VIENNA
SCIENTIFIC
CLUSTER

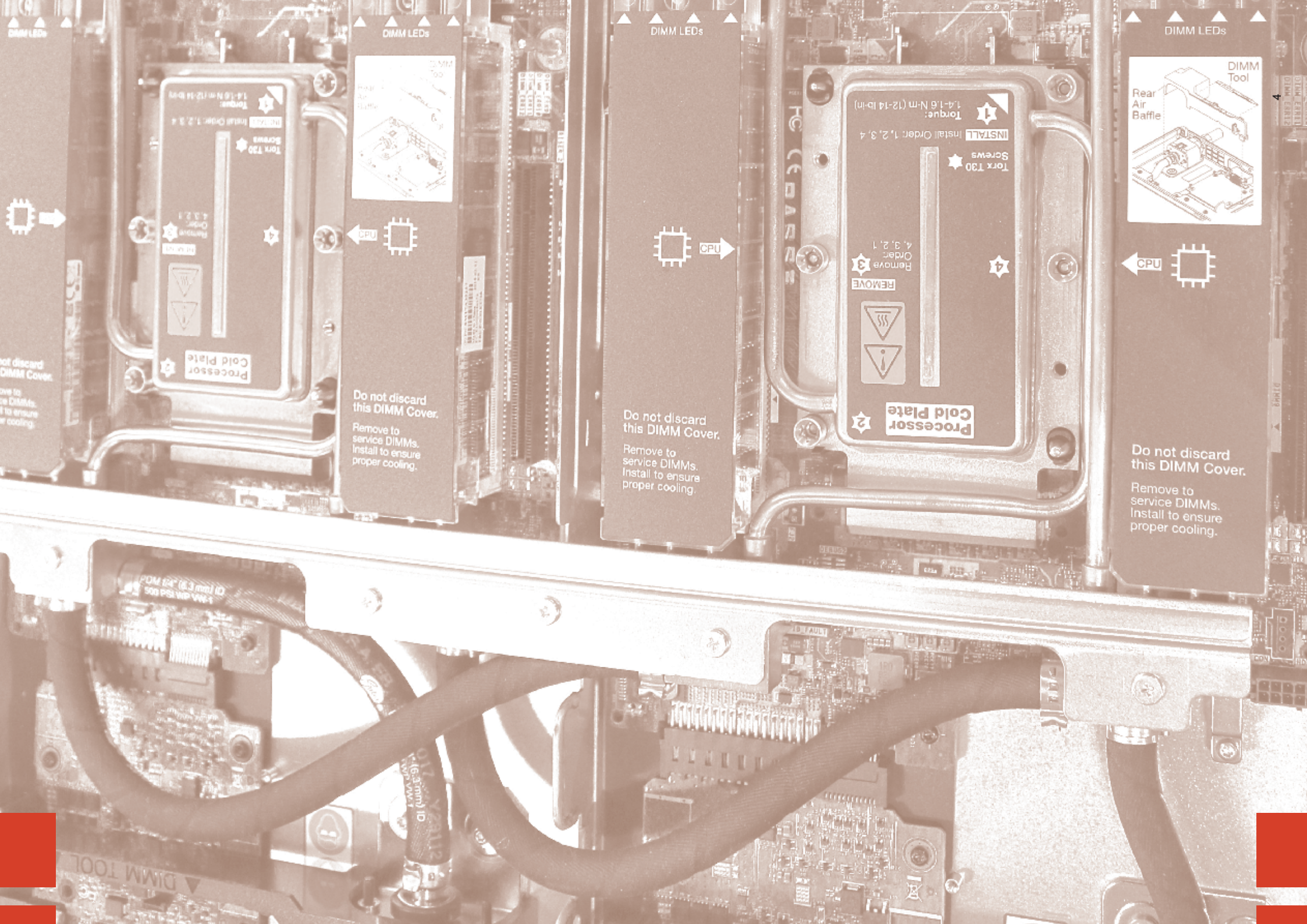



# FORSCHUNGSPROJEKTE AM VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER


VIENNA
SCIENTIFIC
CLUSTER
Vienna Scientific Clus

# INHALT


Vorwort . . . 5
Der Vienna Scientific Cluster . . . 6
Die Macht des Lichts über Moleküle . . . 9
Magnetische Materialien für bessere Sensoren und Festplatten . . . 9
Stark korrelierte Elektronen . . . 10
    Computersimulationen für Quantenmaterialien . . . 11
Made in Vienna: VASP und WIEN2k . . . 12
    VASP . . . 12
    WIEN2k . . . 13
    Bessere Transistoren – stabilere Elektronik . . . 14
    Unregelmäßige Kristalle . . . 14
    Miniaturisierung dank starker Magnete . . . 14
Organisch-anorganische Hybridsysteme . . . 15
    Umweltverträgliche erneuerbare Energie . . . 15
    Materialdesign . . . 15
Die faszinierende Nanowelt . . . 16
    Mathematische Modelle in der Nanotechnologie . . . 17
Was die Welt im Innersten zusammenhält . . . 18
Den Föhnwind verstehen . . . 19
Weiche Materie . . . 20
Strömungsmechanik . . . 22
    … im All …. . . . 22
    … und auf der Erde . . . 22
    Wohin mit dem $CO_2$? . . . 23
    Stadt, Land, Fluss: Die Landschaft berechnen . . . 23
Bodensanierung und Reinigung von Wasserressourcen . . . 24
Suche nach bewohnbaren Planeten . . . 24
Wellenausbreitung in ungeordneten Medien . . . 25
Big Data hilft, chinesische Politik zu verstehen . . . 26
Mehr Effizienz für die Öffis . . . 27
Bioinformatik liefert Einblicke in die Evolutionsgeschichte . . . 28
Der Herzschlag im Computer . . . 30
Bioprozesse richtig vorhersagen . . . 30
Vitamine und ihre Gegenspieler . . . 30


DIMM LEDs
DIMM Tool
Rear Air Baffle
CPU
Do not discard this DIMM Cover.
Remove to service DIMMs. Install to ensure proper cooling.
Processor Cold Plate
REMOVE
INSTALL
Torque: 1.4-1.6 N-m (12-14 lb-in)
Torx T30 Screws
Install Order: 1, 2, 3, 4
Remove Order: 4, 3, 2, 1

# VORWORT

Der Vienna Scientific Cluster (VSC) ist eine gemeinsame Aktivität österreichischer Universitäten im Bereich Hochleistungsrechnen (High Performance Computing, HPC), finanziert durch Projekte und über die Leistungsvereinbarungen der Partneruniversitäten durch das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung (BMBWF). Im Herbst 2009 wurde das erste System (VSC-1) in Betrieb genommen. Damals waren die Universität Wien, die Universität für Bodenkultur Wien und die TU Wien am VSC beteiligt. Heute gehören dem VSC-Konsortium auch die Technische Universität Graz und die Universität Innsbruck und damit insgesamt 5 Partner-Universitäten an. Weitere Universitäten und wissenschaftliche Einrichtungen haben im Rahmen von Kooperationsprojekten oder pay-per-use Vereinbarungen Zugang zu den Systemen des VSC.

Neben der organisatorischen Erweiterung des Kreises der Nutzer beobachten wir eine starke fachliche Diversifizierung. Derzeit nutzen etwa 300 laufende Projekte verschiedenster Fachrichtungen mit in Summe etwa 1200 individuellen Benutzern die Systeme des VSC. Vor allem die fachliche Diversifizierung und die damit verbundene große Zahl verschiedener Anwendungsprogramme stellen eine große Herausforderung für das VSC-Team dar.

Im Rahmen des Hochschulraum-Strukturmittel (HRSM)-Projektes „VSC Research Center" wurde die Unterstützung der Benutzer bei der Optimierung von Programmen verstärkt und ein HPC-spezifisches Ausbildungsprogramm etabliert. Die Ausbildungskurse sind zugänglich für Angehörige der Partneruniversitäten und nach Verfügbarkeit freier Plätze auch für Externe. Im Zuge desselben HRSM-Projektes wurden auch Dissertanten und Postdocs in sieben Teilprojekten gefördert, um wissenschaftlich hochrelevante Programme zu optimieren, zu dokumentieren und als open source zur Verfügung zu stellen.

Im Rahmen des HRSM-Projektes „VSC-Scientific Cloud Services" soll die Zugänglichkeit des VSC allgemein und für Benutzer, welche mit Arbeiten auf der command line nicht vertraut sind, verbessert werden.

Die vorliegende Broschüre gibt in Gestalt einiger Beispiele einen Querschnitt durch die wissenschaftlichen Aktivitäten unserer Benutzer. Wir laden Sie darüber hinaus ein, auf unserer Homepage in weiteren Projekten und den daraus hervorgegangenen wissenschaftlichen Publikationen zu stöbern.

http://vsc.ac.at




**Die Wiener Firma EDV-Design lieferte den VSC-4 als Lenovo ThinkSystem SD650 mit Intel Skylake Prozessoren.**

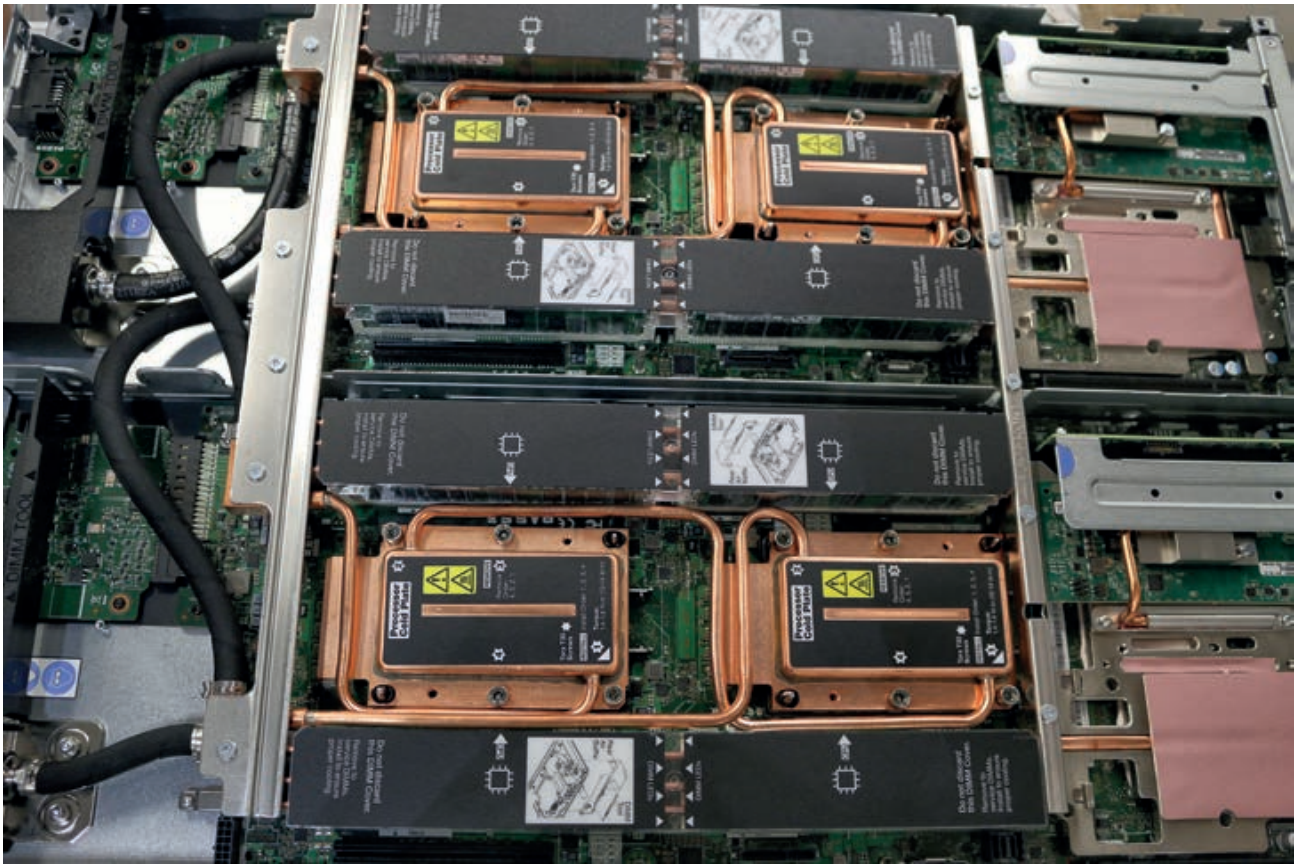
# DER VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

Der **Vienna Scientific Cluster 4** (VSC-4) ist der leistungsfähigste Computer, der je in Österreich in Betrieb genommen wurde. In die TOP500-Liste (Juni 2019) der weltweit schnellsten Rechner schaffte er es an Platz 82. Die Anschaffung eines so großen Systems ist nur durch die Partner-Universitäten im Vienna Scientific Cluster und die finanzielle Unterstützung des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft und Forschung möglich.

