

Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	6
Aktuelle Forschung in der Quantum Computing Gruppe	8
FAU-Team rockt den HPCG-Benchmark bei der SCC 2022 in Dallas	15
KONWIHR: Projektabschluss „PEigFEx“	18
KONWIHR: Apply now!	20
Die Kunst beim Modellieren ist, die Spreu vom Weizen zu trennen	21
Festkolloquium 10.02.2023	22
9. BGCE Student Paper Preis bei der SIAM CS&E 2023	27
Ausblick Ferienakademie 2023	30
Notiz*Notiz*Notiz	32

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/>

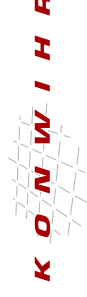
Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: 01.06.2023

* Quartel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 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 Engineer-*
ing (BGCE)

Editorial

Gibt es aktuell besonders viele Déjà-vus, oder kommt mir das bloß so vor? Skrupellose Diktatoren, die Kriege anfangen, um vermeintliche Kränkungen in der Vergangenheit auszumerzen, und um dem eigenen Volk endlich wieder die Größe und den Respekt zukommen zu lassen, die es – nach eigener Auffassung – verdient. Ein verkrusteter Militärapparat, der sich, obwohl er es nun wirklich besser wissen müsste, auf wahnsinnige Aktionen einlässt, an deren Ende eigentlich nur das Desaster sowie der eigene Fall in die Bedeutungslosigkeit stehen können. Betroffene Kirchenobere, die bestürzt zur Kenntnis nehmen, dass im k-plus-ersten Bistum völlig überraschend genau dieselben Schweinereien vorgekommen sind wie in k anderen Bisitümern zuvor. Hier Gewerkschafter, die die – zwar gesellschaftspolitisch wünschenswerte, ökonomisch aber fragwürdige – These vertreten, man müsse von einem Arbeitseinkommen leben können; und dort Arbeitgebervertreter, die verkünden, der Markt müsse den Preis des Guts Arbeit regeln – was umgekehrt zwar ökonomisch nachvollziehbar, gesellschaftspolitisch aber mehr als brisant ist. Hier lautstarke Friedensbewegte, die – sinngemäß – dem Menschen meiner Generation sehr vertrauten (und sei es nur aus Besinnungsaufsätzen in der Schule...) Leitsatz „lieber rot als tot“ folgen, und dort Freiheitsbewegte, deren Motto gerade andersrum lautet. Haben wir da nichts gelernt, oder dreht sich alles einfach immer wieder um dieselben Fragen – ungelösten Fragen?

Wie dem auch sei, wir wollen uns heute mit einem bestimmten Déjà-vu befassen; keine Angst, nichts Politisches, sondern eines aus der Wissenschaft. „Ich brauche meinen eigenen Rechencluster bei mir am Lehrstuhl“ – über Jahrzehnte eine der Standardforderungen einschlägig arbeitender Computational Scientists (im Folgenden etwas vereinfachend „Simulanten“ genannt) in ihren Berufungsverhandlungen. In der Sache war das – unabhängig vom eigentlichen Rechenzeitbedarf – in den meisten Fällen kaum zu begründen, ist doch der Betrieb in Rechenzentren professioneller und weitaus effizienter durchzuführen.

Was wurden da für absurde Argumente angeführt: „Bei mir kostet der Betrieb nichts, da mein Techniker, der Herr Müller, ja eh da ist“. Au weia, schon wieder dieses „Eh-da-Prinzip“, schon wieder eine Inkarnation dieses zentralen schrägen Paradigmas des öffentlichen Diensts: Das Personal ist schließlich eh da und – auch das ein traditioneller Bestandteil dieses Prinzips – irgendwie chronisch unterbelastet. Insofern kosten zusätzliche Aktivitäten von denen nichts. Noch was Absurdes gefällig? „Die Antwort auf meinen für den Fortschritt der Wissenschaft eminent wichtigen Rechenauftrag dauert zu lange, wenn das erst ins Rechenzentrum muss“. Ja klar, bis so ein kleines Bit die Strecke bis ins Rechenzentrum zurückgelegt hat, das kann schon mal dauern. Oder „Meine Forschung ist so wichtig, ich brauche direkten Zugriff, ein Einreihen in eine Warteschlange kommt doch für mich nicht infrage“.

Kurzer Einschub: Warum habe ich als Dekan eigentlich keine eigene Kantine? Es kommt doch tatsächlich manchmal vor, dass ich ein paar Minuten anstehen muss, bevor ich mein Mittagessen bekomme. Völlig indiskutabel, ja skandalös. Oder neulich auf der Autobahn, da stand ich im Stau – was ist da der Gesellschaft für ein Schaden entstanden, weil ich nicht noch mehr Quartl-Editorials schreiben konnte. Ich brauche unbedingt eine eigene Spur auf der Autobahn. Warten wie die anderen? Unzumutbar!

Falls man übrigens eine Überholspur bei der Abwicklung von Rechenjobs zubilligt: Priorisierung auf meinen im Rechenzentrum betriebenen Knoten kann auch dort sichergestellt werden – das kann sich besagter Eh-da-Müller vielleicht nicht vorstellen, aber ... es geht!

Es war ein jahrelanger Kampf, bis diesem Wahnsinn Einhalt geboten werden konnte. Der Hebel: Die Kommission für IT-Infrastruktur der DFG hat Großgeräteanträge einfach zurückgeschickt, wenn das Betriebsmodell nicht vernünftig war. Das war manchmal kräfte- und zeitraubend, aber es hat sich gelohnt: Lokal betriebene Systeme sind heute unter Simulanten die Ausnahme, müssen sie doch gesondert begründet werden, hieb- und stichfest. Ebenso wichtig: Ausnahmen sind möglich, weil es eben besondere Situationen und Anforderungen gibt.

Also eigentlich alles gut, könnte man meinen. Doch seit einiger Zeit geht der ganze Unfug wieder von vorne los. Nur sind es diesmal nicht die Simulanten, sondern die aufstrebende und sich rasant vermehrende Spezies der künstlich Intelligenzen und der maschinell Lernenden. Und wir reden von GPU-Clustern, nicht von solchen mit primär CPUs. Bei der einen oder anderen Berufungsverhandlung kommt es eben zu besagten Déjà-vus, immer gekleidet in Floskeln wie „das ist in der Robotik halt so“, oder „das mag bei der Simulation anders sein, beim maschinellen Lernen ist es so“. Was für ein Stuss. Was in letzterem Feld allerdings in der Tat anders ist, ist das lemmingeske Publikationsverhalten der dort Forschenden. Bekanntlich gibt es in diesem Bereich nur eine Handvoll als erstklassig eingestufte Konferenzen, mit einer Handvoll Deadlines zur Einreichung von Beiträgen. Und weil alle wie die Lemminge ihre Arbeiten genau da unterbringen wollen, fangen alle kurz vor den Deadlines mit ihrer Giganto-Trainerei an. Tja, und da das alle machen, kommt es doch tatsächlich zu Warteschlangen. Weil solche aber – s.o. – geradezu obszön sind, wird schamlos ein total überdimensionierter Cluster beantragt – so groß eben, dass in Spitzen-Nachfragezeiten kein Gedränge entsteht.

