

# News

# April 2019

Flashback: E-Science-Tage 2019

---

bwHPC-Schulungen & bwHPC User Forum  
bwHPC-Kompetenzzentrum „GSS“ &  
Internationales Symposium  
Messestand auf der ISC 2019  
bwVisu-Umfrage

---

Call for Tiger Team Support  
Wissenschaftliche Publikationen &  
Acknowledgements

---

# Flashback: E-Science-Tage 2019



## E-Science-Tage 2019 "Data to Knowledge"

Unter dem Motto "Data to Knowledge" fanden vom 27. bis 29. März die E-Science-Tage 2019 an der Ruperto Carola in Heidelberg statt. Über 200 Teilnehmer beschäftigten sich drei Tage lang mit Herausforderungen, Konzepten und Lösungsansätzen im Bereich des Forschungsdatenmanagements. Immer mehr Wissenschaftsbereiche bauen auf digitalisierte Forschungsmethoden, welche immer mehr Daten produzieren um daraus neue wissenschaftliche Erkenntnisse zu generieren. Um diese Datenflut organisieren und den Wissenschaftlern zugänglich machen zu können, bedarf es Technologien, institutsübergreifende Strukturen, Verbundprojekte und vor allem auch eine Sensibilisierung aller Akteure.

Deshalb trafen sich nach den E-Science-Tagen 2017 auch dieses Jahr wieder Wissenschaftler und Infrastrukturpartner aus dem deutschsprachigen Raum, um sich über Themen wie Big Data, Software, Standards, Archivieren und Publizieren auszutauschen. Neben Keynotes von Vertretern des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Rates für Informationsinfrastrukturen (RfII), Vorträgen und Workshops bot die Konferenz Messestände, interaktive Demotische, fünfminütige Lightning-Talks, eine Postersession und eine Podiumsdiskussion mit dem Motto "Die Wissensinfrastruktur von morgen" an.



Foto: Oliver Mattes/Universität Heidelberg

# Flashback: E-Science-Tage 2019



Das bwHPC-S5 Projekt hat sich mit einem Messestand an den E-Science-Tagen beteiligt. Es wurden die bwHPC-Systeme und Landesspeichersysteme wie SDS@hd vorgestellt sowie das erweiterte Support-Konzept, das auch die Unterstützung beim Forschungsdatenmanagement (FDM) auf dem Weg von der Datenentstehung und der Datenanalyse hin zu Archivdiensten und Repositorien mit einschließt. Für das bwHPC-S5 Team vor Ort waren die E-Science-Tage eine willkommene Gelegenheit, um FDM-Workflows mit Nutzerinnen und Nutzern zu diskutieren und wertvolle Kontakte zu FDM-Diensten zu knüpfen.

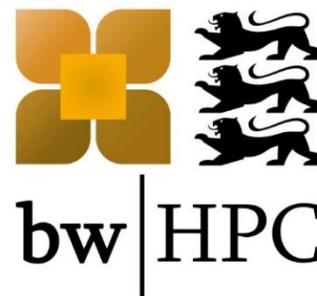


Foto: Oliver Mattes/Universität Heidelberg

Offiziell eröffnet wurde die Konferenz von Prof. Dr. Vincent Heuveline, dem Leiter des Rechenzentrums und Chief Information Officer (CIO) der Universität Heidelberg, Prof. Dr. Dr. h.c. Bernhard Eitel, dem Rektor der Universität Heidelberg und der Ministerin für Wissenschaft, Forschung und Kunst Theresia Bauer, welche eine systematische Datensicherung und einen kompetenten Umgang mit riesigen Datenmengen als Voraussetzung für erfolgreiche Wissenschaft bezeichnete.

