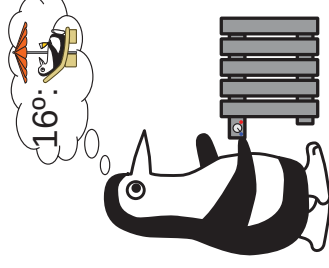


Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	6
Earthquake shaking and noise disturbance	8
Gemeinsam innovativ: Leistungsstarker	
Exascale-Supercomputer für das LRZ	15
Quantum Computing: The Next Wave for HPC18	
Viel gerechnet	21
Paralleles Wissenschaftliches Rechnen	
und der Fluch des Zoom	22
Ein Königreich für einen SYCL Computer	26
Computing Insight UK	
und Student Cluster Challenge	30
KONWIHR: New projects from autumn 2022	32
Ferienakademie 2022	34
Schnappschuss: Ein Quartl auf der Wies'n	37
Notiz*Notiz*Notiz	38



Quartl* - Impressum

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde

Redaktion:

S. Herrmann, S. Reiz, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

Tel./Fax: ++49-89-289 18611/18607

e-mail: hermasa@in.tum.de,

<https://www.cs.cit.tum.de/sccs/startseite/>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.03.2023**

* Quarttel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartt: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Das Quartl erhalten Sie online unter <https://www.cs.cit.tum.de/sccs/weiterfuehrende-informationen/quartl/>



Das Quartl ist das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für *Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern* (KONWIHR) und der *Bavarian Graduate School of Computational Engineering* (BGCE)

Editorial

Dieser Tage ist immer häufiger vom Boykottieren die Rede – von russischem Gas bis zum Gekicke in der Wüste. Deshalb soll es in dieser Ausgabe um Boykotte und das Boykottieren gehen. Machen wir uns zunächst mal schlau in Sachen Herkunft des Begriffs.

Der Namensstifter war, manche mögen es geahnt haben, Brite. Charles Cunningham Boycott wurde 1832 im englischen Burgh St. Peter geboren. Er übte verschiedene Berufe aus, war zum Beispiel Offizier in der Royal Army oder Gutsverwalter in Irland. 1880 wurde Boycott von John Crichton, dem dritten Earl of Erne, in dieser Funktion auf dessen Ländereien in der irischen Grafschaft Mayo angestellt. Aus der Geschichte, oder wohlweise auch aus diversen Hollywood-Produktionen, ist ja bekannt, dass die soziale Lage im Irland des 19. Jahrhunderts ziemlich angespannt (gelingend gesagt) war. Die Verhältnisse bei der Landnutzung standen da der Ausbeutung in den aufkommenden Industriegebieten z.B. Englands oder anderswo in puncto Rückschrittlichkeit und Brutalität in nichts nach. Im Gegenteil. Es kam immer wieder zu Unruhen, und ja auch zu heftigen sowie andauernden Absetzbewegungen in Richtung USA. In dieser Gemengelage gab es natürlich hinreichend Möglichkeiten für einen Gutsverwalter, sich seinem Arbeitgeber gegenüber als besonders effektiv anzupreisen ...

Und in der Tat: Schon bald erwarb sich Boycott den Ruf eines ziemlich üblen Menschenschinders. Das mag seinem Chef gefallen haben, bei den aufmüpfigen Iren kam es gar nicht gut an. Zum einen missfiel seine Amtsführung, zum anderen brodelte es eben ohnehin schon seit längerer Zeit zwischen den wohlhabenden Landlords einerseits und ihren oft bettelarmen Pächtern andererseits. Auf jeden Fall weigerten sich die Bauern von Lough Mask (das muss irgendwo zwischen Middle Fritham und Nether Adlethorpe liegen ...) bereits im ersten Dienstjahr Boycotts, den fälligen Pachtzins weiter zu bezahlen. Boycotts Verhalten gegenüber den Pächtern führte schließlich dazu, dass niemand mehr für ihn arbeiten, etwas von ihm kaufen oder an ihn verkaufen, kurz irgendetwas mit ihm zu tun haben wollte. Boycott drohte

* **Notiz * Notiz * Notiz ***

Termine 2023

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **preCICE Workshop 2023**
Technical University of Munich: 13.02. - 16.02.2023
<https://precice.org/precice-workshop-2023.html>
- **Supercomputing 2023:**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC23) – SC 23 in Denver, CO, USA: 12.11.-17.11.2023 <https://sc23.supercomputing.org/>

darauf mit gerichtlichen und polizeilichen Maßnahmen und setzte schließlich im November 1880 arbeitslose, loyale protestantische Arbeiter aus Ulster ein, um die Ernte einzubringen. Das Ganze ging einher mit einem massiven Militäreinsatz – Soldaten in großer Zahl flankierten die Ernte. Und wer jetzt angesichts der Worte Ulster, Protestanten, Militäreinsatz zusammensetzt, liegt so falsch nicht – da deutet sich in der Tat noch eine ganz andere große Baustelle an.

Kurzum, die Sache drohte völlig zu eskalieren und zu entgleiten, die Behörden wussten sich am Ende nicht anders zu helfen, als Boycott ebenfalls unter Militärschutz zu stellen und wegzubringen. Daraufhin kündigten sämtliche Pächter und Landarbeiter ihre Verträge. Ein Beschluss der 1879 gegründeten Irischen Landliga erlaubte ihnen offiziell, Boycott zu meiden und keinerlei Geschäfte mit ihm zu machen. Selbst die Eisenbahngesellschaft weigerte sich damals, sein Vieh zu transportieren. Es gab den ersten – Boycott. Der Vollständigkeit halber: Sympathieträger Boycott verstarb 1897 in England.

So viel zum Kontext – doch nun zum Boykottgedöns neuerer Zeit. Irgendwie ist es immer dasselbe. Irgendwo sitzt ein böser Bube, genannt Diktator, Mulah, Präsident, oder auch nur ein finsterner Konzern. Der macht vermeintlich schlimme Dinge, nach innen oder außen. Die anderen, die Guten, wollen ihn zur Raison bringen. Aber nicht so wie früher, indem mal eben kurz den Krieg erklärt oder eine Fabrik kurz und klein schlägt, sondern mit anderen Druckmitteln – man boykottiert. Die Diskussionen dazu sind immer dieselben, und deshalb ziemlich ermüdend: Schadet das dem bösen Buben überhaupt, oder uns am Ende mehr? Denn wenn der Westen nicht zu Olympia nach Moskau kommt, sagt postwendend der Osten seine Zusage in Los Angeles ab (Letzteres hat mich damals überhaupt nicht gestört – weniger Medaillen für die Schergen des Kommunismus hieß schließlich mehr für uns). Oder wenn wir keine Gummibärchen mehr liefern, dreht die andere Seite den Vodka-Hahn zu ... oder so ähnlich.

Und trifft es denn überhaupt den bösen Buben oder vielmehr irgendwelche armen Schweine in seinem Land, die man gar nicht treffen will, die dadurch eher noch weiter in die Arme des bösen Buben getrieben werden? Denn machen wir uns nichts vor: Wenn man keine Erdbeeren mehr nach Nordkorea liefert, wird das für Kims Speiseplan keinerlei Folgen haben. Ein Dilemma jagt das andere.