Mit 2,7 Petaflops (ein Petaflop ist eine Million Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde) erreicht der VSC-4 fast die fünffache Leistung des Vorgängersystems VSC-3. Die Rechenknoten des VSC-4 bestehen aus 48 Cores, wobei die einzelnen Cores um zirka einen Faktor vier leistungsstärker als jene des VSC-3 sind.

Um im Zeitalter von Big Data und künstlicher Intelligenz dem stetig steigenden Bedarf nach Datenspeicher gerecht zu werden, wird das System durch ein hocheffizientes paralleles Filesystem mit 7 PB Kapazität komplettiert.

Für einen Supercomputer ganz entscheidend ist neben Hard- und Software eine energieeffiziente Kühlung, um die Stromkosten so niedrig wie möglich zu halten. Luft als Kühlmedium, wie in gewöhnlichen Arbeitsplatzrechnern üblich, hat eine sehr geringe Wärmekapazität und führt daher zu großen Energieverlusten. Darüber hinaus wäre es durch die Miniaturisierung und Verdichtung der Leistung auf kleinstem Raum nicht mehr möglich, die gesamte Wärme mit Luftkühlung abzuführen. Deswegen setzt man auf flüssige Kühlmedien, deren Wärmekapazität etwa um einen Faktor

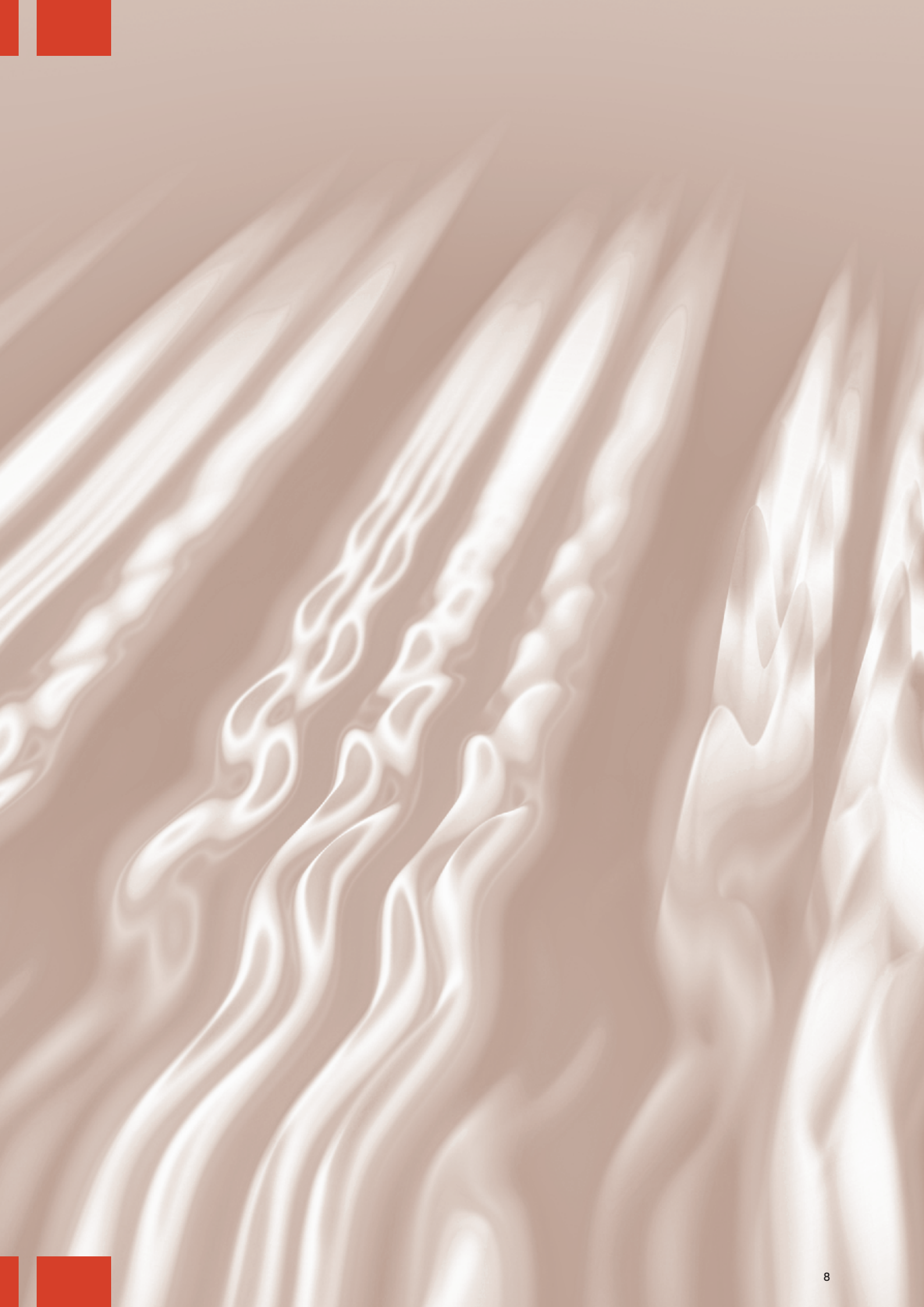


Details der Direktwasserkühlung des VSC-4.

| | VSC-3 | VSC-3+ | VSC-4 |
|---|---|---|---|
| **Anzahl der Knoten** | 2020 | 864 | 790 |
| **Anzahl der Cores pro Knoten** | 16 | 20 | 48 |
| **Gesamtanzahl der Cores** | 32.320 | 17.280 | 37.920 |
| **CPU-Typ** | Intel Xeon E5-2650 v2, 2.6 GHz | Intel Xeon E5-2660 v2, 2.2 GHz | Intel Xeon Platinum 8174, 3.1 GHz |
| **Linpack Leistung** | 596 TFlop/s | - | 2.726 TFlop/s |
| **Interconnect** | Intel TrueScale Infiniband | Mellanox FDR/QDR | Intel Omni-Path |
| **Storage** | 0.6 PB + 1.2 PB BeeGFS | Zugriff auf 0.6 PB von VSC-3 Storage | 7 PB Spectrum Scale (GPFS) |

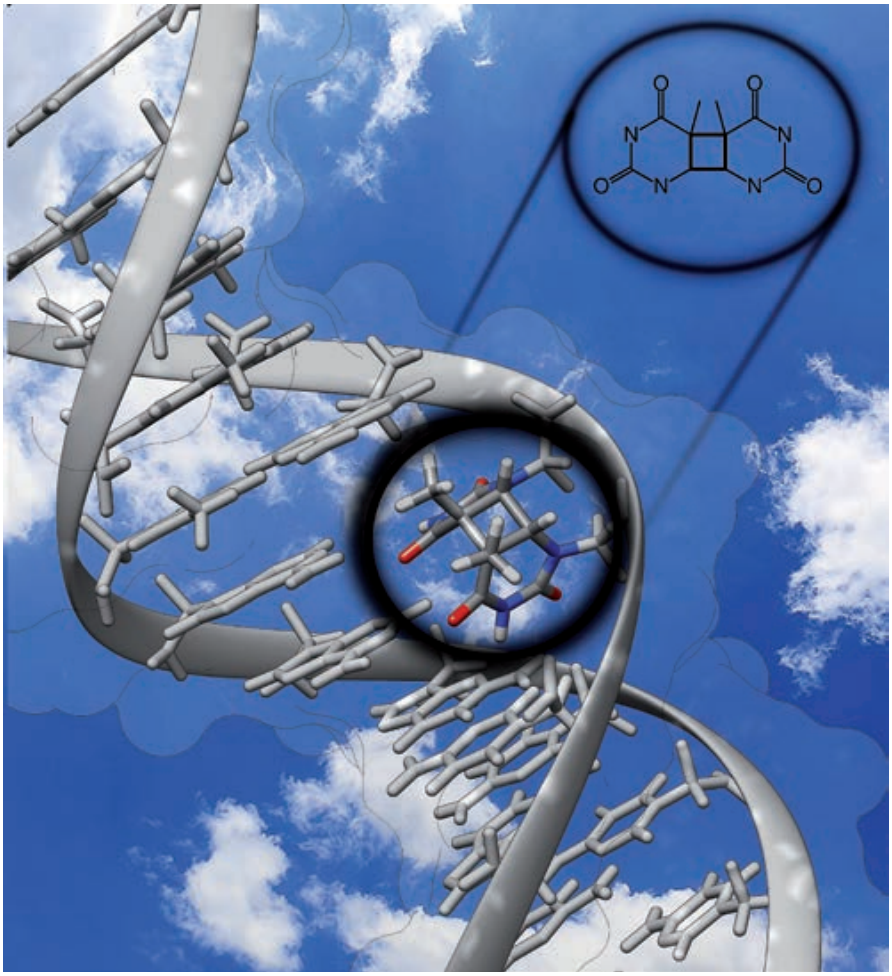
1000 größer ist. Im Fall des VSC-3 ist dies Öl, in welchem die Rechenknoten versenkt sind. Im VSC-4 sind die CPUs und andere Komponenten direkt von Kühlkörpern umgeben, die von Wasser durchströmt werden. Sowohl VSC-3 als auch VSC-4 können mit Kühlmitteltemperaturen von 40°C—50°C betrieben werden; dadurch kann ganzjährig auf Kompressorkälte verzichtet werden. Dies reduziert den Energieverbrauch drastisch und damit auch den ökologischen Fußabdruck.

Der VSC-4 wurde im Dezember 2018 bestellt und im Juni 2019 in Betrieb genommen, seit September 2019 läuft der Benutzer-Testbetrieb, im vierten Quartal 2019 soll der VSC-4 fließend in den regulären Betrieb übergehen. Voraussichtlich wird das Vorgängersystem VSC-3 noch bis 2021 in Betrieb sein und dann vom VSC-5 abgelöst werden.



# DIE MACHT DES LICHTS ÜBER MOLEKÜLE

Wenn Moleküle Licht absorbieren, können chemische Reaktionen ausgelöst werden. Dieses Grundprinzip hat in vielen ganz unterschiedlichen Bereichen eine zentrale Bedeutung – für Solarzellen, die das Licht in elektrische Energie umwandeln, aber auch für die Entstehung von Krebs, wenn durch elektromagnetische Strahlen DNA-Moleküle geschädigt werden. Um die Chemie zu verstehen, die all diesen Prozessen zugrundeliegt, simuliert man in der Forschungsgruppe von **Leticia González** (Universität Wien) die Dynamik molekularer Systeme nach der Anregung durch Licht.