Text: Fabian Gebhart, Sabine Richling /Universität Heidelberg

# bwHPC-Schulungen



Niveau	Thema	Titel	Kurs- beginn	Kurs- ende	Ort
Advanced course	Programming	Fortran for Scientific Computing	06.05. 2019	10.05. 2019	Universität Stuttgart
					<a href="https://hls.de/training/2019-04-01-ftn1">hls.de/training/2019-04-01-ftn1</a>
Advanced course	Programming	Advanced C++ with Focus on Software Engineering	14.05. 2019	17.05. 2019	Universität Stuttgart
					<a href="https://hls.de/training/2019-05-14-cpp1">hls.de/training/2019-05-14-cpp1</a>
Advanced course	Pre- & Postprocessing	Scientific Visualization	20.05. 2019	21.05. 2019	Universität Stuttgart
					<a href="https://hls.de/training/2019-05-20-vis1">hls.de/training/2019-05-20-vis1</a>
Special course	Programming for Tier2 and Tier1	OpenMP GPU Directives for Parallel Accelerated Supercomputers - an alternative to CUDA from Cray perspective	22.05. 2019	23.05. 2019	Universität Stuttgart
					<a href="https://hls.de/training/2019-05-22-gpu">hls.de/training/2019-05-22-gpu</a>
Advanced course	Parallel programming	Node-Level Performance Engineering	27.06. 2019	28.06. 2019	Universität Stuttgart
					<a href="https://hls.de/training/2019-06-27-nlp">hls.de/training/2019-06-27-nlp</a>

# bwHPC-Schulungen & bwHPC User Forum



Niveau	Thema	Titel	Kurs- beginn	Kurs- ende	Ort
Advanced course	Parallel programming	Concepts of GASPI and interoperability with other communication APIs	01.07. 2019	02.07. 2019	Universität Stuttgart
			<a href="https://hls.de/training/2019-07-01-gaspi">hls.de/training/2019-07-01-gaspi</a>		
Advanced course	Programming	Advanced C++ with Focus on Software Engineering	09.07. 2019	12.07. 2019	Universität Stuttgart
			<a href="https://hls.de/training/2019-07-09-cpp2">hls.de/training/2019-07-09-cpp2</a>		
Advanced course	Parallel programming	Deep Learning and GPU programming using OpenACC	15.07. 2019	17.07. 2019	Universität Stuttgart
			<a href="https://hls.de/training/2019-07-15-dl1">hls.de/training/2019-07-15-dl1</a>		

## Das bwHPC Forum

Als Ergänzung zum bwHPC E-Learning-Kurs "Introduction to bwHPC" eröffnet das bwHPC User Forum die Möglichkeit, allgemeine Fragen rund um Ihre Arbeit auf den bwHPC Clustern zu stellen. Sie finden das Forum unter:

[https://training.bwhpc.de/ilias/goto.php?target=frm\\_321&client\\_id=bwhpc](https://training.bwhpc.de/ilias/goto.php?target=frm_321&client_id=bwhpc)



Text: Bärbel Große-Wöhrmann/Universität Stuttgart

# Das bwHPC- Kompetenzzentrum „GSS“ stellt sich vor & Inter- nationales Symposium



**Save the Date: Urban Systems – Global Challenges – Digital Tools  
Internationales Symposium in Stuttgart vom 28. bis 29. Mai 2019**

Das **bwHPC-S5 Kompetenzzentrum für Global System Science (GSS)** dient zur Vereinigung von Sachkundigen der fachlichen und technischen Ebene. Es bringt High Performance Computing (HPC) mit Forschung aus unterschiedlichen Disziplinen aber auch mit Entscheidungsträgern und Akteuren aus der Praxis zusammen. Ziel ist es, Entscheidungsunterstützung zu bieten und die Grundlagen für Entscheidungen in Wirtschaft, Politik und der Zivilgesellschaft zu verbessern. High Performance Computing wird dabei zu einem wesentlichen Werkzeug um äußerst komplexe gesellschaftliche und wissenschaftliche Probleme lösen zu helfen.

