden beträgt drei Jahre. *CW*



Mitglieder des neuen HLRS-Lenkungsausschusses (v.l.n.r.): Andrea Beck, Roland Potthast, Kira Rehfeld, Miriam Schulte, Anita Schöbel, Thomas Ludwig, Andreas Frommer, Peter Bastian und Volker Wulfmeyer. (Nicht abgebildet: Lars Pastewka, Jörg Schröder, Birgit Strobel).

Die Mitglieder des neuen HLRS-Lenkungsausschusses sind folgende:

Vorsitzender

Prof. Dr. Thomas Ludwig
Deutsches Klimarechenzentrum (DKRZ)

Stellvertretender Vorsitzender

Prof. Dr. Peter Bastian
Universität Heidelberg

Mitglieder des Lenkungsausschusses

Prof. Dr. Andrea Beck
Universität Stuttgart

Prof. Dr. Andreas Frommer
Bergische Universität Wuppertal

Prof. Dr. Lars Pastewka
Universität Freiburg

Prof. Dr. Roland Potthast
Deutscher Wetterdienst

Prof. Dr. Kira Rehfeld
Universität Tübingen

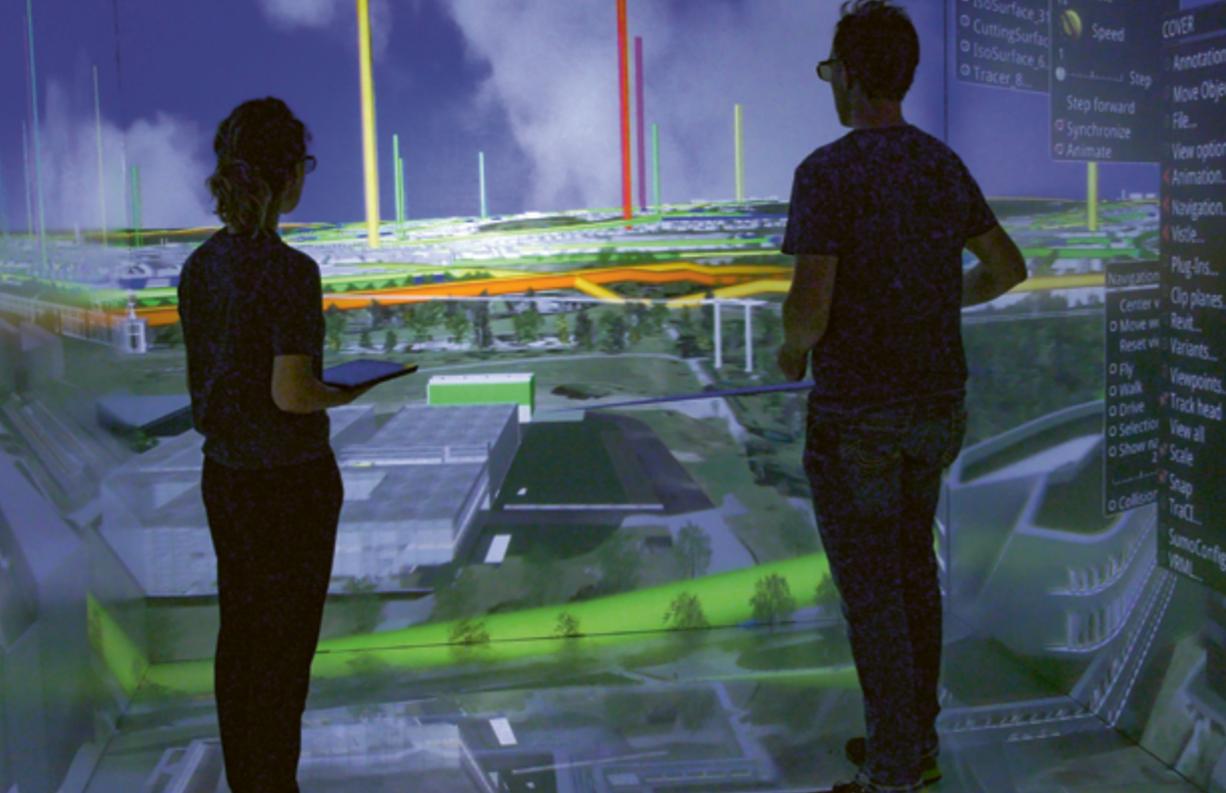
Prof. Dr. Anita Schöbel
Fraunhofer-Institut für Techno- und
Wirtschaftsmathematik – ITWM

Prof. Dr.-Ing. habil. Jörg Schröder
Universität Duisburg-Essen

Prof. Dr. rer. Nat. Miriam Schulte
Universität Stuttgart

Prof. Dr. Birgit Strobel
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Prof. Dr. Volker Wulfmeyer
Universität Hohenheim



Im DiTEnS-Projekt wird die Visualisierungsabteilung des HLRS den digitalen Zwilling der Universität Stuttgart weiterentwickeln und daraus Strategien für eine klimaneutrale Gestaltung des Campus ableiten.

Stuttgarter Forschungsinitiative wird Energiewende in Kommunen unterstützen

Als Teil der Stuttgart Research Initiative DiTEnS wird das HLRS digitale Zwillinge einsetzen, um die Transformationsprozesse zu einem klimaneutralen Energiesystem in urbanen Umfeldern zu verbessern.

Das Klimaschutzpaket der Europäischen Union wie auch das nationale Klimaschutzgesetz enthalten ehrgeizige Ziele für die Reduzierung der Treibhausgasemissionen in Europa. Damit dies gelingen kann, muss ein Schwerpunkt auf der Verringerung der Emissionen liegen, die durch die Beheizung von Gebäuden entstehen. Die Gebäudewärme verursacht derzeit etwa ein Fünftel der Treibhausgasemissionen und verbraucht etwa ein Drittel der Energie in Deutschland.

Die benötigte Steigerung von Gebäudeeffizienz und der Einsatz erneuerbarer Energiequellen für die moderne Beheizungsinfrastruktur sind nicht nur technische Herausforderungen, sondern auch ein Gemeinschaftsakt. Unterschiedliche Akteure wie Energieversorger, Hauseigentümer, Bewohner, Handwerk, Heiztechnikhersteller und weitere haben ihre jeweiligen Perspektiven und Interessen, die berücksichtigt werden müssen. Für viele Kommunen und Akteure ergeben sich aus den tech-

nischen, wirtschaftlichen und sozialen Aspekten dieser Maßnahmen jedoch große Herausforderungen.

Eine neue von der Universität Stuttgart angekündigte multidisziplinäre Forschungsinitiative zielt darauf ab, die Kommunen sowie involvierte Akteure bei der Energiewende zu unterstützen. In der Stuttgart Research Initiative (SRI) DiTEnS (Discursive Transformation of Energy Systems) werden Forschende des HLRS gemeinsam mit Wissenschaftler:innen anderer Institute der Universität Stuttgart eine Methodik sowie Technologien für die lokale Weiterentwicklung der Energiewende aufbauen. Unterstützt durch moderne Algorithmen aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz und Visualisierungen entwickelt das Team einen diskursiven Ansatz, der alle Stakeholder eines Gebiets in die Gestaltung der örtlichen Transformationsprozesse einbindet.

DiTEnS wird von der Carl-Zeiss-Stiftung (CZS) innerhalb des Programms „CZS Durchbrüche – RessourcenEffizienz“ für sechs Jahre gefördert. Die Universität Stuttgart beteiligt sich mit zusätzlichen Mitteln und wird damit einen langfristigen neuen Forschungsschwerpunkt sowie ein dazugehöriges Graduiertenkolleg aufbauen. Prof. Dr.-Ing. Kai Hufendiek vom Institut für Energiewirtschaft und Rationelle Energieanwendung (IER) wird der Sprecher von SRI DiTEnS.

Als erste Hauptaufgabe von DiTEnS werden Forschende der Uni Stuttgart Methoden entwickeln, mit denen sich die komplexe Bestandssituation in den betrachteten Straßenzügen und Stadtvierteln effizient ermitteln lässt. Von der regionalen Ebene bis hin zu einzelnen Gebäuden wird der Ansatz für Kommunen, Eigentümer und weitere Akteure Strategien zur Nutzung erneuerbarer Energien, Verbesserung der Energieeffizienz, für den Einsatz intelligenter Netze, verfügbarer Abwärme, Elektromobilität und moderner Energiespeichertechnologien wie auch die Flexibilisierung der Nachfrage veranschaulichen.

Wissenschaftler:innen aus der Visualisierungsabteilung des HLRS unter der Leitung von Dr. Uwe Wössner ent-

wickeln aus den Ergebnissen dieser Modellierung digitale Zwillinge der Gebäude- und Energiesysteme in ihrem urbanen Kontext. Betrachtet in einer interaktiven 3D-Visualisierungsanlage wie der CAVE des HLRS vereinfachen digitale Zwillinge die Darstellung von komplexen Systemen wie der Energie- und Gebäudeinfrastruktur eines Stadtgebiets. So kann man zum Beispiel verstehen, wie sich Veränderungen zur Erreichung von Klimaneutralität vor Ort und im Gesamtsystem auf Gebäude, Straßenzüge oder Stadtviertel und ihren vernetzten Betrieb im Gesamtsystem auswirken.

Aufbauend auf dem Fachwissen von Prof. Dr. Cordula Kropp, Direktorin des Zentrums für interdisziplinäre Risiko- und Innovationsforschung (ZIRIUS), verfolgt DiTEnS auch eine sozialwissenschaftliche Perspektive, um für eine gelingende Energie- und Wärmewende gemeinsam mit den verschiedenen Stakeholder-Gruppen Empfehlungen zu erarbeiten. Diese Anstrengungen werden ausschlaggebend für den Erfolg der Energiesparmaßnahmen sein. Das Projekt fördert den transdisziplinären Dialog, um Konflikte zwischen allen Beteiligten der Energiewende zu reduzieren und gemeinsame Perspektiven zu fördern.

Die Universität Stuttgart hat sich zum Ziel gesetzt, bis zum Jahr 2030 klimaneutral zu werden. DiTEnS beginnt mit einer Studie, die die Energie- und Gebäudeinfrastruktur der Universität erfassen und mögliche Maßnahmen empfehlen wird. Die Forschenden werden sich unter anderem mit der Frage befassen, wie sich die Abwärme des Supercomputers Hawk am HLRS zur Beheizung anderer Gebäude nutzen lässt.

Perspektivisch wird DiTEnS auch weitere Fallstudien durchführen und mit Gemeinden aus dem Großraum Stuttgart bzw. Baden-Württemberg zusammenarbeiten, um weitere Strategien für eine nachhaltige Transformation urbaner Energiesysteme zu ermitteln und digitale Zwillinge in Partizipationsprozessen einzusetzen. Letztlich möchten die Forschenden dazu beitragen, die Energiewende in Deutschland zu beschleunigen und die Umsetzung der Klima- und Nachhaltigkeitsziele zu verbessern. **CW**

Anbindung von HPC an Windparks

Das neue Forschungsprojekt WindHPC erarbeitet Strategien zur Steigerung der Energieeffizienz von Höchstleistungsrechnern, Software und Arbeitsabläufen.

In Zusammenarbeit mit mehreren deutschen Forschungsinstituten und der WestfalenWIND IT GmbH & Co KG | windCORES koordiniert das HLRS ein neues Forschungsprojekt, bei dem zum ersten Mal Recheninfrastrukturen an Standorten der Windenergieerzeugung mit einem Höchstleistungsrechenzentrum kombiniert werden sollen. Ziel des Projekts ist es, überschüssige Energie aus Windkraftanlagen effizient einzusetzen und vermehrt Ökostrom in der rechenintensiven Forschung zu nutzen.

WindHPC verfolgt eine ganzheitliche Strategie mit Fokus auf Hardware und weitere Elemente des Lösungsprozesses, die sich auf die Energieeffizienz von Simulationen auswirken. Hierfür wird genau untersucht, wie Rechenaufgaben innerhalb einer verteilten Rechenarchitektur zugewiesen werden, wie die aus einer Simulation gewonnenen Daten verwaltet und wie Simulationsalgorithmen ausgewählt werden. Auf diesen Ebenen wird WindHPC den Stromverbrauch und die Leistung als Basis für Kosten-Nutzen-Analysen heranziehen, die das Höchstleistungsrechnen (HPC) nachhaltiger machen könnten.

Die Informatiker:innen am HLRS werden die Arbeitsabläufe bei der Übertragung und dem Speichern von Daten optimieren. Diese sind notwendig, wenn eine Simulation über Netzwerke verteilt wird, wie es zum Beispiel in der Anbindung eines HPC-Zentrums an Rechencluster in Windparks der Fall ist. In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern werden sie auch Methoden zur Nutzung von Leistungsdaten für das Autotuning von Algorithmen und die intelligente Planung einer Simulation entwickeln. Mithilfe dieser Methoden lässt sich der Stromverbrauch senken. Auf Clusterebene wird WindHPC das Systemlebenszyklus-Management und die Auswirkungen von Schwankungen der Strom-

erzeugungskapazitäten untersuchen, die sich zum Beispiel aus wechselnden Windverhältnissen ergeben.

In dem Projekt stehen praktische HPC-Anwendungen für die Verfahrenstechnik in der chemischen Industrie im Vordergrund. Aus diesen Anwendungsfällen werden digitale Zwillinge entwickelt. Das WindHPC-Team wird auch den Stromverbrauch bei der Visualisierung wissenschaftlicher Ergebnisse untersuchen. Darüber hinaus möchten die Forschenden mithilfe von Leistungskennzahlen und Kosten-Nutzen-Analysen von Simulationen besser verstehen, in welchen Fällen „approximatives Rechnen“ sinnvoll ist. Dabei werden präzise wissenschaftliche Ergebnisse mit möglichst geringem Energieverbrauch in Einklang gebracht. Die Ergebnisse könnten dazu beitragen, wichtige Fragen für die Zukunft des HPC zu beantworten: Steht das aus bestimmten Simulationen erhaltene Wissen in einem angemessenen Verhältnis zu der Energie, die sie verbrauchen? In welchen Situationen könnten kleinere, weniger präzise und energieintensive Algorithmen und Simulationen Forschenden dennoch die benötigten Informationen liefern?

WindHPC wird vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) innerhalb der GreenHPC-Initiative gefördert. [CW](#)

WindHPC wird erstmals Rechner, die sich in einem Windpark befinden, mit einem Höchstleistungsrechenzentrum verbinden. [Bild: iStock.com/ezyipix](#)



Die Verbreitung von Fehlinformationen, Desinformationen und Malinformationen hat zu einem weit verbreiteten Gefühl der – wie Wissenschaftler es nennen – epistemischen Unsicherheit geführt.

Vertrauen schaffen im Angesicht von Desinformation

Eine vom HLRS organisierte Konferenz beschäftigte sich mit den Ursprüngen von Desinformationen, ihren Auswirkungen und mögliche Gegenmaßnahmen.

