



INFOBRIEF

Nr. 015
Oktober 2017

- GCS-Zentren auf der SC17
- Simulation des Sumatra-Erdbebens im Wettbewerb für den SC17-Best Paper Award
- GCS-gesponsertes Team TUMany SegFAULTs im SC17-Studenten-Cluster-Wettbewerb
- Wissenschaftsministerin Theresia Bauer am HLRS
- Thyssen-Tower in Rottweil: Entwicklungsarbeit am HLRS
- Einmillionster Rechenjob auf HLRS-System Hazel Hen
- Projekt Helmholtz Analytics Framework mit JSC-Beteiligung
- QPACE3 am JSC installiert
- Zwei neue Forschungsgruppen am JSC
- Deep Learning am LRZ
- GCS Science Communications – News Features von besonderen Forschungsprojekten

GCS-ZENTREN AUF DER SC17

Auch in 2017 sind die drei GCS-Zentren HLRS, JSC und LRZ auf der Supercomputing Conference 2017 (SC17) vertreten. Die jährlich wiederkehrende SC, die als größte und wichtigste Veranstaltung im Bereich High Performance Computing (HPC) gilt, wird vom 12.-17.11.2017 in Denver, Colorado/USA stattfinden.



Repräsentanten aller drei Zentren wirken dort im technischen

Konferenzprogramm in Tutorials, Birds-of-a-Feather-Meetings oder Workshops mit, zudem präsentieren sich die GCS-Zentren in der Ausstellung auf jeweils eigenen Messeständen. Das HLRS (Stand Nr. 417) legt bei seinen Exponaten den Schwerpunkt auf immersive parallele Visualisierung. Anwendungsgebiete werden u. a. der Maschinenbau (z.B. Luftströmung in Verpackungsanlagen), die Stadtplanung (Feinstaub- und Verkehrssimulationen) und die Architektur und das Bauwesen sein (Building Information Modeling). Das LRZ (Stand Nr. 875) zeigt Komponenten des neuen Cool-

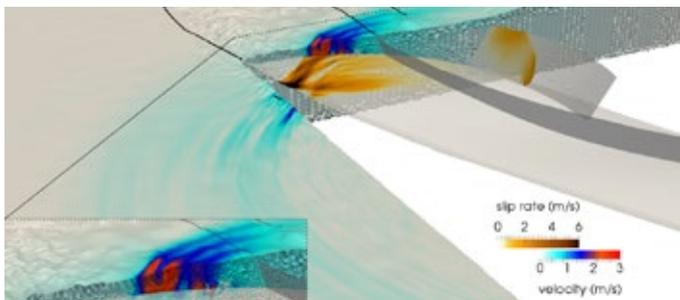
MUC-3 Systems, einer zu 100% warmwassergekühlten KNL-basierten Maschine von Megware. Zudem können Messebesucher eine Virtual Reality (VR) Demo erleben, die ihnen die Verbindung zwischen HPC und VR näherbringt. Im Mittelpunkt des JSC-Auftritts (Stand Nr. 401) steht das Konzept Modulares Supercomputing und die Vorstellung des neuen JURECA-Booster-Moduls. Präsentiert werden Aktivitäten der Sicherheitsforschung mit den Schwerpunkten Fußgängerdynamik, Verkehr und Brandschutz, die Beteiligung an der Infrastruktur für das Human-Brain-Projekt sowie die Kooperation mit der RWTH Aachen in der Jülich Aachen Research Alliance (JARA). Außerdem werden Ergebnisse wissenschaftlicher Simulationen und im JSC entwickelte HPC-Softwarewerkzeuge vorgestellt.

Mit Dr. Bernd Mohr vom JSC ist erstmals ein Nicht-Amerikaner Vorsitzender (General Chair) der SC.