Auf dem Ponyhof ist so etwas vielleicht darstellbar, in der realen Welt nicht: Welches Gesundheitssystem richtet die Zahl der Betten in der Unfallchirurgie nach einem Szenario, in dem sich alle zeitgleich das Bein brechen? Das System kann darauf reagieren – z.B. gibt es Uni-Rechenzentren, die ein paar Wochen vor den Deadlines der Machine-Learning-Konferenzen Rechenjobs für Einreichungen bevorzugt abarbeiten. Aber man kann nicht zehnfach überdimensionierte Rechner hinstellen, nur weil die Lemminge das einfordern. Und so sind entsprechende Forderungen nach Ausstattung weder sachlich begründet noch legitim, sondern schlicht und ergreifend unsinnig. Und dementsprechend muss man mit ihnen umgehen. Auch wenn man die betreffenden Wissenschaftler:innen natürlich gewinnen möchte. Bei den Simulanten hat das schließlich auch geklappt. Aber halt, dort ist ja angeblich alles total anders ...

Termine 2023

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **preCICE Minisymposium Greece, Crete, Chania**
ECCOMAS Coupled Problems 2023: 05.06.23 - 07.06.2023
<https://precice.org/eccomas-coupled-2023.html> or <https://coupled2023.cimne.com/>
- **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/>

* Notiz * Notiz * Notiz *

Biomathematiker Fabian Theis erhält Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis

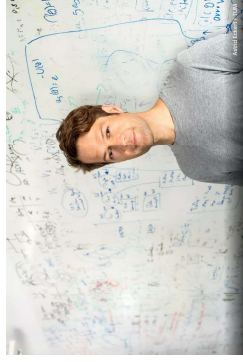


Abbildung 1: Leibniz-Preisträger
Prof. Fabian Theis

Der Ordinarius für Biomathematik an der Technischen Universität München (TUM) wird für seine Pionierarbeiten in der Analyse, Modellierung und Interpretation genomischer Daten ausgezeichnet, wie die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) mitteilte. <https://www.tum.de/aktuelles/alle-meldungen/pressemitteilungen/details/biomathematiker-fabian-theis-erhaelt-leibniz-preis>

Stairway to Impact Award für Wil Schilders

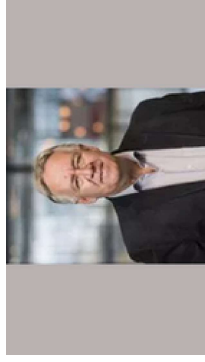


Abbildung 2: Leibniz-Preisträger
Prof. Fabian Theis

IAS Hans-Fischer-Fellow erhält wichtigen niederländischen Wissenschaftspreis. <https://www.cit.tum.de/cit/aktuelles/article/stairway-to-impact-award-fuer-wil-schilders/>

Doch damit genug für heute. Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen einen schönen Frühling und ein frohes Osterfest. Eier als Déjà-vus sind dabei durchaus willkommen. Zunächst aber wünschen wir Ihnen natürlich viel Vergnügen mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=46

12. März 2023

Der peloponnesische Krieg^a gilt als Kulminationspunkt in der griechischen Geschichte. Das mag daran liegen, dass seine beiden größten Protagonisten Sparta und Athen waren. Athen gilt bis heute als Inbegriff der Demokratie^b. Sparta gilt bis heute als Inbegriff des Militärstaates. Bekannt wurde der Krieg durch den Autor Thukydides^c. Sein Werk „Der peloponnesische Krieg“^d gilt heute als vermutlich erstes Werk einer sachlichen Geschichtsschreibung jenseits von Mythen und Göttergeschichten.

Der peloponnesische Krieg zeigt ein Muster, das wir heute auch noch in modernen Kriegen sehen. Während der Winter eine schlechte Zeit für die Kriegsführung war, wurde in der warmen Jahreszeit gekämpft. Wie auch in modernen Kriegen wurde dieser Krieg total geführt. Das heißt, er bezog die gesamte Bevölkerung ein. Die Zerstörung von Ernten und das Fällen von Olivenbäumen entsprachen dabei den heute üblichen – kriegsvölkerrechtlich verbotenen – Zerstörungen ziviler Infrastrukturen und Versorgungsstrukturen.

^aDer peloponnesische Krieg dauerte mit Unterbrechungen von 431 v.Chr. bis 404 v. Chr. und war eine Auseinandersetzung zwischen dem Attischen Bund und dem Peloponnesischen Bund.

^bDas Wort Demokratie bedeutet wörtlich übersetzt „Volksherrschaft“. Bis heute ist jedoch umstritten, was eine Demokratie auszeichnet. Während einige Denkschulen das Prinzip der Mehrheitsentscheidung in den Mittelpunkt stellen verweisen andere darauf, dass Demokratie ihre Grundlage vor allem in verbindlichen Regeln (später Verfassungen) hat, die auch durch Mehrheit nicht oder nur in Ausnahmefällen geändert werden können. Unbeantwortet bleibt dabei die Frage ob die Abschaffung der Demokratie durch eine qualifizierte Mehrheit ihrer Bewohner ein demokratischer Akt wäre und die daraus sich ergebende Regierungsform noch immer eine Demokratie wäre, weil eine qualifizierte Mehrheit der Menschen, den Wunsch nach dieser neuen Regierungsform geäußert hat.

^cThukydides lebte zwischen etwa 454 v.Chr. und 399 v. Chr. wobei genaue Daten über seine Geburt und seinen Tod wohl nicht bekannt sind. Thukydides gilt allgemein auch als Stammvater einer nüchternen und sachlichen Geschichtsschreibung.

^dDas Werk blieb unvollendet. Aus irgendeinem Grund brach die Aufzeichnung mitten im Satz ab. Heute wird das Werk noch immer in der militärischen Ausbildung gelesen und als ein wesentlicher Beitrag zum Verständnis des Krieges an sich angesehen.