Bei typischen GSS Anwendungen sind die relevanten Datensätze meist sehr groß und heterogen – Beispiele dafür sind Daten aus sozialen Medien oder Urban Data. Es wird erwartet, dass ihre Größe in Zukunft anwächst.

Die Stadt als System ist ein Schwerpunkt der GSS, insbesondere im Kontext der Urbanisierung, der Energieversorgung, des Klimawandels, nachhaltigen Wachstums und gesundheitspolitischer Aspekte. Das Projekt „Reallabor Stadt: Quartiere 4.0“ betrachtet diese Aspekte auf lokaler Ebene (Kommune und Region) mit einem zusätzlichen Schwerpunkt auf der Entwicklung digitaler Werkzeuge zur Bürgerbeteiligung und zu kollaborativen Verfahren in Stadtentwicklungsprozessen.

Im Rahmen des zweitägigen **Symposiums „Urban Systems – Global Challenges – Digital Tools“** werden diese Aspekte und solche der digitalen Transformation in urbanen Systemen beleuchtet: Die Digitalisierung von Wirtschaft und Gesellschaft ist eine der umfassendsten Umwälzungen unserer Zeit. Neben der digitalen Transformation hin zu einer Industrie 4.0 muss in Zukunft auch die Veränderung von Lebens- und Arbeitswelten proaktiv gestaltet werden.

# Das bwHPC- Kompetenzzentrum „GSS“ stellt sich vor & Inter- nationales Symposium



Allerdings sind die Auswirkungen der Digitalisierung auf unsere Städte als zentrale Lebensräume kaum bekannt. Eine große Herausforderung stellt zudem der Konflikt zwischen kontinuierlich kürzer werdenden Innovationszyklen digitaler Produkte und Prozesse einerseits und der Langlebigkeit und Pfadabhängigkeit der Städte und ihrer Infrastrukturen andererseits dar. Vielfach werden Planungs- und Entscheidungsfindungsprozesse noch mit sehr konventionellen und stark regulierten Verfahren und Werkzeugen durchgeführt, die angesichts der aktuellen und komplexen Herausforderungen kaum Schritt halten können mit zunehmender globaler Veränderungsgeschwindigkeit in Wirtschaft und Gesellschaft. Digitale Werkzeuge und Methoden bieten hier große Potentiale für eine effiziente, bedarfsgerechte und zielgerichtete Entwicklung und Planung von zukunftsfähigen Lebensräumen unter Einbeziehung aller relevanter Akteure.

Ein Kerngedanke ist zudem die Vernetzung und Förderung von Kooperation in den Forschungsfeldern und der Austausch mit Entscheidungsträgern, Planern unterschiedlicher Disziplinen und Experten aus den Bereichen der Beteiligung und Kommunikation.

Am 28.05., dem ersten Tag des Symposiums liegt der Schwerpunkt auf der Präsentation der Ergebnisse aus dem **„Reallabor Stadt: Quartiere 4.0“** und der Entwicklung von Verstetigungsstrategien. Der zweite Tag des Symposiums soll in diesem Sinne den Auftakt des Kompetenzzentrums GSS im Rahmen von **„bwHPC-S5“** zum Schwerpunkt haben und auf aktuelle internationale Forschungsprojekte fokussieren.

Neben Vorträgen an den Vormittagen soll in Workshops an den Nachmittagen Interessierten die Möglichkeit gegeben werden, digitale Werkzeuge und Formate in beispielhaften Szenarien selbst zu erproben und anzuwenden.

Die Konferenz wird von **„Reallabor Stadt: Quartiere 4.0“** und **„bwHPC-S5 – Scientific Simulation and Storage Support Services, Kompetenzzentrum GSS“** organisiert und veranstaltet. Beide Projekte werden vom **Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg** gefördert.