Die Neigung, falschen Informationen Glauben zu schenken und nach diesen zu handeln, ist nichts Neues. Mit dem Aufkommen der sozialen Medien und der Polarisierung der öffentlichen Meinung ist es jedoch dringender denn je, zu verstehen, wie und warum dies geschieht. Mit der Unterstützung des Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg erforscht die Abteilung Philosophy of Computational Sciences des HLRS, wie man die Vertrauenswürdigkeit von Informationen sowohl in den Computerwissenschaften als auch in der Gesellschaft bewerten und verbessern kann.

Während einer dreitägigen internationalen Konferenz zum Thema „Trust & Disinformation“ gingen Forschende aus diversen Bereichen am HLRS der Frage nach, wie Desinformationen – in Kombination mit technologischen, soziologischen, institutionellen und politischen Faktoren – sowohl zu fehlgeleitetem Glauben in Falschinformationen führt als auch das gegenseitige Vertrauen innerhalb einer Gesellschaft schädigen kann.

Wie mehrere Vortragende auf der Konferenz betonten, hat die komplexe Informationslandschaft sowohl zu einer Vermehrung von Falschinformationen als auch einer Vertrauenskrise geführt. Die fehlende Klarheit und Unstimmigkeiten in Bezug auf grundlegende Fakten er-

schweren die öffentliche Diskussion und Entscheidungsfindung. Dabei erklärten die Referenten, dass die Neigung eines Einzelnen, Desinformationen zu glauben, nicht nur das Ergebnis der Algorithmen in den sozialen Medien ist. Unter anderem die individuellen Überzeugungen und kognitiven Prozesse, soziale Beziehungen, die Bildung und sogar mattersuchende Funktionen des Gehirns spielen auch eine Rolle. Um erfolgreich gegen Desinformation vorgehen zu können, muss man besser verstehen, wie die zuvor genannten und viele andere Faktoren zusammenwirken.

Mögliche Maßnahmen zur Bekämpfung der Verbreitung von Desinformationen wurden auf der Konferenz diskutiert. Zu den Vorschlägen gehören Kampagnen zur Medienkompetenz, Web-Plugins, die die Vertrauenswürdigkeit bewerten oder die Faktenüberprüfung erleichtern, Algorithmen zum Löschen von Desinformationen aus dem Internet oder sogar Crowdsourcing-Warnungen vor Desinformationen. Zwar erscheinen diese Maßnahmen sinnvoll und technisch machbar, für die Teilnehmenden der Veranstaltung blieb aber offen: Wer sollte die Befugnis haben, „gute“ Informationen von „schlechten“ Informationen zu unterscheiden? Diese Frage ist im Hinblick auf die Grundrechte und den freien Willen sehr kritisch. Sie bringt Herausforderungen in Bezug auf Legitimität und Vertrauen mit sich. [CW](#)

HLRS in Zahlen

138 Beschäftigte **2 Gastwissenschaftler:innen**

 **99** Wissenschaftler:innen

 **34** Nichtwissenschaftler:innen

 **2** Studentische Hilfskräfte

 **3** Wissenschaftliche Hilfskräfte

57
Vorträge von
Mitarbeitenden
des HLRS

Systemnutzung

2,887 Milliarden
Core-Stunden

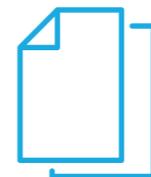
Berichtigung, Systemnutzung (November 2023): Im Jahr 2022 wurden 2,887 Milliarden Core-Stunden für Großprojekte auf HLRS-Systemen genehmigt. Insgesamt wurden 4,364 Milliarden Core-Stunden durch GCS- und PRACE-Projekte in Anspruch genommen. Die Gesamtnutzung, einschließlich akademischer und industrieller Nutzer, belief sich im auf 4,639 Mrd. Core-Stunden.

130
Nutzerprojekte

66
Industrielle Kunden

176
Publikationen der Nutzer:innen

Publikationen



26 Veröffentlichungen in Fachzeitschriften, Büchern und Konferenzen

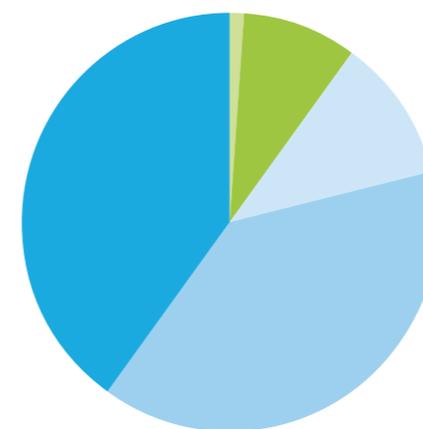
4 Bücher

Aus- und Weiterbildung

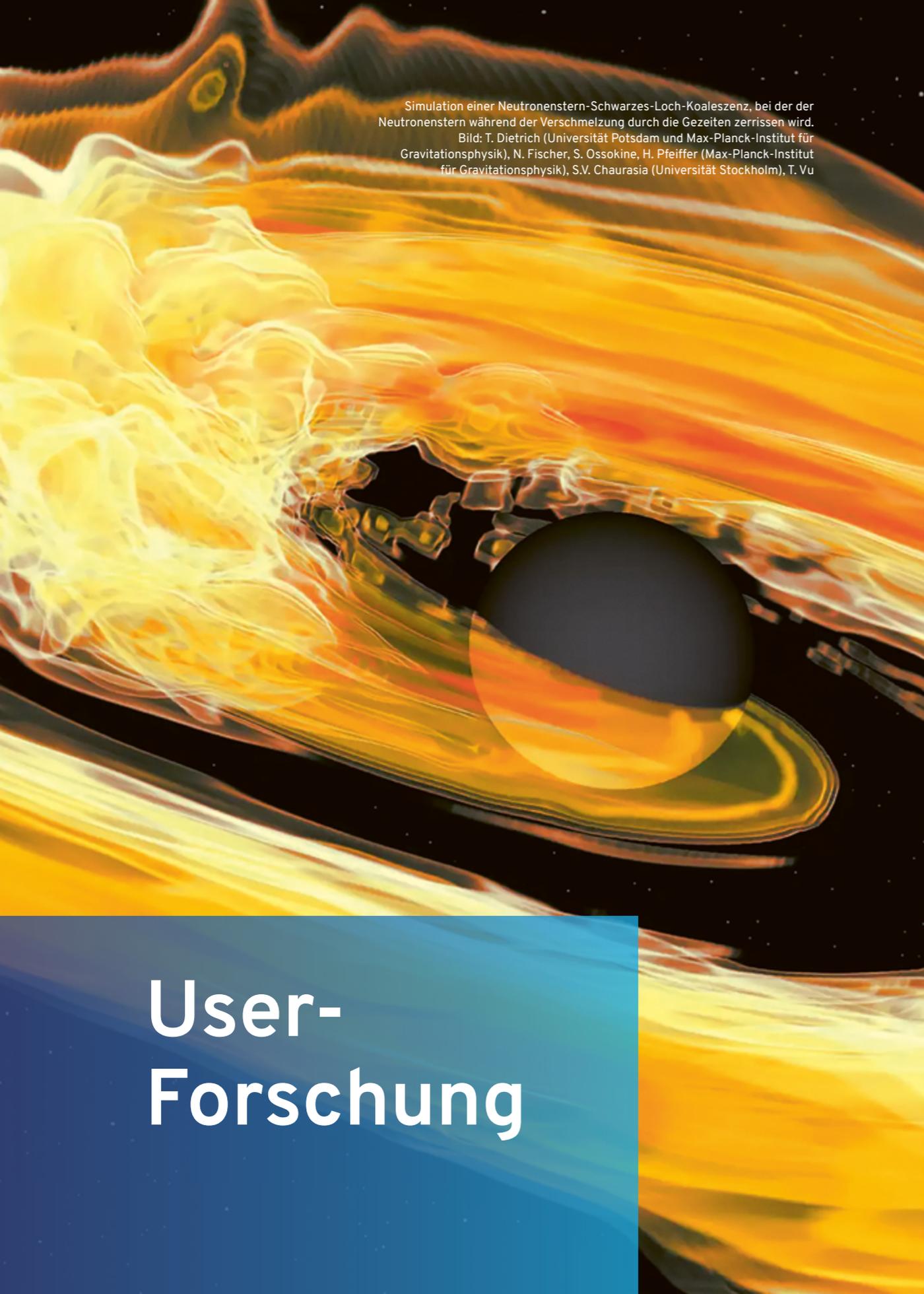


 **718** 
Gäste am HLRS

Drittmittel



6.534.118 €

A detailed simulation of a neutron star-black hole merger. The scene is set against a dark, starry background. In the center, a dark, spherical black hole is surrounded by a bright, glowing accretion disk. To the left, a large, turbulent, yellow and orange structure represents the neutron star being consumed. The overall image is a vibrant, multi-colored simulation of these celestial events.

Simulation einer Neutronenstern-Schwarzes-Loch-Koaleszenz, bei der der Neutronenstern während der Verschmelzung durch die Gezeiten zerrissen wird.
Bild: T. Dietrich (Universität Potsdam und Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik), N. Fischer, S. Ossokine, H. Pfeiffer (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik), S.V. Chaurasia (Universität Stockholm), T. Vu

User- Forschung

Wenn Sterne zusammenstoßen

Mithilfe neuer Beobachtungsdaten von Gravitationswellen und elektromagnetischen Signaturen nutzen Forschende der Universität Potsdam Supercomputer, um die Verschmelzung von Neutronensternen zu verstehen.

Im Jahr 2015 feierten Astrophysiker, Astronomen und Astronomiebegeisterte eine spannende Entwicklung. Etwa 100 Jahre lang hatten Forschende Hypothesen über die Existenz von Gravitationswellen aufgestellt – Wellen der Schwerkraft in der Raumzeit, die von großen, gewaltigen Ereignissen im Kosmos wie Supernovas oder Neutronensternverschmelzungen verursacht werden – konnten ihre Existenz aber nie direkt beweisen. Als das Laser-Interferometer-Gravitationswellen-Observatorium (LIGO) in den Vereinigten Staaten ein eindeutiges Gravitationswellenereignis nachwies, bauten Forschende auf dieser Erkenntnis auf, um die astrophysikalische Forschung weiter voranzubringen.

„Seit 2015 haben wir etwa 100 Gravitationswellen-Ereignisse gesehen. Diese Art der Forschung ist extrem neu und birgt ein enormes Potenzial für zusätzliche Erkenntnisse, die wir derzeit nicht anders erlangen können“, sagt Prof. Tim Dietrich, Forscher an der Universität Potsdam. Seitdem nutzen Dietrich und seine Forschungsgruppe Höchstleistungsrechner, um kosmische Phänomene zu simulieren, die Gravitationswellen erzeugen. Das Team simuliert auf dem Supercomputer Hawk des HLRS, was passiert, wenn binäre Neutronensterne zusammenstoßen. In den vergangenen drei Jahren hat das Team bedeutende Fortschritte bei der Modellierung dieser komplexen Ereignisse erreicht. Die Simulationen auf Hawk haben zu mehr als einem Dutzend wissenschaftlicher Veröffentlichungen beigetragen, darunter Artikel in den führenden Fachzeitschriften *Nature* und *Science*.

Aufeinandertreffen

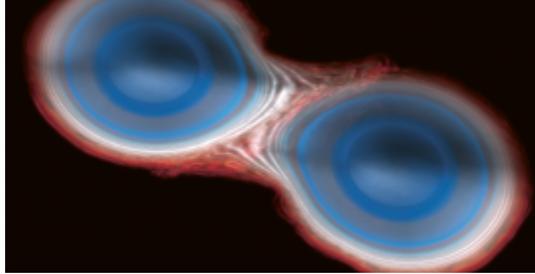
Im Grunde sind Neutronensterne die fossilen Überreste von massereichen Sternen, die das Ende ihres Lebenszyklus erreicht haben. Wenn Sternen der Brennstoff ausgeht, beginnen sie zu kollabieren, bevor sich ihre äu-

ßeren Schichten in einer Supernova explosionsartig nach außen ausdehnen. Diese gewaltigen Ereignisse erzeugen Gravitationswellen und schleudern schwere Elemente und andere Materialien durch das Universum. Das verbleibende Material kühlt auf 1.000 Grad Celsius ab, verdichtet sich weiter und wird zu einem ultradichten Neutronenstern. Wenn zwei dieser Objekte zu nahe aneinander vorbeidriften, fusionieren sie aufgrund der starken Gravitationskraft und bilden einen viel größeren Neutronenstern oder es entsteht ein Schwarzes Loch.

Astrophysiker können die Zusammenschlüsse von Neutronensternen anhand ihrer Beobachtungssignaturen, wie etwa Gravitationswellen, nachweisen. Ergänzend zu diesen Methoden simulieren Wissenschaftler:innen diese Ereignisse auch mithilfe von Supercomputern. Dank Simulationen können sie grundlegend verstehen, wie diese Ereignisse Gravitationswellen und elektromagnetische Signale erzeugen und Materialien durch das Universum schleudern.

Dazu benötigen Forschende ein zuverlässiges Modell, das die komplexen physikalischen Wechselwirkungen genau darstellen kann, die in diesen massiven Systemen auf zahlreichen Skalen entstehen. Das erfordert weltweit führende Supercomputer und selbst die leistungsfähigsten Maschinen können diese Ereignisse nicht vollständig nach Grundprinzipien simulieren. So musste die Forschungsgruppe um Dietrich Wege finden, um die Effizienz der Berechnungen zu verbessern, ohne dabei echte physikalische Zusammenhänge zu vernachlässigen.

Dank der realistischen Simulation von Neutronensternverschmelzungen kann das Team die Informationen der sogenannten “Multi-messenger-physics“ miteinbeziehen. Wie der Name schon sagt, fassen “Multi-messen-



Simulation zweier verschmelzender Neutronensterne mit einer Masse von jeweils 1,35 Sonnenmassen. Von Rot nach Blau sind die zunehmenden Dichten dargestellt. Bildnachweis: T. Dietrich (Universität Potsdam und Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik).

ger-physics“ Informationen zusammen, die mehrere physikalische Phänomene beschreiben. Dies ermöglicht ein umfassenderes Bild des Verhaltens von Materialien auf einer grundlegenden Ebene. Messungen von Merkmalen wie Photonen (Licht), einer geheimnisvollen Klasse von Elementarteilchen namens „Neutrinos“, hochenergetischer kosmischer Strahlung und Gravitationswellen liefern den Forschern wertvolle, detaillierte Informationen. Obwohl diese Informationen sowohl im kleinen als auch im großen Maßstab vorhanden sind, lassen sie sich kaum in eine einzige Simulation integrieren, die das gesamte System genau wiedergibt. „Wir müssen 5.000 Operationen für die Entwicklung eines einzigen Punktes in unserem Rechengitter durchführen“, sagt Anna Neuweiler, Doktorandin in Dietrichs Gruppe. „Natürlich besteht unser Gitter aus vielen Punkten, sodass wir selbst für nur eine zeitliche Entwicklung sehr viel Kapazität für die Lösung unserer Gleichungen benötigen.“

Mit Hawk konnte das Team einen Versuch einer genauen Simulation von Neutronensternverschmelzungen auf der Grundlage erster Prinzipien erreichen. Dies gelang, indem die Forschenden die Auflösung von Teilen der Simulation, die für die Forschung weniger relevant sind, selektiv verringerte. Darüber hinaus verglichen die Wissenschaftler:innen die Daten der „Multi-messenger-physics“ in ihren Simulationen mit ergänzenden Schwerionenkollisionsexperimenten, die in speziellen experimentellen Einrichtungen auf der Erde durchgeführt werden. Dieser kombinierte Ansatz hat es dem Team ermöglicht, den Stand der Technik bei der Erforschung der Verschmelzung von binären Neutronenstarts voranzutreiben. Außerdem plant die Gruppe eine zuverlässige Anwendung zu entwickeln, die sie in den kommenden Jahren mithilfe weiterer physikalischer Berechnungen nach den Grundprinzipien verbessern möchte. Zwar hat das Team bereits größere Simulationen an anderen Systemen durchgeführt, doch der Zugang zu Hawk legte den Grundstein für ihren erfolgreichen Simulationsansatz.