Ferienakademie

2023

17.9. – 29.9.2023

Samtal (Südtirol)

Programm

Kurs	Thema	Dozent*innen	Fachrichtungen und Partnerstellen
1	Medizin, Neurobiologie und Kognition	G. Roth, T. Schwaninger, V. Dierker, Stuttgart	Neurobiologie, Psychologie (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
2	Infektionskrankheiten und Cyberphysikalische Systeme	R. Winkler, Erlangen (GD), S. Krawinkel, München (GD), M. Bauer, Gießen (GD), M. Bauer, Gießen (GD)	Medizinische Fakultät, Physik, Informatikwissenschaften (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
3	Neural Network Compression	R. Müller, Erlangen (GD), A. Kapp, Erlangen (GD)	Informatikwissenschaften, Elektrotechnik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
4	Stochastische Erfindungen und Simulationen	G. Roth, T. Schwaninger, H.-J. Bange, München (GD), M. Schulte, Stuttgart	Mathematik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
5	Let's Play Simulated Physics for Robots	M. Schulte, Stuttgart	Informatikwissenschaften, Elektrotechnik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
6	Climate, Energy, and Sustainability	M. Schulte, Stuttgart	Informatikwissenschaften, Elektrotechnik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
7	Quantenmechanik: Von Born und Heisenberg zu Schrödinger	J. Schulte, Erlangen (GD), R. Nage, Erlangen (GD)	Physik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
8	Distributed Acoustic Signal Processing: A New Energy in the Field	R. Müller, Erlangen (GD), E. Schulte, Stuttgart	Physik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
9	Simulation for the Energy Transition	U. Roth, T. Schwaninger, C. Hees, Erlangen	Informatikwissenschaften, Elektrotechnik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)
10	Computational Medical Imaging	J. Schulte, Erlangen (GD), R. Nage, Erlangen (GD)	Physik (StuSt 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100)

Bewerbungsschluss 1. Mai 2023

Organisationskomitee:
J. Schulte, Erlangen (GD), R. Nage, Erlangen (GD), M. Winkler, München (GD), J. Peter, Jena (GD)

Technische Universität München
www.ferienakademie.de

Abbildung 1: Das Poster der Ferienakademie 2023.

Ferienakademie 2023

FERIENAKADEMIE

Im Herbst 2023 wird zum 39.ten Mal die Ferienakademie¹ im Samtal (Südtirol) stattfinden, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird.

In diesem Jahr wird es insgesamt zehn Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen geben:

1. Moderne Algorithmik und Komplexität
2. Self-organizing Industrial Cyberphysical Systems
3. Neural Network Compression
4. Stochastik Evolution Equations: From Martingales to Applications
5. Let's play! Simulated Physics for Games
6. Climate, Energy, and Sustainability Transitions: Where Politics, Education, Technology, and Society Meet
7. Quantentechnologien: Von Tunnelbauelementen zu verschränkten (Halbleiter-)Qubits
8. Distributed Acoustic Signal Processing - From Theory to Practice
9. Simulation for the Energy Transition
10. Computational Medical Imaging

Details zu den Kursen sind unter <https://ferienakademie.de/kurse-2023/> sowie unter <https://youtu.be/hDzz30KTRMM> zu finden.

Tobias Neckel

¹www.ferienakademie.de

Als Wendepunkt im peloponnesischen Krieg gilt der Sizilien-Feldzug^a Athens. Nachdem 421 v. Chr. im Nikias^b – Frieden^c eine – wenn auch prekäre – Übereinkunft gefunden worden war, schwelte der Konflikt weiter. Die Gegner des Friedens in Athen sahen 416 v.Chr. eine Chance, den Krieg wiederaufzunehmen. Die sizilische Stadt Segesta hatte um Beistand gegen Syrakus gebeten. In einer von Thukydides beschriebenen stürmischen Volksversammlung wurde ein militärischer Feldzug beschlossen, der schließlich in einer Katastrophe endete und die Niederlage Athens im peloponnesischen Krieg auslöste.

Die Niederlage Athens im peloponnesischen Krieg wirkte rund 25 Jahre nach bis Athen mit der Errichtung des zweiten attischen Bundes zu aller Stärke zurückkehrte. Sparta unterlag rund 30 Jahre nach dem Ende des Krieges seinerseits dem lachenden Dritten Theben und büßte damit ebenfalls seine Vormachtstellung ein. So hinterließ der peloponnesische Krieg nur Verlierer.

M. Resch

^aDie sizilische Expedition begann im Sommer 415 v. Chr. Nach anfänglichen Erfolgen musste sich das athenische Expeditionsheer 413 v.Chr. geschlagen geben wobei 7000 Gefangene später als Sklaven verkauft wurden oder in den Bergwerken Siziliens starben.

^bDer athenische Politiker und Heerführer Nikias wurde 413 v.Chr. in Syrakus hingerichtet. Er war gegen eine Expedition nach Sizilien und wurde dennoch vom Volk zu einem der drei Heerführer für diese Expedition gewählt.

^cDer 421 v. Chr. geschlossene Nikias-Frieden sah einen Rückzug der Spartaner und Athener aus besetzten Gebieten vor. Die Bedingungen des Friedens wurden von Anfang an nicht eingehalten. Auf beiden Seiten wurden dadurch die Gegner des Friedens gestärkt.

Aktuelle Forschung in der Quantum Computing Gruppe

In einem vorherigen Beitrag (siehe Quartl 1/2022, 101. Ausgabe) habe ich einen Überblick über die Munich Quantum Valley (MQV) - Initiative gegeben, und möchte jetzt beschreiben, wie sich die Forschungsanstrengungen in unserer Quantum Computing Gruppe und das Feld allgemein weiterentwickelt haben.

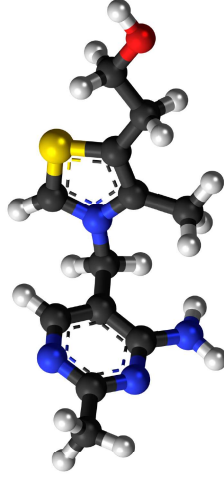


Abbildung 1: Chemische Struktur von Thiamin (Vitamin B₁). Quelle: Wikipedia (public domain)

Nach wie vor stellt sich die Frage, was genau Quantencomputer denn in Zukunft ermöglichen könnten bzw. welche Einsatzfelder vielversprechend sind. Spätestens mit dem „quantum supremacy“ paper von Google / Forschungsgruppe von John Martinis [1] ist ein gewisser Hype um das Thema entstanden, was denke ich leider auch überzogene Erwartungen geweckt hat. Es ist klar, dass Quantencomputer die klassischen Rechner nicht ersetzen werden, schon allein aufgrund des viel größeren experimentellen Aufwands – man wird ja keinen Kühlschrank auf seinem Schreibtisch stehen haben. Eine genauere Analyse findet sich z.B. in einem Vortrag von Matthias Troyer [2], in dem er argumentativ den (in der Praxis sinnvollen) Einsatzbereich von Quantencomputern sehr stark einschränkt, und vor allem „Big Data“-Anwendungen ausschließt. Ein oft übersehener Aspekt ist auch die „Taktfrequenz“: anschaulich ist die Geschwindigkeit, mit der Quantengatter angewendet werden

Eine internationale Jury bewertete die qualitativ sehr hochwertigen Paper und Vorträge direkt im Anschluss. Die Jury setzte sich aus folgenden Wissenschaftler*innen zusammen: Hartwig Anzt (University of Tennessee Knoxville), Esmond Ng (Lawrence Berkeley National Laboratories, USA), Carol Woodward (Lawrence Livermore National Laboratories, USA), Matthias Bolten (Uni Wuppertal) und Hans-Joachim Bungartz (TUM).

