LRZ-Newsletter September 2020

AKTUELLES

ORIGINS – Antworten auf existenzielle Fragen

In Windeseile zum Online-Kurs

Big Data geht auf Reisen

„Kein Wissenschaftler kann spitze sein in seinem Fach und zugleich in der IT“

Eiszeit für das Linux-Cluster

Zahlen des Monats

LRZ zum Anschauen

TERMINE & VERANSTALTUNGEN

Supercomputer suchen Arbeit

Deep Learning und Programmieren

Fortran für Fortgeschrittene

Einführung in die Supercomputer des LRZ

Einführung in ANSYS Fluid Dynamics

C++ für Software-Technik

Umgehen mit den Supercomputern des LRZ

STELLENANGEBOTE

COMPUTER UND GERÄTE ZU VERSCHENKEN

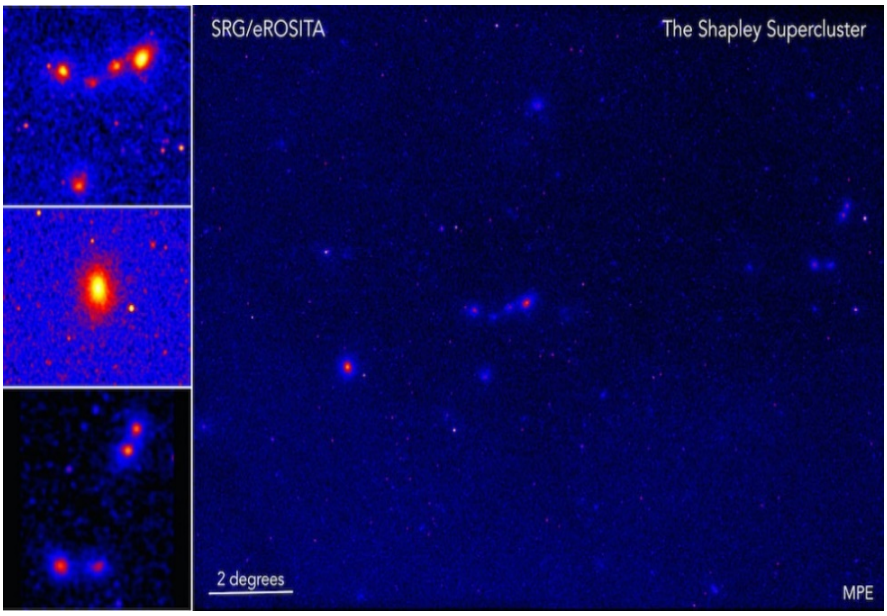
MEHR LESESTOFF

INFORMATIONEN & IMPRESSUM

AKTUELLES

ORIGINS – Antworten auf existenzielle Fragen

In 182 Tagen umrundete das Röntgenteleskop eROSITA an Bord der SRG-Raumsonde und in 1,5 Millionen Kilometern Entfernung einmal die Erde. Es lieferte rund 165 Gigabyte an Daten und Millionen von Bildern, hauptsächlich von schwarzen Löchern in Galaxien, aber auch von heißem Gas in Galaxienhaufen sowie in und rund um unsere Galaxie. Galaxien sind die Welteninseln des Kosmos und Orte, an denen Leben seinen Ursprung nimmt. „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 hochwillkommen: Hier gehen 120 Arbeitsgruppen aus Astro-, Teilchen- und Biophysik seit Ende 2018 der Frage nach, wie Leben überhaupt entsteht. An ORIGINS sind die beiden Münchner Universitäten, Max-Planck-Institute und das European Southern Observatory (ESO) samt internationalen Forschungspartnern beteiligt. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) versorgt die Forschung mit Supercomputing- und Speicherkapazitäten, sein Zentrum für Virtualisierung und Visualisierung (V2C)- und Virtualisierungs-Technik unterstützt das Virtual Reality Lab und das Data Science Lab des Clusters mit professioneller 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) und Leiter des Lehrstuhls für theoretische und numerische Astrophysik. Er ist 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-Ressourcen sind für das ORIGINS-Cluster reserviert, damit aus Messdaten Modelle und Algorithmen entwickelt werden können. Das Zentrum für Virtualisierung und Visualisierung (V2C) hilft den Forschern, Ergebnisse und Berechnungen in Bildern, Videos oder räumlichen Animationen zu veranschaulichen. Über LRZ-Netze wird telefoniert und gesurft. Das ist bereits gute Tradition seit 2006: Damals startete mit UNIVERSE das erste Exzellenzcluster, das dem Ursprung des Universums nachspürte. Bis 2018 veröffentlichten rund 250 Forscher und 70 Arbeitsgruppen aus aller Welt 4000 Beiträge und 308 Doktorarbeiten. Sie konnten am Ende des Projektes Supernova-Explosionen erklären, von neuen Galaxien berichten, hatten stellare Nukleosynthesen und das Geschehen in schwarzen Löchern erkundet und das winzige Higgs-Teilchen, dazu hochenergetische, kosmische Neutrinos entdeckt. Ein Teil der UNIVERSE-Ergebnisse ist im Deutschen Museum zu besichtigen, dort läuft auch der Film „Ausgerechnet", der am SuperMUC entstand und anschaulich berichtet, was nach dem Urknall vor rund 14 Milliarden Jahren geschah.