„Ich kann nicht auf eine große Errungenschaft unserer Arbeit verweisen, denn diese Entwicklungen insgesamt zielen darauf ab, ein besseres Verständnis der physikalischen Zusammenhänge zu bekommen. Das bedeutet, dass auch Simulationen, die sich schrittweise entwickeln, immer noch notwendig sind und in Zukunft vielleicht sogar noch wichtiger werden. Es ist eher ein Marathon als ein Sprint“, so Dietrich.

Turbulenzen voraus

Nachdem das Team die Berechnungseffizienz seines Codes erfolgreich verbessert hat, möchte es nun noch mehr Details in die Simulationen einbeziehen. Anlässlich ihrer Doktorarbeit hat Neuweiler damit begonnen, Magnetfeldberechnungen nach den Grundprinzipien in den Code des Teams zu integrieren, wodurch die Rechenanforderungen erheblich steigen. „Um zu simulieren, was nach der Verschmelzung von Neutronensternen passiert, müssen wir vor allem die Rolle von Magnetfeldern verstehen. Das hilft uns dabei, die Ströme der Materie genauer zu beschreiben“, sagt sie. „Hierfür können wir zusätzliche Gleichungen und Variablen einsetzen, aber das wird deutlich rechenintensiver als das, was wir derzeit tun.“

Dietrich wies auch darauf hin, dass das Team in Zukunft genaue Beschreibungen von Turbulenzen auf den kleinsten Skalen ihrer Simulationen sowie Details über die Neutrinophysik einbeziehen möchte. Diese werden verfügbar, wenn Astrophysiker mehr über diese mysteriösen Teilchen erfahren. Die Forschenden freuen sich auch auf die nächste vorhergesagte Beobachtungsreihe zur Verschmelzung von binären Neutronenstarts im Frühjahr 2023 und eine weitere im Jahr 2026. Mit jedem neuen Ereignis wird das Team Zugang zu wertvollen Beobachtungsdaten erhalten, die es ihm ermöglichen, die Simulationen weiter zu verfeinern. EG

Simulation für bessere Batterien

Zum Verständnis physikalischer Zusammenhänge von Elektrolytströmungen in Batteriezellen kommen computergestützte Methoden zum Einsatz, die ursprünglich für die Hydrologie und die Öl- und Gasförderung entwickelt wurden.

Seit der industriellen Revolution versuchen Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen zu verstehen, wie sich Fluide in komplexen, porösen Räumen verhalten. Beispielsweise mussten Forschende ermitteln, wie sich Flüssigkeiten unter der Erdoberfläche verhalten, um Risiken für Grundwasserverschmutzungen zu erkennen oder effizientere Verfahren zur Gewinnung von Erdöl und Erdgas zu entwickeln. Diese unterirdischen Wechselwirkungen lassen sich nur schwierig direkt beobachten. Für das Verständnis dieser komplexen Umgebungen spielen Simulationen auf Höchstleistungsrechnern (HPC) eine wichtige Rolle. Mithilfe von HPC ließen sich darüber hinaus die Berechnungsmethoden im Laufe der Jahrzehnte verbessern.

Kürzlich haben Forscher des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Ulm diese Ansätze in einem anderen Zusammenhang angewandt: Sie nutzen aus der Hydrologie bekannte Berechnungsmethoden, um besser zu verstehen, wie sich Batteriematerialien und -zellen mit einem Elektrolyt (einer Lösung mit Ionen, die eine elektrische Ladung tragen) füllen lassen. Mithilfe einer optimierten Variante dieser Methode können die Forscher die realen Bedingungen im Inneren von Batteriezellen verstehen, die herkömmlichen Herstellungsmethoden verbessern sowie neue Batteriekonzepte entwickeln.

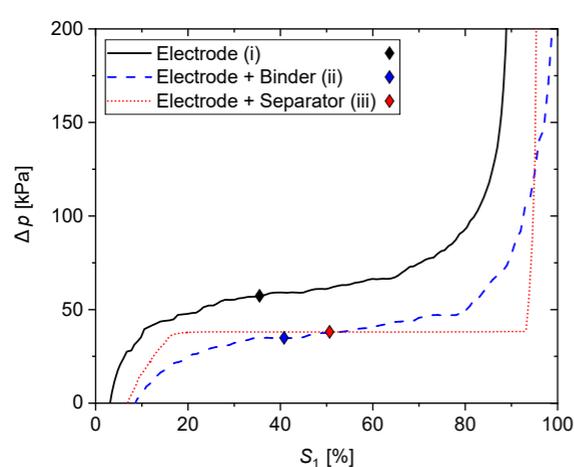
Hierfür nutzt das DLR-Team die HPC-Ressourcen des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS). Auf dem Supercomputer Hawk berechnen die Forscher Lattice-Boltzmann-Simulationen. Mit diesen rechenintensiven Anwendungen lassen sich die komplexen Flüssigkeits-Festkörper-Wechselwirkungen im Inneren einer Batteriezelle untersuchen.

„Batteriematerialien sind sehr porös. Ein Großteil der physikalischen Wechselwirkungen passiert an den Oberflächen der Poren an der Grenzfläche zwischen Elektrolyt und dem umgebenden Festkörper“, sagt Dr.-Ing. Martin Lautenschläger, Projektleiter und Wissenschaftler am DLR Institut für Technische Thermodynamik. „Die komplexen physikalischen Zusammenhänge, die Geometrien und die verschiedenen Skalen, die wir hier berücksichtigen müssen, erschweren die Lösungsfindung. Die Lattice-Boltzmann-Methode ist jedoch ein passender Ansatz hierfür und wir gehören zu den ersten, die diesen auf realistische Batteriematerialien anwenden.“

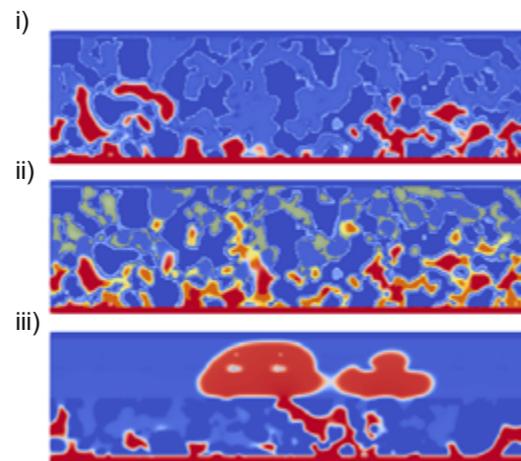
Mithilfe von Hawk hat das Team die traditionelle Lattice-Boltzmann-Methode angepasst und dabei die Berechnungseffizienz verbessert. Die Forscher haben die Mehrphasenströmung von Flüssigkeiten in Poren genau und effizient simuliert, was für Batterien erforderlich ist. Die Ergebnisse wurden in der Fachzeitschrift *Advances in Water Resources* veröffentlicht. Das Ziel ist es, die Methode so weiterzuentwickeln, dass sich auch komplexe chemische und elektrochemische Reaktionen im Inneren einer Batteriezelle modellieren lassen.

Selektive Vereinfachung

Bei der Simulation von Flüssigkeiten in Bewegung stehen die Forscher vor zwei großen Herausforderungen: Die erste ist der Maßstab – denn sie müssen ein Volumen simulieren, das groß genug ist, um ein reales System darzustellen. Gleichzeitig müssen mikroskopische Wechselwirkungen abgebildet werden, die das Verhalten der Flüssigkeit als Ganzes beeinflussen könnten. Die zweite Herausforderung ist die Komplexität. Bei der Simulation der Ölgewinnung oder der Befüllung einer



Elektrolytbefüllung verschiedener Elektrodenstrukturen. Das Druck-Sättigungs-Verhalten (links) wird zusammen mit Abbildungen von Querschnitten (rechts) gezeigt, in denen die Elektrode dunkelblau, das Gas blau, der Elektrolyt rot und das Bindemittel gelb dargestellt sind. Bild: Martin Lautenschläger



Batterie mit Elektrolyt simulieren Forschende nicht nur eine Flüssigkeit, sondern auch die Wechselwirkung zwischen dieser Flüssigkeit und der Luft bzw. einem anderen Gas, das die Poren vor der Befüllung ausfüllt. Bei der Mehrphasensimulation müssen andere strukturell komplexe Batteriekomponenten berücksichtigt werden, die oft aus einer Kombination von Materialien bestehen.

Die Lattice-Boltzmann-Methode bietet aufgrund der physikalischen und geometrischen Gegebenheiten Vorteile gegenüber den üblichen Ansätzen der numerischen Strömungsmechanik. Sie basiert auf der sogenannten „Boltzmann-Gleichung“ und behandelt Flüssigkeiten als eine große Ansammlung von Teilchen auf einem Rechengitter, dem „Lattice“. Im Gegensatz zu herkömmlichen Ansätzen aus der Strömungsmechanik löst die Lattice-Boltzmann-Methode numerisch einfachere Gleichungen und bietet einen rechnerisch günstigeren Ansatz für die Bewältigung dieser Herausforderungen. Um den direkten Kontakt der negativen und positiven Pole (Elektroden, jeweils Anode und Kathode)

einer Batteriezelle zu verhindern, werden diese durch eine elektrisch isolierende poröse Zwischenschicht getrennt. Diese Zwischenschicht (auch Separator genannt) und andere in Batterien verwendete Materialien können allerdings winzige, nanoskalige Poren enthalten, die idealerweise mit Elektrolyten gefüllt sind und so den Ionentransport teilweise ermöglichen. Bei Lattice-Boltzmann-Simulationen muss besonders darauf geachtet werden, wie sich der Elektrolyt verhält, wenn er durch verschiedene Poren mit unterschiedlicher Form und Größe strömt.

Das Team des DLR adaptierte einen sogenannten „Homogenisierungsansatz“ aus der konventionellen Strömungsmechanik und übertrug ihn auf die Lattice-Boltzmann-Methode für Anwendungen der Mehrphasenströmung. Die Forscher simulierten effizient und realistisch, wie sich Elektrolyte verhalten, wenn sie größere mesoskopische und winzige nanoskalige Poren durchqueren. Dabei vereinfachten sie ihre Berechnungen. Um den Rechenaufwand zu verringern, wird nur der Elektrolytfluss durch die größeren Poren vollstän-

dig gelöst und streng berechnet. Die winzigen Poren werden nicht direkt erfasst. Stattdessen werden indirekt basierend auf Beobachtungen Annahmen darüber getroffen, wie sie den Elektrolytfluss beeinflussen. Das daraus resultierende Modell berücksichtigt zwar nicht alle mikroskopischen Wechselwirkungen im kleinsten Maßstab im System, doch das Team stellt eine deutliche Übereinstimmung mit analytischen Lösungen fest. Der Vergleich mit den Ergebnissen ihrer Versuchspartner, die ebenfalls im DLR arbeiten, läuft derzeit noch.

„Wir sind auf Experimente angewiesen, um unsere Modelle zu überprüfen, da sich viele Materialeigenschaften nicht vorhersagen lassen“, so Lautenschläger. „Im Anschluss können wir ein System erstellen, das sich von Rechnern reproduzieren lässt und es anhand von Experimenten validieren. Sobald ein Modell validiert ist, können wir mithilfe von Simulationen Dinge vorhersagen, die im Experiment nicht geklärt werden können. In Experimenten lassen sich Ergebnisse messen, aber oft fehlt eine Erklärung für das Resultat; Simulationen führen zu einem besseren Verständnis. Deshalb sollten Experiment und Simulation immer Hand in Hand gehen.“

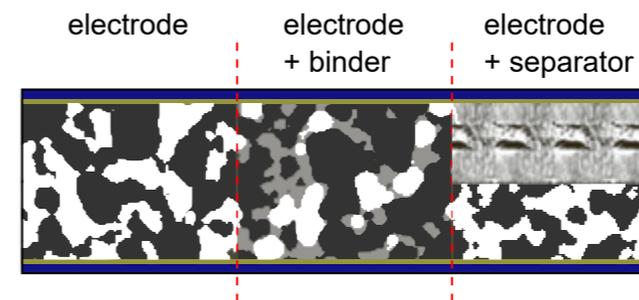
Batterien der Zukunft

Die ersten erfolgreichen Simulationen des Teams zur Elektrolytbefüllung in einer Batterie (veröffentlicht in *Batteries & Supercaps*) fügen sich nahtlos in das DEFACTO-Projekt ein, eine von der Europäischen Union finanzierte Initiative zur Optimierung der Materialentwicklung

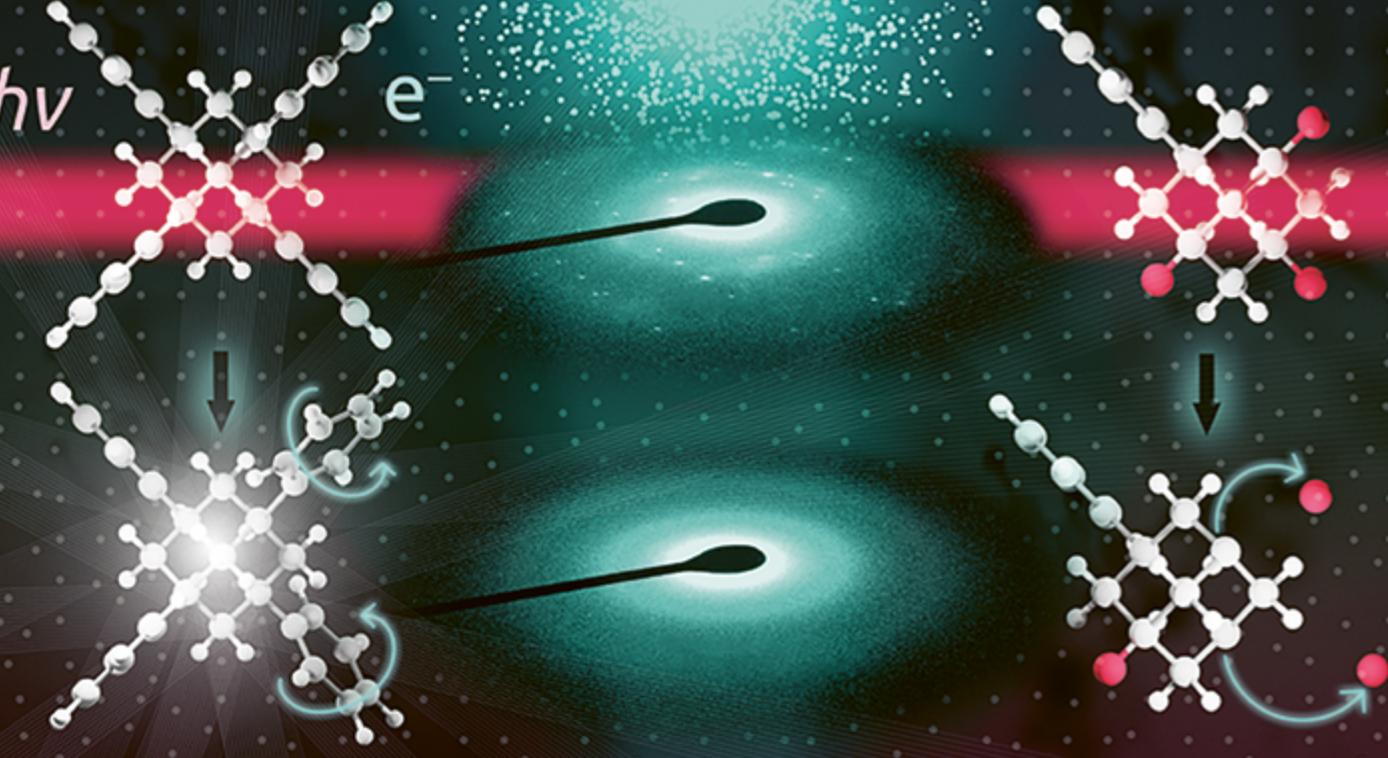
und der Herstellungsprozesse für Lithium-Ionen-Batteriezellen. Die Arbeit von Lautenschläger wurde auch von der Leitung des HLRS geehrt: Während des jährlichen Results and Review Workshops des HLRS gewann er einen der drei Golden Spike Awards 2022.