Die Jury war sich dieses Mal sehr schnell einig: Shane A. McQuarries Beitrag deckte sehr schön verschiedene Facetten von CSE ab: Von der Methodik der Operatorinferenz für partielle Differentialgleichungen (PDE) über die numerischen Aspekte und die Implementierung mittels der impliziten Runge-Kutta Radau Methode fünfter Ordnung bis hin zur Anwendung auf das FitzHugh-Nagumo Modells eines Neurons.

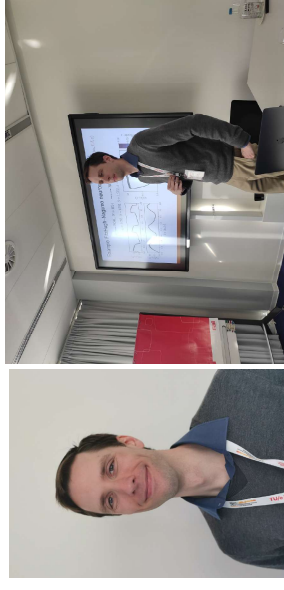


Abbildung 2: Der diesjährige Preisträger Shane A. McQuarrie links im Portrait (© Hayden Liu Weng) und rechts während seines Vortrags zur Operatorinferenz am Beispiel des FitzHugh-Nagumo Modells eines Neurons (© Severin Reiz).

Wir danken allen Finalist*innen sowie der Jury, gratulieren dem Sieger nochmals sehr herzlich und freuen uns schon jetzt auf interessante Diskussionen und intensiven Austausch bei seinem Besuch in Bayern im Sommer.

Tobias Neckel, Severin Reiz

- Piyush Panchal (ETH Zürich): Electrostatic Force Computation using the Boundary Element Method
- Matteo Ferrari (Department of Science & Mathematics, Politecnico di Torino): The Johnson-Nédélec coupling for exterior problems: developments on the stability and a virtual elements approach
- Maria Luisa Taccari (University of Leeds): Machine Learning for Fast and Reliable Groundwater Surrogate Models
- Shane A. McQuarrie (The University of Texas at Austin): Operator Inference for Affine-parametric Systems of Partial Differential Equations



Abbildung 1: BGCE Award Finalist*innen mit Hans-Joachim Bungartz: Matteo Ferrari, Piyush Panchal, Hans-Joachim Bungartz, Shane McQuarrie, Elena Zappon, Gaurav Arya, Theresa Pollinger, Maria Luisa Taccari (v.l.n.r.). © Severin Reiz

können, um Größenordnungen langsamer als die Taktfrequenz klassischer Rechner, so dass Quantencomputer dies mit einem qualitativ anderen Skalierungsverhalten ausgleichen müssen. Matthias Troyer identifiziert stattdessen „Quantensimulation“ als ein vielversprechendes Anwendungsfeld (wie schon in den 80er Jahren unter anderem von Richard Feynman vorgeschlagen), d.h. die Simulation eines (stark korrelierten) Ziel-Quantensystems aus der Festkörperphysik oder Chemie mittels eines Quantencomputers. In unserer Gruppe arbeiten Martina (Nibbi), Shuo (Sun), Yu (Wang) und Irene (López Gutiérrez) in dieser Richtung, mehr Details unten. Trotzdem bleibt abzuwarten, ob Quantencomputer auf diesem Feld irgendwann klassische Rechner überholen können, siehe z.B. [3].

Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die speziellen Forschungsthemen in unserer Gruppe.

Quantenalgorithmen-Entwicklung für die Quantensimulation

Wie oben beschrieben zählt die Quantensimulation zu den vielversprechendsten Einsatzgebieten zukünftiger Quantencomputer. In dieser Richtung verfolgen wir drei Ansätze:

- Algorithmen basierend auf „quantum signal processing“ bzw. der „quantum singular value transformation“ (QSVT), siehe den Übersichtsartikel [4]: mittel QSVT kann man eine Transformation der Singulärwerte bzw. Eigenwerte einer Matrix durchführen. Dies ermöglicht unter anderem „spectral filtering“, also die Abbildung eines Ausschnitts des Spektrums auf 1 und des komplementären Ausschnitts auf 0, so dass sich eine Projektion auf einen Eigenraum realisieren lässt. Damit wiederum kann man prinzipiell den Grundzustand eines Quanten-Hamiltonian-Operators bestimmen. Zusammen mit Martina überlegen wir, wie sich das Block-Encoding, ein Baustein von QSVT, in der Praxis auf einem Quantencomputer gut umsetzen lassen könnte.
- „Density matrix embedding theory“ (DMET) mit Anwendung auf Materialien in Batterien: embedding frameworks wie DMET oder die

„dynamische Mittelfeldtheorie“ (DMFT) ermöglichen eine akkurate Simulation eines größeren Systems (bestehend z.B. aus vielen, mehreren hundert Atomen), obwohl eine volle quantenmechanische Berechnung für das Gesamtsystem nicht möglich ist. Die allgemeine Idee besteht darin, das System in einen Quantenbereich und ein umgebendes „Bad“ zu unterteilen. Der Quantenteil könnte dann von einem Quantencomputer gelöst werden und das umgebende Bad von einem klassischen HPC-System. Zielsysteme für Shuo’s Doktorarbeit sind Moleküle und Materialien, die für Li-Ionen Batterien eine wichtige Rolle spielen.

- Quantendynamik mittels optimierter Quantenschaltkreise: wir verwenden einen brickwall-layout Ansatz und optimieren die Gatter mittels des „Riemannian trust-region“-Algorithmus auf unitären Matrix-Mannigfaltigkeiten, siehe den entsprechenden aktuellen Preprint [5] und Abb. 2. Das Projekt liegt an der Schnittstelle von Quantenalgorithmen und Tensornetzwerkmethoden, die unten nochmal separat beschrieben werden.