Leticia González

**Die UV-Strahlen der Sonne verursachen Defekte in der DNA, was zu schwerwiegenden Schäden führen kann.**

# MAGNETISCHE MATERIALIEN FÜR BESSERE SENSOREN UND FESTPLATTEN

Die magnetischen Eigenschaften neuer Materialien kann man nicht nur nutzen, um bessere Festplattenspeicher zu bauen, sondern auch, um neue, präzisere Sensoren zu entwickeln. Durch solche Sensoren kann man beispielsweise das Antiblockiersystem in Autos verbessern – hier ist eine hohe Genauigkeit wichtig, um das Bremsverhalten möglichst gut optimieren zu können. Die Arbeitsgruppe von **Dieter Süss** (Universität Wien) entwickelt solche magnetischen Sensortechnologien. Dafür werden auch Materialsimulationen auf atomarer Ebene durchgeführt. So wird es möglich, bessere Materialkompositionen zu entwickeln, die präzisere Sensoren ermöglichen und bei neuen Magnet-Festplatten die Anzahl der Schreibfehler minimieren.

# STARK KORRELIERTE ELEKTRONEN

In manchen Materialien besteht zwischen den Elektronen eine so starke quantenphysikalische Verbindung, dass es völlig falsch wäre, die Elektronen unabhängig voneinander zu betrachten. Die Eigenschaften dieser Materialien lassen sich nur verstehen, wenn man die kollektiven Elektronenbewegungen untersucht. Das ist jedoch extrem aufwändig und gelingt nur durch den Einsatz modernster Computer.

In der Forschungsgruppe von **Markus Aichhorn** (TU Graz) gelingt es, mit groß angelegten Computersimulationen (oft mittels der sogenannten „Quantum Monte-Carlo-Technik") Aussagen über solch stark korrelierte Materialien zu treffen.

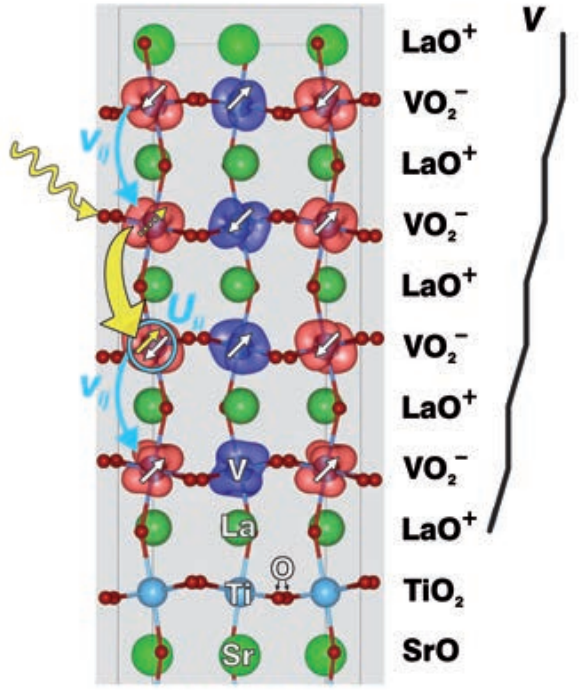
*„What makes VSC really special among the supercomuting centers is the very efficient and friendly user support. This makes calculations on the VSC machines very easy."*
(Markus Aichhorn, TU Graz)

Auch das Team von **Enrico Arrigoni, Wolfgang von der Linden** und **Hans-Gerd Evertz** (TU Graz) untersucht solche Materialklassen numerisch, diesmal mit dem Fokus auf Systeme, denen kontinuierlich Energie zu- und abgeführt wird. Die gewonnenen Erkenntnisse können dazu eingesetzt werden, neue Materialien für Anwendungen zu designen, bekannte Effekte besser zu verstehen oder theoretische Hypothesen numerisch zu testen. Unter anderem erforscht das Team in Zusammenarbeit mit **Karsten Held** (TU Wien) neuartige Solarzellen. Während in gewöhnlichen Solarzellen-Materialien die Elektronen in guter Näherung als unabhängige Teilchen betrachtet werden können, wechselwirken jene nun auf sehr starke und komplizierte Weise miteinander. Diese intensive Interaktion lässt eine Steigerung der Effizienz erhoffen.



**Forscherteam an der TU Graz.**

Die Arbeitsgruppe von **Karsten Held** (TU Wien) entwickelt unter anderem neue quantenfeldtheoretische Methoden, um Materialien mit hochkorrelierten Elektronen besser beschreiben zu können. So möchte man faszinierende ungelöste Rätsel der Physik ergründen – etwa die Hochtemperatur-Supraleitung oder die Quanten-Kritikalität. Außerdem konnte das Team am VSC Solarzellen entwerfen, die später in Experimenten in Japan und Saudi-Arabien realisiert wurden.




**Schema einer neuen auf Übergangsmetalloxiden basierten Solarzelle (Strontium-Titan-Oxid-Subrat mit 4 Oberflächenlagen Lanthan-Vanadium-Oxid). Ein Sonnenstrahl erzeugt ein Elektron-Loch Paar (gelber Pfeil). In der Folge wandern die Elektronen von der Oberfläche ins Innere.**

## COMPUTERSIMULATIONEN FÜR QUANTENMATERIALIEN

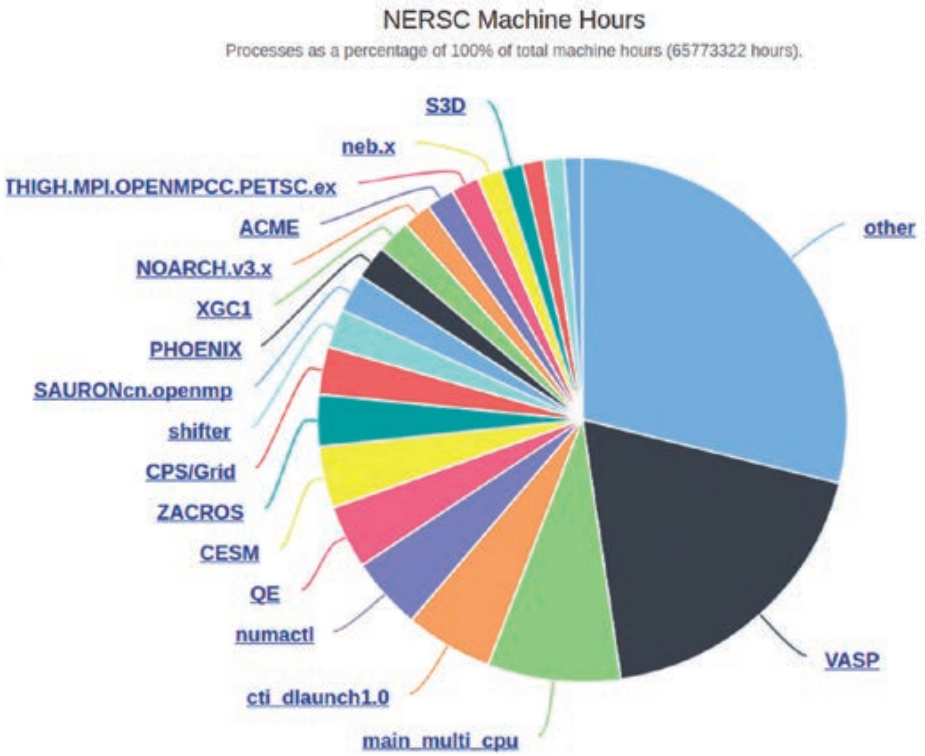
Neuartigen Materiezuständen ist man in der Forschungsgruppe von **Andreas Läuchli** (Universität Innsbruck) auf der Spur. Materialien, in denen die Elektronen besonders eng miteinander wechselwirken, ermöglichen neuartige Phasenübergänge, die bis heute nicht vollständig verstanden sind. Sie werden nun mit modernen Computerverfahren untersucht. Auch wechselwirkende Moleküle in ultrakalten Quantengasen lassen sich mit diesen Verfahren studieren – das soll eines Tages zu neuen Quantentechnologien führen, etwa zu topologischen Quantencomputern.

# MADE IN VIENNA: VASP UND WIEN2K

## VASP

Das Team um **Georg Kresse** und **Martijn Marsman** (Universität Wien) beschäftigt sich ebenfalls mit computergestützter Materialforschung. Mit neuen Methoden, etwa zur Lösung der Vielteilchen-Schrödingergleichung, sollen etablierte Techniken wie die Dichtefunktionaltheorie ergänzt werden, um Materialeigenschaften in Zukunft noch besser vorhersagen zu können. Kernbaustein für die Berechnungen ist VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), das weltweit meist verwendete Programmpaket für die Berechnung von Elektronenstrukturen. Es wurde von dieser Wiener Gruppe maßgeblich entwickelt und wird bis heute weiter verbessert. Der große Erfolg dieses Pakets liegt in den effizienten Algorithmen, die die Rechendauer dramatisch verkürzen.

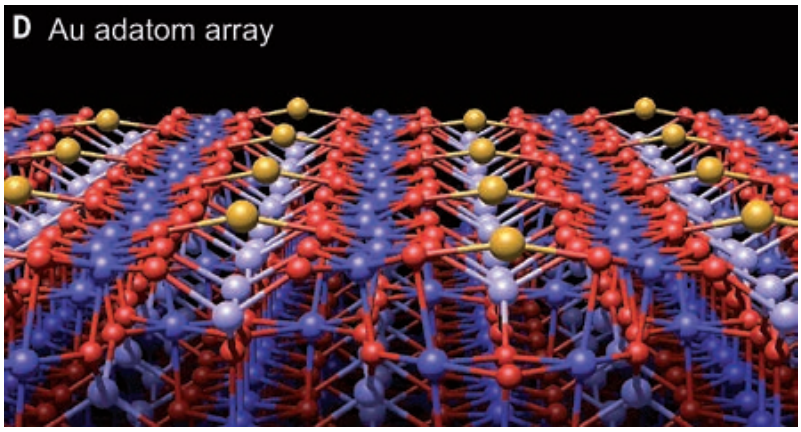
*„Einzig der VSC bietet uns die Möglichkeit diese Skalierungsmessungen mit VASP durchzuführen. Wir können dadurch unsere Software für die nächste Generation von Supercomputern fit machen."*
(Tobias Schäfer, Universität Wien)




Code-Nutzungsstatistik 2017 am NERSC (National Energy Research Scientific Computing Center des US Energieministeriums).

# WIEN2K

Die Gruppe um **Peter Blaha** (TU Wien) entwickelt das Programmpaket WIEN2k, eines der weltweit meist genutzten Programme zur Berechnung der elektronischen Struktur von Festkörpern. Um rechenintensive Problemstellungen an der Spitze der internationalen Forschung beantworten zu können, war die Schaffung des VSC als konkurrenzfähige Großrechenanlage ein wichtiger Meilenstein. Das Team wendet das Programmpaket mit großem Erfolg auf verschiedenste Fragestellungen der Materialwissenschaften an – so gelang es etwa, wichtige Eigenschaften von Katalysatoren aus Metalloxid zu erklären.




**Goldatome, die sich auf einer Eisenoxid-Oberfläche anlagern.**



**Gruppenbild des 24. WIEN2k Workshops (Wien, 18.-23. Sept. 2017).**

## BESSERE TRANSISTOREN – STABILERE ELEKTRONIK

Milliarden von Transistoren sind heute in Mikroprozessoren enthalten. Metall-Oxid-Transistoren (MOS) bilden das Rückgrat der modernen Elektronik. Ihre Zuverlässigkeit hat daher eine extrem wichtige Bedeutung für unsere elektronischen Geräte. Das Team von **Tibor Grasser** (TU Wien) untersucht die Stabilität von Materialien, die zur Herstellung der MOS-Transistoren wichtig sind. Kürzlich konnte gezeigt werden, dass Wasserstoff in der sogenannten „Gate-Oxid"-Schicht der MOS-Transistoren eine entscheidende Rolle spielt. Daher untersucht man nun mit großangelegten Computersimulationen die Interaktionen und die Dynamik von Wasserstoff im Gate-Oxid.

