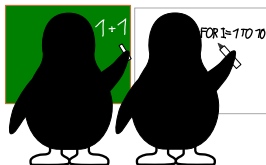


## Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	5
Aktiv oder inaktiv: ein Proton macht den Unterschied	7
Erweiterte Navier-Stokes-Gleichung	10
Das NHR@FAU bei der Supercomputing Konferenz SC23 in Denver	13
Neuer Supercomputer für mehr Methoden	16
Wie KI klassisches Simulieren bereichert	19
Visit of Shane McQuarrie, winner of the 9th BGCE Student Paper Prize	20
Professur „Physics-enhanced Machine Learning“	23
KONWIHR: New projects	25
KONWIHR: Apply now!	27
Ferienakademie 2024 & Bewerbung	28
Notiz*Notiz*Notiz	31

Das Quartl erhalten Sie online unter <https://www.cs.cit.tum.de/scs/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

Da sind wir wieder, liebe Leserinnen und Leser, zurück in der Quartl-Normalität – mit der ersten Ausgabe im Jahr 2024. Und passend hierzu wollen wir uns zunächst mit einer Episode des Jahreswechsels befassen.

Bekanntlich ist hierzulande ja nach wie vor Energiesparen angesagt. Zwar war die Stimmung nicht mehr ganz so dramatisch wie noch vor einem Jahr, als die vermeintlich zum Erliegen kommenden Gasströme bis dato unerhörte Vorschläge wie „kürzer duschen“, „stoßlüften“, „absenken der Raumtemperatur“ oder gar „Verzicht auf die Weihnachtsbeleuchtung“ (Clark Griswold würde die Welt nicht mehr verstehen) hervorbrachten. Und das Preisniveau hat sich ja auch längst wieder beruhigt (was verstehen mag, wer will – von einem Ende der diversen Krisen kann ja nun wirklich keine Rede sein). Aber dennoch galt auch zu Beginn dieses Winters vielerorts die Devise „Vorsicht ist die Mutter der Porzellanpaste“. Und so entschloss sich die Leitung der Universität Stuttgart, über den Jahreswechsel die großen Hörsäle vier Wochen lang dichtzumachen und die Heizung dort runterzufahren. Nicht ganz an den absoluten Nullpunkt, aber so grob in die Nähe schon – um ganz doll Kohle aka Energie oder Geld zu sparen. Warum gerade zu dieser Zeit? Nun, zwar rennt das Volk gerade zwar in Scharen aus den Kirchen weg – im übertragenen wie im ganz konkreten Sinne. Aber Weihnachten ist schließlich auch dem modernen deutschen Atheistenvolk quasi heilig. Somit verlängert man die zwei Wochen vorlesungsfreie Tote-Hosen-Zeit eben schnell auf vier Wochen, und schon lassen sich doch glatt 7 abgeschaltete Kernkraftwerke einsparen. Oder so ähnlich – so lautete zumindest der Plan. Der Begriff der „Schließwoche“ war geboren und ergänzte das schwäbische Wortportfolio der Kategorie „alles außer hochdeutsch“, in dem bisher das Kultwort der Kehrwoche unangefochtener Platzhirsch war.

So weit, so gut. Für das Folgende gilt nun der bekannte Spruch „Uni könnte so schön sein, wenn es nur die Studierenden nicht gäbe“. Denn die standen dem Unterfangen von Anfang an sehr kritisch gegenüber. Hoppla, in Stuttgart

scheinen die Studis ja tatsächlich noch an die Uni kommen zu wollen. Andernorts macht man da dieser Tage eher andere Erfahrungen. Also schickte die Studierendenvertretung sich an, die Sache bzw. den Erfolg der Umsetzung etwas genauer unter die Lupe zu nehmen. Flugs brachten sie in fünf der 57 zentral betriebenen Hörsäle Temperatursensoren an und sammelten fleißig Daten; wie man das heute eben so macht. Die Stuttgarter Zeitung wusste nun zu berichten, dass in drei Hörsälen Temperaturen zwischen 11 und 13 Grad Celsius (plus ...) gemessen wurden, in zwei anderen dagegen saftige 21 bzw. 24 Grad. Da fragen sich die Studis (und nicht nur die) dann natürlich schon, warum sie in ihren Wohnungen Online-Vorlesungen verfolgen und dort heizen müssen, wenn die Uni gar nicht auf Eispalast macht.

Die Unileitung, vertreten durch den Sprecher der Universität, reagiert, wie man heute halt bei so was reagiert. Man dankt allen, findet alles Vorgebrachte ungemein wichtig und richtig, sagt, dass man sich bei der Maßnahme ja nur auf die zentral betriebenen Hörsäle beschränkt habe, verweist auf die noch laufenden Vorgänge und verspricht nach Abschluss eine umfassende Analyse. Dass, zumindest nach Kenntnis der Redaktion, die beiden wohl temperierten Hörsäle freilich beide in die Kategorie „zentral betrieben“ fallen, wird da zur Nebensache.