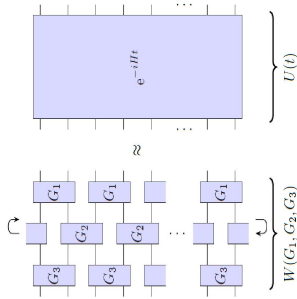


Abbildung 2: Approximation des unitären quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperators durch einen Quantenschaltkreis, siehe [5] und <https://github.com/qc-tum/rqcopt>. Die Gatter werden auf einem klassischen Rechner mittels Riemannian trust-region-Methoden optimiert.

9. BGCE Student Paper Preis bei der SIAM CS&E 2023



Der 9. BGCE Student Paper Preis für hervorragende studentische Arbeiten im Bereich des Computational Science and Engineering wurde auf der SIAM CS&E Konferenz 2023 verliehen, die vom 26. Februar bis 3. März 2023 in Amsterdam stattfand.

Der Preis wird von der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) vergeben, und die Gewinnerin bzw. der Gewinner besucht eine Woche lang kostenlos Bayern, die FAU und die TUM und ist in intensivem Austausch mit Studierenden und anderen Mitgliedern der BGCE. Das Hauptziel des Preises ist es, exzellente Studierende im Bereich CS&E zu fördern und internationalen Austausch in einer frühen Karrierephase zu unterstützen. Für den BGCE Student Paper Preis können sich Masterstudierende und Doktorand*innen mit einem kurzen Paper von maximal vier Seiten bewerben. Aus den Einreichungen werden dann von einem BGCE-Gremium die Finalist*innen bestimmt. Die ausgewählten sieben Preis-Finalist*innen für 2023 stellten ihre Arbeit in den zwei speziellen CS&E Student Paper Prize Minisymposien MS 78 und MS 115 auf der SIAM CS&E 2023 vor:

- Elena Zappone (Department of Mathematics, Politecnico di Milano): Efficient Reduced Order Modeling for Coupled Problems in Cardiac Electrophysiology
- Gaurav Arya (MIT): Automatic Differentiation of Programs with Discrete Randomness
- Theresa Pollinger (Institut für parallele und verteilte Systeme, Universität Stuttgart): A Mass-conserving Sparse Grid Combination Technique with Biorthogonal Hierarchical Basis Functions for Kinetic Simulations

Nach dem Kolloquium konnten sich die Gäste zum Abendessen reichlich am Buffet in der Magistrale bedienen und Speiß und Trank bei lockerer Unterhaltung genießen. Auch als das Catering-Team das Geschirr bereits weggeräumt hatte, waren noch einige Tische bis spät in die Nacht besetzt. Auch an dieser Stelle im Quartl wünschen wir dem Editor dieses Magazins viele weitere gesunde Lebensjahre und gelungene Editorials!

Daniel Lehmborg

Zur Umsetzung und Demonstration der Algorithmen arbeiten wir parallel an einer Python-Toolbox namens *qib* (<https://github.com/qc-tum/qib>). Diese erfüllt eine ähnliche Funktion wie z.B. Qiskit oder Cirq, also vor allem die Repräsentation und Manipulation von Quantenschaltkreisen. Eine Besonderheit ist die Unterstützung von High-Level-Bausteinen, etwa den unitären Zeitentwicklungsoperator eines gegebenen Hamiltonians als Quantengatter. Die Toolbox transformiert (oder „transpiliert“) dann einen solchen High-Level-Quantenschaltkreis auf eine Ziel-Hardware-Plattform, indem sie elementare Gatter verwendet, die von der Hardware unterstützt werden. Auf diese Weise kann der Benutzer Quantenalgorithmen, wie z.B. QSVT oder „quantum phase estimation“ unkompliziert und direkt einsetzen, was unter anderem „rapid prototyping“ ermöglicht. Durch die High-Level-Perspektive ergeben sich zudem zusätzliche Optimierungsmöglichkeiten. Die Arbeit an *qib* ist ein laufendes Projekt, und die Transpilation muss noch implementiert werden; die Toolbox unterstützt z.B. schon die Simulation eines Schaltkreises.

Tensornetzwerkmethoden

Tensornetzwerkmethoden entwickelten sich in der Physik aus dem DMRG-Algorithmus, und sind weiterhin ein „work horse“ in der theoretischen Festkörperphysik zur (klassischen) Simulation und mathematischen Analyse stark korrelierter Quantensysteme. Inzwischen haben Tensornetzwerke einen größeren Bekanntheitsgrad erreicht, unter anderem auch weil die elementaren Operationen, die Machine Learning zugrundeliegen, als Tensoroperationen interpretiert werden können (etwa der Conv-Kernel). *TensorFlow* hat ja sogar „Tensor“ im Namen.

In unserer Gruppe beschäftigt sich Richard (Milbradt) mit der Theorie und Algorithmen von Tensornetzwerken; aus seiner Masterarbeit ist eine Veröffentlichung zu einem lösbaren „quantum lattice model“ entstanden, das spezielle „ternary unitary gates“ verwendet, siehe [6] und Abb. 3. Philipp (Seitz) hat, ebenfalls initiiert in seiner Masterarbeit, sogenannte „tree tensor networks“ zur Quantenschaltkreis-Simulation untersucht [7]. Wir legen weiterhin einen starken Fokus auf tree tensor networks, um z.B. Quanten-

hardware oder Moleküle zu simulieren.

Um Tensornetzwerke zukünftig auch auf high performance computing (HPC) Systemen effizient einsetzen zu können, arbeiten Manuel (Geiger) und Keefe (Huang) an einer Rust Implementierung zur Repräsentation und Kontrahierung solcher Netzwerke. Diese Arbeit ist momentan noch im Anfangsstadium.

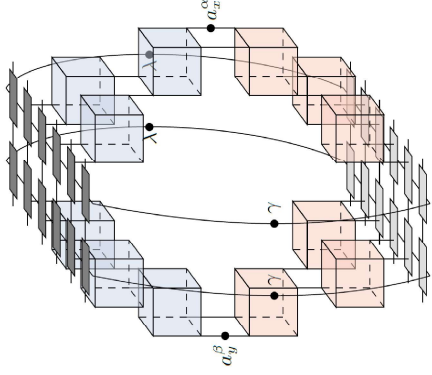


Abbildung 3: Ein „ternary unitary network“ nach vollständigem Heraus Kürzen von Gattern, siehe [6]. Die speziellen ternary unitary gates sind unitär sowohl entlang der Zeit- als auch der beiden räumlichen Richtungen.

