

## Center for Computational Sciences and Simulation

### Center for Computational Sciences and Simulation

CCSS, das Center for Computational Sciences and Simulation, repräsentiert das „Wissenschaftliche Rechnen“ – neben Theorie und Experiment als drittes Standbein des Erkenntnisgewinns. CCSS koordiniert und verbindet seit 2010 etwa 35 Arbeitsgruppen im wissenschaftlichen Rechnen. Dabei stehen Methodentransfer, Softwareentwicklung und die Optimierung von Algorithmen im Vordergrund.

The Center for Computational Sciences and Simulation (CCSS) represents “High Performance Computing” as the third pillar – alongside theory and experiment – of knowledge acquisition. Since 2010, the CCSS has been coordinating and connecting around 35 research groups working in high performance computing. Their main interests lie in method transfer, software development and algorithm optimization.



Das CCSS betreibt gemeinsam mit dem Zentrum für Informations- und Mediendienste (ZIM) den Hochleistungsrechner der Universität und leistet durch ein Supportteam Unterstützung beim wissenschaftlichen Rechnen. Das CCSS und seine Ressourcen tragen maßgeblich zur Zusammenarbeit zwischen den Arbeitsgruppen bei – in strukturierten Forschungsprojekten und über Fakultäten hinweg.

### Forschung

Das wissenschaftliche Rechnen löst Probleme, die für klassische Methoden zu komplex sind. Dazu werden die beschreibenden Gleichungen zunächst so modifiziert (diskretisiert), dass ein Computeralgorithmus iterativ eine Lösung finden kann. Die Mitglieder des CCSS sind dabei sowohl in der Entwicklung der Algorithmen, der Implementierung als Software sowie in der Nutzung der Programme tätig.

Mit diesen Programmen werden Phänomene untersucht, die oft auf verschiedenen Größenskalen stattfinden (zum Beispiel vom Brennstofftröpfchen zur Gasturbine). Der Einfluss der kleinen Skalen auf die gesamte Simulation muss dann durch „Schließungsansätze“ oder „Skalenübergangsbedingungen“ modelliert werden. Diese Modellierungstheorien werden wiederum von Mitgliedern im CCSS entwickelt und durch aufwändige Simulationen getestet.

Mitglieder des CCSS aus Biologie, Chemie, Informatik, Ingenieurwissenschaften, Mathematik und Physik befassen sich oft mit Problemen, deren Lösung massive Rechenleistung erfordert – eine sequentielle Ausführung der Programme würde oft Jahrzehnte dauern. Verschiedene Berechnungen müssen daher zeitgleich ausgeführt werden – man spricht hier vom Parallelrechnen. Dazu sind sowohl effiziente, oft komplexe Parallelisierungsstrategien wie auch geeignete Parallelrechner erforderlich. Der Hochleistungsrechner der UDE, eine Cray XT6m, verfügt über 4.128 Kerne und wird ab 2016 durch ein System von NEC mit 13.248 Kernen (siehe unten) ergänzt.

Dieser Hochleistungsrechner stellt ein wichtiges Werkzeug für die Einwerbung von

The CCSS and the Centre for Information and Media Services (ZIM) jointly operate the University’s supercomputer and provide the services of a support team to assist with high performance computing. The CCSS and its resources are crucial to the cooperation and collaboration between the research groups, both in structured research projects and beyond faculty boundaries.

### Research

High performance computing solves problems that are too complex for classical methods. This is made possible by initially modifying (discretizing) the relevant equations so that a computer algorithm can find a solution iteratively. In this process, the members of the CCSS are responsible for development of the algorithms, implementation in software, and use of the programs.

The phenomena these programs are used to explore often take place on different scales (e.g. from a drop of fuel to a gas turbine), and the influence of the small scales on the simulation as a whole must then be modelled using “closure models” or “scale transition conditions”. These modelling theories are similarly developed by members of the CCSS and tested in complex simulations.

Members of the CCSS from biology, chemistry, computer science, engineering sciences, mathematics and physics often work with problems that require tremendous computing capacity to solve – executing the programs sequentially would often take decades. It is therefore essential that different computations are performed simultaneously – a procedure referred to as parallel computing. This is only possible with efficient, often complex parallelization strategies as well as suitable parallel computers. The UDE’s high performance computer, a Cray XT6m, has 4128 cores and will be joined in 2016 by a NEC system with 13,248 cores (see below).