Ein ganz anderes Thema ist der Sanierungsstau der deutschen Universitäten, der momentan ja auch in den Medien beklagt wird. Wir wollen jetzt nicht in Schuldzuweisungen verfallen, aber etwas schräg ist es ja schon, wenn Landesministerien, die erforderliche Sanierungen oder Erneuerungen über Jahre zurückgestellt haben, jetzt den Unis knackige Vorgaben zum Energiesparen machen. Und das gilt keinesfalls nur für The Länd.

Ach ja, auch bei uns gab es Skurriles. Z.B. wollte der Kollege Bader – wohl mal wieder auf dem Retro-Trip – Kreide ... bunte auch noch. Erste Nachfragen dazu ergaben „weiße Kreide gibt's an der Pforte, bunte nur für die Mathematik“. Was ist denn das für eine Logik? In diesem Kontext betonte dann ein Mathe-Kollege nicht ganz ohne Stolz, dass er inzwischen komplett kreidefrei unterwegs sei. Ein paar Telefonate folgten, und schon gab es Kreide auch für uns; wahlweise sogar in dreieckiger Form. Dass wir

als Tensorprodukt-Überzeugte einen derartigen Form-Fehltritt selbstredend umgehend und schroff zurückwiesen, versteht sich von selbst. Allerdings gab es eine Mindestabnahmemenge, sodass wir jetzt, grob geschätzt, bis etwa 2039 mit bunter Kreide ausgestattet sein dürften. Ein Schelm, wer sich da an die Senfbestellung des frisch pensionierten Herrn Lohse in „Pappa ante portas“ erinnert fühlt.

Doch nun wünscht Ihnen die gesamte Quartl-Redaktion Frohe Ostern und ein schönes Frühjahr, und zunächst natürlich viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

## Iterationsschleife

N=49

09.03.2024

Am Anfang war das Wort <sup>a</sup>. Das Wort also am Anfang und es war der Anfang von allem. Mit dem Wort können Dinge und Sachverhalte benannt werden. Mit dem Wort können Gefühle ausgedrückt und Rechnungen geschrieben werden. Das Wort ist für drei Religionen die Grundlage des Glaubens. Das Wort scheint also mächtig zu sein - mächtig als Werkzeug aber auch mächtig als Waffe. Der italienische Philosoph Antonio Gramsci <sup>b</sup> sah im Wort die Waffe, erkannte die Wirkung des Wortes auf unser Denken und prägte den Begriff der Hegemonie des Denkens. Demnach hat das Wort auch die Macht, das Denken zu verändern und so bestimmten Ideen zur Hegemonie im Diskurs einer Gesellschaft zu verhelfen <sup>c</sup>. Die Macht des Wortes fasziiniert auch die klassische Philosophie. Ludwig Wittgenstein unternahm 1918 den Versuch, das Sagbare vom Unsagbaren zu trennen und so den Raum des Wortes eindeutig abzugrenzen<sup>d</sup>.

Sein logisches philosophisches Traktat fasst er schließlich mit dem lapidaren Satz zusammen "Wovon man nicht sprechen kann, darüber muss man schweigen"<sup>e</sup>.

<sup>a</sup>Johannes 1:1-18

<sup>b</sup>Antonio Gramsci, 22.1.1891 – 27.4.1937, Mitbegründer der kommunistischen Partei Italiens, Vater, Ehemann, Geliebter, Philosoph, Politiker. Autor der Gefängnishefte, in denen er während seiner Inhaftierung bis zu seinem Tod seine Ideen festhielt.

<sup>c</sup>Die Idee der „Hegemonie des Denkens“ blitzte in einem Statement von Fritz Kuhn auf, der 2012 in einem Spiegel Beitrag mit den Worten zitiert wird „Unser Denken hat sich in Herz und Verstand großer Teile des Bürgertums breitgemacht und ist dort schon hegemonial.“ <https://www.spiegel.de/politik/deutschland/jakob-augstein-wie-die-gruenen-der-cdu-das-buergertum-streitig-machen-a-863955.html>

<sup>d</sup>Man kann sich an dieser Stelle fragen, ob die Gedanken Wittgensteins aus dem Jahr 1918 und die Gedankenwelt Gramscis aus den 30er Jahren des 20. Jahrhunderts nicht letztlich Ausdruck eines gemeinsamen Staunens über die Macht des Wortes sind.

<sup>e</sup>Ludwig Wittgenstein, „Tractatus logico philosophicus“, 1918, Satz 7. Zu diesem Satz bleibt die Frage offen ob Wittgenstein bewußt davon geschrieben hat das man „wovon“ spricht und „darüber“ schweigt oder ob es nicht auch hätte umgekehrt sein können. Zu bedenken wäre letztlich ob man über etwas schweigen kann oder ob das Wort „darüber“ nicht sogar eine aktive Verpflichtung ausdrückt währen das Wort „wovon“ nur eine passive Haltung zum Wort ausdrückt. In diesem Sinn würde das „darüber“ den Begriff des „muß“ bewusst und nachdrücklich verstärken. Das Verbot wäre sozusagen ein besonders schwerwiegendes.