Quantum Software Stack

Neben einem eigentlichen Quantencomputer spielen auch unterstützende Software-Frameworks und -bibliotheken bzw. Compiler-Toolchains eine wichtige Rolle, vor allem, um Quantencomputer in ein klassisches Programm als Accelerator einzubinden. Ein naheliegendes Anwendungsszenario sind die oben beschriebenen „embedding frameworks“ wie DMET. In dieser Richtung hat sich ein intensiver Austausch mit der Arbeitsgruppe von Prof. Martin Schulz und dem LRZ zum Thema HPC-Integration, und mit der Gruppe von Prof. Helmut Seidl zum Thema Compiler-Toolchains und Programmierung für Quantencomputer ergeben. Konkret arbeitet Philipp (Seitz) an

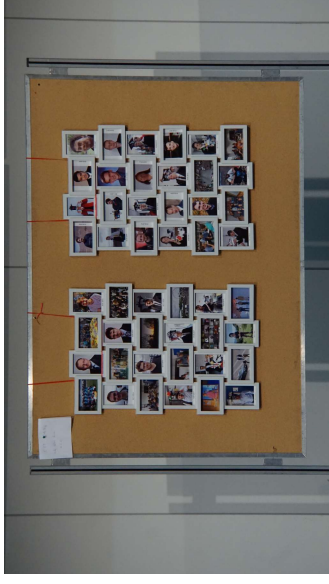


Abbildung 3: Die „Ahnengalerie“ des Lehrstuhls für wissenschaftliches Rechnen (© Hayden Liu Weng)

Das letzte Wort des Kolloquiums gebührte Hans-Joachim selbst. Einen „Schock“ des Älterwerdens hatte er glücklicherweise an diesem Abend nicht (Dieser kam bereits auf einer USA Reise, als ihm in einem Lokal ein Seniorenrabatt angeboten wurde).

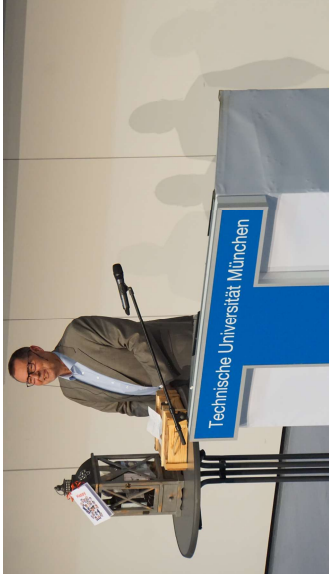


Abbildung 4: Schlussworte zum Festkolloquium (© Hayden Liu Weng)

dem langen Werdegang von Hans-Joachim Bungartz heraus, gespickt mit erheiternden und persönlichen Anekdoten.

Es folgten die wissenschaftlichen Vorträge des Kolloquiums. Wolfgang Nagel (TU Dresden) begann mit einem Überblick über die IT Infrastruktur an den deutschen Universitäten. Als nächstes kamen Präsentationen drei ehemaliger Doktoranden Tobias Weinzierl (Durham University), Dirk Pflüger (Universität Stuttgart) und Philipp Neumann (Universität der Bundeswehr Hamburg). Jeder gab Einblicke in die jeweiligen aktuellen Forschungstätigkeiten, von Algorithmen auf Supercomputern über Sparse Grids zu Molekülsimulationen. Im Gemeinsamen haben sie ihren Ursprung am Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen. Natürlich wurde auch hier mit Anekdoten und Bildern zur gemeinsamen Zeit mit Hans-Joachim Bungartz nicht gespart. Weitere Geburtstagsglückwünsche aus aller Welt wurden per Video von Markus Hegland (Australian National University), George Biros (University of Texas) und Chris Johnson (University of Utah) übersandt. Es sei auch kurz erwähnt, dass zwei Programmpunkte, eine Überraschung von Serapion und Vortrag von Benjamin Pehersdorfer (New York University), leider krankheitsbedingt ausfielen.

Um das Festkolloquium abzurunden gehörte ein letzter Überraschungsteil dem Lehrstuhl. Tobias Neckel überreichte im Namen der aktuellen und ehemaligen Doktorand:innen besonderen Wein, mit dem Hinweis „... abgezapft und originalverkork(s)t...“ und einer Lorient Illustration versehen. Ein Geldgutschein wurde mit möglichen Ideen versehen, wie dieses bei Lücken im Kalender ausgegeben werden kann, etwa einer Reise durch die Schweiz im Glacier Express. Ein weiteres Geschenkhighlight wurde dann an Tafeln hängend in den Hörsaal hereingerollt: Eine „Ahnengalerie“ mit dem Konterfei zahlreicher ehemaliger Doktorand:innen (insgesamt um die 60, also gleichauf mit den Lebensjahren!). Übrigens wurde im Vorfeld viel gerätselt wie man die zahlreichen Bilder denn am Besten anordnen kann. Aspekte der Praxistauglichkeit für noch folgende Bilder, Ästhetik und Stabilität möglicher Konstrukte wurden eingebracht.

Laufzeitumgebungen, und es entsteht ein gemeinsamer Review-Artikel über Software-Frameworks zur HPC-Integration von Quantencomputern. Ein weiterer wichtiger Aspekt ist „Cloud Access“ zu Quantencomputern, der ja z.B. vom LRZ für die dort gehosteten Systeme angeboten werden soll. In unserer Gruppe arbeitet Martin (Knudsen), externer Doktorand beim Walther-Meißner-Institut, an Software-Infrastruktur für einen solchen externen Zugriff.

Quantenalgorithmen zur Lösung klassischer Optimierungsprobleme

Abschließend möchte ich noch die Forschungsrichtung von Lilly (Pallack) und Rudi (Finžgar) erläutern; beide spezialisieren sich auf Quantenalgorithmen zur Lösung klassischer Optimierungsprobleme. Lilly ist externe Doktorandin bei Infineon und untersucht Routenplanung als Anwendungsfall, und Rudi, externer Doktorand bei BMW, arbeitet an hybriden quantenklassischen Varianten des „quantum approximate optimization algorithm“.

Christian Mendl

Literatur

- [1] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, and et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574:505–510, 2019.
- [2] Matthias Troyer. <https://www.youtube.com/watch?v=2MsfbPIKgyI>, 2021.
- [3] Seunghoon Lee, Joonho Lee, Huanchen Zhai, Yu Tong, Alexander M. Dalzell, Ashutosh Kumar, Phillip Helms, Johnnie Gray, Zhi-Hao Cui, Weiyuan Liu, Michael Kastoryano, Ryan Babbush, John Preskill, David R. Reichman, Earl T. Campbell, Edward F. Valeev, Lin Lin, and Garnet Kin-Lic Chan. Is there evidence for exponential quantum advantage in quantum chemistry? *arXiv:2208.02199*, 2022.