This high performance computer is a key instrument in gaining external funding, attracting outstanding employees and conducting research projects with an international profile. At the same





## Ausgewählte Publikationen Selected Publications

- Brands, D., D. Balzani, L. Scheunemann, J. Schröder, H. Richter, D. Raabe (2015): Computational modeling of dual-phase steels based on representative three-dimensional microstructures obtained from ebsd data, *Archive of Applied Mechanics*, <http://dx.doi.org/10.1007/s00419-015-1044-1>.
- Budeus, B., S. Schweigle de Reynoso, M. Przekopowitz, D. Hoffmann, M. Seifert, R. Küppers (2015): Complexity of the human memory B-cell compartment is determined by the versatility of clonal diversification in germinal centers, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 112(38):E5281–E5289.
- Doennig, D., S. Baidya, W. E. Pickett and R. Pentcheva (2016): Design of Chern and Mott insulators in buckled 3d oxide honeycomb lattices, *Phys. Rev. B* 93, 165145
- Gruner, M. E., W. Keune, B. Roldan Cuenya, C. Weis, J. Landers, S. I. Makarov, D. Klar, M. Y. Hu, E. E. Alp, J. Zhao, M. Krautz, O. Gutfleisch and H. Wende (2015): Element-Resolved Thermodynamics of Magnetocaloric  $\text{LaFe}_{13-x}\text{Si}_x$ , *Phys. Rev. Lett.* 114, 057202.
- Gruner, M. E., U. Eckern and R. Pentcheva (2015): Impact of strain-induced electronic topological transition on the thermoelectric properties of  $\text{PtCoO}_2$  and  $\text{PdCoO}_2$ , *Phys. Rev. B* 92, 235140.
- Peters, A., H. Sagar, U. Lantermann, U., O. el Moctar (2015): Numerical modelling and prediction of cavitation erosion, *WEAR*, Vol. 338–339, 189–201.
- Popescu, V., P. Kratzer (2015): Large morphological sensitivity of the magneto-thermopower in Co/Cu multilayered systems, *New J. Phys.* 17, 033036.
- Proch, F., A. M. Kempf (2015): Modeling heat loss effects in the large eddy simulation of a model gas turbine combustor with premixed flamelet generated manifolds, *Proc. Combust. Inst.* 35.3, 3337–3345.
- Rinn, P., Y. Stepanov, J. Peinke, T. Guhr, R. Schäfer (2015): Dynamics of quasi-stationary systems: Finance as an example, *Europhysics Letters* 110, 68003.
- Schramm, A., J. Köster, Y. Assenov, K. Althoff, M. Peifer, E. Mahlow, A. Odersky, D. Beisser, C. Ernst, A.G. Henssen, H. Stephan, C. Schröder, L. Heukamp, A. Engesser, Y. Kahlert, J. Theissen, B. Hero, F. Roels, J. Altmüller, P. Nürnberg, K. Astrahantseff, C. Gloeckner, K. De Preter, C. Plass, S. Lee, H.N. Lode, K. O. Henrich, M. Gartlgruber, F. Speleman, P. Schmezer, F. Westermann, S. Rahmann, M. Fischer, A. Eggert, J.H. Schulte (2015): Mutational dynamics between primary and relapse neuroblastomas, *Nature Genetics* 47(8):872-7. DOI:10.1038/ng.3349.
- Wei, J., F. E. Kruis (2013): GPU-accelerated Monte Carlo simulation of particle coagulation based on the inverse method, *J. Comput. Phys.* 249, 67–79.
- Weise, C., J. Menser, S. Kaiser, A. Kempf, I. Wlokas (2015): Numerical investigation of the process steps in a spray flame reactor for nanoparticle synthesis, *Proc. Combust. Inst.* 35.2, 2259–2266.
- Wiebe, J., K. Kravchenko, E. Spohr (2015): Electrolyte effects in a model of proton discharge on charged electrodes, *Surf. Sci.* 631, 35.