Die dem Wort zugeschriebene Macht des Wortes regt schließlich nicht nur den philosophischen Diskurs, sondern auch die politische Debatte an. Wenn das Wort die Hegemonie des Denkens nicht nur ausdrückt, sondern auch formt, dann ist das Wort der Ansatzpunkt, um die Welt zu verändern. Es muss, nach Ansicht vieler Denkschulen, das Wort sein, das man ändern muss. Die Menschen müssen also zurück zum "Anfang" des Johannesevangeliums um dort den Sündenfall der falschen Hegemonie zu korrigieren. So sehen wir heute den Kampf um das Wort, der Menschen in die Schützengräben einer fast schon absurden Auseinandersetzung treibt. Der Aufforderung, im Wort auch die Geschlechterfrage zu reflektieren (Gendern), stellen sich Menschen entgegen, die sich durch diese Veränderung im Wort angegriffen fühlen, und die diesen Angriff zurückschlagen wollen. Das führt zu erstaunlichen Debatten, denn plötzlich wird aus einer akademischen Debatte, die kaum über die wissenschaftliche Welt hinausreichte, eine allgemeine Debatte. Dies trifft auf Menschen, die nun völlig verwirrt sind ob des Kampfgetöses. Muss das Gendern nun verboten oder zur Pflicht gemacht werden? Ist der Sprachgebrauch im linken Sinn oder im rechten Sinn zu regulieren?

Während wir darüber noch engagiert diskutieren, geht der Krieg in der Ukraine weiter. Der Aufstieg der Antidemokraten in den USA setzt sich fort. Palästina versinkt in einem sinnlosen Krieg. Der Lebensstandard in Europa sinkt. Der Aufstieg rechtspopulistischer und rechtsextremer Parteien in Europa setzt sich fort. Die Folgen der COVID-19 Pandemie begleiten uns weiter. Aber wir Europäer:innen (oder doch Europäer\*innen) haben die Frage zu klären, welches Wort am Anfang stand. Stille, o stille!

*M. Resch*

## Überempfindlichkeitsreaktionen - Aktiv oder inaktiv: ein Proton macht den Unterschied



G-Protein-gekoppelte Rezeptoren (GPCRs) gehören zu einer großen Proteinfamilie, die beim Menschen mehr als 800 Mitglieder umfasst. Diese Transmembranproteine spielen in der Signalweiterleitung eine wichtige Rolle: Sie erkennen chemische Signale von außerhalb der Zelle und reagieren darauf mit einer Änderung ihrer Konformation. Die Rezeptoren sind an G-Proteine gekoppelt – daher der Name – und an einer Vielzahl von physiologischen Prozessen beteiligt. Beim Histamin-H1-Rezeptor (H1R) führt die Bindung des Liganden Histamin zur Aktivierung und Zellreaktion. Da der H1R an Überempfindlichkeitsreaktionen beteiligt ist, gilt dieser GPCR als einer der wichtigsten Rezeptoren in der pharmazeutischen Forschung bei der Behandlung von allergischen Reaktionen sowie von Schlafstörungen und Übelkeit. Der Ligand Histamin kann in physiologischer Umgebung und in Abhängigkeit vom pH-Wert allerdings in verschiedenen Protonierungszuständen vorkommen. Aus Laboruntersuchungen ist bekannt, dass entweder nur eines der beiden Stickstoffatome protoniert ist (tau-Tautomer oder pi-Tautomer) oder beide (Dikation). Die Auswirkung der Histamin-Protonierung auf die Bindung an H1R war jedoch bisher nicht klar und sollten mit atomistischen Moleküldynamik-Simulationen untersucht werden.