Dr. Bernd Mohr (JSC), General Chair der SC17 (c) FZJ

SIMULATION DES SUMATRA-ERDBEBENS IM WETTBEWERB FÜR DEN SC17-BEST PAPER AWARD



Das Sumatra-Andamanen-Erdbeben an Weihnachten 2004, Auslöser des desaströsen Tsunamis im Indischen Ozean, war eines der stärksten und verheerendsten Erdbeben der Geschichte. Einsichten zu den geophysikalischen Abläufen der Naturkatastrophe verspricht die Publikation eines Teams aus Geophysikern, Informatikern und Mathematikern der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) und der Technischen Universität München (TUM). Sie haben auf SuperMUC die bisher größte Bruchmechanik-Simulation eines

Visualisierung eines Ausschnitts der Sumatra-Subduktionszone: Diskretisierung auf einem adaptiven unstrukturierten Tetraeder-gitter mit dynamisch berechneter Abrutschrate des Erdbebenherdes und seismischer Bodenbewegung. (www.geophysik.uni-muenchen.de/Members/gabriel/publicationdetails/2309)

Erdbebens überhaupt durchgeführt. Um die Simulation in vernünftiger Zeit berechnen zu können, waren ca. fünf Jahre Vorarbeit zur Optimierung der Erdbeben-Simulations-Software SeisSol nötig. Die Sumatra-Simulation rechnete fast 14 Stunden auf allen 86.016 Rechenkernen des SuperMUC und führte dabei knapp 50 Trillionen Rechenoperationen durch.

Das Paper mit dem offiziellen Titel „Extreme Scale Multi-Physics Simulations of the Tsunamigenic 2004 Sumatra Megathrust Earthquake“ wird am Dienstag, 14. November 2017, um 16.30 Uhr auf der SC17 in Denver, Colorado präsentiert und zählt dort zu den Anwärtern auf den begehrten „Best Paper“-Award. ([Link](#))

TEAM TUMany SegFAULTs IM STUDENT CLUSTER- WETTBEWERB DER SC17

Ein hochschulübergreifendes Studententeam, bestehend aus vier Vertreter/innen der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) und zwei Studenten der Technischen Universität München (TUM), repräsentieren die deutschen Farben im diesjährigen Studenten-Cluster-Wettbewerb (Student Cluster Competition/SCC) auf der SC17 in Denver. Das fränkisch-oberbayerische Team TUMany SegFAULTs überzeugte die SCC-Jury bei der Bewerbung um die SCC-Teilnahme und erzielte mit erreichten 9,4 von möglichen 10 Punkten eine Spitzenwertung. Damit sicherten sich die Nachwuchswissenschaftler aus Bayern einen der begehrten Plätze im 16 Teams umfassenden Studenten-Wettbewerb, in dem sie – neben einem Team aus Polen (Warschau/Lodsch) – zudem als einzige Europäer antreten werden.



Team TUMany SegFAULTs vor dem LRZ-Supercomputer SuperMUC. Hinten v. l.: TUM-Coach Sharru Møller, Ivonne Rausch, Ingrid Münch und Lisa Marie Dreier (alle FAU). Vorne v. l.: FAU-Coach Alexander Ditter, Benedikt Schröder (FAU) und David Schneller (TUM). Nicht in Bild: Svilen Stefanov (TUM). (c) A. Ditter.

Das GCS, das wie schon in den Vorjahren das deutsche SCC-Team mit einem Zuschuss zur Finanzierung der Reisekosten unterstützt, und die gesamte deutsche HPC-Gemeinde drücken den Studierenden aus Erlangen und München beide Daumen und wünschen viel Erfolg auf der SC in Denver. ([Link](#))