Drittmitteln, das Gewinnen hervorragender Mitarbeiter\*innen und die Durchführung international sichtbarer Forschungsprojekte dar. Der Hochleistungsrechner befähigt die Forscher\*innen der UDE aber auch dazu, ihre Algorithmen so zu entwickeln, dass ein bis zwei Größenordnungen stärkere Höchstleistungsrechner (zum Beispiel Jülich, München, Stuttgart) überhaupt genutzt werden können. So sind nun verschiedene Arbeitsgruppen in der Lage, Spitzenforschung durchzuführen, die ein Vielfaches der an der UDE vorhandenen Rechenkapazität erfordert.

time, the high performance computer enables the researchers at the UDE to develop their algorithms for supercomputers one to two orders of magnitude more powerful (e.g. Jülich, Munich, Stuttgart). This has meant that various research groups now have the capability to undertake top-level research that requires many times greater computing capacity than at the UDE. It is precisely in helping the UDE researchers to this capability that the CCSS and ZIM support team plays a decisive role ([https://www.uni-due.de/ccss/sc\\_support.php](https://www.uni-due.de/ccss/sc_support.php)).

Bei dieser Befähigung der UDE-Forscher\*innen spielt gerade das Supportteam von CCSS und ZIM eine maßgebliche Rolle ([https://www.uni-due.de/ccss/sc\\_support.php](https://www.uni-due.de/ccss/sc_support.php)).

### Neue Mitglieder

Die Arbeitsgruppe „Hochleistungsrechnen“ von Prof. Jens Krüger befasst sich neben den klassischen Fragen des Forschungsgebietes mit wissenschaftlicher Visualisierung und Computergrafik. Im Fokus stehen Methoden zur In-Situ Visualisierung von großen Datensätzen direkt an ihrer Quelle, zum Beispiel im Großrechner selbst. Diese In-Situ Visualisierung adressiert eines der drängendsten Probleme heutiger Computerarchitekturen und Algorithmen, nämlich dass die steigende Rechenleistung immer größere und feiner aufgelöste Domänen beschreibt, die entstehenden Datenmengen aber nicht mehr transportabel sind. So dauert es schon heute mehrere Tage, den kompletten Speicherinhalt von Supercomputern auszulesen und zu transferieren, und dieses Problem wird sich in Zukunft noch verschärfen. Bisherige Lösungen versuchen das Problem durch Datenreduktion direkt auf dem Hochleistungsrechner anzugehen. Diese stoßen aber für viele Problemstellungen an Grenzen, da zu viele Informationen verloren gehen. Dagegen versuchen In-Situ Systeme nicht länger, die Daten abzutransportieren, sondern sie direkt zu visualisieren und den Benutzer\*innen „remote“ anzuzeigen. Dieser Ansatz hat sich gerade im MERCUR Projekt „Virtueller Interaktiver Numerischer Windkanal“ (VINKanal) der Arbeitsgruppen Kempf, Krüger sowie Turek (TU Dortmund) bewährt, um Ergebnisse einer schnellen GPU(Grafikprozessor)-basierten Strömungssimulation interaktiv und ohne weiteren Datentransfer zu visualisieren.

Die Arbeitsgruppe „Computergestützte Materialwissenschaften“ von Prof. Rossitza Pentcheva befasst sich mit der theoretischen Physik und quantenmechanischen Modellierung der Eigenschaften nanoskaliger Materialien. Dabei kommt die Dichtefunktionaltheorie zum