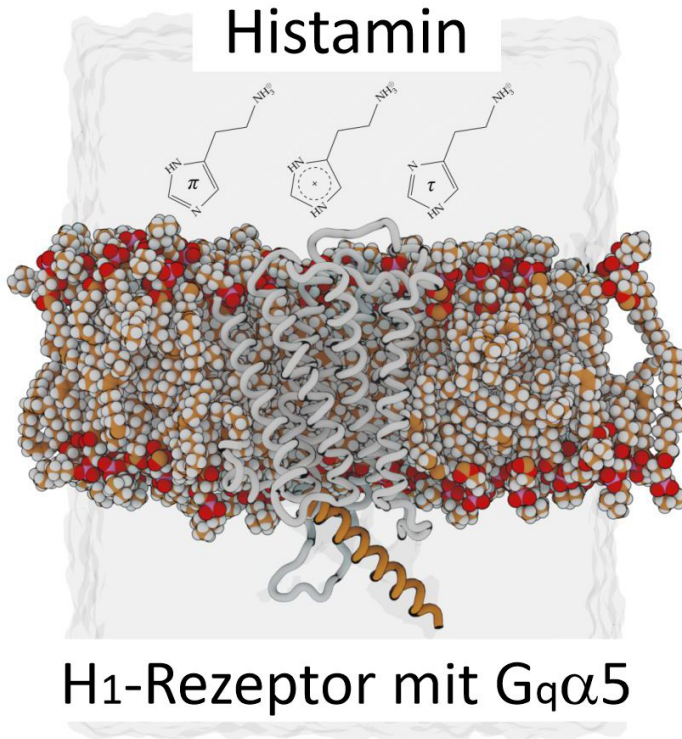
Die ersten Rechnungen zur Vorbereitung des Simulationssystems wurden am LRZ auf SuperMUC-NG durchgeführt, alle übrigen auf den beiden NHR@FAU-Clustern mithilfe des dort installierten Software-Pakets AMBER. Die Anfangsphase der Simulationsrechnungen lief auf dem CPU-Cluster Fritz, um von der höheren Rechengenauigkeit zu profitieren. Für die Produktionsphase der Simulationen wurde auf den GPU-Cluster Alex gewechselt; die Rechnungen nutzten jeweils eine einzelne GPU (hauptsächlich NVIDIA A40) und erzielten eine hohe Performance ohne CPU-Overhead. Aus den MD-Simulationen ergab sich, dass der Zustand der Histaminprotonierung tatsächlich einen entscheidenden Einfluss auf die Stabilisierung des Protein-komplexes zwischen H1R und seinem G-Protein besitzt: Das tau-Tautomer

erwies sich als die beste Spezies, um die Konformation des aktiven Zustands im H1R zu stabilisieren, während ein dikationisches Histamin eher eine inaktive Konformation im Rezeptor induzierte.

Die Ergebnisse dieser Studie bieten damit eine mechanistische Erklärung früherer Laborbefunde, was nicht nur für die Grundlagenforschung auf dem Gebiet der pH-abhängigen GPCR-Liganden interessant ist. Die künftige Entwicklung neuer, maßgeschneiderter Liganden zur Feinjustierung der H1R-Aktivität könnte davon profitieren, um neuartige und passgenaue Arzneistoffe zu entwerfen und herzustellen. Die Forschungsarbeit wurde mit finanzieller Unterstützung der DFG im Rahmen des GRK1910 (Medizinische Chemie selektiver GPCR-Liganden) durchgeführt. Die zugehörige wissenschaftliche Publikation ist per Open Access verfügbar: Marcus Conrad, Anselm H. C. Horn, Heinrich Sticht. *Molecules* 2023, 28(9), 3774, DOI 10.3390/molecules28093774.

Anselm Horn  
Verbindungsassistent NHR@FAU  
Institut für Biochemie  
FAU Erlangen-Nürnberg





**Abbildung 1:** Struktur des Histamin-H<sub>1</sub>-Rezeptors (grauer Schlauch als Darstellung des Proteinrückgrats), eingebettet in die Lipidmembran (Kalottenmodell in Rot, Weiß und Orange; nur ein Teil ist dargestellt); die alpha5-Helix des zugehörigen G-Proteins (G<sub>q</sub>, oranger Schlauch, Proteinrückgrat) bindet auf der Innenseite der Zelle an H<sub>1</sub>R. Oberhalb der Membran ist der physiologische Ligand Histamin in den drei untersuchten Protonierungszuständen als Lewis-Struktur abgebildet. Der hellgraue, unregelmäßige Quader zeigt die Ausdehnung der in den Simulationen vorhandenen Wasserbox (periodische Randbedingungen). (Abbildung angepasst von Abb. 12 der Originalpublikation)

## Erweiterte Navier-Stokes-Gleichung

Mit der Bereitstellung gesteigerter Rechenleistung durch Hochleistungsrechner (Supercomputer) und der Bereitstellung verbesserter numerischer Berechnungsmethoden (Mehrgitterverfahren) gelang es, numerische Berechnungen durchzuführen, die direkte Vergleiche mit korrespondierenden experimentellen Daten zuließen. Solche Vergleiche wurden am Lehrstuhl für Strömungsmechanik an der Universität Erlangen-Nürnberg Ende der 1990er-/Anfang der 2000 Jahre durchgeführt. Es zeigte sich, dass Strömungen mit großen Druck- und Temperatur-Gradienten zu keinen Übereinstimmungen zwischen numerischen und experimentellen Untersuchungen führten. Lagen keine hohen Gradienten von Druck und Temperatur vor, war die Übereinstimmung zwischen numerischen und experimentiell ermittelten Werten sehr gut. Dies führte zu einer Vielzahl von numerischen Berechnungen von Strömungen mit laminaren Strömungseigenschaften, die heute ein vertiefendes Wissen über strömungsmechanische Vorgänge bereitstellen.

Die Strömungen, für die keine Übereinstimmung zwischen numerischen Berechnungen und experimentellen Untersuchungen erzielt werden konnte, gerieten unter „Numerikern“ in Vergessenheit. Außerhalb der numerischen Strömungsmechanik wurden allerdings Modellierungen durchgeführt, um verbesserte Übereinstimmungen zu erreichen, die z.B. in einem Buch von Karniadakis et al. [1] zusammengefasst wurden.