# Das bwHPC-Kompetenz- zentrum „GSS“ stellt sich vor & Internationales Symposium



## URBAN SYSTEMS GLOBAL CHALLENGES DIGITAL TOOLS

INTERNATIONAL  
SYMPOSIUM  
STUTT GART **28–29 MAY**

Hosted by  
Reallabor Stadt-Quartiere 4.0,  
funded by:



**Baden-Württemberg**

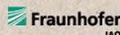
MINISTERIUM FÜR WISSENSCHAFT, FORSCHUNG UND KUNST



University of Stuttgart  
Germany

**HLRS**

High-Performance Computing Center - Stuttgart



**Fraunhofer**

IAO  
ulmer  
Kommunikationsbüro

In the framework of  
Reallabor Stadt-Quartiere 4.0 and  
bwHPC-S5, Centre of Excellence for  
Global System Science:

**REALLABOR**

STADT-QUARTIERE 4.0

Frühzeitige gestaltende Bürgerbeteiligung  
für eine nachhaltige Entwicklung  
Baden-Württembergs



**bwHPC-S5**

In cooperation with  
Städtetag  
Baden-Württemberg



With participation of

HIDALGO

HPC and Big Data Technologies  
for Global Challenges.



Die Teilnahme ist kostenlos. Eine Anmeldung ist erforderlich, da die Anzahl der Teilnehmer begrenzt ist. Weitere Informationen zur Anmeldung werden ab dem 25.04.2019 über <http://hlrs.de/home> sowie <https://digitale-mitwirkung.de> bekannt gegeben.

Ort:

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)

Nobelstraße 19

70569 Stuttgart

Text: Fabian Dembski/Universität Stuttgart

8

# Messestand auf der ISC High Performance 2019



## ISC High Performance: The HPC Event

Das bwHPC Projektteam wird auf der Internationalen Supercomputing-Konferenz 2019 (ISC'19) in Frankfurt am Main vom 17. Juni bis 19. Juni 2019 vertreten sein, um die breite Palette unterstützter HPC-Aktivitäten in dem Bereich Wissenschaft zu präsentieren. Am bwHPC-Stand Nr. B-1223 bekommen Besucher die Möglichkeit, Informationen zu den verschiedenen HPC-Clustern der fünf bwHPC-Clusterstandorte aus erster Hand zu erhalten.

**Besuchen Sie uns am Stand # B-1223**



# ISC

## High Performance

### FUELING

### INNOVATION

Link zur ISC High Performance Messe: <https://www.isc-hpc.com>

Text: Marion Moser/Universität Ulm

9

# bwVisu-Umfrage



## Nehmen Sie an unserer Umfrage teil

Das Landesprojekt bwVisu macht es sich zum Ziel, einen schnellen und nutzerfreundlichen Zugang zur Remote-Visualisierung großer wissenschaftlicher Daten bereitzustellen und setzt dabei auf bestehende HPC-Technologien. Um die Bedarfe der Nutzer zu treffen und an reale Szenarien zu orientieren, ist es von äußerster Wichtigkeit die Bedürfnisse zu ergründen, die bei der Visualisierung großer wissenschaftlicher Daten bestehen.

Durch Ihre Teilnahme an dieser vollständig anonymisierten Umfrage leisten Sie einen wichtigen Beitrag zur Entwicklung von bwVisu und helfen uns aktiv bei der Gestaltung des Dienstes.

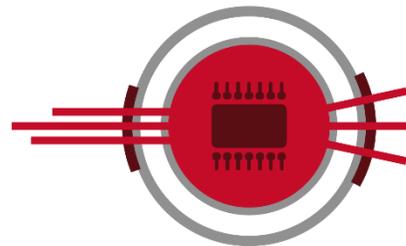


## Link zur bwVisu-Umfrage:

<https://limesurvey.urz.uni-heidelberg.de/index.php/215384?lang=de>

## Support-Adresse:

[bwvisu-support@listserv.uni-heidelberg.de](mailto:bwvisu-support@listserv.uni-heidelberg.de)