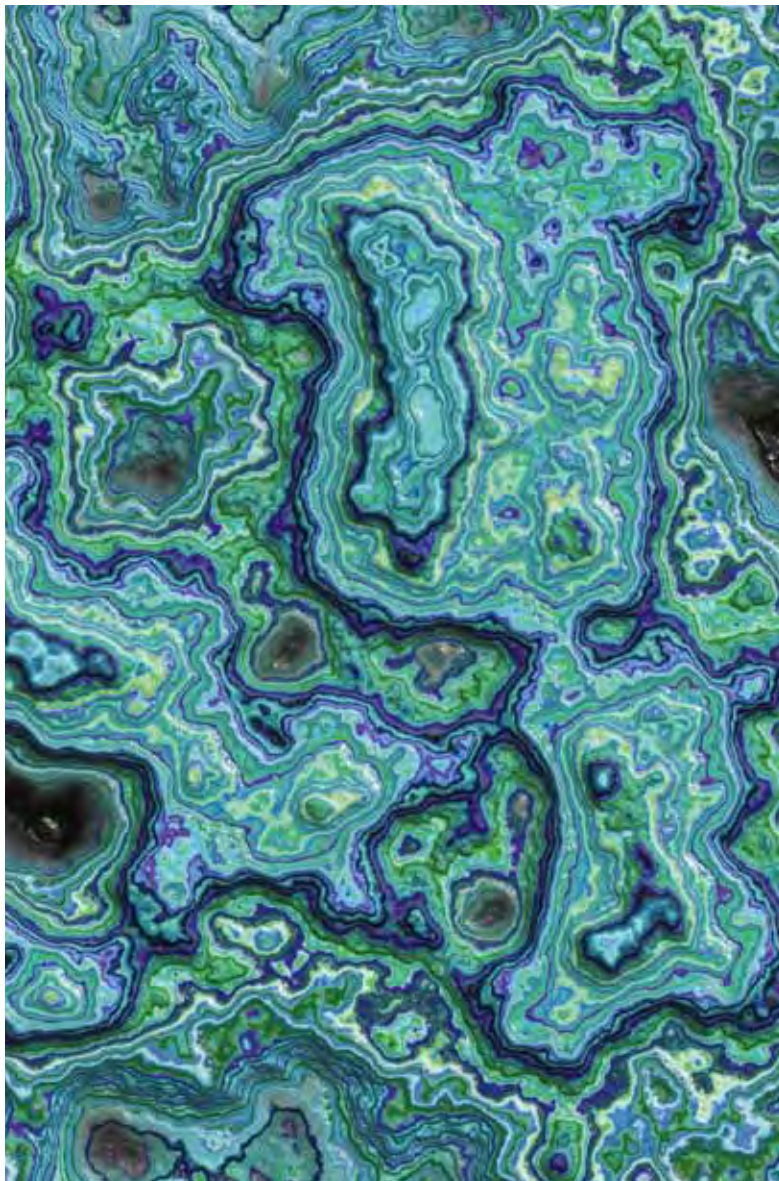


*Sprecher des Vorstands/Speaker of the Board: Prof. Dr. Andreas Kempf*

### New members

The “High Performance Computing” group of Prof. Jens Krüger works on the classical questions concerning this field of research but also on scientific visualization and computer graphics. The focus is on methods of in-situ visualization of large data sets directly at their source, e. g. in the mainframe computer. In-situ visualization addresses one of the most pressing problems of computer architectures and algorithms today, namely that increasing computing capacity is permitting ever greater and more finely resolved domains, but the resulting quantities of data are no longer transportable. Even now, it takes several days to read and transfer the entire storage content of a supercomputer, and the problem is set to become more acute in the future. Solutions so far have attempted to address the problem by

Einsatz, welche die Nutzung der Großrechner der UDE sowie des Leibniz Rechenzentrums (München) erfordert. Beispiele hierfür sind zwei Projekte (im DFG-SFB/TR80) zu Grenzflächen-induzierten Phänomenen und neuartigen Funktionalitäten von Oxidheterostrukturen und Oberflächen. Dabei müssen die Entstehung von zweidimensionalen Elektronengasen und Magnetismus an polaren Grenzflächen beschrieben werden, aber auch elektronische Phasenübergänge. Eine neue Forschungsrichtung be-



reducing data directly on the high performance computer. In many cases, however, these solutions are limited by the amount of information lost. By contrast, in-situ systems have stopped attempting to move the data, instead visualizing it directly and displaying it “remotely” to the user. This approach has recently been used in the MERCUR project “Virtual, interactive numerical wind-tunnel” (VINKanal) by the research groups of Kempf, Krüger, and Turek (TU Dortmund) to successfully visualize the results of a fast GPU (graphics-processor)-based flow simulation interactively and without further data transfer.