- [4] John M. Martyn, Zane M. Rossi, Andrew K. Tan, and Isaac L. Chuang. Grand unification of quantum algorithms. *PRX Quantum*, 2:040203, 2021.
- [5] Ayse Kotil, Rahul Banerjee, Qunsheng Huang, and Christian B. Mendl. Riemannian quantum circuit optimization for Hamiltonian simulation. *arXiv:2212.07556*, 2022.
- [6] Richard Milbradt, Lisa Scheller, Christopher Aßmus, and Christian B. Mendl. Ternary unitary quantum lattice models and circuits in $2 + 1$ dimensions. *arXiv:2206.01499*, 2022.
- [7] Philipp Seitz, Ismael Medina, Esther Cruz, Qunsheng Huang, and Christian B. Mendl. Simulating quantum circuits using tree tensor networks. *arXiv:2206.01000*, 2022.

Als sich die Festgäste schließlich innerhalb des Hörsaals eingefunden haben, eröffnete Miriam Schulte (Universität Stuttgart) das Kolloquium, welches sie munter durch das gesamte Programm moderierte. Gleich zu Beginn wies sie von der offiziellen Agenda zu einem Überraschungspunkt ab. Durch die Seitentür des Hörsaals erschien ein Streich-Ensemble samt Dirigent Alois Rottenaicher vom Akademischen Orchesterverband München. Der Überraschung wegen waren diese zuvor heimlich vom Parkplatz aus durch die Seitengänge des Gebäudes navigiert worden. Als Hommage an den Ehrengast und gleichzeitiges Mitglied des Verbands, spielten sie klassische Variationen von „Happy Birthday“.



Abbildung 2: Akademischer Orchesterverband, München (© Hayden Liu Weng)

Nachdem die Instrumente für's Erste abgelegt wurden, startete das offizielle Programm mit Grußworten und Glückwünschen von Thomas F. Hofmann (TUM Präsident), Alfons Kemper (TUM Head of Computer Science) und Dieter Kranzlmüller (LRZ). Die Redner pickten sich einzelne Aspekte aus

Festkolloquium Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz



Am 10. Februar fand das Festkolloquium zu Ehren des 60. Geburtstages von Hans-Joachim Bungartz statt. Der glückliche Anlass einer runden Zahl bot zudem eine passende Möglichkeit seine herausragenden Leistungen in Wissenschaft und Management zu würdigen.

Um die 160 Festgäste strömten an diesem Tag zum Friedrich Bauer Hörsaal im TUM-MI Gebäude, Garching. Während einige aus unterschiedlichen Teilen Deutschlands oder gar dem Ausland anreisten, war es für TUM Angehörige freilich ein relativ kurzer Weg vom Büro. Die Feierlichkeiten begannen in der Magistrale vor dem Hörsaal wo sich die eintreffenden Gäste zum Sektempfang eingefunden haben. Für einige auch eine Rückkehr an die ehemalige Wirkungsstätte und freudiges Treffen ehemaliger Kolleg:innen.



Abbildung 1: Eröffnung des Festkolloquiums in der Magistrale (© Hayden Liu Weng)

FAU-Team rockt den HPCG-Benchmark bei der Student Cluster Competition 2022 in Dallas



Die jährlich stattfindende Supercomputing Conference (SC) in den USA ist nicht nur der weltweit führende Kongress zu naturwissenschaftlich-technischem Höchstleistungsrechnen, sondern dient unter anderem auch als Plattform für die Student Cluster Competition (SCC), bei der sich Studierendenteams aus der ganzen Welt beim „Leistungstuning“ messen können. Das Team der FAU belegte auf der SC22 in Dallas mit einer Leistung von 1,97 Tflop/s den ersten Platz in der Kategorie High Performance Conjugate Gradient (HPCG) und Platz 2 in der LINPACK-Kategorie.

Nach mehr als einem halben Jahr Vorbereitung, inklusive Spekulierens und Grübelns über mögliche Aufgaben und Regeln und vor allem eifrigen Benchmarkens, trat das sechsköpfige Bachelorstudierenden-Team FRAUG („FRiendly Amphibian Undergraduates“) der Studiengänge Informatik und Computational Engineering im November 2022 zur SCC an.

Bei dem Wettbewerb haben die Studierenden die Aufgabe, eine Auswahl an Hochleistungsrechenanwendungen so schnell wie möglich unter strengen Bedingungen auszuführen – unter anderem darf die verwendete Hardware in der Spitze nicht mehr als 3kW Strom verbrauchen. Neben Anwendungsprogrammen aus der Strömungsmechanik wie PHASTA (Fluidodynamik) oder LAMPPS (Molekulardynamik) kamen auch klassische Programme zur Leistungsmessung von Supercomputern wie LINPACK, HPCG und IO500 zum Einsatz. Als Wettbewerbshardware wurde eine baugleiche „Kopie“ eines Knotens aus dem NHR@FAU-System „Alex“ gewählt, der 128 AMD-CPU-Kerne vom Zen3 und acht NVIDIA A100-GPUs umfasst. Der Hersteller MEGWARE sorgte für die rechtzeitige Lieferung. Schließlich hatten sich die Studierenden entsprechend ihrer Team-Bezeichnung auch beim Rechnernamen mit „tadpole“, also einer Kaulquappe, auf ein amphibisches Thema eingeschossen.

Kaum in Dallas angekommen, konnten sich die Erlanger zusammen mit neun anderen Teams aus USA, Schweiz, Singapur und Taiwan dank Jetlag und 24stündigem Zugangsprivileg zur Ausstellungshalle der SC22 ihren „Cluster“ einrichten und letzte Tests durchführen. Bereits am nächsten Tag startete die Benchmarkphase, bei der, unter Beachtung des Powerlimits von 3kW, ein höchstmöglicher LINPACK-, HPCG- und IO500-Lauf durchzuführen war. Da ein Überschreiten des Powerlimits den Lauf ungültig gemacht hätte (die mitgebrachte Hardware wäre dazu spielend in der Lage gewesen), war diese erste Aufgabe vor allem eine Übung in Energieeffizienznutzung und „Kuscheln mit dem Powerlimit“.

Ein vorangegangenes nächtliches Tuning des Systems (ohne Lüfter, um Strom zu sparen) zahlte sich aus, denn der HPCG-Benchmark des FRAUG-Teams erreichte den höchsten Score aller Teams und auch der LINPACK-Benchmarktest fiel so gut aus, dass es für eine sehr hohe Green500-Platzierung gereicht hätte; nur ein Team mit energieeffizienteren MI250 GPUs von AMD war besser.

Äußerst zeit- und arbeitsintensiv war hingegen die mit vielfältigen Herausforderungen bestückte Applikationsphase. So kompilierte die erst am Tag der Umsetzung bekannt gegebene „mystery application“ SeisSol (Erdbebensimulation) bis zum Ende des Wettbewerbs nicht ohne Fehler und auch für die Applikation PHASTA reichten 20 Minuten nicht aus, um stante pede die Grundlagen der numerischen Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, kurz CFD) zu lernen, sodass für manche Datasets dann einfach die Zeit fehlte.