Nach Abschluss dieser Proof-of-Concept-Arbeiten konzentriert sich das Team nun darauf, die Komplexität ihrer Simulationen zu erhöhen. „Die Motivation geht in zwei Richtungen: Die Verbesserung gängiger Batterietechnologien durch optimierte Herstellungsprozesse und die Verbesserung der frühen Entwicklungsphasen von Batterietechnologien der nächsten Generation“, so Lautenschläger. Die Forscher prüfen nun, wie Batterien der aktuellen Generation durch realistischere Simulationen der Herstellung und der elektrochemischen Prozesse verbessert werden können. Darüber hinaus untersuchen sie vielversprechende Batterietechnologien der nächsten Generation wie Lithium-Schwefel-Batterien. Ihr Ziel ist es, das Design zu optimieren und Alterungsprozesse sowie unerwünschte Nebenreaktionen zu verhindern, um deren langfristige Leistung zu verbessern.

Unabhängig davon, ob sich das Team auf die weitere Optimierung heutiger Batterietechnologien konzentriert oder Batteriezellen der Zukunft entwirft, weiß Lautenschläger eines: „Sicher ist, dass unser Bedarf an Rechenressourcen in den nächsten Jahren noch steigen wird.“ EG



Mikrostrukturen (v.l.n.r.) einer reinen Elektrode (schwarz), einer Elektrode mit Bindemittel und einem Separator-Elektroden-Stack. Mesoskopische Poren sind weiß und Materialien mit nanoskaligen Poren sind grau dargestellt. Bild: Martin Lautenschläger



Strukturelle Modifikationen der Molekülcluster, die zur Bildung amorpher Verbindungen führen, können durch Elektronen- oder Laserbestrahlung induziert werden.
Bild: Elisa Monte, Justus-Liebig-Universität Gießen

Mit Supercomputern eine sauberere Quelle für weißes Licht entdecken

Forscher:innen der Justus-Liebig-Universität Gießen nutzten die Supercomputing-Ressourcen des HLRS bei der Entdeckung von „Cluster-Glas“, einer neuen Werkstoffklasse.

Als die Frühmenschen entdeckten, wie man sich das Feuer zunutze machen kann, waren sie in der Lage, sich gegen die nächtliche Dunkelheit zu wehren: Mit der Erfindung und Verbreitung der Elektrizität wurde es einfacher, Wärme von Licht zu trennen, nachts zu arbeiten und alles – von Eisenbahnwaggons bis hin zu Autobahnen – zu beleuchten. In den vergangenen Jahren wurden alte Formen der elektrischen Lichterzeugung, wie Halogenleuchtstoffröhren, durch energieeffizientere Alternativen ersetzt. Diese Umstellung hat die Kosten für die

Beleuchtung unserer Wohnungen, Arbeitsplätze und unseres Lebens im Allgemeinen weiter verringert.

Die Erzeugung von weißem Licht mittels moderner Technologien, wie z. B. Leuchtdioden (LEDs), ist nicht einfach und hängt häufig von sogenannten „Seltenerdmetallen“ ab, die zunehmend rar werden. Wegen der Begrenztheit suchen Wissenschaftler:innen nach Möglichkeiten, weißes Licht nachhaltiger zu erzeugen. Forschende der Universität Gießen, der Universität

Marburg und des Karlsruher Instituts für Technologie haben vor Kurzem eine neue Werkstoffklasse, das sogenannte „Cluster-Glas“, entdeckt. Dieses Material könnte LEDs in vielen Anwendungen ersetzen.

„Wir befinden uns in der Geburtsstunde einer Technologie zur Erzeugung von weißem Licht, die die derzeitigen Lichtquellen ersetzen kann. Sie erfüllt alle Anforderungen unserer Gesellschaft: Verfügbarkeit von Ressourcen, Nachhaltigkeit, Biokompatibilität“, sagt Prof. Dr. Simone Sanna, Professor an der Justus-Liebig-Universität Gießen und leitender Wissenschaftler des Projekts. „Meine Kollegen aus den experimentellen Wissenschaften, die diese unerwartete Erzeugung von weißem Licht beobachtet haben, baten um theoretische Unterstützung. Cluster-Glas hat eine unglaubliche optische Reaktion, aber wir verstehen bisher noch nicht, warum. Computergestützte Methoden können uns dabei helfen, das herauszufinden.“

Sanna und seine Mitarbeitenden haben den Supercomputer Hawk am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) genutzt, um Cluster-Glas besser zu verstehen und herauszufinden, wie es der nächsten Generation als Lichtquelle dienen könnte. Sie veröffentlichten ihre Ergebnisse in *Advanced Materials*.

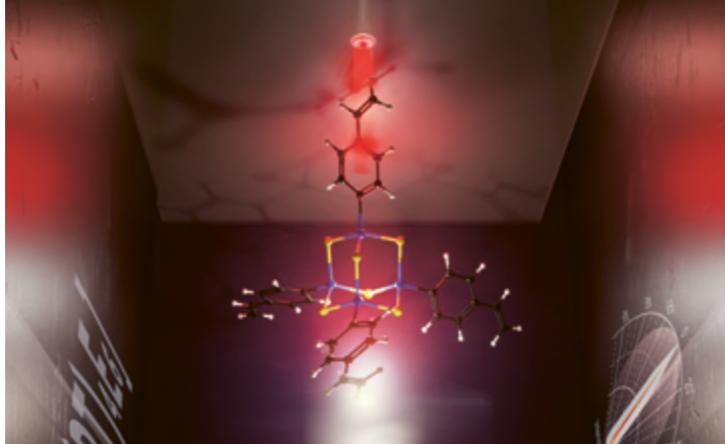
Der richtige Blick für die Entstehung von Cluster-Glas

Fachfremde denken bei dem Wort „Glas“ womöglich nur an das klare, feste Material ihrer Fensterscheiben oder auf ihrem Esstisch. Jedoch ist Glas eigentlich eine Werkstoffklasse, die als „amorpher Festkörper“ bezeichnet wird. Diese hat kein geordnetes kristallines Gitter, was auf einen schnellen Abkühlungsprozess zurückzuführen ist. Auf atomarer Ebene befinden sich die Teilchen, aus denen sie bestehen, in einem schwebenden, ungeordneten Zustand. Im Gegensatz zu kristallinen Materialien, bei denen die Teilchen über eine lange molekulare Distanz hinweg geordnet und symmetrisch sind, eignen sich „Gläser“ aufgrund ihrer Unordnung auf molekularer Ebene hervorragend zum Biegen, Brechen oder Reflektieren von Licht.

Eine Gruppe experimenteller Forschender der Universität Marburg hat kürzlich eine besondere Art von Glas synthetisiert, das sogenannte „Cluster-Glas“. Im Gegensatz zu herkömmlichem Glas, das sich fast wie eine gefrorene Flüssigkeit verhält, ist Cluster-Glas, wie der Name andeutet, eine Ansammlung von einzelnen Molekülclustern, die sich bei Raumtemperatur wie ein Pulver verhalten. Bei Bestrahlung mit Infrarot erzeugen sie helles, klares, weißes Licht. Während Pulver nicht ohne Weiteres zur Herstellung kleiner, empfindlicher elektronischer Bauteile verwendet werden können, haben die Forschenden einen Weg gefunden, sie in Glasform zu gießen: „Wenn wir das Pulver schmelzen, erhalten wir ein Material, das alle Eigenschaften eines Glases hat und in jede für eine bestimmte Anwendung benötigte Form gebracht werden kann“, so Sanna.

Während die experimentellen Forschenden in der Lage waren, das Material zu synthetisieren und seine Leuchteigenschaften zu beobachten, wandte sich die Gruppe an Sanna, um mithilfe von Supercomputern das Verhalten von Cluster-Glas besser zu verstehen. Sanna wies darauf hin, dass die Erzeugung von weißem Licht nicht die Eigenschaft eines einzelnen Moleküls in einem System, sondern das kollektive Verhalten einer Gruppe von Molekülen ist. Die Interaktionen dieser Moleküle untereinander und mit ihrer Umgebung in einer Simulation zu erfassen, bedeutet daher, dass die Forscher:innen gleichermaßen den Prozess der Lichterzeugung auf allgemeiner Ebene erfassen und auch beobachten müssen, wie kleinskalige atomare Interaktionen das System beeinflussen. Jeder dieser Faktoren stellt eine rechnerische Herausforderung dar; die Modellierung dieser Prozesse auf mehreren Skalen ist jedoch nur mit führenden Supercomputern wie Hawk möglich.

Die Zusammenarbeit zwischen Experimentator und Theoretiker wird in der Materialwissenschaft zunehmend von Bedeutung, da die Synthese vieler Iterationen eines ähnlichen Materials langwierig und teuer sein kann. Mithilfe von Höchstleistungsrechnern, so Sanna, lassen sich Materialien mit neuen optischen Eigenschaften schneller identifizieren und testen. „Die Beziehung zwischen Theorie und Experiment ist eine



Bei Bestrahlung mit Infrarotlicht geben Adamantan-basierte Molekülcluster mit der allgemeinen Zusammensetzung $[(RT)_4E_5]$ (mit R = organische Gruppe; T = C, Si, Ge, Sn; E = O, S, Se, Te, NH, CH₂, ON) stark gerichtetes weißes Licht ab. Bild: Elisa Monte, Justus-Liebig-Universität Gießen

kontinuierliche Schleife. Wir können die optischen Eigenschaften eines Materials vorhersagen, das von Chemikern synthetisiert wurde. Diese Berechnungen nutzen wir, um die Eigenschaften des Materials zu überprüfen und besser zu verstehen“, sagt Sanna. „Wir können auch neue Materialien am Computer entwerfen und den Chemikern so Informationen liefern, mit denen sie sich auf die Synthese von Verbindungen konzentrieren können, die höchstwahrscheinlich nützlich sind. Auf diese Weise inspirieren unsere Modelle die Synthese neuer Verbindungen mit maßgeschneiderten optischen Eigenschaften.“

Im Fall des Cluster-Glases führte dieser Ansatz zu einem Experiment, das zum einen durch Simulationen verifiziert wurde. Modellierung trug zum anderen dazu bei, den Forschenden den Zusammenhang zwischen den beobachteten optischen Eigenschaften und der Molekularstruktur ihres Cluster-Glas-Materials aufzuzeigen. Dadurch kommt dieses nun als Ersatz von Lichtquellen, die stark auf Seltenerdmetalle angewiesen sind, in Frage.

Supercomputing beschleunigt die Forschung und Entwicklung

Supercomputing (High-Performance Computing, HPC) spielt eine wichtige Rolle für die Zeitspanne zwischen neuen Entdeckungen und Produkten oder Technologien. Sanna zufolge verkürzt HPC die Zeit enorm, die für ein besseres Verständnis von Glas-Clustern erforderlich ist. „Wir verbringen viel Zeit mit Simulationen, aber das ist dennoch deutlich weniger, als die Charakterisierung dieser Materialien in der Realität benötigen würde“, sagt er.

„Die Cluster, die wir modellieren, haben einen rautenförmigen Kern, an den vier Liganden (Molekülketten) gebunden sind. Diese Liganden können aus diversen Materialien bestehen, sodass es sehr zeitaufwändig ist, dies in einem Experiment zu untersuchen.“

Sanna wies darauf hin, dass das Team noch immer durch die kurze Dauer der einzelnen Simulationsläufe eingeschränkt ist. Einige Forschungsprojekte auf Supercomputern können ein komplexes System in kleinere Teile aufteilen und jeden davon parallel berechnen. Sannas Team achtet besonders auf die Wechselwirkungen zwischen Teilchen über große Entfernungen hinweg, sodass es nur begrenzt Simulationen auf mehrere Computerknoten aufteilen kann. Er wies ebenfalls darauf hin, dass das Team bei regelmäßigem Zugang zu längeren Laufzeiten – mehr als einen Tag am Stück auf einem Supercomputer – schneller arbeiten könnte.

Sannas Team hofft, in den laufenden Studien über Cluster-Glas den Ursprung seiner lichterzeugenden Eigenschaften vollständig zu ergründen. Dies könnte dazu beitragen, weitere neue Materialien zu identifizieren und zu bestimmen, wie man Cluster-Glas am besten zur Lichterzeugung einsetzen kann.

Sanna erklärte, dass die HPC-Ressourcen am HLRS für die wissenschaftliche Grundlagenforschung seines Teams unerlässlich sind. Er hofft, dass diese Arbeiten zu neuen Produkten mit gesellschaftlichem Nutzen führen werden. „Die wichtigste rechnerische Leistung in unserem Zeitschriftenartikel war nur möglich, weil wir Zugang zu der Maschine in Stuttgart hatten“, sagt er. EG

Ausgewählte Publikationen unserer Nutzer:innen im Jahr 2022

Ala-Lahti M, Pulkkinen TI, Pfau-Kempf Y, et al. 2022. **Energy flux through the magnetopause during flux transfer events in hybrid-Vlasov 2D simulations.** Geophys Res Lett. 49(19): e2022GL100079.