The “Computational Materials Physics” research group led by Prof. Rossitza Pentcheva is interested in the theoretical physics and quantum-mechanical modelling of the properties of nanoscale materials. The group employs density functional theory in its work, for which it requires use of the supercomputers at the UDE and the Leibniz Supercomputing Centre (Munich). Examples here include two projects (within DFG SFB/TR80) on boundary-layer-induced phenomena and novel functionalities of oxide heterostructures and surfaces. This involves describing the occurrence of two-dimensional electron gases and magnetism on polar boundary layers, as well as electronic phase transitions. A new research direction is concerned with the occurrence of topologically non-trivial phases in oxide heterostructures with characteristic structural patterns such as honeycomb lattices. The materials examined are relevant to future applications in electronics, spintronics or energy conversion. These ongoing projects are conducted in close collaboration with experimental groups at the UDE and externally, and they rely on the use of the high performance computer.

#### **New high performance computer**

Plans were first made in 2012 for the expansion of HPC capacities, which had become necessary due to the heavy workload of the Cray XT6m supercomputer and the growing demand as a result of new appointments and research projects.





schäftigt sich mit dem Auftreten topologisch nichttrivialer Phasen in Oxidheterostrukturen mit charakteristischen Strukturmustern, wie beispielsweise Honigwabengitter. Die untersuchten Materialien sind relevant für zukünftige Anwendungen in der Elektronik, Spintronik oder Energiekonversion. Die laufenden Projekte erfolgen in enger Kollaboration mit experimentellen Gruppen an der UDE und außerhalb und sind auf die Nutzung des Hochleistungsrechners angewiesen.

### Neuer Hochleistungsrechner

Im Jahr 2012 wurde mit den Planungen für die Erweiterung der HPC-Kapazitäten begonnen, die durch die hohen Auslastung des Hochleistungsrechners Cray XT6m und den gewachsenen Bedarf durch Neuberufungen und Forschungsprojekte notwendig wurde. Nach längerer Raumsuche wurde im Februar 2014 unter Leitung der Professoren Kempf und Schröder ein „Forschungsgroßgeräte“-Antrag zur Beschaffung des neuen Hochleistungsrechners HPC2@UDE eingereicht. Im März 2015 erhielt die UDE den Förderbescheid von DFG und Land. Zu Beginn des Jahres 2016 wird nun der neue Hochleistungsrechner HPC2@UDE installiert. Dieser wird über 13.000 Rechenkerne, knapp 40 TB Hauptspeicher und eine theoretische Leistung von 466 TeraFlops verfügen. Wahrscheinlich wird die UDE damit erneut über einen der 500 leistungsfähigsten Rechner weltweit verfügen, der zugleich das aktuelle Aushängeschild der ausführenden Firma sein soll. Parallel zur Antragsstellung betrieben das ZIM und das Dezernat für Gebäudemanagement gemeinsam die Standortsuche; aufgrund anhaltender Platzprobleme und anstehender Sanierungsarbeiten kam nur eine externe Lösung in Frage. Das Resultat sind die entsprechenden Räumlichkeiten, die durch die DU-IT (Tochter der Duisburger Versorgungs- und Verkehrsgesellschaft) auf dem Gebiet des Logport I in Duisburg-Rheinhausen zur Verfügung gestellt werden. Der Betrieb des HPC2@UDE wird so wie bei der Cray-XT6m vom ZIM sichergestellt.

## Wissenschaftler\*innen

### Researchers

- Prof. Dr. Burak Atakan
- Prof. Dr. Friedrich Benra
- Dr.-Ing. Dominik Brands
- Sen. Prof. Dr. Peter Entel
- Prof. Dr.-Ing. Istvan Erlich
- Prof. Dr. Heinz H. Gonska
- Prof. Dr. Ulrich Görtz
- Dr. rer. nat. Markus Gruner
- Prof. Dr. Thomas Guhr
- Prof. Dr. Christoph Hanck
- Prof. Dr. Wilhelm Heinrichs
- Prof. Dr. Daniel Hoffmann
- Prof. Dr. Georg Jansen
- Prof. Dr. Andreas Kempf
- Prof. Dr. Axel Klawonn (Universität zu Köln)
- Prof. Dr. Jürgen König
- Jun.-Prof. Dr.-Ing. Wojciech Kowalczyk
- Prof. Dr. Peter Kratzer
- Prof. Dr. Jens Krüger
- Prof. Dr. Einar Kruis
- Prof. Dr.-Ing. Bettar Ould el Moctar
- Prof. Dr. Pedro José Marrón
- Prof. Dr. Patrizio Neff
- Prof. Dr. Josef Pauli
- Prof. Dr. Rossitza Pentcheva
- Prof. Dr. Sven Rahmann
- Prof. Dr. Arnd Rösch
- Dr. Gabi Schierning
- Prof. Dr.-Ing. Dieter Schramm
- Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder
- Prof. Dr. Christof Schulz
- Prof. Dr. Rüdiger Schultz
- Prof. Dr. Eckhard Spohr
- Prof. Dr. Gerhard Starke
- Prof. Dr.-Ing. Torben Weis
- Dr.-Ing. Irenäus Wloka
- Prof. Dr. Dietrich Wolf