BADEN-WÜRTTEMBERGISCHE WISSENSCHAFTSMINISTERIN THERESIA BAUER AM HLRS

Einen Ortstermin am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) im August d. J. nutzte Wissenschaftsministerin Theresia Bauer, um die neue High-Performance Computing (HPC)-Strategie des Landes Baden-Württemberg zu verkünden. Die bekanntgegebene Förderung von 500 Millionen Euro soll für den landesweiten Ausbau der digitalen Infrastruktur und des Supercomputing verwendet werden, wovon auch das GCS-Center HLRS profitieren wird. Während ihres Besuchs am HLRS wurde Frau Ministerin Bauer exemplarisch gezeigt, welche Bedeutung das Höchstleistungsrechnen für Unternehmen, Städtebauer, Kriminalisten und Wissenschaftler hat und wie die digitale Infrastruktur und die Rechenleistung des HLRS-Supercomputers Hazel Hen schon heute genutzt wird. [\(Link\)](#)



In der HLRS-CAVE: Wolfgang Schotte (links) erläutert BW-Wissenschaftsministerin Theresia Bauer den Aufbau zur Verifikation der Methoden zur Blutspritzerrekonstruktion. Die Linien stellen die rekonstruierten Flugbahnen der Blutstropfen dar. (c) HLRS

THYSSEN-TOWER IN ROTTWEIL: ENTWICKLUNGSARBEIT AM HLRS

Seit dem 13. Oktober ist die Aussichtsplattform des 246 Meter hohen Aufzugtestturms der thyssenkrupp Elevator AG in Rottweil (Baden-Württemberg) für jedermann geöffnet. Die auf 232 Metern Höhe befindliche Besucherebene, die höchste und

größte allgemein zugängliche Aussichtsplattform in Deutschland, ist jedoch nur eine der Besonderheiten, die der „Thyssen-Tower“ als „Zentrum für Innovationen bei der Aufzugstechnologie“ bietet. Neben Hochgeschwindigkeitsaufzügen testet thyssenkrupp Elevator in drei von insgesamt 12 in diesem Turm vorhandenen Testschächten auch sein neuartiges Aufzugssystem MULTI, ein seilloses Aufzugssystem, das es – dank Linearmortertechnologie – erstmals erlaubt, mehrere Kabinen im selben Aufzugschacht vertikal und horizontal zu betreiben. Schon in der Forschungsphase des MULTI-Projektes stand das HLRS den Ingenieuren von thyssenkrupp Elevator als Partner zur Seite. Dank Simulation und Virtueller Realität wurden in der CAVE des HLRS wichtige Merkmale des neuen Systems getestet, was maßgeblich dazu beitrug, dass die Entwicklung und Realisierung des neuartigen Aufzugskonzeptes zügig und effizient vorangetrieben werden konnte. [\(Link\)](#)



Test des voll funktionsfähigen Prototypen des MULTI-Aufzugsystems in der HLRS-CAVE. (c) HLRS



EINMILLIONSTER RECHENJOB AUF HLRS-SYSTEM HAZEL HEN

Ein Rekord der besonderen Art konnte kürzlich am HLRS gefeiert werden: Auf dem CRAY XC40-Höchstleistungsrechner Hazel Hen wurde der einmilli-



Drei Mitarbeiter des ITLR analysieren die Morphologie eines nicht-newtonschen Flüssigkeitsstrahls in der HLRS-CAVE. (c) HLRS

onste Rechenjob vollzogen. Durchgeführt wurde dieser im Rahmen einer Untersuchung des Instituts für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) der Uni-

versität Stuttgart. Das Team um Prof. Bernhard Weigand nutzt die HPC-Infrastruktur des HLRS seit Jahren für die Forschung rund um Mehrphasenströmungen und in diesem Zusammenhang für die Weiterentwicklung ihres eigenentwickelten CFD (Computational Fluid Dynamics)-Codes FS3D.