Wie setzt sich die Ursuppe zusammen?

ORIGINS führt diese Arbeit fort – neben Teilchen- und Astrophysiker sind nun zusätzlich Biophysiker und Biochemiker 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." Sie bringt neue Ideen, Modelle, Gedanken und Ausdrucksweisen ins Cluster. Das erste ORIGINS-Jahr sei daher ein spannender Findungsprozess gewesen, erzählt Burkert: „Biologen haben andere Gedankenketten als Physiker, bevor wir zusammenarbeiten konnten, musste das Cluster dafür sorgen, dass alle die Sprache des jeweils anderen Wissenschaftlers verstanden." Als Astrophysiker, der im All nach Signaturen von dunkler Materie sucht, lernte Burkert beispielsweise, dass die Teilchenphysik bereits Methoden bereithält, diese genauer aufzuschlüsseln.

Auf der Suche nach dem Ursprung des Lebens legt ORIGINS daher 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 jetzt 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 Wissenschaftler noch viel mehr Bausteine des Lebens. Im ersten Jahr von ORIGINS sind bereits mehr als 100 Forschungsbeiträge nicht nur über Sterne, schwarze Löcher oder Galaxien entstanden. Neben der Erforschung des Universums will ORIGINS, das bis 2026 mit insgesamt 45 Millionen Euro der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefördert wird, die Rezeptur der Ursuppe entdecken, jene unbekannte Mischung aus anorganischen Substanzen, die das Entstehen von Leben ermöglichte. Wenn ihre Zusammenstellung im Labor nachvollzogen werden kann, lässt sich besser erklären, wie sich darin Einzeller und erste Lebewesen entwickelten.

Was berichten Daten vom Leben?

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

In Windeseile zum Online-Kurs

Dr. Volker Weinberg, Dozent und Koordinator der High Performance Computing-Kurse am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), wurde im März 2020 aus einer Schulung in den Corona-Lockdown geschickt. Danach wurden am LRZ wie an allen Höchstleistungs-rechenzentren des Gauss Centres for Supercomputing (GCS) und bei der Partnership of Advanced Computing in Europa (PRACE) in Windeseile die wichtigsten Supercomputing-Kurse auf Online umgestellt. „Der Übergang zur Online-Schulung war abrupt, und die Mitarbeiter der GCS-Zentren mussten mehr tun, als nur ein Webkonferenz-Tool ausfindig zu machen – sie mussten sich überlegen, wie die Kurse effizient online ablaufen würden“, beschreibt Wissenschaftsjournalist Eric Gedenk in dem Artikel „Wie das GCS während Corona sein E-Learning ausbaut“. Wichtigster Anspruch bei der Umstellung: Die Kurse sollten weiterhin interaktiv, attraktiv und pragmatisch bleiben. Das scheint den Verantwortlichen bestens gelungen: Seit März haben 726 Wissenschaftler an den Online-Kursen des GCS teilgenommen, rund 40 Prozent machten im Ausland mit. Die Teilnehmenden kamen aus 34 Ländern – HPC-Ausbildung wurde zum erfolgreichen Exportartikel. Auch wenn nach Überwindung der Pandemie ein großer Teil der Schulungen wieder persönlich und vor Ort bei den Partnern stattfinden soll, wird es auch weiterhin Online-Kurse im Verbund geben. PRACE bietet bereits erste Massive Open Online Courses (MOOC) an. Zu den verschiedenen Kursangeboten: https://www.supercomputing-akademie.de/

