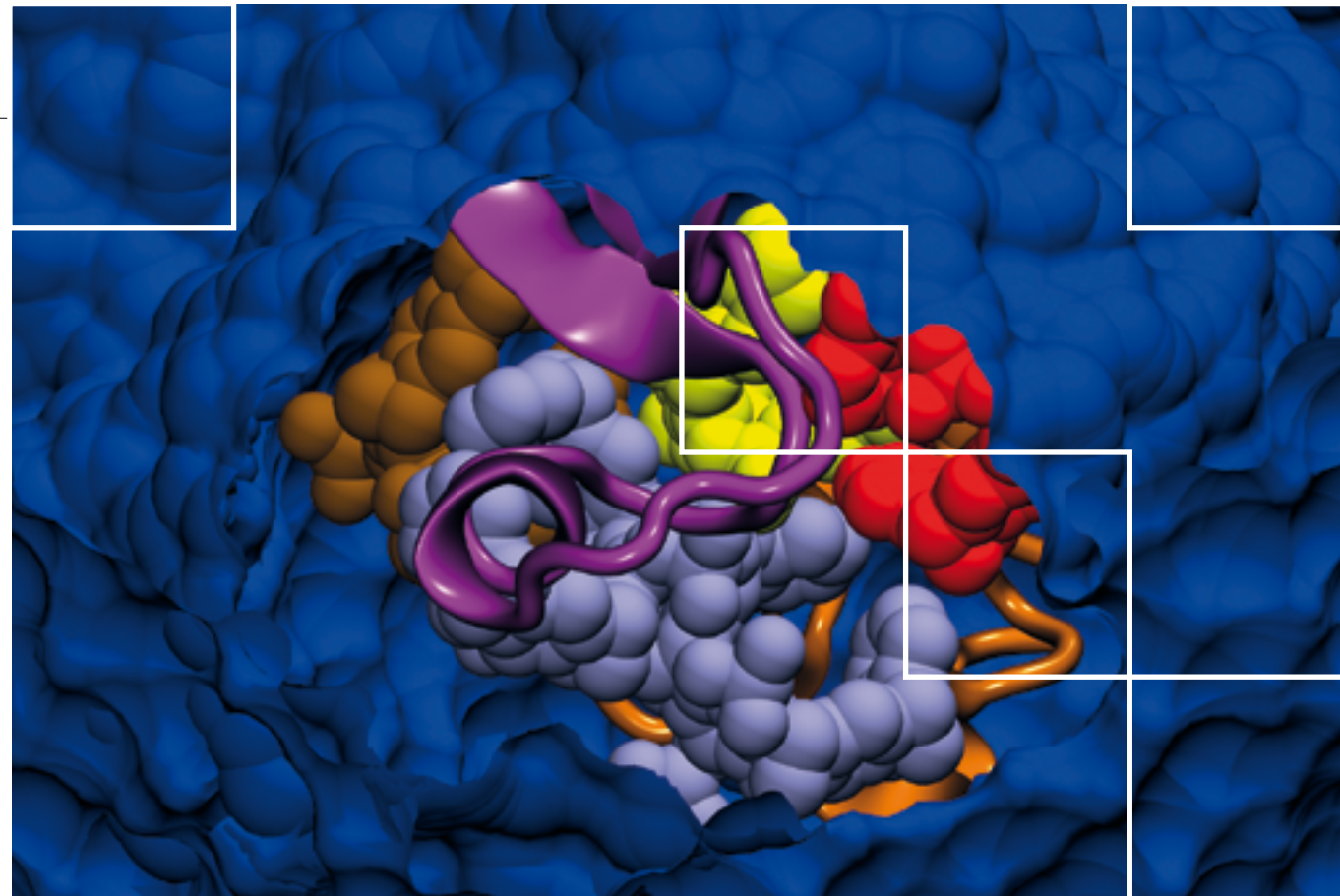




Die Wechselwirkung zwischen Abeta1-42-Monomeren (in magenta und orange) wird durch die molekulare Pinzette (Kalottenmodell) moduliert. Umgebende Wassermoleküle (dunkelblau) werden explizit, also vollständig atomistisch in unserem Modell berücksichtigt. Momentaufnahme einer Replika-Austausch-Molekulardynamik-Simulation.
The interactions between Abeta1-42 monomers (in pink and orange) are regulated by the molecular tweezer CLR01 (ball representation). Water molecules (dark blue) were explicitly considered. Snapshot taken from REMD simulations.

© Foto: Prof. Elsa Sánchez-García

CCSS – 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 das dritte 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 CCSS – Center for Computational Sciences and Simulation – represents scientific computing as one of the three principal elements of inquiry alongside theory and experiment. Since 2010 it has coordinated and connected around 35 research groups in this field at the University of Duisburg-Essen (UDE). Work focuses primarily on method transfer, software development and algorithm optimisation.

Das CCSS betreibt gemeinsam mit dem Zentrum für Informations- und Mediendienste (ZIM) den Hochleistungsrechner magnitUDE sowie weitere Server für das wissenschaftliche Rechnen. Ein Supportteam leistet dabei Unterstützung bei der Nutzung von Rechnern verschiedener Leistungsklassen. Das CCSS und seine Ressourcen tragen maßgeblich zur Zusammenarbeit zwischen den Arbeitsgruppen bei – in strukturierten Forschungsprojekten und über die 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 (z.B. vom Kristalliten zum Rotorblatt), 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 dieser Programme würde häufig 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. Unser Hochleistungsrechner magnitUDE, ein System von NEC, verfügt über fast 15.000 Kerne.