Irgendwie sind Boykotte somit immer blöd: Man nimmt nicht an Olympia teil, sorgt sich aber über entgangene Chance für die eigenen Sportler:innen. Man liefert keine Hitech-Produkte mehr in ein bestimmtes Land, gibt sich aber besorgt, wenn deshalb in diesem Land weniger chirurgische Eingriffe durchgeführt werden können. Oder man denke an fast schon belustigende Marketingmaßnahmen zur Abwehr eines Boykotts wie vor ein paar Jahren, als Putin keine Äpfel mehr aus der EU importieren wollte: „an apple a day keeps Putin away“. Und in jüngster nun die Sache mit Öl und Gas aus Russland: Man würde den Aggressoren ja gerne die kalte Schulter zeigen, will aber andererseits, dass es die Schulter in der eigenen Stube warm und gemütlich hat. Ganz zu schweigen von den skurrilen Diskussionen um individuelles Boykottverhalten während der WM in Katar. Ein besonders schöner Beitrag netlich in einer Talkshow: „Wir müssen die Spiele anschauen. Denn tun wir das nicht, sehen wir ja auch tolle Aktionen wie das Nicht-Singen der Nationalhymne durch die iranische Nationalmannschaft nicht.“ Das ist ähnlich sinnbehaftet, wie wenn ich den Verzicht auf's Rauchen als meinen Beitrag zur Fastenzeit bezeichne. Alles schräg.

Also alles nutzlos mit den Boykotten? Nicht ganz. Es gibt ja schon „erfolgreiche“ Beispiele wie etwa den Boykott von Shell-Tankstellen in Deutschland 1995, nach der Ankündigung von Shell, die Öplattform Brent Spar trotz massiver ökologischer Bedenken und internationaler Proteste versenken zu wollen. Der Umsatz ging zurück – gar nicht so stark, aber sichtbar, und schnell. Und das brachte den Riesen tatsächlich zum Einlenken. Es kann also klappen, oft aber verpufft es oder wird zum Bumerang. Ich fürchte daher, dass uns die lästigen Debatten über Nutz und Frommen von Boykotten auch in Zukunft belästigen werden.

Schnappschuss der Woche: Ein Quartl auf der Wies'n



Ein treuer Leser hat beim Oktoberfest 2022 folgenden Schnappschuss festgehalten und festgelegt, dass der Ausdruck „Münchner Quartl“ sogar im Ammer Festzelt angekommen ist. Immerhin – oder sogar – mit „Bio“.



Abbildung 1: Bild von Reinhard Fössmeier
mit Rahmen unter freier Lizenz, freepik.com (1ed2020)

Vielen Dank für diesen schönen Schnappschuss!

Verzichtet hätten wir gerne auf einen Bergwacheinsatz für eine Gruppe von sechs Studierenden der Ferienakademie. Bei ungünstigen Wetterverhältnissen wurde eine sehr anspruchsvolle Tour nicht abgebrochen. Zum Glück lief am Ende dank des Einsatzes der Profis von der südtiroler Bergwacht alles glimpflich ab, aber es zeigt, wie wichtig Kommunikation und Hinterfragen der aktuellsten Situation überall und insbesondere auch in den Bergen ist.

Die Planung der Kurse für nächstes Jahr ist fast abgeschlossen, und wir freuen uns schon auf eine interessante Ferienakademie in 2023.

Tobias Neckel

Doch damit genug für heute. Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen eine friedvolle und geruhsame Weihnachtszeit, mit hoffentlich wenig Viren und viel Gas. Zunächst aber wünschen wir Ihnen natürlich viel Vergnügen mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=45

06. Dezember 2022

Theater

All the world's a stage, and all the men and women merely players^a; lässt William Shakespeare^b auf der Bühne verkünden. Eine ironische Selbstreflexion, die Jacques da von der Bühne verkündet.

Der amerikanische Philosoph Elvis Aaron Presley^c greift diese Zeile auf und paraphrasiert sie zu *The world's a stage and each must play her part*^d. Wo Shakespeare in seinem anarchischen Theater 1599 noch changiert zwischen der Freiheit, eine Rolle zu spielen und dem Zwang dies zu tun, reduziert Presley diese Frage 1969 auf den Zwang - die äußere und innere Notwendigkeit.

Etwas hat sich verändert im Leben der Menschen. Karl Marx^e würde sagen, sie sind aus der theatralischen Anarchie der frühen Neuzeit in den hoch entwickelten Kapitalismus des 20ten Jahrhunderts hineingewachsen - Opfer eines ausbeuterischen Systems, entfremdet^f von sich selbst.

Theatralisch kann uns also das Leben mitunter erscheinen. Wer ein dreijähriges Kind toben sieht kann sich nicht des Eindrucks erwehren, dass hier neben einem inneren Konflikt auch eine äußere Show aufgeführt wird. Wer Vladimir Putin^g hört, kann sich des Eindrucks nicht erwehren, dass hier auf der Weltbühne Theater gespielt wird.

^aWilliam Shakespeare, As you like it, 1599

^bWilliam Shakespeare, englischer Theaterschriftsteller, 26. April 1564 – 3. Mai 1616

^cElvis Aaron Presley, amerikanischer Philosoph und Künstler, 8. Januar 1935 – 16. August 1977 (?) denn einige sind ja überzeugt, dass Elvis noch lebt.

^dElvis Presley über eine Background Sängerin live in concert at the International Hotel in Las Vegas, USA, 26. August 1969

^eKarl Marx, deutscher Philosoph, 5. Mai 1818 – 14. März 1883

^fDer Begriff der Entfremdung ist ein alter philosophischer Begriff der durch Karl Marx verweltlicht wurde und für die 68er Generation eine zentrale Rolle spielte.

^gVladimir Wladimirowitsch Putin, russischer Politiker, 7. Dezember 1952 -

In 2022 gab es neben der höchsten bisher gemessenen Zahl an (sehr guten) Bewerbungen und Zulassungen auch die höchste Zahl an Teilnehmer*innen bei der Ferienakademie: 244 Personen, davon 187 Studierende. Und das trotz der vergleichsweise niedrigen Zahl an Kursen.

An gewisse Covid-19-Maßnahmen bei der Ferienakademie waren wir schon gewöhnt. Im Gegensatz zu einem sehr ruhigen Ablauf in 2021 mussten alle Teilnehmenden heuer mehr mit Krankheiten umgehen: Neben einigen Covid-19-Verdachts- und bestätigten Fällen hatte ein Gasthof unglücklicherweise mit einem Magen-Darm-Infekt zu kämpfen, der der Reihe nach die Mehrzahl der dort untergebrachten Teilnehmer*innen beeinträchtigte. Der Gasthof hat aber super mit einer angepassten und flexiblen Essensplanung und diversen Portionen Hühnersuppe reagiert.

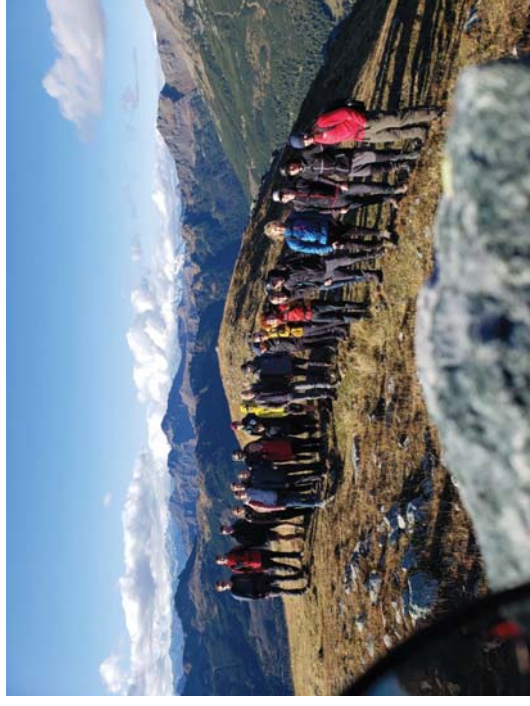


Abbildung 1: Teilnehmer*innen von Kurs 3 „Dark Matter and the Cosmos“ und Kurs 6 „Climate Change: Social, Technical, and Political Dimensions“ der Ferienakademie 2022 bei einem Wander-Ausflug in den Sarntaler Alpen. ©Stefan Andres Cifuentes Wäldelich

Ferienakademie 2022

FERIENAKADEMIE

Zum 38.ten Mal hat die Ferienakademie⁴ diesen Herbst im Sarntal (Südtirol) stattgefunden, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird.