**bwVisu**

Text: Egzon Miftari/Universität Heidelberg

10

# Call for Tiger Team Support



## Aufruf zur Antragsstellung auf Tigerteam-Support



Mit diesem Aufruf möchten wir alle Nutzerinnen und Nutzer der bwHPC-Systeme bwForCluster/bwUniCluster nochmal auf unser besonderes Unterstützungsangebot 'Tigerteam-Support' aufmerksam machen. Ein Tigerteam wird für umfangreichere Support- und Optimierungsmaßnahmen von einem HPC-Kompetenzzentrum initiiert, um gemeinsam mit den Nutzern eine bestimmte Aufgabe zu bearbeiten, beispielsweise die Portierung einer Anwendung auf einen bwHPC-Cluster, die Optimierung von Batch-Skripten

oder die Parallelisierung von Programmteilen. Auch Workflows und das Datenmanagement auf den HPC- und Speichersystemen können im Rahmen eines Tigerteams untersucht und verbessert werden.

Eine ausführlichere Beschreibung des Supportangebots befindet sich auf der Webseite: [https://zas.bwhpc.de/zas\\_info\\_tigerteamsupport.php](https://zas.bwhpc.de/zas_info_tigerteamsupport.php)

Dort können Sie über ein Online-Formular Tigerteam-Support für Ihr Anliegen beantragen.

Alternativ können Sie sich auch über die Support-Adressen der Cluster- und Speichersysteme an Ihr HPC-Kompetenzzentrum wenden und formlos nach Tigerteam-Support fragen.

Die HPC-Kompetenzzentren freuen sich auf interessante Aufgaben und die Zusammenarbeit mit Ihnen.

Text: Sabine Richling/Universität Heidelberg

# Wissenschaftliche Publikationen & Acknowledgements



## Wie melde ich meine neue wissenschaftliche Publikation an das bwHPC-Team?

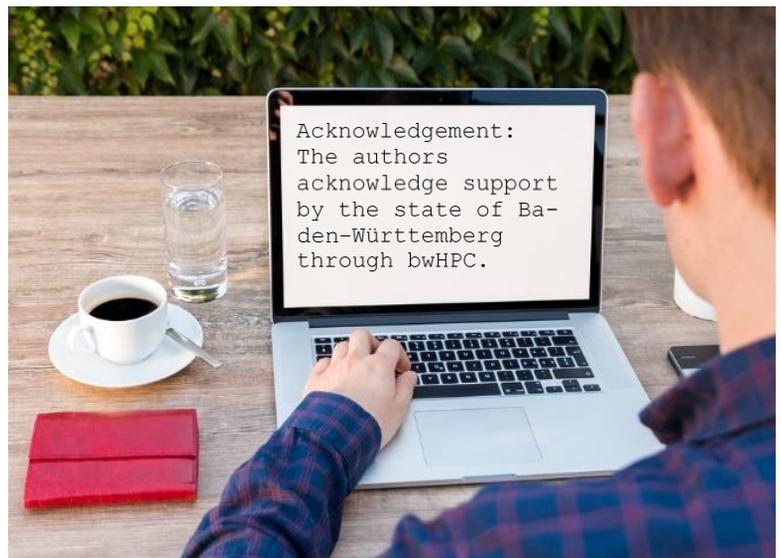
Wenn Sie einen der baden-württembergischen Hochleistungsrechner für Ihre Forschung verwendet haben, bitten wir Sie die unten aufgeführten Informationen über Ihre Forschung vorzubereiten und diese an das bwHPC-Team zu senden:

[publications@bwhpc.de](mailto:publications@bwhpc.de)

- Name des genutzten Clusters: (z. B. bwUnicluster, JUSTUS, MLS&WISO, NEMO, BinAC),
- Akronym des Rechenvorhabens (z.B. bw14L001),
- DOI (Digital Object Identifier) der Publikation,
- Namen der Autoren,
- Titel oder Buchtitel,
- Name der Zeitschrift oder des Bandes (und gegebenenfalls die Seitenzahlen sowie die Herausgeber) und
- Erscheinungsjahr

Die erzielten Forschungsergebnisse, zu denen die Nutzung der Geräte beigetragen haben, sind nicht nur ein wichtiger Indikator für den durch die DFG beabsichtigten wissenschaftlichen Erfolg des bereits geförderten Systems sondern haben auch richtungsweisende Wirkung auf zukünftige Förderungsmaßnahmen der DFG für Nachfolgesysteme.