Dieser Hochleistungsrechner stellt ein wichtiges Werkzeug für die Einwerbung von Drittmitteln, das Gewinnen hervorragender Forscher*innen und die Durchführung

The CCSS and the Centre for Information and Media Services (ZIM) jointly operate the magnitUDE supercomputer and other servers for high performance computing (HPC). A support team is available to assist users with computers of different performance classes. The CCSS and its resources play a vital role in collaboration between the research groups – in structured research projects and beyond faculty boundaries.

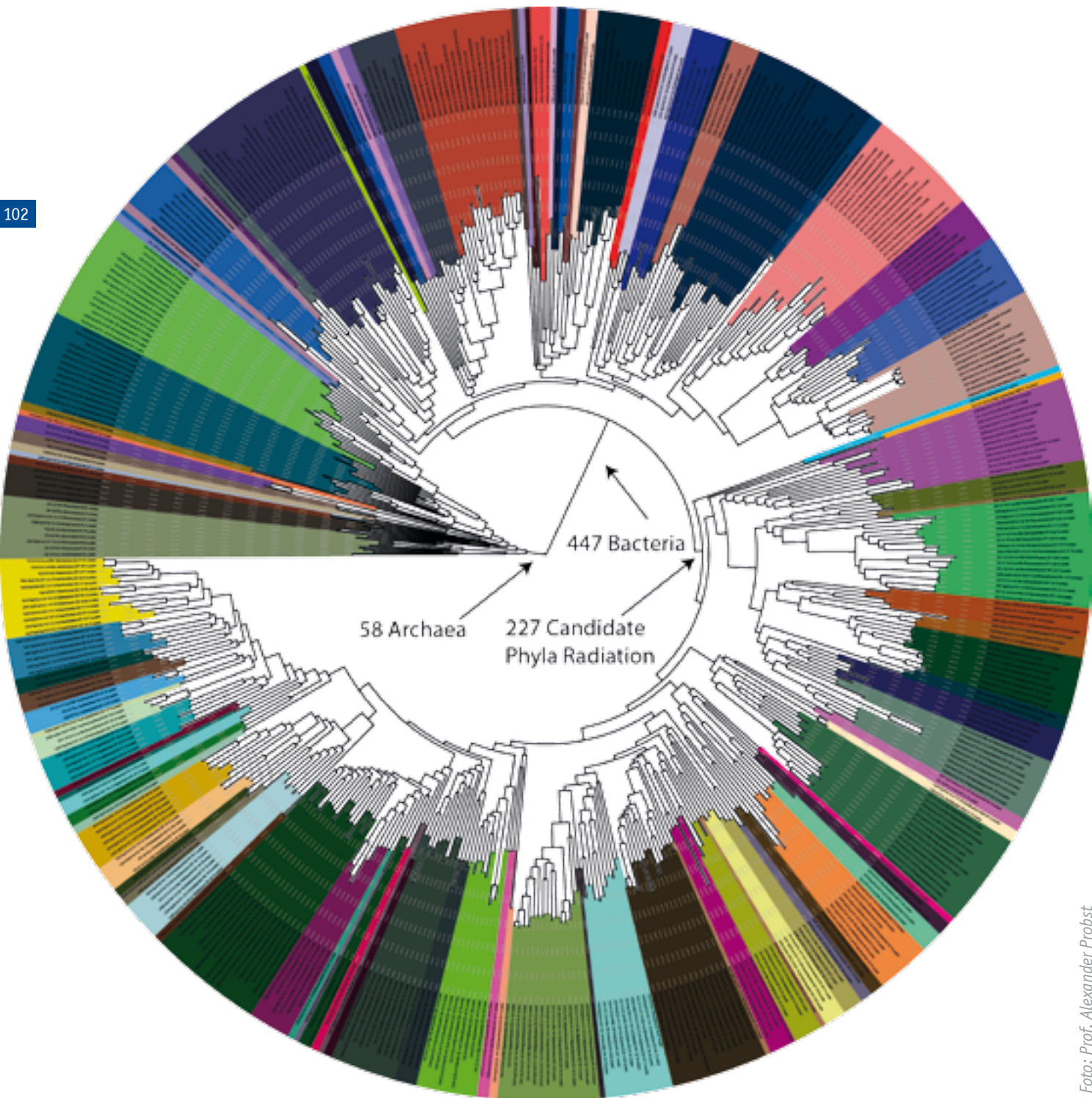
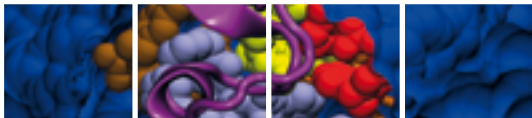
Research

High performance computing solves problems that are too complex for classical methods. First, the descriptive equations are modified (discretised) so that a computer algorithm can find a solution by iteration. The CCSS members work in algorithm development, software implementation, and use of the programs.

These programs are used to investigate phenomena that often occur on different scales (e.g. from a crystallite to a rotor blade), and the impact at small scales on the full simulation must then be modelled using closure models or scale transition conditions. Such modelling theories are similarly developed by members of the CCSS and tested in complex simulations.

CCSS members from Biology, Chemistry, Computer Science, Engineering, Mathematics and Physics often deal with problems that require huge amounts of computing capacity to solve – executing the corresponding programs sequentially would often take decades(!). For that reason, different computations must be executed simultaneously, which is referred to as parallel computing. Parallel computing is only possible with efficient, often complex parallelisation strategies and suitable parallel computers. Our supercomputer, magnitUDE, is an NEC system with close on 15,000 cores.