In diesem Jahr fanden insgesamt neun Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen statt (für Details vgl. <https://www.ferienakademie.de/kurse-2022/>):

1. Modern Approaches to Optimization and Verification in Computer Science
2. Decentralized Decision Making and Simulation Models in Smart City Infrastructures
3. Dark Matter and the Cosmos
4. Deep Learning in Computational Science and Engineering
5. Let's play! Simulated Physics for Games
6. Climate Change: Social, Technical, and Political Dimensions
7. Physical Models meet Deep Learning
8. Perceptual Audio Coding - From Theory to Software
9. Computational Medical Imaging

Darüber hinaus gab es auch noch einen Doktorand*innenkurs im Bereich der Elektro- und Informationstechnik, der von Professor Jörg Schulze (FAU) geleitet wurde.

⁴www.ferienakademie.de

Aber während das dreijährige Kind einen Lösungsprozess und eine Weiterfahrungsphase durchmacht – und daher mitunter in einen Konflikt zwischen vorgestellter Realität und realer Realität gerät – scheint bei Vladimir Putin tatsächlich ein Theater aufgeführt zu werden.

Tatsächlich lernt das Kind, mit der Diskrepanz zwischen Wunsch und Realität umzugehen. Es erkennt die Rituale, Zeichen und Symbole, die unsere Welt strukturieren. Es lernt im Lauf der Zeit, dass mehrere solche Welten existieren mit ihren jeweils eigenen Ritualen, Zeichen und Symbolen. Es lernt mit-zuspielen und dabei doch ganz bei sich zu sein. Im Sinne von Peter Brook^a lernt es, nach innen auf sich selbst zu hören und gleichzeitig nach außen mit der Welt zu kommunizieren^b. Diese Balance zwischen Innenwelt und Außenwelt zu halten ist theatral aber nicht theatralisch.

Einer der größten Schauspieler unserer Zeitgeschichte war übrigens der österreichische deutsche Reichskanzler Adolf Hitler^c. Wolfram Pyta^d hat auf diese theatralischen Fähigkeiten und den Einsatz der Theatralik hingewiesen und damit Grundlagen für die Interpretation des Populismus als Theater geliefert^e. The world's a stage and each must play his part.

M. Resch

^aPeter Brook, englischer Theaterregisseur, 21. März 1925 – 2. Juli 2022

^bSiehe Peter Brook, *The Open Door: Thoughts on Acting and Theatre*, Pantheon, 1993

^cAdolf Hitler, Politiker, 20. April 1889 – 30. April 1945. Österreicher und Deutsche streiten sich mitunter um die Frage, welchem Land er zugehörig sei. 1889 im österreichischen Teil der K&K Monarchie geboren wurde er am 25. Februar 1932 in Deutschland verbeamtet und erhielt am 26. Februar 1932 mit seiner Vereidigung die deutsche Staatsbürgerschaft (nach dem Reichs- und Staatsangehörigkeitsgesetz von 1914). Die gesetzliche Regelung, mit der Verbeamtung automatisch die deutsche Staatsbürgerschaft zu verleihen, wurde zwischenzeitlich praktisch beendet da nun auch EU-Angehörige in Deutschland verbeamtet werden können.

^dWolfram Pyta, deutscher Historiker, 27. Oktober 1960 -

^eWolfram Pyta, Hitler: Der Künstler als Politiker und Feldherr. Eine Herrschaftsanalyse, Siedler, 2015

Earthquake shaking and noise disturbance

Earthquakes not only generate shaking or trembling of the Earth, but also audible noise. While the shaking aspect is typically of bigger concern, audible noise has developed into a real issue for geothermal power engineering. While earthquakes generated by geothermal engineering processes are in most cases not directly damaging, noise can irritate residents and thus often impedes substantially the acceptance of geothermal activities in the general public. In this article, we report on a joint endeavour of LMU, TUM and the University of Helsinki to simulate such seismo-acoustic nuisance patterns.

Sometimes everything just comes together perfectly in research: A freshly developed feature in your favourite simulation software, a newly installed supercomputer, an interesting research question and an established team looking for the next challenge. But let's take it one by one:

The software: SeisSol¹, the Bavarian HPC earthquake simulation software (featured, e.g., in Quartl #100), has recently been extended to simulate coupled elastic-acoustic problems. This feature has been developed to simulate earthquake-tsunami problems, where the elastic earth interacts with the ocean, modelled by the acoustic wave equation [1]. However, very similarly, also solid earth and the atmosphere form a coupled elastic-acoustic system.

The problem: In 2018, the Finnish *St1 Deep Heat Company* established an enhanced geothermal system (EGS) under the Laajalahti bay just next to the Finnish capital Helsinki. An EGS cannot directly start operating; the underground rock formation first needs to be activated (lingo: *stimulated*)². During such a stimulation, water is pumped into the subsurface under high-pressure. The purpose is to open cracks to enhance the heat exchange between hot rock and the cool circulating fluids to produce carbon-neutral

¹<https://seissol.org/>

²e.g. Bundesverband Geothermie, *Enhanced Geothermal-System (EGS)*, <https://www.geothermie.de/bibliothek/lexikon-der-geothermie/e/enhanced-geothermal-system-egs.html> (accessed Nov. 28, 2022).

About KONWIHR

The main objective of KONWIHR is to provide technical support for the use of high performance computers and to expand their deployment potential through research and development projects. Close cooperation between disciplines, users and participating computer centres as well as efficient transfer and fast application of the results are important. Read more on konwihhr.de.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihhr.de

Your email will be read carefully and answered by Katrin Nusser or Gerasimos Chourdakis, KONWIHR's current contact people in the Bavarian North and South. Together with Prof. Gerhard Wellein and Prof. Hans-Joachim Bungartz (who you can also reach using the same address), we collect and process your proposals two times per year (1st of March and 1st of September). Learn more about how you can apply for funding at:

<https://www.konwihhr.de/how-to-apply/>

Katrin Nusser, Gerasimos Chourdakis

KONWIHR: New projects from autumn 2022



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of autumn 2022. In every round, we accept proposals for “normal” (up to 12 months) and “small” (up to 3 months) projects, as well as “basis” projects to establish contact points. In this round, the following projects were funded:

- *Vectorization of SPHinXsys, a strong-coupling, meshless multi-physics and AI-ware library* – PD Dr. Xiangyu Hu (Institute of Aerodynamics and Fluid Mechanics, TUM)

You can find more details about these projects at

<https://www.konwihir.de/konwihir-projects/>

We would like to invite you to our online workshop on April 19, 15:00-16:00, in which new projects will present their goals and challenges. For more details, please watch our konwihir-announcements mailing list.

energy for district heating. This procedure induces many earthquakes of low magnitude. As the production site is within a densely populated area, the Institute of Seismology of the University of Helsinki closely monitored the stimulation [2]. While the earthquake magnitudes did not exceed the safety threshold of $M2.0$, residents reported persistent disturbing noises during the stimulations.

The supercomputer: In 2020, the Finnish IT Center for Science, CSC, installed the supercomputer *Mahiti*. CSC is, coincidentally, located in the same municipality that hosts the EGS: Espoo. It was one of the first available supercomputers with the new AMD EPYC processors (1404 nodes with 128 cores@2.6 GHz and 256 GB RAM each, Infiniband interconnect).

