



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften



2020 JAHRESBERICHT

JAHRESBERICHT 2020



Stand: Juni 2022
LRZ-Bericht 2020



INHALTSVERZEICHNIS

01	Chronik	08
02	IT-Dienste für die Wissenschaft	14
03	Neue Technologien	42
04	Forschung	54
05	Aus- und Weiterbildung	72
06	Menschen	86
07	Kooperationen	98
08	Zahlen und Fakten	110



Von links: Prof. Dieter Kranzlmüller, Prof. Martin Schulz, Prof. Thomas Seidl, Prof. Hans-Joachim Bungartz

GEMEINSAM SIND WIR STARK: TROTZ PANDEMIE GAB ES VIELE POSITIVE NEUERUNGEN

Ohne Frage: Die SARS-Cov-2-Pandemie war das zentrale Thema in 2020, auch am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften. Aber: Wir haben wir das schier Unmögliche möglich gemacht – unsere Dienste und unsere Forschung und Entwicklung zu treiben – wie immer.

Als Rechenzentrum, das nach IT-Sicherheit und IT-Service-Management zertifiziert ist, hatten wir natürlich Notfallpläne in der Schublade. Für die Zertifizierung in 2019 hatten wir uns allerdings auf einen IT-Sicherheitsvorfall konzentriert – eine Pandemie als Notfall-Szenario erschien uns zu abwegig. Anfang 2020 wurden wir schnell eines Besseren belehrt. Trotzdem: Der Krisenstab am LRZ war im Handumdrehen eingerichtet, innerhalb weniger Tage konnten wir über 90% unser Kolleg:innen ins Homeoffice schicken. Es war eine große Kraftanstrengung – das ist nicht von der Hand zu weisen. Aber: Unsere Dienste liefen wie gewohnt – sogar so gut, dass wir z. B. die Partner vom DFN beim Ausbau ihrer Videokonferenzlösung

DAS LRZ IM DIENST DER FORSCHUNG: GERADE IN 2020 WICHTIGER DENN JE



unterstützen konnten und auch den Start des ersten digitalen Semesters an den bayerischen Universitäten problemlos meisterten.

Wie Sie in unserem Jahresbericht für 2020 lesen werden, spielte die Pandemie natürlich trotzdem meist eine Rolle. Deshalb freut es uns umso mehr, wie üblich viel über „Business-as-usual“ (Kapitel 2); hervorragende Forschung und Entwicklung (Kapitel 3) sowie ausgezeichnete Wissenschaft (Kapitel 4) berichten zu können. Wir entschieden uns daher ganz bewusst dazu, diesem Jahresbericht kein eigenes „Corona-Kapitel“ voranzustellen, sondern unsere Themen und Geschichten in den in 2019 etablierten Rubriken zu erzählen.

Unser Kapitel 6 „Menschen“, dehnt sich allerdings über den ganzen Jahresbericht aus. Es war uns ein Anliegen, die außergewöhnlichen Menschen zu zeigen, die die hervorragende Arbeit des LRZ in diesen turbulenten Zeiten leisteten. Natürlich gilt auch in 2020: Diese Kolleg:innen stehen stellvertretend für die herausragende Teamarbeit aller Beschäftigten am LRZ.

Wie beruhigend, dass wir uns auch in 2020 auf die Unterstützung unserer Förderer und unserer Mutterorganisation, der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAW) zu 100% verlassen konnten. Ein umso herzlicheres Dankeschön geht daher an dieser Stelle an die Bayerische Staatsregierung und das Bayerische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst, allen voran an unseren Ansprechpartner Herrn Georg Antretter. Die Zusammenarbeit mit dem BAW-Präsidenten Prof. Thomas O. Höllmann und der Generalsekretärin Bianca Marzocca war ebenso gewohnt vertrauensvoll. Auch hierfür ein herzliches Dankeschön. Unterstützt haben uns mit weisen und in diesem Jahr besonders willkommenen Ratschlägen unsere ehemaligen Direktoren Prof. Dr. Arndt Bode und Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering. Ein besonderer Dank gilt nicht zuletzt unserem stellvertretenden LRZ-Leiter Prof. Dr. Helmut Reiser. In engster Abstimmung mit ihm führen wir das LRZ durch herausfordernde Zeiten und behalten dabei fest die Zukunft des Hauses im Blick.

Wir bedanken uns für Ihr Vertrauen und freuen uns auf die künftige Zusammenarbeit.

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller
Vorsitzender des Direktoriums

Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz
Mitglied des Direktoriums

Prof. Dr. Martin Schulz
Mitglied des Direktoriums

Prof. Dr. Thomas Seidl
Mitglied des Direktoriums

dominie-
entrum der
r im Team
cht: Unse-
ng voran



01

CHRONIK

Zeitreise 2020

10

DIE ENTDECKUNG DES WIR

JANUAR

DIGITALE ZEITZEUGIN



Die jüdische Kinderärztin Eva Umlauf erzählt fürs LediZ-Projekt von ihrem Leben

MÄRZ

#WIRVERSUSVIRUS

In aller Welt fahnden Wissenschaftler:innen nach Wirkstoffen gegen das Corona-Virus: SuperMUC-NG hilft der internationalen Forschungsgruppe CompBioMed. In rund 60 Millionen Stunden durchforstet der Supercomputer ganze Bibliotheken voller Moleküle und chemischen Stoffen nach Mitteln gegen COVID-19.

MÄRZ

ENGAGIERT & ERFOLGREICH



Lernen Sie 19 Corona-Held:innen des LRZ kennen: <http://purl.badw.de/rVLBhO>

Als hätten sie's geahnt: Für die Zertifizierung des IT-Service- und Sicherheits-Managements 2019 hatten Kolleg:innen ausgerechnet einen Pandemie-Notfallplan für das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ausgearbeitet. Was als Übung gedacht war, wurde Realität. 2020 ging das SARS-Cov-2-Virus um die Welt und erzwang Umdenken, Umgewöhnen, Umstrukturierung. Auch am LRZ. Und viel länger als erwartet.

Corona prägte Arbeit, Kooperationen und Forschung am LRZ wie nichts Anderes zuvor. Ab Mitte März ging gar nichts mehr in Garching: Vorträge, Workshops ins Digitale gedrängt, mehr als 200 von rund 260 Beschäftigten ins Home Office geschickt, Besuche auf das Minimum beschränkt. Erstmals lernen Mitarbeitende ihr LRZ aus der Sicht von Anwender:innen kennen: im Remote-Zugriff, in Videokonferenzen, mit Abstand.



Die Corona-Pandemie treibt Forschung und Digitalisierung am Leibniz-Rechenzentrum voran, bringt neue Technologie ins Haus – und schafft nebenbei Gewissheit: "Zamhalten" hilft in Krisen.

APRIL

MAI

JULI

STUDIUM DIGITALE

Die Universitäten gehen wegen der Pandemie auf Distanz. Das LRZ bereitet seine Systeme vor, damit Zehntausende Studierende und Dozent:innen in München digital lernen und lehren können. Zittern zum Semesterstart: Aber die Systeme halten dem Ansturm stand.

MIT ABSTAND WILLKOMMEN



Die CSU-Politikerin Prof. Angelika Niebler informiert sich am LRZ über Zukunftstechnologien.

AUSGEZEICHNETE SOFTWARE

Das LRZ-Framework „Wintermute“ wird als eines der innovativsten Datenanalyse-Verfahren fürs High Performance Computing ausgezeichnet

ZITTERPARTIEN FÜR MENSCH UND MASCHINEN

Im Chinesischen besteht der Begriff Krise, Weiji, aus den Zeichen für Risiko und Chance. Tatsächlich bringt Corona Leid und Unsicherheit, aber eben auch Möglichkeiten. Dank seiner zupackenden Beschäftigten und Corona-Held:innen hat das LRZ Risiken gemeistert und konnte Perspektiven schaffen.

Der Lockdown im LRZ, bei Universitäten und Hochschulen fordert insbesondere die Kolleg:innen in der Technik und von den Speichersystemen. Statt WLAN in Stadt und Land sind jetzt sichere Verbindungen zwischen Tausenden von Home Offices und Studierstuben zu den Speichern des LRZ sowie zu Hörsälen und

Universitäten gefragt. In Windeseile müssen Speicher-, Cloud-, Netzwerks-Kapazitäten um- und ausgebaut, mehr Server und Rechenressourcen installiert, neue Lizenzen für Lehr-, Lern- und Kommunikationssoftware beschafft werden. Oft eine Zitterpartie: Reichen die Ausbauten? Schaffen die Systeme den Ansturm? Am LRZ wird zusammen gerückt und effizient weiter geschafft. Kolleg:innen springen ein, wenn irgendwo etwas nicht weitergeht. Und die Universitäten starten ohne Ruckeln ins Zeitalter digitaler Lehre. Allen Belastungen der Systeme zum Trotz – das LRZ kann sogar den Verbündeten vom Deutschen Forschungsnetz (DFN) helfen.

Zehn virtuelle Maschinen in der Cloud erweitern dessen Dienste und ermöglichen Tausende Telefon- und Hunderte Videokonferenzen mehr pro Tag. Diese Zuverlässigkeit spricht sich rum: Die Verwaltungen der Münchner Universitäten legen jetzt noch den Betrieb ihrer Netze in die Hände des LRZ.

MIT FORSCHUNG GEGEN EIN VIRUS

Auch am LRZ wird digital gelehrt und geübt. Online-Kurse ziehen mehr Interessent:innen ans LRZ, das Netzwerk an Lehrkräften wächst durch Spezialist:innen für Supercomputing und Künstliche Intelligenz aus aller Welt. Und selbst für die Auszubildenden werden digitale Lernformate geschaffen, die gefallen, von den IT-Einsteiger:innen begeistert ergänzt werden – und sicher nicht mehr aus dem Lehrplan verschwinden.

Das Virus beschäftigt auch die Wissenschaft. Im Verbund mit der Partnership für Advanced Computing in Europe (PRACE) und dem Gauss Centre für Supercomputing (GCS) öffnet das LRZ im April seine Ressourcen für die Erkundung von Covid-19. Bis Sommer rechnen SuperMUC-NG und CoolMUC bereits rund 60 Millionen Stunden, modellieren die Wege von Virus-Proteinen in Zellen, sortieren mit Verfahren von Künstlicher Intelligenz Stoffe für Arzneien und simulieren, wie Atem durch die Lungen strömt: Das digitale Modell hilft, die Beatmung zu verbessern. Einige dieser Arbeiten werden 2021 für den Gordon Bell-Preis nominiert, der exzellentes Hochleistungsrechnen würdigt. Eine Technologiespende von Chip-Hersteller AMD unterstützt und befeuert dieses Engagement: Mit den innovativen Prozessoren lassen sich smarte Systeme aufbauen –

JULI

AUGUST

SEPTEMBER

KINDERLEICHT: SUPERCOMPUTING



Der TV-Kinderkanal KIKa besucht den SuperMUC-NG und erklärt seine Arbeit. Unbedingt sehenswert.
<https://bit.ly/3jAngmZ>

SICHER BLEIBT SICHER

Die DEKRA erneuert die ISO-Zertifikate für IT-Service Management (20.000) und IT-Sicherheits-Management (27.001) und lobt dabei die Teamarbeit am LRZ. Kolleg:innen teilen ihr Wissen über Prozesse mit anderen Rechenzentren.

WIR SAGEN DANKE

Computerhersteller AMD spendet dem LRZ 6 Server mit EPYC- und MI50-Prozessoren sowie 32-Gigabyte-Direkt Speicher für die Corona-Forschung. Wissenschaftler:innen können damit smarte Systeme zur Datenanalyse entwickeln und nutzen.

nach Corona sollen damit bevorzugt medizinische Daten ausgewertet werden.

Was für ein Jahr! Bei allen Abstandsregeln – das LRZ ist 2020 digitaler, in vielen Bereichen effizienter und sowieso sichtbarer geworden. Es präsentiert sich und seine Services gekonnt im Internet, versteht Weihnachten stimmungsvoll im Digitalen zu feiern, denkt mit den Beschäftigten über die Verstetigung von Remote-Arbeit und digitalen Prozesse nach. Am Ende aber steht eine schöne Entdeckung: das Wir-Gefühl. Komme, was da wolle – wir schaffen das gemeinsam. #LRZamhalten.



SuperMUC-NG als TV-Kulisse: Immer wieder erklären Wissenschaftler:innen vor dem Supercomputer ihre Forschungsprojekte. Hier führt Prof. Volker Springel (LMU) das Kamerateam von ARTE in die Welt der Astrophysik ein.

OKTOBER

NOVEMBER

DEZEMBER

OZAPFT WIRD IN VIRTUELLEN WELTEN



Bei den Medientagen 2020 präsentiert das LRZ seine Services und Arbeiten erstmals digital. Der Biergarten wird zum Treffpunkt während internationaler HPC-Konferenzen.

INNOVATIVE SYSTEME TESTEN

Neue Prozessoren und IT-Technologie im Härtestest: BEAST ist spannendes Testfeld für Forschende und Studierende, das LRZ kundschaftet damit Technik für den nächsten Supercomputer aus.

SMARTER, SCHNELLER, STÄRKER

Künstliche Intelligenz und maschinelles Lernen etablieren sich zunehmend in der Wissenschaft. Als Folge plant das LRZ den Ausbau von SuperMUC-NG für Phase 2 mit GPUs. Die notwendigen Verträge sind für die Unterzeichnung bereit ...



02

IT-DIENSTE FÜR DIE WISSENSCHAFT

Das LRZ als Dienstleister	16
Feuerprobe Corona	20
Mit SuperMUC-NG gegen Covid-19	24
25 Jahre Datenarchivierung	26
CoolMUC für die Forschung	30
Das Münchner Wissenschaftsnetz	32
Digitalisierung an Universitäten	34
Gut gerechnet SuperMUC-NG	36
Forschung und XR-Technik	38
Das LRZ in virtuellen Welten	40

IT-SERVICES FÜR WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG

Wir sind seit fast 60 Jahren für sie da: Hochschulen und Forschungsinstitute in München und Bayern, in Europa und weltweit verlassen sich auf die IT-Dienstleistungen des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). Rund 150.000 Menschen bieten wir von der E-Mail über Webserver bis zu virtuellen Maschinen, vom Internetzugang bis zu Speichermöglichkeiten in der Cloud, vom Notebook bis zum Supercomputer Technik und Services auf Spitzenniveau. Skalierbar, sicher, zuverlässig, nachhaltig. Dafür bauen wir auf das Know-how, die Erfahrung und die Neugierde von 260 Mitarbeitenden. Sie beraten bei Nutzungsfragen, installieren und hosten Gerätschaften, bauen Netze. Unterstützen Forschende tatkräftig bei der Verarbeitung, Simulation und Visualisierung ihrer Daten. Und erforschen gleichzeitig neueste Technik, um auch künftig exzellente Wissenschaft und den effizienten Rechenzentrumsbetrieb mit erneuerbaren Energien zu ermöglichen.

1.900
PROFESSOR:INNEN



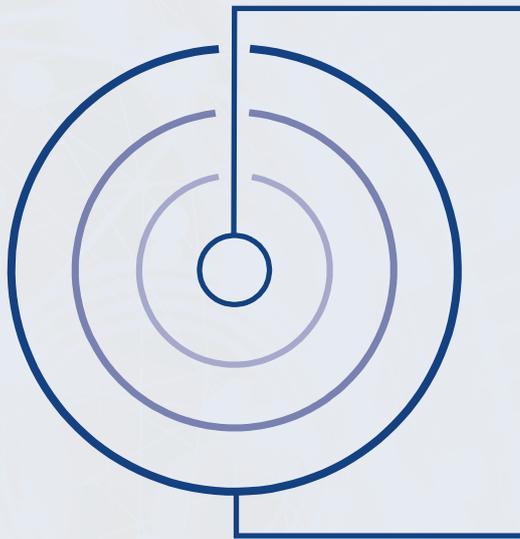
27.000
BESCHÄFTIGTE



120.000
STUDIERENDE



DAS LRZ ALS



Rechenzentrum für alle Münchner Universitäten

Regionales Rechenzentrum für alle bayerischen Universitäten

Nationales Höchstleistungsrechenzentrum (GCS)

Europäisches Höchstleistungsrechenzentrum (PRACE)



Detaillierte Anleitungen sowie Tipps und Tricks zu allen unseren Services bietet die LRZ-Dokumentationsplattform: <https://doku.lrz.de/>

DIE DIENSTE IM ÜBERBLICK



Desktop und mobile Clients



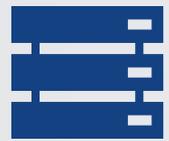
E-Mail und Groupware



High Performance Computing



Netz



Server-Hosting



Speicherlösungen



Unterstützende Dienste



Virtuelle Realität und Visualisierung



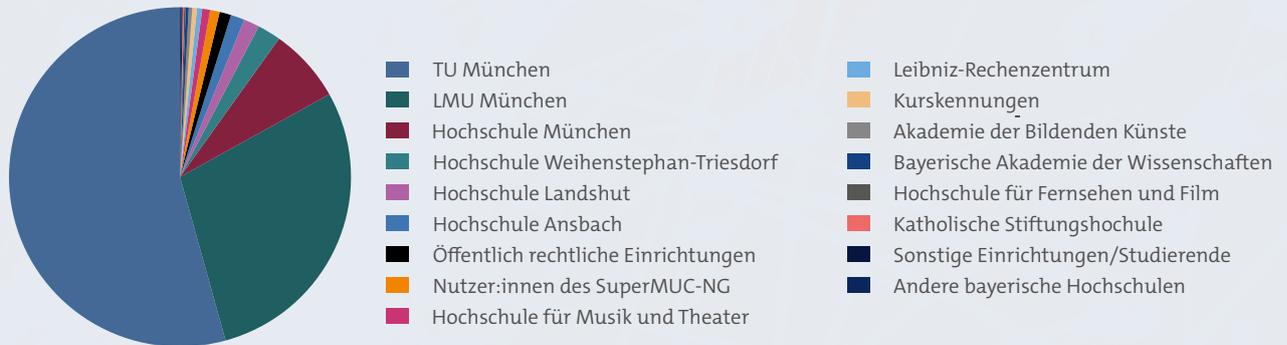
Vor-Ort Services



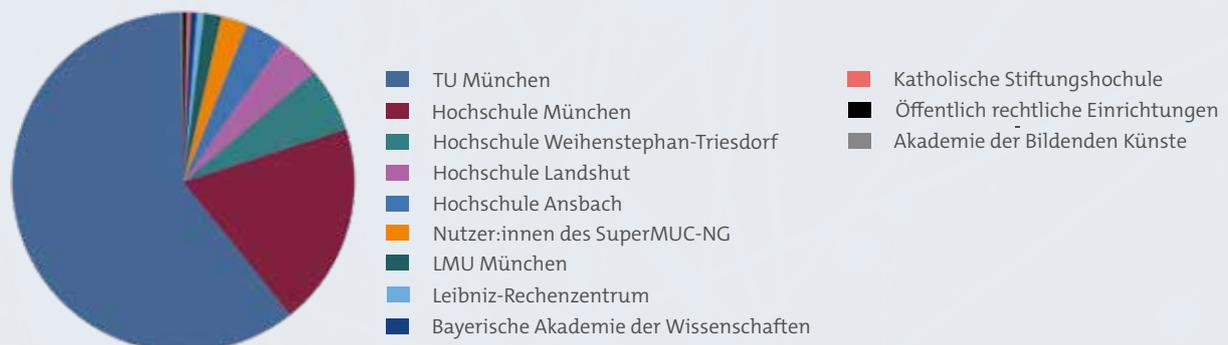
Webhosting und Webservices

ZUVERLÄSSIGE DIENSTE STARK GEFRAGT

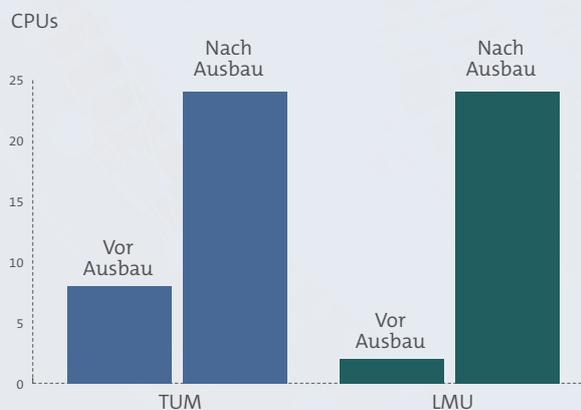
KENNUNGEN FÜR LRZ-DIENSTE



EXCHANGE NUTZERGRUPPEN

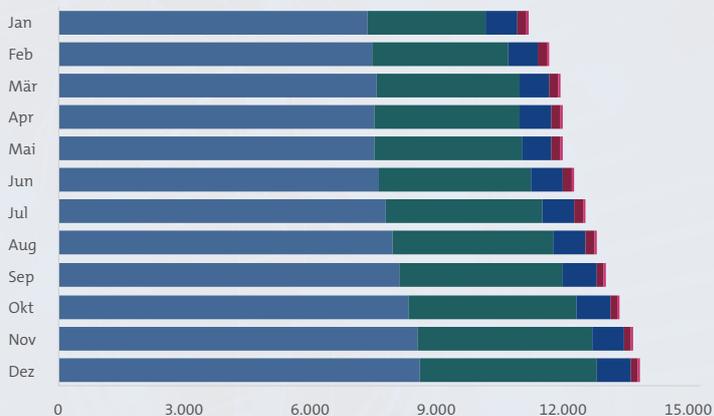


NUTZUNGSENTWICKLUNG MOODLE



Weitere Statistiken finden Sie in Kapitel 8.

MWN-PC



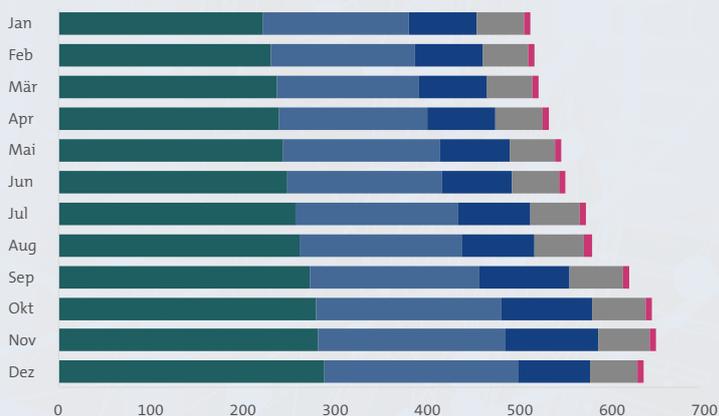
- Technische Universität
- Ludwig-Maximilian-Universität
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Hochschule München
- Hochschule für Musik und Theater

13.430

SYSTEME
ENDE 2020



MWN-MAC



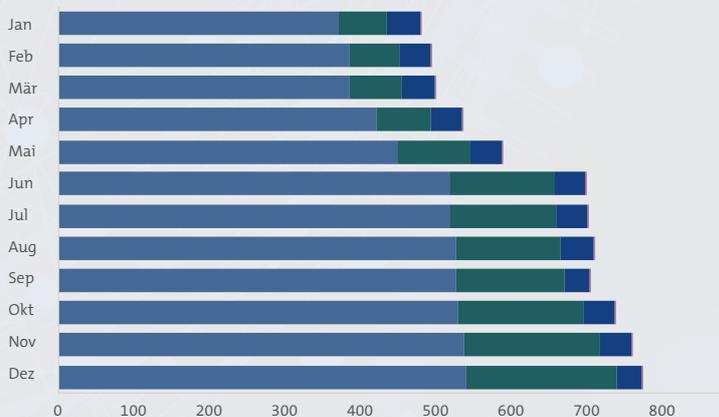
- Ludwig-Maximilian-Universität
- Technische Universität
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Akademie der Bildenden Künste
- Hochschule für Musik und Theater

632

SYSTEME
ENDE 2020



IOS-SYSTEME



- Technische Universität
- Ludwig-Maximilian-Universität
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Hochschule für Musik und Theater
- Akademie der Bildenden Künste

769

SYSTEME
ENDE 2020



CORONA FEUERPROBE FÜR IT-SYSTEME

6.000

VPN-SITZUNGEN



25 %

AUSLASTUNG
SYNC+SHARE



> 90 %

AUSLASTUNG
LRZ CLOUD



Die Corona-Pandemie zeigte: Das Leibniz-Rechenzentrum kann sich auf seine Systeme verlassen – vor allem aber mit dem Teamgeist und Engagement seiner Mitarbeitenden rechnen.

Stichtag 17. März 2020. Ganz Deutschland geht in den Corona-Lockdown. „Flatten the Curve“ lautet die Ansage, „runter mit den Ansteckungszahlen“. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) verschließt an diesem Tag seine Türen und schaltet in den Remote-Modus. Mehr als drei Viertel seiner 260 Beschäftigten arbeiten jetzt Zuhause. In Garching sorgt eine Notbesetzung dafür, dass die Computersysteme und Netze laufen. Auf ihnen lasten höchste Erwartungen – allein an den beiden Münchner Universitäten verlassen sich jetzt rund 125.000 Studierende, Professorinnen und Professoren sowie Beschäftigte in Wissenschaft, Technik und Verwaltung darauf, dass die Verbindung zu Servern und damit zu allen Programmen, Tools, Dateien zuverlässig steht, dass das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) und mit ihm die notwendigen Kommunikations- und Austauschkanäle wie Email, LRZ Sync+Share sowie Videokonferenz-Tools stetig funktionieren.

„Corona und die Umstellung der Universitäten auf die Online-Lehre waren eine echte Feuerprobe für das LRZ“, sagt der stellvertretende Leiter Prof. Helmut Reiser. „Die Systeme hielten dem Ansturm stand, und das ist vor allem unseren Mitarbeitenden zu verdanken. Sie haben sich über die Maßen reingekniet und schnell Lösungen für Probleme entwickelt. Wir standen alle vor einer neuen Situation, haben sie gemeistert und Einiges daraus gelernt.“



KLAUDIA ADAMOWICZ

VON DER FRAU BEKOMMEN WIR HILFE

Klaudia Adamowicz unterstützt seit 3 Jahren den Service-desk. „Wir merken, dass viele im Homeoffice arbeiten“, erklärt die Bioinformatik-Studentin.

„Es geht jetzt weniger um technische Fragen, sondern um Sofortlösungen, um Hilfe beim Videochat, um Mail-Zugang oder um Verbindungen zum Münchner Wissenschaftsnetz mit Hilfe von Virtual Private Networks.“ Offen, freundlich gibt Klaudia Antworten. Meist kommt sie um Mitternacht zum Service-Desk, Nacht- oder Frühschichten sind weniger beliebt. Dann steht neben Nutzer-Fragen die Kontrolle der Systeme auf dem Plan und Klaudia schaut in der Leitwarte beim Rechnerwürfel, ob alle Geräte und Computer zuverlässig laufen: „Am Service-Desk kann ich was bewirken. Ich mag es, mit Usern und Profs zu sprechen, aber vor allem Probleme zu lösen.“ Dass ihr die Expert:innen des LRZ jederzeit beistehen, wenn sie einmal nicht weiterweiß, beruhigt und stärkt sie zugleich.

SCHNELLE HILFE AUS DER LRZ-CLOUD

Das Deutsche Forschungsnetz (DFN) konnte im Corona-Jahr ebenfalls mit dem LRZ rechnen: Nach der Schließung von Universitäten und Forschungseinrichtungen im März schwoll die Nutzung der Kommunikationsdienste des DFN, vor allem DFNConf, so sehr an, dass die Systeme überlastet wurden und es zu merklichen Einschränkungen für die Nutzer:innen kam. Das LRZ half mit 10 virtuellen Maschinen aus der Compute Cloud aus und sorgte so für zusätzliche Kapazitäten. In wenigen Tagen liefen Server und CPU-Kerne produktiv. Das DFN konnte dadurch 1300 Videositzungen und 5300 Telefonkonferenzen pro Tag mehr über seine Systeme zulassen.

IT-SYSTEME VOR DER AUSLASTUNG

Zahlen verdeutlichen die Belastung am LRZ: Registrierten Administratoren noch Anfang März etwa 10 Videokonferenzen mit höchstens 25 Teilnehmenden pro Tag, laufen ab Mitte März 150 Veranstaltungen mit bis zu 450 Anwesenden. Die virtuellen Maschinen des LRZ werden sofort auf 16 Gigabyte Arbeitsspeicher aufgerüstet, eine weitere Videobridge wird integriert. Auch die Virtual Private Networks (VPN) sind stark gefordert. Die Zahl der Sitzungen steigt ab Mitte März von sonst 1500 auf 6000 gleichzeitige und mehr pro Tag. Bei LRZ Sync+Share wächst die Auslastung um bis zu 25 Prozent. Und in der LRZ-Cloud sind von den 5400 CPU-Kernen und 40 Terabyte Random Access Memory weit über 90% fast vollständig ausgelastet. Sie wird um 2,25 Petabyte Kapazität erhöht. „Vor dem Semesteranfang am 21. April hatten wir sehr großen Respekt“, erinnert sich Reiser. „Wir konnten schlecht vorhersagen, wie sich die IT-Systeme unter der Vollaast des Online-Semesters verhalten.“ Auftretende Störungen mit Lern- und Lehrsoftware konnten durch schnelle Konfigurationsanpassungen und deutliche Aufstockung der Ressourcen aufgefangen werden, wohingegen sich die Einbindung von Content Delivery Networks (CDN) nicht bewährt hat.