„Die Kunst beim Modellieren ist, die Spreu vom Weizen zu trennen“



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Herzlichen Glückwunsch zum Geburtstag: Hans-Joachim Bungartz, promovierter Mathematiker und Informatiker, Inhaber des Lehrstuhls für wissenschaftliches Rechnen an der TUM School of Computation, Information and Technology (CIT) und einer der Direktoren des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ), ist gerade 60 geworden. Ein guter Anlass, sich mit dem Spezialisten für Codes und Gleichungen über Simulationen und Entwicklungen in der Numerik zu unterhalten. Warum Künstliche Intelligenz und Datenwissenschaft seinem Fach mehr Aufmerksamkeit verschaffen und wieso Mathematik jetzt auch menschelt, das erklärt Bungartz locker, verständlich und hintergründig im Interview. Das ganze Interview findet sich hier: <https://www.lrz.de/presse/ereignisse/2023-02-22-Simulation-HJBungartz/>

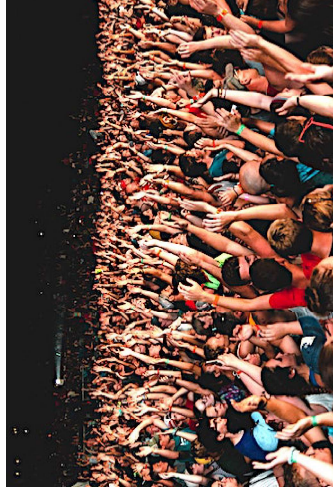
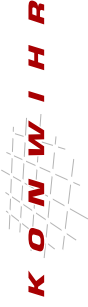


Abbildung 1: Das Verhalten von Menschen in Mengen simulieren: In der Mathematik und Numerik menschelt es neuerdings. Prof. Hans-Joachim Bungartz erklärt die Gründe. Foto: A. Bracken/Unsplash

Susanne Wieser

KONWIHR: KONWIHR: Apply now!



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria accepts applications for “normal” (up to 12 months, 50 000 €) and “small” (up to 3 months, 10 000 €) projects, as well as “basis” projects to establish contact points.

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 centers as well as efficient transfer and fast application of the results are important. Find already funded projects at

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

Read more on [konwihr.de](https://www.konwihr.de) and join the [konwihr](https://www.konwihr.de)-announcements mailing list.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihr.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.konwihr.de/how-to-apply/>

Katrin Nusser, Gerasimos Chourdakis

Alles in allem konnte am Ende zwar nicht der Gesamtsieg ergattert werden (diesen Erfolg verbuchte das Team der National Tsing Hua University aus Taiwan für sich); dennoch flog das FRAUG-Team mit vielen interessanten Erlebnissen, Einblicken in den HPC-Alltag, diversen Praktika- und Jobangeboten und einem bei einer Verlosung gewonnenen riesigen „Millennium Falcon Lego Set“ nach Hause.



Abbildung 1: Studierenden des FRAUG-Teams der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg gemeinsam mit den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Firma MEGWARE Computer Vertrieb und Service GmbH

Dominik Ernst

KONWIHR-Projektabschluss „PEigFEx“



Im Herbst 2022 konnte das KONWIHR-Projekt „PEigFEx“ (Hochparallele Berechnung vieler innerer und eng benachbarter Eigenwerte fermionischer und hochangeregter exzitonischer Systeme) zum Abschluss gebracht werden.

Das Projekt hatte zum Ziel, die Berechnung vieler innerer und eng benachbarter Eigenwerte fermionischer und hoch angeregter exzitonischer Systeme auf Hochleistungsrechnern zu beschleunigen. Dazu wurde eine optimierte Implementierung der Chebyshev-Filterdiagonalisierung (ChebFD) mit zweistufiger Parallelisierung basierend auf der im DFG-Projekt ESSEX entwickelten GHOST-Bibliothek [1] entwickelt. Diese Implementierung erlaubt eine flexible Steuerung der Verteilung von Suchraumvektoren auf die einzelnen Rechenknoten, was eine Balancierung des Kommunikationsaufwandes in der Matrix-Vektor-Multiplikation (d.h. der Anwendung des Polynomfilters) gegen den Kommunikationsaufwand im folgenden Orthogonalisierungsschritt erlaubt. Angesichts der hohen Speicherausstattung moderner Clusterknoten ist der in manchen Konfigurationen erforderliche erhöhte Speicherbedarf dabei zu verschmerzen, insbesondere wenn eine matrixfreie Formulierung möglich ist.

Bei der Beurteilung der erreichten Rechenleistung hat sich ein Performancemodell als hilfreich erwiesen, das, basierend auf den Eigenschaften der Hamilton-Matrix, die Rechen- und Kommunikationszeiten vorhersagen und so die erwartete Beschleunigung validieren konnte. Die beiden Ebenen der Parallelität, in denen der erforderliche Kommunikationsaufwand – je nach Verteilung der Suchraumvektoren – erheblich variiert, wurden dabei berücksichtigt. Der entstandene Code ist hybrid-parallel, d.h., er kombiniert MPI-Parallelisierung mit OpenMP-Threadparallelität.

Die Beschleunigung, die sich durch optimiertes Layout der Suchraumvektoren ergibt, hängt selbstverständlich entscheidend von der Struktur der Matrix, der Systemarchitektur und der Zahl der verwendeten Rechenknoten ab. Zum Benchmarking wurden sowohl Matrizen für exzitonische Systeme (die eher wohlverhalten sind, was den Kommunikationsaufwand angeht) als auch für Hubbard-Systeme verwendet (die erheblichen höheren Kommunikationsaufwand erfordern). Die Matrizen wurden mit Hilfe der ebenfalls in ESSEX entwickelten ScaMaC-Bibliothek [2] erzeugt. Je nach Situation konnten auf bis zu 64 Knoten des „Meggie“-Clusters am NHR@FAU Beschleunigungen von $2 \times$ bis $5 \times$ erzielt werden.

Die Ergebnisse der Arbeiten wurden als Paper beim Journal „ACM Transactions on Parallel Computing“ (TOPC) eingereicht und befinden sich aktuell in der Begutachtung [3]. Die Implementierung ist frei verfügbar [4], zusammen mit einem Werkzeug, das den erforderlichen Kommunikations-Overhead direkt aus der Struktur der Hamilton-Matrix berechnet.

1. <https://bitbucket.org/essex/ghost/src/devel/>
2. <https://bitbucket.org/essex/matrixcollection/>
3. A. Alvermann, G. Hager, and H. Fehske: Orthogonal layers of parallelism in large-scale eigenvalue computations. Submitted. Preprint: arXiv:2209.01974
4. <https://www.bitbucket.org/alvbit/twolayerfd>

Andreas Alvermann & Georg Hager