

Energieeffizientes HPC: Abwärmenutzung in Dresden

Am 6. April erfolgte die Vertragsunterzeichnung zwischen dem Staatsbetrieb Sächsisches Immobilien- und Baumanagement und der SachsenEnergie AG zur nachhaltigen Nutzung der Abwärme der HPC-Systeme am ZIH der TU Dresden. Zukünftig soll die überschüssige Abwärme zur Nutzung im Fernwärmenetz der SachsenEnergie AG aufbereitet werden. Dafür wird noch in diesem Jahr ein Technikbauwerk mit Wärmepumpen errichtet, in dem das Wärmeniveau der Abwärme des Rechenzentrums auf das Fernwärmeniveau angehoben wird. Ausrüstung und Probetriebe erfolgen 2024. Ab 2025 kann dann ganzjährig die Rückkühlung überschüssiger Abwärme vermieden und diese stattdessen zur Nutzung im Fernwärmenetz eingespeist werden. Zusätzlich wird die bereits bestehende Nutzung zur Beheizung umliegender Hochschulgebäude im Winter um den Anschluss zweier Bürogebäude ergänzt. Durch die Einspeisung der Überschusswärme in das Fernwärmenetz werden über 2.700 t CO₂ pro Jahr vermieden, die sonst bei der Erzeugung der Fernwärme entstanden wären. Weitere Informationen: tu-dresden.de/zih/news/energieeffiziente-abwaermenutzung-lzr (Kontakt: [Daniel Hackenberg](#), ZIH)

NFDI für und mit Computer Science

Die Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) startete im März mit einem weiteren Projekt unter Beteiligung mehrerer GA-Mitglieder: „NFDI für und mit Computer Science“ (NFDIXCS) wurde in der 3. Auswahlrunde der Bund-Länder-Förderung der NFDI bewilligt. Das Projekt adressiert domänenspezifische Datenobjekte aus der Informatik. Sowohl Forschungsdaten als auch Software-Artefakte sollen durch gezielte Lösungen, den FAIR-Datenprinzipien folgend, besser auffindbar (findable), zugänglich (accessible), interoperabel (interoperable) und wiederverwendbar (reusable) werden. Um die unterschiedlichen Informatik-Forschungsdaten abzudecken sowie die notwendigen Ausführungsumgebungen und Software-Artefakte erreichbar zu machen, wurde das Konzept des Research Data Management Containers (RDMC) entwickelt und wird nun schrittweise eingeführt. Zentrales Ziel ist der Aufbau einer organisatorischen, technischen, kooperativen und interoperablen Infrastruktur zur Bündelung der vorhandenen Dienste und Akteure aus und für die Informatik. Dafür wurden die Anforderungen der Teildisziplinen ermittelt, in eine Dienstinfrastruktur überführt und für den nachhaltigen Betrieb ausgelegt. Durch gezielte Community-Entwicklung, wie spezifische Unterstützung des wissenschaftlichen Nachwuchses, Definition von Standards und Entwicklung von

Kompetenzen für den verantwortungsvollen Umgang mit Forschungsdaten, soll zudem ein Kulturwandel innerhalb der Fachgebiete angestoßen werden. An diesem, von der Universität Duisburg-Essen koordinierten, Vorhaben wirken mehrere GA-Mitglieder mit: Das ZIH der TU Dresden, JSC des Forschungszentrums Jülich und PC² der Universität Paderborn arbeiten im Teilprojekt „Performance Management“ gemeinsam daran, Performance-Daten und deren Metadaten im Rahmen des RDMC zu speichern und der Forschung zur Verfügung zu stellen. Das IT Center der RWTH Aachen leitet das Teilprojekt „Data for Benchmarking“, an dem auch die TU Darmstadt beteiligt ist. Die GWDG ist in 6 Themen involviert und leitet die Teilprojekte „Storage and Repositories“, „Persistent Identifiers“ und „Reusable Execution Environments“. Letzteres ist eine Kernkomponente für das RDMC-Konzept. Weitere Informationen: nfdixcs.org (Kontakt: [Michael Goedicke](#), Universität Duisburg-Essen)