Für Stress sorgte Corona außerdem in der Lizenzabteilung des LRZ: Für die Online-Lehre wurden neue Verträge mit Konferenztool-Anbietern diskutiert, bestehende Konzessionen ausgeweitet. „Corona zeigte, dass wir eine Online-Lehre mit dem Mengengerüst der Hochschulen im MWN nicht stemmen können“, berichtet Dr. Norbert Hartmannsgruber, Leiter der Abteilung Benutzernahe Dienste & Systeme (BDS). „Die Universitäten setzen auf eigene Lösungen, um Dozent:innen eine größere Auswahl an Werkzeugen für Konferenzen und die digitale Lehre zu geben. Das LRZ rüstet das vorhandene Backend zur Unterstützung auf.“

ERFAHRUNGEN UND LEHREN FÜR DIE ZUKUNFT

Das Fazit aus dem Pandemie-Jahr ist dennoch positiv: Remote Arbeit bereichert im LRZ wie in Bayerns Hochschulen und Forschungseinrichtungen den Alltag. Die LRZ-Systeme sind dafür gerüstet. „Die Mitarbeitenden sind im Homeoffice voll arbeitsfähig, in der Verwaltung kann die Digitalisierung noch vorangetrieben werden“, sagt Reiser. Die zertifizierten Prozesse für das Management von IT-Services sowie für die Informationssicherheit haben sich bewährt und wurden präzisiert. Die Zusammenarbeit mit den Münchner Universitäten intensivierte sich durch regelmäßige Treffen zur Online-Lehre. „Die LRZ-Technik ist umgebaut und skalierbar“, resümiert Reiser und sein Kollege Hartmannsgruber ergänzt: „Corona hat viele neue Services angestoßen, an denen wir schon arbeiten.“

**MAX DIEHN****DER MANN HILFT UNS BEIM KOSTENSENKEN**

Max Diehn leitet das Lizenz-Team, das die Nutzungsrechte von Software verhandelt. So können Mitarbeitende und LRZ-Nutzer digital organisieren, kalkulieren, forschen. „Lehrstühle und Institute brauchen Hilfe und Beratung bei der Beschaffung von Software, für Kosteneffekte bündeln wir Bedarfe.“ Wird ein Programm gleich von Zehntausenden eingesetzt, wird die Nutzung oft billiger. Vor Kurzem verhandelte das Team noch Lizenzverträge für das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN), heute geht es gleich um bayern- oder bundesweite Lösungen, Massenbeschaffung, Flatrates – Cloudcomputing lässt grüßen. „Früher waren die Verträge lesbarer, inzwischen haben wir es mit verzweigten Dokumenten von gefühlt 100 Seiten und mehr zu tun.“ Das verlangt wirtschaftliches und juristisches Know-how. Durch Corona benötigten Hochschulen und Lehrstühle schnell zusätzliche Software. „Hersteller locken gern mit kurzfristig kostenlosen Lizenzen, langfristig fehlen den Forschungseinrichtungen aber Budgets für Software.“ Auch dadurch wächst der Bedarf an Beratung und ausgefeilten Nutzungsverträgen.



SUPERCOMPUTER – DIE AUSGEZEICHNETE TAKTIK GEGEN CORONA

**Modellieren, Simulieren oder mit Methoden von Künstlicher Intelligenz
Wirkstoffe sortieren: Supercomputing unterstützt die Lebenswissenschaften
und kann die Entwicklung von Medikamenten enorm beschleunigen.
Wie CoolMUC und SuperMUC-NG im Kampf gegen Corona unterstützen.**

Im November 2019 erschienen die ersten Meldungen über ein äußerst ansteckendes Virus aus China. Wenn auch zunächst allseits unterschätzt, war SARS-CoV-2 schnell als Erreger der Lungenkrankheit Covid-19 mit schweren bis tödlichen Verläufen identifiziert. Weltweit begann die Suche nach Medikamenten und Impfstoffen: „Computergesteuerte Ansätze können einzigartige und entscheidende Einblicke in die Übertragung von Krankheiten und Wirkmechanismen von Viren und Molekülen liefern“, sagt Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, Leiter des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). Als Teil des Gauss Centre für Supercomputing (GCS) und der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) stellte das LRZ seine High-Performance-Computing- oder HPC-Ressourcen sofort für den Kampf gegen Corona zur Verfügung. Bis Juni 2020 vergab es rund 60 Millionen Stunden Rechenzeit an vier Projekte aus den Bereichen Virologie, Biophysik, Biochemie und Pharmakologie: „Durch unsere Erfahrungen aus der kontinuierlichen Zusammenarbeit mit Forschenden sowie durch gewachsene Partnerschaften zu Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen konnten wir schnell reagieren und die Projekte auf unseren Maschinen schnell in Gang bringen“, so Kranzlmüller weiter.

Aus heutiger Sicht war die Arbeit der Forscher:innen, des Linux-Clusters CoolMUC sowie von SuperMUC-NG äußerst erfolgreich: Zwei von ihnen – die Untersuchung des Spike-Proteins vom Team um Prof. Dr. Gerhard Hummer sowie das Scoring-System zur Ermittlung von Wirksubstanzen des Daten-Analytikers Daniel Soler Viladrich – wurden für den renommierten Gordon Bell-Award, quasi der Oskar im HPC, der jedes Jahr während der Fachkonferenz SC verliehen wird, nominiert. Dem Team um Prof. Dr. Andreas Pichlmair von der Technischen Universität München (TUM) gelang es wiederum die Angriffsziele von SARS-Cov-2-Viren auf menschlichen Zellen zu kartieren – ein Erfolg, über den das Fachmagazin „Nature“ berichtete. Und nicht zuletzt erwies sich auch die langjährige Partnerschaft des LRZ mit dem Institut für Numerische Mechanik der TUM als nützlich im Kampf gegen Corona: Dort wurde mit Hilfe von Gleichungen und Algorithmen der Atemfluss in den menschlichen Lungen simuliert und aus den Rechenergebnissen Leben rettende Erkenntnisse für den Einsatz von Beatmungsgeräten gezogen.

CORONA-TAKTIK ENTSCHLÜSSELT

Aus Massenspektrometrie-Daten von 1200 Labor-Experimenten modellierte das Team um den Immunpathologen Prof. Andreas Pichlmair von der TUM die Wechselwirkungen von SARS-Viren mit Lungenzellen. Ergebnis ist eine offen zugängliche Datenbank über die Angriffspunkte, die das Virus auf mehreren Ebenen der Zelle nutzt. Diese bildet nun eine Basis für die Entwicklung von Impfstoffen und Medikamenten.



CORONAS WAFFE ENTSCHÄRFT

Das Spike-Protein auf der Oberfläche des Virus durchbricht Abwehrmechanismen von Zellen und verschafft dem Virus Zugang. Das Team um Prof. Gerhard Hummer vom Max-Planck-Institut für Biophysik hat dieses Protein, seinen Mantel aus zuckerähnlichen Molekülen sowie seine Verbindungen zum eigentlichen Virus erforscht. Mit diesem Wissen können Wirkstoffe entwickelt werden, die den Zugang zur Zelle erschweren oder das Protein vom Virus trennen und Corona-Symptome lindern.



GROSSZÜGIGE TECHNIK-SPENDE

Mit Technik gegen das Covid-19-Virus: Der US-amerikanische Chip-Entwickler AMD unterstützt die Suche nach Impfstoffen gegen Corona mit High-End-Computersystemen und Zugang zu Penguin-on-Demand-Clustern (POD) in der Cloud. Neben 19 Forschungseinrichtungen in aller Welt wurde auch das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) bei der Technik-Spende bedacht. Bis Ende 2020 wurden sechs GPU Compute Server mit je einem AMD EPYC-Prozessor (CPU) sowie acht AMD MI50 Grafikprozessoren (GPU) mit 32 Gigabyte Direktzugriff-Speicher (RAM) plus lokalem NVMe-Storage installiert. Sie unterstützen bevorzugt die COVID-19-Projekte.



ATEMHILFEN VERBESSERN

Atemnot ist eines der schlimmsten Symptome von Corona, die Beatmung kritisch: Lungen kollabieren, wenn Sauerstoff mit zu viel Druck in ihre Kapillaren gedrückt wird. Am Institut für Numerische Mechanik entwickelte das Team um Prof. Wolfgang Wall die Formeln und Gleichungen, mit denen der Atemfluss durch die Lungen berechnet und ein digitales Modell der Lunge erstellt wird. Damit wurden medizinisches Fachpersonal beraten und der Einsatz von Beatmungsgeräten verbessert.



DIE WAFFEN GEGEN CORONA SCHÄRFEN

Wirkstoffe gegen Krankheitserreger funktionieren umso besser, je stärker sie an Viren oder Bakterien binden. Im EU-Projekt CompBioMed suchte das Team um Prof. Dr. Peter Coveney aus Millionen von potenziellen Wirkstoffen die Arzneimittel mit der höchsten Bindungsstärke an das SARS-CoV-2 Protein heraus. Supercomputer erleichtern und verkürzen diese Arbeit: <https://www.compbiomed.eu/coronavirus-computational-drug-screening/>





DR.
WERNER BAUR

**WIR ERREICHTEN
EINE TRANSFERRATE
VON 7 TERABIT
PRO SEKUNDE** ”

1995 zentralisierte das Leibniz-Rechenzentrum die Sicherung und Archivierung der Daten in einem eigenen System. Obwohl sich die Hardware stark änderte und Kapazitäten enorm wuchsen, hat sich am Prinzip von Backups und Speicherung wenig geändert.

Nachts beginnt im Daten- und Archivraum des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) mit einem Sirren die Arbeit der Roboter: Mit ihren Greifarmen ziehen sie Tapes aus den Fächern der Libraries, speichern darauf die 40 Millionen Sicherungskopien, die rund 5.000 Computeranlagen im Münchner Wissenschaftsnetz tagtäglich schicken, und stecken sie wieder zurück. Vor 25 Jahren zentralisierte das LRZ die Datenspeicherung – Werner Baur, der das Archiv- und Backupsystem (ABS) aus der Taufe hob und wachsen sah, beschreibt Veränderungen und Herausforderungen.

1995 hat das LRZ das Archiv- und Backup-System aufgebaut: Seine Bedeutung wuchs und mit ihm die technischen Dimensionen. Warum?

Werner Baur: Weil die Bedeutung und die Menge der Daten wuchsen. Daten werden in unserer Gesellschaft immer wichtiger, sie dürfen nicht verloren gehen. Das war vor 25 Jahren so und gilt heute erst recht. Entsprechend vielstufig sind heute die Sicherungsmaßnahmen, an deren Ende, sozusagen als „last line of defense“ unser Archiv- und Backupsystem steht. In der Wissenschaft kommt hinzu – Messdaten sollen langfristig verfügbar bleiben. Forschungsergebnisse sollten jederzeit überprüfbar sein, sie können weiter ausgewertet und mit neuen Daten kombiniert werden.

Wie ist das ABS aufgebaut?

Baur: Wir starteten 1995 mit dem Aufbau von zwei Servern, einer kleinen Bandbibliothek und 4 Bandlaufwerken. Auf zwei Quadratmetern Stellfläche bekamen wir um die 10 Terabyte Speicherplatz unter. Heute füllen 20 Server, 5 Bandroboter mit über 70.000 Slots, 126 Bandlaufwerke und mehr als 2.300 Festplatten ein Stockwerk im Rechnerwürfel. Etwas mehr Kapazität als damals haben wir mit 125.000 Terabyte inzwischen auch. Zwar hat sich die Hardware stark verändert, der Dienst läuft trotzdem noch mit dem gleichen Konzept

und der gleichen Software von IBM. Nur der Name wechselte öfter mal. Anfangs hieß die Software Adstar Distributed Storage Manager, ADSM, dann Tivoli Storage Manager, TSM, und jetzt Spectrum Protect, ISP.

Wie funktioniert die Sicherung?

Baur: LRZ-Nutzer:innen bekommen eine Kennung, laden sich den ISP-Client herunter, danach durchsucht dieser ihre Systeme nach neuen oder geänderten Dateien und überträgt sie in der Regel nachts als Backup ans LRZ. Anders beim Archivieren – wie lange Forschungs-, Verwaltungs- und Arbeitsdaten gespeichert werden, konfigurieren LRZ-Nutzer:innen selbst. Die Standard-Archivierung umfasst 10 Jahre.

125 Petabyte Speicherkapazität – wie viel davon sind belegt?

Baur: Rund 110 Petabyte sind gespeichert verteilt auf 50.000 Bänder. Täglich kommen momentan rund 150 Terabyte dazu. Das reicht also nicht mehr lange. Wir komprimieren viel, schichten um und das System wird 2022 erheblich erweitert.

Was ist die größere Herausforderung – Technik- oder Anwenderfehler?

Baur: Das kommt auf die Perspektive an. Ein verbreiteter Fehler ist, die Sicherung aufzusetzen und regelmäßig Daten zu sichern, aber nie Updates einzufahren und einen Restore-Test zu machen. Tritt nach Jahren der Ernstfall ein, gehen Platte oder Server kaputt und müssen Daten aus dem ABS zurückgeholt werden, geht das oft schief, weil die alte TSM-Version nicht mehr funktioniert. Das wird zur technischen Herausforderung, einige Male konnten wir Daten noch retten. Für uns als Betreiber ist wohl die größte Aufgabe, mit den Versionszyklen mitzuhalten und die Daten mitzunehmen.

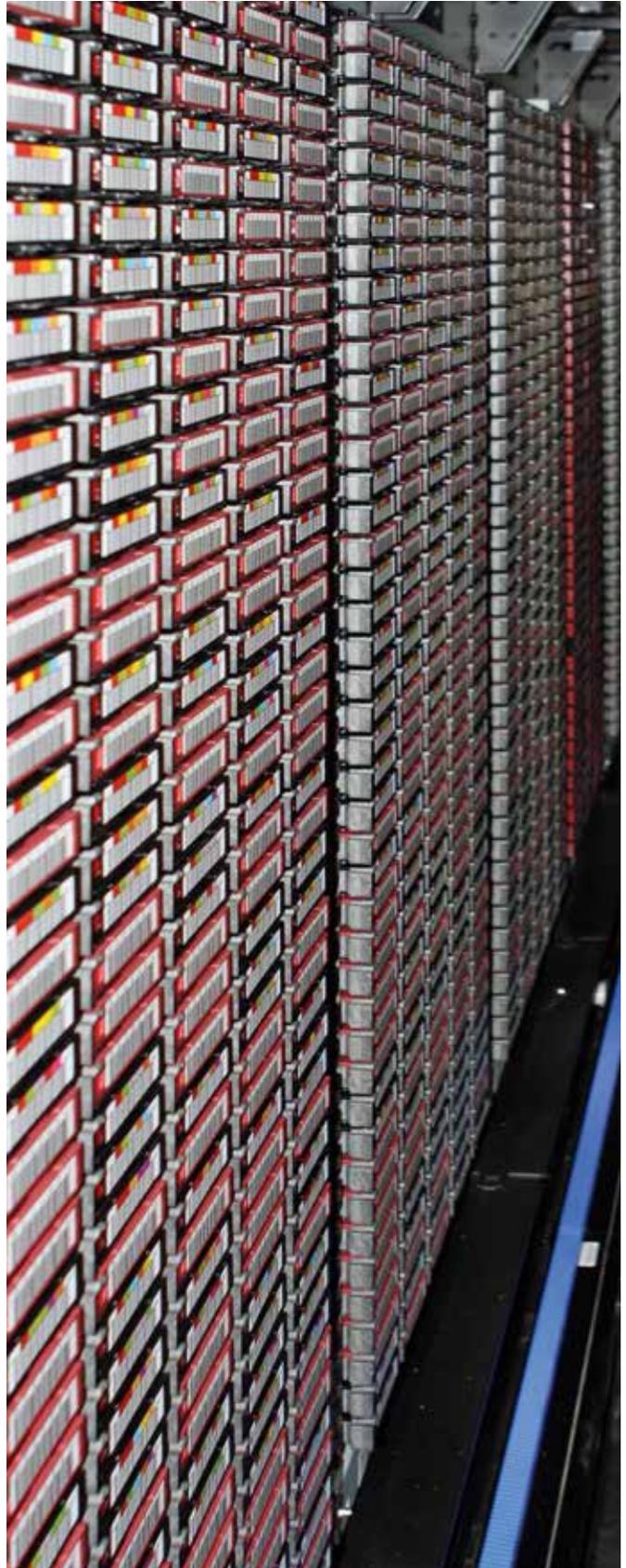
Baur: Vor allem Zeit. Für die erste Migration der Daten haben wir 1995/96 etwa 6 Monate gebraucht, damals zogen wir etwa ein Terabyte Daten ins ABS, ähnlich lange werden wir jetzt brauchen, um 40.000 Terabyte aus dem Archiv von SuperMUC-NG ins neue Data Science Archive, kurz DSA, zu transferieren. Schneller ging es 2006 beim Umzug des LRZ nach Garching. Glaubt man im Zeitalter von Hochgeschwindigkeitsnetzen nicht – aber die schnellste Methode war, alle Tapes mit dem LKW zu transportieren, statt die 1,5 Petabyte Daten übers Netz zu übertragen. Mit dem LKW erreichten wir eine Transferrate von 7 Terabit pro Sekunde – das kriegen wir übrigens mit aktuellen Netzen noch nicht hin.

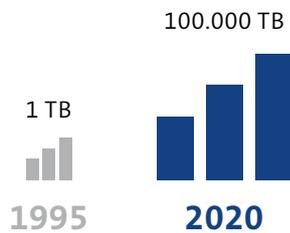
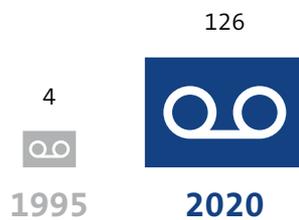
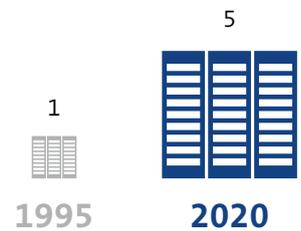
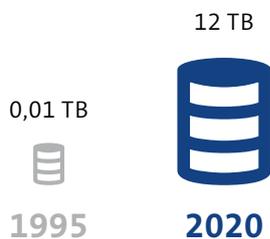
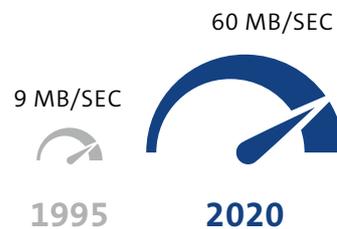
Warum werden Daten umkopiert?

Baur: Weil das Bandmaterial altert und Daten unlesbar werden können. Sicherheitshalber und weil die neuen Medien schneller sind und eine viel höhere Speicherkapazität haben, ersetzen wir sie alle 5 bis 7 Jahre. Mir tut das in der Seele weh, denn die alten Bänder sind aus Datenschutzgründen nicht weiterzuverwenden. Zwischen den Migrationszyklen kontrolliert das System die Daten auf den Bändern nach Fehlern. Außerdem lagern Kopien unserer Archivdatensätze in einem anderen Rechenzentrum. So sind wir für den Katastrophenfall gerüstet.

Tapes und Festplatten wurden oft totgesagt – wie sieht die Datensicherung in Zukunft aus?

Baur: Die Unterschiede bei der Übertragungsgeschwindigkeit und bei den Kapazitäten werden zwar immer kleiner. Für sehr große Datenmengen aber wird das Tape noch lange das wirtschaftlichste Speichermedium bleiben. Konzerne wie Amazon, Google, Microsoft bauen darauf – eine Garantie, dass die Technologie weiterentwickelt wird. Fest steht – Datensicherung bleibt unverzichtbar. Selbst wenn die Primärspeichermedien eine absolute, unbefristete Haltbarkeit garantierten, braucht man weiterhin Backups als Schutz gegen Cyberkriminalität oder menschliches Fehlverhalten. ■



GESPEICHERTE DATENMENGE**ANZAHL DER BANDLAUFWERKE****ANZAHL DER BANDBIBLIOTHEKEN****KAPAZITÄT EINES TAPES****SCHREIBGESCHWINDIGKEIT EINES BANDLAUFWERKS****CHRISTIAN GREUNKE**

MIT DEM MANN TAUSCHEN WIR DATEN UND DATEIEN

Christian Greunke ist promovierter Chemiker, war erst Nutzer des LRZ und kümmert sich heute im Speicher- oder NAS-Team um den Datenaustausch, vor allem um Speicherdienste in der Cloud sowie LRZ Sync+Share. „Fast jeder, der an einer Münchner Universität Daten speichern oder austauschen will, setzt dabei auf diese beiden Dienste. Die Datenmengen, die unsere Nutzer verarbeiten, reicht von wenigen Gigabytes bis zu mehreren Terabyte.“ Knapp 120.000 Accounts organisiert das NAS-Team, durch Corona stieg allein bei LRZ Sync+Share die Nutzerlast um 25%: „Die Leute und Institute tauschen heute viel mehr Daten und Dateien aus.“ Ein großer Teil der Nutzer:innen erhöhte dafür den Speicherplatz. Zu Jahresbeginn hatten Greunke und seine Kolleg:innen LRZ Sync+Share noch aktualisiert, mit Corona hat die neue Version ihre Feuerprobe bestanden: „Sie ist viel leistungsfähiger und erreicht eine gute Performance.“ An der Usability wird weitergearbeitet, jede:r soll den Dienst nutzen können, ohne lang im Handbuch zu blättern: „Das kriegen wir auch noch hin.“

COOLMUC & CO

Wenn SuperMUC-NG die Champions League des Höchstleistungsrechnens ist, dann ist der Linux-Cluster am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) die Bundesliga des Hochleistungsrechnens.

ZUGANG ZU COOLMUC & CO – SO EINFACH GEHT'S:

Arbeitsgruppen an der Ludwig-Maximilians-Universität, der Technischen Universität München, der Hochschule München sowie allen staatlichen Hochschulen in Bayern können den Linux-Cluster am LRZ kostenlos nutzen. Dazu müssen Sie einen „Master User“ ernennen, der Projekte anmeldet und dem die Kennungen der einzelnen Projektbeteiligten zugeordnet werden.

Der Linux-Cluster am LRZ versorgt die staatlichen Universitäten und Hochschulen in München und Bayern mit leistungsfähigen Computer-Ressourcen, deren Nutzung für diese Einrichtungen kostenlos ist.

Er besteht aus vielen verschiedenen Komponenten, die alle Rechnen mit 64-bit-Programmen erlauben. Am Linux-Cluster des LRZ können MPI- oder OpenMP- wie auch Hybrid-parallele Programme eingesetzt werden. CoolMUC2 ist mit jeweils zwei 14-Kern-Haswell-Prozessoren ausgestattet, CoolMUC3 mit Intel 64-Kern-Xeon-Phi-Prozessoren, IvyMUC mit Intel 16-Kern-Ivy-Bridge-Prozessoren und Teramem mit 96 Intel Broadwell-Rechenkernen und 6 TeraByte Hauptspeicher. Alle Knoten innerhalb eines Systems können über sehr schnelle Netze miteinander kommunizieren.

Der Linux-Cluster des LRZ hat 2020 insgesamt 449.153.874 Core-Hours geliefert, von denen die Technische Universität München 67,1 %, die Ludwig-Maximilian-Universität 8,5 %, die Hochschule München 4,6 % und die weiteren Universitäten und Hochschulen in Bayern 16,6 % in Anspruch genommen haben. Hauptnutzer:innen sind Forschende aus der Physik, aus den Ingenieurwissenschaften, der Chemie und den übrigen Naturwissenschaften. Für ihre Forschung oder spezielle Ansprüche schaffen einige Lehrstühle und Institutionen eigene Rechenkapazitäten an: Sie finanzieren aus eigenen Mitteln Systeme, die am LRZ platziert und umfassend betreut werden, ihnen aber exklusiv zur Verfügung stehen (Housing).

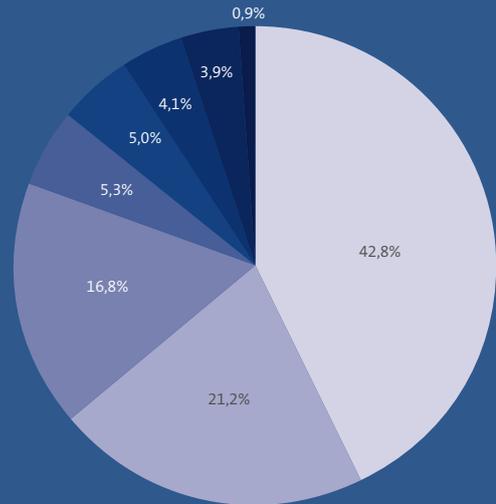
LINUX-CLUSTER NUTZUNG



Bayerische Akademie der Wissenschaften | Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
 Hochschule München | Leibniz-Rechenzentrum | Ludwig-Maximilians-Universität
 Technische Hochschule Nürnberg Georg-Simon-Ohm | Technische Universität München
 Universität Augsburg | Universität Bamberg | Universität Bayreuth | Universität Regensburg
 Universität Würzburg

LINUX-CLUSTER HAUPTNUTZER:INNEN

Anteil Core-h in %



- Chemie/Pharmazie
- Geowissenschaften
- Ingenieurwissenschaften
- Biologie
- Physik
- Medizin
- Mathematik/Informatik
- Wirtschaft



NIELS FALLENBECK
 MIT DEM MANN ARBEITEN WIR VIRTUELL

Niels Fallenbeck und seine drei Kollegen betreuen die Compute Cloud des LRZ, die eine Speicherkapazität für virtuelle Maschinen von rund 2 Pebibyte bietet. Die Cloud dient dem LRZ bei Testumgebungen und Services und wird von bayerischen Hochschulen und Forscher:innen genutzt – etwa für Berechnungen und Tests. Die Cloud ist automatisiert: Monitoring-Systeme kontrollieren die Hardware, Speicher für User:innen gibt das Cloud-Team online frei. Vom Zugang bis zur Einrichtung virtueller Server vergehen oft nur wenige Minuten. Daher kann das Team in Corona-Zeiten leicht zuhause arbeiten: „Absprachen untereinander sind schwerer geworden und ein paar Arbeiten vor Ort bleiben liegen.“ Neue Cloudserver und Switches müssten auf-, Festplatten umgebaut werden. „Nicht kriegsentscheidend jetzt“, urteilt Niels Fallenbeck. Wichtiger ist für ihn und die Kollegen derzeit, wie Familie, Kinder, Cloud unter einen Hut zu bringen sind.

VON GARCHING IN DIE GANZE WELT

Vom Starnberger See bis nach Weihenstephan, vom Schneefernerhaus auf der Zugspitze bis zum Neuen Museum in Nürnberg: Das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) verbindet reizvolle, pittoreske, atemberaubende, berühmte Plätze Bayerns miteinander, vor allem aber Wohnheime für Studierende, Universitäten, verschiedene Forschungseinrichtungen, die Bayerische Staatsbibliothek und zahlreiche Museen in München, alles in Allem 635 Standorte. Im WLAN dieser Datenautobahn für die Wissenschaft melden sich bis zu 400.000 Geräte an, in Hochzeiten greifen knapp 50.000 Tablets, Smartphones oder Notebooks gleichzeitig auf das Netz zu. Im Corona-Jahr allerdings deutlich öfter gefragt: sichere Verbindungen und Virtual Private Networks (VPN) zu den Datenspeichern.

Über das MWN werden im Monat knapp 5 Petabyte Daten ausgetauscht und rund 2,5 Petabyte in alle Welt hinaus verschickt. Für solche Höchstleistungen wurden 2.206 Switches installiert, 4.920 Access Points aufgebaut und rund 300 Kilometer Glasfaserkabel verlegt. Am Übergang ins Internet werden Daten mit 262 Gigabit/s von einem Punkt zum nächsten transferiert. In denen die Daten mit 262 Gigabits pro Sekunde von einem Punkt zum nächsten sausen. Heute reicht das Münchner Wissenschaftsnetz über die Grenzen Bayerns hinaus bis nach Heilbronn, wo die Technische Universität München einen Außencampus unterhält. Mit einer LRZ-Kennung kann über das MWN das internationale EDUROAM-Netz geentert werden, und wenn es die Forschung verlangt, hilft das leistungsstarke Netz sogar, größte Datenmengen von Garching über große Teiche zu verschicken.

MWN – ZAHLEN UND FAKTEN

Weitere Daten zum Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) finden Sie in Kapitel 8



DATENMENGE PRO MONAT

4,9 PB Eingehend
2,5 PB Ausgehend



WLAN

300.000 verschiedene Geräte
49.700 Geräte in 5 Minuten



NETZKOMPONENTEN IM MANAGEMENT



2.206 Switches
4.920 Access Points

STANDORTE



635 Standorte
620 Unterbezirke

BANDBREITE



262,5 Gbit/s X-Win



10 Gbit/s M-net



VPN

191 TB Datenvolumen pro Monat
6.100 TB gleichzeitige Verbindungen



DNS

400.000 eingetragene IPv4 Adressen
3.325 verwaltete Domains

UNTERSTÜTZUNG BEI DER DIGITALISIERUNG

Das Leibniz-Rechenzentrum unterstützt die beiden Münchener Universitäten bei der Digitalisierung und übernimmt dazu noch den Betrieb der Verwaltungsnetze.