This supercomputer is instrumental in attracting external funding and outstanding researchers and conducting research projects with an international profile. Equally, it also allows the researchers at the UDE to develop their algorithms so that they can use even more powerful supercomputers (e.g. in Jülich, Munich or Stuttgart). This means that various research groups now have the capability to undertake top-level research that requires many times the computing power available at the UDE. It is precisely in enabling the UDE researchers to



© Foto: Prof. Alexander Probst

Diversität von rekonstruierten Genomen von einem einzelnen Probenahmeort des Colorado Plateaus in Utah, US. Es wurde Grundwasser aus verschiedenen Tiefen des Untergrundes beprobt. Dargestellt sind 505 verschiedene Organismen, die zu 104 verschiedenen definierten Phyla gehörten, viele davon sind unkultiviert oder repräsentieren neue Phyla.
Diversity of recovered genomes from a single sampling site, that accessed groundwater fluids from different depth of the Colorado Plateau, Utah (US). Displayed are 505 organisms that belong to 104 different phylum-level lineages, many of which have never been cultivated in the lab before or represent even new phylum-level lineages.

international sichtbarer Forschungsprojekte dar. Der Hochleistungsrechner befähigt aber auch die Forscher der UDE, ihre Algorithmen so zu entwickeln, dass noch Größenordnungen stärkere Höchstleistungsrechner (z.B. in Jülich, München oder Stuttgart) überhaupt genutzt werden dürfen. So sind nun verschiedene Arbeitsgruppen in der Lage, Spitzenforschung durchzuführen, die ein Vielfaches der an der UDE vorhandenen Rechenkapazität erfordert. Bei dieser Befähigung der UDE Forscher spielt gerade das gemeinsame Supportteam von CCSS und ZIM eine maßgebliche Rolle (https://www.uni-due.de/ccss/sc_support.php).
Allerdings sind auch Gruppen, die in einzelnen Projekten in Jülich, München oder Stuttgart rechnen können, für die meisten ihrer Arbeiten auf magnitUDE angewiesen, da deren Nutzung keine langwierige Projektantragstellung mit wissenschaftlicher Begutachtung voraussetzt, wie dies in Jülich, Stuttgart oder München der Fall wäre.

Neue Mitglieder

Neue Mitglieder wie Prof. Sánchez-García oder Prof. Probst bringen neue Themen im CCSS ein und benötigen gerade am Anfang dessen Unterstützung bei Administration, Rechnernutzung und insbesondere Rechenzeitressourcen.
Prof. Alexander Probst ist Leiter der “Group for Aquatic Microbial Ecology (GAME)” am Biofilm Center der Universität Duisburg-Essen, an welcher er auch die Professur für Aquatische Mikrobielle Ökologie vertritt. Herr Probst wechselte von der University of California, Berkeley, wo er als PostDoc an Kaltwassergeysiren forschte, nach Essen. Diese Forschung setzt er nun hier an der UDE fort, wobei dabei ein besonderer Schwerpunkt die terrestrische tiefe Biosphäre ist, die größtenteils von unbekannten Mikroorganismen bevölkert wird. Diese unbekannten Lebensformen werden im Verlauf der Forschung in den „Baum des Lebens“ eingeordnet (Hug et al. 2016) – ein Modell für Forschung und Lehre, welches ständiger Veränderung unterliegt. Fast täglich werden heutzutage neue Organismen mittels Genomsequenzierung aus der Umwelt entdeckt und bedürfen der taxonomischen Einordnung. Für individuelle Gruppen kann dies schnell passieren, sofern entsprechende Nachbargruppen bereits bekannt sind. Jedoch stellt diese Einordnung



Wissenschaftlicher Direktor/Scientific Director: Prof. Dr. Andreas Kempf

do this that the joint CCSS and ZIM support team plays such an important role (https://www.uni-due.de/ccss/sc_support.php).
Nevertheless, groups that are able to work on individual projects in Jülich, Munich or Stuttgart also rely on magnitUDE for much of their work, as it can be used without the lengthy project application process and scientific review that would be required by those facilities.

New Members

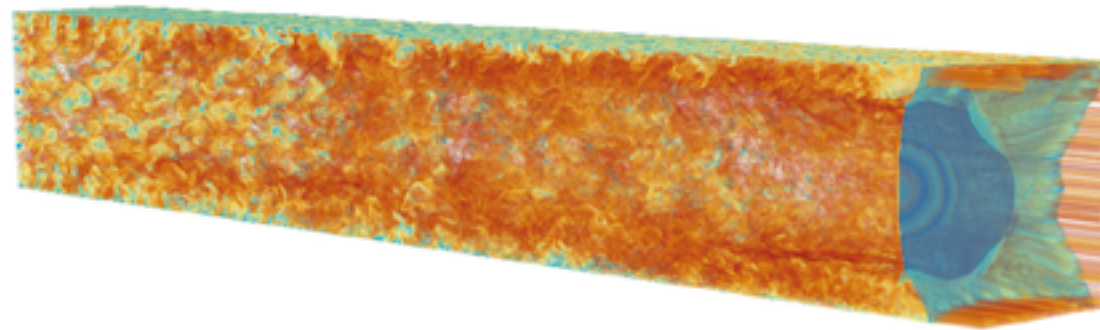
New members like Prof. Sánchez-García or Prof. Probst introduce new research interests to the CCSS; especially in the initial stages, they need the Center’s support with administration, computer use and, in particular, computing time resources.
Dr. Alexander Probst is head of the Group for Aquatic Microbial Ecology (GAME) at the Biofilm Center of the University of Duisburg-Essen, where he is also professor of Aquatic Microbial Ecology.