## UNREGELMÄSSIGE KRISTALLE

Als Mischkristalle bezeichnet man kristalline Strukturen, die nicht völlig regelmäßig sind, sondern bei denen unterschiedliche Bestandteile in einer zufälligen Mischung vorliegen. Allerdings können sich bestimmte Unregelmäßigkeiten bewegen und sich zu bestimmten Strukturen zusammenfinden. Das Team von **Alice Redermeier** (TU Wien) untersucht solche Ausscheidungsbildungen in Mischkristallen am Computer, berechnet Gleichgewichtszustände und berechnet Daten für thermodynamische Datenbanken, mit denen Eigenschaften von technologisch relevanten Mischkristallen vorhergesagt werden können.



**Lin Qin, Alice Redermeier, Aurelie Jacob (v.l.n.r.).**

## MINIATURISIERUNG DANK STARKER MAGNETE

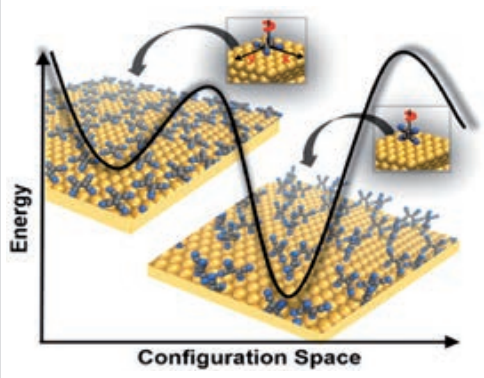
Extrem starke Magnete lassen sich aus Verbindungen zwischen Metallen und der Elementgruppe der seltenen Erden herstellen. Das hat zu einer bemerkenswerten Miniaturisierung von Elektromotoren und anderen technischen Anwendungen geführt – bis hin zu Hybrid-Autos und Windkraftanlagen. Die magnetischen Eigenschaften neuartiger Materialien vorherzusagen gelingt in der Arbeitsgruppe von **Josef Fidler** (TU Wien) mit Hilfe von Programmcodes wie WIEN2k und VASP. Um die komplizierten Verbindungen in höchster Genauigkeit zu berechnen, ist eine starke Rechenleistung wie am VSC erforderlich.

# ORGANISCH-ANORGANISCHE HYBRIDSYSTEME

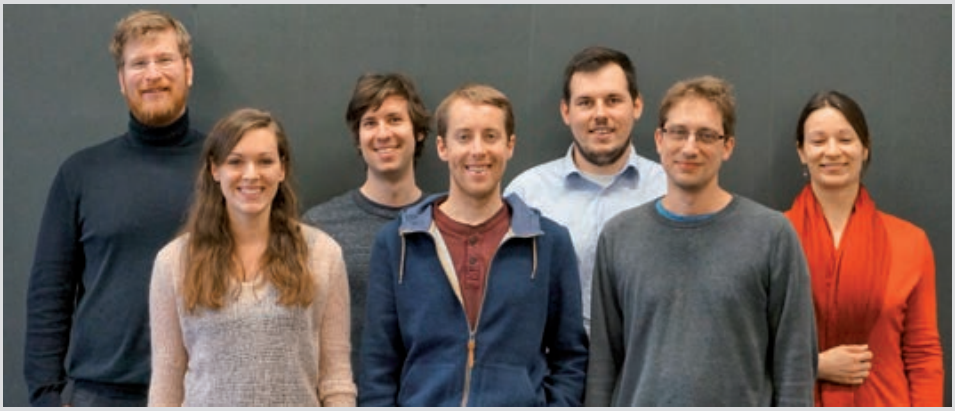
Mit Systemen, die aus organischen und anorganischen Materialien bestehen, beschäftigt man sich an der TU Graz:

## UMWELTVERTRÄGLICHE ERNEUERBARE ENERGIE

Auf der Suche nach effizienter, kostengünstiger und umweltverträglicher erneuerbarer Energie ist die Forschungsgruppe von **Oliver Hofmann** (TU Graz). Im Zentrum ihrer Berechnungen am VSC stehen organische Solarzellenmaterialien. An der Grenzfläche zwischen organischen und anorganischen Materialien treten immer gewisse Störungen und Defekte auf, die den Transfer von Ladung und Energie beeinflussen. Um diesen Transfer zu verstehen, werden einerseits quantenmechanische Methoden, andererseits auch „Machine-Learning"-Ansätze eingesetzt.




Organisches Material auf einem anorganischen Substrat: Defekte im Material beeinflussen die Stabilität der Oberfläche.



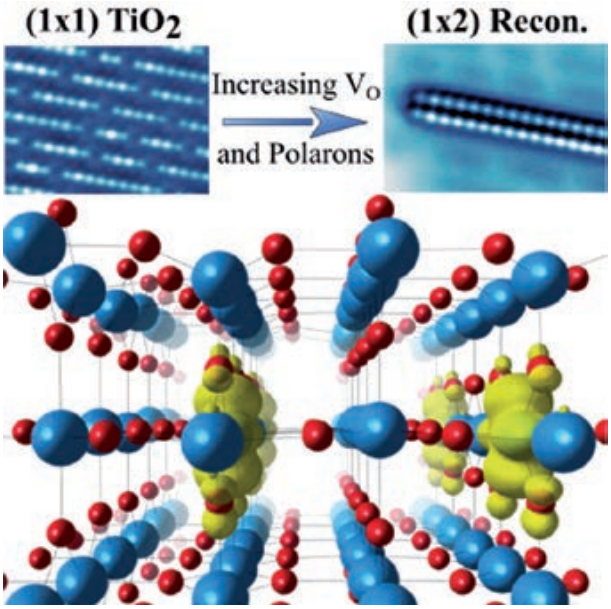
Lukas Hörmann, Veronika Obersteiner, Michael Scherbela, Simon Erker, Andreas Jeindl, Oliver Hofmann, Elisabeth Wruss (v.l.n.r.).

## MATERIALDESIGN

Die Arbeitsgruppe von **Egbert Zojer** (TU Graz) klärt mit Computersimulationen den Zusammenhang zwischen der Struktur und Eigenschaften von organisch-anorganischen Hybridsystemen sowie von organischen Halbleitern. Entscheidend ist dabei nicht nur bestehende Strukturen aufzuklären, sondern gezielt Materialien mit speziellen Eigenschaften zu designen. Anwendung findet dieses Vorgehen beispielsweise beim Design organischer (opto)elektronischer Bauelemente, wie sie in den von Samsung hergestellten AMOLED Displays oder Solarzellen eingesetzt werden.

# DIE FASZINIERENDE NANOWELT

Will man elektronische und magnetische Phasenübergänge neuartiger Materialien verstehen, muss man auf die grundlegenden Gleichungen der Quantenphysik und Relativitätstheorie zurückgreifen – das macht die Forschungsgruppe von **Cesare Franchini** (Universität Wien). Neue Quanten-Materialien werden am Computer simuliert, ihre Eigenschaften werden analysiert und gezielt verbessert, um sie dann für neue Technologien einsetzen zu können.

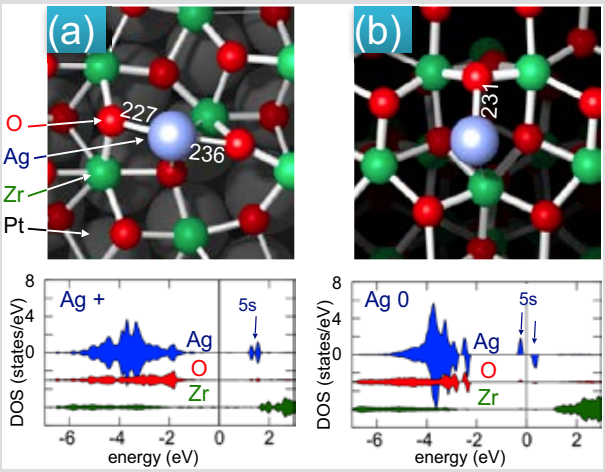



**Wird ein Kristall gespalten, haben die Oberflächenatome an den Bruchstellen weniger Nachbaratome. Wie sich die Oberfläche reorganisiert, um einen neuen Gleichgewichtszustand zu erreichen, ist Fokus der Forschung von Cesare Franchini und seinem Team.**

*„The availability of fast, stable and reliable computing resources is an essential prerequisite for top-notch research in computational materials science. In this respect the VSC infrastructure and the VSC team of experts represent fundamental partners for our research. Moreover the VSC offers high-quality courses and workshops on a wide range of computational-related subjects helping the youngest researchers of the team to acquire the necessary technical competences to conduct their research using the VSC. Finally, the VSC is also a valuable partner for the organization of international schools and training workshops that require a rapid and flexible access to computing resources."*
(Cesare Franchini, Universität Wien)

Die Forschungsgruppe von **David Holec** (Montanuniversität Leoben) untersucht die Eigenschaften von Materialien auf ganz fundamentalem Level mit den Methoden der Quantenmechanik. Dabei geht es etwa um die mechanischen und strukturellen Eigenschaften metallischer Systeme. So kann man etwa vorhersagen, welche elastischen Eigenschaften ein neuentwickeltes Material haben wird und welche Strukturen am stabilsten sind. Überprüfen lässt sich das dann in Untersuchungen mit hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopen.

Die Gruppe von **Josef Redinger** (TU Wien) interessiert sich speziell für Oberflächen von Materialien – die Eigenschaften der Oberflächen unterscheiden sich oft stark von den Eigenschaften, die das Material im Inneren aufweist. Im SFB-Forschungsprojekt FOXSI werden die elektronischen und strukturellen Eigenschaften von Oberflächen und Grenzflächen untersucht – in zahlreichen Experimenten, aber auch in großen Computersimulationen. So wird etwa berechnet, welche Auswirkungen die Wechselwirkung zwischen dünnen Oxid-Schichten und adsorbierten Molekülen (wie CO, $O_2$ oder $H_2O$) hat. Ein fundamentales Verständnis solcher Prozesse ist für viele Anwendungsbereiche wichtig – etwa für Brennstoffzellen.

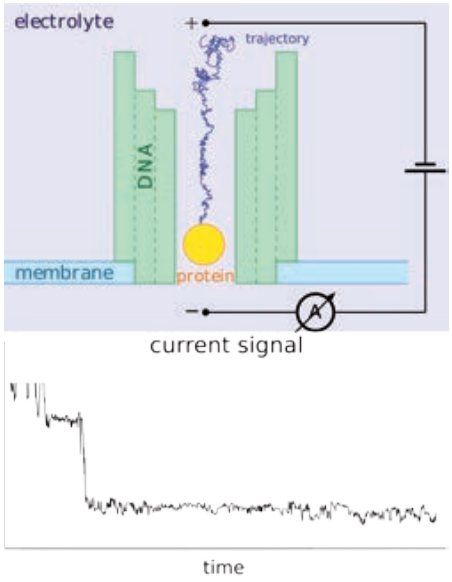



Ladungszustände von Silberatomen (Ag) auf einer Zirkoniumdioxid ($ZrO_2$) Oberfläche: (links) ultra-dünner Zirkoniumdioxid-Film auf Platin (Pt), (rechts) dicker isolierender Zirkoniumdioxid-Film. Die Silberatome auf dem ultra-dünnen Film sind positiv geladen, während jene auf dem dicken ungeladen sind.

# MATHEMATISCHE MODELLE IN DER NANOTECHNOLOGIE

Das Team von **Clemens Heitzinger** (TU Wien) entwickelt mathematische Modelle und numerische Verfahren zur Simulation von Nanoporen, von Metamaterialien und von Nanodraht-Sensoren. Zu den untersuchten Bauteilen gehören unter anderem verschiedene Arten von Nanoporen, mit denen sogar einzelne Moleküle detektiert werden können. Verwendet werden sie großteils in der Medizin, zum Beispiel in der Krebsforschung. Um quantitative Aussagen über die Funktionsweisen dieser Bauteile zu treffen, werden Simulationen am Vienna Scientific Cluster durchgeführt.