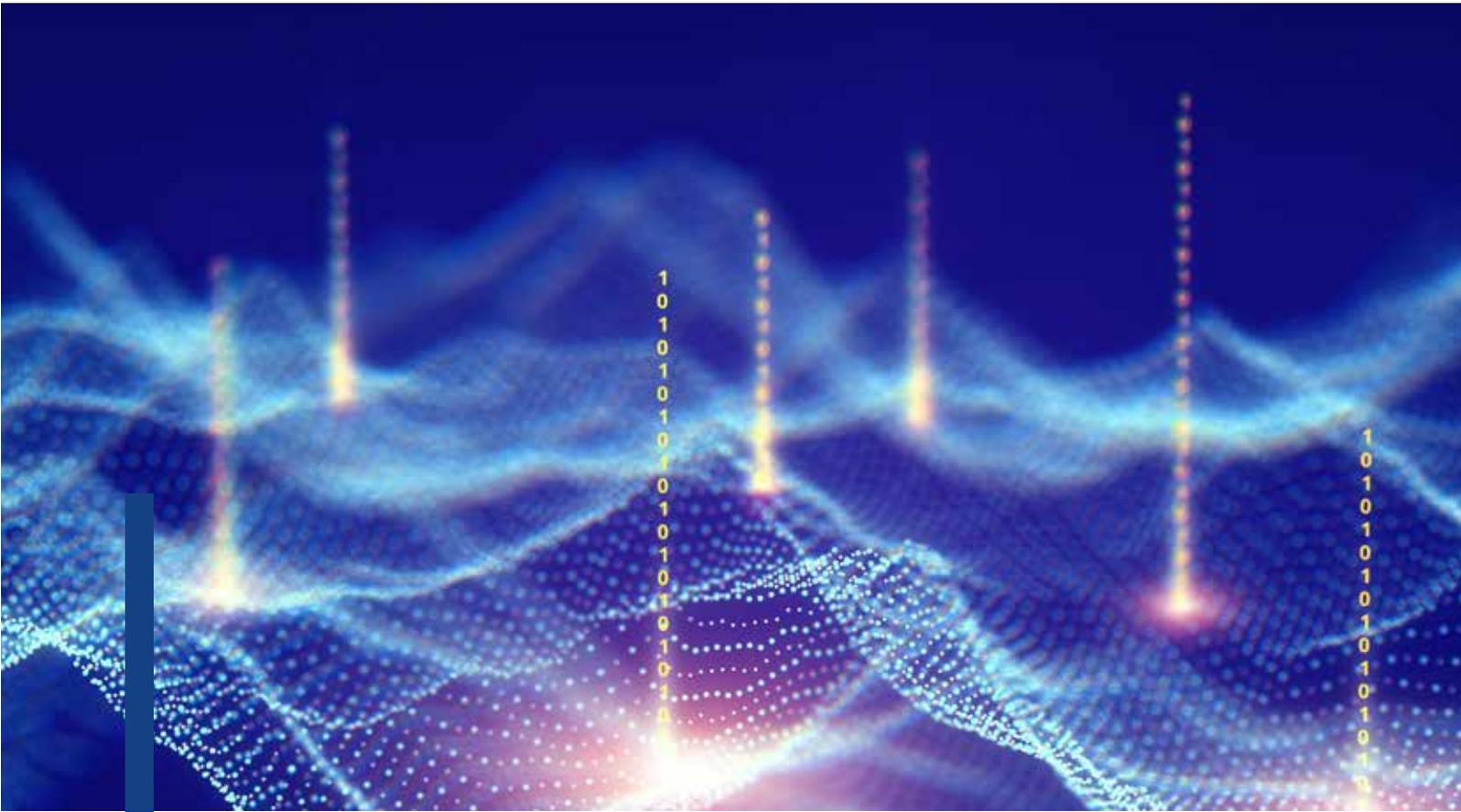
Online-Vorlesungen und Seminare per Videokonferenz für mehr als 400.000 Studierende in Bayern: In Corona-Zeiten sind die Universitäten und Hochschulen in München und Bayern voll damit beschäftigt, Forschung, Lehre und auch ihre Verwaltungsprozesse zu digitalisieren. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) stellt dafür notwendige technische Ressourcen zur Verfügung, unter anderem das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) oder Cloud-Services: „Wir sind für Fernlehre, Remote-Studium und mobiles Arbeiten gerüstet und liefern Hochschulen sowie Wissenschaftsinstituten sichere Übertragungsraten und praktische Dienste für Forschung und Lehre“, erklärt Prof. Helmut Reiser, stellvertretender Leiter des LRZ und Abteilungsleiter Kommunikationsnetze. „Mit dem MWN bieten wir schon seit Jahren zuverlässig die zentrale Infrastruktur für vernetzte Kommunikation, jetzt auch für die Verwaltung der Münchener Universitäten.“

Die Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) und die Technische Universität München (TUM) haben Bayerns größtes wissenschaftliches Rechenzentrum gerade mit dem Betrieb ihrer Verwaltungsnetze beauftragt. „Durch die Unterstützung des LRZ“, sagt Dr. Oliver Diekamp, Leiter des IT-Dezerats der LMU, „können wir unsere internen Ressourcen stärker auf unsere Kernaufgaben und die weitere Digitalisierung der Hochschulprozesse fokussieren.“ Auch sein Kollege Haggemiller, IT-Leiter des Verwaltungsbereichs der TUM, vertraut auf die gewachsene Erfahrung: „Der Betrieb des MWN war und ist eine Kernkompetenz des LRZ“, sagt er. „Daher ist es ein logischer Schritt, dass wir nun den Betrieb und die Verantwortung für unsere Verwaltungsnetze dorthin delegieren.“



IT-SERVICES FÜRS MUSEUM

Neben Münchens Universitäten verlässt sich das IT-Servicezentrum der Bayerischen Staatsgemäldesammlung auf das LRZ. Dieses versorgt mit Hilfe von Technik und Know-how aus Garching mehr als 30 bayerische Museen mit IT-Services. Das Deutsche Museum indes setzt bei der Übertragung digitaler Veranstaltungen und Ausstellungen auf das LRZ und seinen Partner, das Deutsche Forschungsnetz (DFN).



ZUVERLÄSSIG SICHERE DIENSTE, EFFIZIENTE PROZESSE

Das MWN reicht von der Zugspitze zum Wendelstein und über München bis nach Triesdorf im Norden Bayerns. Es verbindet zuverlässig Hochschulen und Forschungsinstitute im Großraum München und bietet Studierenden und Wissenschaftler:innen unter anderem mobilen Zugang über WLAN und Zugriff aufs Internet sowie die Möglichkeit, über gesicherte Virtual Private Networks (VPN) das Home Office nahtlos zu integrieren. In Spitzenzeiten greifen wegen der Pandemie 2020 bis zu 40.000 Menschen gleichzeitig auf das MWN zu, rund 300.000 mobile Geräte loggen sich dort regelmäßig ein.

Diese Infrastruktur wollen LMU und TUM nun auch für ihre Verwaltung nutzen. „Das LRZ hat das kompetente Personal, das Know-How und die Technik für den zuverlässigen Betrieb komplexer Netze. Wir freuen uns darüber, dass wir von diesen Kompetenzen profitieren können“, so Diekamp von der LMU.

Technische Ausstattung und Prozesse, auf denen seine Services basieren, lässt das LRZ als IT-Dienstleister für Wissenschaft und Forschung systematisch dokumentieren. Dafür hat sich das Rechenzentrum in Garching 2019 nach den ISO-Normen 20000 und 27001 für Servicemanagement und IT-Sicherheit zertifizieren lassen: Ein vertrauenswürdiges Signal, das neue Aufträge mit sich bringt. Die Zertifizierung überzeugte auch die Universitäten, denn an die Verwaltungsnetze werden deutlich höhere Sicherheitsanforderungen gestellt. Darüber laufen auch sensible Informationen zu Mitarbeitenden oder Finanzen: „Die Anforderungen zur IT-Sicherheit wachsen“, stellt TUM-Mann Hagenmiller fest. „Ein wichtiger Faktor, Ressourcen und Kompetenz jetzt beim LRZ zu bündeln, sind die Zertifizierungen des Rechenzentrums, die stringente Prozesse garantieren.“

GUT GERECHNET SUPERMUC-NG!

Corona hat den SuperMUC-NG mit seinen 311.040 Rechenknoten gefordert, aber nicht nur: 2019 rechnete der Supercomputer drei Milliarden Stunden. Er absolvierte mehr als 725.000 Aufträge für 308 Forschungsprojekte. Neben den datenintensiven Wissenschaften Astrophysik und Materialwissenschaften arbeitete SuperMUC-NG für Medizin, Umwelt und Klima; außer Simulationen produziert der Höchstleistungsrechner immer mehr bahnbrechende dreidimensionale Visualisierungen, die helfen, die Welt und ihre Phänomene besser zu verstehen.

#15

TOP 500
(NOV 2020)

SUPERMUC-
NG



26,9 PetaFlop/s Peak Performance
= 26.900.000.000.000.000
Gleitkommaoperationen pro Sekunde

AUGUST 2019 – START REGULÄRER NUTZEBETRIEB BIS ENDE 2020



3 Milliarden
Rechenstunden



725.418
Jobs



308
Projekte



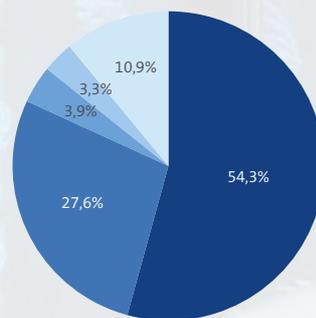
784
Wissenschaftler:innen

KENNZAHLEN SYSTEM



Lenovo Intel (2019)
311.040 Rechenkerne
Intel Xeon Skylake
19,5 PetaFlops Linpack Leistung
719 TeraByte Hauptspeicher
70 PetaByte Disk

WISSENSCHAFTSBEREICHE



- Physik
- Thermodynamik
- Chemie
- Geowissenschaften
- Andere



SuperMUC-NG wird gemeinsam vom Freistaat Bayern und vom Bund über das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) finanziert.



LRZ IN VIRTUELLEN WELTEN

Und dann kam die Pandemie. Das LRZ musste schließen. Unser Team vom V2C lud deshalb kurzerhand in virtuelle Welten ein und gewährte Einblicke in das LRZ via Mozilla Hubs.



XR-TECHNIK FÜR DIE FORSCHUNG

Das Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) am LRZ

Visualisierung, Virtuelle Realität und Erweiterte Realität: XR-Technologien bieten verschiedenste Möglichkeiten, wissenschaftliche Datensätze zum Leben zu erwecken.

Unser V2C-Team betreibt dafür XR-Forschung auf internationalem Spitzenniveau. Die Erforschung zukunftsweisender Technologie im Team, die Beratung von externen Wissenschaftler:innen und die Umsetzung von anspruchsvollen Projekten gehen dabei Hand in Hand und stimulieren sich gegenseitig.

AUSSTATTUNG

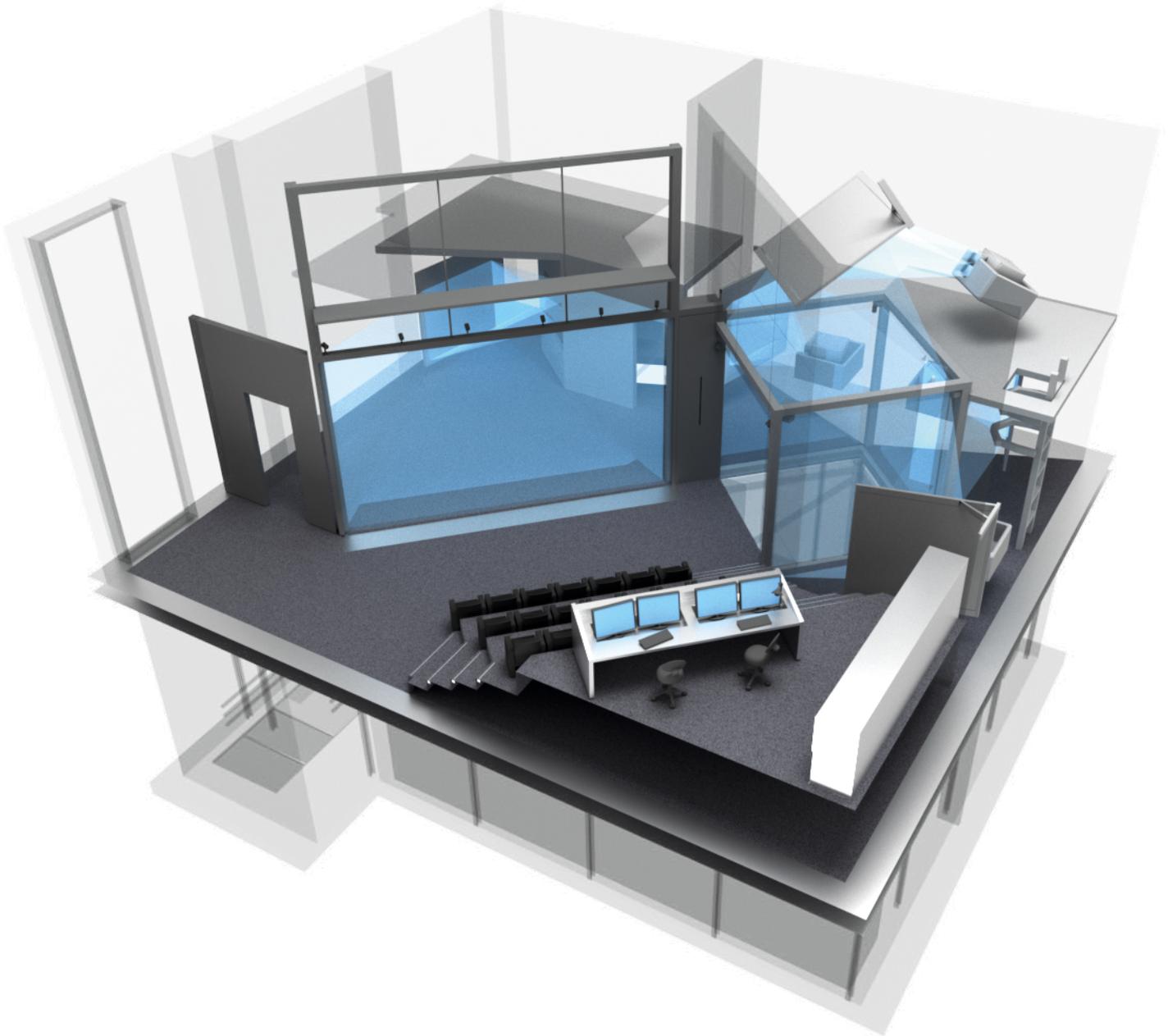
- Powerwall (2012)
- LED-Powerwall (2018)
- 5-seitige Projektionsanlage (CAVE)
- Leistungsfähige Rechnerinfrastruktur
- 2 Labs für Head-Mounted Displays

DIENSTLEISTUNG

- Bereitstellung der Installationen
- Aufbereitung von Datensätzen
- Standard-Softwarelösungen
- Maßgeschneiderte Softwarelösungen

ANWENDUNGSGEBIETE

- Artenschutz
- Geophysik
- Klimaforschung
- Kunstgeschichte
- Zeitzeugen



2011
Bau



2012
Eröffnung



2018
Erneuerung



DAS LRZ IN VIRTUELLEN WELTEN



Willkommen im virtuellen Raum: Im Corona-Jahr präsentierte
das Leibniz-Rechenzentrum Forschungsarbeiten und seine Services
online in den Mozilla Hubs

Im Internet ist die Empfangshalle des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) sechseckig. In der Mitte ein Counter, rundum Gänge, die zu Präsentationen von Forschungsarbeiten des Rechenzentrums führen: Herzlich Willkommen in den Mozilla Hubs. Die Spezialist:innen des Zentrums für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) am LRZ haben auf der Social-Plattform sieben dreidimensionale Räume eingerichtet – ein Museum, ein Versuchslabor sowie eine Mini-Biosphäre, einen Rechnerraum und mehr. Diese öffnen sich während Messen und Kongressen, der Klick auf einen Link genügt, und schon sind Interessent:innen mittendrin, können sich per Smartphone, Tablet und Virtual Reality-Brillen durch das LRZ und seine Arbeiten navigieren. Anwesende sind als Avatare erkennbar und sogar direkt ansprechbar. „Virtuelle Räume eignen sich prima zum Präsentieren für digitale Messen“, sagt Sabrina Schulte, Leiterin der LRZ-Öffentlichkeitsarbeit. „Sie bieten einen Überblick über das LRZ und Raum zum Netzwerken, der Besuch macht Spaß.“

Eigentlich könnten die virtuellen Räume jederzeit besucht werden. Das LRZ nutzt sie als digitale Treffpunkte und innovative Präsentationsmedien – und die Spezialist:innen vom V2C inszenieren immer mehr Forschungsergebnisse als virtuelle Ausstellungen. Mozilla baute seine Hubs 2018 auf, auch Start-ups, Unternehmen oder Spielehersteller bieten solche VR-Welten. „Wir suchten nach einer Plattform, die virtuelle Räume darstellt und für die wir keine zusätzliche Software oder Hardware brauchten, um mitzumachen“, erklärt Elisabeth Mayer, Spezialist:in für Virtuelle Realität (VR) am V2C. Mozilla Hubs sind datenfreundlich ohne Account zugänglich – für die Architekt:innen und ihre Gäste. Mit Spoke liefert Mozilla ein Open-Source-Programm für Design und Einrichtung. „Bei Mozilla Hubs finden sich viele vorgestaltete Räume“, sagt Mayer. „Wir haben die LRZ-Räume selbst aufgebaut.“

ZWISCHEN DETAILREICHTUM UND DATENREDUKTION

Neben Mayer gestalteten die Spezialist:innen Maya Czipor und Kristian Weinand liebevoll und detailreich die Präsentationen: Sie zeigen den Blutfluss im Circle of Willis, aufwändige Schnitzereien von alten Buchdeckeln, ein Moor mit piepsenden Vögeln oder den Höchstleistungscomputer SuperMUC-NG. „Zur Gestaltung gehört das Aufbauen eines Raumes, auch Datenverarbeitung und -konvertierung sowie interne Tests“, berichtet Mayer. Jeder Raum ist anders und wird geprägt von den Projekten und Informationen, die darin präsentiert werden. Dazu werden die Daten komplexer Simulationen oder von 3D-Modellen so aufbereitet, dass sie online mit mobilen Geräten erreichbar sind. Etwa zwei Wochen benötigt das Team,

um eine Präsentation aufzubauen. „Mozilla Hubs ist ein browser-basiertes Programm, wir sind folglich an Browser-Bedingungen gebunden“, erklärt Mayer. „Weniger ist mehr. Je weniger im Raum ist, desto besser läuft es im Browser.“ Die Kunst virtueller Welten ist das Gleichgewicht aus Reduktion und Detailreichtum.



RUNDGANG DURCH DAS VIRTUELLE LRZ

Von der Lobby aus sind alle virtuellen Räume des LRZ erreichbar, sogar ein Biergarten und ein Weihnachtsmarkt.

Viel Spaß beim Gucken, Forschen – gerne auch mit Freunden.





03

NEUE TECHNOLOGIEN

HPC-Technik – Meet the BEAST	44
Mit neuer Technik experimentieren	46
Clever gekühlt	48
Datenbank für guten Service	50
Digitale Forschungsdaten	52

HPC-TECHNIK FÜR DIE ZUKUNFT TESTEN

Das Leibniz-Rechenzentrum erforscht die Technologien für kommende Supercomputer: Meet the BEAST, die Testumgebung aus modernster Informationstechnik.

Die Fragen von Forschenden werden komplexer, die Datenmengen größer. Immer mehr Wissenschaftsbereiche setzen auf High Performance Computing (HPC). Die Technologie als Arbeitsmittel muss dies widerspiegeln. Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) machen sich Expert:innen daher bereits heute Gedanken über die nächste und übernächste Generation von Supercomputern. Für das Programm „Future Computing“ wurde am LRZ das Bavarian Energy-, Architecture- and Software-Testbed oder kurz: BEAST aufgebaut.

BEAST besteht aus unterschiedlichen Teil-Systemen: Zum einen wurden Knoten auf Basis von AMD-Rome-Prozessoren mit MI50-Graphic Processing Units (GPU) des gleichen Herstellers installiert. Neben dieser x86-Architektur gibt es zudem Knoten mit den auf ARM basierenden Prozessoren Marvell ThunderX2, die durch GPU vom Typ Tesla V-100 des Herstellers Nvidia unterstützt werden. Inzwischen ergänzt noch der ebenfalls auf ARM-basierende Fujitsu-Prozessor A64FX das BEAST-Testumfeld. Diese Central Processing Unit (CPU) kommt auch beim derzeit schnellsten Supercomputer der Welt, Fugaku in Japan, zum Einsatz: „Ziel von BEAST ist es, Technologien zu evaluieren, und den besten Mix für unsere künftigen Supercomputer zu finden“, erläutert Dr. Josef Weidendorfer, der am LRZ das Thema Future Computing leitet. „Es geht dabei darum, herauszufinden, welche Technologien für HPC und Künstliche Intelligenz interessant sind und nicht zuletzt zu den Codes passen, die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler nutzen.“

NÜTZLICH UND ENERGIEEFFIZIENT

Die Bandbreite an Technologien fürs HPC wächst zurzeit wie nie: Verfügbare Prozessoren und Beschleuniger

werden für spezialisierte Aufgaben entwickelt und haben daher Vor- und Nachteile. Sogar ARM-Prozessoren – sie stecken unter anderem in Smartphones oder Automotive-Systemen – haben im HPC Fuß gefasst. Welche Technologie und welche IT-Architektur den Ansprüchen von Wissenschaft und Forschung am besten gerecht wird, ist folglich nicht mehr eindeutig zu bestimmen. BEAST soll Antworten liefern – dabei immer im Blick: Die Energieeffizienz der Systeme. Die verschiedenen Technologien werden nicht als heterogenes System betrieben, sondern sollen vielmehr nebeneinander in derselben Umgebung verglichen werden. Die Benchmarks dazu hat das LRZ mit Hilfe der Anwendungen aus über 100 Forschungsprojekten entwickelt, für die SuperMUC-NG arbeitete und die typisch für das LRZ und seine HPC-Ressourcen sind.

Der schrittweise Ausbau von BEAST ist geplant. In der nächsten Phase wurden CPU der aktuellen Intel-Xeon-Reihe namens Cooper Lake in Dienst gestellt, neue Ice Lake-Prozessoren sind bestellt. Interessant sind laut Weidendorfer an diesen Prozessoren neue Merkmale wie 16-Bit-Float (Bfloat16) für Gleitkommaoperationen, die Anwendungen der Künstlichen Intelligenz (KI) beschleunigen. In Zukunft sollen auch exotischere Rechenarchitekturen, etwa Beschleuniger wie Field Programmable Gate Arrays (FPGA) und neuromorphe Systeme evaluiert werden: „Das ist sehr komplex“, sagt Weidendorfer. „FPGA werden auf den Einsatzzweck und die Arbeitslast konfiguriert, damit unterscheiden sie sich sehr von der klassischen Software-Entwicklung. Hier ist eine besondere Expertise gefragt.“ Welche Möglichkeiten die FPGA dem Supercomputing bringen können, wird am LRZ und in Forschungsprojekten erforscht.



LERNEN UND FORSCHEN MIT BEAST

Der Zugang zu BEAST wird ausgewählten LRZ-Partnern aus der Wissenschaft sowie Studierenden während eines Praktikums, beziehungsweise im Rahmen einer Abschlussarbeit gewährt. „Das vermittelt uns wertvolles Feedback und Verständnis dafür, was unsere Nutzer:innen von zukünftigen Systemen erwarten“, so Weidendorfer, „während umgekehrt Forschende gleichzeitig einen besseren Einblick in zukünftige Technologien erhalten.“



DAS BEAST ZÄHMEN



Über die Erfahrungen von Studierenden im BEAST-Praktikum lesen Sie in Kapitel 6: Aus- und Weiterbildung.



DR.
JOSEF WEIDENDORFER

**UP TO DATE BLEIBEN,
WAS NEUE
ARCHITEKTUREN UND
KOMPONENTEN
BETRIFFT**

”

Die Zukunft von Computern erforschen und mitgestalten. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) setzt in seinem Bereich die Tech-Offensive der Bayerischen Staatsregierung um und startete das ambitionierte Programm „Future Computing“. BEAST ist dessen Kern – Dr. Josef Weidendorfer erklärt die Strategie:

Wozu braucht das LRZ BEAST?

Dr. Josef Weidendorfer: In einem Produktivsystem wie dem SuperMUC-NG, das für Forschungsprojekte arbeitet, können wir nicht mit Hardware experimentieren. Das aber ist der Plan mit BEAST und für Future Computing. Wir wollen neueste Computersysteme der nächsten Generation, deren Energiebedarf und Arbeitsweise erforschen.

Wozu ist das Ausprobieren nötig?

Weidendorfer: Mit BEAST bereiten wir uns auf die Herausforderungen der nächsten Generation von Supercomputern vor. Wir untersuchen, welche Architekturen sinnvoll sind für größere Systeme. Das ist auch deshalb wichtig, weil die Computertechnologie vor dem nächsten Entwicklungsschritt in Richtung Exascale steht. Die Verarbeitung wachsender Datenmengen und Verfahren der Künstlichen Intelligenz fordern neues Chip-Design und andere Rechnerarchitekturen, umgekehrt werden sich diese Technologien wahrscheinlich in den Supercomputing-Systemen der näheren Zukunft etablieren und hier Arbeits- oder Speicherleistungen optimieren.

Was ist konkret geplant?

Weidendorfer: BEAST wird Prototypen neuester Technologien enthalten. Wenn wir heute mit modernster Hardware und Prototypen experimentieren, können wir erstens fundierte Anforderungen für den nächsten Supercomputer formulieren. Zweitens können wir abschätzen, welche Systeme unseren Nutzerkreis zufrieden stellen und wie sich Dienstleistungen fürs HPC entwickeln. Drittens entwickelt das LRZ Software – mit Hilfe von BEAST können wir diese auf neue Systeme vorbereiten. Nicht zuletzt können wir ausgewählte Nutzerkreise bei ihrer Grundlagenforschung unterstützen.

Wer darf die Testumgebung nutzen?

Weidendorfer: BEAST steht in erster Linie für interne Projekte zur Verfügung. Allerdings öffnen wir die Testumgebung ausgewählten Forschenden, die sich mit Hardware beschäftigen. Wir unterstützen deren Arbeit und bleiben up to date, was neue Architekturen und Komponenten betrifft.

Sind Hersteller an solchen Tests interessiert?

Weidendorfer: Das ist die langfristige Hoffnung, die bei Future Computing mitschwingt. Mittel- bis langfristig sollen uns Hersteller nicht nur als Kunden sehen, wir wollen neue Computertechnologie mitgestalten. Mit der Warmwasser-Kühlung ist uns das prima gelungen, durch den Aufbau des SuperMUC-NG mit Intel und Lenovo vertieften wir die Zusammenarbeit so, dass wir jetzt Zugriff auf Prototypen bekommen und Einfluss darauf nehmen können. Als Dienstleister sind wir Schnittstelle zwischen Grundlagenforschung und Hersteller – mit Hilfe von Forschungsergebnissen und praktischen Erfahrungen können Hersteller Produkte optimieren. Umgekehrt können wir Technologien umfassend erkunden. Das nützt allen Beteiligten.

CLEVER GEKÜHLT

Kaltes und warmes Wasser kühlen die Rechner des Leibniz-Rechenzentrums. Durch Veränderungen in den Kühlsystemen sinkt der Energiebedarf weiter.

„Bei der Datenverarbeitung wird Strom in Wärme umgewandelt“, erklärt Albert Kirnberger, Leiter Gebäudemanagement des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). „Daher muss zusätzlich Energie für die Kühlung der Systeme aufgewendet werden. So verschleudern ineffiziente Rechenzentren oft gut ein Drittel ihrer Energie.“ Anders in Garching: Das LRZ hat zusammen mit Herstellern eine viel beachtete Kühlung mit warmem Wasser entwickelt und sucht nach weiteren Möglichkeiten, den Strombedarf von Computern und Servern zu senken.

Setzen die IT-Spezialist:innen dabei auf Sensoren und eine effizientere Auslastung (s. Kasten), optimiert das Team Gebäudemanagement andauernd die Kühlanlagen. Allein dadurch sanken zwischen 2016 und 2020 die Energiekosten um 890.000 Euro, das LRZ emittierte zwei Millionen Tonnen weniger Kohlendioxid (CO₂). SuperMUC-NG erreicht dadurch außerdem den sehr niedrigen Power Usage Efficiency-Wert (PUE) von 1,08. Und nur acht Prozent des Höchstleistungs-Computers müssen noch mit Kältemaschinen gekühlt werden, den Rest besorgt das ausgeklügelte Wassersystem.

ABWÄRME FÜR BÜROS UND KÄLTEMASCHINEN

Vom Keller des Rechnerwürfels verlaufen dafür die mächtigen Rohre und Leitungen der Kühlkreise und schrauben sich durch die Decke in die Technikbereiche der Rechnerräume, wo die Systeme direkt mit Wasser gekühlt werden. Die Wärme, die Supercomputer bei der Arbeit aus Strom produzieren, wird über silberne Kühltürme auf dem Dach abgeleitet. Durch eines der Kühlnetze fließt 14 Grad kaltes Wasser, dessen Temperatur durch die Abwärme der Server und Speicher auf 20 Grad steigt. Durch die Server von CoolMUC und SuperMUC-NG strömt wiederum 36 Grad warmes Wasser, das sich in den Systemen auf 45 Grad erwärmt. Und was im SuperMUC NG durch diese Direktflüssigkeits-Kühlung nicht kälter wird, verliert seine Temperatur auf dem Weg durchs System und durch eine

Adsorptions-Kältemaschine, die mit der Abwärme aus der warmen Kühlung betrieben wird: mehr Energiekreislauf geht kaum. Auch ein Teil der Büros am LRZ wird übrigens damit geheizt. Ventilatoren in den Kühltürmen sorgen für weitere Abkühlung.

Durch Kopplung von zwei Kaltwassernetzen und durch Anpassungen der Wassertemperatur verschwand in den letzten Jahren auf dem Dach des Rechnerwürfels nicht nur ein Tank, sondern konnten in der Kühlanlage auch die hydraulischen Weichen und Drei-Wege-Ventile zurückgebaut werden. „Dadurch nutzen wir jetzt in den Kühltürmen die Außentemperatur stärker und brauchen im Winter keine Kältemaschinen mehr“, beschreibt der Gebäudetechnik-Ingenieur Pascal Weibel.

VERZICHT AUF FROSTSCHUTZMITTEL

Ab etwa 16 Grad Lufttemperatur kühlt das erwärmte Wasser aus den Computern von selbst in den Türmen ab – etwa die Hälfte des Jahres pausieren die Kältemaschinen und verbrauchen gar keinen Strom.