Als die ersten Arbeiten über Differenz zwischen numerischen und experimentellen Arbeiten für

- Mikro-Kanal und Mikro-Kapillarströmungen und
- Verdichtungsstöße in Überschallströmungen

in der Literatur erschienen, wurden innerhalb FORTWIHR, in der LSTM-Gruppe in Erlangen, Stimmen laut, dass die „Navier-Stokes-Gleichungen“

unvollständig seien. Eine erste diesbezüglich durchgeführte Ableitung erschien 2006, siehe Ref. [2]. Weitere Arbeiten folgten, mit Anwendung im Mikro-Kanalbereich und im Bereich der Überschallströmungen. Eine Zusammenfassung dieser Arbeiten aus Erlangen zu diesem Thema sind in Ref. [3] publiziert und Anwendungen anderer Autoren beispielhaft in Refs. [4] und [5] für Mikro-Kanalströmungen und Verdichtungsstöße.

Vor kurzem ist eine Publikation erschienen, siehe Ref. [6], welche die Erweiterung des CFD-Codes OpenFOAM beschreibt, um auch Berechnungen von Strömungen mit merkbarer Selbstdiffusion, infolge starker Druck- und Temperatur-Gradienten, durchführen zu können. Dies gelang unter Berücksichtigung der erweiterten Navier-Stokes-Gleichungen, auf die zum ersten Mal in Ref. [2], hingewiesen wurde, mit dem Hinweis auf die Notwendigkeit der Erweiterung der Navier-Stokes-Gleichungen.

Die innerhalb FORTWIHR begonnenen Arbeiten zur Erweiterung der Navier-Stokes-Gleichungen (ENSE) haben nun den Eingang in die CFD-Codes gefunden, trotz der Bedenken, die in Ref. [7] geäußert wurden. Diese Bedenken beruhen auf der Annahme, dass die „Grundprinzipien der Mechanik“ auch die Selbstdiffusion durch Moleküle umfassen. Das tut sie nicht. Dieser Sachverhalt sollte noch einmal, im Detail untersucht werden, so auch Strömungen verlässlich berechnet werden können, die numerisch berechnet wurden, aber hohe Druck- und Temperatur-Gradienten aufweisen. Strömungen also mit solchen Eigenschaften können mittels der klassischen Navier-Stokes-Gleichungen nicht korrekt berechnet werden.

Franz Durst

## Referenzen:

- 1 Karniadakis, G., Beshkok, A., Aluru, N.: Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation, Springer-Verlag, Series, Interdisciplinary Applied Mathematics 29, 2002.
- 2 Durst, F., Gomes, J., Sambasivam, R.: Thermo-fluid-dynamics: Do we Solve the Right Kind of Equations, Proceedings of the International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, (Dubrovnik), pp.1-15,2006.
- 3 Durst, F., Filimonov, D., Sambasivam, R.: Treatments of Micro-Channel Flows Revisited: Continuum versus Rarified Gas Considerations, Journ. Inst. Engineering, Series C, 101 () 3, pp. 429-439, 2020.
- 4 Jaishankar, A., McKinleigh, G.H.: An exact analytical solution to the extended Navier-Stokes equations using the Lambert W function, AIChE-Journ.60,pp. 1413-1423, 2014.
- 5 Greenshields, C.J., Reese, J.M.: The structure of hypersonic shock waves using Navier-Stokes equations modified to include mass diffusion, 2nd European Conference on Aero-Space Sciences, von Karman Institute, 2007.
- 6 Schwar, J., Axelson, K., Anheuer, D., Richter, M., Adam, J., Heinrich, M., Schwarze, R.: An OpenFoam solver for the extended Navier-Stokes equations, Software 22, 101375, 2023.
- 7 Öttinger, H.C., Strucktrup, H., Liu Mario: Inconsistency of a dissipative contribution to the mass flux in hydromechanics. Physical Review E80, 056 303-1707, 2009.

## **Das NHR@FAU bei der SC23 Supercomputing Konferenz – da stept der HPC-Bär**



Wieder einmal brachte die Supercomputing Conference die HPC-Welt zusammen, diesmal vom 12. bis 17. November in Denver, Colorado. „I am HPC“ lautete das gewohnt schmissige Motto – passend zum wichtigsten Thema der SC schlechthin: Wer hat den Schnellsten? Wenngleich sich gegenüber des Vorjahrs auf den ersten Plätzen der TOP500 nicht viel getan hat. An der Spitze der Liste und als einziger Exascale-Rechner steht nach wie vor das Frontier-System am Oak Ridge National Laboratory, und der schnellste Hochleistungsrechner Europas bleibt der auf 380 PetaFLOPS aufgerüstete Lumi aus Finnland auf Platz 5.