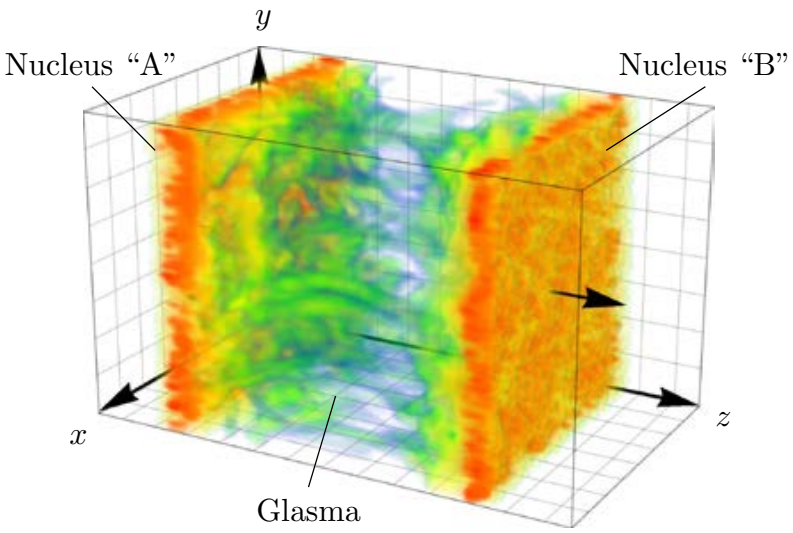
*„Für uns war es von Vorteil, mithilfe des interaktiven Modus auf dem VSC unsere Programme auf etwaige Fehler untersuchen zu können oder auch kleine Testprogramme laufen zu lassen. Dazu war das VSC-Team sehr hilfreich, besonders beim Installieren von python-packages.“*
(Benjamin Stadlbauer, TU Wien)



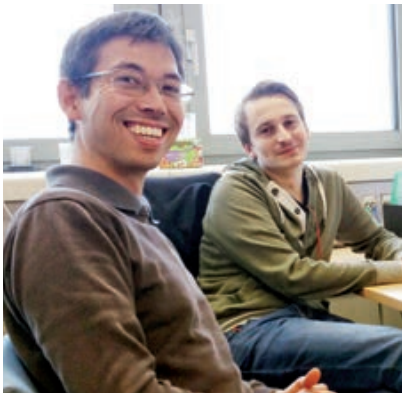

Hier sieht man den Querschnitt einer Nanopore (DNA), durch welche sich gerade ein Molekül (Protein) bewegt und eine Verminderung des elektrischen Stromes verursacht. Durch dieses Signal kann auf das Vorhandensein des Proteins geschlossen werden.

# WAS DIE WELT IM INNERSTEN ZUSAMMENHÄLT

Am Large Hadron Collider (LHC) am CERN werden schwere Ionen mit ungeheurer Wucht aufeinander geschossen. Ihre Energie ist so hoch, dass beim Zusammenstoß die Neutronen und Protonen zu einem Plasma aus Quarks und Gluonen aufgeschmolzen werden – dieser Übergang wird als „Glasma" bezeichnet. Das Team von **Andreas Ipp** und **Anton Rebhan** (TU Wien) entwickelt Computersimulationen dieses Prozesses, um mehr über diesen außergewöhnlichen Materiezustand zu lernen, der in unserem Universum knapp nach dem Urknall vorgeherrscht hat.




**Eine simulierte Kollision zwischen zwei Schwerionen „A" und „B", die sich annähernd mit Lichtgeschwindigkeit bewegen. Gleich nach der Kollision entsteht ein sogenannter „Glasma"-Zustand.**



Andreas Ipp und David Müller

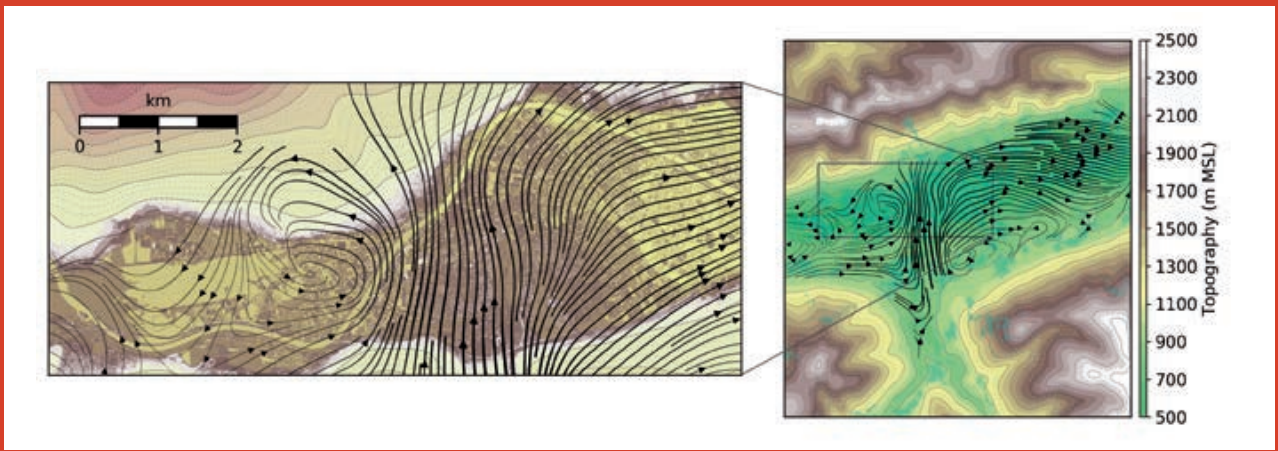
Auch in der Gruppe von **Axel Maas** (Universität Graz) entwickelt man Computersimulationen um Experimente, wie sie am CERN durchgeführt werden, besser zu verstehen und interpretieren zu können. Unter anderem wird dort auch versucht, Theorien zu untersuchen, die über das bisher verwendete „Standardmodell der Teilchenphysik" hinausgehen.



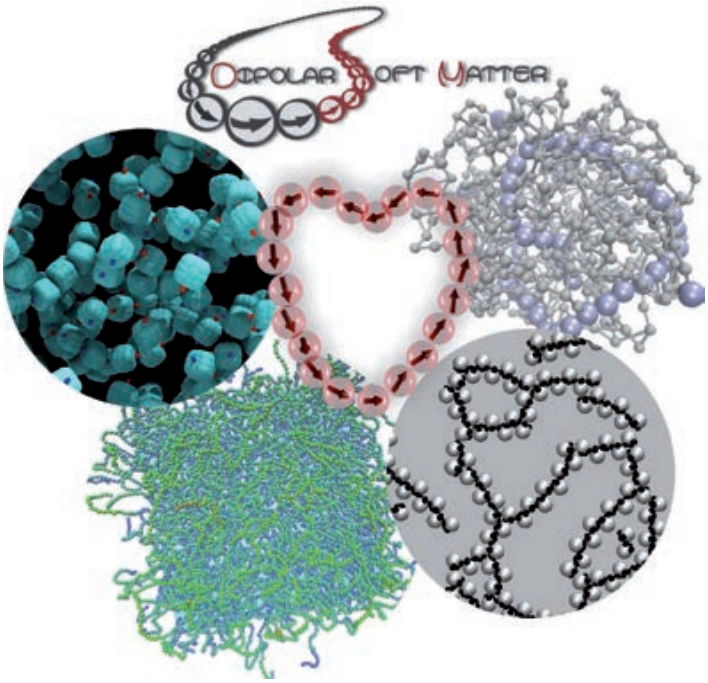
Lukas Lehner, Helen Ward, Maren Haid, Alexander Gohm, Lukas Umek, Thomas Muschinski (v.l.n.r.).

# DEN FÖHNWIND VERSTEHEN

Welche atmosphärischen Prozesse kontrollieren den Durchbruch und den Zusammenbruch von Föhnwinden? Wie lässt sich die Wechselwirkung zwischen Föhn und Kaltluftseen in alpinen Tälern verstehen? Diesen Fragen geht das Team von **Alexander Gohm** (Universität Innsbruck) nach. Dabei wird auf numerische Simulationen am VSC und auf atmosphärische Messungen im Inntal in der Umgebung von Innsbruck zurückgegriffen.




Computersimulation des Windfeldes (Stromlinien) über Innsbruck in einer Höhe von 1000m bei Südföhn. Die rechte Abbildung zeigt das Inn- und Wipptal. Die linke Abbildung zeigt eine Nahaufnahme der Stadt Innsbruck.



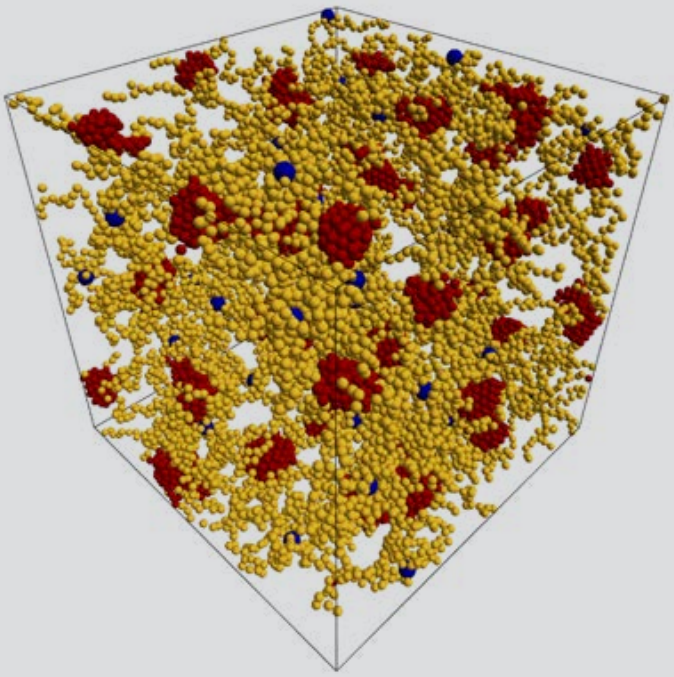

Winzige Partikel können interessante Strukturen ergeben – so entstehen neuartige Materialien mit bemerkenswerten Eigenschaften.

# WEICHE MATERIE

Das Forschungsgebiet der „weichen Materie“ ist vielschichtig: Es geht dabei beispielsweise um das Verhalten von Kolloiden – das sind winzige Teilchen, die in einer Trägersubstanz fein verteilt sind.

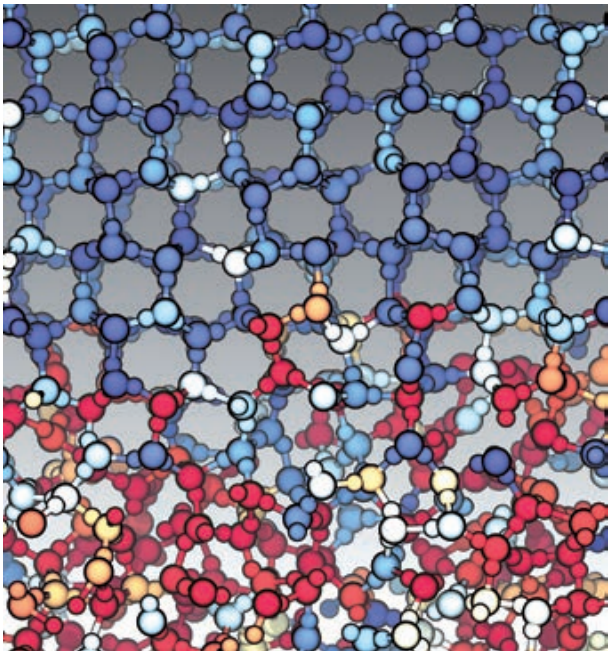
Das Team von **Sofia Kantorovich** (Universität Wien) interessiert sich besonders für Teilchen mit bestimmten elektrischen und magnetischen Eigenschaften. Sie können Strukturen ergeben, die sich für technische und medizinische Anwendungen nutzen lassen.