https://www.gauss-centre.eu/trainingsworkshops/

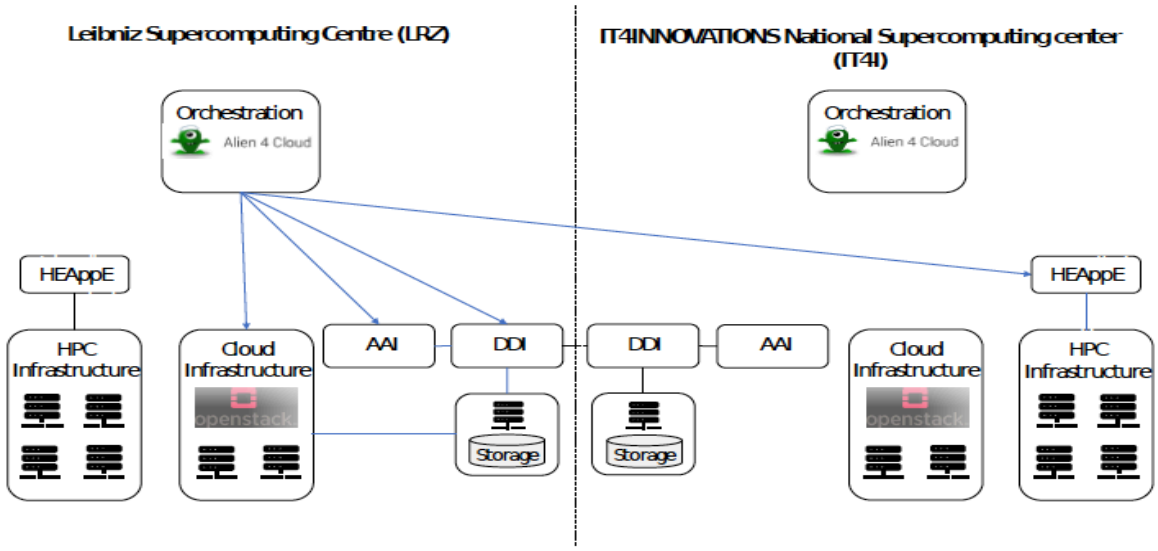
https://www.lrz.de/services/compute/courses/

Big Data geht auf Reisen

Von Italien über Garching nach Tschechien und zurück: Die effiziente Ausführung von mehrteiligen Simulationen („Workflows“) auf verteilten Cloud- und High-Performance-Computing-Systemen – das hat sich das EU-Projekt LEXIS zum Ziel gesetzt. Wissenschaft und Unternehmen entwickeln dafür Programme und Infrastruktur. Das Team Forschungsdaten-Management vom Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) fokussiert sich bei LEXIS auf den Datenaustausch, der verteilte Simulationen überhaupt ermöglicht. Das tschechische Supercomputing-Zentrum IT4Innovations leitet LEXIS. Nutzer finden bereits eine Reihe innovativer Rechen- und Datensysteme, dafür integriert LEXIS – über eigens entwickelte Schnittstellen – Angebote der European Open Science Cloud (EOSC) sowie Open-Source-basierte Lösungen wie B2HANDLE, B2SAFE und B2STAGE von EUDAT („European Data“) zum Datenmanagement. Erste Tests zeigen, dass damit Big Data auf Reisen gehen kann und ein ortsunabhängiger Zugriff möglich ist.

Als Testobjekt diente eine Waldbrand-Prognose-Simulation auf Basis von aktuellen Wetterdaten. Die Simulationen wurden in Ligurien von der CIMA-Foundation konzipiert und werden vom dortigen Umweltamt (ARPAL) genutzt: „Der Workflow startete mit einer virtuellen Maschine in der LRZ Compute Cloud, auf der Wetterdaten zusammengetragen und für Transfer und Simulation vorbereitet wurden“, erklären Dr. Rubén García-Hernández und Mohamad Hayek vom LRZ. „Danach griffen die Systeme des IT4I darauf zu, errechneten kleinskalige Wetterphänomene und Waldbrandgefahr, und speicherten diese Daten wieder zurück ins LRZ-System. Dort können die Resultate jetzt heruntergeladen und weiterverarbeitet oder visualisiert werden.“ Die Grafik unten zeigt die am Austausch beteiligten Komponenten, Tools fürs Datenmanagement sorgen auf beiden Seiten dafür, dass die Nutzung der Forschungsdaten dokumentiert, deren Unversehrtheit überprüft und die aktuellen Arbeitsergebnisse sicher abgespeichert werden. Die Grafik zeigt die am Austausch beteiligten Komponenten.