Alho M, Battarbee M, Pfau-Kempf Y, et al. 2022. **Electron signatures of reconnection in a global eVlasior simulation.** Geophys Res Lett. 49(14): e2022GL098329.

ALPHA Collaboration. 2022. **Determination of $\alpha_s(m_Z)$ by the non-perturbative decoupling method.** Eur Phys J C. 12: 1092.

Antolovic I, Vrabec J. 2022. **Vapor-liquid-liquid equilibria of nitrogen + ethane by molecular simulation.** Ind Eng Chem Res. 61(8): 3104-3112.

Bangga G, Parkinson S, Lutz T. 2022. **Utilizing high fidelity data into engineering model calculations for accurate wind turbine performance and load assessments under design load cases.** IET Renew Power Gen. ePub Dec 3.

Bangga G, Seel F, Lutz T, Kühn T. 2022. **Aerodynamic and acoustic simulations of thick flatback airfoils employing high order DES methods.** Adv Theor Simul. 5(8): 2200129.

Bell IH, Fingerhut R, Vrabec J, Costigliola L. 2022. **Connecting entropy scaling and density scaling.** J Chem Phys. 157: 074501.

Beyer J, Pfeiffer M, Fasoulas S. 2022. **Non-equilibrium radiation modeling in a gas kinetic simulation code.** J Quant Spectrosc Radiat Transfer. 280: 108083.

Bhowmik A, Alon OE. 2022. **Longitudinal and transversal resonant tunneling of interacting bosons in a two-dimensional Josephson junction.** Sci Rep. 12: 627.

Bi MN, Rost S, Auge M, et al. 2022. **Low-energy Se ion implantation in MoS₂ monolayers.** NPJ 2D Mater Appl. 6: 42.

Bocchini A, Gerstmann U, Bartley T, et al. 2022. **Electrochemical performance of KTiOAsO₄ (KTA) in potassium-ion batteries from density-functional theory.** Phys Rev Materials. 6: 105401.

Bocchini A, Gerstmann U, Schmidt WG. 2022. **Oxygen vacancies in KTiOPO₄: optical absorption from hybrid DFT.** Phys Rev B. 105: 205118.

Borsanyi S, Kara R, Fodor Z, et al. 2022. **Precision study of the continuum SU(3) Yang-Mills theory: how to use parallel tempering to improve on supercritical slowing down for first order phase transitions.** Phys Rev D. 105: 074513.

Borsanyi S, Guenther JN, Kara R, et al. 2022. **Resummed lattice QCD equation of state at finite baryon density: strangeness neutrality and beyond.** Phys Rev D. 105: 114504.

- Chandola S, Sanna S, Hogan, et al. 2022. **Adsorbate-induced modifications in the optical response of the Si(553)-Au surface.** Phys Status Solidi RRL. 16(6): 2200002.
- Chepkasov IV, Smet JH, Krasheninnikov AV. 2022. **Single- and multilayers of alkali metal atoms inside graphene/MoS₂ heterostructures: a systematic first-principles study.** J Phys Chem C. 126(37): 15558-15564.
- Chiocchetti S, Dumbser M. 2022. **An exactly curl-free staggered semi-implicit finite volume scheme for a first order hyperbolic model of viscous two-phase flows with surface tension.** J Sci Comput. 94: 24.
- Djukanovic D, von Hippel G, Koponen J, et al. 2022. **Isovector axial form factor of the nucleon from lattice QCD.** Phys Rev D. 106: 074503.
- Doulis G, Atteneder F, Bernuzzi S, Brüggemann B. 2022. **Entropy-limited higher-order central scheme for neutron star merger simulations.** Phys Rev D. 106: 024001.
- Duan J, Chava P, Ghorbani-Asl M, et al. 2022. **Self-driven broadband photodetectors based on MoSe₂/FePS₃ van der Waals c-p type-II heterostructures.** ACS Appl Mater Interfaces. 14(9): 11927-11936.
- Dudi R, Dietrich T, Rashti A, et al. 2022. **High-accuracy simulations of highly spinning binary neutron star systems.** Phys Rev D. 105: 064050.
- Dues C, Müller MJ, Shatterjee S, et al. 2022. **Nonlinear optical response of ferroelectric oxides: first-principles calculations within the time and frequency domains.** Phys Rev Materials. 6: 065202.
- Dunleavy N, Ballance CP, Ramsbottom, et al. 2022. **A Dirac R-matrix calculation for the electron-impact excitation of W⁺.** J Phys B. 55: 175002.
- Eberheim K, Dues C, Attaccalite C, et al. 2022. **Tetraphenyl tetrel molecules and molecular crystals: from structural properties to nonlinear optics.** J Phys Chem C. 126(7): 3713-3726.
- Eckart S, Pio G, Zirwes T, et al. 2022. **Impact of carbon dioxide and nitrogen addition on the global structure of hydrogen flames.** Fuel. 335. ePub Dec 13.
- Frankel N, Pillepich A, Rix HW, et al. 2022. **Simulated bars may be shorter but are not slower than those observed: TNG50 versus MaNGA.** Astrophys J. 940: 61.
- Gan Z, Paradisanos I, Estrada-Real A, et al. 2022. **Chemical vapor deposition of high-optical-quality large-area monolayer Janus transition metal dichalcogenides.** Adv Mater. 34(38): 2205226.
- Gao M, Kuhn T, Munz CD. 2022. **On the investigation of oblique shock-wave/turbulent boundary-layer interactions with a high-order discontinuous Galerkin method.** Int J Numer Methods Fluids. 94(8): 1331-1357.
- Gieg H, Schianchi F, Dietrich T, Ujevic M. 2022. **Incorporating a radiative hydrodynamics scheme in the numerical-relativity code BAM.** Universe 8(7): 370.
- Glahn LJ, Ruiz Alvarado IA, Neufeld S, et al. 2022. **Clean and hydrogen-adsorbed AlInP(001) surfaces: structures and electronic properties.** Phys Status Solidi B. 2200308.
- Hafner R, Guevara-Carrion G, Vrabec J, Klein P. 2022. **Sampling the bulk viscosity of water with molecular dynamics simulation in the canonical ensemble.** J Phys Chem B. 126(48): 10172-10184.
- Han P, Bester G. 2022. **Determination of the phonon sidebands in the photoluminescence spectrum of semiconductor nanoclusters from ab initio calculations.** Phys Rev B. 106: 245404.
- Heinen M, Hoffmann M, Diewald, et al. 2022. **Droplet coalescence by molecular dynamics and phase-field modeling.** Phys Fluids. 34: 042006.
- Hoedl MF, Ertural C, Merkle R, et al. 2022. **The orbital nature of electron holes in BaFeO₃ and implications for defect chemistry.** J Phys Chem C. ePub Jul 21.
- Huth S, Pang PTH, Tews I, et al. 2022. **Constraining neutron-star matter with microscopic and macroscopic collisions.** Nature. 606: 276-280.
- Ibach M, Vaikuntanathan V, Arad A, et al. 2022. **Investigation of droplet grouping in monodisperse streams by direct numerical simulations.** Phys Fluids. 34: 083314.
- Isotta E, Mukherjee B, Bette S, et al. 2022. **Static and dynamic components of Debye-Waller coefficients in the novel cubic polymorph of low-temperature disordered Cu₂ZnSnS₄.** IUCrJ. 9: 272-285.
- Jain M, Gerstmann U, Schmidt TW, Aldahhak H. 2022. **Adatom mediated adsorption of N-heterocyclic carbenes on Cu(111) and Au(111).** J Comput Chem. 43: 413-420.
- Jain M, Kretschmer S, Höflich K, et al. 2022. **Atomistic simulations of defects production under ion irradiation in epitaxial graphene on SiC.** Phys Status Solidi RRL. 202200292.
- Janssen M, Falcke H, Kadler M, et al. 2022. **Event Horizon Telescope observations of the jet launching and collimation in Centaurus A.** Nat Astron. 5: 1017-1028.
- Jöns S, Munz CD. 2022. **Riemann solvers for phase transition in a compressible sharp-interface method.** Appl Math Comput. 440: 127624.
- Keim J, Munz CD, Rohde C. 2022. **A relaxation model for the non-isothermal Navier-Stokes-Korteweg equations in confined domains.** J Comput Phys. 474: 111830.
- Kempf D, Munz CD. 2022. **Zonal direct-hybrid aeroacoustic simulation of trailing edge noise using a high-order discontinuous Galerkin spectral element method.** Acta Acust. 6: 39.
- Kiwitt T, Fröhlich K, Meinke M, Schröder W. 2022. **Nusselt correlation for ellipsoidal particles.** Int J Multiphase Flow. 149: 103941.
- Kopper P, Copplestone SM, Pfeiffer M, et al. 2022. **Hybrid parallelization of Euler-Lagrange simulations based on MPI-3 shared memory.** Adv Eng Softw. 174: 103291.
- Köster J, Storm A, Ghorbani-Asl M, et al. 2022. **Structural and chemical modifications of few-layer transition metal phosphorous trisulfides by electron irradiation.** J Phys Chem C. 126(36): 15446-15455.
- Kozub AL, Gerstmann U, Schmidt WG. 2022. **Third-order susceptibility of lithium niobate: influence of polarons and bipolarons.** Phys Status Solidi B. 2200453.
- Krenz M, Gerstmann U, Schmidt WG. 2022. **Bound polaron formation in lithium niobate from ab initio molecular dynamics.** Appl Phys A. 128: 480.
- Kretschmer S, Ghaderzadeh S, Facsko S, Krasheninnikov AV. 2022. **Threshold ion energies for creating defects in 2D materials from first-principles calculations: chemical interactions are important.** J Phys Chem Lett. 13(2): 514-519.

- Kumar S, Gosselet P, Huang D, et al. 2022. **Parallel multiphysics simulation for the stabilized optimal transportation meshfree (OTM) method.** *J Comput Sci.* 62: 101739.
- Kurz M, Offenhäuser P, Viola D, Resch M, Beck A. 2022. **Relaxi – a scalable open source reinforcement learning framework for high-performance computing.** *Software Impacts.* 14: 100422.
- Lagemann C, Lagemann K, Mukherjee S, Schröder W. 2022. **Generalization of deep recurrent optical flow estimation for particle-image velocimetry data.** *Meas Sci Technol.* 33(9): 094003.
- Larsson HR, Schröder M, Beckmann R, et al. 2022. **State-resolved infrared spectrum of the protonated water dimer: revisiting the characteristic proton transfer doublet peak.** *Chem Sci.* 37. ePub Aug 30.
- Lasek K, Ghorbani-Asl M, Pathirage, et al. 2022. **Controlling stoichiometry in ultrathin van der Waals films. PtTe₂, Pt₂Te₃, Pt₃Te₄, and Pt₂Te₂.** *ACS Nano.* 16(6): 9908-9919.
- Lasek K, Li J, Ghorbani-Asl M, et al. 2022. **Formation of in-plane semiconductor-metal contacts in 2D platinum telluride by converting PtTe₂ to Pt₂Te₂.** *Nano Lett.* 22(23): 9571-9577.
- Lautenschlaeger MP, Prifling B, Kellers B, et al. 2022. **Understanding electrolyte filling of lithium-ion battery electrodes on the pore scale using the lattice Boltzmann method.** *Elec Soc S.* 5(7): e202200090.
- Lee J, Moon JS. 2022. **Merger effects on the spin and shape alignments of galaxy stellar, cold gas, hot gas, and dark matter components.** *Astrophys J.* 936(2): 119.
- Lesnicki D, Wank V, Cryan JD, et al. 2022. **Lower degree of dissociation of pyruvic acid at water surfaces than in bulk.** *Phys Chem Chem Phys.* 24: 13510.
- Letzqus P, Guma G, Lutz T. 2022. **Computational fluid dynamics studies on wind turbine interactions with the turbulent local flow field influenced by complex topography and thermal stratification.** *Wind Energy Sci.* 7: 1551-1573.
- Li J, Joseph T, Ghorbani-Asl M, et al. 2022. **Edge and point-defect induced electronic and magnetic properties in monolayer PtSe₂.** *Adv Funct Mater.* 32(18): 2110428.
- Lolicato F, Saleppico R, Griffo A, et al. 2022. **Cholesterol promotes clustering of PI(4,5)P₂ driving unconventional secretion of FGF2.** *J Cell Biol.* 221(11): e202106123.
- Luu TD, Shamooni A, Stein OT, et al. 2022. **Flame characterisation of gas-assisted pulverised coal combustion using FPV-LES.** *P Combust Inst.* ePub Sep 6.
- Luy JN, Henkel P, Grigjanis D, et al. 2022. **Bonding character of intermediates in on-surface Ullmann reactions revealed with energy decomposition analysis.** *J Comput Chem.* 44(3): 179-189.
- Marx J, Kohns M, Langenbach K. 2022. **Systematic study of vapour-liquid equilibria in binary mixtures of fluids with different polarity from molecular simulations.** *Mol Phys.* e2141150.
- Mastrikov YA, Gryaznov D, Sokolov MN, et al. 2022. **Oxygen vacancy formation and migration within the antiphase boundaries in lanthanum scandate-based oxides: computational study.** *Materials.* 15(7): 2695.
- Mastrikov YA, Gryaznov D, Zvejnieks G, et al. 2022. **Sr doping and oxygen vacancy formation in La_{1-x}Sr_xSC_{3-δ} solid solutions: computational modeling.** *Crystals* 12(9): 1300.
- Mausbach P, Fingerhut R, Vrabec J. 2022. **Thermodynamic metric geometry and the Fisher-Widom line of simple fluids.** *Phys Rev E.* 106: 034136.
- Molignini P, Lévêque C, Keßler H, et al. 2022. **Crystallization via cavity-assisted infinite-range interactions.** *Phys Rev A.* 106: L011701.
- Moritz DC, Ruiz Alvarado IA, Zare Pour MA, et al. 2022. **P-terminated InP (001) surfaces: surface band bending and reactivity to water.** *ACS Appl Mater Interfaces.* 14(41): 47255-47261.
- Müller C, Mossier P, Munz CD. 2022. **A sharp interface framework based on the inviscid Godunov-Peshkov-Romenski equations: simulation of evaporating fluids.** *J Comp Phys.* 473: 111737.
- Müller MJ, Ziese F, Belz J, et al. 2022. **Octave-spanning emission across the visible spectrum from single crystalline 1,3,5,7-tetrakis-(p-methoxyphenyl) adamantane.** *Opt Mater Express.* 12(9): 3517-3529.
- Nitzke I, Pohl S, Thol M, et al. 2022. **How well does the Tang-Toennies potential represent the thermodynamic properties of argon?** *Mol Phys.* e2078240.
- Norouzi MJ, Andric J, Vernet A, Pallares J. 2022. **Shape evolution of long flexible fibers in viscous flows.** *Acta Mech.* 233: 2077-2091.
- Papadakis K, Pfau-Kempf Y, Ganse U, et al. 2022. **Spatial filtering in a 6D hybrid-Vlasov scheme to alleviate adaptive mesh refinement artifacts: a case study with Vlasiator (versions 5.0, 5.1, and 5.2.1).** *Geosci Model Dev.* 15: 7903-7912.
- Papenfort LJ, Most ER, Tootle S, Rezzolla L. 2022. **Impact of extreme spins and mass ratios on the post-merger observables of high-mass binary neutron stars.** *Mon Not R Astron Soc.* 513(3): 3646-3662.
- Pérez-Montañó LE, Rodríguez-Gómez V, Bervantes Sodi B, et al. 2022. **The formation of low surface brightness galaxies in the IllustrisTNG simulation.** *Mon Not R Astron Soc,* ePub Jun 21.
- Peter JMF, Kloker MJ. 2022. **Direct numerical simulation of supersonic turbulent flow with film cooling by wall-parallel blowing.** *Phys Fluids.* 34: 025125.
- Qian W, Kronenburg A, Hui X, et al. 2022. **Effects of agglomerate characteristics on their collision kernels in the free molecular regime.** *J Aerosol Sci.* 159: 105868.
- Ren J, Kloker M. 2022. **Instabilities in three-dimensional boundary-layer flows with a highly non-ideal fluid.** *J Fluid Mech.* 951: A9.
- Rojas-León I, Christmann J, Schwan S, et al. 2022. **Cluster-glass for low-cost white-light emission.** *Adv Mater.* ePub Jun 24.
- Rößler J, Antolovic I, Stephan S, Vrabec J. 2022. **Assessment of thermodynamic models via Joule-Thomson inversion.** *Fluid Phase Equilib.* 556: 113401.
- Ruiz Alvarado IA, Schmidt WG. 2022. **Water/InP(001) from density functional theory.** *ACS Omega.* 7(23): 19355-19364.
- Rusevich LL, Kotomin EA, Zvejnieks G, et al. 2022. **Effects of Al doping on hydrogen production efficiency upon photostimulated water splitting on SrTiO₃ nanoparticles.** *J Phys Chem.* 126(50): 21223-21233.