gerade bei komplett unbekannten Arten, von welchen keine nah verwandten Organismen bekannt sind, eine größere Herausforderung dar. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit metabolischen Stoffwechselvorgängen im terrestrischen Untergrund, genauer mit der tiefen Biosphäre. Hier werden in fast jeder Probe zig neue mikrobielle Arten entdeckt, die klassifiziert werden müssen. Als Beispiel sei hier eine neue Veröffentlichung in Nature Microbiology genannt, in welcher mehr als 1.200 neue Genome vorgestellt werden. Um den Baum des Lebens weiterhin erweitern und neue Organismen korrekt klassifizieren zu können, benötigt die Gruppe von Prof. Alexander Probst an der UDE pro Jahr ca. 300.000 CPU-Stunden. Die benutzten Algorithmen beinhalten Maximum Likelihood Methoden und Bayesian Inferences, um phylogenetische Bäume basierend auf Alignments von konkatenierten Markergenen zu berechnen. Die Resultate werden in sehr vielen Fachartikeln, die aus der Arbeitsgruppe hervorgehen werden, Verwendung finden.

Das Team um Prof. Elsa Sánchez-García verwendet Computersimulationen, um komplexe chemische und biochemische Prozesse zu studieren. Im Fokus stehen dabei Eigenschaften, Reaktionsverhalten und Anwendungen unterschiedlichster Systeme, beispielsweise Studien zur Stabilisierung reaktiver Moleküle, zur Funktion von Proteinen und zu enzymatischen Reaktionen. Im Zentrum der Forschung steht die Implementierung und Anwendung von Hybridmethoden, typischerweise Quantenmechanik/Molekularmechanik-Näherungen (QM/MM und QM/MM/

Prof. Probst transferred to Essen from the University of California, Berkeley, where he conducted research on cold-water geysers as a postdoc. He is now continuing this research at the UDE, with a special focus on the deep terrestrial subsurface biosphere, which is largely populated by unknown microorganisms. These unfamiliar life forms are being classified in the course of the research in the “tree of life” (Hug et al. 2016) – a constantly evolving research and teaching model. Genome sequencing means that new organisms in the environment are being discovered almost daily, all of which require taxonomic classification. For some groups this can be a quick process, provided that relevant neighbouring groups are already known. When it comes to entirely new species for which there are no known closely related organisms, however, classification can be more of a challenge. The research group works on metabolic processes in the terrestrial subsurface, more precisely the deep biosphere. This is an environment in which almost every sample reveals countless new microbial species for classification. A new article published in Nature Microbiology, for example, presents over 1,200 new genomes. To continue expanding the tree of life and correctly classify new organisms, Alexander Probst and his group at the UDE need around 300,000 hours of CPU time a year. The algorithms they use include maximum likelihood methods and Bayesian inferences to calculate phylogenetic trees based on alignments of concatenated marker genes. The results will be used in very many specialist articles that will come out of the research group.



© Foto: Prof. Andreas Kempf

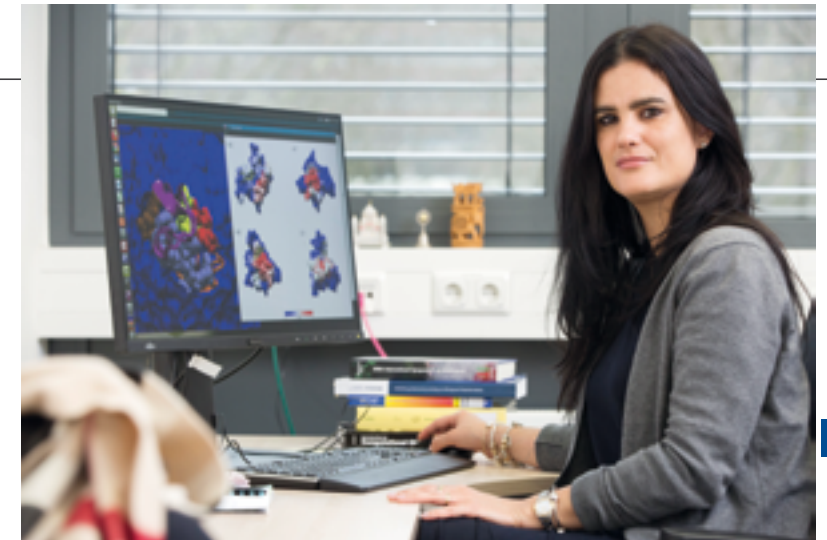
Simulation eines Stoßrohrexperimentes zur Bestimmung und Korrektur der gemessenen Reaktionsverzugszeit in der Gasphase. Dargestellt sind die Beträge des Dichtegradienten, was sowohl Stoßwellen als auch Mischungszonen zwischen kaltem und heißem Gas zeigt.

Simulation of a shock tube experiment for determining and correcting reaction delay time in the gas phase. The figure shows the density gradients, which highlights shockwaves and the mixing layers between cold and hot gas.

CG). Für biomolekulare Anwendungen ist es wichtig, dass die Funktionalität von Systemen mit unterschiedlichster Komplexität – von intrinsisch fehlgeordneten Peptiden zu großen Biomolekülen – durch Wechselwirkungen mit kleinen Molekülen und Peptiden gesteuert werden kann. Die Studien erlauben es dann, die Bindungstaschen in Proteinen vorherzusagen und darauf basierend verbesserte Liganden mit maßgeschneiderten Eigenschaften „in silico“ zu entwickeln. Auf der anderen Seite sind Mutationen ein Werkzeug zur Regulation biologischer Prozesse. Entsprechende Arbeiten führen zu einem molekularen Verständnis des Effektes von Mutationen in biologischen Systemen. An erster Stelle steht dabei die computergestützte Voraussage von Mutationen zur gezielten Veränderung von Proteineigenschaften, z.B. der enzymatischen Aktivität. Zudem wird die Rolle intermolekularer Wechselwirkungen zwischen Solvens (Wasser in den meisten biologisch relevanten Systemen) und Solut zur Optimierung der enzymatischen Katalyse und Steuerung der Proteinaggregation und Protein-Ligand Wechselwirkung untersucht, um nur einige Beispiele zu nennen. Die Gruppe hat typischerweise einen Bedarf von 25 Millionen Kernstunden im Jahr, die über magnitUDE, weitere Cluster und Anträge in Jülich abgedeckt werden.