Die nächsten Schritte sind nun, das neue LEXIS-Datenmanagement noch schneller und zuverlässiger zu machen, außerdem die Nutzung der Tools und der LEXIS-Plattform Forschung und Firmen zu ermöglichen. LRZ und IT4I arbeiten daran, Simulations-Software zur Erkundung von Erdbeben und Tsunamis sowie für die Luftfahrt zu integrieren. „Auch wenn sie sich noch in der Beta-Phase befinden, kann mit den entwickelten Systemen bereits wissenschaftlich gearbeitet werden“, so Johannes Munke, ebenfalls vom Forschungsdaten-Team weiter. „Jetzt optimieren wir Systeme der LEXIS-Plattform auf ein Qualitätsniveau kommerzieller Anbieter.“ **(vs)**



„Kein Wissenschaftler kann spitze sein in seinem Fach und zugleich in der IT“

Mehr als 50 Jahre arbeitete **Heinz-Gerd Hegering** für das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ): 1968 stieg er als wissenschaftlicher Mitarbeiter ein, promovierte in Mathematik und wurde 1989 Mitglied und Leiter des Direktoriums. Unter Hegerings Ägide entwickelte sich das LRZ zum nationalen Höchstleistungsrechenzentrum und zog von München nach Garching, außerdem baute der Professor an der Ludwig-Maximilians-Universität den Studiengang Informatik auf. 2008 gab Hegering die Leitung des LRZ ab, 2019 wurde er auch als Direktor verabschiedet. Zum 50 Geburtstag des LRZ, 2012, verfasste der Wissenschaftler eine **Chronik des LRZ,** die jetzt digital abzurufen ist und ein buntes Kaleidoskop aus Geschichten rund ums LRZ aufzeigt.

Wie entstand 2012 die Chronik des LRZ? **Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering:** Was mich damals an der Chronik gereizt hat, war, dass damit nicht nur die Geschichte des LRZ zu schreiben war, sondern sich auch die der Entwicklung von Informatiksystemen ergab. Als ich Mathematik studierte und darin promovierte, gab es das Fach Informatik noch gar nicht. Kurz nachdem ich beim LRZ angefangen hatte, wurde Professor Gerhard Seegmüller dort Leiter des Direktoriums. Er brachte aus den USA Forschungsfragen zu Rechnersystemen und deren Anwendungen mit, das war damals neu. Zusammen mit einem LRZ-Kollegen gehörte ich zu den kritischen Probe-Zuhörern seiner Vorlesungen, zuvor gab es keine Begriffe oder Definitionen für IT-Technik und ihre Funktionen. So mutierte ich immer mehr zu einem Informatiker. Zu meinen ersten Aufgaben am LRZ gehörte der Aufbau einer Programm-Bibliothek für statistische Anwendungen sowie die Beratung der Nutzer in statistischen und numerischen Methoden. Später beschäftigte ich mich mit Systemprogrammierung, Netzen und Kommunikationssystemen, Einsatzmöglichkeiten für Personal Computing, IT-Infrastrukturen und Konzepte für IT-Management.

Hatten Sie Hilfe bei den Arbeiten an der Chronik? **Hegering:** Dr. Dietmar Täube, der frühere stellvertretende Leiter des LRZ, und ich begannen wahrscheinlich im Herbst 2011 mit der Chronik zum 50. Geburtstag. Er hatte den Überblick zu allen praktischen Fragen über die Organisation, lieferte die Informationen zu Beschäftigten, Technik und Strukturen. Das LRZ war und ist in Bayern und Deutschland eine einzigartige Einrichtung. Im Vergleich zu anderen Hochschul-Rechenzentren war es von Beginn an für zwei Universitäten und damit für einen deutlich größeren und heterogeneren Nutzerkreis zuständig. Die Vernetzung von räumlich verteilten Nutzern, aber auch die Fächervielfalt der Hochschulen setzte eine andere technische Ausrichtung und ein komplexeres betriebliches Handeln voraus. Umgekehrt waren wir oft technisch voraus, weil wir immer schon größere Systeme als andere

Hochschulrechenzentren aufbauen mussten. Außerdem war das LRZ an einer damals überwiegend geisteswissenschaftlich orientierten Akademie, der BAdW, angesiedelt und daraus ergaben sich häufig inhaltlich wie verfahrensmäßig viel größere Spielräume, die noch immer bestehen. Wir konnten mit dieser Sonderstellung hochschulübergreifende Aufgaben übernehmen und auch auf andere, zusätzliche Finanzierungsquellen hoffen. Dadurch öffneten sich viele innovative Experimentierfelder – jüngste Beispiele sind etwa die Visualisierung, Pilotierungen mit energieeffizienten Rechnerarchitekturen oder die Bereiche Quantencomputing, Big Data. Die Arbeiten an der Chronik gingen 2011 jedenfalls flott voran, wir hatten am LRZ ein gutes Archiv und schon viel zu den Infrastrukturen und Systemen gesammelt und dokumentiert.