Ein Highlight war selbstverständlich der Stand des LRZ, der diesmal strategisch günstig nahe des Eingangs platziert war. Außer TUM und LMU durfte auch das NHR@FAU wieder mitspielen und seine Arbeiten auf dem Gebiet der Performance-Tools (LIKWID, OSACA, ClusterCockpit) präsentieren. Der Standslogan „Enjoy HPC & Gmiatlichkeit made in Bavaria“ wurde mustergültig umgesetzt: Bierbänke luden zu ad-hoc-Meetings ein, bei denen sich in Ruhe ein von woanders organisiertes Bier kippen ließ und wissenschaftliche, strategische oder private Gespräche dabei nicht zu kurz kamen. Das Konzept ging auf, man setzte sich zusammen, plauderte, visionierte und posierte für Social Media. So wie es sein muss.

Im wissenschaftlichen Programm konnte das NHR@FAU zusammen mit seinen Partnern im BMBF-Projekt „Quelloffene Lösungsansätze für Monitoring und Systemeinstellungen für energieoptimierte Rechenzentren“ ein Research-Poster platzieren. Wie immer war die „Poster Reception“ geballte Kommunikation auf einem Haufen (das ist ja das Schöne daran); noch schöner wäre es allerdings gewesen, wenn es zum „Buzz“ auch mehr „Booze“ gegeben hätte – zwei Freigetranke pro Poster? Ausbaufähig. Beim sehr gut besuchten 14. Workshop „Performance Modeling, Bench-

marking and Simulation of High Performance Computer Systems” (PMBS) wurde dann abgesehen: NHR@FAU platzierte zwei Paper und konnte für eines davon den „Best Short Paper Award“ mit nach Hause nehmen. Das ist übrigens schon das dritte Mal seit 2019, dass diese Trophäe nach Erlangen geht. Vielleicht wird ja ein Abo draus.

Ein weiterer Dauerbrenner: Das Ganztages-Tutorial „Node-Level Performance Engineering“, das jetzt zum zwölften Mal in Folge die heißen Infos zu Cores, Caches, SIMD, ccNUMA und dem Roofline-Modell in wissbegierige HPC-Neulinge injizierte. Auch wenn dieses Jahr die Teilnehmerzahl eher mau war – kein Wunder bei 47 Tutorials und 1100 \$ Registrierungsgebühr für zwei Tage – interessante Diskussionen gab es dennoch.

Dass die Kolleginnen und Kollegen von NHR@FAU nicht nur wissenschaftlich, sondern auch sportlich Spitze sind, zeigte sich gleich am Anfang der SC23: Doktorand Jan Laukemann siegte beim „SCinet 5K Run“, einem Lauf-Event, das jedes Jahr vom SCinet-Team veranstaltet wird. SCinet kümmert sich um die Versorgung der Konferenz mit einer Netzwerk-Infrastruktur, die ihresgleichen sucht; tatsächlich ist es der größte temporäre Internetdienst der Welt. Wenn man wie Jan dabei mithilft, muss man gut im Saft stehen, denn das Verlegen von 20 km Netzkabel inklusive der zugehörigen Netzkomponenten ist in jeder Beziehung ein Kraftakt. Gegen wie viele muskelschwache Nerds er beim 5K antreten musste, ist allerdings nicht bekannt. Trotzdem – Congrats, Jan!

Sechs Tage lang steppte zusammen mit 14.000 Teilnehmenden bei der SC23 der HPC-Bär. Erschöpft, aber zufrieden und mit vielen neuen Ideen und Kontakten im Gepäck ging es in Richtung Heimat.

Georg Hager  
NHR@FAU



**Abbildung 1:** „I See What You Mean“ – Das Colorado Convention Center in Denver unter Beobachtung des blauen Bären.



**Abbildung 2:** Doktorand Jan Laukemann nach dem Sieg beim SCinet 5K. Er kam offensichtlich nicht einmal ins Schwitzen. (Quelle: <https://twitter.com/Supercomputing/status/1723778947794575409>)

## Neuer Supercomputer für mehr Methoden



Leibniz-Rechenzentrum  
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Nach dem Installieren beginnt nun die Arbeit für Forschende und HPC-Spezialist:innen: In einer Early User Phase implementieren sie die ersten wissenschaftlichen Codes auf SuperMUC-NG Phase 2 (SNG-2), der Ausbaustufe des Supercomputers am Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). Und prüfen außerdem Datenverbindungen oder wie Prozessoren mit Beschleunigern und Speicherkomponenten zusammenarbeiten. „Phase 2 verlangt neue Programmierparadigmen, um Teile der Codes und Workloads auf den GPUs auszuführen. Daher müssen die Programme angepasst und Routinen umprogrammiert werden“, berichtet Dr. Gerald Mathias, Leiter des Computational X Support-Teams (CXS). „Und natürlich wollen wir wissen, was das System kann, wie wir im laufenden Betrieb In- und Output von Daten verbessern können und wie SNG-2 auf Maßnahmen zum Energiesparen reagiert.“