Schon arbeitet das Team an weiteren Verbesserungen: Das wärmere System soll schon mit 20 Grad kaltem Wasser funktionieren. Dann haben auch die Kompressions-Kältemaschinen im Sommer nur knapp zwei Monate Arbeit und der Stromverbrauch kann weiter sinken. „Dafür müssen wir aber die Kühlflächen in den Rechnerräumen erhöhen, etwa durch spezielle Rückkühl Türen an den Racks“, sagt Weibel.

Bis 2020 wurde dem warmen Wasser außerdem Glykol zugesetzt – eine Vorsichtsmaßnahme gegen Frost in den Kühltürmen. „Tritt ein Leck auf, schadet Glykol der Umwelt“, sagt Weibel. „Es ist außerdem viskoser oder träger als Wasser und verändert seine Temperatur langsamer. Deshalb wurde bisher mehr Leistung von den Pumpen gebraucht.“ Inzwischen setzt das LRZ-Gebäudemanagement auf reines Wasser. Selbst wenn in kalten Wintern die Außentemperatur weit unter den Gefrierpunkt fällt, bleibt das System durch die Abwärme der Computer eisfrei.



Sollte einmal der Strom länger ausfallen, die Supercomputer also nicht mehr arbeiten und Strom in Wärme umwandeln, wird eine Schnellentleerung aktiv: Die pumpt Stickstoff in die Kühltürme, der das dort fließende Wasser in das frost-sichere Rechnergebäude verdrängt. „Mittelfristig werden wir alle Kühlanlagen auf den Betrieb mit Wasser umstellen und ältere ersetzen“, erklärt Kimberger. Dass im LRZ schon seit Jahren nur Strom aus regenerativen Quellen zum Einsatz kommt, versteht sich bei diesen Anstrengungen zum Strom sparen von selbst.

SMARTER RECHNEN

Den Standort von Supercomputern zu gestalten, ist eine Maßnahme für Energie-Effizienz. Das LRZ erforscht außerdem, wann Supercomputer wie viel Strom verbrauchen. Die Hoffnungen ruhen auf Künstlicher Intelligenz zur Kontrolle und Steuerung der Systeme. Dazu nehmen rund 15 Millionen Sensoren Daten auf, sie werden im eigenen Programm DCDB gesammelt und überprüft.

Für die Daten-Analyse gibt es bereits erste Regeln – die Basis für eine smarte Steuerung.





DIE DATEN- BANK FÜR GUTEN SERVICE

Die technischen Zutaten aller IT-Dienstleistungen auf einen Blick: Mit einer selbst programmierten Datenbank managt das Leibniz-Rechenzentrum alle genutzten technischen Geräte und seine IT-Services. Der wichtigste Schritt zum datengetriebenen Unternehmen.

Münchner Wissenschaftsnetz, Wireless Local Area Networks (WLAN), Mailhosting, die Ausstattung mit Computerarbeitsplätzen: Hinter jeder Leistung des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) für Wissenschaft und Forschung stehen Gerätschaften und Netztechnik. Die werden jetzt in einer zentralen Datenbank inventarisiert, der Configuration Management Data Base, kurz CMDB. „Darin finden sich Hardware, Switches, Monitore, Router, Access Points, aber auch solche Punkte wie IP-Adressen von Servern, also alles, was für das Management unserer IT-Services notwendig ist“, sagt Markus Gillmeister, Informatiker und am LRZ zuständig für Benutzernahe Dienste. „So behalten wir die Übersicht, können Dienstleistungen optimieren und Kund:innen gezielter und genauer informieren.“

TRANSPARENZ VERBESSERT ABSTIMMUNG

Inzwischen verzeichnet die Datenbank insgesamt 148.000 Posten, darunter knapp 5.000 Access Points, 256 Firewalls, 1486 Server, die Geräte von knapp 500 Arbeitsplätzen im LRZ sowie an Münchner Universitäten, außerdem 2853 virtuelle Maschinen. Vier Mitarbeitende des LRZ programmierten, was ihre Kolleg:innen zuvor an Ideen und Forderungen für eine einheitliche Datenbasis gesammelt hatten. So entstand eine lange Liste – zumal jedes Element darin weiter spezifiziert wird, etwa durch die Inventarnummer, mit Daten zu Rechnung und Garantie, zu Standort und vor allem zum Dienst, dem er zugeordnet ist. Die CMDB wurde für die Zertifizierung des IT-Service-Managements nach ISO/IEC-Norm 20.000 entwickelt, vereinigt die Inhalte unterschiedlichster Dokumente, Tools und Listen, die Abteilungen bislang für sich führten.

Sie ist allerdings mehr als bloß eine Liste, sie zentralisiert Informationen, zeigt den Lebenszyklus von Geräten, Lizenzen sowie Abhängigkeiten zwischen einzelnen Posten, ordnet diese Services und Nutzer:innen zu und ermöglicht intern eine bessere Abstimmung. „CMDB ist ein Schritt zum datengetriebenen Unternehmen“, erläutert Gillmeister. „Auch wenn wir noch viele Daten von Hand einpflegen, hilft die Datenbank schon bei der Automatisierung von einigen Services.“ Wird beispielsweise eine Firewall in der Cloud um eine virtuelle Maschine gezogen, sammelt ein Tool bei CMDB die dazu



notwendigen Daten zu Netz, Server, nötigen Co-Systemen – und die Schutzmaßnahme kann mit wenigen Klicks aktiviert werden. Ob sie noch funktioniert, speichert die CMDB auch.

AUTOMATISIERTE INFORMATIONEN UND SERVICES

Das ermöglicht Kontrolle und Management: Fällt einer der 25 Server aus, auf denen die Groupware Exchange und das Mailsystem laufen, werden die Nutzer:innen dieses Dienstes benachrichtigt. Vor Wartungen oder wenn Geräten ausgetauscht werden, können Anwender:innen dank CMDB jetzt nach Standort angesprochen werden. Ziel ist, dass die LRZ-Systeme diese Aufgabe einmal selbst übernehmen: „Wir tasten uns an automatisierte Informationen heran“, berichtet Gillmeister. „Dazu aber müssen die CMDB-Daten überprüft und bei Bedarf optimiert werden. Wir haben sie aus diversen Systemen und teils von Hand in CMDB eingepflegt, das erhöht leider die Fehlerquote.“

Trotzdem – die Vorteile von CMDB sprechen sich für sich: Die IT-Abteilungen der Münchner Universitäten würden gerne zumindest auf einen Teil von CMDB zugreifen, um den Überblick über Gerätschaften und Dienstleistungen zu behalten, die Institute und Lehrstühle vom LRZ abonnieren. Im LRZ selbst denken die Expert:innen schon über eine Statusseite nach, auf der Ampeln zeigen, wie die IT-Dienste des Rechenzentrums gerade funktionieren. Auch dieser Service würde hauptsächlich durch die zentrale Inventarliste CMDB gespeist.



DIGITALE FORSCHUNGSDATEN VERWALTEN

Daten aus dem High-Performance Computing finden und teilen: Das Leibniz-Rechenzentrum entwickelt innovative Services und Technologien für die Verwaltung von Forschungsdaten.

Messwerte, Bilder, Statistiken – die Wissenschaft greift online auf immer mehr Informationen aus unterschiedlichsten Quellen zu. Aufwändige Experimente im Labor oder Umfragen müssen nicht wiederholt werden, auch wenn mit den Ergebnissen andere Fragen beantwortet werden sollen. Zwar schwelen Datensätze so durchaus auf einige hundert Terabyte an, doch in ihnen steckt weit mehr als die Antwort auf nur eine Frage. Wissen wächst, wenn Forschungsdaten geteilt werden. Klingt simpel, doch was für Computer-Nutzer:innen zum Alltag gehört, ist im High Performance Computing (HPC) eine der größten Herausforderungen.

Noch jedenfalls: Angeregt durch den wachsenden Bedarf und inspiriert von Erfahrungen aus Projekten entwickelt ein Team am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) Methoden und Technologien zur Verwaltung von Big Data: „Große Datensätze können ja nicht beliebig von Speicher zu Speicher bewegt werden“, umreißt Stephan Hachinger, promovierter Physiker und Leiter der Arbeitsgruppe, das Problem. „Damit sie aber gesucht werden können, sollten sie mit Metadaten ausgestattet sein, die Inhalt, Autor:innen, Speicherort und mehr beschreiben.“

DATEN FINDEN GeRDI



Forschungsdaten für die Suche vorbereiten und Standards für die Verwaltung finden: Eine Generic Research Data Infrastructure – GeRDI – war das Ziel dieses Projektes, das 2020 endete. Die Arbeit daran regte im LRZ eigene Services und Tools für das Datenmanagement an.

<https://www.gerdi-project.eu>

GROSSE DATENSÄTZE UNABHÄNGIG VOM STANDORT VERARBEITEN



Das Projekt Large-Scale Execution for Industry and Society – LEXIS – schafft eine Plattform mit Analyse-Tools für Big Data. Mit dem Zentrum IT4Innovations entwickelte das LRZ Datenmanagement Werkzeuge und Workflows.

<https://lexis-project.eu>

DATEN HARMONISIEREN AlpEnDAC



16 europäische Observatorien zentralisieren seit 2014 ihre Messwerte über die Alpen. Das Portal Alpine Environmental Data Analysis Centre – AlpEnDAC – macht diese Echtzeitdaten zugänglich. Das LRZ entwickelte Speicher- und On-Demand-Simulationswerkzeuge:

<https://www.alpendac.eu>



FAIRE DATEN



Beim Management von Forschungsdaten folgt das LRZ den FAIR-Prinzipien, die Mark D. Wilkinson, Professor für Biotechnik am Polytechnikum Madrid, mit rund 50 Wissenschaftler:innen voranbrachte. Daten sind FAIR, wenn sie auffindbar/findable, zugänglich/accessible, interoperabel und wiederverwertbar/reusable sind.



04

FORSCHUNG

Forschungsprojekte am LRZ	56
Magische Momente	58
Neugier wecken mit Immersion	62
Den Menschen simulieren	64
ORIGINS: Existenzielle Fragen	66
Eine Brücke zum Lernen	70

FORSCHEN, RECHNEN, SIMULIEREN

FORSCHUNGSBEREICHE

Messwerte, Bilddaten, Rechenergebnisse – die Datenvolumina wachsen in der Forschung. An den Hochschulen und Instituten setzen sich zur Auswertung zudem Verfahren der Künstlichen Intelligenz durch. Die High-Performance Computing-Ressourcen sowie die Speicherangebote des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) werden nicht mehr nur von Disziplinen mit traditionell großen Datenmengen gefordert, sondern auch von Umwelt-, Naturwissenschaften und Medizin, ja sogar Kultur- und Sozialwissenschaften verlangen nach mehr Rechen- und Speicherleistungen, weil sie Kunst digitalisieren, Lernmedien kreieren, Geschichte und Gegenwart in den virtuellen Raum transferieren.



1 Umweltwissenschaften



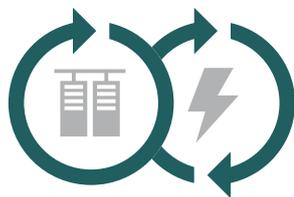
2 Medizin



3 Big Data & KI



4 Forschungsdaten-Management



5 Future Computing & Energieeffizienz



6 Visualisierung



7 IT-Management & IT-Sicherheit



8 Quantum Computing

1| AlpEnDAC II, Hydro-BITS, HiOS, BaysSICS, ePIN, GEO.KW, CoCoRECS, VECMA, ViWA, Terra_Byte, HyBBEX, LandKlif 2| Bavarian Genome, DigiMed Bayern, CompBioMed2, MuDS, Intel Pandemic Response Program, GHGA, ePIN 3| EuroCC, DeToI, InHPC-DE, DigiMed Bayern, MCML, IGNITE ITN, Cluster Origins 4| AlpEnDAC II, Hydro-BITS, LEXIS, NFDI4ING, GHGA, ePIN 5| Arktik, DEEP-EST, PRACE-6IP, SiVeGCS 6| LediZ, Moosaik, Bridge of Knowledge, InHPC-DE 7| GN4-3, CONCORDIA 8| Intel-QS

FÖRDERGEBER



PUBLIKATIONEN

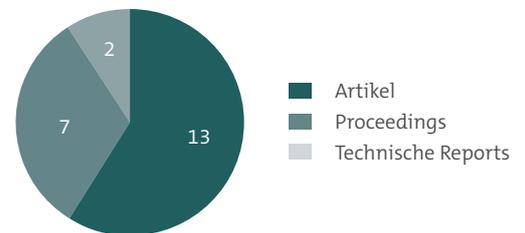


22
Publikationen
gesamt

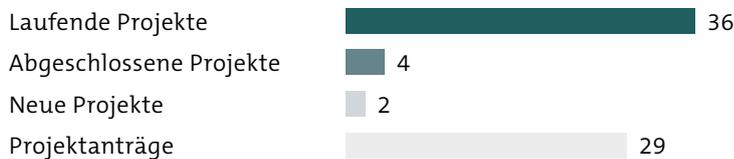
GEFÖRDERTE PROJEKTE



36
Projekte
gesamt



FORSCHUNGSMANAGEMENT



Die Gesamtübersicht der
Publikationen finden Sie
in Kapitel 08.

Neben all diesen Aufgaben für die Wissenschaft liegt dem LRZ die Erforschung von Computern für die Zukunft sowie deren Energieeffizienz am Herzen: Innovative Graphic Processing Units (GPU) erweitern die Möglichkeiten von (Super)Computern, beschleunigen Leistungen und sind auf die Integration von Anwendungen des tiefen und maschinellen Lernens vorbereitet. Neben Eingriffen in der Umgebung von Supercomputern ruhen die Hoffnungen für energieeffizientes Rechnen auch auf smarterer Steuerung: Die Zahl der Forschungsprojekte am LRZ sowie die Publikationen von LRZ-Spezialist:innen oder mit deren Beteiligung wird also weiter zunehmen. Wir freuen uns drauf.

MAGISCHE MOMENTE FÜR DEN UNTERRICHT



DISKUTIEREN UND FRAGEN

Studierende diskutieren mit Professorin Ballis Fragen für Zeitzeugen



SCHAUEN UND STAUNEN

Spezielle VR-Brillen zeigen Zeitzeug:innen räumlich, lebensecht und verstärken die Immersion

ZUSAMMEN ARBEITEN UND GEMEINSAM LERNEN

Studierende mit Naor, der Pädagogin Ballis, dem Politik-Wissenschaftler Gloe und dem Historiker Barricelli



REIF FÜRS MUSEUM

uture of Contemporary Witnessing
Zukunft der Zeitzeugenschaft

Das Interview mit Zeitzeugenden gestalten, was nicht mehr selbst zu Wort kommen können? Wie wird die Erinnerung an die Vergangenheit weitergegeben? Welche Verantwortung haben wir, diese Aufgabe wahrzunehmen, diese Zeugnisse zu bewahren und der Gesellschaft zugänglich zu machen?

Wie werden diese Zeugnisse gesammelt und weitergegeben? Welche Verantwortung haben wir, diese Zeugnisse zu bewahren und der Gesellschaft zugänglich zu machen? Welche Verantwortung haben wir, diese Zeugnisse zu bewahren und der Gesellschaft zugänglich zu machen?

Wie werden diese Zeugnisse gesammelt und weitergegeben? Welche Verantwortung haben wir, diese Zeugnisse zu bewahren und der Gesellschaft zugänglich zu machen? Welche Verantwortung haben wir, diese Zeugnisse zu bewahren und der Gesellschaft zugänglich zu machen?

Das Münchner NS-Dokumentationszentrum zeigt 2021 Strategien fürs Erinnern und dabei auch das Projekt LediZ mit der Zeitzeugin Dr. Eva Umlauf.

Zeitzeug:innen befragen, sie dabei filmen und die Interviews virtualisieren: Dank Mixed Reality wird der Geschichts-Unterricht zum nachhaltigen Erlebnis

Der alte Mann im roten Ohrensessel erzählt: von Flucht, Familie, Grausamkeit, Lager, vom Überleben und der Zukunft. „Wir sind alle nur kleine Teile in der Geschichte, aber unser Wissen dürfen wir nicht ins Grab mitnehmen, sondern müssen es weitergeben“, sagt Abba Naor, Überlebender des Holocaust und Buchautor. „Was einmal geschah, kann wieder geschehen. Um das zu vermeiden, müssen wir darüber reden.“ Deshalb gibt es Abba Naor virtuell: Für das Projekt „Lernen mit digitalen Zeugnissen“ (LediZ) wurde der gebürtige Litauer virtualisiert. Dank Spracherkennung beantwortet sein Alter Ego Fragen zu seinem Überleben in den Konzentrationslagern Stutthof und Dachau – so als würde man ihm gegenüber sitzen. „Zielgruppe von LediZ sind Jugendliche ab 16 Jahren und Studierende, sie sollen mit dieser Form von Mixed

Reality ausgebildet werden“, berichtet Anja Ballis, Professorin der Ludwig-Maximilian-Universität (LMU) München, Didaktikerin und Projektleiterin LediZ. „Das Projekt ist interdisziplinär und lebt von der Synergie unterschiedlicher Fach- und Wissensbereiche.“ Für LediZ arbeiten Expert:innen aus Didaktik, Pädagogik, Geschichte, Sprach- und Sozialwissenschaften sowie Informatik zusammen.

Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) und die britische Design-Agentur Bright White unterstützen LediZ mit Technik und praktischen Erfahrungen, um die Erzählungen von Zeitzeug:innen wie Abba Naor oder der Kinderärztin Eva Umlauf, die in Arbeits- und Konzentrationslagern aufwuchs, für die Nachwelt zu erhalten. „Wir sehen in der Virtualisierung von Zeitzeugenberichten eine große Chance für die didaktische Vermittlung von Stoffen, weil Lehrende und Lernende sich dabei mit der Kunst des Fragens beschäftigen, die viel zu oft beim Lernen vernachlässigt wird“, sagt Ballis. „Bisher gab es in jeder Interview-Sitzung mit den virtuellen Zeitzeug:innen einen magischen Moment – wenn Zuhörer:innen spürbar in den Bann der Antworten gezogen werden.“

KINOTECHNIK + SPRACHERKENNUNG = DIALOGFÄHIGKEIT

Noch sind magische Momente für den Unterricht aufwändig – und anstrengend, vor allem für die Zeitzeug:innen. Fünf Tage lang setzten sich Abba Naor und Eva Umlauf jeweils mehrere Stunden für Interviews in den Sessel. Sie wurden dabei von zwei RED-Epic-Kameras stereoskopisch gefilmt: „Im Augenabstand aufgestellt, entsteht beim Anschauen der Filme mit speziellen Brillen später ein dreidimensionaler Eindruck, man glaubt, die sprechende Figur sei real“, erklärt Daniel Kolb, Spezialist für Virtual Reality und Visualisierung am LRZ. „Für LediZ war Kontinuität wichtig, jede Frage sollte in der gleichen Einstellung aufgenommen werden können.“

Die so entstandenen Erzählungen von LediZ werden interaktiv durch die Fragen von Zuschauenden abgespult. Dafür verarbeitet die Spracherkennung Google Dialogflow die Audiospuren der Interviews, die real gestellten Fragen wurden noch semantisch und linguistisch modifiziert. „Zu den 1.000 Fragen kommen 40.000 Variationen, die wir nach einem eigens entwickelten, linguistischem System erstellt haben“, erläutert Ballis. „So erhöhen wir die Passung von Fragen und Antworten.“ Die Spracherkennung liefert inhaltlich

passende Antworten zu den Fragen. „Wir erreichen bereits 80 Prozent Treffsicherheit damit, wollen das aber auf über 90 Prozent steigern“, berichtet Kolb.

Die Interviews mit Eva Umlauf und Abba Naor können zwei- und dreidimensional abgespielt werden: 3D-Brillen lassen zwar Zuschauende ins Gespräch abtauchen, aus den Daten, die das LRZ archiviert und zur Verfügung stellt, ließen sich Apps oder weitere Medien entwickeln. Damit die persönlichen Berichte möglichst vielseitig und noch lange technisch ausgewertet und verarbeitet werden können, wurden sie in höchster Auflösung produziert.

DURCH FRAGEN GESCHICHTE HAUTNAH ERLEBEN

„Ich habe noch meine Bedenken, wie das wirkt auf Kinder – ist das nicht doch etwas Anderes als wenn der Mensch lebendig Fragen beantwortet“, fragt sich Eva Umlauf. „Wenn wir einen alten Film sehen, der nicht in Farbe oder 3D gemacht wurde, beeindruckt uns das ja auch.“ Noch sind die interaktiven Interviews Prototypen. Ihre Wirkung wird vom LediZ-Team in Schulen, Museen und in Umfragen erforscht. Befragten Lernende und Studierende die virtuellen Zeitzeugen, wird Didaktikerin Ballis oft berührt: „Zum Teil sind Studierende sehr nervös, wenn sie Fragen stellen. Sie wollen nichts Falsches fragen“, beobachtet sie. „Und oft entsteht eine beglückende Stimmung, wenn die Zeitzeugen eine sinnhafte Antwort zur eigenen Frage geben.“ 2020 wurde LediZ eine Woche in der KZ-Gedenkstätte in Dachau ausgestellt, danach in Schulen ausprobiert, unter anderem im Carl-von-Linde-Gymnasium von Kempten: „Mich beeindruckt, dass man das Holocaustzeugnis durch Virtual Reality lebendig erhalten kann“, sagt Stefan Dieter, promovierter Historiker und Lehrer für Evangelische Religion, Geschichte und Deutsch. „Schüler:innen können sich Geschichte nicht mehr nur abstrakt durch Bücher oder im Unterricht erarbeiten, sondern mit einer Person sprechen und interagieren, die Vergangenheit erlebt hat.“

Ballis und ihre Kollegen von LediZ, der Politik-Wissenschaftler Professor Markus Gloe und der Historiker Professor Michele Barricelli, denken bereits weiter. Sie wollen mehr Zeitzeugnisse erstellen und denken dafür an weitere Ereignisse und soziale Gruppen: So könnte zum Beispiel DDR-Geschichte virtualisiert werden, aber auch die Erlebnisse von Migrant:innen. Dank digitaler Technik muss heute also keiner mehr sein Wissen mit ins Grab mitnehmen.



PROMOVEND
DANIEL KOLB

IMMERSIVE DARSTELLUNGEN FACHEN NEUGIERDE AN



Daniel Kolb promoviert über die Interaktionen zwischen Mensch und Computern. Am LRZ betreut er unter anderem das Projekt Lediz.

Welche technische Ausstattung benötigen Schulen, um LediZ im Unterricht einzusetzen?

Daniel Kolb: Die Mindestanforderung sind ein Computer mit Browser, ein Bildschirm oder Projektor, verlässliche Internetverbindungen und eine Tastatur oder ein Mikrofon. Je größer der Bildschirm oder die Leinwand, umso besser die Wirkung. Am besten kommen die Immersions-Effekte mit einem 3D-Projektor samt Brillen oder anderen 3D-Darstellungstechniken zustande.

Wie aufwändig ist die Produktion von Virtual Reality-Anwendungen?

Kolb: Das schwankt stark und ist abhängig davon, was in der Anwendung an Interaktivität und Darstellung geboten werden soll. Die Kosten der Arbeitszeit sind sicher höher als die für die reine Hardware. Je nach Projekt und Aufwand müssen nach meiner Erfahrung vierstellige Budgets für kleinere Mixed-Reality-Medien und Ausgaben im hohem sechsstelligen Bereich für anspruchsvolle Projekt mit vielen Beteiligten und Aspekten einkalkuliert werden.

LediZ fasziniert – werden Virtual- oder Mixed Reality-Anwendungen Alltag im Unterricht werden?

Kolb: Solche Anwendungen werden in Zukunft sicher häufiger in Schulen eingesetzt, aber auf absehbare Zeit nicht alltäglich. Solange Laptops für Lehrer sowie eine stabile Internetanbindung an Schulen nicht gesichert sind, bleibt Virtual Reality-fähige Hardware als Standardausstattung Zukunftsmusik.

Wo könnte man Mixed Reality-Anwendungen noch einsetzen?

Kolb: Visualisierungen, bei denen Forschende und andere Betrachter:innen gleichermaßen in Daten eintauchen können, sind ein sehr wichtiges Medium. Sie bieten Perspektiven, die sonst nicht möglich sind – auch in Simulationen nicht. Am LRZ kann man zum Beispiel zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Geschichte durch die Erde fliegen und verstehen, wie Erdplatten und Kontinente entstanden. Die virtuelle Schleißheimer Kammerkapelle macht Orte und Details sichtbar, die der Öffentlichkeit gar nicht zugänglich sind. Außerdem lassen sich in virtuellen Welten bedrohte und scheue Tierarten wie Kiebitze von Nahen und allen Seiten betrachten. Immersive Darstellungen saugen Betrachter:innen förmlich ein, was deren Neugierde und Entdeckergeist anfacht.



STICHWORT IMMERSION

Augmented, Virtual und Mixed Reality ziehen uns in ihren Bann – weil sie nicht nur den Blick oder das Gehör, sondern mehrere Sinne gleichzeitig ansprechen. Immersion wird der Effekt genannt, wenn Nutzer in digitale, dreidimensionale Welten eintauchen und diese für real oder täuschend echt halten. Er entsteht durch die dreidimensionale Darstellung und wird noch durch Spezialbrillen und Controller für die Hände verstärkt.

Mit dem Klick auf oder durch Bewegen des Blicks, bewegen Nutzer:innen sich selbständig in der digitalen Welt, können mit ihren Händen oft sogar Objekte verschieben oder neu zusammensetzen.

Zu erleben ist die Immersion im virtuellen Kaisersaal der Neuen Residenz Bamberg: Hier kann der Zuschauer:innen durch den Raum wandern und bis zur Decke fliegen und Gemälde oder Wandtexturen betrachten. Was Spiele lebensechter macht, unterstützt in Kunst und Wissenschaft das Verständnis von Zusammenhängen.



DEN MENSCHEN SIMULIEREN

Supercomputer modellieren den digitalen Zwilling des Menschen und durchforsten Bibliotheken aus Substanzen: Wie High-Performance Computing die Medizin unterstützt und die Pharmaforschung beschleunigt.

SuperMUC-NG kämpft gegen Corona: Der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) in Garching filtert aus Millionen von chemischen Substanzen, natürlichen Heilmitteln oder zugelassenen Medikamenten jene Wirkstoffe heraus, die mit SARS-CoV-2, dem Corona-Virus, reagieren. „Supercomputer sind eine bemerkenswerte Ressource für die Entwicklung von COVID-19-Behandlungen“, sagt Peter Coveney, Mehrfach-Professor, Direktor des Zentrums für Computational Science (CCS) am University College London (UCL), außerdem Initiator von CompBioMed. „Sie können durch eine Vielzahl von Methoden wie maschinelles Lernen und künstlicher Intelligenz komplexe molekulare Dynamik sowie mögliche Wirkstoffe identifizieren. Wir müssen nicht nur Moleküle finden, die sich an die Stacheln auf dem Coronavirus binden, sondern auch modellieren, wie gut sie sich an diese binden, wenn die Stacheln sich bewegen.“

DIGITALE ZWILLINGE FÜR PERSONALISIERTE MEDIZIN

Die Corona-Krise zeigt den Nutzen von High Performance Computing (HPC) und CompBioMed, einem von der EU geförderten Projekt zur Digitalisierung in der Medizin. Seit 2015 entwickelte ein Konsortium aus Wissenschaft und Unternehmen rund 20 HPC-Programme und -Algorithmen, um ein virtuelles Modell des Menschen zu schaffen. Damit lassen sich Bewegungsabläufe, biochemische und molekulare Prozesse sowie das Geschehen in Gefäßen oder im Herzen berechnen. Die Codes verarbeiten Massendaten zu einem virtuellen Modellmenschen oder aber die

Lebensdaten eines Menschen zu seinem digitalen Zwilling – ein Ausgangspunkt für die personalisierte Medizin. Im Kampf gegen COVID-19 machen sich diese Werkzeuge von CompBioMed jetzt bezahlt: Simulationsprogramme helfen dabei, das Corona-Virus und sein Vermehrungsverhalten zu verstehen und beschleunigen die Suche nach Medikamenten. Wochen nach dem ersten Ausbruch von COVID-19 lagen dank HPC detaillierte Modelle des Virus vor und die ersten 40 Substanzen, mit denen er bekämpft werden könnte.

MODELL MENSCH IN HD-AUFLÖSUNG

Vier Jahre nach dem Start von CompBioMed startete 2019 die zweite Phase des Projektes: Der digitale Zwilling soll durch die gewachsene Kraft von Hochleistungsrechnern und mit Unterstützung von Big Data, künstlicher Intelligenz und Maschinenlernen detaillierter werden. Das LRZ begleitet CompBioMed seit 2016, seit 2019 ist es Kernpartner des Projekts und verantwortlich für die Analyse und das Management großer Datenmengen. Mitte März 2020 organisierte das LRZ ein dreitägiges, virtuelles Arbeitstreffen: „Neben HPC und Simulationen können maschinelles Lernen und Verfahren der Künstlichen Intelligenz einige Probleme in der biomedizinischen Forschung lösen helfen“, berichtet David Wifling, promovierter medizinischer Chemiker, der am LRZ die Arbeiten für CompBioMed koordiniert. Außerdem visualisieren Supercomputer dreidimensionale Modelle, die das Verständnis von Körperfunktionen verbessern. So veranschaulichte SuperMUC-NG mit dem CompBioMed-Programm HemelB und mit Daten der Schweizer IT'IS-Foundation den Fluss roter Blutkörperchen.