Auch DNA-Moleküle, Mikrogele oder sternförmige Polymere mit langen Armen, die sich zu interessanten Strukturen zusammenfinden können, gehören zu den spannenden Untersuchungsobjekten im Bereich „soft matter“. Die Selbstorganisation solcher Teilchen und ihre Reaktion auf äußere Felder werden in der Forschungsgruppe von **Christos Likos** (Universität Wien) untersucht.



Ein Netzwerk von Sternpolymeren, simuliert auf dem VSC.

Der Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe von **Christoph Dellago** (Universität Wien) liegt in der Computersimulation komplexer Vielteilchensysteme, wie Flüssigkeiten, Festkörper und Nanopartikel, sowie in der Entwicklung der dafür notwendigen Algorithmen. Kürzlich konnte die Forschungsgruppe mit Hilfe einer neuartigen Simulationsmethode, die auf künstlichen neuronalen Netzen beruht, das anomale Verhalten von Wasser entschlüsseln. Durch aufwändige Simulationen am VSC konnten sie zeigen, dass die eigentümlichen Eigenschaften von Wasser und Eis maßgeblich von van der Waals-Kräften beeinflusst werden, relativ schwache Wechselwirkungen, die bisher oft vernachlässigt wurden.



**Schnappschuss aus einer Molekulardynamik-Simulation von der Grenzfläche zwischen Wasser (unten) und Eis (oben).**

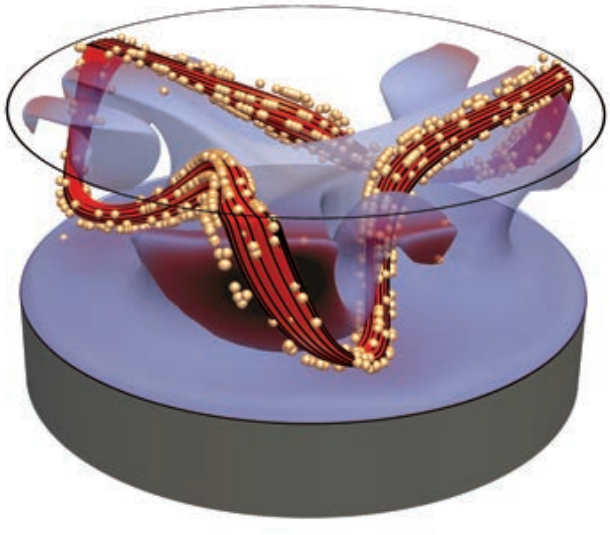


Clemens Moritz und Max Innerbichler

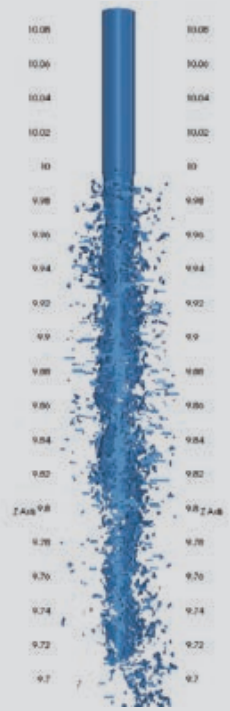
# STRÖMUNGSMECHANIK

## ... IM ALL ...

Wenn sich Partikel in einem Flüssigkeitstropfen in einer durch Oberflächenspannungseffekte angetriebenen Strömung bewegen, sind erstaunliche Phänomene zu beobachten: Zwischen Partikeln und der Oberfläche des Tropfens bildet sich ein Flüssigkeitsfilm, der eine abstoßende Kraft auf die Partikel ausübt. Obwohl diese Kraft nur in einem kleinen Bereich am Rand wirkt, kann es sein, dass sich alle in der Flüssigkeit befindlichen Partikel aufgrund wiederholter Kollisionen mit der Flüssigkeits-Gas-Grenzfläche entlang einer kurios geformten, geschlossenen Bahn ansammeln. Dieser Effekt, der bald auch im JEREMI-Experiment von ESA und JAXA auf der internationalen Raumstation ISS experimentell untersucht werden soll, tritt besonders unter Schwerelosigkeit auf. Die Forschungsgruppe von **Hendrik Kuhlmann** (TU Wien) untersucht solche und ähnliche strömungsmechanische Effekte in Computersimulationen.



**Partikel (golden, nicht maßstabsgetreu) haben sich in einer kapillaren Strömung in einem Tropfen in der Nähe eines Torus (rot) entlang einer geschlossenen Kurve angesammelt, die fünfmal um die Achse des zylindrischen Tropfens gewickelt ist. Die gezeigte Partikelstruktur rotiert.**



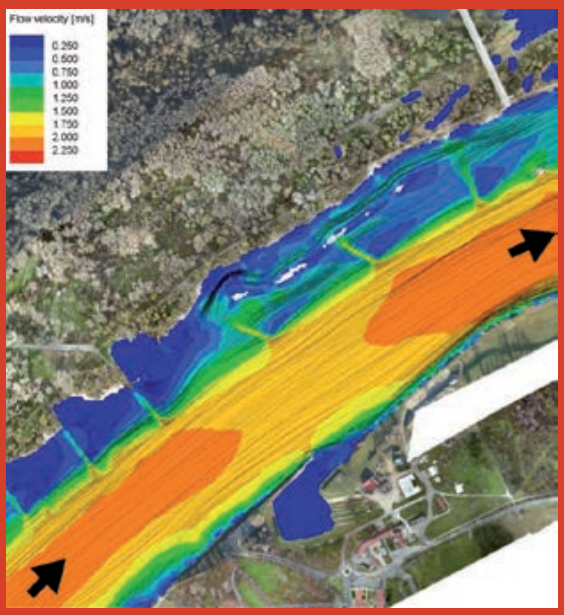
## ... UND AUF DER ERDE

Das Strömungsverhalten von Wasser hält noch immer bemerkenswerte Geheimnisse bereit: **Freddy Florez** und sein Team (TU Wien) entwickeln Computermodelle, um zu untersuchen, wie Luft in einen Wasserstrom eingebracht werden kann. Ein fallender Wasserstrom kann bei hoher Geschwindigkeit Luft aufnehmen – und das ist in vielen Fällen ein gewünschter Effekt. So kann etwa ein Wasserstrom mit Hilfe von Luft in einen Sprühregen von Tröpfchen zerlegt werden, die eine viel weniger zerstörerische Wirkung auf den Untergrund haben als eine geschlossene Wassersäule, die mit hoher Geschwindigkeit nach unten fließt. Dabei muss man allerdings komplizierte Effekte berücksichtigen – die dynamische Wechselwirkung zwischen Wasser und Luft sowie das plötzliche Abreißen von Strömen.

**Ein frei fallender Wasser-Jet in der Computersimulation.**

# STADT, LAND, FLUSS: DIE LANDSCHAFT BERECHNEN

Im Flussbau muss man oft ganz unterschiedliche Anforderungen vereinen: Die Nutzungsinteressen der Schifffahrt, der Hochwasserschutz und die Ökologie müssen in Einklang gebracht werden. Um das zu erreichen, braucht man Rechenmodelle, mit denen die Interaktion zwischen Flussbaumaßnahmen, dem Strömungsfeld, Sedimentations- und Erosionsprozessen sowie der ökologischen Gewässerfunktionalität untersucht werden können. **Michael Tritthart** (Universität für Bodenkultur Wien) entwickelt dafür hochaufgelöste numerische 3D-Strömungsmodelle.

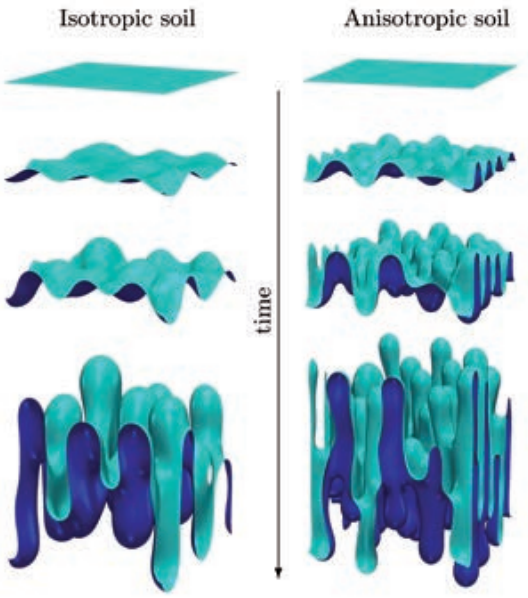



Am Computer simulierte Flussgeschwindigkeiten.

# WOHIN MIT DEM $CO_2$?

Eine mögliche Strategie, den Klimawandel einzubremsen, wäre die Lagerung von $CO_2$ in geologischen Formationen unter der Erde. **Alfredo Soldati** (TU Wien) untersucht in numerischen Simulationen, wie verlässlich und effizient die Lagerung von flüssigem $CO_2$ wäre und wie die Zuverlässigkeit von den Bodeneigenschaften abhängt. Speziell Reservoirs in Sedimentgestein wurden untersucht. Dort spielen Anisotropien im Boden eine wichtige Rolle – das bedeutet, dass der Boden nicht in jeder Richtung betrachtet dieselben Eigenschaften aufweist.

*„We have been supported by the enthusiastic and dynamic VSC team during the entire duration of the project, from the initial phases of code-porting and performance-improvement, up to the launch of productive jobs. We have also enjoyed a lot of excellent initiatives promoted by the VSC team, like advanced training schools and workshops/meetings."*
(Franceso Zonta, TU Wien)



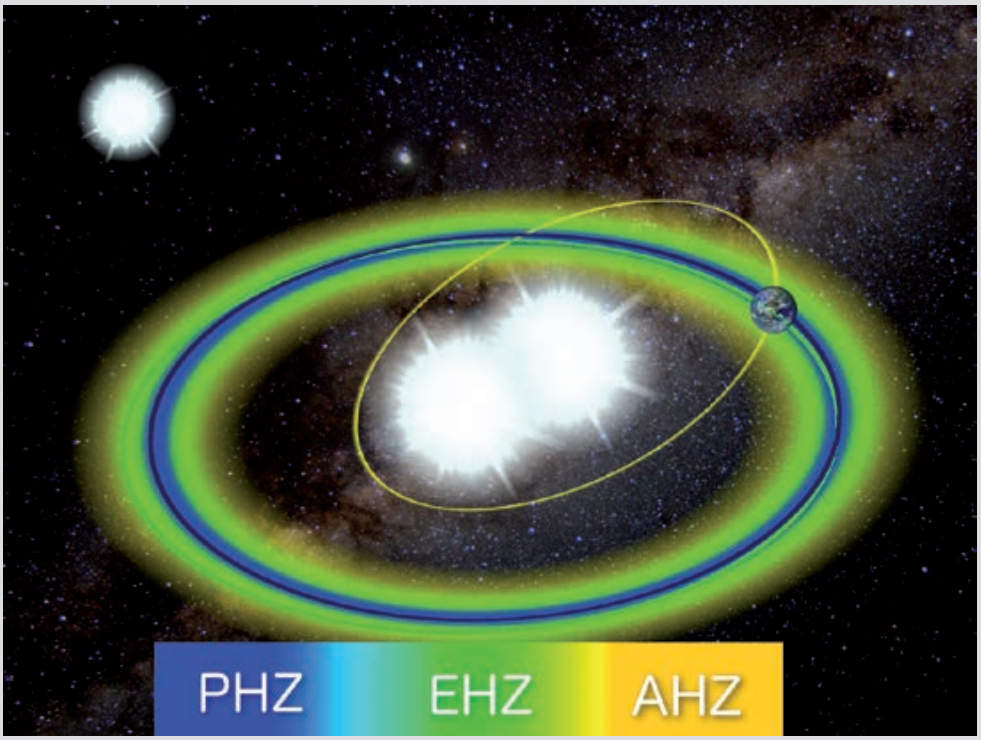

Auflösung und Mischung von $CO_2$ in Wasser links in einem isotropen (ordnungslosen) und rechts in einem anisotropen (richtungsabhängigen) geologischen Reservoir. Die zeitliche Entwicklung zeigt, wie sich die Grenzfläche zwischen Wasser und $CO_2$ ändert. Im anisotropen Fall sieht man, dass die Strukturen kleiner werden und die Oberfläche dadurch größer wird. Dies führt zu einer verbesserten Bindung des $CO_2$s.