### **Supportteam**

Zur Unterstützung und zur besseren Vernetzung mit den Anwender\*innen haben ZIM und CCSS ein Support-Team gegründet. Dieses berät Nutzer\*innen bei Fragen des Wissenschaftlichen Rechnens, insbesondere auch bei der Nutzung der CRAY und des zukünftigen HPC2@UDE. Das Supportteam konnte mit Dr. Dominik Brands und Olaf Hasemann sehr kompetent besetzt werden.

### **Projekte, Kooperationen und Internationales**

Mitglieder des CCSS sind in vielfältigen nationalen und internationalen Projekten und Kooperationen eingebunden. So ist das CCSS in verschiedenen DFG-Forschergruppen (FOR 1376, 1509, 1993, 2284), -Schwerpunktprogrammen (SPP 1386, 1538, 1599, 1613, 1648, 1679) und -Sonderforschungsbereichen (TRR 60, 80, SFB 1093) vertreten. Weitere Projekte werden durch den Bund, die EU oder auch durch Drittmittel aus der Industrie gefördert.

### **Perspektiven**

Verschiedene gemeinsame Transregio-Anträge von CCSS-Mitgliedern innerhalb der UA Ruhr sind in Arbeit.

After a lengthy search for a suitable location, a research facility funding application was submitted under Professors Kempf and Schröder in February 2014 for investment in the new HPC2@UDE supercomputer. In March 2015, the UDE received approval from the DFG and the State. The new high-performance HPC2@UDE is being installed early in 2016. It will have 13,000 cores, just below 40 TB of main memory and theoretical performance of 466 teraflops. This is likely to mean that the UDE will once again be home to one of the world's 500 most powerful computers and the implementing company's current flagship system. Parallel to making the application, the ZIM and the Building Management Department were jointly searching for suitable premises, since ongoing space problems and a forthcoming modernization schedule made an external location the only viable solution. The search culminated in suitable premises being provided by the DU-IT (a subsidiary of the public utilities and transport provider Duisburger Versorgungs- und Verkehrsgesellschaft) on the site of the logport I logistics area in Duisburg-Rheinhausen. Operation of the new HPC2@UDE, like the Cray-XT6m, will be the responsibility of the ZIM.

### **Support team**

The ZIM and the CCSS have established a support team to assist users and improve networking. The support team provides advice on all matters relating to high performance computing, especially use of the CRAY and the future HPC2@UDE. The support team is in the very capable hands of Dr. Dominik Brands and Olaf Hasemann.

### **Projects, cooperation and international news**

Members of the CCSS are involved in many different national and international projects and collaborations. The CCSS is represented in various DFG Research Units (FOR 1376, 1509, 1993, 2284), Priority Programmes (SPP 1386, 1538, 1599, 1613, 1648, 1679) and Collaborative Research Centres (TRR 60, 80, SFB 1093). Further projects are re-

ceiving funding from the federal government, the EU, and from external sources in industry.

### Outlook

Various joint Transregio proposals by members of the CCSS are currently in preparation within the University Alliance Ruhr (UA Ruhr).

## Kontakt

### Contact



Center for Computational  
Sciences and Simulation

Center for Computational Sciences and Simulation (CCSS)  
Center for Computational Sciences and Simulation (CCSS)

**Prof. Dr. Andreas Kempf**

Sprecher des Vorstands

Carl-Benz-Str. 199  
47057 Duisburg

☎ +49 203 379 8129

@ ccss@uni-due.de

🌐 [www.uni-due.de/ccss](http://www.uni-due.de/ccss)