Diese Sichtbarkeit ist von unschätzbarem Wert und wird durch die öffentlichen Fördergeber, dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg (MWK) und der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), durchaus mit Interesse wahrgenommen.



# Wissenschaftliche Publikationen & Acknowledgements



Besonders wirkungsvoll sind natürlich diejenigen Publikationen, in denen bereits eine entsprechende Anerkennung der Förderung gemäß den folgenden Links formuliert wurde.

Acknowledgment des bwUniClusters:

[http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwUniCluster\\_Acknowledgement](http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwUniCluster_Acknowledgement)

Acknowledgement des bwForClusters JUSTUS:

[http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster\\_Chemistry\\_Acknowledgement](http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster_Chemistry_Acknowledgement)

Acknowledgement des bwForClusters MLS&WISO:

[https://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster\\_MLS%26WISO\\_Produktion\\_Acknowledgementt](https://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster_MLS%26WISO_Produktion_Acknowledgementt)

Acknowledgement des bwForClusters NEMO:

[http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster\\_NEMO\\_Acknowledgement](http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster_NEMO_Acknowledgement)

Acknowledgement des bwForClusters BinAC:

[http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster\\_BinAC\\_Acknowledgement](http://www.bwhpc.de/wiki/index.php/BwForCluster_BinAC_Acknowledgement)

---

Die Publikationen werden auf der bwHPC-Website referenziert:

[http://www.bwhpc.de/en/user\\_publications.php](http://www.bwhpc.de/en/user_publications.php)

Text: Marion Moser/Universität Ulm

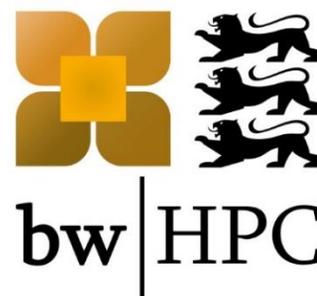
**Frohe Ostern**



**Zu dem bevorstehenden Osterfest  
wünscht das bwHPC-Team Ihnen ein  
paar schöne und festliche Tage!  
Bei der Entspannung im Kreise der  
lieben Familie kann wieder neue Kraft  
getankt werden, um anschließend  
erneut durchzustarten.**



# Impressum



## Herausgeber:

bwHPC Projektleitung  
Steinbuch Centre for Computing  
Karlsruher Institut für Technologie  
(KIT)

Kommunikations- und  
Informationszentrum (kiz)  
Universität Ulm

E-Mail: [office@bwHPC.de](mailto:office@bwHPC.de)

## Redaktion & Layout :

Marion Moser, Universität Ulm  
Telefon: +49 (0)731 50-22483  
Telefax: +49 (0)731 50-22471  
E-Mail: [marion.moser@uni-ulm.de](mailto:marion.moser@uni-ulm.de)

»Für den Inhalt der Textbeiträge  
und die verlinkten Seiten sind  
ausschließlich die jeweiligen  
Autoren bzw. Autorinnen  
verantwortlich«



Hochleistungsrechner JUSTUS  
Foto: Elvira Eberhardt/kiz

Die Redaktion verwendet eine gendergerechte Sprache. In Einzelfällen kann es aus Gründen der leichteren Lesbarkeit zu Abweichungen kommen. Wir weisen an dieser Stelle ausdrücklich darauf hin, dass sowohl die männliche als auch die weibliche Schreibweise für die entsprechenden Beiträge gemeint sind.

Für weitere Informationen besuchen Sie [www.bwhpc.de](http://www.bwhpc.de)