### **KI ins HPC integrieren**

SNG-2 wurde entwickelt, um Berechnungen zu beschleunigen und um in etablierte HPC-Abläufe KI-Methoden zu integrieren, die Forschende immer öfter einsetzen. Seine 240 Rechenknoten, die auf Lenovos ThinkSystem SD650-I V3 Neptune DWC Servern basieren und mit 45 Grad heißem Wasser gekühlt werden, enthalten jeweils zwei Central Processing Units (CPUs – Intel Xeon Platinum 8480+) sowie 4 Graphics Processing Units (Intel Data Centre GPU Ponte Vecchio). Letztere verarbeiten Daten schneller, etwa für klassischen Simulationsaufgaben, sie eignen sich aber auch für hoch skalierbare, rechen- und datenintensive Workloads zum Beispiel für das maschinelle Lernen. Diese Aufgaben unterstützt überdies ein verteiltes, asynchrones Objektspeichersystem (DAOS), das auf Intel Optane Speichern basiert und den Zugriff auf große Datenmengen beschleunigt. Laut aktueller IOP500-Liste vom November 2023 erreicht SNG-2 eine Leistung von 17,19 PetaFLOP pro Sekunde, was rund 17 Milliarden Fließkommaoperationen entspricht, und liegt damit auf Platz 2 der Produktionssysteme. Seine Leistungen können über das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) beantragt werden.



Vor dem offiziellen Betriebsstart im Frühjahr wird das System umfassend getestet und in dieser Early User- oder Pilotphase bereits mit nützlichen Programmierwerkzeugen sowie Anwendungen ausgerüstet: So wurden neben dem allgemeinen HPC-Software-Stack und den Intel One API-Tools in Zusammenarbeit mit dem CXS-Team und Intel-Spezialist:innen bereits die beiden, auf GPU optimierten Astrophysik-Programme OpenGadget und DPEcho sowie Gromacs und Amber, zwei Anwendungen der Molekulardynamik, zudem die Codes SeisSol (Seismologie) und CP2K (Quantenchemie) implementiert, außerdem praktische Werkzeuge wie das Kokkos-Framework für das Coden von C++-Anwendungen. Im Fokus der Beobachtungen und Analysen stehen die Ansprache der parallelen Prozessoren durch wissenschaftliche Codes, aber auch wie Nutzer schnell auf Daten zugreifen und Rechenergebnisse verwalten können – Funktionalitäten, die im wissenschaftlichen Alltag reibungslos zu erledigen sein sollen.

### **Neue, andere Prozesse kennenlernen**

„Um das Potential der GPUs zu nutzen, spielen die Programmiermodelle OpenMP sowie SYCL, eine Erweiterung von C++, eine große Rolle. OpenMP ist weit verbreitet in akademischen Anwendungen, aber die meisten Anwendungen müssen noch auf SYCL angepasst werden“, berichtet Mathias. Im Forschungsprojekt SeisSol haben sie für diese Aufgabe sogar schon einen Code-Generator entwickelt, der sich nun auf SNG-2 bewähren und vielleicht sogar bei der Anpassung weiterer Forschungscodes helfen kann. Auch der DAOS-Speicher steht in dieser Testphase unter besonderer Beobachtung: Mit Forschenden prüft das LRZ-Team, ob der Zugriff aus verschiedenen Applikationen und Programmen problemlos funktioniert und alle Container-Typen angesprochen werden können. Neben diesen Aufgaben experimentieren sie am LRZ außerdem mit neuen Workflows für Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI). Zusätzlich zum HPC-Tool-Set werden schrittweise auch KI Frameworks installiert, mit denen sich dann KI-Modelle mit großen Datenmengen trainieren oder Muster in Simulationsdaten erkennen lassen. Schon im Vorfeld hat sich das CXS-Team mit Datenspezialist:innen verstärkt. Traditionell werden die Hochleistungsrechner des LRZ von Anwender:innen aus unterschiedlichsten Wissenschaftsdisziplinen genutzt, jetzt erwartet das

CXS-Team zudem noch Daten-Expert:innen der Fachdisziplinen. Um Forschenden die Möglichkeiten von SNG-2 sowie die Abläufe für die Kombination von klassischen Berechnungen mit KI-Methoden näher zu bringen, sind darüberhinaus Workshops und Seminare in Planung. Schon in den letzten Jahren ist das Kursprogramm des LRZ um Themen rund um KI, Machine und Deep Learning gewachsen, jetzt stellen Mathias und seine Kolleg:innen mit Intel einen Hackathon zur Optimierung von HPC-Codes zusammen, außerdem weitere Workshops zu KI-Verfahren am SNG-2 sowie die Optimierung von Codes auf die neue Systemarchitektur. „Diese Pilotphase mit Forschenden ist dieses Mal besonders intensiv und spannend“, sagt Mathias. „Vieles ist neu und anders – wir lernen gerade alle enorm dazu.“ Von diesen Erfahrungen werden alle Forschende nach dem Betriebsstart profitieren, denn das CXS-Team begleitet deren Projekte und berät sie bei allen möglichen Aufgaben rund um die Implementierung von Codes.