GreenHPC durch optimierte Simulationen

Das Projekt „Energieoptimierte Simulationen für anwendungsorientierte Rechenprobleme“ (ENSIMA) hat das Ziel, durch den Einsatz von KI-Methoden die Auswahl von Entwurfsparametern in Produktionsprozessen zu verbessern und die Ausführungszeit von Simulationsprozessen zu beschleunigen. Für den Anwendungsfall von Blechumformungen in der Automobilindustrie soll die Rechenzeit um 50 % reduziert werden, was zu einer Verringerung des Stahleinsatzes um 15 % und somit zu einer Reduktion der Emissionen und des Energiebedarfs in der Fahrzeugproduktion führen soll. Das im Rahmen des BMBF-Programms „GreenHPC“ geförderte Verbundvorhaben wird unter Koordination der RWTH Aachen gemeinsam mit der TU Darmstadt, dem Forschungszentrum Jülich, der Gesellschaft für numerische Simulation, den Firmen GNS Systems sowie SIMCON kunststofftechnische Software und der Technischen Hochschule Würzburg-Schweinfurt durchgeführt. Weitere Informationen: itc.rwth-aachen.de/go/id/fdvb/#aaaaaaaaaahyoli (Kontakt: [Christian Terboven](#), RWTH Aachen)

Lösung von Protein-Puzzles mit Quantencomputing

Proteine sind für alle Lebewesen wichtig, weil sie beispielsweise elementare Stoffe im Körper transportieren oder beim Aufbau von Zellen helfen. Sie bestehen aus Ketten von Aminosäuren, die je nach Funktion anders gefaltet sind. Sind Proteine im menschlichen Körper falsch gefaltet, werden bestimmte Vorgänge gestört oder bleiben sogar ganz aus. Um diese Zusammenhänge besser zu verstehen, erforschen Wissenschaftler:innen des JSC

mit Hilfe des D-Wave Quantenannealers JUPSI aktuell, wie das Problem der Proteinfaltung für Quantencomputer kodiert werden kann. Erste Ergebnisse dieser Zusammenarbeit wurden kürzlich von Dr. Sandipan Mohanty (JSC) gemeinsam mit Forschenden der Universität Lund veröffentlicht. Die von der Zeitschrift Physical Review Research als „Empfehlung des Editors“ ausgezeichnete Arbeit zeigt, dass es JUPSI bereits jetzt – auf Basis seiner 5.000 Qubits – gelingt, mit geeigneten Algorithmen die Grundzustände von Modellproteinketten mit bis zu 64 Aminosäuren mit einer Erfolgsquote von 100 % aufzuspüren. Mit weiterentwickelten Systemen lassen sich voraussichtlich deutlich komplexere biophysikalische Fragestellungen berechnen – und so vermutlich auch manche Krankheiten besser verstehen. Weitere Informationen: go.fzj.de/protein-folding (Kontakt: [Sandipan Mohanty](mailto:Sandipan.Mohanty@GCS), JSC@GCS)

Simulation für bessere Batterien

Mithilfe von HPC-Simulationen und Berechnungen auf dem Supercomputer Hawk am HLRS untersuchen Forschende des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt Flüssigkeits-Festkörper-Wechselwirkungen in Batterien. Diese Prozesse spielen eine entscheidende Rolle für die Befüllung von Batteriezellen mit Elektrolyten. Um die realen Bedingungen innerhalb der Batteriezellen mit ihren Geometrien und Materialien besser zu verstehen, nutzt das Forschungsteam für die Modellentwicklung auf dem HPC-System Hawk des HLRS insbesondere „Lattice-Boltzmann“-Simulationen. Hierbei wird eine Flüssigkeit als Ansammlung vieler Teilchen auf einem Gitter (Lattice) betrachtet. Mithilfe des Supercomputers lassen sich die Methoden anpassen und die Berechnungseffizienz steigern. Ohne Einschnitte in Bezug auf die Genauigkeit der Simulation der Mehrphasenströmungen von Flüssigkeiten in den Poren der Batteriematerialien kann dabei eine Übereinstimmung zwischen Berechnung und analytischer Lösung erreicht werden. Das Team wird für die Validierung weitere Ergebnisse vergleichen. Die ersten Simulationen sind Teil der EU-geförderten Initiative DEFACTO für die Optimierung der Materialentwicklung und der Herstellungsprozesse von Lithium-Ionen-Batteriezellen. Weitere Informationen: hlrs.de/de/news/detail/simulation-fuer-bessere-batterien (Kontakt: [Eric Gedenk](mailto:Eric.Gedenk@GCS), GCS)