Mehrphasenströmungen mit festen, flüssigen und/oder gasförmigen Anteilen sind die in der Natur und Technik am häufigsten auftretenden Strömungsformen. Der Jubiläums-Rechenjob widmete sich der Untersuchung des Strömungsverhaltens von „Nicht-Newtonschen“ Flüssigkeiten, der Simulation und Visualisierung der Einspritzung einer flüssigen Lösung von Polymeren durch unterschiedliche Druckdüsen. ([Vollständiger Bericht](#))

Dass der einmillionste Rechenjob auf Hazel Hen den Bereich Ingenieurwissenschaften repräsentiert, kommt nicht von ungefähr. Angesiedelt im Herzen eines der wirtschaftlich und industriell bedeutendsten Standorte Deutschlands, zählen am Stuttgarter HPC-Zentrum Projekte aus dem Bereich Engineering - vor allem aus dem Bereich Strömungsmechanik - mit einem Anteil von knapp 54% zu den Schwerpunkten der dort betriebenen Forschungsarbeit, gefolgt von rund 26% für Physik inklusive Festkörperphysik.

PROJEKT HELMHOLTZ ANALYTICS FRAMEWORK MIT JSC-BETEILIGUNG

Scientific Big Data Analytics (SBDA) ist ein Instrument moderner Forschung, um wissenschaftliche Probleme höchster Daten- und Rechenkomplexität zu bearbeiten. Dabei werden sehr große Datenvolumina mit Hilfe von High-Performance-Computing und Datenmanagementtechnologien verarbeitet. Das Projekt Helmholtz Analytics Framework (HAF), an dem das JSC maßgeblich beteiligt ist, wird auf der technischen Plattform der Helmholtz Data Federation (HDF) die Entwicklung der Datenwissenschaften in der Helmholtz-Gemeinschaft stärken. Dabei wird eine systematische Entwicklung von Datenanalysetechniken durch Domänenwissenschaftler gemeinsam mit Betreibern der Infrastruktur verfolgt. Dieses geschieht in einer Reihe anspruchsvoller Anwendungsfälle aus



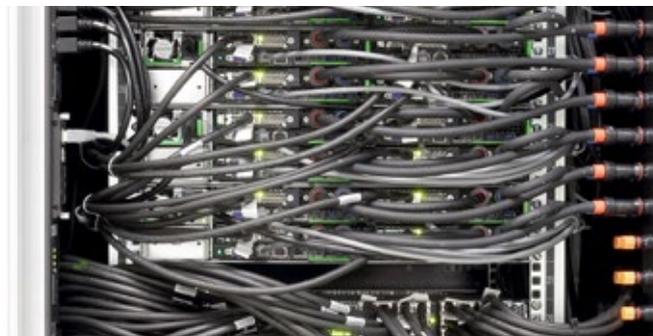
Die Teilnehmer des HAF-Kick-Off-Meetings am JSC. (c) FZ Jülich

fünf wissenschaftlichen Feldern. Der Austausch von Methoden zwischen den Anwendungsfällen ermöglicht Verallgemeinerungen, die dann weiteren Feldern und Benutzern zur Verfügung gestellt werden. Das auf die Laufzeit von drei Jahren ausgelegte Projekt erfuhr Anfang Oktober 2017 das offizielle „Kick-Off“. ([Link](#))



QPACE3 AM JSC INSTALLIERT

Im Juli d. J. wurde am JSC die Installation der dritten Generation von QPACE-Rechnern abgeschlossen. Der Rechner QPACE3 wurde im Rahmen des Projekts „QCD Parallel Computing Engine“ beschafft, das 2007 von den Universitäten Regensburg und Wuppertal als Teil des DFG-Sonderforschungsbereichs SFB TRR 55 gestartet wurde. Er wird hauptsächlich für Simulationen der Theorie der Starken Wechselwirkung, d.h. der Quantenchromodynamik (QCD), eingesetzt. QPACE3 besteht aus 672 PRIMERGY-CX1640-M1-Servern von Fujitsu, die jeweils mit einem Intel-Xeon-Phi-7210-Prozessor ausgestattet sind. Die theoretische Rechenleistung der insgesamt 43.008 Rechenkerne addiert sich auf 1,79 PFlop/s. Zur Kühlung der Prozessoren wird direkte Flüssigkühlung verwendet. Das Wasser, das die Racks