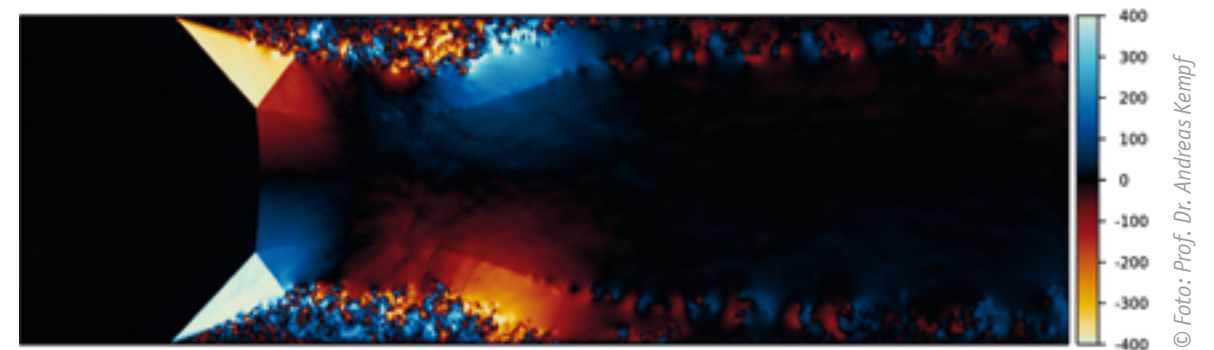
Neuer Hochleistungsrechner magnitUDE

Im Jahr 2012 wurde mit den Planungen für die Erweiterung der HPC-Kapazitäten an der UDE begonnen, die durch die hohe Auslastung



Prof. Dr. Elsa Sánchez-García

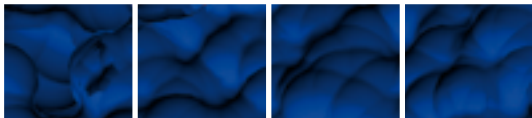
Prof. Sánchez-García's field of research is computational chemistry and computational chemical biology, with emphasis on complex biological systems and reactive intermediates. Before she established the Computational Biochemistry group within the Faculty of Biology of at the University Duisburg-Essen, she was independent group leader at the Max Planck Institute for Coal Research (Mülheim). The Computational Biochemistry research group works on investigating the properties, reactive behaviour and applications of the most diverse systems, from reactive species to protein complexes. Implementation and application of hybrid methods, typically quantum mechanics/molecular mechanics approaches (QM/MM) and their combination with coarse-grained techniques (QM/MM/CG), are central to the research. For biomolecular applications, their studies facilitate predictions of binding sites in proteins and use this information



© Foto: Prof. Dr. Andreas Kempf

Dreidimensionale Simulation eines Stoßrohrexperimentes zur Bestimmung und Korrektur der gemessenen Reaktionsverzugszeit in der Gasphase. Dargestellt ist die Geschwindigkeit (m/s) in wandnormaler Richtung hinter dem reflektierten Stoß entlang der Mittelebene.

Three-dimensional simulation of a shock tube experiment for determining and correcting reaction delay time in the gas phase. The figure shows the wall-normal velocity component (m/s) behind the reflected shock wave in a plane through the center-line.



Wissenschaftler*innen | Researchers

**Fakultät für
Wirtschaftswissenschaften**
Prof. Dr. Christoph Hanck

Fakultät für Mathematik
Prof. Dr. Heinz H. Gonska
Prof. Dr. Ulrich Görtz
Prof. Dr. Patrizio Neff
Prof. Dr. Arnd Rösch
Prof. Dr. Rüdiger Schultz
Prof. Dr. Gerhard Starke

Fakultät für Physik
Prof. Dr. Peter Entel
Prof. Dr. Thomas Guhr
Prof. Dr. Jürgen König
Prof. Dr. Peter Kratzer
Prof. Dr. Rossitza Pentcheva
Prof. Dr. Dietrich Wolf

Fakultät für Chemie
Prof. Dr. Georg Jansen
Prof. Dr. Eckhard Spohr

Fakultät für Medizin
Prof. Dr. Sven Rahmann

Fakultät für Biologie
Prof. Dr. Daniel Hoffmann
Prof. Dr. Alexander Probst
Prof. Dr. Elsa Sánchez-García

**Fakultät für
Ingenieurwissenschaften**
Prof. Dr. Burak Atakan
Prof. Dr. Friedrich Benra
PD Dr.-Ing. Bernhard Eidel
Prof. Dr.-Ing. Bettar Ould el Moctar
Prof. Dr.-Ing. Istvan Erlich
Prof. Dr. Wilhelm Heinrichs
Prof. Dr. Andreas Kempf
Prof. Dr.-Ing. Wojciech Kowalczyk
Prof. Dr. Jens Krüger
Prof. Dr. Einar Kruis
Prof. Dr. Pedro José Marrón
Prof. Dr. Josef Pauli
Dr. Gabi Schierning
Prof. Dr.-Ing. Dieter Schramm
Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder
Prof. Dr. Christof Schulz
Prof. Dr.-Ing. Torben Weis
Dr.-Ing. Irenäus Wlokas

Wir trauern um Olaf Hasemann, der am 23. Dezember nach schwerer Krankheit verstorben ist. Mit Olaf haben wir einen wertvollen und geschätzten Mitarbeiter des Supportteams verloren, der sich durch seine Hilfsbereitschaft, Kompetenz und Effizienz um das wissenschaftliche Rechnen an der UDE verdient gemacht hat. Olaf fand immer Zeit, Kolleg*innen, Studierende und Promovierende zu beraten, zu betreuen und zu inspirieren. Wir werden Olaf nicht vergessen, sein Tod erfüllt uns mit tiefer Trauer.