Neben der Beratung, Ausbildung und Unterstützung beim Supercomputing – Coveney's Code zur Erforschung von Wirkstoffen forderte Anfang 2020 erstmals alle 311 040 Rechnerknoten des noch neuen SuperMUC-NG – hilft das LRZ CompBioMed, Mess- und Laborwerte aufzuarbeiten und mit Metadaten zu katalogisieren. So werden sie online leichter gefunden von Wissenschaft und Medizin. Das LRZ setzt dabei auf Erfahrungen mit seinem Data Science Storage (DSS) und bietet Tools zur automatisierten Hochdurchsatz-Analytik von großen Datenmengen. CompBioMed fordert auch die Spezialist:innen für Big Data und Künstliche Intelligenz: „Machine Learning ergänzt in der Medizin die Computersimulation“, beobachtet Dr. Peter Zinterhof, Mitarbeiter des LRZ. In den Daten aus Screenings oder Massentests finden Algorithmen oft mehr Muster

als Menschen. Das bringt die Forschung auf neue Fragen. Verfahren der Künstlichen Intelligenz, des maschinellen Lernens, der Bilderkennung und andere smarte Systeme breiten sich daher in der Medizin schnell aus.

HPC BESCHLEUNIGT MEDIKAMENTEN-ENTWICKLUNG

„Wir nutzen die Leistung von Supercomputern, um schnell eine riesige Anzahl potenzieller Verbindungen zu suchen, die das neuartige Coronavirus hemmen könnten“, erklärt Coveney, „und verwenden die gleichen Computer erneut, aber mit anderen Algorithmen, um diese Liste zu verfeinern. So identifizieren wir die vielversprechendsten Verbindungen, um danach im Labor auf herkömmlichen Wegen wirksame Behandlungen gegen COVID-19 zu testen.“ Normalerweise dauert die Entwicklung eines marktreifen Medikaments bis zu 12 Jahre und kann Milliarden Euro an Kosten verschlingen. HPC minimiert diesen Aufwand. Anhand des digitalen Zwillings von CompBioMed können invasive Eingriffe präziser platziert, Medikamente und prothetische Geräte personalisiert werden. Eine individuelle Medikamentierung ist ebenso realistisch wie passgenaue Gelenke.





ANTWORTEN AUF EXISTENZIELLE FRAGEN

**Im Exzellenz-Cluster ORIGINS
suchen Astro- und Biophysik
sowie die Chemie nach dem
Ursprung des Lebens. Das LRZ
unterstützt die Forschenden
mit Supercomputing und
Visualisierungstechniken**

In 182 Tagen umrundete das Röntgenteleskop eROSITA an Bord der SRG-Raumsonde und in 1,5 Millionen Kilometern Entfernung einmal die Erde. 2020 lieferte es rund 165 Gigabyte an Daten und Millionen von Bildern, hauptsächlich von Galaxien, schwarzen Löchern und heißem Gas. In diesen Welteninseln des Kosmos hat das Leben seinen Ursprung. „Galaxien verfügen über ein zentrales, schwarzes Loch, das permanent Materie anzieht und dadurch wächst“, erklärt Dr. Klaus Dolag von der Universitäts-Sternwarte München. „In diesem Prozess werden enorme Energiemengen freigesetzt, die wiederum die Entwicklung einer Galaxie beeinflussen und damit auch die Voraussetzungen zur Bildung von Leben.“

WIE ENTSTEHT LEBEN?

Die Daten von eROSITA und des Max-Planck-Instituts für extraterrestrische Physik (MPE) sind im Exzellenzcluster ORIGINS hoch willkommen: Hier gehen 120 Arbeitsgruppen aus Astro-, Teilchen- und Biophysik seit Ende 2018 der Frage nach, wie Leben überhaupt entsteht. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) versorgt die Forschenden mit Supercomputing- und Speicherkapazitäten, außerdem mit Erfahrung im Umgang mit Daten und Algorithmen: „Wir brauchen Rechenzeit, um die komplexen Zusammenhänge im Universum vom Urknall bis zur Entstehung des Lebens zu verstehen. Numerische Simulationen sind die modernen Arbeitspferde der Astro-, Teilchen- und Biophysik“, erklärt Dr. Andreas Burkert, Ordinarius an der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU), Leiter des Lehrstuhls für theoretische und numerische Astrophysik und einer der Koordinatoren von ORIGINS. „Das LRZ garantiert den Zugang zu einem der weltweit stärksten Höchstleistungsrechner.“



Außerdem können wir das vielfältige Angebot von IT-Services des LRZ nutzen.“

IST LEBEN EIN CHEMISCHER ODER PHYSIKALISCHER PROZESS?

Ein Teil der High Performance Computing- oder HPC-Ressourcen sind für das Cluster reserviert, damit aus Messdaten Modelle und Algorithmen entwickelt werden. Das Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) visualisiert Ergebnisse und Berechnungen. Das ist gute Tradition seit 2006: Damals startete das erste Exzellenzcluster UNIVERSE, das dem Ursprung des Universums nachspürte. Bis 2018 veröffentlichten rund 250 Forscher:innen und 70 Arbeitsgruppen aus aller Welt 4.000 Beiträge und 308 Doktorarbeiten. Sie konnten am Ende Supernova-Explosionen erklären, von neuen Galaxien berichten, hatten stellare Nukleosynthesen und das Geschehen in schwarzen Löchern erkundet sowie das winzige Higgs-Teilchen und hochenergetische, kosmische Neutrinos entdeckt. Ein Teil der Ergebnisse ist im Deutschen Museum zu besichtigen, dort läuft der Film „Ausgerechnet“, der am SuperMUC entstand und anschaulich berichtet, was nach dem Urknall vor rund 14 Milliarden Jahren geschah.

ORIGINS führt diese Arbeit fort – neben Teilchen- und Astrophysik sind nun noch Biophysik und Biochemie beteiligt. „Ist Leben ein unausweichlicher physikalischer und chemischer Prozess, der überall dort stattfinden kann, wo die Bedingungen dafür gegeben sind?“, nennt Burkert die zentrale Frage. „Um eine Antwort darauf zu finden, benötigen wir jetzt auch die Biophysik und -Chemie.“ Diese Wissenschaften bringen andere Ideen, Modelle, Gedanken und Ausdrucksweisen ins Cluster.



ORIGINS – DIE FAKTEN

- Laufzeit: 2018 bis 2026.
Fördergeber: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) unter der Fördernummer EXC 2095-390783311
- Fördersumme: 45 Millionen Euro
- Partnerinstitutionen:
Ludwig-Maximilians-Universität, Technische Universität München, diverse Max-Planck-Institute, das LRZ, das Institute des Nanosciences, das Laboratoire Astroparticulaire et Cosmologie, das Centre for Study Origins and Evolution of Life, Planets and the Universe, das European Southern Observatory, die Harvard University und das Centre for Computational Astrophysics (USA) beteiligt.



AUSGEZEICHNETE WISSENSCHAFT

Den Schwarzen Löchern hat sich Prof. Dr. Reinhard Genzel verschrieben: Der Direktor am Max-Planck-Institut für extraterrestrische Physik in Garching erforschte mit seinem Team das schwarze Loch im Zentrum der Milchstraße und beobachtete darin unter anderem Helligkeitsausbrüche von Gas sowie eine Gravitationsrotverschiebung. Genzels Arbeit fließt ebenfalls bei ORIGINS ein und wurde im Herbst 2020 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.



Das erste ORIGINS-Jahr sei daher ein spannender Findungsprozess gewesen, erzählt Burkert: „In der Biologie haben sie andere Gedankenketten als in der Physik, bevor wir alle zusammenarbeiten konnten, musste das Cluster dafür sorgen, dass alle die Sprache des jeweils anderen Forschenden verstanden.“ Als Astrophysiker, der im All nach Signaturen von dunkler Materie sucht, lernte Burkert etwa, dass die Teilchenphysik Methoden bereithält, diese genauer aufzuschlüsseln.

WIE SETZT SICH DIE URSUPPE ZUSAMMEN?

Auf der Suche nach dem Ursprung des Lebens legt ORIGINS Wert auf interdisziplinäre Forschung: „Wo Phosphor in den Sternen entsteht, darüber haben wir uns in der Astrophysik noch nicht wirklich Gedanken gemacht“, gibt Burkert offen zu. Die Teilchen- und Biophysik ergänzt Wissen. Eine erste Erkenntnis von ORIGINS: Phosphor entsteht in Sternen und wird durch deren Explosionen in die interstellaren Staub- und Gaswolken geschleudert, in denen sich wiederum Planetensysteme und Kometen bilden. Interstellare Wolken sind interessant für ORIGINS, hier vermuten Fachleute mehr Bausteine des Lebens.

Im ersten Jahr von ORIGINS entstanden mehr als 100 Beiträge nicht nur über Sterne, schwarze Löcher oder Galaxien. Inzwischen wurden außerdem Wasservorkommen auf sternlosen Monden entdeckt und die Entstehung von Anti-Materie geklärt, außerdem Messungen wie die Hubble-Konstante zur Ausdehnungsgeschwindigkeit des Universums präzisiert. Nebenbei wurden Modellierungssoftware fürs HPC sowie Beobachtungswerkzeuge entwickelt und optimiert. ORIGINS erkundet das Universum und will die Rezeptur der Ursuppe entdecken, jene Mischung aus anorganischen Substanzen, die das Entstehen von Leben ermöglichte. Kann ihre Zusammenstellung im Labor kopiert werden, wird die Entwicklung der ersten Lebewesen verständlich.

WAS BERICHTEN DATEN VOM LEBEN?

Vom Geschehen im All bis hin zu den mikroskopisch kleinen Verbindungen des Lebens und weiter zu den atomaren Bausteinen der Materie integriert ORIGINS ein breites Forschungsspektrum, jede wissenschaftliche Frage produziert über Messungen, Aufnahmen von Teleskopen und Mikroskopen oder Modellrechnungen Daten über Daten. Mit Hilfe der Rechenkraft von Supercomputern sind Astro- und Teilchenphysik in die dritte Dimension und in die räumliche Darstellung vorgestoßen. Jetzt geht es um höhere Genauigkeit und Auflösung der Darstellungen: „Viele unserer Forschungsbereiche arbeiten mit Big Data und müssen große, multi-dimensionale Daten auswerten“, sagt Burkert. Im Cluster arbeiten sie daher auch mit Hilfe des LRZ an einem Data Science Lab für neue Techniken und Methoden für die Datenanalyse. Die 165 Gigabyte Informationen, die eROSITA vor Kurzem zur Erde schickte, sind nicht nur inhaltlich interessant, an ihnen werden zudem Tools zur Verarbeitung und Validierung erprobt.

#LRZWebservice



ALEXANDER SCHREINER

DER MANN HILFT UNS IM WORLD WIDE WEB

Alexander Schreiner und seine Kolleg:innen kümmern sich um Infrastruktur fürs Web, Exchange-Server und ums ID-Management von mehr als 120.000 Kennungen, mit denen LRZ-Nutzer:innen auf Online-Dienste, Cloud, Speicher zugreifen. „Die Dienstleistungen, die das LRZ anbietet, werden immer komplexer, das erhöht den Beratungsbedarf“, erzählt Schreiner. „Wir sind die ersten Ansprechpartner:innen für Nutzende.“ Nicht erst seit Corona gehört Teamviewer zu den wichtigsten Werkzeugen, die Spezialist:innen können damit von Ferne Technik besser einrichten. Oft hat es das Team mit den rund 5000 Master-Usern zu tun, die sich an Institutionen um die IT kümmern und Studierende oder Angestellte zu LRZ-Diensten an- oder abmelden. Alexander Schreiner betreut dabei die der TUM. „Ich lerne viel Neues kennen. Mir macht es Spaß, Projekte und Nutzer:innen mit unseren Diensten auszustatten.“

WISSEN BRINGT VORWÄRTS

Zusammen mit dem Department für Anglistik und Amerikanistik der Ludwig-Maximilians-Universität entwickelte das Leibniz-Rechenzentrum die App Bridge of Knowledge VR: ein sehenswerter, motivierender Beitrag fürs digitale Lernen.



Es kommt eher selten vor, dass popkulturelle Werke wie die Filmreihe um den Hau-Drauf-Archäologen Indiana Jones auf den akademischen Lehrbetrieb ausstrahlen. „Aber die Brückenszene in ‚Indiana Jones und der Tempel des Todes‘ hat mich einfach inspiriert“, erklärt PD Dr. Christina Sanchez-Stockhammer, die Leiterin des App-Projekts. Eine Hängebrücke, die nur überqueren kann, wer die richtigen Antworten auf zahlreiche fachliche Fragen kennt, kann die tradierte Form der Wissensüberprüfung so ergänzen, dass die Studierenden mit Spaß und Motivation bei der Sache sind. Die Idee zur Bridge of Knowledge war geboren.

Das offiziell als „PrüfungsvorbeReitung VR“ betitelte und vom Multiplikatoren-Programm der LMU geförderte Projekt besteht im Wesentlichen aus einer Hängebrücke in einem virtuellen Dschungel, den die Student:innen mit einem Smartphone über eine einfache VR-Brillen-Halterung dreidimensional sehen. Im Display werden zu einer Frage mehrere Antworten im Multiple-Choice-Verfahren eingeblendet, die Spieler:in wählt eine Antwort aus. Ist die Antwort richtig, darf auf der Brücke ein Feld vorgerückt werden. Ist die Antwort falsch, sollten die Studierenden gute Nerven haben: Der Sturz von der Brücke in eine tiefe Urwaldschlucht ist unvermeidlich. Freunde des britischen Humors dürfen sich hier gerne an die Brücke des Todes aus Monty Pythons „Ritter der Kokosnuss“ erinnern fühlen. Ein kleines Trostpflaster hält die App aber bereit: In der Schlucht finden die Spieler:innen die richtige Antwort, mit der sie beim nächsten Versuch hoffentlich mehr Erfolg haben.

INTUITIVE BEDIENUNG

Realisiert wurde die Smartphone-App von einem Team von Studierenden unter der technischen Leitung von Elisabeth Mayer am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). „Zunächst lag unser Fokus darauf, eine intuitive Interaktion in der App zu ermöglichen“, erläutert Mayer. „Die wenigsten Studierenden haben bereits Erfahrung mit VR gemacht. Gesucht war also eine Steuerung, die nicht von den Fragen ablenkt.“ Diese Steuerung wurde in Form der Gaze Control gefunden. Dabei steuern die Spieler die App mit den Augen. Um also eine Antwort auszuwählen, muss das dazugehörte Augensymbol nur genau angeschaut werden.



Auch die 3D-Brille folgt dem Prinzip der Einfachheit. Hier genügt ein simples Modell aus Karton, das als Halterung für das Smartphone vor den Augen dient. Mit rund 5 Euro schlägt eine solche zu Buche und ist damit mit den meisten studentischen Budgets erschwinglich. „Prinzipiell funktioniert die App auch ohne die VR-Brille, nur leidet die Immersion darunter“, erläutert Mayer. Aus Inklusionsgründen sind Lesbarkeit und Verständlichkeit ein sehr wichtiger Aspekt. Sanchez-Stockhammer ergänzt: „Wir haben durch Tests im Vorfeld die ideale Textlänge ermittelt und diese dann in Style-Sheets festgehalten. Dozent:innen, die die App nutzen wollen, können also auf klare Vorgaben zurückgreifen.“

OFFEN UND MODULAR

Es ist geplant, dass das Adventure-Quiz vollständig modular aufgebaut wird. Dozent:innen können ihre Fragen in die App einspielen lassen, und es sind nahezu beliebig viele Fragen möglich. Damit steht Bridge of Knowledge VR prinzipiell jedem Fach offen, sobald die App planmäßig das aktuelle Teststadium verlassen hat. Eine Begrenzung gibt es nur nach unten. Mindestens zehn Fragen müssen zur Verfügung stehen, sonst ist die Brücke zu kurz. Geeignet sind dazu vor allem die Inhalte von Einführungsveranstaltungen – das für jedes Fach unverzichtbare Grundlagenwissen –

egal in welcher Disziplin. „Unser Ziel ist zunächst die Verstetigung der Bridge of Knowledge“, so Sanchez-Stockhammer. „Und dass sie von möglichst vielen Studierenden genutzt wird, die so ihr Fach neu entdecken.“ Dabei wurde natürlich auch an alle Student:innen gedacht, denen der Nervenkitzel zu groß ist: Die Schlucht kann mit Wasser gefüllt werden. Wer Höhenangst hat, riskiert also keinen Sturz von der Brücke.



05

AUS- UND WEITERBILDUNG

Wissen teilen	74
Online lehren und lernen	76
Ausbildung im Homeoffice	78
Prozessoren im Praxistext	80
Hilfe beim Supercomputing	82
Schneller forschen	84

WISSEN TEILEN UND ANREICHERN

Es fallen keine Meister:innen vom Himmel: Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) bildet daher aus – Forschende in den Techniken des Supercomputings sowie die künftigen Spezialist:innen für zuverlässigen IT-Service. Corona konnte diesen Angeboten nichts anhaben – im Gegenteil: Trotz des Verbots von Präsenzveranstaltungen weitete das LRZ im Jahr 2020 sein Trainings-Angebot aus und brachte mehr als 1200 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler die Kunst des Programmierens für parallele Rechensysteme sowie den Einsatz smarterer Analyseverfahren näher – eine Leistung, die ohne das Engagement von LRZ-Dozent:innen sowie bewährten Kooperationen mit Universitäten, Rechenzentren und Unternehmen nicht denkbar wäre und jetzt noch von Webtechnologie unterstützt wird. Corona brachte die Digitalisierung der Kursangebote nach vorn: Teilnehmende mussten nicht extra nach Garching kommen; das LRZ gewann mehr renommierte IT-Spezialist:innen für Workshops. Partnerschaften mit immer neuen Organisationen und Unternehmen bereichern das Qualifizierungsangebot des LRZ, in diesen Netzwerken wachsen außerdem die Pläne für Forschungsprojekte und damit immer wieder neue Aufgaben für das LRZ. ■



#Lernen

VOLKER WEINBERG
MIT DEM MANN LEHREN WIR ONLINE

Volker Weinberg koordiniert das Lehrprogramm des LRZ im HPC-Bereich, organisiert Kurse und Workshops von PRACE und arbeitet als Dozent. „Im März wurde ich mitten aus einem Kurs ins Homeoffice geschickt,“ erzählt er. Seither testen er und seine Kolleg:innen Konferenz-Tools und widmen sich der digitalen Lehre. „Die Tools müssen Interaktivität und das Einteilen der Teilnehmer in Gruppen ermöglichen“, so die Erfahrung. „Schön ist, wenn weitere Feedback- und Chatfunktionen dazu kommen.“ Die digitale Lehre wird gut angenommen: „Den ersten Kurs zu OpenCL verschoben wir auf nachmittags, damit der Dozent von Intel ihn aus den USA halten konnte. Erstmals haben sich Interessenten aus Ägypten, Zypern und Italien registriert.“ Dass LRZ und PRACE mit den Online-Kursen Wissen ins Ausland exportieren und den Kreis ihrer Dozent:innen ausweiten können, ist positiver Nebeneffekt der Digitalisierung. „Ich war kein Freund von Online-Veranstaltungen, heute sehe ich sie als Bereicherung“, sagt Volker. Er hantiert jetzt begeistert mit mehreren Devices und Nicknames gleichzeitig, um Lehr-Tools zu bewerten und die Gestaltung von Kursen den neuen technischen Möglichkeiten anzupassen.

ZUVERLÄSSIGE DIENSTE STARK GEFRAGT

QUICK FACTS



31 Kurse



61 Kurstage



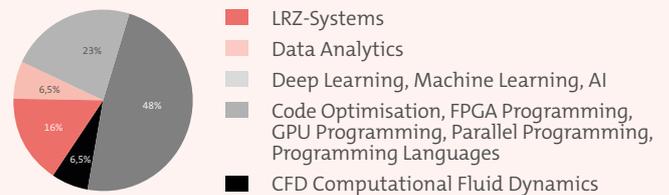
1.242 Teilnehmer:innen

TRAININGSPARTNER

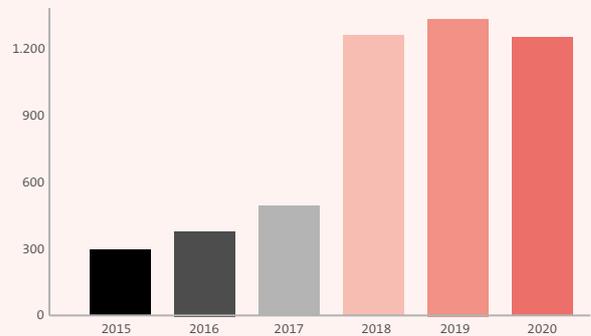


- CADFEM** CADFEM GmbH
- CSC** IT Center for Science Ltd., Finnland
- DU** NVIDIA Deep Learning Institute
Essential Data Science Training GmbH
- GCS** Gauss Centre for Supercomputing
- IT4I** IT4Innovations, Tschechien
- TUM** Technische Universität München
- PRACE** Partnership for Advanced Computing in Europe
- RRZE** Regionales Rechenzentrum Erlangen
- VI-HPS** Virtual Institute – High Productivity Supercomputing
- VSC** Vienna Scientific Cluster, TU Wien, Österreich

THEMENGEBIETE HPC + FUTURE COMPUTING



ENTWICKLUNG TEILNEHMER:INNEN HPC UND FUTURE COMPUTING-KURSE SEIT 2015



Eine Gesamtübersicht über alle Kurse 2020 finden Sie auf S. 118ff

ONLINE LEHREN UND LERNEN

Corona zwingt das Leibniz-Rechenzentrum 2020 zur Digitalisierung seines Kursprogramms. Und siehe da: Die Zahl der Teilnehmenden wächst, Dozent:innen vermitteln Wissen aus und in alle Welt.

Ein jäher Abbruch: Kaum hatte Dr. Volker Weinberg, Leiter der Aus- und Weiterbildung am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), seine einwöchige Schulung zum High Performance Computing (HPC) an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) gestartet, da war schon wieder Schluss. Corona war in Bayern angekommen, alle Beteiligten sollten sofort den Kursraum verlassen. Am 11. März wurden von Amts wegen alle Präsenzveranstaltungen an Universitäten und Hochschulen gestoppt. Noch im Hotelzimmer begann Weinberg, Kurse zu verschieben oder abzusagen. Doch die Seminare rund ums Supercomputing vollständig ausfallen lassen, das wollten weder der LRZ-Dozent noch seine Kolleg:innen. So beschäftigten sie sich intensiv mit Videokonferenz-Software, probierten Programme und Tools für Online-Lehre aus, suchten Wege, den Stoff digital ansprechend zu präsentieren und Teilnehmende aktiv miteinzubeziehen. „Acht Stunden im Home Office vor einem Bildschirm zu sprechen, ist sicher kein Kinderspiel“, sagt LRZ-Dozent Dr. Juan Durillo Barrionuevo, Spezialist für Verfahren der Künstlichen Intelligenz (KI). Weil das umgekehrt auch für Lernende anstrengend ist, wurden Unterrichtseinheiten gekürzt, bald mehr Dozent:innen an den Online-Kursen beteiligt, die neben der Präsentation des Stoffes Fragen in Chats beantworteten, Diskussionen moderierten oder Übungen in Arbeitsgruppen steuerten.

BREITES ANGEBOT DURCH PARTNERSCHAFTEN

Programmiersprachen, das Arbeiten mit parallelen Rechensystemen, der Umgang mit Künstlicher Intelligenz: Das Seminar- und Kursangebot des LRZ basiert auf Partnerschaften und einem internationalen Stamm an erfahrenen Dozent:innen. Das LRZ kooperiert mit dem Gauss Centre for Supercomputing, der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) und akademischen Rechenzentren sowie mit Technologie-Anbietern.

SMARTE METHODEN FÜR DIE DATENANALYSE

Nach wenigen Wochen stand das neue, leicht abgespeckte Schulungsprogramm. „Wenn es um Online-Lehre ging, war ich bislang eher zurückhaltend“, gibt Weinberg offen zu. „Aber nach den ersten Kursen sah ich sie als Bereicherung, wir konnten damit den Kreis der Dozent:innen ausweiten und deutlich mehr Teilnehmende im Ausland gewinnen.“ Corona brachte die internationale HPC-Community enger zusammen. Interessierte aus 34 Ländern meldeten sich an. Das LRZ vertiefte für die Online-Seminare bestehende Kooperationen mit Partnerorganisationen wie dem Gauss Centre for Supercomputing (GCS), der Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) oder dem Deep Learning Institute (DLI) von NVIDIA und engagierten Dozent:innen aus europäischen HPC-Zentren und aus den USA.

Trotz des Lockdowns im März richtete das LRZ 2020 an 61 Tagen insgesamt 31 Schulungen aus, an denen 1.242 Studierende und Forscher:innen teilnahmen. Allein zehn Kurse oder 32 Prozent des Programmes widmeten sich den Themen Künstliche Intelligenz (KI), insbesondere



dem Maschinellen Lernen (ML) oder dem tiefen oder Deep Learning (DL): Neben der Einführung in die KI-Ressourcen des LRZ standen vor allem das Programmieren und Konfigurieren von Beschleunigern wie Graphic Processing Units (GPU) sowie Trainings von ML-Systemen zur Auswertung von Massendaten im Lehrplan: „Wie die Industrie setzt auch die Wissenschaft immer öfter bei der Datenanalyse auf Verfahren der KI, des maschinellen und des tiefen Lernens“, berichtet Dr. Momme Allal, HPC-Spezialist am LRZ. „In den Supercomputern kommen dafür neben den klassischen Central Processing Units oder CPUs jetzt auch GPUs zum Einsatz. Und um diese Beschleuniger besser nutzen zu können, brauchen Anwender:innen Programmiersprachen wie CUDA oder Open ACC.“

KURSYNHALTE AUF BEDÜRFNISSE ZUGESCHNITTEN

Die LRZ-Dozent:innen sind auf die neuen Kursinhalte vorbereitet. Ein Teil von ihnen wurde von Chip-Hersteller NVIDIA – Anbieter auch von GPUs speziell für Verfahren von KI – als „University Ambassador“ zertifiziert. „Die Wünsche der Kursteilnehmenden sind unterschiedlich“, beobachtet Dozent Durillo. „Zu uns kamen Leute, die von KI gehört haben und wissen wollten, wie sie die Methoden für ihre Forschung nutzen können, oder solche, die damit praktische Probleme lösen wollten, also etwa Screening-Daten aus der Medizin mit

Bildererkennung auswerten, statistische Analyseverfahren anwenden oder selbst entwickeln.“ Auf alle diese Wünsche einzugehen, fällt schwer. Daher wurden die Online-Seminare nach jedem Durchlauf und anhand des Feedbacks von Lernenden stärker auf deren Wünsche und vor allem Vorkenntnisse zugeschnitten. Die Online-Schulungen verschwinden sicher nicht mehr aus dem Seminarprogramm des LRZ. Auch wenn sie einen höheren personellen Aufwand erfordern, lassen sich durch sie mehr Menschen für Methoden des Supercomputings ansprechen, außerdem können damit Spezialist:innen aus aller Welt ihr Wissen vermitteln. Doch gerade die mehrtägigen Seminare dienen der Vernetzung von Wissenschaftler:innen. Zwar ersetzt das LRZ den Besuch im Biergarten und gemeinsame Essen durch virtuelle Events, trotzdem gingen während Übungen und in den Pausen persönliche Kontakte verloren. „Die Mischung macht’s“, meint Weinberg. „Nach der Pandemie werden wir sicher Präsenz- mit Online-Angeboten mischen. Bei allen Möglichkeiten, die Online-Seminare bieten, freu’ ich mich jetzt schon auf meinen ersten Kurs im Hörsaal.“



AUSBILDUNG IM HOME OFFICE

Lehre digital: Neuerdings pauken die Auszubildenden des LRZ die Theorie online – und gestalten Videos und andere Medien zum Lernen selbst mit.

AUSBILDUNG IM HOME OFFICE

Lernen fürs (Berufs)Leben: Auch die fünf Auszubildenden am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) wurden mit dem Lockdown im März 2020 ins Home Office geschickt, die Berufsschule fand digital statt. So lernte das Quintett neben praktischem und theoretischem Fachwissen eine Menge über Selbstorganisation und Motivation.

Der angehende Systemelektroniker Markus hat sich mit Geräten vom LRZ ein „kleines, aber schönes Homeoffice“ eingerichtet. Virtuelles Lernen, erzählt er, sei „eine schöne Abwechslung und Herausforderung: Ob es besser oder schlechter ist, kann ich gar nicht sagen. Mit der Zeit gehen mir aber die Kollegen und das persönliche Miteinander ab.“ Die praktischen Wartungsarbeiten bei LRZ-Kunden wie den Münchner Universitäten nahmen in Corona-Zeiten ab, stattdessen lernten die Auszubildenden online und per Videoübertragung zuhause. Dafür produzierte das Ausbildungsteam mit den Fachverantwortlichen eigens Videos für die Moodle-Lernplattform. Regelmäßig bekamen die Auszubildenden neuen Lese- und Lernstoff in Form von Moodle-Fragebögen, die danach in Video-Konferenzen wiederholt, diskutiert und vertieft wurden.

Das Pensum war anspruchsvoll: „Das Lernmodul ‚Linux‘ wurde komplett auf die virtuellen Dienste des LRZ umgestellt und von allen Auszubildenden zwei Wochen lang jeweils vier Stunden am Tag erfolgreich absolviert“, berichtet Ausbildungskoordinatorin Petra Gärtner. Verständnisprobleme wurden dabei per Chat oder am Telefon aus dem Weg geräumt.

Auch Berufsschulen unterrichteten digital: „Wir bekamen Arbeitsblätter zum Durcharbeiten“, erzählt Björn, der am LRZ für den Fachinformatiker Systemintegration paukt. „Ich lerne im Homeoffice besser“, erkannte er schnell. „Muss nicht so früh aufstehen und kann länger schlafen. Allerdings lasse ich mich zuhause leichter von Anderem ablenken.“ Zwar konnten die Auszubildenden zuhause Aufgaben und Zeit selbst einteilen, doch sie vermissen Kollegen und Abwechslung. Nach der Aufhebung der Ausgangsbeschränkungen im Sommer konnten sie zumindest im LRZ wieder in der Übungswerkstatt, an realen Netzen und Computern trainieren: „Zuhause kann ich wenig praktisch arbeiten, dafür programmiere und dokumentiere ich dort mehr“, berichtet Markus. „Nur vor dem Bildschirm zu sitzen, war ganz schön ungewohnt und anstrengend für mich, da musste ich mich oft selbst motivieren, weiterzumachen.“

Pausen halfen, Sport, Rausgehen, auch Musik oder ein Chat mit Freunden. Und für die Digitalisierung oder künftige Remote-Arbeit sind die Fünf jetzt sehr gut gerüstet.