- Sabater E, Sola M, Salvador P, Andrada DM. 2022. **Cage-size effects on the encapsulation of P₂ by fullerenes.** J Comp Chem. 44(3): 268-277.
- Santini P, Castellano M, Fontana A, et al. 2022. **The stellar mass function in CANDELS and frontier fields: the buildup of low-mass passive galaxies since z ~ 3.** ApJ. 940(2): 135.
- Satcunanathan S, Meinke M, Schröder W. 2022. **Impact of porous media on boundary layer turbulence.** Fluids. 7(4): 139.
- Schmidt F, Kozub AL, Gerstmann U, et al. 2022. **A density-functional theory study of hole and defect-bound exciton polarons in lithium niobite.** Crystals 12(11): 1586.
- Schmitt S, Vo T, Lautenschlaeger MP, et al. 2022. **Molecular dynamics simulation study of heat transfer across solid-fluid interfaces in a simple model system.** Mol Phys. 120(10): e2057364.
- Schröder M, Gatti F, Lauvergnot D, et al. 2022. **The coupling of the hydrated proton to its first solvation shell.** Nat Commun. 13: 6170.
- Sebastian R, Schreyer AM. 2022. **Flow fields around spanwise-inclined elliptical jets in supersonic crossflow.** Eur J Mechanics B Fluids. 94: 299-313.
- Sebastian R, Schreyer AM. 2022. **Influence of jet spacing in spanwise-inclined jet injection in supersonic crossflow.** J Fluid Mech. 946: A39.
- Secchi F, Gatti D, Frohnapfel B. 2022. **The wall-jet region of a turbulent jet impinging on smooth and rough plates.** Flow Turbul Combust. ePub Nov 23.
- Secchi F, Häber T, Gatti D, et al. 2022. **Turbulent impinging jets on rough surfaces.** GAMM Mitteilungen. 45: e202200005.
- Shamooni A, Stein OT, Kronenburg A, et al. 2022. **Fully-resolved simulations of volatile combustion and NO_x formation from single coal particles in recycled flue gas environments.** P Combust Inst. ePub Oct 1.
- Shen X, Vogelsberger M, Nelson D, et al. 2022. **High-redshift predictions from IllustrisTNG – III. Infrared luminosity functions, obscured star formation, and dust temperature of high-redshift galaxies.** Mon Not R Astron Soc. 510(4): 5560-5578.
- Soares PMM, Careto JAM, Cardoso RM, et al. 2022. **The added value of km-scale simulations to describe temperature over complex orography: the CORDEX FPS-Convection multi-model ensemble runs over the Alps.** Climate Dynam. ePub Dec 23.
- Sotillo-Ramos D, Pillepich A, Donnari, et al. 2022. **The merger and assembly histories of Milky Way- and M31-like galaxies with TNG50: disc survival through mergers.** Mon Not R Astron Soc. 516(4): 5405-5427.
- Steinhausen M, Zirwes T, Ferraro F, et al. 2022. **Turbulent flame-wall interaction of premixed flames using Quadrature-based Moment Methods (QbMM) and tabulated chemistry: an a priori analysis.** Int J Heat Fluid Flow. 93: 108913.
- Stiskalek R, Bartlett DJ, Desmond H, Anbajagane D. 2022. **The scatter in the galaxy-halo connection: a machine learning analysis.** Mon Not R Astron Soc. 514(3): 4026-4045.
- Strabac A, Greiwe DH, Hoffmann F, et al. 2022. **Piloted simulation of the rotorcraft wind turbine wake interaction during hover and transit flights.** Energies. 15(5): 1790.
- Trcka A, Baes M, Camps P, et al. 2022. **UV to submillimetre luminosity functions of TNG50 galaxies.** Mon Not R Astron Soc. 516(3):3728-3749.
- Ujevic M, Rashti A, Gieg H, et al. 2022. **High-accuracy high-mass-ratio simulations for binary neutron stars and their comparison to existing waveform models.** Phys Rev D. 106: 023029.
- Walzer U, Hendel R. 2022. **Mantle evolution and continental growth events.** Earth-Sci Rev. 2323: 104130.
- Wang W, Lozano-Duran A, Helmig R, Chu X. 2022. **Spatial and spectral characteristics of information flux between turbulent boundary layers and porous media.** J Fluid Mech. 949.
- Warrach-Sagi K, Ingwersen J, Schwitalla T, et al. 2022. **Noah-MP with the generic crop growth model Gecros in the WRF Model: effects of dynamic crop growth on land-atmosphere interaction.** J Geophys Res-Atmos. 127(14): e2022JD036518.
- Wen X, Shamooni A, Nicolai H, et al. 2022. **Flame structure analysis and flamelet modeling of turbulent pulverized solid fuel combustion with flue gas recirculation.** P Combust Inst. ePub Sep 18.
- Wollny P, Menser J, Engelmann L, et al. 2022. **The role of phase transition by nucleation, condensation, and evaporation for the synthesis of silicon nanoparticles in a microwave plasma reactor – simulation and experiment.** Chem Eng J. 453(1): 139695.
- Wu Y, Römer T, Axtmann G, Rist U. 2022. **Transition mechanisms in a boundary layer controlled by rotating wall-normal cylindrical roughness elements.** J Fluid Mech. 945: A20.
- Yogi P, Joch J, Sanna S, Pfnür H. 2022. **Electronic phase transitions in quasi-one-dimensional atomic chains: Au wires on Si(553).** Phys Rev B. 105: 235407.
- Zamponi R, Satcunanathan S, Moreau S, et al. 2022. **Effect of porosity on Curle's dipolar sources on an aerofoil in turbulent flow.** J Sound Vib. 542: 117353.
- Zhang F, Kujata M, Sebbar N, et al. 2022. **Numerical study on flame stabilization and NO_x formation in a novel burner system for sulfur combustion.** Energy Fuels. 36(7): 4094-4106.
- Zhang F, Zirwes T, Wachter S, et al. 2022. **Numerical simulations of air-assisted primary atomization at different air-to-liquid injection angles.** Int J Multi-phase Flow. 158: 104304.
- Zhang F, Zirwes T, Wang Y, et al. 2022. **Dynamics of premixed hydrogen/air flames in unsteady flow.** Phys Fluids. 34: 085121.
- Zimmermann NER, Guevara-Carrion G, Vrabec J, Hansen N. 2022. **Predicting and rationalizing the Soret coefficient of binary Lennard-Jones mixtures in the liquid state.** Adv Theor Simul. 5(11): 2200311.
- Zirwes T, Zhang F, Bockhorn H. 2022. **Memory effects of local flame dynamics in turbulent premixed flames.** Combust Inst. ePub Sep 20.

Über uns



In unserem Rechenraum

Hewlett Packard Enterprise Apollo (Hawk)

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

System: Hewlett Packard Enterprise Apollo

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

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

System: Apollo 6500 Gen10 Plus

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



Cray CS-Storm

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

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

AMD GPU System

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

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

NEC Cluster (Vulcan)

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

Intel Xeon Gold 6248 @2.5GHz (CascadeLake)

Anzahl Rechenknoten: 96
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 128 GB

Intel Xeon Gold 6138 @2.0GHz (SkyLake)

Anzahl Rechenknoten: 100
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 192 GB

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

Anzahl Rechenknoten: 88
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB

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

Anzahl Rechenknoten: 168
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 384 GB

AMD Radeon

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

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

Anzahl Rechenknoten: 10
 Hauptspeicher pro Rechenknoten: 256 GB

CPU: 1 × Nvidia P100
 CPU Hauptspeicher: 12 GB

NEC SX-Aurora TSUBASA A300-8 @ 2.6 GHz

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

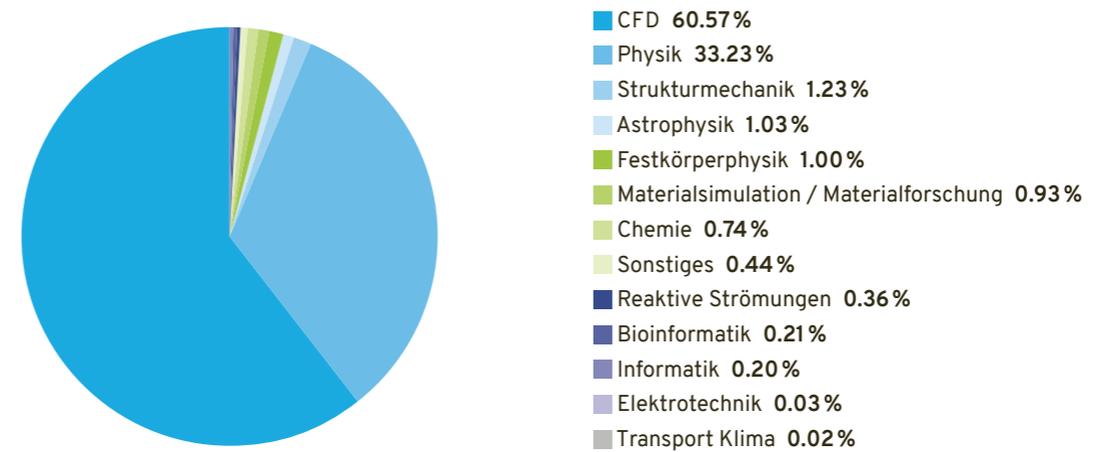
Interconnects

Infiniband EDR/FDR/HDR/QDR

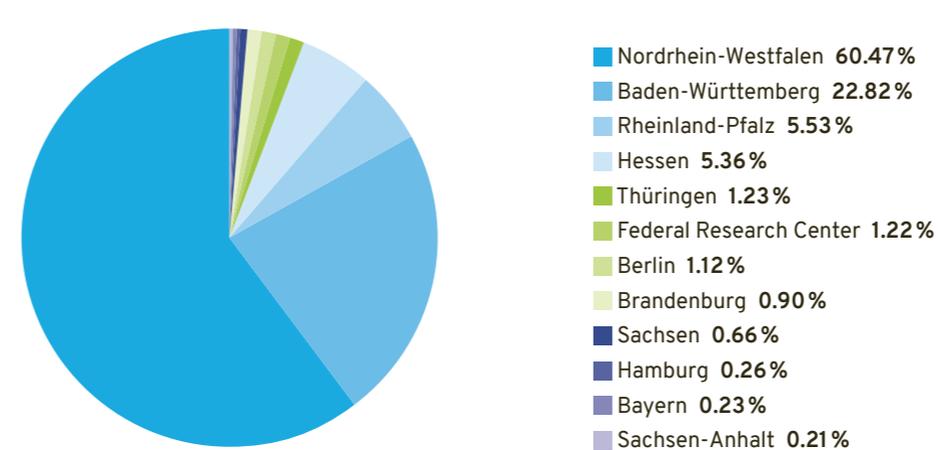
Unsere User-Gruppen

2022 bewilligte das Gauss Centre for Supercomputing für den HLRS-Rechner Hawk 7 neue Forschungsprojekte ("large-scale projects": jedes Projekt erfordert mindestens 35 Millionen Core-Stunden innerhalb eines Jahres) mit einer Rechenzeit von insgesamt 2,887 Milliarden Core-Stunden. Außerdem unterstützte das HLRS 3 internationale Simulationsprojekte, die über die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) genehmigt wurden, mit insgesamt 318 Millionen Core-Stunden. 2022 wurden auf Hawk insgesamt 130 Projekte mit 4,364 Milliarden Core-Stunden gerechnet.

Systemnutzung nach Forschungsdisziplin



Systemnutzung nach Bundesland



Geförderte Forschungsprojekte am HLRS

Zusätzlich zur Bereitstellung von Supercomputing-Ressourcen für Wissenschaftler:innen und Ingenieur:innen aus Wissenschaft und Industrie werden eigene Forschungsvorhaben des HLRS in den Bereichen Höchstleistungsrechnen, künstliche Intelligenz, Visualisierung und High-Performance-Datenanalyse gefördert. Diese meist in Zusammenarbeit mit Partnern aus Forschung und Industrie umgesetzten Aktivitäten beschäftigen sich mit den wichtigsten HPC-Themen und tragen dazu bei, Herausforderungen für Deutschland, Europa und die Welt zu bewältigen. Im Folgenden finden Sie eine Liste der geförderten Projekte des Jahres 2022.

Mehr über unsere aktuellen Projekte erfahren Sie unter: www.hlrs.de/de/hlrs-projekte

3×a ■

November 2022 – Oktober 2025 (BMBF)

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

aqua3S

September 2019 – Dezember 2022 (EU)

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

bwHPC-S5

Juli 2018 – Juni 2023 (MWK)

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

Cape Reviso

Juli 2020 – Juni 2023 (BMVI)

Entwickelt ein Werkzeug für die Stadt- und Verkehrsplanung, das Konflikte zwischen Fußgänger:innen und Radfahrenden im Stadtraum analysieren und reduzieren kann.

CASTIEL 2 ■

Januar 2023 – Dezember 2025 (EuroHPC JU)

Koordiniert und unterstützt die Aktivitäten des EuroCC 2 Projekts und der europäischen HPC-Kompetenzzentren durch die Förderung von Zusammenarbeit und Austausch von Wissen und Fähigkeiten zwischen nationalen HPC-Kompetenzzentren in ganz Europa.