Blick in den QPACE3-Rechner des JSC: Energieeffizientes Supercomputing durch direkte Flüssigkühlung. (c) FZJ

verlässt, darf über 40°C warm sein, so dass trockene Freikühler eingesetzt werden können. Diese Art der Kühlung hilft, den Energieverbrauch zu reduzieren. [\(Link\)](#)

ZWEI NEUE FORSCHUNGSGRUPPEN AM JSC

Am John von Neumann-Institut für Computing (NIC) am Forschungszentrum Jülich haben im Sommer dieses Jahres zwei neue Forschungsgruppen ihre Arbeit aufgenommen. Beide Gruppen sind dem JSC angegliedert. Die Gruppe Computational Biophysical Chemistry unter der Leitung von Prof. Dr. Holger Gohlke widmet sich Technologien und Anwendungen aus den Bereichen strukturelle Bioinformatik, computergestützte Biologie und computergestützte Biophysik und hat zum Ziel, die Struktur, Dynamik und Funktion von Biomolekülen und Supramolekülen zu erforschen. [\(Link\)](#)



Prof. Dr. Holger Gohlke (c) FZJ



Dr. Alexander Schug (c) FZJ

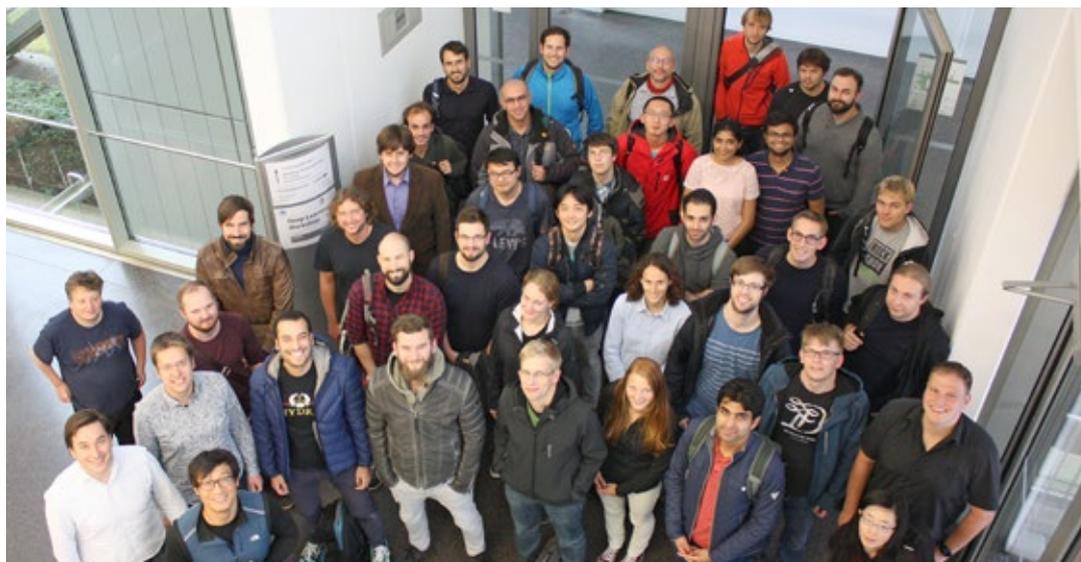
Die Gruppe Computational Structural Biology steht unter der Leitung von Dr. Alexander Schug. Seinem Team liefert die am JSC vorhandene HPC-Infrastruktur optimale Voraussetzungen, umfangreiche und komplexe Datensätze verschiedener Quellen zu integrieren, um mithilfe computergestützter Simulationen biomolekulare Strukturen und deren Dynamik mit atomarer Auslösung zu erforschen oder um nähere Einblicke in das Wachstum und die Differenzierung neuronalen Zellgewebes zu erhalten. Die gewonnenen Erkenntnisse werden von großem Wert für eine breite Palette wissenschaftlicher Gebiete sein, von der Grundlagenforschung der Molekularbiologie bis zur pharmakologischen und medizinischen Forschung. [\(Link\)](#)