Was hat Sie während der Recherchen überrascht? **Hegering:** Dass tatsächlich mit der LRZ-Chronik eine Geschichte der Informatiksysteme in Deutschland entstand, allerdings nicht nur aus einem wissenschaftlichen Blickwinkel, sondern auch aus Sicht von Anwendern und IT-Infrastrukturen. Wir haben die Chronik des LRZ systemorientiert aufgebaut, beschreiben also eher die computertechnischen Hilfsmittel von Lehre und Wissenschaft im Laufe der Zeit. Das war und ist für die Informatik interessant, denn mit dem Aufkommen neuer Systeme mit noch unbekannter Funktionalität ergaben sich neue Betriebs- und Forschungsfragen: Wie lassen sich Hunderte von regionalen Standorten und unabhängige Organisationen vernetzen? Wie funktionieren verteilte Netze? Wie ist ein Verbund von tausenden Servern effizient und sicher zu betreiben? Welche Managementkonzepte und Sicherheitsmaßnahmen eignen sich dafür? Welche Datenbanken und Software eignen sich für den Betrieb von tausenden PC und Clients? Was ist sinnvoll in Clouds auszulagern? Die Anwendungsnähe des LRZ, der Erfolg der wissenschaftlichen Projekte und ein professionelles IT-Management gaben sicher um das Jahr 2000 den Ausschlag, dass die Deutsche Forschungsgemeinschaft und der Wissenschaftsrat einen nationalen Höchstleistungsrechner bei uns platzierten.

Sie haben das LRZ von 1989 bis 2008 geleitet – was war Ihnen wichtig? **Hegering:** Das LRZ sollte über eigene Forschungsvorhaben einen Know-how-Vorsprung und Expertise in den rechnernahen Wissenschaften gewinnen. Das ist die Voraussetzung für die Entwicklung innovativer IT-Dienste. Wir wollten neueste Technik pilotieren und deren Einsatz voranbringen. Und wir wollten führend sein bei der Beratung von Nutzern: Astrophysiker, Naturwissenschaftler und Mediziner können nur gut rechnen, wenn sie von IT-Systemen und IT-Spezialisten optimal unterstützt werden, die zu ihren Anwendungen passen. Kaum ein Wissenschaftler kann wirklich Spitze sein in seinem Fach und zugleich auch noch in der IT. Deshalb sind enge Kooperationen zwischen IT-Fachleuten und Fachwissenschaftlern so wichtig.

Würden Sie heute Dinge anders machen oder entscheiden? **Hegering:** Nicht viele. In unserem Rechnerwürfeln stecken bereits mehrere Hundert Millionen Euro. Sollen die Systeme dort gut betrieben werden, muss es Leute geben, die nicht nur technisch kompetent und wissenschaftlich interessiert sind, sondern vor allem unsere Nutzer bei deren Projekten unterstützen wollen. Dienstleistungen werden ja gerne angenommen, aber nur selten honoriert. Das gilt leider oft auch für die wissenschaftliche Reputation der IT-Anwendungsunterstützung, etwa im Umfeld von Promotionsverfahren, bei Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften oder auf Konferenzen. Das Problem kann es auch im LRZ geben, Forschungsprojekte machen vielleicht manchmal mehr her als die Aufgabe, die Systeme am Laufen zu halten. Als Vorgesetzter muss man also aufpassen, dass es eine gute Balance zwischen Dienstleistung und wissenschaftlicher Arbeit gibt. Diese Herausforderung war und ist sicher nicht trivial.

Was machen Sie heute? **Hegering:** Ich bin nach wie vor mit dem LRZ eng verbunden und stehe in gutem Kontakt mit Arndt Bode, Dieter Kranzlmüller, Helmut Reiser sowie weiteren Mitgliedern aus dem Direktorium. Einige Alltagsfragen und Problemstellungen bekomme ich noch immer mit, aber ich durchdenke sie nicht mehr. Wenn ich um Rat gefragt werde oder mir etwas auffällt, dann sage ich das schon, einmischen werde ich mich natürlich nicht. Hinzu kommt, dass die Innovationsrate in unserem Fach so hoch ist, dass ich nicht mehr alles verfolgen und verstehen kann. Vielleicht sollte ein neuer Autor die Chronik zum 60. Geburtstag des LRZ fortsetzen und die Entwicklungen und Erfolge in einer auch für Oldies verständlichen Sprache fortschreiben. Noch hätte er fast zwei Jahre Zeit … **(vs)**