We are mourning Olaf Hasemann, who passed away on 23 December after a serious illness. In Olaf we have lost a valued and respected member of the support team, who with his helpful manner, expertise and efficiency made an outstanding contribution to high performance computing at the UDE. Olaf always found the time to advise, support and inspire colleagues, students and postgraduates. We will not forget Olaf. We are deeply saddened by his death.

for the development of improved ligands with tailored properties “in silico”. Meanwhile, mutations are also investigated as a tool for the regulation of biological processes. Foremost in this research is computer-assisted prediction of mutations for targeted modification of protein properties, e.g. of enzymatic activity. Another area of study is comprised by the role of intermolecular interactions between solvent and solute for the optimisation of enzymatic catalysis and for the control of protein aggregation and protein-ligand interactions. These are just some examples. Currently, the research group typically requires 25 million core hours per year, which are covered by magnitUDE, other clusters, and one application in Jülich. Prof. Sánchez-García is a member of significantly contributes of the Cluster of Excellence RESOLV (EXC 1069) on Solvation Science, of the Collaborative Research Centre 1279 and to the Collaborative Research Centre 1093 “Supramolecular Chemistry on Proteins”. CRC 1093 is a joint effort of researchers from the Faculties of Biology and Chemistry at the University of Duisburg Essen towards control of biomolecular function by supramolecular ligands.

New magnitUDE Supercomputer

Planning began in 2012 to expand the HPC capacities at the UDE, made necessary by the heavy workload of the Cray XT6m supercomputer and growing demand due to new appointments and research projects. After a lengthy search for a location, a research facility funding application was submitted under Professors Kempf and Schröder in February 2014 for investment in the new supercomputer. In March 2015 the UDE received approval from the DFG and the state government. In the subsequent tender, a test matrix based on the requirements of the user groups was used to find the best possible solution for the UDE. The winner of the tender was announced in November 2015, and NEC installed the new magnitUDE supercomputer at the beginning of 2016. It initially had over 564 compute nodes with a total of 13,536 processor cores, over 40,704 GB of main memory and fast communication with Intel OmniPath architecture; it is connected to 480 TB of space on a parallel storage system, so that multiple nodes can access the shared memory

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 eingereicht. Im März 2015 erhielt die UDE den Förderbescheid von DFG und Land. Bei der folgenden Ausschreibung wurde mittels einer Testmatrix, die auf der Grundlage der Anforderungen der Anwendergruppen erstellt wurde, die bestmögliche Eignung für die UDE sichergestellt. Seit November 2015 steht als Gewinner des Verfahrens die Firma NEC fest, welche zu Beginn des Jahres 2016 den neuen Hochleistungsrechner magnitUDE installiert hat. Dieser verfügte zu Beginn über 564 Rechenknoten, die insgesamt 13.536 Rechenkerne enthielten, über 40.704 GB Hauptspeicher und eine schnelle Vernetzung mit Intel OmniPath Technologie; an das System sind 480 TB Festplattenplatz über ein paralleles Speichersystem angebunden, so dass viele Knoten gleichzeitig auf den gemeinsamen Speicher zugreifen können. Das System wird durch wassergekühlte Rücktüren energiesparend klimatisiert und hat eine maximale Leistungsaufnahme von 200 kW Strom. Es ist in insgesamt zehn Serverschränken untergebracht. Benchmarkläufe haben gezeigt, dass die Maschine im Juni 2016 einen sehr respektablen Platz 279 der weltweiten TOP 500-Liste belegt hat. Die Entwicklung beim Hochleistungsrechnen ist allerdings so rasant, dass die Maschine nun aus der Liste verdrängt wurde. Ein Listen-Platz für die UDE ist aber nicht kontinuierlich erforderlich; es genügt vielmehr, wenn eine neue Maschine zu Beginn ihres Betriebs einen Platz in der Mitte der Liste erreicht. Anfang 2017 wurde magnitUDE mit Fördermitteln aus der Physik auf fast 15.000 Rechenkerne erweitert.

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 magnitUDE. Das Supportteam konnte mit Dr. Dominik Brands und Dipl.-Inf. Olaf Hasemann sehr kompetent besetzt werden. Beide haben sich

Ausgewählte Publikationen | Selected Publications

Gruhlke, P., E.I. Mahiques, S. Dederichs, F. Proch, C. Beck, A.M. Kempf (2017): Prediction of CO and NOx Pollutants In A Stratified Bluff Body Burner. GT2017-63203. ASME Turbo Expo 2017.

Gruner, M.E., R. Niemann, P. Entel, R. Pentcheva, U.K. Rössler, K. Nielsch, S. Fähler (2017): Modulations in martensitic Heusler alloys originate from nanotwin ordering. arXiv:1701.01562.

Hug, L.A., B.J. Baker, K. Anantharaman, C.T. Brown, A. J. Probst, C.J. Castelle, et al. (2016): A new view of the tree of life. Nature Microbiology. 1, 16048.

Mochty, L., A.M. Kempf (2017): UNIKATE 50 „Natur-, Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften – High-Performance und Cloud Computing“.