The mission was therefore set: Use the elastic-acoustic coupling feature of SeisSol to simulate sound emission patterns of earthquakes on the *Mahiti* supercomputer. The final ignition for the project eventually resulted from a successful proposal: The joint project *Seismo-Acoustic Effects of EGS Induced Earthquakes Below Otaniemi* by TUM, LMU and the University of Helsinki was chosen to be one of eight *grand challenge* projects on *Mahiti*³.

The optimizations: In order to run efficiently on *Mahiti* it was necessary to adapt SeisSol to its new AMD architecture. AMD’s Zen2 is an x86 architecture, with AVX2 extension, such that SeisSol’s optimization for the Intel Haswell CPUs could be recycled. The most interesting aspects of *Mahiti* turned out to be its pronounced NUMA effects: The compute-nodes come with dual-socket configuration, with each socket further divided into four NUMA domains. With a NUMA-aware thread-pinning strategy and by using one MPI rank per NUMA domain, we were able to achieve excellent performance and parallel efficiency on *Mahiti*, see Figure 1.

³<https://www.csc.fi/en/-/mahti-grand-challenge-projects-are-chosen>

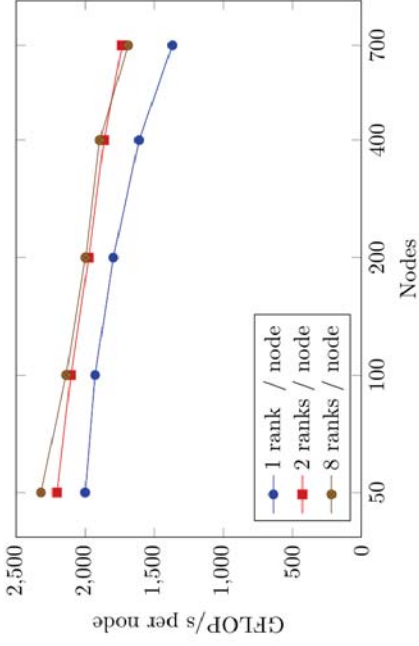


Figure 1: Parallel efficiency of SeisSol on *Mahti* for a mesh with 89 million elements. Image taken from [1].

The wave speeds of acoustic waves in air vs. seismic waves in the earth vary drastically (343 m/s vs. ~6000 m/s). As SeisSol uses an explicit scheme, it has to obey the infamous CFL-condition to ensure stability: The time-step Δt_i on the i^{th} element is restricted by

$$\Delta t_i < C h_i / v_i,$$

where h_i denotes the diameter of the element and v_i the maximum speed at which information propagates within that element.

To not be globally restricted by locally refined meshes or material inhomogeneities, we employ a clustered local time-stepping (LTS) scheme. Originally, SeisSol was built solely for elastic problems, for which LTS already achieved a significant speed-up. Now, in our scenario with a more drastic velocity difference, the smallest time-step was $1/16284$ compared to the largest time-step.



Abbildung 1: Erfolgreiche, aber auch erleichterte Durhammer Studenten.

mit großem Vorsprung gewonnen, so dass sie mit einem guten Polster nach Manchester gereist sind. Das brauchten sie dann aber auch gegen Teams aus Bristol, York und Birmingham. UCL hatte zuvor zurückgezogen. Auf der Konferenz haben sie dann die Challenges um „esoterischere“ Hardware wie dem Graphcore-System immer noch gewonnen, aber gerade beim klassischen HPL wurden sie in Grund und Boden performt. Irgendwie hat ein kleiner Konfigurationsfehler am Anfang zu MPI+OpenMP sie so aus der Bahn geworfen, dass die zuvor meilenweit abgeschlagenen Bristolers nahezu allen Boden wieder gutmachen konnten und sie auch kurzzeitig auf Platz zwei verwiesen wurden. Aber es hat am Ende doch noch gereicht, so dass der Pott abermals in den hohen Norden kommt.

Ab kommenden Jahr haben wir die UK Cluster Challenge nun in unseren L3 Lehrplan integriert, weil wir Ausbildung zu Hardware halt allem Python und Machine-Learning zum Trotz eben doch noch als wichtig erachten. Die ISC werden wir wohl nie angehen können, da die traditionell genau in unseren Prüfungswochen liegt, aber unsere Studenten als Dauergast auf dem CIUK-Podium zu sehen - daran könnte ich mich gewöhnen.

Tobias Weinzierl

Computing Insight UK and Student Cluster Challenge



Die CIUK (Computing Insight UK) ist eine jährliche Konferenz immer so kurz vor Weihnachten. Gestartet hat sie als Machine Evaluation Workshop (MEW) in Coventry. Jetzt sind weder Coventry noch der Name MEW besonders attraktiv – bei Ersterem darf man allerdings als Deutscher sich nicht allzu laut beschweren – und so wurde der Workshop vor einigen Jahren nach Manchester verlegt, in CIUK umbenannt, und um ein Vorlesungsprogramm, Poster-Session und Vendor-Ausstellungen angereichert. Es ist so ein kleines bißchen eine Mini-Mini-SC mit Klassentreffen-Touch.

Vor drei Jahren haben die Organisatoren dann beschlossen, dass sie auch eine Student Cluster Challenge haben wollen. Dann kam jedoch Covid, und so mussten sie komplett umdisponieren. Heraus kam eine andere Art von Challenge, die nicht besser oder schlechter, sondern wirklich anders ist als das Inspirationsprogramm auf den großen Schwesterkonferenzen: Jedes Team bekommt über zwei Monate hinweg vier verschiedene Challenges, die sie in einem eng gesteckten Zeitrahmen zu bearbeiten haben. Jede Challenge wird von einer anderen Firma gestellt, die den Teams zu diesem Zweck ihre Maschinen remote als Bare-Metal zur Verfügung stellen. Die Studenten kommen auf diese Art und Weise mit so verschiedenen Systemen wie Graphcore IPUs, IBM Power Prozessoren, aber eben auch NVIDIA GPUs in Berührung. Nach jeder Challenge wird der Punktestand bekannt gegeben. Auf der eigentlichen CIUK absolvieren die Teams dann nochmals vier Challenges und am Ende der Konferenz gibt es einen strahlenden Gewinner.

Und der heißt dieses Jahr wieder Durham. Vor zwei Jahren haben wir den Titel geholt, dann wurden wir im vergangenen Jahr Zweiter bzw. erster Verlierer. In diesem Jahr hat Laura Morgenstern, die aus Chemnitz bzw. Jülich nach Durham gekommen ist, das Team von mir übernommen und prompt ging es auch wieder aufwärts. Unsere Studenten haben alle Remote-Herausforderungen

For such large differences, the old implementation of local time-stepping was no longer working reliably. This gave the final impetus to move to a new local time stepping implementation, which uses an actor model to formalize updates and communication. Using LTS reduced the time-to-solution by a factor of 31 in comparison to global time-stepping.

The earthquake model: SeisSol demands three main components for an earthquake model: A tetrahedral mesh that discretizes the geometry of the simulated domain, a “velocity model” that depends on rock properties and defines the wave propagation speeds, and a source model to explain where and how seismic waves are generated.

The land-survey of Finland provides free elevation data with up to 2 m resolution. With that elevation data, we generated several meshes for the simulation domain, which extends down to 13 km in the solid earth and up to 2 km in the atmosphere. Horizontally, the mesh covers an area of 12 km × 12 km, centred around the borehole. The lower threshold of hearing for humans is around 20 Hz. In order to resolve waves with a frequency up to 25 Hz accurately, we set a target element size of 97 m in the elastic domain and 14 m in the acoustic domain. Generating such a fine mesh in the entire domain is still computationally unfeasible, so we allowed the mesh generator to coarsen the mesh outside a region of interest.