Eiszeit für das Linux-Cluster

Erfolgreich gerechnet und modelliert: Carlo Licciulli, Gletscherforscher und wissenschaftlicher Mitarbeiter der Bayerischen Akademie der Wissenschaften wurde gerade mit dem Graham Cogley Award der International Association for Cryospheric Sciences und der International Glaciological Society für die beste Publikation eines Nachwuchswissenschaftlers ausgezeichnet. Der Fachartikel im Journal of Glaciology basiert auf seiner Dissertation und wurde aus 70 Publikationen ausgewählt. „Dieser Preis bringt mehr Sicherheit, Mut und Selbstvertrauen für die zukünftige Forschung und motiviert mich, innovativer zu arbeiten“, sagt Carlo Licciulli. Seit 2018 berechnet und modelliert der Forscher am Linux-Cluster des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) mit Messdaten das Verhalten des Gletschers Vernagtferner in den Ötztaler Alpen auf der Basis von Messdaten, um den Rückzug des Eises besser erklären zu können.

„Gletscher sind für viele Menschen und Lebewesen ein entscheidender Teil ihrer Existenz und es herrscht große Unsicherheit, in welchem Maße diese Ressourcen künftig zur Verfügung stehen“, erklärt Licciulli sein Fach. „Das betrifft insbesondere die Verfügbarkeit von Wasser für Landwirtschaft, Industrie, Wasserkraftwerke sowie Tourismus.“ Für seine Doktorarbeit beschäftigte sich der Wissenschaftler mit dem Colle Gnifetti im Monte Rosa-Massiv. Dieser Gletscher ist aufgrund seiner jahrtausendalten Eiskernzeitreihen von besonderem Interesse. Noch mit dem PC adaptierte er ein numerisches Full-Stokes Eis-Fließmodell, berechnete damit den Eistransport im Gletscher und modellierte die dreidimensionale Verteilung des Eisalters. Diese Informationen sind notwendig für eine optimale Interpretation der Eiskernzeitreihen und daher für die Paläoklimaforschung.

Inzwischen steht der Vernagtferner im Mittelpunkt von Licciullis Forschung: „Er ist seit mehr als einem Jahrhundert der Hausgletscher der BAdW“, erzählt Licciulli. „Auf der Basis von Messungen, die seit mehr als 100 Jahren von Akademiemitgliedern vorangetrieben werden, versuchen wir, seine Geschichte mit Computermodellen zu rekonstruieren.“ Für das BAdW-Projekt **Erdmessung und Glaziologie** arbeitet Licciulli weiterhin mit numerischen Eis-Fließmodellen, allerdings mit verstärktem Fokus auf dem Zusammenhang zwischen Klimawandel und Gletscherdynamik. „Neben detaillierten Beschreibungen der Eisdynamik und der Massenbilanz ist eine realistische Abschätzung verschiedener Modellparameter essentiell. Zum Beispiel untersuchen wir zurzeit einen Parameter, der das Gleiten des Gletschers auf dem Felsbett beschreibt“, erklärt Licciulli. „Die Berechnungen sind sehr aufwändig, gerade wenn man mit der komplexen Full-Stokes-Methode über Jahrhunderte simuliert. Damit Modelle entsprechend initialisiert und solche Parameter quantifiziert werden können, sollen die Simulationen sehr oft und sehr lange laufen können.“ Der Bedarf an Rechenzeit für das BAdW-Projekt wird sich daher in Zukunft stetig erhöhen. **(vs)**

Zahlen des Monats

Gleich mehrere Bibliotheken speichert das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) in seinen Bandarchiven: Dort liegen bereits **rund 35 Milliarden Dateien,** die zusammengerechnet etwa eine Datenmenge von **105 Petabyte** oder **107.520 Terabyte** ausmachen. Ein Terabyte Daten entsprechen schätzungsweise 500.000 Büchern. Die Datenmenge in den LRZ-Speichern ist folglich vergleichbar mit rund **57 Milliarden Büchern.** Die Bayerische Staatsbibliothek hält übrigens rund **10 Millionen Bücher** vor. Und jeden Tag gehen weitere **133 Terabyte an Daten** auf den Bandarchiven des LRZ ein. **(vs)**