CATALYST

Oktober 2016 – Dezember 2022 (MWK)

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

CEEC ■

Januar 2023 – Dezember 2026 (EuroHPC JU, BMBF)

Das Exzellenzzentrum für Exascale CFD entwickelt neue und verbesserte Algorithmen und Arbeitsabläufe für die numerische Strömungsmechanik auf Exascale-Systemen und verfolgt Strategien zur Verbesserung der Energieeffizienz in hochparallelen HPC-Architekturen.

ChEESE 2 ■

Januar 2023 – Dezember 2026 (EuroHPC JU, BMBF)

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

CIRCE

November 2021 – Oktober 2024 (BMBF, MWK)

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

CYBELE

Januar 2019 – März 2022 (EU)

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

DECICE ■

Dezember 2022 – November 2025 (EU)

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

DEGREE

Juni 2021 – Juni 2023 (DBU)

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

EE-HPC ■

September 2022 – August 2025 (BMBF)

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

ENRICH

April 2021 – März 2023 (UM)

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

EuroCC 2 ■

Januar 2023 – Dezember 2025 (EuroHPC JU, BMBF)

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

exaFOAM

April 2021 – März 2024 (EU)

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

EXCELLERAT P2 ■

Januar 2023 – Dezember 2026 (EuroHPC JU, BMBF)

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

FF4EuroHPC

September 2020 – August 2023 (EuroHPC JU)

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

FocusCoE

Dezember 2018 – März 2022 (EU)

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

Gaia-X4ICM ■

Mai 2022 – Dezember 2024 (MWK, ICM)

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

HiDALGO 2 ■

Januar 2023 – Dezember 2026 (EuroHPC JU, BMBF)
Entwickelt neue Methoden, Algorithmen und Software für HPC und High-Performance-Datenanalyse, um die komplexen Prozesse im Zusammenhang mit großen globalen Herausforderungen wie Luftverschmutzung und Waldbränden zu modellieren und zu simulieren.

HPC-Europa 3

Mai 2017 – April 2022 (EU)
Fördert die länderübergreifende Zusammenarbeit zwischen EU-Wissenschaftler:innen (insbesondere Nachwuchsforscher:innen), die an HPC-bezogenen Themen wie Anwendungen, Tools und Middleware arbeiten.

IKILeUS

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

InHPC-DE

November 2017 – Dezember 2023 (BMBF)
Koordiniert die Integration zwischen den drei deutschen Tier-1-Höchstleistungsrechenzentren, um ein standardisiertes und abdeckendes HPC-Umfeld zu schaffen. Es finanziert 100-Gbit-Netze und bietet Möglichkeiten zur Hochgeschwindigkeits-Datenverwaltung und -visualisierung.

KoLab BW

März 2021 – Dezember 2024 (MWK)
Entwickelt Tools, die Treffen und Zusammenarbeit in dreidimensionalen VR-Umgebungen, selbst von entfernten Standorten aus, ermöglichen.

MERIDIONAL ■

Oktober 2022 – September 2026 (EU)
Entwickelt Ansätze zur Bewertung der Leistung und der Belastungen von Windenergieanlagen an Land, auf See und in der Luft.

NFDI4Cat

Oktober 2020 – September 2025 (DFG)
Schafft eine deutsche nationale Forschungsdateninfrastruktur für Katalyse und chemisch-technische Forschung.

ORCHESTRA

Dezember 2020 – November 2023 (EU)
Schafft eine vernetzte Datentransferplattform, die den Aufbau einer umfassenden pan-europäischen Kohorte ermöglicht, wodurch die Forschung und Maßnahmen zur Bewältigung der SARS-CoV-2-Pandemie verbessert und ein Modell für künftige Gesundheitsbedrohungen entwickelt wird.

PRACE

Mai 2019 – Dezember 2022 (EU)
Unterstützt wichtige wissenschaftliche Forschung und technische Entwicklung, um die europäische Wettbewerbsfähigkeit zum Nutzen 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.

SEQUOIA End-to-End ■

Januar 2023 – März 2024 (WAT)
Zielt darauf ab, transparente, automatisierte und kontrollierbare End-to-End-Lösungen für den industriellen Einsatz von hybriden Quantenanwendungen und -algorithmen durch ganzheitliches Quanten-Software-Engineering zu entwickeln.

SERRANO

Januar 2021 – Dezember 2023 (EU)
Ziel ist es, ein neuartiges Ökosystem cloudbasierter Technologien einzuführen, das von spezialisierten Hardware-Ressourcen bis hin zu Software-Tools reicht, um eine anwendungsspezifische Dienstinstanziierung und optimale kundenspezifische Anpassung zu ermöglichen.

SimTech

Juli 2019 – März 2023 (DFG)
Dieser fachübergreifende 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 Unsicherheiten.

Simulierte Welten

Januar 2011 – August 2024 (MWK)
Bietet Schüler:innen die Möglichkeit, in Zusammenarbeit mit HLRS-Wissenschaftler:innen Simulationsprojekte zu entwickeln und durchzuführen.

SiVeGCS

Januar 2017 – Dezember 2025 (BMBF, MWK)
Koordiniert und gewährleistet die Verfügbarkeit der HPC-Ressourcen des Gauss Centre for Supercomputing und befasst sich mit Fragen der Finanzierung, des Betriebs, der Ausbildung und Anwenderunterstützung der drei Bundeshöchstleistungsrechenzentren Deutschlands.

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.

SRI DiTeNS ■

April 2023 – März 2029 (CZS)
Erforscht, wie sich mithilfe von urbanen digitalen Zwillingen – auf der Grundlage von virtueller Realität – ein diskursiver Transformationsprozess mit den Stakeholdern in der Energieversorgung gestalten lässt.

TargetDART ■

Oktober 2022 – September 2025 (BMBF)
Erarbeitet einen Task-basierten Ansatz für hochskalierbare Simulationssoftware, der auf heterogenen Exascale-Systemen unvorhersagbare Lastungleichgewichte mittels dynamisch adaptiver und reaktiver Verteilung von Rechenaufgaben zwischen den Rechenknoten ausgleicht.

TOPIO ■

November 2022 – Oktober 2025 (BMBF)
Mithilfe eines globalen, hochauflösenden Modells des Erdsystems untersucht TOPIO die Lese- und Schreibgeschwindigkeiten für große Datenmengen auf Höchstleistungsdateisystemen sowie Ansätze, die die Datenmenge durch Komprimierung reduzieren, ohne dass dabei ein erheblicher Informationsverlust entsteht.

Vertrauen in Information

August 2020 – August 2023 (MWK)
Entwickelt als multidisziplinäres Forschungsprojekt, das von der Abteilung für Philosophie am HLRS geleitet wird, Methoden, die die Vertrauenswürdigkeit von Computerwissenschaften bewerten und die Verbreitung von Fehlinformationen begrenzen können.

WindHPC ■

Oktober 2022 – September 2025 (BMBF)
Als erstes Projekt, das Computer in Windparks mit einem HPC-Zentrum verbindet, zielt WindHPC darauf ab, den Energieverbrauch durch die Verbesserung der Effizienz von Simulationscodes, HPC-Workflows und Datenmanagement zu senken.

■ Neues Projekt im Jahr 2022 ■ Zuschuss bewilligt, Beginn im Jahr 2023

Abkürzungen Fördergeber:

BMBF – Bundesministerium für Bildung und Forschung | BMVI – Bundesministerium für Verkehr und digitale Infrastruktur | BMWi – Bundesministerium für Wirtschaft und Energie | CZS – Carl-Zeiss-Stiftung | DBU – Deutsche Bundesstiftung Umwelt | DFG – Deutsche Forschungsgemeinschaft | ESF – European Social Fund | EU – European Union | EuroHPC JU – European High-Performance Computing Joint Undertaking | ICM – InnovationsCampus Mobilität der Zukunft | MWK – Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg | UM – Ministerium für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg | WAT – Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg

HPC Fort- und Weiterbildung in 2022

2022 bot das HLRS 54 Weiterbildungskurse an, die höchstrelevante Themen im Hoch- und Höchstleistungsrechnen ansprachen. Die Kompaktkurse fanden an 140 Tagen online und in Stuttgart und in Zusammenarbeit mit Instituten in Deutschland und anderen Ländern statt. Insgesamt nahmen 1.416 Interessierte an den Kursen teil.

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

Datum	Ort	Thema	Veranstalter
10. Jan–21. Feb	Online	HPC-Cluster – Auslegung, Kosten & Nachhaltigkeit	HLRS (SCA)
20.–21. Jan	Online	Data analytics for engineering data using machine learning ^{NEU}	Fraunhofer-SCAI/HLRS
1.–2. Feb	Online	AI for Science Bootcamp ^{NEU}	NVIDIA/HLRS/JSC/LRZ
7.–11. Feb	Online	Parallel Programming with MPI & OpenMP and Tools	ZIH/HLRS
14.–18. Feb	Online	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS/DLR
21.–25. Feb	Online	Fortran for Scientific Computing *	HLRS
21. Feb–28. März	Online	Performance Optimierung - Kommunikation	HLRS (SCA)
8.–11. März	Online	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
14.–15. März	Online	N-Ways to GPU Programming Bootcamp ^{NEU}	NVIDIA/HLRS/LRZ
14. März–11. Apr	Online	Datenmanagement	HLRS (SCA)
22.–25. März	Mainz	Parallelization with MPI and OpenMP	ZDV/HLRS
28. März–1. Apr	Stuttgart	Iterative Solvers and Parallelization	HLRS
5.–7. Apr	Online	Hybrid programming in HPC - MPI+X *	VSC Vienna/HLRS
7.–8. Apr	Online	AI for Science Bootcamp	NVIDIA/HLRS/JSC/LRZ
25. Apr–9. Mai	Online	Paralleles Programmieren mit OpenMP	HLRS (SCA)
26.–29. Apr	Online	Optimization of Node-level Performance and Scaling on Hawk	HLRS
28.–29. Apr	Online	Shared memory parallelization with OpenMP @ VSC Vienna *(TtT)	VSC Vienna/HLRS
2.–30. Mai	Online	Visualisierung: Grundlagen & Anwendung	HLRS (SCA)
3.–6. Mai	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
9.–11. Mai	Online	Fortran for Scientific Computing	HLRS
16. Mai–4. Jul	Online	HPC-Cluster – Aufbau & Betrieb	HLRS (SCA)
17.–20. Mai	Online	Parallelization with MPI @ VSC Vienna *(TtT)	VSC Vienna/HLRS
23.–25. Mai	Online	Data analytics for engineering data using machine learning	Fraunhofer-SCAI/HLRS
13.–15. Jun	Online	Data analytics for engineering data using machine learning	Fraunhofer-SCAI/HLRS
13. Jun–25. Jul	Online	Simulation: Grundlagen & CFD	HLRS (SCA)
15.–17. Jun	Online	MPI and OpenMP in Scientific Software Development @ SURF *(TtT)	SURF/HLRS
20.–21. Jun	Online	Efficient Parallel Programming with GASPI *	HLRS

21.–24. Jun	Stuttgart	Modern C++ Software Design (Intermediate)	HLRS
22.–24. Jun	Online	Hybrid Programming in HPC - MPI+X	LRZ/HLRS/NHR@FAU/VSC
28. Jun–1. Jul	Online	Node-Level Performance Engineering *	HLRS
12.–14. Jul	Stuttgart	Deep Learning and GPU programming using OpenACC	HLRS/LRZ
17.–25. Aug	Online	Six-day course in parallel programming with MPI/OpenMP	ETH/HLRS
12.–16. Sep	Stuttgart	Introduction to Computational Fluid Dynamics	HLRS/DLR
12. Sep–24. Okt	Online	Datenanalyse mit HPC	HLRS (SCA)
20.–23. Sep	Stuttgart	Julia for High-Performance Computing * ^{NEU}	HLRS
26.–27. Sep	Online	Machine Learning with AMD Instinct GPUs and ROCm Software ^{NEU}	HLRS/AMD
29.–30. Sep	Stuttgart	Scientific Visualization	HLRS
29.–30. Sep	Online	AMD Instinct GPU Training	HLRS/AMD
10.–14. Okt	Stuttgart	Parallel Programming Workshop (with TtT)	HLRS
17.–21. Okt	Stuttgart	CFD with OpenFOAM	HLRS
24.–25. Okt	Online	NVIDIA/HLRS SciML GPU Bootcamp ^{NEU}	HLRS/NVIDIA/LRZ
26.–28. Okt	Online	Introduction to oneAPI, SYCL2020 and OpenMP offloading ^{NEU}	HLRS/INTEL
7.–11. Nov	Stuttgart/Online	Optimization of Scaling, I/O and Node-level Performance on Hawk	HLRS
7.–30. Nov	Online	Paralleles Programmieren mit MPI	HLRS (SCA)
10.–11. Nov	Online	Shared memory parallelization with OpenMP @ VSC Vienna *(TtT)	VSC Vienna/HLRS
14.–17. Nov	Online	Introduction to GPU Programming using CUDA ^{NEU}	HLRS
21.–23. Nov	Online	Data analytics for engineering data using machine learning	Fraunhofer-SCAI/HLRS
22.–25. Nov	Online	Modern C++ Software Design (Advanced)	HLRS
22.–25. Nov	Wien/Online	Parallelization with MPI @ VSC Vienna TtT	VSC Vienna/HLRS
28.–30. Nov	Online	Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP	JSC/HLRS
1.–2. Dez	Online	Introduction to NEC SX-Aurora TSUBASA vector platform	HLRS/NEC
5.–9. Dez	Online	Fortran for Scientific Computing *	HLRS
12.–14. Dez	Online	Hybrid Programming in HPC - MPI+X @ VSC Vienna *(TtT)	VSC Vienna/HLRS/NHR@FAU
12.–16. Dez	Online	From Machine Learning to Deep Learning: a concise introduction	HLRS

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

* PRACE Kurse: Das HLRS ist Mitglied des Gauss Centre for Supercomputing (GCS), einem der zehn PRACE Training Centers in der EU. Die gekennzeichneten Kurse sind teilweise von PRACE gesponsert und Teil des PRACE Kursprogramms.

TtT: Train the Trainer Kurse

AMD – AMD | DLR – Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt | ETH – Scientific IT Services, ETH Zürich | Fraunhofer-SCAI – Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen | HLRS – Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart | HLRS (SCA) – Supercomputing-Academie | INTEL – INTEL | JSC – Jülich Supercomputing Centre | LRZ – Leibniz-Rechenzentrum | NEC – NEC | NHR@FAU – Erlangen National High Performance Computing Center | NVIDIA – NVIDIA | SURF – SURFSara (Niederländisches Nationales Supercomputing-Zentrum) | VSC Vienna – Vienna Scientific Cluster | ZDV – Zentrum für Datenverarbeitung (Universität Mainz) | ZIH – Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (TU Dresden)

Workshops und Konferenzen 2022

24. Februar Kick-off Workshop CIRCE: Wie Urgent Computing das Krisenmanagement unterstützt

Dieser an Behörden gerichtete Workshop befasste sich mit der Frage, wie große Computersimulationen eine bessere Vorhersage und Entscheidungsfindung in Krisensituationen ermöglichen können.