From [2], we extracted information about the largest recorded earthquake during the stimulation. We generated a kinematic earthquake model with a source-type function of the Brune type. While the speed of sound in the atmosphere is well known, the material model for the elastic earth is more difficult to evaluate. It is not easily accessible for measurements and furthermore heterogeneous, since the subsurface can consist of different rock types. We reviewed several velocity models, which were obtained from samples in the borehole, active or passive tomography. We decided to use the 1D velocity model from [3].

The overall goal of the project is to heighten the awareness of induced earthquake sounds, and to provide developers and policymakers a framework to assess acoustic nuisance effects for future experiments. Depending on

the source mechanism, an earthquake radiates differently polarized waves in different directions. Hence, in addition to the reference case based on actual observations, we implemented four more earthquake scenarios by rotating the source mechanisms of the earthquake. Over the course of two years, we have used in total 19.3 million CPU hours on Mahti to produce two terabytes of raw data to be then post-processed.

The results: We first verified that our synthetic waveforms match the seismograms recorded by our Finnish colleagues. Figure 2 shows the comparison at

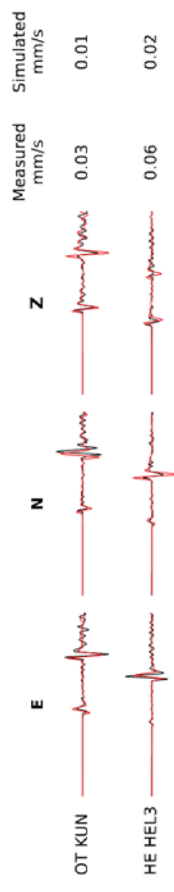


Figure 2: Comparison of the obtained simulated seismograms (red) with the observations (black). Image modified from [4].

two recording stations. The quality of the fit of the main features is very good. The arrival times for the primary and the secondary are well reproduced, as are the relative amplitudes of both wave modes. Note that the seismograms are normalized, as it is usually difficult to reproduce the full source physics with the employed Brune-type source model approximation.

With the validated seismograms, we calibrated a model that relates the peak ground velocity to the peak sound pressure level in the atmosphere. For that, we used the seismograms within the refinement zone of the mesh, where we obtained the most accurate results. With this model, we could drastically reduce the compute time for the scenarios. Instead of running the fully-coupled model with a refinement zone, it was sufficient to run only the cheaper elastic part of the model, now with the required accuracy everywhere. From the calibrated model, we could infer the sound pressure from the peak ground velocity and thus generate discomfort maps as illustrated in Figure 3. For the actually recorded earthquake (Event 13), we see that most disturbances were reported from the north-eastern part of the study area – where we also see

Dank an die Codeplay-Leute, Michael (Bader) dafür, dass Mario rüberkommen konnte, um mit der GPUisierung von ExaHyPE weiter zu helfen, und natürlich an Intel, die das Event gesponsort haben.

Tobias Weinzierl

Referenzen:

- 1 Holger Schulz, Gonzalo Brito Gadeschi, Oleksandr Rudyy, Tobias Weinzierl: *Task inefficiency patterns for a wave equation solver*. IWOMP 2021. arXiv:2105.12739
- 2 https://scicomp.webspace.durham.ac.uk/events/code_performance_series/sycl-practioners-hackathon-2022-user-group-meeting/



Abbildung 1: Geht es, geht es? Nein es geht noch immer nicht ... Experten aller Art versuchen, einen SYCL Software-Stack aufzusetzen und etwas auf GPUs laufen zu lassen.

pro Knoten unterstützte. Und so ging das alles weiter. Kurzum: Es hat etwa zehn Leute wirklich über einen Tag gekostet, um einen SYCL Software-Stack aufzusetzen, mit dem man arbeiten kann. Und manche Probleme wie die Tatsache, das man nicht separat linken kann, haben wir immer noch nicht ausgeräumt (in Durham geht's, in Bristol net – verstehe das wer wolle).

Für den allerersten SYCL-Workshop dieser Art ist das ein versöhnlicher Ausklang. Wir können nicht ernsthaft anfangen, SYCL-Applikationen zu schreiben, solange wir keine lokalen Maschinen haben, die SYCL unterstützen. Insbesondere möchten wir in Durham nicht auf das Profiling-Ecosystem von NVIDIA verzichten. Somit sind wir nun, nach diesem Workshop, in der Lage, richtig mit SYCL anzufangen. Und wir warten alle sehnsüchtig auf den nächsten, um nun wirklich in SYCL-Code einzutauchen.

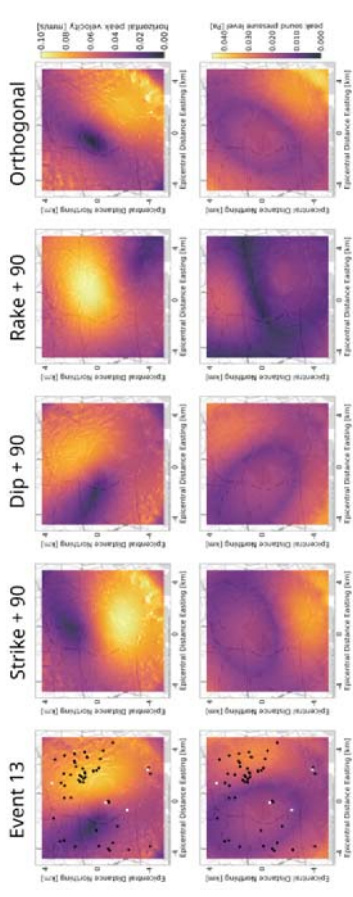


Figure 3: Horizontal peak ground velocity (top row) and sound pressure level (bottom row) for five different earthquake scenarios in a $4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$ area of interest. Event 13 is the largest $M1.8$ earthquake [2], whereas the other scenarios are hypothetical to study effects of alternative source geometries. For event 13, the white and black circles represent locations of reported heard and felt disturbances. Image modified from [4].

the largest peak ground velocity and the largest sound pressure level. The other results illustrate which neighbourhoods would have been affected if the source mechanisms had been different.

Finally, we investigated which of the two elastic body waves generate the louder sounds upon interaction with the atmosphere. We found that the shear wave generates higher sound pressures compared to the compressional wave at larger epicentral distances, while at shorter distance to the epicentre it is vice versa. These results refine the common assumption that the first arriving compressional wave is typically responsible for sound generation.

The future: Our results enable a more profound information of the public, not only about seismic hazard due to geothermal energy production, but also about the acoustic nuisances during such a stimulation. The workflow can be adopted for other geothermal energy productions—if the companies or local authorities have access to sufficiently large supercomputing facilities. A detailed article on our work is under review for the *Bulletin of the Seismological Society of America* (a preprint is publicly available [4]).

Sebastian Wolf, Lukas Krenz, Gregor Hillers,
Alice-Agnes Gabriel, Michael Bader

Acknowledgements The CSC IT Center for Science, Finland, Grand Challenge project 2003841 provided access to the CSC Mahti computational infrastructure. The authors gratefully acknowledge the Gauss Centre for Supercomputing e.V. (www.gauss-centre.eu) for funding this project by providing computing time on the GCS Supercomputer SuperMUC-NG at Leibniz Supercomputing Centre (www.lrz.de).