LRZ zum Anschauen

Der Fernsehsender Euronews besuchte das Leibniz-Rechenzentrum im Juli, jetzt ist der **Beitrag über das EU-Projekt CompBioMed** veröffentlicht. In der Mediathek stehen die beiden Filme in Deutsch und Englisch, in denen Moderatorin Katharina Rabillon von Futuris den Sinn und Nutzen der digitalen Zwillinge in der Medizin erklärt: Die Algorithmen und Software, die bei CompBioMed entwickelt wurden, verarbeiten unter anderem Daten aus Computer- und Magnetresonanz-Tomografen (CT, MRT) und Röntgenscans sowie aus Organen und Genomen. Mit ihnen lassen sich virtuelle Menschen simulieren, um Behandlungen und Medikamente individuell abzustimmen, aber auch um Gesundheitsrisiken, etwas Krebserkrankungen zu prognostizieren. Ein Riesenfortschritt in der Medizin, der ohne Supercomputing nicht möglich wäre. „Die Rechenleistung des SuperMUC-NG von heute haben wir zukünftig auf Tablets und Smartphones“, zitiert Euronews Professor Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Wir versuchen heute zu simulieren, was die personalisierte Medizin in 15, 20 Jahren direkt im Krankenhaus einsetzen wird.“ **(vs)**

TERMINE & VERANSTALTUNGEN

Supercomputer suchen Arbeit

Die Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) vergibt ebenfalls Rechenzeit an den europäischen Supercomputern. Seit **1. September 2020** sind Forscher und Wissenschaftlerinnen aufgerufen, ihren Bedarf anzumelden. Die Bewerbungsfrist dauert bis **bis 27. Oktober**. Interessenten finden **online alle Informationen** zu den unterschiedlichen Systemen, darunter auch der SuperMUC-NG sowie die Voraussetzungen für den Zugang zum High Performance Computing (HPC) in Europa.

Deep Learning und Programmieren

Der Online-Workshop vom **7. bis zum 10. September** beschäftigt sich mit den Grundlagen des Deep Learning, der Computer Vision und dem Programmieren von Multi-GPU. Vorträge und praktische Übungen mit den Programmen Open ACC sowie den Programmiersprachen CUDA C / C ++ vertiefen die Theorie. Alle Übungen werden auf einer vollständig konfigurierten GPU-beschleunigten Workstation und auf Jupyter-Notebooks in der Cloud durchgeführt. Für den Workshop kooperieren PRACE, CSC (Finnland), IT4Innovations und LRZ mit Nvidia. **Information und Anmeldung**

Fortran für Fortgeschrittene

Wissenschaftler, die ihre Kenntnisse in Fortran erweitern möchten, lernen in diesem viertägigen Online- Kurs vom **22.bis 25. September** Objekte, Schnittstellen und objektbasiertes Programmieren kennen. Vorträge und Übungen behandeln zudem IEEE-Funktionen und Gleitkomma-Ausnahmen, die Interoperabilität mit C und Fortran 2003 E, außerdem die Vorteile von OO Design Patterns oder Co-Arrays. **Information und Anmeldung**

Einführung in die Supercomputer des LRZ

Eine Einführung ins High Performance Computing und ein Crashkurs in das Computional Fluid Dynamics, die Darstellung von Strömungen am Computer, gibt dieser halbtägige Online-Workshop am **14. Oktober.** Er ist für Anfänger gedacht und zeigt die Arbeit am Linux-Cluster des LRZ. **Information und Anmeldung**

Einführung in ANSYS Fluid Dynamics

Das brauchen angehende Ingenieure und Naturwissenschaftler: ANSYS Fluid Dynamics ist ein Bündel aus Programmen zum Berechnen und Visualisierungen unterschiedlichster Strömungen. Der Einführungskurs in das meist genutzte Programm an den Supercomputern des LRZ findet **ab 19. Oktober und bis 14. Dezember** jeden Montag online von 10 bis 12 Uhr und von 14 bis 16 Uhr statt. **Information und Anmeldung**

C++ für Software-Technik

Objektorientiertes Software-Design mit der Programmiersprache C++ steht im Mittelpunkt dieses Onlinekurses **vom 18. bis 20 November.** Teilnehmende lernen die wichtigsten Programmierkonzepte und Verfahren kennen, Anspruch dabei ist einen robusten, zuverlässigen Code zu fabrizieren, der gewartet und weiter entwickelt werden kann. **Information und Anmeldung**

Umgehen mit den Supercomputern des LRZ

Wer im Oktober nicht teilnehmen konnte, bekommt am **9. Dezember** nochmals die Chance, das Linux-Cluster des LRZ kennenzulernen. Der halbtägige Online-Kurs erklärt den Umgang mit dem Cluster und die wichtigsten Anwendungen darauf, die Berechnung und Darstellung von Strömungen. **Information und Anmeldung**

STELLENANGEBOTE

Sie finden ein internationales und diverses Team in Garching, das ständig wächst. Wenn Sie unten kein passendes Aufgabenprofil finden, besuchen Sie die **Karriereseite** oder schicken Sie gerne eine **Initiativbewerbung**. Wir sind LRZ – und neugierig auf Sie!