Morbec, J.M., P. Kratzer (2017): The role of the van der Waals interactions in the adsorption of anthracene and pentacene on the Ag(111) surface. J. Chem. Phys. 146, 034702.

Nguyen, T., A.M. Kempf (2017): Investigation of Numerical Effects on the Flow and Combustion in LES of ICE, Oil & Gas Science and Technology-Revue d’IFP Energies nouvelles. 72 4, 25.

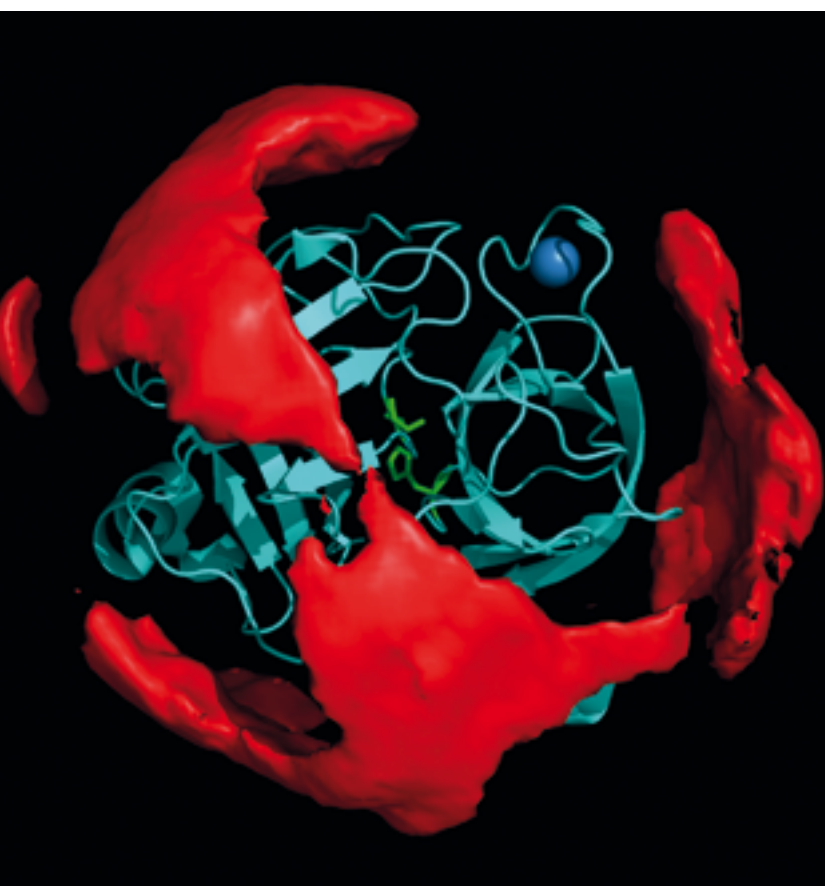
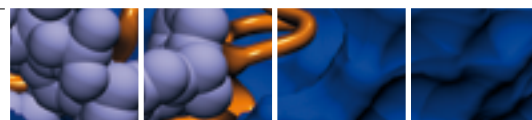
Proch, F., P. Domingo, L. Vervisch, A.M. Kempf (2017): Flame resolved simulation of a turbulent premixed bluff-body burner experiment. Part I: Analysis of the reaction zone dynamics with tabulated chemistry. Combustion and Flame. 180, 321–339.

Rieth, M., A.M. Kempf, A. Kronenburg, O.T. Stein (2017): Carrier-phase DNS of pulverized coal particle ignition and volatile burning in a turbulent mixing layer. Fuel 212, 364–374.

Suzuki, T., J. Lawrence, M. Walker, J. M. Morbec, P. Blowey, K. Yagyu, P. Kratzer, G. Costantini (2017): Indium coverage of the Si(111)-√7×√3-In surface. Physical Review B 96, 3, 035412.

Vöpel, T., K. Bravo-Rodriguez, S. Mittal, S. Vachharajani, D. Gnutt, A. Sharma, A. Steinhof, O. Fatoba, G. Ellrichmann, M. Nshanian, C. Heid, J.A. Loo, F.-G. Klärner, T. Schrader, G. Bitan, E.E. Wanker, S. Ebbinghaus, E. Sánchez-García (2017): Inhibition of Huntingtin Exon-1 Aggregation by the Molecular Tweezer CLR01, Journal of the American Chemical Society 139, 5640 .

Wolloch, M., M. E. Gruner, W. Keune, P. Mohn, J. Redinger, F. Hofer, D. Suess, R. Podlucky, J. Landers, S. Salamon, F. Scheibel, D. Spoddig, R. Witte, B. Roldan Cuenya, O. Gutfleisch, M. Y. Hu, J. Zhao, T. Toellner, E. E. Alp, M. Siewert, P. Entel, R. Pentcheva, H. Wende (2016).Phys. Rev. B 94, 174435.



Computermodell von Energie-Isoflächen von Bisphosphonat um das Protein Trypsin.
Zur Methode siehe Grad et al 2018, doi:10.1021/acs.jcim.7b00413.
Computationally generated model of energy iso-surfaces of bisphosphonate around the protein trypsin. For method see Grad et al 2018, doi:10.1021/acs.jcim.7b00413.

© Foto: Prof. Daniel Hoffmann

simultaneously. The system has energy-saving water cooling in the rear doors and consumes a maximum of 200 kW of electricity. It is installed in a total of ten server cabinets. Benchmarks showed that the supercomputer occupied a very respectable 279th place in the worldwide TOP 500 list as of June 2016. Given the speed at which HPC is advancing, however, it has now already been nosed out of the list. For the UDE's purposes, a permanent place on the list is not essential, however, and it suffices for a machine to be in the middle of the list when it is first commissioned. At the beginning of 2017 magnitUDE was upgraded with funds from the Faculty of Physics to just under 15,000 processor cores.