24. März Was haben kommunale Planung und digitale Modelle gemeinsam?

Dieser Online-Workshop zeigte die Möglichkeiten auf, die Höchstleistungsrechner, virtuelle Realität, digitale Zwillinge und verwandte Technologien für Stadtplanung, Stadtmanagement und nachhaltige Entwicklung bieten.

23.-24. Mai 33. Workshop on Sustained Simulation Performance

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

31. August – 2. September SAS-Konferenz 2022: Vertrauen in Informationen

Diese interdisziplinäre Konferenz befasste sich mit den Ursprüngen und der Natur von Desinformation, ihren Auswirkungen auf die öffentliche Meinung und möglichen Strategien zu ihrer Bekämpfung.

4.-5. Oktober 25th Results and Review Workshop

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

6.-7. Oktober HPC User Forum

Der von Hyperion Research und dem HLRS organisierte Workshop brachte hochrangige Vertreter:innen der wichtigsten HPC-Initiativen, international bekannte Höchstleistungsrechenzentren, führende Technologiehersteller und andere Expert:innen für neue HPC-, KI- und Quantencomputertechnologien und -anwendungen zusammen.

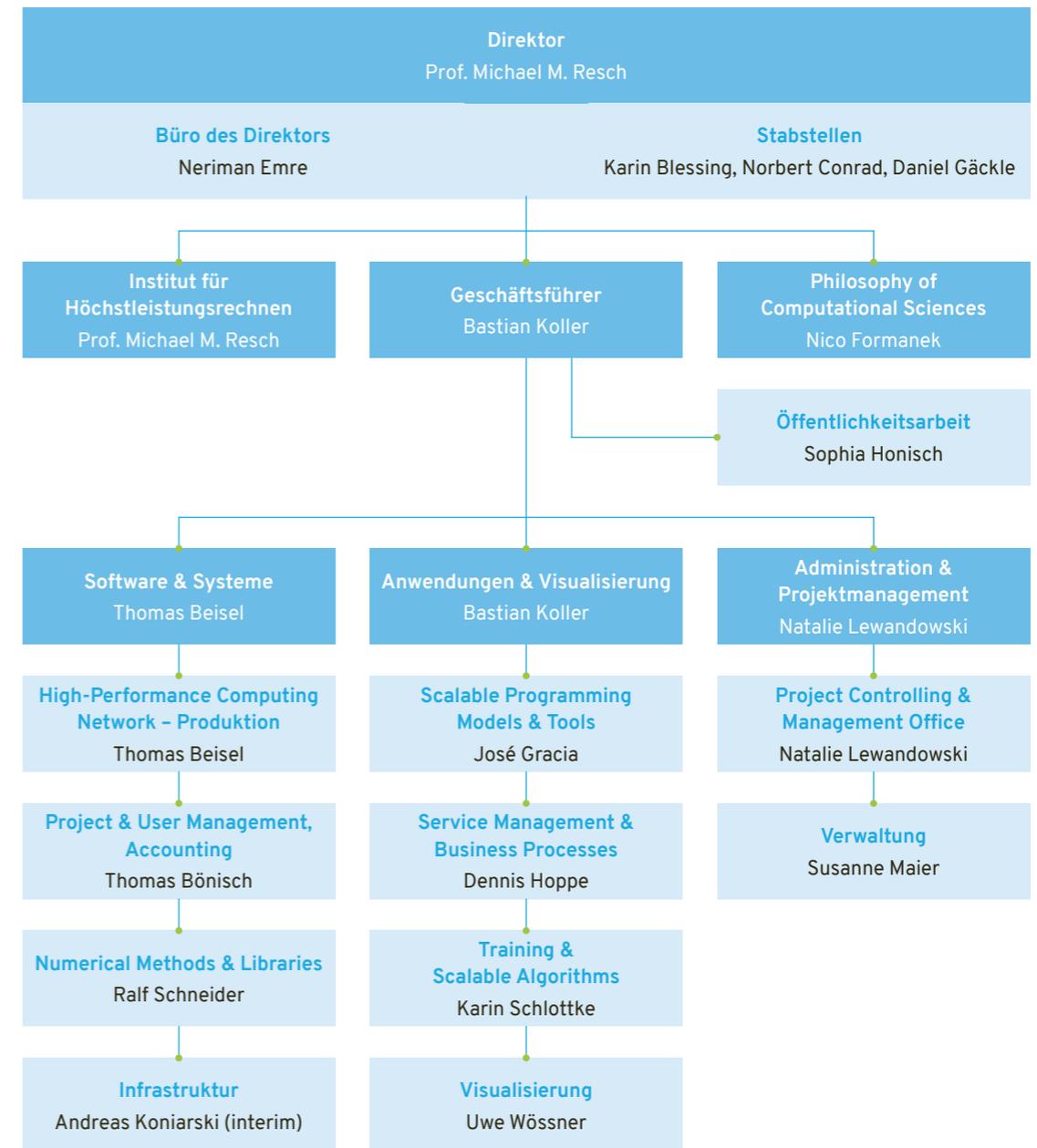
1. Dezember 6. Industrial HPC User Round Table (iHURT)

Das jährliche iHURT-Treffen förderte auch 2022 den Austausch zwischen dem HLRS und seinen Industrienutzer:innen. Der Fokus lag auf innovativen HPC-Anwendungen für Forschung und Entwicklung sowie auf den Herausforderungen, vor denen Nutzer:innen von Höchstleistungsrechnern aus der Industrie stehen.

12. Dezember Nachhaltige Beschaffung und nachhaltiger Rechenzentrumsbetrieb

Auf der Grundlage der im ENRICH-Projekt gesammelten Erfahrungen konzentrierte sich dieser Workshop auf Strategien für eine nachhaltigere Beschaffung und Entsorgung von Großrechnersystemen sowie auf Ansätze zur Verbesserung der Energieeffizienz im Zusammenhang mit dem Systembetrieb, effizienter Programmierung, dem Einsatz intelligenter Netze und anderer Infrastruktur.

Organigramm



Organisation

Verwaltung

Leitung: *Susanne Maier*

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

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

Leitung: *Thomas Beisel*

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

Infrastruktur

Leitung (interim): *Andreas Koniarski*

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

Numerical Methods and Libraries

Leitung: *Dr.-Ing. Ralf Schneider*

Stellt numerische Bibliotheken und Compiler für HLRS-Computing-Plattformen bereit. Die Abteilung verfügt über Erfahrung in der Implementierung von Algorithmen auf verschiedenen Prozessoren und HPC-Umgebungen, einschließlich der Vektorisierung basierend auf der Architektur moderner Computer. Das Team forscht auch an der Simulation von Blutfluss und Knochenfrak-

turen im menschlichen Körper und ist verantwortlich für Schulungen, die sich auf Programmiersprachen und numerische Methoden konzentrieren, die für HPC wichtig sind.

Philosophy of Computational Sciences

Leitung: *Nico Formanek*

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

Project Controlling and Management Office

Leitung: *Dr. Natalie Lewandowski*

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

Project & User Management, Accounting

Leitung: *Dr.-Ing. Thomas Bönisch*

Verantwortet das Management und das Accounting der Systemnutzung am HLRS. In diesen Bereich fallen auch die Erstellung und die Pflege der Webschnittstellen zum (Bundes-) Projektmanagement und die Informationsbereitstellung für die Nutzer:innen. Außerdem sind in der Abteilung die Aktivitäten des HLRS in Bezug auf die europäische Supercomputerinfrastruktur PRACE sowie das Datenmanagement gebündelt. Dazu gehören der Betrieb des High-Performance Storage

Systems und dessen Weiterentwicklung, die Konzeption neuer Ansätze für das Datenmanagement der Anwender:innen und die Aktivitäten im Bereich Forschungsdatenmanagement.

Öffentlichkeitsarbeit

Leitung: *Sophia Honisch*

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

Scalable Programming Models and Tools

Leitung: *Dr. José Gracia*

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

Service Management and Business Processes

Leitung: *Dennis Hoppe*

Evaluiert neuartige Technologien, die einen wesentlichen Impuls für die künftige Nutzung von Hochleistungsrechnern geben könnten. Zu diesen Technologien gehören künstliche Intelligenz, Cloud- und Edge-Computing sowie Quantencomputing. Die Arbeitsgruppe untersucht beispielsweise die Konvergenz von Höchstleistungsrechnen und künstlicher Intelligenz mit dem Ziel, KI-Methoden in klassische Simulationen einzubinden, um hybride HPC/AI-Workflows zu realisieren. Dazu gehört auch die Entwicklung von KI-Lösungen,

insbesondere mit Industriebeteiligung, unter Verwendung von Spitzentechnologien aus den Bereichen Big Data, maschinelles Lernen und Deep Learning. Die Arbeitsgruppe erforscht auch verwandte Virtualisierungstechnologien wie Container, Orchestrierung und Job Scheduling. Durch die Nutzung von Synergien zwischen Virtualisierung und HPC hat die Gruppe weitreichendes Fachwissen über die Entwicklung und den Betrieb dynamischer und skalierbarer, förderter Cloud-Dienste erworben.

Training and Scalable Algorithms

Leitung: *Karin Schlottke*

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

Visualisierung

Leitung: *Dr.-Ing. Uwe Wössner*

Unterstützt Ingenieur:innen und Wissenschaftler:innen bei der visuellen Analyse von Daten, die durch Simulation auf Höchstleistungscomputern erzeugt werden. Durch die Bereitstellung von Technologien, die Benutzer:innen in visuelle Darstellungen ihrer Daten eintauchen lassen, ermöglicht die Abteilung den Anwender:innen die direkte Interaktion mit ihnen, wodurch die Analysezeit verringert und neue Arten von Entwicklungsprozessen ermöglicht werden. Die Abteilung entwickelt Tools für die Visualisierung in Virtual Reality, Augmented Reality und hat darüber hinaus Softwaresysteme entwickelt, um Verarbeitungsschritte, die über mehrere Hardwareplattformen verteilt sind, in eine nahtlos verteilte Simulations- und Visualisierungsumgebung zu integrieren.

© 2023

Hochleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Universität Stuttgart
Nobelstraße 19
70569 Stuttgart, Deutschland

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

Direktor, HLRS

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

Leitung Öffentlichkeitsarbeit

Sophia Honisch

Redaktion

Christopher M. Williams

Autoren

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

Unterstützung bei der Übersetzung

Louise Acupanda

Fotos und Abbildungen

Bildrechte aller nicht gekennzeichneten Bilder: HLRS

Druck

gutenberg beuys, Feindruckerei GmbH, Langenhagen

Design

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

Institutionelle Zugehörigkeit



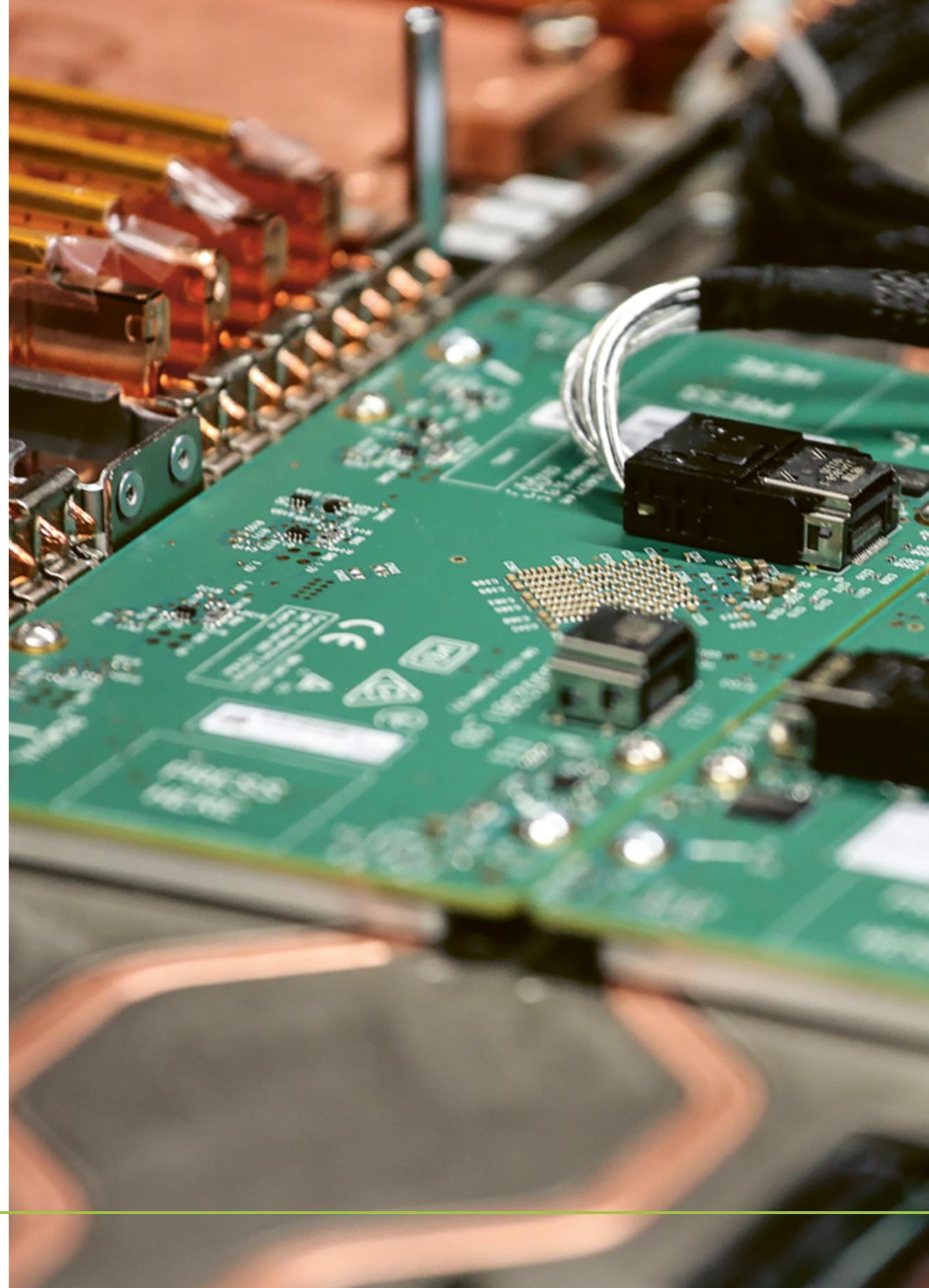
Universität Stuttgart



Finanzierung für Hawk bereitgestellt von:



Dieses Magazin wurde klimaneutral auf Papier gedruckt,
das mit dem FSC® zertifiziert wurde.



Folgen Sie uns auf:



LinkedIn



Twitter

**Höchstleistungsrechenzentrum
Stuttgart**

www.hlrs.de

Cover:

Forschende aus der Visualisierungsabteilung des HLRS arbeiteten mit Ingenieuren und Architekten zusammen, um einen digitalen Zwilling des ElbX-Tunnels zu entwickeln. Als größtes Sonderbauwerk des SuedLink-Projekts wird der Tunnel Offshore-Windenergie aus Norddeutschland unter der Elbe hindurch nach Süden transportieren.

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