Data Architect zum Aufbau einer High Performance Data Analytics-Plattform für Daten zur Erdbeobachtung (m, w, d)
Wissenschaftlicher Angestellter für E-Mail und Groupware, Schwerpunkt Mailrelays und Malware-Abwehr (m,w,d)
Client-Manager für MAC- und Mobile Devices (m,w,d)
Client-Manager für Windows (m,w,d)
Studentische Hilfskraft für die ITSM-Software-Entwicklung (m,w,d)
Studentische Hilfskräfte für den Service-Desk (m,w,d)

AM LRZ ABZUGEBENDE GERÄTE

Das Leibniz-Rechenzentrum trennt sich wieder von gebrauchten Computern und Zubehör. Studierende, DozentInnen, studentische Hilfskräfte und andere InteressentInnen von Hochschulen und Behörden melden sich bitte **bis 14. September 2020** per Mail, wenn sie etwas davon gebrauchen können. Mailadresse: **Althardware_AT_lrz.de**.

- 14 Dell Optiplex 9020 Desktop, Baujahr 2014, 8 GB, mit und ohne Festplatte
- 22 Dell Optiplex 7010 Desktops, Baujahr 2013, 8 GB, mit Festplatte
- 3 Dell Optiplex 790 Desktop, Baujahr 2012, 8 GB, mit Festplatte
- 1 Dell Precision T1700 Desktop, Baujahr 2014, 16 GB, mit Festplatte
- 4 Dell Latitude e6430 Laptop, Baujahr 2012 bis 2014, 8/12 GB, mit und ohne Festplatte
- 1 Dell Latitude xt3 Laptop, Baujahr 2011, 8 GB, mit Festplatte und drehbarem Bildschirm

- 1 Dell Latitude e7240 Laptop, Baujahr 2011, 8 GB, mit Festplatte und kleinen Macken am Bildschirm
- 1 Dell Latitude e5510, Baujahr 2012, 4 GB, mit Festplatte
- 1 Dell Latitudew e6530, Baujahr 2013, 8 GB, mit Festplatte
- 2 Plotter/Großformatdrucker HP Designjet 5000 PS, reparaturbedürftig
- 1 MacBook Air 13 Zoll, Baujahr 2014, keine Festplatte, 8 GB RAM
- 3 MacBook Pro, 13-15 Zoll, Baujahr 2012/2013, keine Festplatte, 8 GB RAM
- 2 iPad 2, Baujahr 2011, 16 GB, UMTS
- 3 iPad Air, Baujahr 2013, 16 GB

MEHR LESESTOFF

Hier finden Sie die Links zu den aktuellen Informationen aus der Supercomputing-Community und von unseren Kooperationspartnern:
Publikationen des Gauss Centre for Supercomputing (GCS): GCS-News und Inside
Infobriefe der Gauß-Allianz
Publikationen von PRACE: **PRACE Digest, Jahresbericht**

INFORMATIONEN & IMPRESSUM

Schwierigkeiten bei der Darstellung? Sollten Sie den Newsletter nicht gut lesen können, schicken Sie bitte eine kurze Beschreibung des Problems an <NewsletterRedaktion_AT_lrz.de>. Danke!
Sie können den LRZ-Newsletter über unsere Webseite **bestellen oder abbestellen**.
Das LRZ verschickt und veröffentlicht diesen Newsletter in deutscher und englischer Sprache. Die beiden Versionen sowie frühere Ausgaben finden Sie im **Archiv**.
Aktuelle Informationen übers LRZ sowie zu Kursen und Veranstaltungen finden Sie außerdem bei **Twitter** und bei **LinkedIn.**

Herausgeber:
Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften
Boltzmannstraße 1
D-85748 Garching
Telefon: +49-89-35831-8000
Telefax: +49-89-35831-9700
Twitter: **LRZ_DE**
LinkedIn: **Leibniz-Rechenzentrum**

Redaktion: PR-Team
E-Mail: pr-team_AT_lrz.de; newsletter_AT_lrz.de
Fotos: Max Planck-Institut für extraterrestrische Physik (MPE), S. Vieser LRZ, C. Licciulli, A. Kurzmann LRZ