Support Team

The ZIM and CCSS together set up a support team to assist users and improve networking. It provides advice to users on all matters of scientific computing, and especially also on magnitUDE. The support team was placed in the very capable hands of Dr. Brands and Dipl.-Inf. Olaf Hasemann. Both played a key role in the tender procedure, benchmarking, installation and commissioning of magnitUDE. The team today is a valuable point of contact for magnitUDE users.

Project ZIM-HPC-HUB: Virtual Servers for High Performance Computing

The CCSS and ZIM launched the ZIM-HPC-HUB project to provide a central solution for other applications that require higher computing power but neither a parallel file system nor a high-speed

um Ausschreibung, Benchmarking, Installation und Inbetriebnahme der magnitUDE verdient gemacht; das Team stellt heute für die Nutzer*innen der magnitUDE wertvolle Ansprechpartner dar.

Projekt „ZIM-HPC-HUB“, virtuelle Server für wissenschaftliches Rechnen

Um auch für andere Anwendungen, die zwar ebenfalls eine erhöhte Rechenleistung benötigen, aber weder ein paralleles Filesystem noch ein Hochgeschwindigkeitsnetzwerk zwischen den Rechenknoten erfordern, eine zentrale Lösung zur Verfügung zu stellen, haben das CCSS und das ZIM das Projekt „ZIM-HPC-HUB“ initiiert. Dabei soll den Nutzer*innen auf Basis virtueller Server in den zentralen Serverräumen des ZIM Rechenleistung und Speicher-Ressourcen nach Bedarf bereitgestellt und auch kleinschrittig abgerechnet werden. Erste Use-Cases dazu wurden im Jahr 2017 bereits angestoßen.

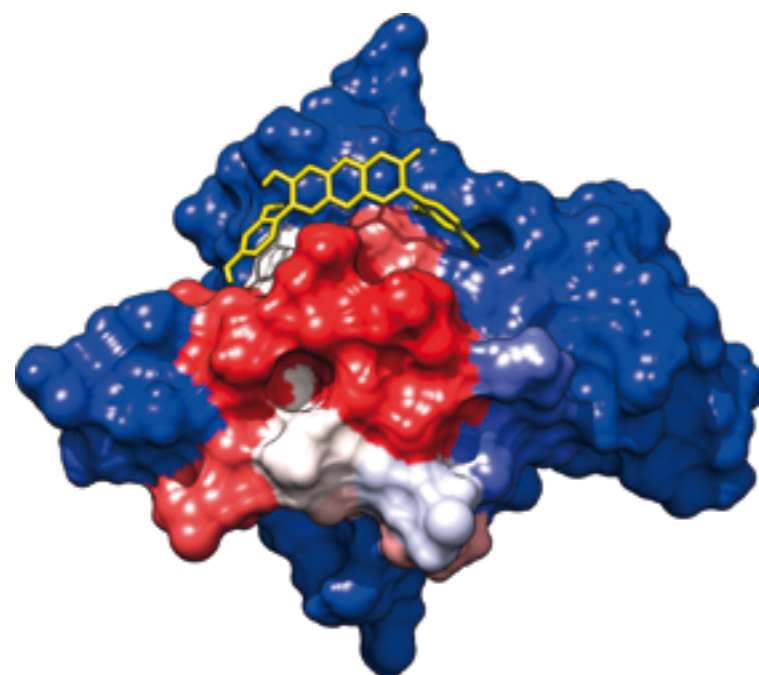
Projekte, Kooperationen und Internationales

Mitglieder des CCSS sind in vielfältigen nationalen und internationalen Projekten und Kooperationen eingebunden. So ist das CCSS in verschiedenen DFG-Forschergruppen, Schwerpunktprogrammen und -Sonderforschungsbereichen vertreten. Weitere Projekte werden durch den Bund, die EU oder auch durch Drittmittel aus der Industrie gefördert. Verschiedene gemeinsame Transregio-Anträge von CCSS Mitgliedern innerhalb der UA Ruhr sind in Arbeit.

interconnect between the compute nodes. The project sets out to make computing capacity and storage resources based on virtual servers in the ZIM's central server rooms available to users on demand and billed incrementally. The first use cases were launched in 2017.

Projects, Collaboration 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, Priority Programmes and Collaborative Research Centres. Further projects are funded by the federal government, the EU, or external sources in industry. Various joint Transregio proposals by members of the CCSS within the University Alliance Ruhr (UA Ruhr) are currently in preparation.

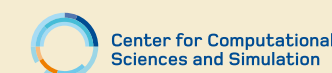


Wechselwirkung zwischen der organischen Verbindung O4 (Stabmodell in gelb) und dem Protein Ex1Q47 (Oberflächendarstellung). Die Färbung repräsentiert die Wahrscheinlichkeit, dass O4 während der Molekulardynamik-Simulation in einer Entfernung von weniger als 5 Å zum Protein anzutreffen ist.
Interactions between the organic compound O4 (yellow sticks) and the Ex1Q47 protein (shown as surface), coloured according to the normalized probability to find O4 within 5 Å of each protein residue during the MD simulations.

Kontakt | Contact

Center for Computational Sciences and Simulation (ccss)

Sprecher des Vorstands:
Prof. Dr. Andreas Kempf



Geschäftsführer:
Dr. Holger Gollan

Carl-Benz-Str. 199
47057 Duisburg
NETZ 1.09

☎ +49 203 379 8129
@ ccss@uni-due.de
🌐 www.uni-due.de/ccss