DEEP LEARNING AM LRZ

Deep Learning entwickelt sich in vielen wissenschaftlichen Disziplinen rasant weiter: Die Datengenerierung und -erfassung wird einfacher und die parallele Rechenleistung (insbesondere durch GPUs) immer stärker. In den letzten Monaten konnten Testnutzer auf den Anfang des Jahres am LRZ in Betrieb genommenen Systemen (DGX-1 und eine Cloud-basierte VM mit Tesla-P100-GPUs) wertvolle Erfahrungen sammeln. Bei einem sehr gut besuchten Workshop im September, den das LRZ in enger Zusammenarbeit mit NVIDIA anbot, wurde das Wissen vertieft und Best

Practices besprochen. Sowohl das Know-how im Bereich Deep Learning als auch die Wissensvermittlung dazu will das LRZ in seinem vom bayerischen Wissenschaftsministerium geförderten Big Data Kompetenzzentrum weiter ausbauen.



Die Teilnehmer des Deep Learning-Workshops vor dem LRZ-Gebäude. (c) LRZ



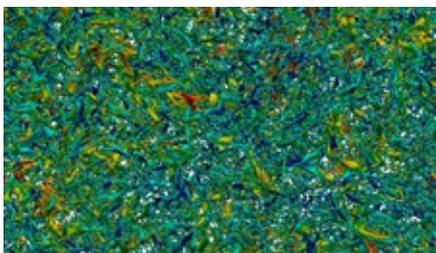
Eric Gedenk, Science Writer des GCS.
(c) GCS

GCS SCIENCE COMMUNICATIONS – NEWS FEATURES VON BESONDEREN FORSCHUNGSPROJEKTEN

Seit April dieses Jahres verstärkt mit Eric Gedenk ein US-amerikanischer Kollege die PR-Abteilung des GCS. Eric, der über einen Master in Germanistik verfügt, hatte zuvor am Oak Ridge National Laboratory in Knoxville/Tennessee (USA) gearbeitet, wo er als Science Writer der Oak Ridge Leadership Computing Facility (OLCF) bereits umfangreiche Erfahrung in Sachen Supercomputing und Einsatz der HPC-Systeme in Wissenschaft und Forschung sammeln konnte. Für das Thema Science Communications zuständig, setzt Eric seine Arbeit am GCS mit gleicher Zielsetzung fort. In dieser Rolle wird er u. a. auf GCS-Supercomputern durchgeführte Forschungsprojekte durch journalistisch ausgearbeitete Artikel (in Englisch) dediziert vorstellen. Die Artikel werden der Wissenschafts- und Fachpresse zur Publikation angeboten, zudem werden sie auf der GCS-Webseite gepostet. Ziel dieser speziellen „News Features“ ist es, außergewöhnliche, öffentlichkeitswirksame Forschungsereignisse zu bewerben und die wissenschaftliche Arbeit einem noch breiteren Publikum nahezubringen. Nachfolgend drei erste Beispiele:

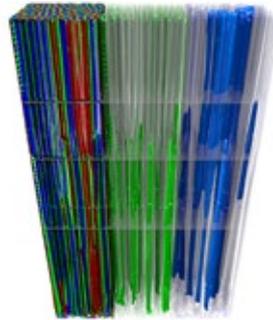
SAUBERERE KOHLEKRAFTWERKE

Wissenschaftler des Aerodynamischen Instituts (AIA) der RWTH Aachen University unter der Leitung von Prof. Wolfgang Schröder erforschten dank Rechenzeitkontingenten von hundertten von Millionen CPU-Stunden, wie durch Einsatz der Oxyfuel-Verbrennungstechnologie der CO₂-Ausstoß von konventionellen Kohlekraftwerken reduziert werden kann. Simulationen von Aufheizvorgängen des Kohlestaubs sollen Erkenntnisse dazu liefern, in welchen Zonen sich der Kohlestaub in einer Sauerstoff-/Kohlendioxid-Atmosphäre entzündet. Die auf dem HLRS-Supercomputer Hazel Hen durchgeführten direkten numerischen Simulationen (DNS) von Mehrphasenströmungen umfasste 45.000 Partikel, deren Durchmesser durch die Kolmogorov-Skala definiert wurde. Nach Kenntnisstand der Wissenschaftler enthielt diese Simulation eine bis dato unübertroffene Anzahl von Partikeln in diesem Längenskalenbereich. Die gewonnenen Ergebnisse sind erforderlich, um unbedingt notwendige verbesserte Modelle für derartige Mehrphasenströmungen aufzustellen. [\(Link\)](#)



Auf Hazel Hen durchgeführte direkte numerische Simulationen von Mehrphasenströmungen mit 45.000 Partikeln, deren Durchmesser durch die Kolmogorov-Skala definiert ist. <https://doi.org/10.1017/jfm.2017.171>

INNOVATIVE MATERIALFORSCHUNG

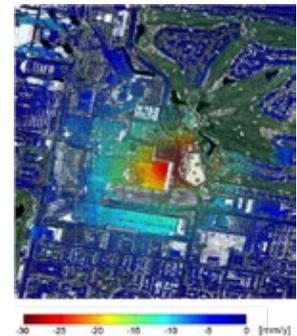


Phasenfeldsimulation von gerichtet ternär eutektisch erstarrtem Al-Ag-Cu mit dynamischen Geschwindigkeitswechseln (graue Ebenen).
(c) J. Hötzer, B. Nestler. IAM-CMS, KIT.

Computergestützte Simulationen auf GCS-Supercomputern eröffnen einem Team von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des Instituts für Angewandte Materialien (IAM), des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) und des Institute of Materials and Processes (IAM) der Hochschule Karlsruhe neue Wege in Sachen Materialforschung. Mit Hilfe der GCS-Höchstleistungsrechner SuperMUC (LRZ) und Hazel Hen (HLRS) erforschte ein Team um Prof. Britta Nestler, Gewinnerin des Gottfried Wilhelm Leibniz-Preises 2017 der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), die Mikrostrukturen von Materialien. Zielsetzung ist es, Einblicke in Prozesse der Mikrostrukturmodellierung zu erhalten, die experimentell nur schwer oder gar nicht nachgebildet werden können. Die gewonnenen Erkenntnisse verhelfen den Wissenschaftlern zur Entwicklung realistischer dreidimensionaler Materialmodelle, die in die praxisnahe Forschung mit der Industrie einfließen. [\(Link\)](#)

STADTENTWICKLUNG – VOM BILD ZUM FILM

Satellitenbilder und Supercomputer erlauben es ohne weiteres, ein dreidimensionales Bild einer Stadt zu erstellen. Ohne jedoch eine vierte Dimension – in diesem Fall, die Zeit – ist dieses Bild lediglich ein statisches. Mithilfe des Höchstleistungsrechners SuperMUC (LRZ) konnte ein Forscherteam der Technischen Universität München und des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt unter der Leitung von Prof. Xiaoxiang Zhu statische Stadt-Modelle erstmals in 4D-Modelle umrechnen. Das daraus resultierende „städtische Monitoring“ erlaubt es, Veränderungen in der Bebauungsinfrastruktur zu erkennen, die jederzeit durch entwe-



Risikoabschätzung von Fundamentabsetzungen dank Satellitendaten und HPC-Verarbeitung. Hier: Das Convention Center Las Vegas (USA). (c) Signal Processing in Earth Observation, TUM

der natürliche (seismische) oder vom Menschen verursachte Ereignisse (Baumaßnahmen) hervorgerufen werden können. Das Absacken von z. B. Fundamenten und damit einhergehend mögliche Schäden oder gar das Kollabieren von Gebäuden kann somit frühzeitig erkannt und erforderliche Gegenmaßnahmen können rechtzeitig eingeleitet werden. [\(Link\)](#)