#wirbildenaus

Alessandro Podo Mit dem Mann bilden wir aus

Alessandro Podo hat am LRZ IT-Systemelektroniker gelernt und gehört zum Ausbildungsteam, das seine Aufgaben in Corona-Zeiten digitalisierte: „Als Ausbilder sitze ich normalerweise nah dran und sehe die Probleme mit den Aufgaben. Das geht im Homeoffice nicht.“ Videokonferenzen können Gespräche nicht ersetzen, aber die Lehre funktioniert trotzdem. Wenigstens an einem Tag pro Woche wird zumindest an den LRZ-Systemen praktisch geübt, Switches einzubauen und Kabel zu ziehen. Theorie wird online gepaukt: Das Team hat auf der Moodle-Plattform Inhalte in 15minütige Videos umgesetzt. „Wir fragten die Azubis, was sie wie am besten lernen und haben danach gefilmt. Die Videos helfen, Manpower einzusparen.“ Künftig sollen LRZ-Auszubildende mit den Kolleg:innen Praxis-Wissen aufbauen, Basiswissen aber digital lernen. Das möglichst spielerisch: Dafür testeten sie Gamification-Tools für Moodle, etwa für Wissens-Battles oder Lern-Quiz. Die Lernergebnisse der Corona-Zeit werden ausgewertet, um die digitale Lehre am LRZ optimieren zu können. Das gehört sich so in einem wissenschaftlichen Rechenzentrum.

NEUARTIGE PROZESSOREN IM PRAXISTEST

Innovative Computertechnologie erforschen: Das LRZ ermöglicht das mit der neuen Testumgebung BEAST. Studierende der beiden Münchener Universitäten können in einem Praktikum lernen, wie sie Prozessoren programmieren und deren Leistung pushen oder die Einsatzmöglichkeiten bewerten können.

Andere Computerarchitekturen und Prozessoren kennenlernen: Damit schürt die Testumgebung BEAST am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) Neugierde. Informatik-Studierende können sich beim BEAST-Praktikum ein Bild von den darin installierten AMD-, Marvell- und Fujitsu-Prozessoren (CPU) machen, die bei der Datenverarbeitung durch Grafikprozessoren (GPU) von AMD oder NVIDIA unterstützt werden: „BEAST bietet aktuellste Software und einen Zugang zu unterschiedlichsten Systemen, das ist für mich sehr spannend“, meint Sergej Breiter, Masterstudent der LMU und Absolvent des Praktikums.

Mit diesen Prozessoren werden zurzeit Supercomputer ausgestattet. Auch deshalb interessieren sich Studierende für das Praktikum, das TUM und LMU mit dem LRZ im Wintersemester 2020/21 organisierten. Insgesamt 26 Informatik-Studierende nahmen daran teil. In zwölf Einheiten von November bis Februar lösten sie praktische Aufgaben an den Steuereinheiten von BEAST sowie an Rechenknoten des SuperMUC-NG von Intel. „Ziel des BEAST-Praktikums ist, Hochleistungs-Computertechnologien, Rechnerarchitekturen und Speicherhierarchien auszuprobieren, diese mit Programmiersprachen und Software zu konfrontieren und die Erfahrungen zu vergleichen“, erklären die Dozenten Dr. Karl Furlinger (LMU) und Dr. Josef Weidendorfer (TUM), der das Programm „Future Computing“ am LRZ leitet. Nebenbei standen Präsentationen von Herstellern auf dem Programm, die Einblicke in Strategien vermittelten und Bau- oder Funktionsweisen erklärten.



HARDWARE NOCH BESSER KENNENLERNEN

Bei den Informatik-Studierenden kommt diese Mischung aus Praxis und Theorie gut an: Sie testeten die Prozessoren mit Programmiererweiterungen wie OpenMP, CUDA und anderen von Herstellern empfohlenen Anweisungen und versuchten, auf den Systemen Speicher- und Rechenfunktionen zu beschleunigen. „Am meisten Spaß machte die Recherche von Hinweisen, wie die Systeme am besten zu programmieren und wie Performanceprobleme zu beheben sind“, erzählt Breiter. Jeder Eingriff musste dokumentiert, jeder Arbeitsschritt der Systeme gemessen und verglichen werden. „Das Tempo von dem AMD Rome-System war gigantisch, schon ohne Optimierungen der Codes war es schnell, und wir konnten es deutlich beschleunigen“, erzählt Ludwig Kratzl, Fachinformatiker

Anwendungsentwicklung und im 5. Semester Informatik an der TUM. Sein Kommilitone Maximilian Bauregger ergänzt: „Mich hat überrascht, dass es keinem von uns gelungen ist, die volle Leistung des sehr speziellen Fujitsu-Prozessors abzurufen.“

Vier Systeme mit diversen Variablen auf Herz und Nieren zu testen, ist aufwändig – und liefert Daten in großen Mengen: Arbeitsgruppen stellten vor jeder Studieneinheit ihre Erfahrungen mit den Systemen zur Diskussion. „Meistens arbeiten wir mit Intel-Prozessoren“, sagt Kratzl. „Das BEAST-Praktikum hat meinen Horizont erweitert und mir viele Kriterien vermittelt, Computersysteme besser einschätzen zu können.“ Auch Bauregger hat davon profitiert: „Ob ich so viele andere Systeme in meinem Berufsleben kennenlerne, ist eher unwahrscheinlich. Diese Erfahrungen helfen, Leistungskriterien hinterfragen zu können.“

NEUE SYSTEME PUSHEN

So unterschiedlich die Systeme, so unterschiedlich die Vorkenntnisse der Teilnehmenden. Im BEAST-Praktikum saßen Master- und Bachelor-Studenten zusammen. „Alle sind mit der recht hohen Komplexität gut zurechtgekommen“, berichtet Dozent Furlinger, durchaus überrascht. „Es handelt sich um neue Hardware mit nicht immer ausgereifter Software, bei der nicht immer alles reibungslos funktioniert.“ Daher lief's im Praktikum nicht ständig rund – „wir haben erst beim Machen gemerkt, was zur Bewältigung von einigen Aufgaben fehlte“. Spannend für Furlinger und Weidendorfer sind die Beobachtungen zum Umgang mit der Technik: Trotz gleicher Aufgaben unterschieden sich die Messwerte der Studierenden. Ob das im nächsten Praktikum wohl bleibt? Dass der Prozessor von Fujitsu, der im Supercomputer Fugaku in Tokio arbeitet, Zeit zum Einarbeiten verlangt, ist ein Detail, das die Planung von Supercomputern beeinflussen dürfte. „Bei den BEAST-Systemen auch mit GPU funktionierte oft das offene OpenMP zur Programmierung besser, auch wenn die empfohlenen Programmiermodelle etwas mehr herausholen“, berichtet Weidendorfer. Diese Erkenntnis dürfte nicht nur Dozent:innen interessieren.



EFFIZIENTE HILFE BEIM SUPERCOMPUTING

Mentor:innen des LRZ begleiten wissenschaftliche Berechnungen am SuperMUC-NG. So kann Rechenzeit effizienter genutzt werden und Projekte erreichen schneller ihr Ziel

Radarsatelliten nehmen auch bei Wolken Bilder von der Erde auf. Dazu schicken sie ihre Signale zur Erde und empfangen deren Echo. Durch komplexe Prozesse entstehen so Bilder, die aus Millionen von Pünktchen Strukturen auf der Oberfläche zusammensetzen. Sie machen Straßen erkennbar, Grünflächen, sogar unterschiedlich hohe Bauten. Aus Massen dieser Bilder erstellt ein Team um die Datenwissenschaftler:in Professor Xiaoxiang Zhu und Dr. Yuanyuan Wang am SuperMUC-NG dreidimensionale Stadt- und Gebäudemodelle für die Technische Universität München und für das Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt. Damit wird die Urbanisierung erforscht. „Die größte Herausforderung bei unserem Projekt ist die Speicherung von Petabyte an Daten“, erklärt Wang.

Hilfe bei High Performance Computing- oder HPC-Projekten bietet jetzt ein Mentoring-Programm des Gauss Centre for Supercomputing (GCS), zu dem das LRZ gehört. „Rechenzeit und Supercomputing-Ressourcen sind wertvoll, wir möchten, dass sie effizient ausgenutzt werden“, erklärt Dr. Gerald Mathias, der den Computational X Support am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) leitet. „Deshalb betreuen wir Rechenprojekte seit Ende 2019 intensiv und stellen den Forschenden eine:n Ansprechpartner:in zur Verfügung.“ Etwa bei der Hälfte der Rechenprojekte am SuperMUC-NG, die durchaus Jahre dauern, kommen Fragen zu Software und Codes oder zum Umgang mit riesigen Datensätzen auf.

Alle 6.480 Rechenknoten des SuperMUC-NG mit einem Algorithmus anzusprechen, das ist eine Kunst für sich: „Bei Anwender:innen stehen Simulationen und Daten im Vordergrund, nicht unbedingt Computertechnik“, meint Matthias. „Sie sind ja in erster Linie Wissenschaftler:innen, die für ihre Projekte Applikationen entwickeln.“

OPTIMIEREN, BERATEN, NACHFRAGEN

So benötigte Wang Rat zur Datenspeicherung: Um Unschärfen oder das Signal-Rausch-Verhältnis auf Radarbildern auszugleichen, durchlaufen diese vor der eigentlichen Auswertung Filter, werden dabei automatisiert optimiert und bei Bedarf noch durch weitere Informationen ergänzt. Selbst Supercomputer geraten da schnell an Grenzen. Der Mentor des Projektes am LRZ, der promovierte Seismologe André Kurzmann, öffnete das neue System Data Science Storage zur Auslagerung von Bild- und Simulationsdaten. Die Mentor:innen helfen außerdem bei der Optimierung und Implementierung von Algorithmen, öffnen die Türen zu anderen LRZ-Teams, etwa wenn Forschende Verfahren von Künstlicher Intelligenz benötigen, wenn es um die Katalogisierung und Suchbarkeit von Forschungsergebnissen geht oder Simulationen visualisiert werden sollen: „Als Mentor schaue ich, wie das Projekt vorankommt, und frage nach, wenn lange nichts passierte“, berichtet Kurzmann. „Viele unserer Nutzer:innen scheuen sich, selbst auf uns zuzugehen. Die Gefahr ist groß, dass dann Rechenzeit nicht aufgebraucht und Projekte abgebrochen werden.“

Das Mentoring verkürzt diesen Weg. Kurzmann und seine Kolleg:innen sind von Anfang an in die Projekte involviert, können HPC-Software für die geplanten Berechnungen oder Strategien zur Bearbeitung von unstrukturierten Daten empfehlen, unterstützen bei technischen Fragen oder klären Details zum Rechenzeit-Antrag und dessen Verlängerung. Neben Astrophysik, Medizin, Natur- und Ingenieurwissenschaften

sind im Team diverse Disziplinen vertreten, nach Möglichkeit werden Projekt und Mentor:in fachspezifisch zusammengeführt.

Das Projekt von Zhu und Wang startete 2017, inzwischen liegen die ersten 3D-Stadtmodelle vor und werden bearbeitet und näher erforscht: „Durch den direkten Ansprechpartner am LRZ können wir Probleme schneller an die Person adressieren, die für eine Lösung

sorgt“, sagt Wang. Nebeneffekt des Mentorings: Die Kontakte vertiefen sich, neue Verbindungen werden geschaffen. „Über André Kurzmann haben wir neue Kooperationen mit dem LRZ aufgebaut, er ist als wissenschaftlicher Berater auch in unserem ERC-Projekt So2Sat tätig und nimmt am jährlichen Projekttreffen teil.“



#HPC4Science

Nisarg Patel

Dieser Mann lastet die Supercomputer voll aus

Nisarg Patel ist Luftfahrt-Ingenieur und hat sich auf Simulationen spezialisiert. Am LRZ ist er Teil des High-Performance Computing- oder HPC-Teams von rund 25 Spezialisten verschiedener Wissenschafts-Bereiche. "Wir helfen Forschern bei der Integration, Parallelisierung und Optimierung von Codes auf den HPC-Systemen wie SuperMUC-NG und CoolMUC. Mit dem Angebot von rund 3 Milliarden CPU-Stunden pro Jahr wollen wir den wissenschaftlichen Horizont in Deutschland und Europa erweitern". Das HPC-Team hat dazu etwa 400 Open-Source- und kommerzielle Programme in petto. Obwohl Codes schnell installiert sind, braucht es Erfahrung und Optimierung bis jeder der 6480 Computerknoten des SuperMUC-NG oder die 960 Knoten des CoolMUC-2 beschäftigt sind, und so kann es manchmal bis zu einem Jahr dauern, bis die Supercomputer mit einem Code ausgelastet werden. "Weil wir am LRZ mit Forschern aus ganz Europa zusammenarbeiten, gehört Remote zum Alltag." Corona änderte nicht die Arbeitsweise im HPC-Team, brachte aber neue Forschungsprojekte ins LRZ. Und das Team wurde durch Hacking herausgefordert, schließt nun Schlupflöcher und sucht nach neuen Plug-ins für die Forscher.



PROFESSOR
FRANCESCO KNECHTLI

**KURZE REAKTIONS-
ZEIT FÖRDERT
DAS PROJEKT**

”

Der Physiker
 Prof. Francesco Knechtli
 und sein Team an der
 Universität Wuppertal
 beschäftigen sich mit der
 Quantenchromodynamik
 oder dem Aufbau von
 Hadronen aus Elementar-
 teilchen und berechneten
 deren Energiespektrum
 am SuperMUC-NG.

Was haben Sie berechnet oder modelliert?

Prof. Francesco Knechtli: Unser Projekt befasst sich mit Hadronen, die aus einem Charm-Quark-Anti-Quark-Paar bestehen, das Charmonium. Wurde in Berechnungen des Energie-Spektrums die Paar-Vernichtung bisher vernachlässigt, rechnen wir diese Beiträge direkt aus, indem wir die Technik der Destillation für die Quarkfelder optimieren.

Wie hat Sie das HPC-Team dabei unterstützt?

Knechtli: Wir analysieren Zehntausende von Konfigurationen der Gluonfelder. Um die verschiedenen Quantenzahlen zu rechnen, benötigen wir immens viel Arbeitsspeicher. André Kurzmann half uns auch bei der Abwicklung der Simulationen.

Welche technischen Probleme konnten Sie lösen?

Knechtli: Kleinere Simulationen wurden gebündelt, um den Durchsatz von größeren Jobs zu erhöhen. Durch mehr Arbeitsspeicher konnten wir die Vorteile der Destillation voll auszunutzen. Das Projekt erhielt Zugang zum Data Science Archive und wir konnten Konfigurationen aus dem JUWELS-Supercomputer in Jülich zum SuperMUC-NG kopieren.

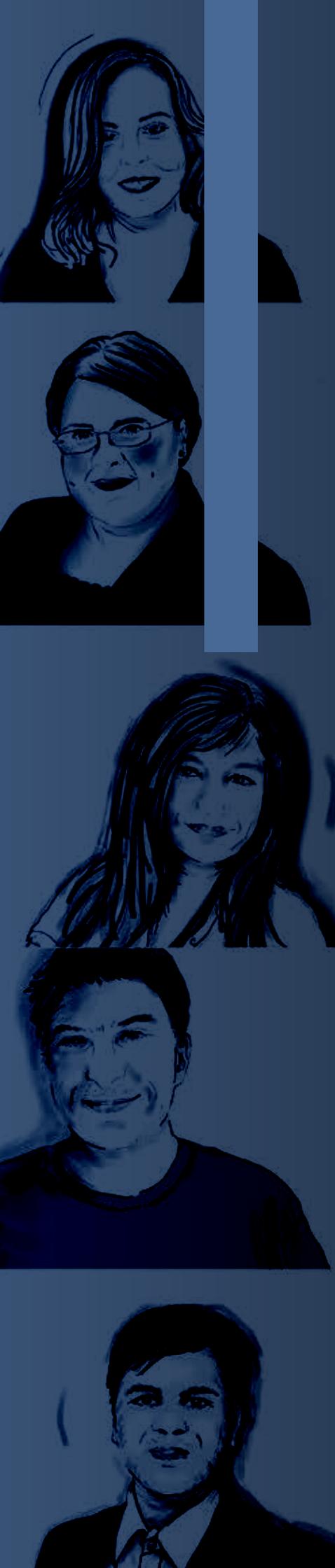
Puscht das Mentoring die Projekte? Wie?

Knechtli: Die kurze Reaktionszeit auf Fragen hat das Projekt gefördert.

Wie weit ist Ihr Projekt gediehen?

Knechtli: Die Paar-Vernichtung von Charm-Quarks und Anti-Quarks trägt zur Masse des Charmoniums bei. Mit unseren Rechnungen ist es gelungen, diesen Effekt das erste Mal direkt zu berechnen, allerdings mit halb so schweren Charm-Quarks. Jetzt optimieren wir die numerischen Algorithmen, um in Zukunft das Charmonium wie in der Natur berechnen zu können.





06

MENSCHEN

#LRZamhalten	88
Wechsel ans LRZ	90
Arbeiten am LRZ	92
In tiefer Trauer	96

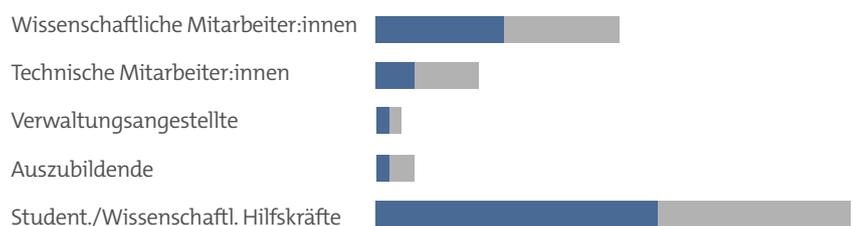


#LRZamhalten

TEAMARBEIT MIT WIR-GEFÜHL

Innerhalb weniger Tage mehr als drei Viertel 260 Beschäftigten zum Arbeiten nach Hause schicken: Corona forderte nicht nur die IT-Spezialist:innen des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ), sondern auch die Abteilungen Zentrale Dienste und Personal. Sie sorgten für die passende Ausrüstung zur Heimarbeit und bauten außerdem die Kommunikationskanäle auf, die gewohnte Kaffeegespräche unter Kolleg:innen ersetzen und das Miteinander selbst in Distanz fördern. So liegt jetzt eine Playlist mit den Motivations-Songs von LRZ-Beschäftigten vor, dadurch formte sich sogar ein Chor und wir feierten zusammen stimmungsvoll Weihnachten. Das neue Wir-Gefühl am LRZ – eine gute Grundlage für Engagement, Leistung, Qualität.

ZU- UND ABGÄNGE





Es macht mich glücklich, dass es am LRZ offensichtlich eine hohe Zufriedenheit und einen guten Zusammenhalt im Team gibt.

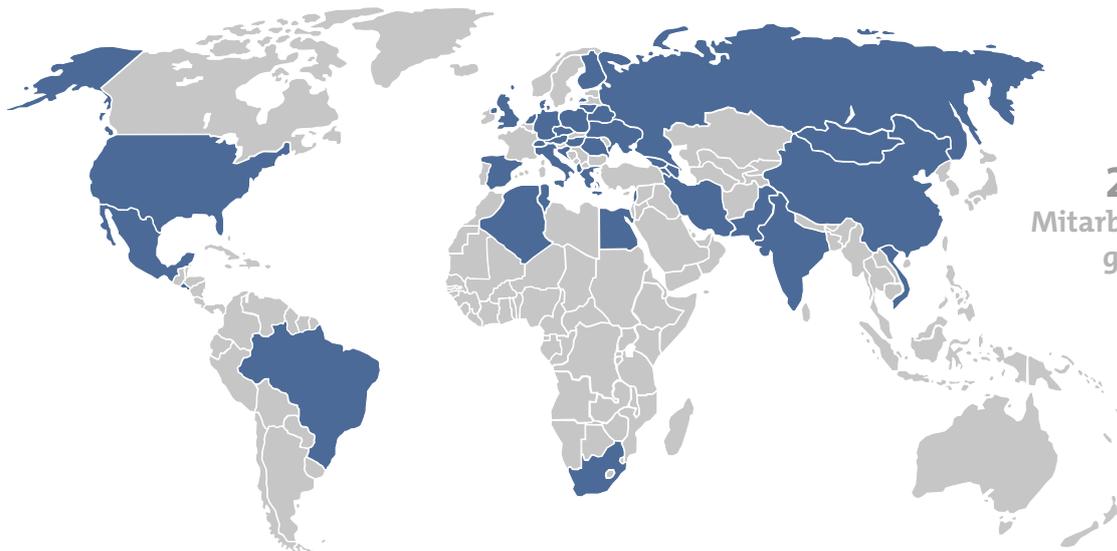
Sabine Osorio,
Leiterin Personal LRZ

#Dahoambleibm

Diese Musik hat uns durch die Pandemie begleitet. Einfach mal reinhören in unsere LRZ-Playlist



HIER KOMMEN UNSERE MITARBEITER:INNEN HER



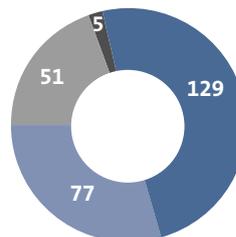
262
Mitarbeiter:innen
gesamt

Zugänge 37

Abgänge 32



MITARBEITER:INNEN IN ZAHLEN



- Wissenschaftl. Mitarbeiter:innen
- Technische Mitarbeiter:innen & Verwaltungsangestellte
- Student./Wissenschaftl. Hilfskräfte
- Auszubildende



DR. JÜRGEN SEIDL

**ICH KONNTE MIR
SOFORT VORSTELLEN,
HIER GERNE
ZU ARBEITEN** ”

Seit 1. Oktober 2020 leitet Dr. Jürgen Seidl die Abteilung Zentrale Dienste des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). Der promovierte Historiker wechselte von der Bayerischen Staatsbibliothek (BSB) ans LRZ. Seidl hat in seiner Doktorarbeit die Unternehmensgeschichte von BMW ergründet. Er startete seine berufliche Karriere bei der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAdW) und ging von dort zur BSB. Hier beschäftigte sich der Historiker zunächst mit klassischen Bibliotheksarbeiten, bevor er Aufgaben in der Verwaltung übernahm. Zuletzt leitete Seidl bei der Stabi das Referat Finanzen in der Querschnittsabteilung Zentrale Administration. Privat mag der neue LRZ-Kollege und Familienvater Brettspiele, Eishockey und Fußball – zum besseren Kennenlernen ein paar Fragen:

Was zieht Sie ans LRZ?

Dr. Jürgen Seidl: In erster Linie waren der hervorragende Ruf des LRZ und die sehr guten Erfahrungen meiner früheren Dienststelle, der Bayerischen Staatsbibliothek, mit dem LRZ ausschlaggebend für meine Bewerbung. Nach dem Bewerbungsgespräch konnte ich mir sofort gut vorstellen, hier gerne zu arbeiten.

Worauf freuen Sie sich ganz besonders?

Seidl: Auf viele nette, neue Kolleginnen und Kollegen sowie spannende Herausforderungen. Der erste Vorgeschmack, den ich bereits in den Wochen vor meinem Start gewinnen konnte, ist sehr positiv. Wir haben vorab schon viele Dinge ganz unbürokratisch klären können, von der Arbeitsplatzausstattung bis zur LRZ-Mundnasebedeckung mit dem „Stay Safe“-Aufdruck.

Was treibt Sie an?

Seidl: Der Wunsch, die gestellten Aufgaben mit der richtigen Priorisierung möglichst gut zu lösen, aber manchmal einfach eine gute Tasse Kaffee mit leckerer Schokolade.

Mit wem aus der Computer-, Internet-, IT-Szene würden Sie gerne mal diskutieren – und warum?

Seidl: Mit Dietmar Hopp, SAP-Mitgründer und Inves-

tor, der außerdem Projekte in Bildung, Soziales, Medizin und Sport fördert und den Fußballverein TSV 1899 Hoffenheim mitfinanzierte. Neben Fragen zur ethischen Verantwortung in der Informationstechnologie, würde ich gerne mehr über sein großes gesellschaftliches Engagement erfahren. Da ich auch ein großer Sportinteressierter bin, nähmen der Fußball und das Eishockey sicher großen Raum in diesem Gespräch ein.

Welche Funktion müsste für Computer/Smartphone dringend erfunden werden?

Seidl: Eindeutig das mobile Beamen. Damit könnte ich mir die tägliche Zugfahrt aus dem bayerischen Oberland nach Garching und anderswohin sparen.

Und auf welche könnten Sie gerne verzichten

Seidl: Nicht essenzielle Cookies oder die Tatsache, dass ich beim Surfen im Internet kaum oder nur schwer noch Kontrolle über meine eigenen Daten behalten kann.

Was entspannt Sie?

Seidl: Zeit zuhause auf der Terrasse mit der Familie, am liebsten bei einem spannenden Brettspiel. ■

Corona fördert die Digitalisierung in Deutschland und damit auch das Arbeiten im Home Office:

Auch am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) arbeitete der größte Teil der 260 Beschäftigten im Corona-Jahr zuhause. Sie konferierten per Video mit Kolleg:innen oder chatteten auf dem eigens eingerichteten RocketChat-Kanal „LRZamhalten“. 94 Prozent der Mitarbeitenden beurteilen die Corona-Maßnahmen des LRZ als gut, 91 Prozent sahen das wissenschaftliche Rechenzentrum als gut gerüstet für die Pandemie, so das Ergebnis einer Umfrage: „Dass die Ergebnisse so positiv waren, hat mich überrascht“, freut sich Sabine Osorio, Leiterin der LRZ-Personalabteilung. „Das LRZ ist offensichtlich für viele ein guter Platz zum Arbeiten, das macht mich schon ein bisschen glücklich.“ Im Interview resümiert Osorio 2020 als „arbeitsreiches und aufreibendes Jahr“ für ihr Team:

Welches Umfrageergebnis ist aus Sicht der Personalabteilung das wichtigste?

Sabine Osorio: Die Antworten zeigen, dass sich rund 80 Prozent der Beschäftigten im Home Office vom LRZ gut informiert fühlten, und auch in Teams und Abteilungen lief die Kommunikation gut. Es wurde viel bei RocketChat gepostet, einige virtuelle Kaffeerunden waren gut besucht. Bei der Kommunikation haben wir während des Lockdowns offensichtlich viel richtig gemacht. Mehr als 80 Prozent der LRZler:innen sind mit der technischen Ausstattung im Home Office zufrieden. In dieser Hinsicht freuen mich die Ergebnisse sehr, allerdings gibt es einige Themen, in denen wir besser werden können.

Wo denn?

Osorio: Die Arbeitszeit- und Urlaubserfassung muss digitaler werden, es müsste Möglichkeiten geben, im Home Office Urlaub beantragen und Arbeit elektronisch erfassen zu können. Dazu brauchen wir Technik, und das fordert im Personalbereich Planung, Absprachen, neue Regeln. Das umzusetzen wird noch dauern.

Was hat Dich am meisten überrascht bei der Umfrage?

Osorio: Dass die Ergebnisse zu allen Fragen so positiv waren. Ehrlich gesagt – ich hatte mit mehr Leuten gerechnet, die sich im Schutz einer anonymen Umfrage beklagen. Die Antworten lassen aber auf eine hohe Zufriedenheit, einen guten Zusammenhalt und viel Verständnis schließen. Dass das LRZ offensichtlich für viele ein guter Platz zum Arbeiten ist, das macht mich schon ein bisschen glücklich.

Das Home Office kommt bei Neulingen wie bei Routiniers gut an – wird das mobile Arbeiten nach Corona am LRZ verstetigt oder sogar ausgeweitet?

Osorio: Das wird die Leitung des LRZ und der Personalrat diskutieren, die Personalabteilung liefert dazu Input und mögliche Szenarien. Persönlich kann ich mir nicht vorstellen, dass wir in punkto Home Office vollständig zu Vor-Corona-Zeiten zurückkehren. Mobiles Arbeiten erfordert modifizierte Regelungen, dafür werden Dienstvereinbarungen überarbeitet werden müssen. Vor allem aber muss das mobile Arbeiten organisatorisch intensiv überdacht werden. Unterneh-

Sabine Osorio



**DAS LRZ IST
FÜR VIELE EIN
GUTER PLATZ
ZUM ARBEITEN**



INTERVIEW

men wie Twitter, Google, Facebook schickten im März ihre Belegschaften nach Hause und wollen sie erstmal dort belassen. Andererseits geben Erfahrungen von Yahoo zu denken, wo 2013 die Arbeitszeit im Home-Office für Beschäftigte wieder beschränkt wurde, weil es in den Teams an Abstimmung fehlte. IBM und weitere Unternehmen folgten diesem Beispiel. Das sollten wir diskutieren.

Was war neben Corona 2020 für die Personalabteilung wichtig?

Osorio: Persönlich wie organisatorisch war sicher der Tod von Monika Bernhardt, Leiterin Zentrale Dienste, ein sehr einschneidendes Erlebnis und ein großer Schock. Sie war ein knappes Jahr bei uns, hatte so viele Pläne. Das war sehr, sehr traurig. Fachlich gab es durch Corona viel zu tun: Allein bis Mitte November beantworteten wir insgesamt 9720 Anfragen oder Eingaben. Zu zweit. Knapp 200 pro Woche. Vom Adressenwechsel über Krankmeldungen und Tarif- sowie Ausbildungsthemen waren sehr viele Beratungen in persönlichen oder Führungsfragen darunter. Außerdem haben wir 254 Bewerbungen und 15 Austritte gemanagt, 75 Job-interviews geführt, 17 Assistant Students eingestellt. Dazu kommen noch in einem hohen dreistelligen Bereich die diversen Meldungen an das Landesamt für Finanzen, zu denen wir verpflichtet sind, sowie mehrere hundert interner Abwesenheitsmeldungen. Es war ein aufreibendes und arbeitsreiches Jahr für uns.