# BODENSANIERUNG UND REINIGUNG VON WASSERRESSOURCEN

Die Gruppe von **Daniel Tunega** (Universität für Bodenkultur Wien) modelliert Böden auf molekularem Niveau, um Phänomene auf Oberflächen und Grenzflächen zu beleuchten. Insbesondere wird die Anhaftung von Verschmutzungen an Bodenkomponenten unter die Lupe genommen. Die Gruppe arbeitet mit einigen experimentellen Gruppen zusammen und deren gemeinsame Ergebnisse haben Konsequenzen für den Umweltschutz, wie zum Beispiel die Bodensanierung oder die Reinigung von Wasserressourcen.

# SUCHE NACH BEWOHNBAREN PLANETEN

Viele Planetensysteme unterscheiden sich von unserem Sonnensystem ganz entscheidend: In unserer kosmischen Nachbarschaft sind ungefähr 60% der Sterne Teil eines Doppel- oder Mehrfach-Sternsystems. Das wirft die Frage auf, wie Planetenbahnen in einem solchen System mit mehr als einem Stern aussehen können und was das für die potenzielle Bewohnbarkeit solcher Planeten bedeutet. Über 120 Doppelsternsysteme mit Planeten sind bereits bekannt, und die Wahrscheinlichkeit, dass demnächst in einem solchen System ein bewohnbarer Planet gefunden werden könnte, ist hoch. Im Forschungsteam von **Elke Pilat-Lohinger** (Universität Wien) arbeitet man an numerischen Simulationen der Planetenentstehung, planetarem Wassertransport und Langzeitstabilitäts-Untersuchungen solcher Planeten.

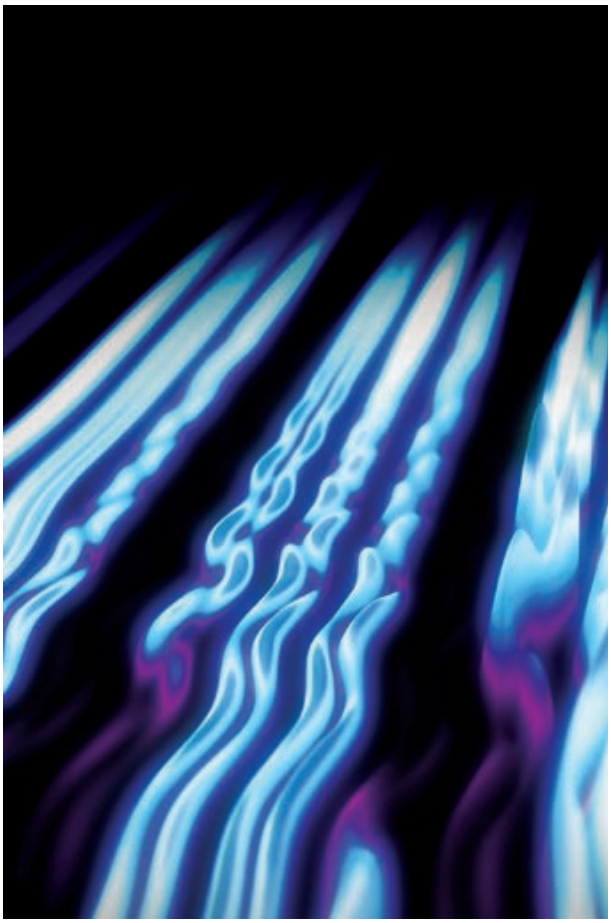



Ist da jemand? Auch Doppelsternsysteme könnten bewohnbare Planeten beherbergen.
http://path.univie.ac.at/index.php/sp8-binary-stars

# WELLENAUSBREITUNG IN UNGEORDNETEN MEDIEN

Mit der Ausbreitung von Wellen beschäftigt sich das Team von **Stefan Rotter** (TU Wien). Interessante Phänomene ergeben sich etwa, wenn sich Lichtwellen durch ein komplexes Medium wie ein Stück Würfelzucker bewegen, wo sie immer wieder gestreut und abgelenkt werden. Auch Elektronenwellen in einem ungeordneten, nicht-kristallinen Medium zeigen dieses schwer berechenbare Verhalten. Daher entwickelt man Computerprogramme, mit denen sich die Ausbreitung solcher Wellen auf realistische Weise berechnen lässt, um wellendynamische Experimente aus verschiedenen Bereichen der Physik besser verstehen zu können.

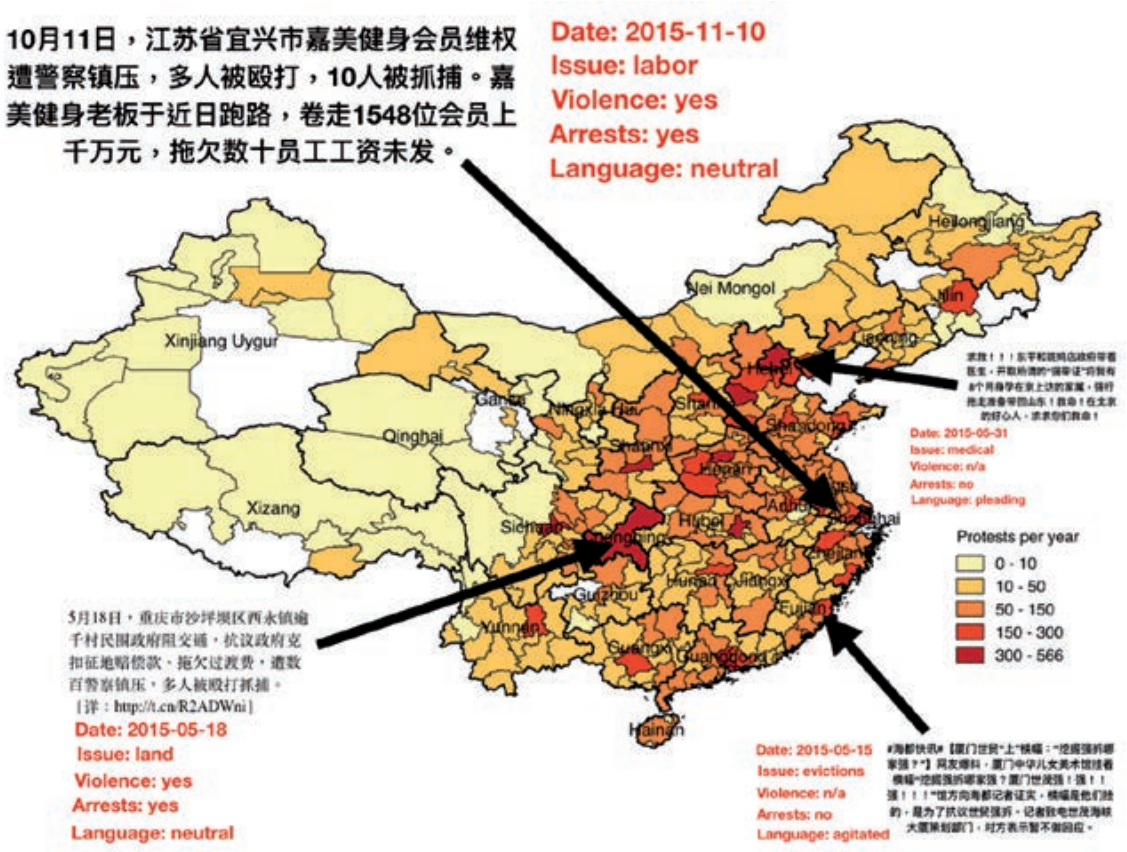
*„Der attraktivste Aspekt bei der Arbeit mit dem VSC - abgesehen von seiner starken Rechenleistung - ist die Flexibilität, mit der wir diesen Supercomputer nützen können. Dadurch können wir schnell und unkompliziert auf den Rechner zugreifen - wenn immer es ein Projekt erfordert oder wir eine neue Idee haben und schnell eine Testrechnung starten wollen. Sehr zufrieden sind wir auch mit dem professionellen Support des VSC Teams."*
(Stefan Rotter, TU Wien)



**Wellen bei der Ausbreitung in einem Wellenleiter mit räumlich moduliertem Rand.**

# BIG DATA HILFT, CHINESISCHE POLITIK ZU VERSTEHEN

Wie reagieren Lokalregierungen in China auf Proteste und Onlinebeschwerden ihrer Bürger? Mit dieser Frage beschäftigt sich das Team von **Christian Göbel** (Universität Wien). Mit Hilfe von linguistischer Datenverarbeitung und maschinenlernenden Verfahren werden hunderte Millionen Datenpunkte analysiert – das können Tweets oder Onlinebeschwerden sein, oder auch Medienberichte und Regierungsdokumente. Unter anderem kann man aus chinesischen Tweets Informationen darüber erhalten, wo und wann Proteste stattfinden, wogegen die Bürger protestieren, ob es zur Gewaltanwendung kommt und welche Haltung der Verfasser der Tweets gegenüber der (Lokal-)Regierung hat. So soll erforscht werden, warum die lokale Führung manchmal die Probleme der Bürger löst und sie manchmal ignoriert oder sogar unterdrückt.




**Automatisch kann aus Kurzmeldungen in sozialen Medien wertvolle Information über Unruhen und Proteste in China extrahiert werden.**

*„Am meisten bin ich mit der Unterstützung durch die Mitglieder des VSC-Teams zufrieden. Ich fand die Lernkurve für verteiltes Rechnen sehr steil und musste nie lange auf Antworten auf meine vielen Fragen warten. Ansonsten gefällt mir das Gefühl der Aufregung, wenn das Programm endlich läuft, alle CPUs auf einem Knoten zu 100% ausgelastet sind und Stunden in Minuten verwandelt werden."*
(Christian Göbel, Universität Wien)

# MEHR EFFIZIENZ FÜR DIE ÖFFIS



Foto: Johannes Zinner

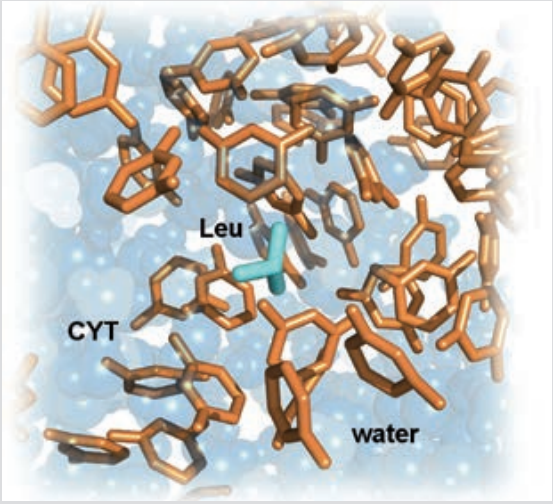
**U-Bahn-Leitstelle der Wiener Linien in Wien Erdberg.**

Wie kann man den öffentlichen Verkehr am besten planen und steuern? Damit beschäftigt sich die Forschungsgruppe um **Karl Dörner, Roland Braune** und **Michael Schilde** (Universität Wien). Mit metaheuristischen Lösungsmethoden untersucht man Strategien für optimales Störungsmanagement, Wartungsplanung oder Intervalloptimierung. Das Ziel ist, dadurch mit den vorhandenen Ressourcen die Kundenzufriedenheit zu erhöhen, oder bei gleichbleibender Qualität den Ressourceneinsatz zu verringern.