References

- [1] L. Krenz et al., *3D acoustic-elastic coupling with gravity: the dynamics of the 2018 Palu, Sulawesi earthquake and tsunami*, in Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, New York, NY, USA, Nov. 2021, pp. 1–14. doi: 10.1145/3458817.3476173.
- [2] G. Hillers et al., *The 2018 Geothermal Reservoirs Simulation in Espoo/Helsinki, Southern Finland: Seismic Network Anatomy and Data Features*, Seismological Research Letters, 2020, doi: 10.1785/0220190253.
- [3] M. Leonhardt et al., *Seismicity during and after stimulation of a 6.1 km deep enhanced geothermal system in Helsinki, Finland*, Solid Earth, vol. 12, no. 3, pp. 581–594, Mar. 2021, doi: 10.5194/se-12-581-2021.
- [4] L. Krenz, S. Wolf, G. Hillers, A.-A. Gabriel, and M. Bader, *Numerical simulations of seismic-acoustic nuisance patterns from an induced M1.8 earthquake in the Helsinki, southern Finland, metropolitan area*, arXiv, Nov. 07, 2022, doi: 10.48550/arXiv.2211.05647.

In der Praxis stellt sich heraus, dass der Teufel natürlich wie immer im Detail liegt: Verschiedene SYCL-Generationen behandeln Nested-Parallelism unterschiedlich, nicht alle Tasks unterstützen alle C++ Features wie virtuelle Funktionsaufrufe (auch wenn selbige Aufrufe auf dem Host stattfinden), die parallelen Schleifen sind nur bis zu drei Dimensionen wohldefiniert, und so weiter und so fort. Eines der größten Mankos ist allerdings die Plattform: Wenn man SYCL programmiert, dann möchte man das auch auf GPGPUs laufen lassen.

Solche GPUs gibt es wohl für Eingeweihte in der Intel DevCloud, aber weder weiss man so ganz genau, was man dort an Hardware serviert bekommt (oder man darf nicht drüber schreiben), noch kann man dort verlässlich gegen Konkurrenzhardware der Firmen AMD und NVIDIA benchmarken. Wir haben in Durham daher den ersten UK SYCL Practitioners Hackathon durchgeführt [2], mit dem erklärten Ziel, SYCL-Codes wirklich (also auf NVIDIA Architekturen) laufen zu lassen. Aus ExaHyPEs Sicht waren Kollegen aus der TUM (Mario) und die Durhamer dabei, sowie unser Kontaktmann von Intel. Dann hatten wir Vertretungen der anderen Intel Centres of Excellence da (auch aus Cambridge ;-), und schlussendlich zwei Leute aus dem hohen Norden: von Codeplay aus Edinburgh, einer Firma, die ja nun auch inzwischen zu Intel gehört.

Da Intel seine Toolchain verständlicherweise nicht für ein CUDA-Ecosystem ausliefert, mussten wir den kompletten Software-Stack selber neu bauen. Zunächst hatten wir enorm von der Arbeit der Kollegen aus Bristol profitiert, die auf einem Isambard Test-Sub-Cluster SYCL für den Unterricht bereits vorinstalliert hatten. Ihre Erfahrungen zu nichtdokumentierten Flags und das Insider-Knowledge der Codeplay-Leute zusammen erlaubten uns, erste Schritte zu machen. Dann die grosse Ermüchterung: Isambards Setup kann zwar eine Datei mit SYCL übersetzen, übersetzt man aber zwei Source-Files und versucht im Anschluss, explizit zu linken, geht die Toolchain komplett in die Knie. Kaum war das auf den Durham-lokalen A100s ausgeräumt, stellt sich heraus, dass das CUDA-Subsystem nicht mehr als acht logische GPUs

Ein Königreich für einen SYCL Computer



Vorgeschichte: Früh im Jahre 2021 wurde ich von Intel kontaktiert, ob wir eventuell Peano und ExaHyPE aus den UK ExCALIBUR Projekten auf oneAPI portieren wollen würden. Natürlich mit dem zugehörigen Support. Und natürlich war die Antwort sofort ja, zumal – soviel Zeit muss sein, das zu betonen – Durham dadurch vor Cambridge zum ersten oneAPI Academic Centre of Excellence von Intel im Königreich wurde. Das hören die Kollegen aus dem Süden bis heute nicht gerne. Das Motiv des Durham Centre ist, oneAPI bzgl. komplexen Taskings abzuklopfen. In der Tat erzeugen ExaHyPE und das zugrundeliegende Peano relativ komplexe Taskmuster, die z.B. die normale GNU-Runtime sehr schnell an ihre Belastungsgrenze treiben [1].

Die ersten paar Monate haben wir in Durham nahezu ausschließlich damit verbracht, Peano mit Intels OpenMP Implementierung zu testen. Ans Tageslicht kamen lediglich kleinere Mängel im Software-Stack, und so verlagerte sich der Fokus sehr schnell auf GPU-Offloading mittels OpenMP. Der nächste Schritt des Zentrums war dann, Peano auf SYCL zu portieren. Und somit sind wir im zweiten Funding-Jahr des oneAPI Centre of Excellence.

SYCL liest sich für C++-Nerds eigentlich wunderbar: Man erstellt ein Objekt, das eine Queue über einem Beschleuniger repräsentiert, und submittiert im Anschluss Tasks in diese Queue, die ihrerseits Abhängigkeiten entweder zu weiteren Tasks der Queue oder globalen Tasks haben können. Aller Datentransfer wird im Hintergrund abgewickelt, solange man nur initial korrekt entweder für die GPU oder im Managed-Memory allokiert. Innerhalb eines GPU-Tasks kann man mit einem parallel-for die GPU Threads und SMs beschäftigen. Alles im reinsten C++, wunderschön über Klassen und Funktoren abstrahiert und modelliert.

Gemeinsam innovativ: Leistungsstarker Exascale-Supercomputer für das LRZ



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Als erstes Supercomputing-Zentrum in Europa setzt das Leibniz-Rechenzentrum auf eine Innovationspartnerschaft zur Beschaffung seines nächsten High Performance Computing-Systems der Exascale-Leistungsklasse. Dafür entwickelt das LRZ in einem ersten Schritt gemeinsam mit Hewlett Packard Enterprise (HPE) und Lenovo Prototypen.

Er soll modernste Technik enthalten, Komponenten, die (noch) nicht verkauft werden und der Wissenschaft neue Methoden zur Datenverarbeitung offenbaren: Bei der Beschaffung seines nächsten Höchstleistungsrechners setzt das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften erstmals auf eine Innovationspartnerschaft – ein Novum in Europa: Dabei wird das wissenschaftliche Rechenzentrum, Teil des Gauss Centre for Supercomputing, gemeinsam mit den Technologieanbietern Hewlett Packard Enterprise (HPE) und Lenovo innerhalb des nächsten Jahres die Architektur des Supercomputers der Exascale-Klasse planen, die dafür notwendigen Prototypen entwickeln und bestehende Komponenten an spezifische Wünsche anpassen. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBWF) sowie das bayerische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (StMWK) gaben bereits grünes Licht und die notwendige finanzielle Zusage.

Neue Architektur für den leistungsstarken Supercomputer

Was Geschwindigkeit und Energiebedarf betrifft, geraten die Architekturen von aktuellen Supercomputern an Grenzen. Vor allem der Transport von Daten innerhalb der Systeme ist enorm energieintensiv und braucht neue Lösungen. Anwender:innen setzen nicht mehr nur auf klassische Modellierung und Simulationen. Bei ihnen steigt der Bedarf an Auswertung von Big Data mit Künstlicher Intelligenz und Methoden des maschinellen Lernens. Zudem benötigen Nutzer:innen heute auch Rechenkraft, um Forschungsergebnisse zu visualisieren oder in Virtueller Realität (VR) darzustellen.