Hast du trotzdem einen persönlichen Meilenstein erreicht?

Osorio: Oh ja – wir haben alle Personalprozesse dokumentiert und aktualisiert. Seit meinem Einstieg am

LRZ 2018 versuche ich die Informationen zur Personalarbeit an einem Ort zu konzentrieren. Wir haben die Angaben zu Ausschreibungs- und Bewerbungsprozess, zu Kündigungen, Verträgen und mehr vereinheitlicht und verständlicher formuliert. Es gab Abstimmungsbedarf mit Abteilungen und Vieles haben wir nebenbei hinbekommen. Diese Arbeit hat sich gelohnt, und ich bin stolz darauf. Jetzt bin ich gespannt auf Feedback und auf Fragen, mit denen wir an den Inhalten feilen können.

Wie sehen die Personalstrategien und Pläne für 2021 aus?

Osorio: Dazu stimmen wir uns mit Personalrat und Institutsleitung ab. Fachlich und persönlich am Herzen liegt mir das Thema Diversität und die bessere Sichtbarkeit von Beschäftigten, die keine Männer sind. Als Frau in der Frauendomäne Verwaltung beobachtete ich leider oft, welche Probleme Kolleginnen in der Männerdomäne IT haben. Das muss sich ändern. Fürs Recruiting und um Beschäftigte zu binden, muss das LRZ von außen als diverse Organisation erkennbar werden. Das beginnt bei der Sprache und mit dem Gendern, das inzwischen startete und mir sehr wichtig ist. Wer den Sinn von einer gendergerechten Sprache in Abrede stellt, ignoriert die Dringlichkeit des Themas und die Erkenntnisse vieler Studien, nach denen diverse Teams besser arbeiten und kreativer sind. Wenn wir weiter wachsen wollen, werden wir viel mehr soziale Gruppen für das LRZ begeistern müssen – Frauen, Queere, Spezialist:innen aus dem Ausland. Wir haben ein großes Pfund, das wir nutzen können: das gute Arbeitsklima und der kollegiale Umgang miteinander.

Mehr als **55 %** der Befragten fühlen sich zuhause produktiver.

18 % wird die strategische Ausrichtung des LRZ deutlich,

auf **9 %** trifft das nicht zu.

38 % der LRZ-Mitarbeitenden arbeiteten erstmals im Home Office.

Mehr als **60 %** arbeiten gerne flexibel zuhause.

61 % der Neulinge und **65 %** der Erfahrenen

sind mit dem mobilen Arbeiten sehr zufrieden.



#Teamgeist

Sarah Struck
Von ihr lassen wir uns motivieren

Sie ist Personalerin am LRZ und mit ihren Kolleg:innen zurzeit vor allem mit Mails beschäftigt: Wie wird Urlaub beantragt? Wann kann ich wieder ins Büro? Muss ich telearbeiten, wenn Kinder stören? „Jeder, der remote arbeiten kann, soll das machen, um das Risiko für sich und alle Beschäftigten zu reduzieren.“ Für bessere Stimmung und für den Zusammenhalt hat das Personalteam mit Kolleg:innen den Chat-Kanal #LRZamhalten ins Leben gerufen und postet dort Musiktipps, Fotos, Lustiges. Die Personalabteilung ist zurzeit drei Mal pro Woche am LRZ präsent – das Team wechselt sich dort ab, hält Kontakt mit Ministerien, Behörden, Mitarbeitenden: „Wir haben durch Corona weniger direkten Kontakt zu Kolleginnen und Kollegen, aber sonst hat sich die Arbeit nicht groß verändert. Schön ist, dass wir viel Feedback erhalten, dass es allen gut geht und die Arbeit im Home Office funktioniert.“

IN TIEFER TRAUER



MONIKA

BERNHARDT

Es war ein kalter, trüber Januartag als uns die Nachricht vom Tode Monika Bernhardts erreichte. Wir standen in der Bibliothek zusammen und niemand konnte die unfassbare Trauer in Worte fassen. Denn Monika Bernhardt war in den Tagen und Wochen zuvor noch so hoffnungsvoll und optimistisch, dass sie sich auf dem Weg der Besserung befindet – und wir waren es mit ihr.

Sie hatte sich viel vorgenommen als sie im Herbst 2018 am Leibniz-Rechenzentrum die Leitung der Verwaltung übernommen hatte. Als diplomierte Verwaltungsrätin und Oberregierungsrätin mit jahrelanger Erfahrung im öffentlichen Dienst war Monika Bernhardt die perfekte Ergänzung für unsere LRZ-Familie. Bei vermeintlich trockenen Themen blühte sie auf: Haushaltsrecht, Steuerrecht, Kosten- und Leistungsrecht. Da machte Monika Bernhardt keiner was vor. All ihr Wissen und all ihr Erfahrungsschatz sollte dem LRZ zugutekommen – so der Plan.

Schnell machte sie sich einen Namen im Haus – nicht nur mit ihrer umfassenden Expertise.

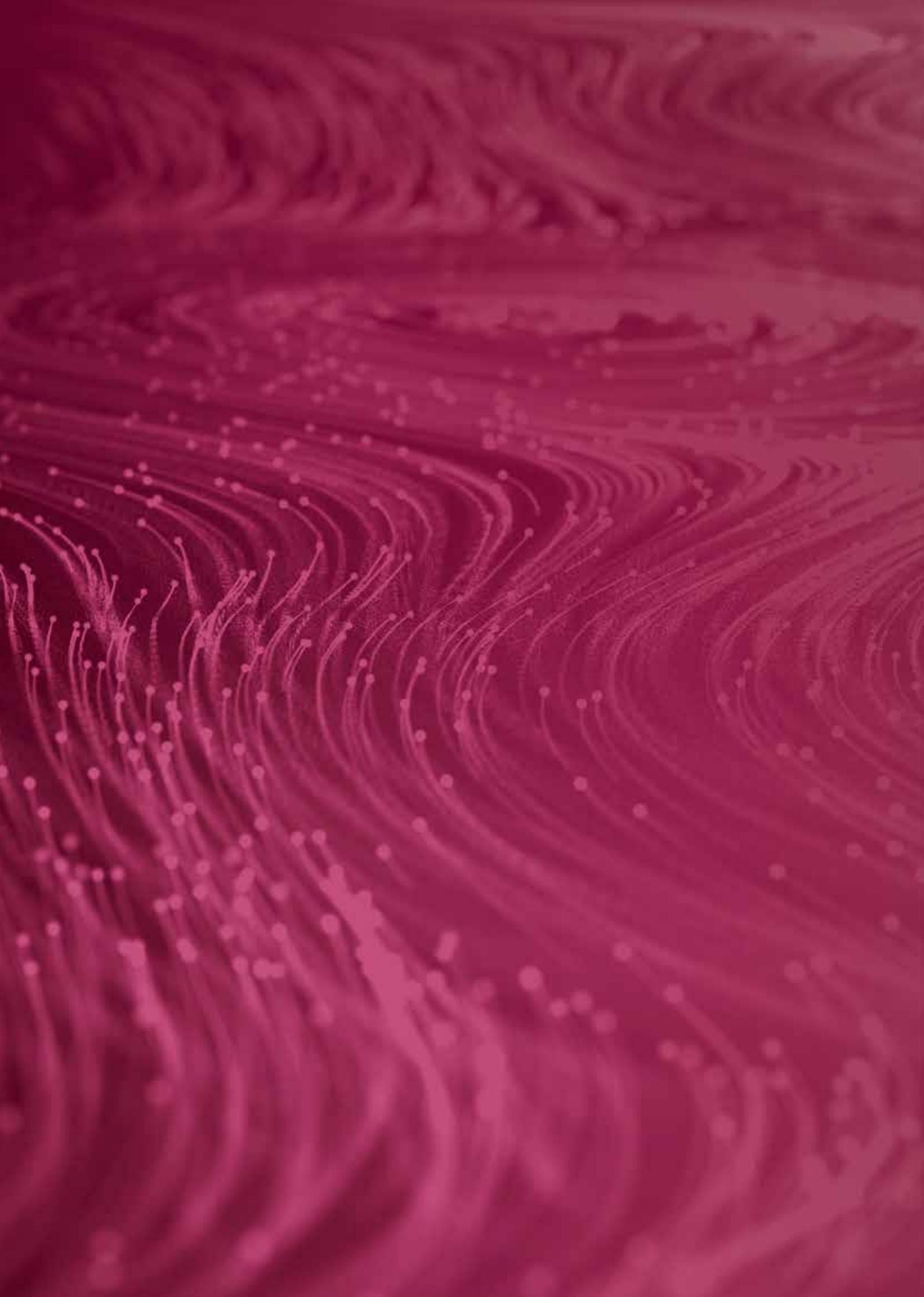
Monika Bernhardt war nicht nur fokussiert und äußert strukturiert in ihrer Arbeit. Sie hatte immer ein freundliches Wort für alle Kolleg:innen und beeindruckte durch ihre ruhige und besonnene Art. Das gemeinsame Lachen und der Spaß zwischendurch fehlten dabei nie.

Monika Bernhardt ging ihre Aufgaben mit viel Energie, einem starken Willen und einer großen Portion Optimismus an. Mit diesen Eigenschaften nahm sie auch den Kampf gegen ihre Krankheit auf und war bis zuletzt guten Mutes. Dass Monika Bernhardt diesen Kampf schlussendlich doch verlor, macht uns tief betroffen.

In nur kurzer Zeit hat sie Wegmarken am LRZ gesetzt – sie bleibt in unseren Gedanken und immer ein Teil der LRZ-Familie.

Möge Sie in Frieden ruhen!





07

KOOPERATIONEN

Unsere Partner Weltweit	100
Teamwork für Zertifikate	102
Kompass fürs Internet	104
Experimentierfeld Bibliothek	106
Tierpräparate digitalisiert	108

UNSERE PARTNER WELTWEIT



~ 50

**KOOPERATIONEN
WELTWEIT**



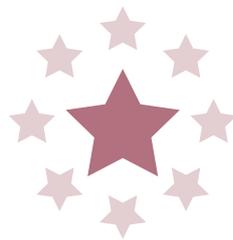
MÜNCHEN

- Digital Humanities München (dhmuc)
- Helmholtz Artificial Intelligence Cooperation Unit (HAICU)
- Hochschule München (HM)
- Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU)
- Munich Center for Machine Learning (MCML)
- Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST)
- Munich Network Management Team (MNM)
- Munich School of Data Science (MUDS)
- Technische Universität München (TUM)
- Universität der Bundeswehr München (UniBW)



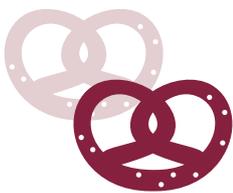
INTERNATIONAL

- Argonne National Laboratory (ARGONNE), USA
- Lawrence Berkeley National Laboratory (LBL), USA
- Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), USA
- National Energy Research Scientific Computing Center (NERSC), USA
- Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA



EUROPA

- Barcelona Supercomputing Center (BSC), Spanien
- CSC IT Center for Science, Finnland
- GÉANT
- Hartree Centre Science & Technology Facilities Council (STFC), UK
- Irish Centre for High-End Computing (ICHEC), Irland
- IT4Innovations (National Supercomputing Center), Tschechien
- Open Search Foundation (OSF), Hauptsitz Deutschland
- Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)
- Poznan Supercomputing and Networking Center (PSNC), Polen
- Technical University of Denmark (DTU), Dänemark
- VSC Technische Universität Wien, Österreich



BAYERN

- Bavarian Quantum Computing eXchange (BQCX)
- Bavarian Supercomputing Alliance (BSA)
- Bayerische Forschungsallianz (BayFOR)
- Bayerische Staatsbibliothek (BSB)
- Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR)
- Rechenzentren Bayern
- Regionales Rechenzentrum Erlangen (RRZE) & Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU)
- Technische Hochschule Deggendorf (THD)
- Universität Regensburg (UREG)



NATIONAL

- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)
- Gauss Centre for Supercomputing (GCS)
- Gauß-Allianz (GA)
- Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN-Verein)
- Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung e.V. (ZKI)



GEMEINSAM IT-DIENSTE OPTIMIEREN

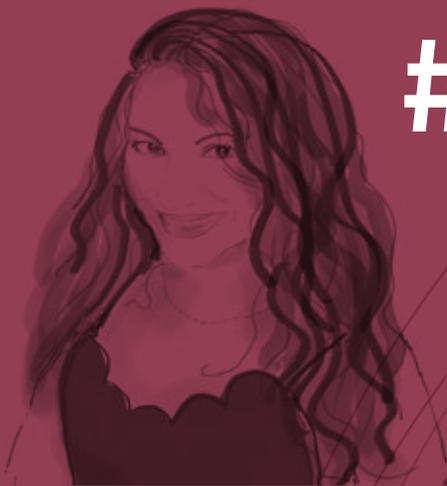
Seit 2019 lässt sich das Leibniz-Rechenzentrum regelmäßig zertifizieren. Die Partnerschaft mit dem IT-Servicezentrum der Universität Bayreuth hilft, Verbesserungspotenzial zu erkennen

Die Zertifizierungen des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) machen Schule: Im April 2020 hat das IT-Servicezentrum (ITS) der Universität Bayreuth ebenfalls das Testat für Informationssicherheit nach internationaler ISO/IEC-Norm 27001 erhalten, das nächste nach ISO/IEC-Norm 20000 für IT-Service-Management ist bereits in Vorbereitung. LRZ-Kolleg:innen halfen dabei mit ihren Erfahrungen, analysierten Prozesse des Universitäts-Rechenzentrums und zeigten darin Chancen zur Optimierung auf. Daraus entstand eine Beratungs-Partnerschaft. Stehen die notwendigen Erneuerungen der Zertifikate an, werden die beiden Rechenzentren nun wechselseitig IT-Sicherheit und die Servicequalität prüfen und bewerten: „Die Audits fördern das Kennlernen der Mitarbeitenden, so können wir den Erfahrungsaustausch und die Zusammenarbeit intensivieren“, meint Prof. Dr. Torsten Eymann, Inhaber des Lehrstuhls Wirtschaftsinformatik sowie Vizepräsident der Universität Bayreuth.

Im Sommer 2019, nach rund 18 Monaten Vorbereitung, hatte sich das LRZ als erstes wissenschaftliches Rechenzentrum Deutschlands in den Disziplinen IT-Service-Management und Informationssicherheit zertifizieren lassen. Über Arbeitskreise und Nachrichten erfuhr das IT-Team der Universität Bayreuth davon und bat um Rat und Unterstützung.

Damit sie ihre Gültigkeit behalten, werden Zertifikate zunächst jährlich, danach alle zwei Jahre erneuert. Dafür werden die notwendigen Analysen über relevante Prozesse sowie die Dokumentation von Sicherheits- oder Servicemaßnahmen regelmäßig wiederholt: „Die Normen sehen neben Audits durch Zertifizierungsstellen weitere Untersuchungen durch unabhängige Auditor:innen vor, damit sich die Organisation laufend verbessert“, erläutert Prof. Helmut Reiser, stellvertretender Leiter des LRZ. „Nur wenige gewerbliche Auditor:innen verfügen über Erfahrungen mit wissenschaftlichen oder universitären Rechenzentren. Dieses spezielle Know-how ist jedoch in unserer Partnerschaft mehr als ausreichend vorhanden.“

Die ersten gegenseitigen Audits zeigen Erfolg, stärken den gewünschten Austausch und die Zusammenarbeit und haben außerdem den positiven Nebeneffekt, dass sie auch noch kostengünstiger sind. Im April 2021 wird daher wieder ein Bayreuther Team das LRZ unter die Lupe nehmen und umgekehrt. Beide Rechenzentren qualifizieren interessierte Mitarbeitende außerdem als Auditor:innen. Mit diesem Wissen erweitert das LRZ wiederum auch seine Beratungs- und Serviceleistungen.



#PRIMAService

Eda Seval Mit der Frau sind wir sicher

Eda Seval leitet den Servicedesk und hat 2018 für die ISO-Zertifizierungen des LRZ an Notfallplänen mitgearbeitet, sogar ein Pandemieplan wurde entwickelt: „Dass der einmal eintritt, daran haben wir damals wirklich nicht gedacht. Notfallpläne entstehen im Team, über Krisensituationen, entstehende Risiken und vor allem Gegenmaßnahmen kann man nur zusammen nachdenken.“ Geregelt wurde, wie das LRZ seine wichtigsten Dienste sicherstellt. „Wir merken jetzt, dass wir damals auf einige Services nicht eingegangen sind.“ Daher wurden die Notfallpläne ergänzt, alle LRZ-Abteilungen prüften, welche ihrer Prozesse sich in Corona-Zeiten bewährten und wo Anpassung nötig war. „Vor-Ort-Dienste wie Führungen können wir im Pandemiefall nicht aufrechterhalten, aber die technischen Services funktionieren weiterhin sehr gut, wenn die Kolleginnen und Kollegen zuhause arbeiten.“ Detailliert wird dies das Notfallteam aber beurteilen, wenn die Corona-Pandemie weitgehend überstanden ist.

EIN OFFENER KOMPASS FÜRS INTERNET

Mehr Vielfalt für die Welt der Suchmaschinen: Das Leibniz-Rechenzentrum unterstützt die Open Search Foundation beim Aufbau eines offenen Indexes fürs Web.

Die Zahlen machen nachdenklich: Etwa 77 Millionen Menschen in Deutschland suchen tagtäglich bei Google Informationen im Internet. Die Suchmaschine erreicht in Deutschland einen Marktanteil von mehr als 90 Prozent. Das ist in Europa und weltweit ähnlich. Der nächste Konkurrent, Bing von Microsoft, erreicht in Deutschland wenigstens 10, weltweit indes knapp 3 Prozent der Internetnutzer:innen. Ein einziges Unternehmen sorgt folglich für Orientierung im Netz. Entscheidet mit seinen geheimen Algorithmen, welche Informationsangebote wo in der Rangfolge der Ergebnisse gelistet werden. „Die Algorithmen und Datenpools großer Suchmaschinen sind undurchsichtige Boxen, wir wissen nicht, welche Filter zu den Ergebnissen führen, die wir präsentiert bekommen, und auch nicht, was die Unternehmen mit unseren Daten tun“, stellt Stefan Voigt, promovierter Geograf und Vorstand der Open Search Foundation (OSF), fest und fordert: „Das Internet muss offen kartiert werden.“

GEMEINSAM NACHHALTIG RECHNEN

Die gemeinnützige Organisation, die 2017 startete und für die sich inzwischen Universitäten, Forschungseinrichtungen, auch Unternehmen und Nutzer:innen in Deutschland und Europa stark machen, arbeitet an einem offenen Suchindex fürs Internet. Mit dabei: das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). „Ein wichtiger Partner für die Open Search Foundation“, wie Christine Plote, Gründungsmitglied der OSF, berichtet: „SuperMUC-NG und andere Computer-Ressourcen rechnen bereits an der offenen Kartei fürs Internet. Die beste Lösung gegen die Dominanz bestehender Suchmaschinen ist Vielfalt.“

Diese soll mit dem neuen Suchindex entstehen. Er macht transparent, welche Informationen aus dem Web er aufnimmt und wie Ergebnislisten zustande kommen. Mit dieser Landkarte fürs Internet ließen sich Alternativen zu Google & Co, innovative Services und Geschäftsmodelle

Im Winter 2020 war Galileo zu Gast im LRZ und interviewte Christine Plote von der Open Search Foundation zu den Chancen einer offenen Suche. Der Beitrag kann online hier abgerufen werden:





entwickeln. „Die Open Search Foundation rannte mit dieser Idee bei uns offene Türen ein“, sagt Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Wir machen uns für Open Science stark und bauen unsere Dienste bevorzugt auf Open Source-Software auf, da passt Open Search prima ins Konzept. Das Internet wurde als offene Kommunikationsinfrastruktur gebaut, diese Offenheit muss bei Kernaufgaben wie der Suche erhalten bleiben.“ Wie Kranzlmüller engagieren sich einige LRZ-Mitarbeitende bei der OSF und tüfteln an Konzepten.

An der Technik für die offene Kartei des Internets wird schon gearbeitet. Erste Suchagenten oder Crawler wurden entwickelt, Pläne für Infrastrukturen zum Management von Archiven oder zum Speichern stehen. Statt auf riesige Server-Farmen wie sie Betreiber von Suchmaschinen unterhalten und die viel Strom verbrauchen, vertraut die OSF auf Engagement, Kooperation und Dezentralität. Wie das LRZ stellen weitere Organisationen zeitweise ungenutzte Computerkapazitäten zur Verfügung: „Wir arbeiten verteilt und gemeinsam in europäischen Rechenzentren mit einem offenen Quellcode“, erklärt Voigt.

INTERDISZIPLINÄR SUCHTECHNIKEN ENTWICKELN

Dieses Engagement zieht an: Noch ist die OSF zwar eine Graswurzelbewegung, aber eine die sich Gehör verschafft. Dank der Kontakte von Mitstreitenden zieht sie weite Kreise vor allem in Wissenschaft und Forschung, in Europa und darüber hinaus. Konferenzen und Workshops zu Fragen rund um das computergestützte Aufspüren von Wissen verbreiten die Idee einer offenen Suche und gleichzeitig Aufgaben zur Technik. Das erste internationale Open Search Symposium fand 2019 am LRZ statt. Die Kooperation zwischen OSF und LRZ trägt noch mehr Früchte, sie brachte das Thema in europäische Forschungsprogramme: Bei Horizon 2020 ist ein breit angelegtes, interdisziplinäres Projekt geplant, das den Aufbau digitaler Technologien nach sozialen und ethischen Kriterien fördert und die Bausteine für eine offene Suche in Europa liefern soll.

EXPERIMENTIERFELD BIBLIOTHEK

Das Leibniz-Rechenzentrum hostet die Systeme des Bibliotheksverbunds Bayern und hat diesem nun für die Suche nach moderner Managementsoftware eine Testumgebung in der Cloud eingerichtet.

Doch, Bücher sind in den Universitäts- und Hochschulbibliotheken Bayerns noch zu finden, aber im Vergleich zu elektronischen Medien nimmt ihre ihr Anteil ab, denn die Bibliotheken werfen die Bücher ja fast nie weg, es kommen nur weniger Neues im Verhältnis zu elektronischen Medien. „Wir kaufen Print-Medien, selbst Grundlagenwerke nur dann noch, wenn es keine andere wirtschaftliche Alternative dazu gibt“, sagt Jens Renner, der die Bibliothek der Hochschule für angewandte Wissenschaft Würzburg Schweinfurt (FHWS) leitet. Digitale Medien lassen sich an verschiedenen Standorten gleichzeitig nutzen.

Im Bibliotheksverbund Bayern, kurz BVB, haben sich knapp 200 bayerische Bibliotheken vernetzt. Der Verbund organisiert pro Jahr 700.000 Fernleihen. „Dreh- und Angelpunkt sind unsere Verbunddatenbank, der gemeinsam gepflegte Katalog und die einheitliche Bibliothekssoftware“, so Renner. Diese Systeme hostet das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) in Zusammenarbeit mit der BVB-Verbundzentrale. Die LRZ-Datenspeicher verwahren überdies die Digitalisate einzelner Bibliotheken, bibliophile Schätze wie alte Handschriften oder mit Kommentaren berühmter Dichter:innen und Wissenschaftler:innen versehene Bücher, die eingescannt nun weltweit ausgeliehen werden.

TESTEN IN DER CLOUD

Die Software SISIS-Sunrise, mit der die Bibliotheken ihre Ausleihen und ihren Bestandsaufbau organisieren, ist veraltet. Eingeführt in



den 1990er Jahren ist sie für die Verwaltung elektronischer Medien nicht geeignet. Schnittstellen fehlen, um neue, automatisierte Prozesse zu implementieren. „Wir müssen modernisieren“, sagt Ralf Brugbauer, Leiter der Universitätsbibliothek Bayreuth und wie Renner im Vorstand des BVB-Verbunds. „Durch eine Cloudumgebung und Testinstallationen unterstützt uns das LRZ, die neue Generation von Bibliothekssystem besser kennenzulernen.“

Einzelne Mitglieder, die BVB-Task Force, prüfen bereits die neue Software namens FOLIO auf Bits und Befehle. Bis Sommer 2022 will der Verbund entscheiden, ob die modulartig aufgebaute Open-Source-Software zum Einsatz kommt. „Ein Open Source-Programm könnte der BVB selbst betreiben, es lässt individuelle Anpassungen und die schnelle Integration eigener Ideen zu“, beschreibt Florian Gleixner, der das Bibliotheksteam am LRZ leitet, die Vorteile. „Zurzeit unterstützen wir die Task Force des BVB dabei, FOLIO zu optimieren und auf einen produktiven Stand zu bringen.“ Dabei helfen „User Stories“ oder Forderungen und Wünsche der Task Force an das Programm.

WISSEN SICHTBAR MACHEN

Bislang scheinen die Module zur Organisation elektronischer Medien und zur Verwaltung von Lesenden sowie die intuitiven Oberflächen von FOLIO vielversprechend zu sein. Parallel dazu hat aber die Bayerische Staatsbibliothek, ebenfalls Mitglied im BVB, ein lokales Bibliothekssystem ausgeschrieben und prüft damit, welche IT-Lösungen Unternehmen anbieten können. „Der Ausgang ist offen, wir befinden uns in einer spannenden Phase“, sagt Brugbauer. Die nächste Phase der Digitalisierung geht danach weiter: Nach dem Bibliothekssystem steht die Modernisierung des zentralen Katalogs und damit der Datenbank B3Kat an. „Die Aufgaben der Bibliotheken wandeln sich stark“, sagen Brugbauer und Renner. „Das Management von Forschungsdaten und Informationen gewinnt an Bedeutung, und dazu brauchen wir leistungsfähige Partnerschaften für IT und Speicherung. Das LRZ macht unser Leben leichter.“



LERN-BIBLIOTHEK FÜR TIERPRÄPARATE

Schnelle Hilfe für die digitale Lehre: Das LRZ zeigte Tiermedizinern, wie Präparate gekonnt digitalisiert werden und das Studieren erleichtern.

Was macht man mit annähernd 600 empfindlichen Präparaten? Bei der Tierärztlichen Fakultät der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) hatten sie sich schon einen Handscanner besorgt, um Knochen, Zähne, Organe zu digitalisieren. Daraus sollte eine Datenbank zum Lernen entstehen. Corona hat die Arbeit beschleunigt: "Das Leibniz-Rechenzentrum hat uns super weitergeholfen und Wege aufgezeigt, wie wir die Scans Studierenden schnell zur Verfügung stellen", sagt Privatdozent Sven Reese. Der promovierte Tiermediziner ließ sich vom Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) am LRZ beraten: "3D-Daten übers Internet zu präsentieren, ist gar nicht so einfach." Knapp 300 der Präparate wurden eingescannt, rund 40 davon können über die Lernplattform Moodle der Fakultät oder bei Sketchfab abgerufen werden. Mit der Unibibliothek planen die Veterinäre jetzt eine Plattform für dreidimensionale Objekte. Ein Interview mit den LRZ-Mitarbeitenden Lea Weil und Kristian Weinand vom V2C wie Digitalisierung Forschung und Lehre verändern.

Wann und wie begann die Kooperation mit der Tierärztlichen Fakultät?

Lea Weil: Im letzten Winter meldete sich Sven Reese und erkundigte sich, wie man Präparate in 3D visualisieren kann. Ein Scanner war angeschafft, aber wie und wo die virtuellen Präparate für Studierende publiziert werden sollten, darüber herrschte Unsicherheit. Auf einer Online-Plattform können die Präparate über einen 3D-Viewer mit Computer, Notebook, Tablet oder Smartphone abgerufen werden – in diesem Fall der beste Weg.

Wie findet man solche Tools?

Kristian Weinand: Im Internet, bei Museen, Universitäten und anderen Spezialisten. Wir haben uns Tools wie Verge 3D, Blend4Web, Sketchfab angeschaut und dabei mit Scans der Tierärztlichen Fakultät experimentiert. Für die Evaluation haben wir uns daher mit der Ansichtsqualität und Nutzerfreundlichkeit sowie mit den Kosten auseinandergesetzt. Kriterien, wie die Begrenzung von Zugangsrechten, Datensicherheit und -Speicherung spielten außerdem eine Rolle. So empfahlen wir Sketchfab. Die Plattform ist gut etabliert, das Tool einfach zu handhaben, das Hochladen geht schnell. Sketchfab bietet eine Website mit integriertem Viewer und viele Funktionen, etwa die Beschriftung oder Anmerkungen. Allerdings: Sketchfab speichert die Daten in den USA, mit der kostenlosen Version kann jeder alles downloaden. Die Tierärztliche Fakultät hat sich für ein Abo

entschieden, um den Zugang zu begrenzen.

Weil: Langfristig wäre eine eigene Plattform praktischer, aber die Entwicklung ist finanziell nicht zu unterschätzen, zumal wenn sie mit den Anforderungen und Wünschen der Studierenden mitwachsen soll.

Scannen und hochladen - funktioniert das einfach so?

Weinand: Nicht ganz, wenn die Anschauungsobjekte schnell geladen sein sollen. 3D-Scans produzieren große Datenmengen, die optimiert werden müssen, sollen Nutzer darauf online und mit mobilen Geräten zugreifen. Das erfordert ein paar Arbeitsschritte mehr und zusätzliche Software. Dafür empfehlen wir Blender – ein kostenloses Open-Source-Programm mit vielen Funktionen. Und für einen unkomplizierten Workflow haben wir daher eine Videoanleitung erstellt. Alle sind gut damit klargekommen.