# BIOINFORMATIK LIEFERT EINBLICKE IN DIE EVOLUTIONSGESCHICHTE

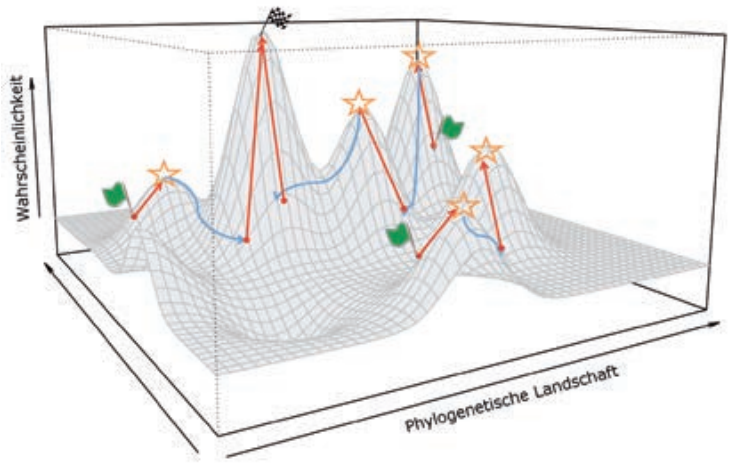
Mit modernen Computermethoden werden völlig neue Einblicke in die Evolutionsgeschichte möglich. Man kann heute vollständige Genome analysieren, miteinander vergleichen und nach statistischen Zusammenhängen suchen – so sind in der Bioinformatik ganz neue Forschungszweige entstanden, die vor dem Aufkommen von Hochleistungscomputern noch undenkbar waren.

Ganz fundamentalen Fragen geht man in der Gruppe von **Bojan Zagrovic** (Max F. Perutz Laboratories) nach. Dort fragt man nach dem Ursprung des universellen genetischen Codes, den alle Lebewesen unseres Planeten nutzen, um genetische Information weiterzugeben. Computersimulationen sollen die Hypothese testen, dass sich der Code aus der Interaktion zweier essentieller biologischer Moleküle, RNA und Proteinen, entwickelt hat.

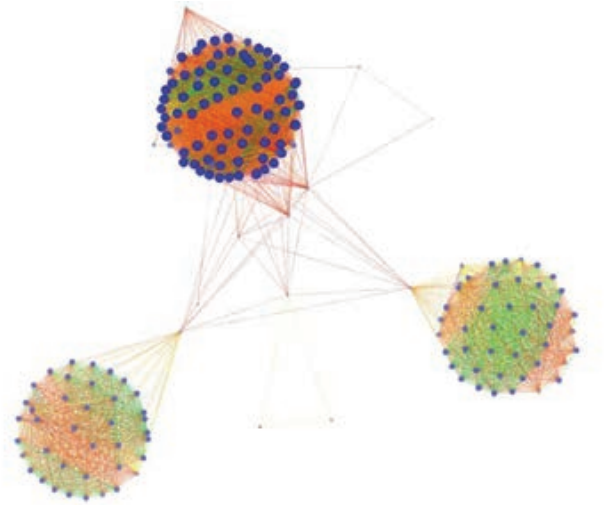



Ein Schnappschuss aus einer Molekulardynamik-Simulation der Seitenkette von Leucin (Leu) in wäßriger Lösung von Cytosin (CYT).

Mit phylogenetischen Bäumen beschäftigt man sich im Team von **Bui Quang Minh** (Max F. Perutz Laboratories) – dabei handelt es sich um Stammbäume, die Verwandtschaftsbeziehungen zwischen unterschiedlichen Spezies illustrieren. Früher erstellte man sie anhand morphologischer Ähnlichkeiten – heute kann man sich dabei auf Statistik und umfangreiches Datenmaterial stützen.




Suche nach dem Stammbaum: Ähnlich wie sich ein Schifahrer Richtung Tal bewegt, versucht man sich am Computer der besten Lösung zu nähern. Dabei muss man es schaffen, tatsächlich den optimalen (hier also: höchsten Punkt) zu erreichen und nicht in einem der lokalen Maxima hängenzubleiben. Startpunkt sind die grünen Flaggen, Ziel ist die schwarz-weiß-karierte.



**Protein- Ähnlichkeitsnetzwerk: Jeder kleine Punkt (Knoten) in diesem Netzwerk entspricht einem Protein. Die Ähnlichkeit zweier Proteine wird durch die Länge der Verbindungslinie (Kante) der beiden repräsentiert. Je größer die Ähnlichkeit, umso kürzer die Kante. Man sieht dadurch sehr gut, dass sich in großen Proteinfamilien kleinere Unterfamilien (hier die 3 großen Kugeln) bilden, die sich jeweils an eine ganz spezifische Funktion angepasst haben.**

In der Arbeitsgruppe von **Thomas Rattei** (Universität Wien) betreibt man Bioinformatik unter anderem auf der Ebene der Proteine. Alle derzeit bekannten Proteinsequenzen sollen am Computer miteinander verglichen werden, sodass sich Gruppierungen ergeben, aus denen man auch wichtige Information über die Evolutionsgeschichte lernen kann.



Thomas Rattei

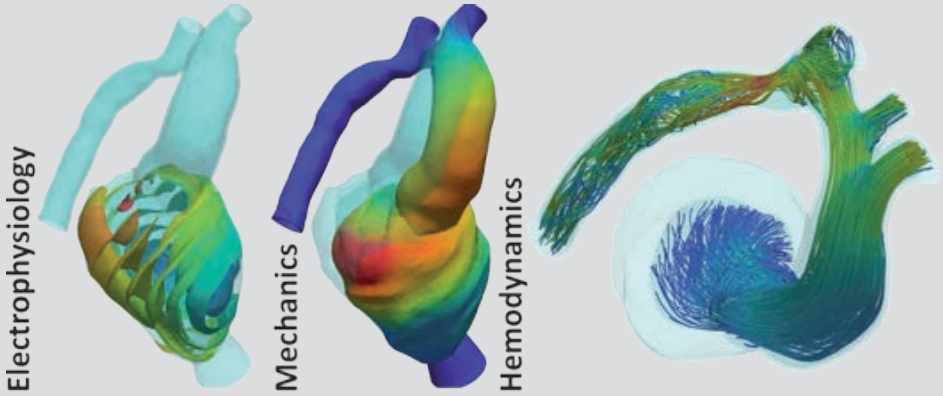
In der Forschungsgruppe von **Joachim Hermisson** (Universität Wien / Max F. Perutz Laboratories) interessiert man sich ganz besonders für die Schotenkresse (Arabidopsis thaliana), eine weit verbreitete, recht unscheinbare Pflanze. Als Modellorganismus in der Genetik spielt sie eine wichtige Rolle. Mittels DNA-Daten wird die Geschichte der Modell-Pflanze untersucht. Mehr als 1000 komplette Genome aus dem Eurasischen Raum wurden zusammen mit über 100 neuen Genomen aus Afrika und von den Makaronesischen Inseln verarbeitet. Die Analysen führten zu überraschenden neuen Resultaten zur Entstehung der Art und zum Übergang zur Selbstbestäubung: Beides fand in Afrika statt, und nicht in Asien, wie bisher vermutet.



**Andrea Fulgione (links) sammelt Arabidopsis thaliana auf den Kapverden.**

# DER HERZSCHLAG IM COMPUTER

Die Medizin soll in Zukunft immer individueller und patientenspezifischer werden. In der Forschungsgruppe von **Gernot Plank** (Medizinische Universität Graz) entwickelt man Modelle, mit denen man die Herzfunktionen einzelner Patientinnen und Patienten erfassen und am Computer simulieren kann – eine überaus komplexe und rechenintensive Aufgabe, die in der zukünftigen Präzisionsmedizin einen wesentlichen Beitrag zur Verbesserung von Diagnose und Therapie leisten soll.




**Multidimensionale Simulationen des Herzschlags für bessere Diagnose- und Therapiemöglichkeiten: elektrische Reizleitung, mechanische Verformung und Hämodynamik.**

# BIOPROZESSE RICHTIG VORHERSAGEN

Viele Pharmaprodukte werden heute auf biotechnologischem Weg hergestellt – etwa mit Hilfe von Bakterien. Dabei handelt es sich um komplexe chemische Vorgänge, die genau überwacht werden müssen, um die nötige Qualität zu gewährleisten. Doch oft können während des Prozesses wichtige Parameter nicht direkt gemessen werden – erst nachdem man eine Probe entnommen und im Labor analysiert hat, kennt man das Ergebnis. **Michael Melcher** und **Friedrich Leisch** (Universität für Bodenkultur Wien und Austrian Centre of Industrial Biotechnology, Graz) entwickeln daher statistische Modelle, mit denen man aus unmittelbar zugänglichen Messgrößen auf die nötigen Parameter schließen kann. So wird es möglich, direkt während des Prozesses relevante Größen einzuschätzen und vorherzusagen.

# VITAMINE UND IHRE GEGENSPIELER

Derivate des Vitamins $B_{12}$ sind für den Menschen äußerst wichtig. Sie spielen etwa eine wichtige Rolle bei der Herstellung roter Blutkörperchen. Allerdings gibt es auch $B_{12}$-Derivate, die als „Antivitamine" zu Gegenspielern des Vitamins $B_{12}$ werden und die Verarbeitung des Vitamins behindern. Ein leichter Vitamin $B_{12}$-Mangel kann mit verschiedenen neurodegenerativen Erkrankungen wie Parkinson oder Alzheimer in Verbindung gebracht werden. Die Forschungsgruppe von **Maren Podewitz** (Universität Innsbruck) untersucht die physikalisch-chemischen Eigenschaften von Vitamin $B_{12}$-Derivaten, um die Folgen eines $B_{12}$-Mangels auf molekularer Ebene zu verstehen.


OK
LA
RP
KM

VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER


Vienna Scientific Cluster
service@vsc.ac.at
http://vsc.ac.at

Univ.-Prof. Dr. Christoph Dellago
Universitätsprofessor für Computational Physics
Universität Wien
1090 Wien, Strudlhofgasse 4
christoph.dellago@univie.ac.at

Ao. Univ.-Prof. i.R. Dr. Herbert Störi
Leiter des VSC Research Centers
VSC Research Center
TU Wien
Karlsplatz 13, 1040 Wien
herbert.stoeri@tuwien.ac.at

Dr. Andreas Schildberger
Leiter des Zentralen Informatikdienstes
ZID/BOKU-IT
Universität für Bodenkultur Wien
1190 Wien, Peter-Jordan-Straße 82
andreas.schildberger@boku.ac.at

Univ.-Prof. Dr. Alexander Ostermann
Leiter des Forschungsschwerpunkts Scientific Computing
und des Instituts für Mathematik
Universität Innsbruck
6020 Innsbruck, Technikerstraße 13
alexander.ostermann@uibk.ac.at

Dr. Manfred Stepponat
Applikationsleiter
IT-Services für Lehre und Forschung
Technische Universität Graz
8010 Graz, Steyrergasse 30/I
stepponat@tugraz.at

Für den Betrieb verantwortlich:

Dr. Ernst Haunschmid
Leiter des Fachbereichs High Performance Computing
Information Technology Solutions
Technische Universität Wien
1040 Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10
ernst.haunschmid@tuwien.ac.at



**Impressum/Offenlegung gemäß § 25 Mediengesetz:**
**Informationsbroschüre des VSC Projekts**

**Herausgeber:** VSC Research Center
TU Wien
Karlsplatz 13, 1040 Wien

**Redaktion:** Dr. Florian Aigner (florian.aigner@tuwien.ac.at),
Dr. Irene Reichl (irene.reichl@tuwien.ac.at)

**Koordination:** Dr. Irene Reichl

**Titelbild:** Dr. Irene Reichl

**Design und Layout:** typothese.at

2019