Folglich wird der Exascale-Rechner des LRZ eine Reihe von spezialisierten Prozessoren und Komponenten auf seinen Rechenknoten vereinen, die mit möglichst niedrigem Energiebedarf eine breite Palette von Arbeitslasten ermöglichen. Diese Leistung ist im Co-Design und in gemeinsamer Anstrengung von Technologieanbietern und Forschung sowie mit unterschiedlichen Herangehensweisen besser zu schaffen.

Gezielter auf Bedürfnisse hin entwickeln

Eine Innovationspartnerschaft bietet sich hierfür geradezu an: In Deutschland ist sie seit 2016 möglich. Bund, Länder und Kommunen wollen damit die Entwicklung neuer Technologien und Angebote im öffentlichen Sektor anregen. Innovationspartnerschaften verlaufen mehrstufig in Form von Wettbewerben: Die erste Runde, in der mehrere Unternehmen um das Konzept eines energie-effizienten, aber leistungsstarken Alleskönners im HPC rangen, konnten HPE und Lenovo für sich entscheiden. In der nächsten Runde werden diese beiden Technologieanbieter nun mit den Spezialist:innen des LRZ sowie Anwender:innen aus verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen Komponenten neu entwickeln, optimieren und in Prototypen auf Herz und Nieren testen.

Innovationspartnerschaften machen mehr Aufwand: Alle Unternehmen sollen mit den gleichen Informationen arbeiten und keiner sollte von den technischen Neuerungen der anderen erfahren können. Verträge werden über Entwicklungsarbeiten und zum Prototypenbau geschlossen, sie berühren Urheber-, Patent- und Vermarktungsrechte. Außerdem arbeiten mehrere Unternehmen an einem Problem und werden dafür honoriert. Trotzdem lohnen sich Innovationspartnerschaften: Ersten Erfahrungen aus kleineren IT-Projekten zufolge lässt sich Hard- oder Software so gezielter auf Bedürfnisse der Anwender:innen hin entwickeln.

Heterogene Technologien integrieren

Bis Ende 2023 wird sich herausgestellt haben, welches Unternehmen den nächsten Supercomputer der Exascale-Klasse mit dem LRZ aufbauen und betreuen wird. Die Erwartungen an den neuen Höchstleistungsrechner, der

Aber gut, es war Zeit für so ein Werk und nun ist es zumindest da. Wer weiß, vielleicht ergibt sich eines Tages die Möglichkeit, die erste Edition grundlegend zu überarbeiten. Auch der Themenkreis ist unvollständig für eine Einführung in das parallele wissenschaftliche Rechnen: PDEs fehlen, MPI wird nicht thematisiert, die lineare Algebra ist nahezu absent. Und ein kurzer UTICS-Text bietet keinen Raum für Übungen. All das wären kanonische Themenfelder für einen zweiten Band ...

Tobias Weinzierl

Referenzen:

- [1] Carl E. Wiemann: *Carl Wieman Science Education Initiative*. <https://cwsei.ubc.ca>
- [2] Thomas Huckle, Stefan Schneider: *Numerische Methoden: Eine Einführung für Informatiker, Naturwissenschaftler, Ingenieure und Mathematiker*. Springer, 2006
- [3] Hans-Joachim Bungartz, Stefan Zimmer, Martin Buchholz, Dirk Pflüger: *Modellbildung und Simulation - Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer, 2013
- [4] Tobias Weinzierl: *Principles of Parallel Scientific Computing: A First Guide to Numerical Concepts and Programming Methods (Undergraduate Topics in Computer Science)*. Springer, 2022

Woher also nehmen und nicht stehlen? Man könnte jetzt noch etwas sorgfältiger suchen, oder man schreibt eben selber was. So ist das Manuskript zur Vorlesung während diverser Lockdowns immer weiter gewachsen. Und eines Tages klopft der Springer an die Tür und fragt nach Buchideen für seine UTICS-Serie (Undergraduate Topics in Computer Science). Da passt das Vorlesungsmanskrpt perfekt und tatsächlich hat zumindest UTICS wirklich kein anderes Werk mit ähnlichem Scope in seinem Repertoire. Seit diesem Jahr ist das Werk nun erhältlich [4].

Bin ich zufrieden? Ja und nein. Nicht alle meine Kollegen nutzen es für klassisches Flipped-Classroom-Teaching oder als durchgängige Vorbereitungslektüre. Aber wir verwenden es in Durham und einige Studenten honorieren die Begleitlektüre. Allerdings teilte sich das Feedback der Studierenden während des Lockdowns in zwei unversöhnliche Lager: Ein großes Lager wollte unbedingt die klassische Vorlesung(-aufzeichnung) wieder haben - egal ob es ein ausgearbeitetes Buch gibt oder nicht. Dem anderen Lager gefällt, nicht noch weiteres Zoom-Binge-Watching zu haben und stattdessen aktive Lernkonzepte. Heute suchen wir zumeist einen Mittelweg zwischen „klassischer“ Präsentation und „selber lesen“ und verkaufen Flipped-Classroom und Literaturbesprechungen immer mit dem Hinweis, dass diese ja omnipräsent in Oxford und Cambridge seien. Das zieht bei vielen Studierenden; was Oxbridge macht muss ja gut sein (schließlich haben wir ja mehrere Premierminister aus deren Hause und die waren alle prima).

Bei der Qualität des Buches sehe ich Luft nach oben. Vermutlich ging ich zu naiv an das Projekt heran und habe angenommen, dass Springer mehr Arbeit investiert, um das Geschriebene zu korrigieren und zu polieren. Das ist nicht passiert. Im Wesentlichen hat der Verlag das Manuskript genommen und in deren internes TeX-Format kopiert, auf welches ich keinen Zugriff hatte.

viele heterogene Technologien in sich vereinen wird, sind hoch: Es wird schätzungsweise fünf- bis zehnmal mehr wissenschaftliche Forschungsarbeiten bewältigen können als SuperMUC-NG, der aktuelle Supercomputer am LRZ. Dafür müssen die Prototypen bei Nutzer:innen-Benchmarks überzeugen. Nicht zuletzt ist die Energieeffizienz des Systems einer der entscheidenden Faktoren für die finale Vergabe.

Susanne Wieser

Quantum Computing: The Next Wave for HPC



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

By its very nature, high-performance computing (HPC) resides at the forefront of technology, with a history of advances punctuating its evolution—from the introduction of multi-core systems in the mid-2000s, the use of GPUs in the last decade, to specialized artificial intelligence (AI) processors in recent years. Each of these waves crashes upon new boundaries of maximal performance that drive new, previously unattainable scientific discoveries. It is no surprise that the HPC community now looks to the emerging capabilities of quantum computing as the next wave of progress to continue pushing the field as a whole forward.

To fulfil this potential, though, quantum computers—as any other accelerator technology before—must be tightly weaved into the HPC realm. Due to its radically different approach to computing, quantum integration is a complex, multi-layered and interdisciplinary endeavour. For one, quantum computing systems are just now emerging from the experimental world of physics laboratories with a long road towards maturation ahead. Second, most types of quantum systems, in their current form, have notably different environmental needs and infrastructure requirements than established HPC systems. Third, quantum systems are heterogeneous themselves and require elaborate embedded control systems to achieve the quantum state necessary for computing—it is these controls systems that need to integrate with HPC. Finally, the software requires integration across the entire stack: from programming models to tools as well as integrated scheduling environments and operating system extensions.