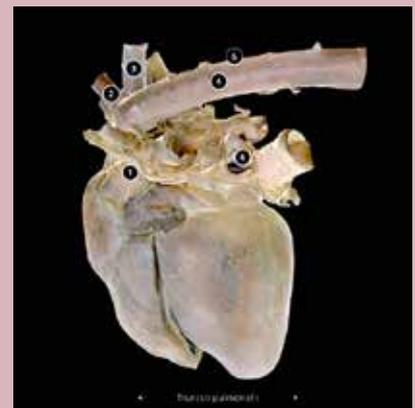
Jetzt sind die Präparate bei Sketchfab abrufbar, was könnte man mit ihnen noch machen?

Weil: In Augmented- oder Virtual Reality-Apps integriert, könnten sie eindrucklicher, spielerischer und freier präsentiert und mit zusätzlichen Informationen angereichert werden. Sie vermitteln dann einen immersiven Eindruck, so als läge das Modell real auf dem Tisch und man könnte damit umgehen.

In welchen Fachbereichen könnten Sketchfab und 3D-Viewer die Lehre noch unterstützen?

Weinand: In der Archäologie und Kunstgeschichte werden sie bereits eingesetzt, auch Architektur, Maschinenbau, Biologie und mehr Wissensbereiche arbeiten mit dreidimensionalen Modellen und profitieren von räumlicher Darstellung. An der LMU und der Uni-Bibliothek soll langfristig eine Online-Plattform für dreidimensionale Objekte entstehen. Daraus ergeben sich viele Möglichkeiten für den Informationsaustausch zwischen Universitäten, Lernenden und Interessierten weltweit.

Weil: Ich bin mir sicher, dass Augmented, Virtual und Mixed Reality-Anwendungen oder Plattformen, die wir am LRZ aufbauen, Forschung und Lehre enorm bereichern. Die Corona-Schutzmaßnahmen haben die Digitalisierung von Lerninhalten gepusht. Es wird hoffentlich nicht mehr lange dauern, dass Studierende Organe und Knochen mit Hilfe einer Datenbrille und einer AR-App räumlich erforschen. So wird Lernen nachhaltiger, eindrucklicher.



3D-OBJEKTE IM NETZ

Unter der Adresse <https://sketchfab.com/vetanatMunich> finden sich die Präparate der tiermedizinischen Fakultät.

Bavarikon ist wiederum der Online-Kunstschatz Bayerns und zeigt Bilder, Skulpturen und andere Ausstellungsstücke aus Museen und Sammlungen: <https://www.bavarikon.de>



08

ZAHLEN UND FAKTEN

Benutzernahe Dienste	112
Stromverbrauch	112
Datenspeicher	113
Hoch-und Höchstleistungsrechnen	114
Münchener Wissenschaftsnetz	115
Gesamtübersicht	
Kurse Supercomputing	118
Publikationen	120

BENUTZERNAHE DIENSTE

ANGENOMMENE UND ABGEWIESENE E-MAILS

Behandlung eingehender E-Mails	Anzahl pro Tag	Anteil in Prozent
Von den Post- & Mailrelays abgewiesene Mails		
• aufgrund allgemeiner Abwehrmechanismen	790.696	75,63 %
• als Spammails erkannt	11.759	1,12 %
• als Virenmails erkannt	126	0,01 %
Von den Post- & Mailrelays angenommene Mails		
• „gute“ E-Mails	234.385	22,40 %
• als mögliche Spammails markiert	8.495	0,81 %
Gesamt	1.045.461	100%

STROMVERBRAUCH

STROMVERBRAUCH 2020

2020

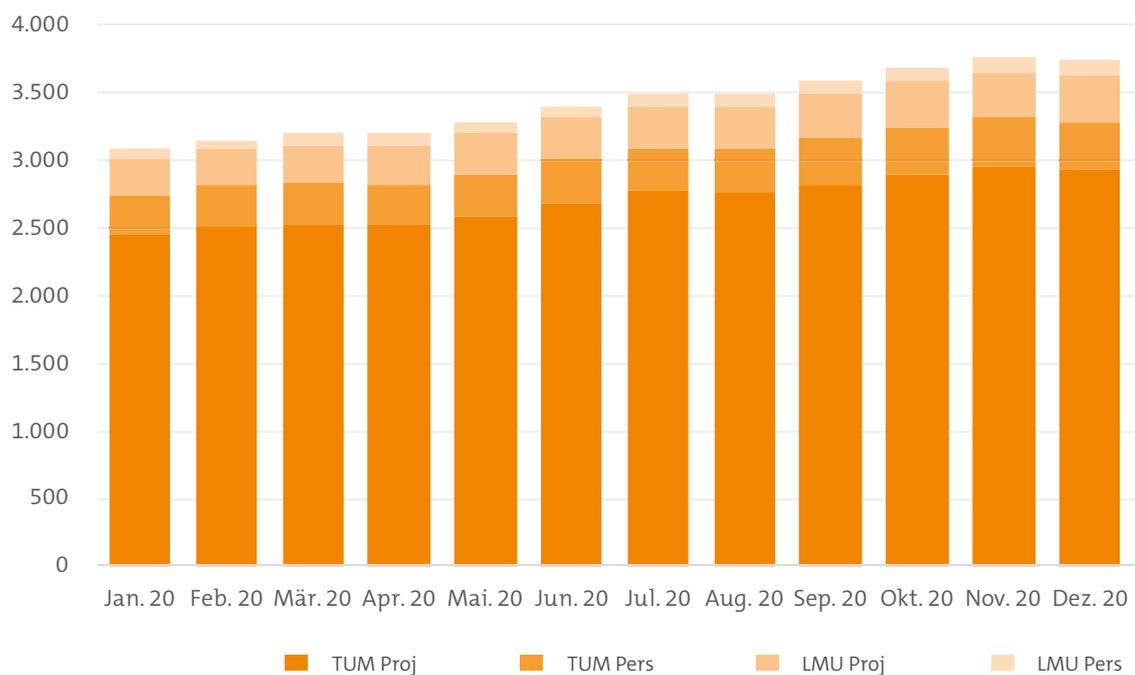
Lastspitze (15 min Intervall)	4.640 kW
Verbrauch insgesamt	32.487 MWh

DATENSPEICHER

KAPAZITÄTEN DER NEARLINE-SPEICHER

Unter Nearline-Systemen versteht man Speicher, die nicht in direktem Zugriff sind. Der Datenträger (in der Regel Magnetband oder Kassette) muss erst in ein Laufwerk geladen werden. Tabelle 2 gibt die Mindestkapazitäten differenziert nach Typ des Datenträgers an. Durch die Hardwarekomprimierung der Bandlaufwerke wird in der Praxis eine deutlich höhere Speicherbelegung erreicht, als in der Tabelle angegeben.

BELEGTER SPEICHER IM MWN CLOUD STORAGE



ÜBERSICHT HOCH- UND HÖCHSTLEISTUNGS- SYSTEME

Architecture				Total Numbers		Access	
System Name	CPU	Cores per Node	RAM per Node [GB]	Nodes	Cores	Queues/ Partitions	Login-Node
SuperMUC-NG Thin Nodes	Intel Xenon ("Skylake")	48	96	6.336	304.128	micro, general large	skx.supermuc.lrz.de
SuperMUC-NG Fat Nodes	Intel Xenon ("Skylake")	48	768	144	8.912	fat	skx.supermuc.lrz.de
SuperMUC-NG Cloud "Compute"	Intel Xenon ("Skylake")	48	96	32	1.536		cc.lrz.de Self Service VMs with custom operating system
SuperMUC-NG Cloud "GPU"	Intel Xenon ("Skylake") + 2x Nvidia V100	48	96	32	1.536		cc.lrz.de Self-Service VMs with custom operating system
Linux Cluster CoolMUC-2	Intel Xenon ES-2690 v3 ("Haswell")	28	64	812	22.736	cm2, serial, inter	lxlogin[1-4].lrz.de
Linux Cluster CoolMUC-3	Intel Xenon Phi (Knights Landing)	64	96	148	9.472	mpp3	lxlogin8.lrz.de
Machine Learning Systems DGX-1 and DGX-1v (GPU)	Nvidia Pascal P100 or V100	8	128	2	n.a.		contact servicedesk datalab.srv.lrz.de
GPU Cloud	Nvidia Pascal P100	1	128	4	n.a.		contact servicedesk datalab.srv.lrz.de
LRZ Compute Cloud	Intel Xeon Gold 6148 ("Skylake")	40	192	85	3.400		cc.lrz.de Self Service VMs with custom operating system
LRZ Compute Cloud (GPU)	Intel Xeon Gold 6148 ("Skylake") Nvidia Pascal P100	2	768	32	1.280		cc.lrz.de Self Service VMs with custom operating system
LRZ Virtual Machines	Intel Xeon ES-2660 v2 ("Sandy Bridge")	1-8	1-32	90	1.800	Managed Hosting	http://www.lrz.de/services/serverbetrieb/

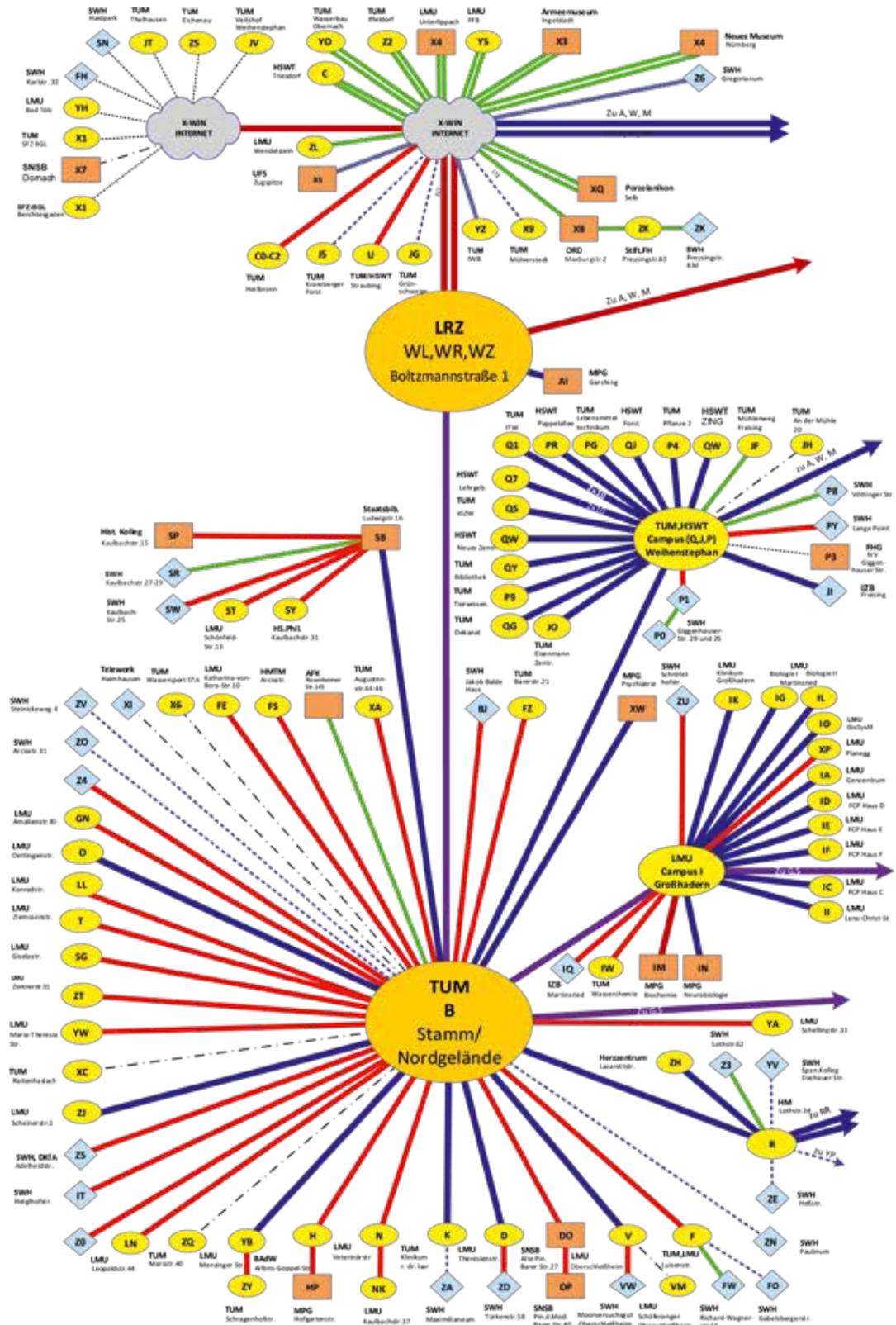
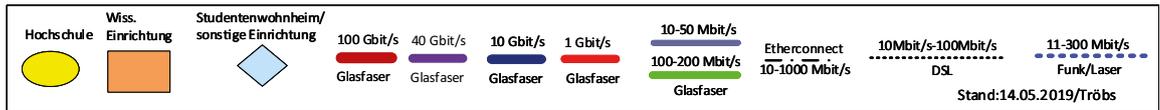
Quelle: <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/Access+and+Overview+of+HPC+Systems>

MÜNCHNER WISSENSCHAFTSNETZ

ANZAHL DER IM MWN EINGESETZTEN SWITCHES UND PORTS

Jahr	2020	2019	2018	2017	2016	2015	2014	2013	2012	2011	2010
Switches	2.206	1.950	1.858	1.528	1.564	1.507	1.469	1.406	1.310	1.247	1.126
Ports	134.098	125.085	119.367	112.137	111.046	104.576	100.557	97.000	88.777	85.161	66.856

STANDORTE UND VERBINDUNGEN MWN



GESAMTÜBERSICHT KURSE SUPERCOMPUTING

SCHULUNGEN UND VERANSTALTUNGEN 2020

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Sprache	Tage	Art	TN
20.01.20	20.01.20	NVIDIA DLI Course: Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision	LRZ	Garching	English	1	DLI-Kurs	24
21.01.20	21.01.20	NVIDIA CLI Course: Fundamentals of Deep Learning for Multiple Data Types	LRZ	Garching	English	1	DLI-Kurs	28
27.01.20	28.01.20	Introduction to Julia for HPC and Machine Learning	LRZ	Garching	English	2	GCS-Kurs	21
05.02.20	05.02.20	PRACE Course: Fundamentals of Accelerated Computing with CUDA C/C++ @ Ostrava	IT4I	Ostrava	English	1	PRACE-Kurs	36
06.02.20	06.02.20	PRACE Course: Fundamentals of Accelerated Computing with OpenACC @ Ostrava	IT4I	Ostrava	English	1	PRACE-Kurs	36
11.02.20	13.02.20	PRACE Workshop: OpenMP Programming Workshop @ LRZ	LRZ	Garching	English	3	PRACE-Kurs	50
26.02.20	28.02.20	Programming with Fortran	LRZ	Garching	English	3	GCS-Kurs	16
09.03.20	11.03.20	Parallel Programming of High Performance Systems	LRZ	Erlangen	English	3	GCS-Kurs	18
23.04.20	24.04.20	ONLINE: OpenCL Programming for Intel FPGAs	LRZ	ONLINE	English	2	GCS-Kurs	31
08.06.20	10.06.20	ONLINE: PRACE WS: HPC code optimisation workshop	LRZ	ONLINE	English	3	PRACE-Kurs	65
15.06.20	18.06.20	ONLINE: PRACE Workshop: Deep Learning and GPU programming workshop	LRZ	ONLINE	English	4	PRACE-Kurs	65
17.06.20	19.06.20	ONLINE: PRACE Course: Introduction to hybrid programming in HPC	VSC/LRZ/HLRS	ONLINE	English	3	PRACE-Kurs	44
19.06.20	19.06.20	ONLINE: Intel OneAPI for FPGAs	LRZ	ONLINE	English	1	GCS-Kurs	38
25.06.20	25.06.20	ONLINE: Optimizing OpenCL Programs for Intel FPGAs	LRZ	ONLINE	English	1	GCS-Kurs	16
14.07.20	17.07.20	ONLINE: Deep Learning and GPU programming using OpenACC @ HLRS Stuttgart	HLRS	ONLINE	English	4	GCS-Kurs	64
07.09.20	10.09.20	ONLINE: PRACE Course: Deep Learning and GPU Programming Workshop @ CSC Finland	CSC Finland	ONLINE	English	4	PRACE-Kurs	44

SCHULUNGEN UND VERANSTALTUNGEN 2020

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Sprache	Tage	Art	TN
22.09.20	25.09.20	ONLINE: PRACE Course: Advanced Fortran Topics	LRZ	ONLINE	English	4	PRACE-Kurs	38
05.10.20	05.10.20	ONLINE: Introduction to GNU/Linux and SSH	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	50
05.10.20	05.10.20	ONLINE: Introduction to the LRZ Compute Cloud	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	45
06.10.20	06.10.20	ONLINE: Introduction to the LRZ HPC Infrastructure	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	40
07.10.20	07.10.20	ONLINE: Using R at LRZ	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	30
07.10.20	07.10.20	ONLINE: Machine Learning with R at LRZ	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	30
07.10.20	07.10.20	ONLINE Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	English	4	PRACE-Kurs	44
08.10.20	08.10.20	ONLINE: Introduction to the LRZ AI Infrastructure	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	40
09.10.20	09.10.20	ONLINE: Intel® AI HPC Workshop #1: Machine Learning Module	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	40
09.10.20	09.10.20	ONLINE: Intel® AI HPC Workshop #2: Deep Learning Module	LRZ	ONLINE	English	0,5	TUM-Kurs	40
12.10.20	14.12.20	ONLINE: Introduction to ANSYS Fluid Dynamics on LRZ HPC Systems	LRZ	ONLINE	English	10	GCS-Kurs	28
18.11.20	20.11.20	ONLINE: Modern C++ Software Design	LRZ	ONLINE	English	3	GCS-Kurs	62
02.12.20	03.12.20	ONLINE: Molecular Modeling with Schrödinger-Suite Workshop	LRZ	ONLINE	English	2	GCS-Kurs	112
02.12.20	04.12.20	ONLINE: PRACE Course: Node-Level Performance Engineering	LRZ	ONLINE	English	3	PRACE-Kurs	49
09.12.20	09.12.20	ONLINE: Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	English	1	GCS-Kurs	16
Gesamt			31			61		1.242

TUM-Kurse: in Kooperation mit TUM Data Innovation Lab, aber offen für alle!



PUBLIKATIONEN

ARTIKEL IN WISSENSCHAFTLICHEN ZEITSCHRIFTEN

13

Batsaikhan, A., Hachinger, S., Kurtz, W., Heller, H., Frank, A., 2020. Application of Modern Web Technologies to the Citizen Science Project BAYSICS on Climate Research and Science Communication. *Sustainability* 12, 7748. <https://doi.org/10.3390/su12187748>

Cielo, S., Iapichino, L., Baruffa, F., Bugli, M., Federrath, C., 2020. Honing and proofing Astrophysical codes on the road to Exascale. Experiences from code modernization on many-core systems. *Future Generation Computer Systems* 112, 93–107. <https://doi.org/10.1016/j.future.2020.05.003>

Lan, L., Ghasemifard, H., Yuan, Y., Hachinger, S., Zhao, X., Bhattacharjee, S., Bi, X., Bai, Y., Menzel, A., Chen, J., 2020. Assessment of Urban CO₂ Measurement and Source Attribution in Munich Based on TDLAS-WMS and Trajectory Analysis. *Atmosphere* 11. <https://doi.org/10.3390/atmos11010058>

Naz, B.S., Kollet, S., Franssen, H.-J.H., Montzka, C., Kurtz, W., 2020. A 3 km spatially and temporally consistent European daily soil moisture reanalysis from 2000 to 2015. *Scientific Data* 7. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0450-6>

Ozer, G., Garg, S., Davoudi, N., Poerwawinata, G., Maiterth, M., Netti, A., Tafani, D., 2020. Towards a Predictive Energy Model for HPC Runtime Systems Using Supervised Learning. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)* 11997 LNCS, 626–638. https://doi.org/10.1007/978-3-030-48340-1_48

Ozer, G., Netti, A., Tafani, D., Schulz, M., 2020. Characterizing HPC Performance Variation with Monitoring and Unsupervised Learning. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)* 12321 LNCS, 280–292. https://doi.org/10.1007/978-3-030-59851-8_18

Richardson, R.A., Wright, D.W., Edeling, W., Jancauskas, V., Lakhilili, J., Coveney, P.V., 2020. EasyVVUQ: A Library for Verification, Validation and Uncertainty Quantification in High Performance Computing. *Journal of Open Research Software* 8. <https://doi.org/10.5334/jors.303>

Shoukourian, H., Kranzlmüller, D., 2020. Forecasting power-efficiency related key performance indicators for modern data centers using LSTMs. *Future Generation Computer Systems* 112, 362–382. <https://doi.org/10.1016/j.future.2020.05.014>

Teffs, J., Ertl, T., Mazzali, P., Hachinger, S., Janka, H.-T., 2020a. How much H and He is 'hidden' in SNe Ib/c? – II. Intermediate-mass objects: a 22 M_⊙ progenitor case study. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 499, 730–747. <https://doi.org/10.1093/mnras/staa2549>

Teffs, J., Ertl, T., Mazzali, P., Hachinger, S., Janka, T., 2020b. Type Ic supernova of a 22 M_⊙ progenitor. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 492, 4369–4385. <https://doi.org/10.1093/mnras/staa123>

ARTIKEL IN WISSENSCHAFTLICHEN ZEITSCHRIFTEN

Vuletić, P., Bosak, B., Dimolianis, M., Mérindol, P., Schmitz, D., Wessing, H., 2020. Localization of network service performance degradation in multi-tenant networks. *Computer Networks* 168. <https://doi.org/10.1016/j.comnet.2019.107050>

Willkofer, F., Wood, R.R., Trentini, F. von, Weismüller, J., Poschlod, B., Ludwig, R., 2020. A Holistic Modelling Approach for the Estimation of Return Levels of Peak Flows in Bavaria. *Water* 12, 2349. <https://doi.org/10.3390/w12092349>

Wright, D.W., Richardson, R.A., Edeling, W., Lakhili, J., Sinclair, R.C., Jancauskas, V., Suleimenova, D., Bosak, B., Kulczewski, M., Piontek, T., Kopta, P., Chirca, I., Arabnejad, H., Luk, O.O., Hoenen, O., Węglarz, J., Crommelin, D., Groen, D., Coveney, P.V., 2020. Building Confidence in Simulation: Applications of EasyVVUQ. *Advanced Theory and Simulations* 3, 1900246. <https://doi.org/10.1002/adts.201900246>

TECHNISCHE BERICHTE

2

Lühns, S.; Dick, B.; Johnson, C.; Marsella, L.; Mathias, G.; Morales, C.; Axner, L.; Shamakina, A. & Shoukourian, H. (2020), 'Best Practice Guide - Application porting and code-optimization activities for European HPC systems', Technical report, PRACE, <https://prace-ri.eu/training-support/best-practice-guides/application-porting-and-code-optimization-activities-for-european-hpc-systems/>

Saastad, O. W.; Kapanova, K.; Markov, S.; Morales, C.; Shamakina, A.; Johnson, N.; Krishnasamy, E.; Varrette, S. & Shourkourian, H. (2020), 'Best Practice Guide - Modern Processors', Technical report, PRACE, <https://prace-ri.eu/training-support/best-practice-guides/modern-processors/>

PUBLIKATIONEN

BEITRÄGE ZU TAGUNGSBÄNDEN

7

Brayford, D., Vallecorsa, S., 2020. Deploying Scientific AI Networks at Petaflop Scale on Secure Large Scale HPC Production Systems with Containers, in: Proceedings of the Platform for Advanced Scientific Computing Conference. ACM. <https://doi.org/10.1145/3394277.3401850>

Chung, M.T., Weidendorfer, J., Samfass, P., Fuerlinger, K., Kranzlmüller, D., 2020. Scheduling across Multiple Applications using Task-Based Programming Models, in: 2020 IEEE/ACM Fourth Annual Workshop on Emerging Parallel and Distributed Runtime Systems and Middleware (IPDRM). pp. 1–8. <https://doi.org/10.1109/IPDRM51949.2020.00005>

Hanauer, T., Hommel, W., 2020. Enhancing Enterprise IT Security with a Visualization-Based Process Framework, in: Thampi, S.M., Ko, R., Perez, G.M., Rawat, D.B. (Eds.), Security in Computing and Communications, 7th International Symposium, SSCC 2019. Springer, pp. 225–236. https://doi.org/10.1007/978-981-15-4825-3_18

Hendricks-Franssen, H.-J., Kurtz, W., Naz, B., Gebler, S., 2020. Data Assimilation with the Integrated Terrestrial System Model TSMP-PDAF, in: NIC Symposium 2020, Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC) NIC Series. Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag, Jülich, pp. 301–310.

Mijakovic, R., Gerndt, M., 2020. Automatic selection of tuning plugins in PTF using machine learning, in: Proceedings - 2020 IEEE 34th International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops, IPDPSW 2020. pp. 349–358. <https://doi.org/10.1109/IPDPSW50202.2020.00069>

Netti, A., Müller, M., Guillen, C., Ott, M., Tafani, D., Ozer, G., Schulz, M., 2020. DCDB Wintermute: Enabling Online and Holistic Operational Data Analytics on HPC Systems, in: HPDC 2020 - Proceedings of the 29th International Symposium on High-Performance Parallel and Distributed Computing. pp. 101–112. <https://doi.org/10.1145/3369583.3392674>

Parodi, Antonio, Danovaro, E., Hawkes, J., Quintino, T., Lagasio, M., Delogu, F., D'Andrea, M., Parodi, Andrea, Sar-do, B.M., Ajmar, A., Mazzoglio, P., Brocheton, F., Ganne, L., García-Hernández, R.J., Hachinger, S., Hayek, M., Terzo, O., Krenek, J., Martinovic, J., 2021. LEXIS Weather and Climate Large-Scale Pilot, in: Barolli, L., Poniszewska-Maranda, A., Enokido, T. (Eds.), Complex, Intelligent and Software Intensive Systems, Advances in Intelligent Systems and Computing. Springer International Publishing, Cham, pp. 267–277. https://doi.org/10.1007/978-3-030-50454-0_25

MASTER-THESIS

Zinterhof, Peter (Betreuer), Dieter Kranzlmüller (Aufgabensteller): Tobias Lutzenberger (Author): Deep-learning-based analysis of hand radiographs to detect growth disorder.

Kurtz, Wolfgang (Betreuer), Leon Fiedler (Autor): Sensitivity Analysis of a Deep Learning Model for Discharge Prediction in the Regen Catchment.

NETP-Team (Betreuung), Shylobokova, O. (Autor): Konzeption und Implementierung einer SaaS-Lösung zur Unterstützung von Awareness-Programmen in der Informationssicherheit.

NETP-Team (Betreuung), Würz, R. (Autor): Test-Umgebung zur Evaluierung von Schwachstellenscannern.

NETP-Team (Betreuung), Mizani, M. (Autor): Organisationsübergreifendes Security-Incident Management am Beispiel des Münchner Wissenschaftsnetzes.

BACHELOR-THESIS

García-Hernández, R. J. (Betreuer), Dieter Kranzlmüller (Aufgabensteller), Kathrin Hartmann (Author): Theoretical study of photon mapping with stratification

Kolb, Daniel (Betreuer); Kranzlmüller, Dieter (Aufgabensteller); Hosseini, Roman (Author): Evaluation of the interaction with and emotional reaction to stereoscopic digital testimonies

Lichtinger, Bernhard (Betreuer), Storz, Dominik (Autor): Anwendung von Policies auf Header-Felder einer E-Mail am Beispiel des From-Feldes in der Mail-Server-Software Postfix.

NETP-Team (Betreuung), Wagner, M. (Autor): Schwachstellenanalyse eines arduino basierten Abrechnungssystems

NETP-Team (Betreuung), Langer, T. (Autor): OT-Security Requirements Ensuring Functional Safety in the Production Environment for Defence Against Cyber Attacks



IMPRESSUM

Herausgeber

Leibniz-Rechenzentrum der
Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Konzeption und Redaktion

PR-Team LRZ

Autoren

Susanne Vieser
Ludger Palm
Sabrina Schulte

Grafik & Layout

Erika Krimmer
Veronika Hohenegger

Bildnachweise

Sofern nicht hier gelistet, sind die Bilder Eigentum des LRZ
oder wurden über Stock-Lizenzen erworben.

S.10, Dr. Eva Umlauf, LediZ Projekt
S. 12, KIKA, Screenshot YouTube
S. 24, Corona-Virus, unsplash
S. 86, Prof. Reinhard Genzel, Max-Planck-Institut
S. 70/71, Bridge of Knowledge, LMU / LRZ
S. 84, Prof. Francesco Knechtli, Hr Knechtli
S. 109, 3D-Objekt, LMU

Kontakt

Leibniz-Rechenzentrum
Boltzmannstraße 1
85748 Garching b. München
Tel: (089) 35831 8000
Email: presse@lrz.de

Stand: Juni 2022

ÜBER DAS LRZ

Über das LRZ

Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ist seit knapp 60 Jahren der kompetente IT-Partner der Münchner Universitäten und Hochschulen sowie wissenschaftlicher Einrichtungen in Bayern, Deutschland und Europa. Es bietet die komplette Bandbreite an IT-Dienstleistungen und -Technologie sowie Beratung und Support - von E-Mail, Webserver, bis hin zu Internetzugang, virtuellen Maschinen, Cloud-Lösungen und dem Münchner Wissenschaftsnetz (MWN). Mit dem Höchstleistungsrechner SuperMUC-NG gehört das LRZ zu den international führenden Supercomputing-Zentren und widmet sich im Bereich Future Computing schwerpunktmäßig neu aufkommenden Technologien, Künstlicher Intelligenz und Machine Learning sowie Quantencomputing.

MIT UNS KÖNNEN SIE RECHNEN!



Kontakt

Leibniz-Rechenzentrum
Boltzmannstraße 1 • 85748 Garching b. München
Tel: (089) 35831 8000 • Internet: www.lrz.de