Internetsuche mitgestalten: OpenWebSearch.EU

In den nächsten zweieinhalb Jahren soll das Projekt OpenWebSearch.EU einen offenen Webindex sowie eine dezentrale IT-Infrastruktur in Europa entwickeln und etablieren. Mindestens fünf unabhängige Organisationen werden dafür Systeme bereitstellen. Für diese große Aufgabe sollen zudem ideenreiche Beiträge von außerhalb des Konsortiums einfließen. Die 14 Projektpartner haben deshalb einen Call veröffentlicht. KMU, Start-ups, Forschende und Innovator:innen sind aufgerufen, Ideen für konzeptionelle Beiträge zu rechtlichen bzw. zu wirt-

schaftlichen Aspekten oder zu technischen Ansätzen für die rechtssichere Datenbeschaffung unter Berücksichtigung gesellschaftlicher Beschränkungen einer offenen Websuche einzureichen. Einsendeschluss ist der 28. April. Für die weitere Ideenentwicklung stehen zwischen 25.000 und 120.000 € Forschungsmittel bereit. OpenWebSearch.EU wird durch das EU-Forschungs- und Innovationsprogramm „Horizon Europe“ gefördert. Weitere Informationen zur Ausschreibung: openwebsearch.eu/community/call1 sowie zu OpenWebSearch.EU: cordis.europa.eu/project/id/101070014 (Kontakt: [Megi Shari-kadze](mailto:Megi.Sharikadze@GCS), LRZ@GCS)

Zwei Jahre NHR@FAU in Erlangen

Das Zentrum für Nationales Hochleistungsrechnen Erlangen (NHR@FAU) feierte am 15. März mit Vertreter:innen aus Politik, Wissenschaft und Verwaltung sein zweijähriges Bestehen und gewährte spannende Einblicke in zukunftsweisende interdisziplinäre Forschungsfelder und performante Hochleistungsrechnerysteme. Als eines von insgesamt neun nationalen Zentren für das nationale Hochleistungsrechnen (NHR) stellt das 2021 gegründete Zentrum über die Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg hinaus HPC-Ressourcen und Beratungskompetenz für die gesamte Region bzw. überregional den Forschenden zur Verfügung. Zugleich leitet es die gemeinsamen Performance-Engineering-Aktivitäten innerhalb der NHR-Allianz und unterstützt Anwender:innen mit spezieller Expertise auf dem Gebiet der atomistischen Simulationen. Dass sich die Mühen in den vergangenen zwei Jahren gelohnt haben, wurde am 16. März im „Results Symposium“ demonstriert: Über zwanzig Nutzer:innen präsentierten wissenschaftliche Erkenntnisse, die sie mit den beiden Supercomputern seit der Inbetriebnahme erzielen konnten. Weitere Informationen: go-nhr.de/Colloquium23 (Kontakt: [Georg Hager](mailto:Georg.Hager@FAU), NHR@FAU)

Veranstaltungen

- 25.–27.04.2023: [Interactive High-Performance Computing with Jupyter](#), JSC@GCS, online
- 26.04.2023: [ANSYS | CADFEM Simulation Day@LRZ](#), LRZ@GCS
- 27.04.2023: [Introduction to Turbulence Modeling and Numerical Implementation](#), NHR4CES, online
- 03.–04.05.2023: [Advanced Meshing in OpenFOAM](#), NHR4CES, online
- 04.05.2023: [Introduction to Finite Element Methods for Flow Problems](#), NHR4CES, online
- 08.–12.05.2023: [Programming in C++](#), JSC@GCS
- 16.05.2023: [Introduction to Deep Learning](#), HKHLR, online

HPC-Kalender der Gauß-Allianz:

hpc-calendar.gauss-allianz.de