As part of the Munich Quantum Valley (MQV), funded by the state of Bavaria as part of its Hightech Agenda, and its associated projects Q-Exa, DAQC, MUNIQ-SC, MUNIQ-ATOMS, and QuaST, the Leibniz Supercomputing Centre (LRZ) investigates solutions to these challenges. MQV-associated projects are funded by the German Federal Ministry for Education and Research

Dann kam Covid. Dann kam Zoom. Dann kam eine gewisse Unzufriedenheit mit der Art und Weise, in der wir unterrichten. Bereits pre-Covid wurden alle Vorlesungen in Durham aufgezeichnet. Offiziell, um Studierenden mit Special-Needs die Revision zu erleichtern. Ehrenwert, wenn man EDI ernst nimmt. Mir erschien es jedoch mehr und mehr, als würde der Markt es diktieren: Unterricht ist stets und überall verfügbar, damit gibt es auch keinen „Zwang“ mehr, Vorlesungen zu vorgeschriebenen Zeiten zu besuchen. Geschenkt auch, dass einige Studien zum Schluss kommen, dass das „Vorproduzieren“ und verfügbar-machen von Vorlesungen sich negativ auf genau die Studierenden auswirkt, die eh schon kämpfen.

Zurück zu mir: Wenn man unzufrieden damit ist, permanent in einen Zoom-Bildschirm zu sprechen mit etwa 20% der Studentinnen und Studenten, die auch noch alle die Kamera aus haben, dann muss man etwas ändern. Ich beschloss, auf den „Don't lecture me“-/Active-Learning-Zug aufzuspringen [1]. Da aktives Lernen mit Zoom nicht einfach ist und Studierende dazu tendieren, vorbereitende Leseaufgaben zu ignorieren, sollten nun meine Studentinnen und Studenten in der Vorlesung (und auch davor) Texte lesen, um diese dann bei Zoom zu diskutieren und das Wissen anzuwenden. Selber Lesen in der Vorlesung und sich selber Notizen zu machen ist ja schon mal besser, also aktiver, als passiv auf Folien zu starren.

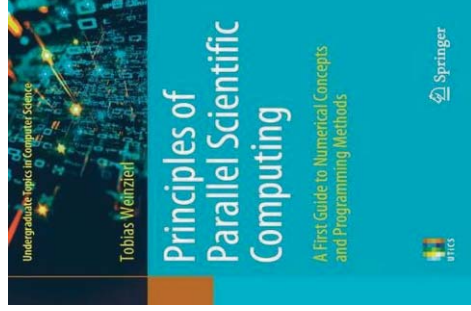
Es war jedoch erstaunlich schwer, Texte zu parallelem wissenschaftlichen Rechnen zu finden: eine Vielzahl der Bücher ist von Mathematikern für Mathematiker geschrieben. Das ist nichts für unsere Studis im dritten Jahr, von denen viele zwei Jahre lang kein einziges Integralzeichen gesehen haben. Selbst mein Favorit aus dem Hause Huckle [2] ist zu theoretisch, ohne die Parallelisierung und nicht in Englisch verfügbar. Dann gibt es einen Zoo an Büchern, die einen Numerik-Crash-Kurs mit einer Programmierführung verknüpfen. Das ist auch kein Fit für unsere Kohorte. Programmieren können sie. Das seminale Modellbildung und Simulation [3] schlussendlich kann die Disziplin super motivieren, aber ich war auf der Suche nach etwas mehr methodischem mit diesem parallelen Touch.

Paralleles Wissenschaftliches Rechnen und der Fluch des Zoom



*Ich mag keinen Unterricht via Zoom.
Ich mag kein PowerPoint-Karaoke in Vorlesungen.
Ich mag Diskussionen und Bücher.*

Vor etwa fünf Jahren haben wir in Durham begonnen, den Lehrplan in der Informatik komplett zu überarbeiten. Im Zuge der Umstrukturierung konnte ich die Numerik aus dem Tandem mit effizienten Algorithmen herauslösen und das Parallele Programmieren aus dem Block mit den Netzwerken und verteilten Systemen. Stattdessen haben wir ein Modul zu Parallel Scientific Computing eingeführt. Das spiegelt in meinen Augen korrekt wieder, dass modernes wissenschaftliches Rechnen ohne HPC nahezu undenkbar ist. Voller Freude ging ich derzeit ergo die Vorlesungsvorbereitung für das neue Modul an: Endlich können wir Vektorisierung, OpenMP und MPI am Beispiel von Molekulardynamik (ODEs) oder Diffusionsgleichungen (PDEs) vorstellen.



(BMBF) and the German Federal Ministry for Economic Affairs and Climate Action (BMWK).

These projects lay the foundation for the efficient integration and use of quantum accelerators in HPC. As a nexus point for these efforts, the Quantum Integration Centre (QIC), established in 2021 at LRZ, houses a research-rich environment with multiple quantum systems and a hefty HPC testbed that directly connects to the quantum systems. This includes an inaugural cryostat, in collaboration with IQM deploying its superconducting technology, and will soon add other quantum technologies and systems. The HPC resource, a medium-sized cluster with additional non-quantum accelerator technologies, is currently being setup in close physical proximity, providing the opportunity to experiment with different network configurations and placement of the control systems. This will provide the deeply integrated, low-latency environment needed for many quantum applications as well as enable novel research in widely heterogeneous systems spanning multiple technologies. This testbed environment further offers a unique platform to merge the two currently widely different software environments.

In order to overcome these challenges, computer and domain scientists require new programming models and approaches that bridge the gap between the two disparate software stacks and enable simplified programming accessible to a broader audience without advanced physics degrees. These models must then be integrated into the existing world of HPC programming models and languages coupled with high-level abstractions to open the door for usage by the broader HPC user community. As a starting point, LRZ and its partners are currently devising extensions to OpenMP that would allow quantum offload through OpenMP's "target" environment, which is a first step to realizing this vision. Additionally, the HPC and the QC system software must be adapted to operate the two system types together in a unified fashion.

Further yet, we require a new generation of schedulers that combine HPC and QC schedules and enables clean co-scheduling of resources and facilitates efficient sharing of QC resources from multiple processes within a large-

scale job or even across jobs. In this area, LRZ heavily leverages the work and expertise from several HPC projects (in particular the EuroHPC/BMBF projects REGALE and DEEP-SEA) on dynamic and malleable schedulers with co-scheduling opportunities and extends this work to include quantum acceleration. This will benefit QC acceleration and help transform the HPC landscape as a whole towards more dynamic resource utilization and heterogeneous execution across any accelerator.

With all these efforts aligned in concept and execution, LRZ helps push forward a powerful next wave in HPC's continued evolution, bringing the raw power of quantum mechanics and the extraordinary benefits of quantum-based acceleration to advanced scientific computing and the discoveries and breakthrough results lying in wait.

Laura Schulz, Martin Schulz

Viel gerechnet



Diese Zahlen können sich sehen lassen: Von August 2019 bis Oktober 2022 hat SuperMUC-NG, der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ), knapp zwei Millionen Jobs für Forschung und Wissenschaft erledigt. Und was er berechnet, simuliert oder analysiert hat, das findet sich nun im neuen Forschungsbericht „High Performance Computing in Science and Engineering“. Erschienen im Herbst 2022 kann der Berichtsband nun auch digital gelesen und heruntergeladen werden. Auf 268 Seiten finden sich Kurzberichte und Grafiken zu 99 Forschungsprojekten aus acht (Natur)Wissenschaftsdisziplinen. Besonders stark beanspruchten die numerische Strömungsmechanik, die Ingenieurwissenschaften sowie die Astrophysik den Supercomputer. Die 311.040 Rechenkerne des SuperMUC-NG waren insgesamt rund 7 Milliarden Stunden beschäftigt.



Abbildung 1: Title: High Performance Computing in Science and Engineering – Garching/Munich 2022 (2022), ISBN: 978-3-9816675-5-4

P. Bastian, D. Kranzlmüller, H. Brühle, G. Mathias