Susanne Vieser

## Wie KI klassisches Simulieren bereichert



Neben klassischen Prozessoren arbeitet SuperMUC-NG Phase 2 mit 960 GPUs von Intel. Aus gutem Grund: Immer mehr Forschende wollen Simulationen mit KI-Methoden erweitern, um mehr Daten auszuwerten. Von besonderem Interesse sind dabei Surrogat- oder Ersatzmodelle sowie Emulatoren, also Annäherungen an eine mathematisch-physikalisch berechnete Modellierung. Surrogatmodelle entstehen durch Verfahren wie Mustererkennung und Maschinelles Lernen. Sie können mit den Simulationsergebnissen trainiert werden und anschließend dabei helfen, deren Parameter zu variieren und in kurzer Zeit weitere Szenarien zu erzeugen. Darüber hinaus ersetzen sie rechenintensive Teile einer Simulation. Surrogatmodelle ergänzen eine Modellierung durch Daten über natürliche Phänomene, die nur schwer oder höchst aufwändig zu berechnen sind. Vier gängige Szenarien der Methodenkombination, die aktuell in den Natur- und Lebenswissenschaften verbreitet sind, beschreibt das LRZ in einem Artikel: <https://www.lrz.de/presse/ereignisse/2023-12-06-Ersatzmodell/>.

Susanne Vieser

## Visit of Shane McQuarrie, the winner of the 9th BGCE Student Paper Prize



The ninth “BGCE Student Paper Prize”, organized by the Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) of the Elite Network of Bavaria (ENB), took place at the SIAM CS&E Conference 2023. The BGCE committee selected the following seven prize finalists, who presented their work at the two special “CS&E Student Paper Prize Minisymposia” MS 78 and MS 115 at SIAM CS&E 2023 (<https://www.siam.org/conferences/cm/conference/cse23>):

- Elena Zappon, Department of Mathematics, Politecnico di Milano, Italy: Efficient Reduced Order Modeling for Coupled Problems in Cardiac Electrophysiology
- Gaurav Arya, MIT, USA: Automatic Differentiation of Programs with Discrete Randomness
- Theresa Pollinger, Institute of Parallel and Distributed Systems: Universität Stuttgart, Germany: A mass-conserving sparse grid combination technique with biorthogonal hierarchical basis functions for kinetic simulations
- Piyush Panchal, ETH Zürich, Switzerland: Electrostatic Force Computation using the Boundary Element Method
- Matteo Ferrari, Department of Science & Mathematics, Politecnico di Torino, Italy: The Johnson-Nédélec coupling for exterior problems: developments on the stability and a virtual elements approach
- Maria Luisa Taccari, University of Leeds, UK: Machine learning for fast and reliable groundwater surrogate models
- *Shane A. McQuarrie*, The University of Texas at Austin, Lehigh University, USA: Operator inference for affine-parametric systems of partial differential equations



**Figure 1:** Picture of the BGCE student paper prize winner Shane McQuarrie; © Hayden Liu Weng

The final winner was Shane McQuarrie of The University of Texas at Austin for his contribution on *Operator Inference for Affine-parametric Systems of Partial Differential Equations*.

Part of the prize consists of a one-week visit to the universities involved in BGCE: FAU Erlangen-Nürnberg and TU München, allowing the award winner to experience the two universities and understand the BGCE's research and educational program while presenting their individual research work in more detail. FAU and TUM hosted Shane in Erlangen and Munich from July 8 to 16, 2023.

Shane presented details of his work via on-site talks during his visit at each location, elaborating on the methodology of operator inference, on the implementation via an implicit Runge-Kutta Radau method of fifth order, and on the application of the approach to the FitzHugh-Nagumo model of a Neuron. Certainly, other than the details of Shane's impressive work, there was also room in the agenda to experience Bavaria (namely) Munich, to the fullest. Starting with a walking tour of the Garching campus, Shane arrived at the

TUM Garching campus on March 10th, where he proceeded to present his work and mingle with the local BGCE students and various researchers in attendance. The day concluded with a car ride through the surrounding small towns of Munich, interrupted only by a pleasant dinner with a view and ending with an informal tour of Schloss Nymphenburg.

The second day of Shane's stay in Munich began with a scheduled tour of the Leibniz-Rechenzentrum. The remainder of the day was punctuated by informal discussion sessions over coffee, where interesting research topics could be exchanged in a more informal environment. In the late afternoon, Shane experienced a guided walking tour through the old city of Munich, winding through the small streets surrounding Marienplatz. The final conclusion to this short, packed but nonetheless fruitful visit to Munich was a visit to a local Biergarten before Shane's departure to Erlangen the following day.

Summarizing, Shane's visit led to fruitful discussions and new insight and ideas at both our institutes. Meanwhile, Shane started an interesting position at the Sandia National Labs in Albuquerque (USA). We are very happy that we had a chance to spend time together and to establish connections. We hope that our guest enjoyed his time in Bavaria and are looking forward to meeting him again soon!

Tobias Neckel

## **Professur „Physics-enhanced Machine Learning“ an der TUM erst- malig besetzt**



Zum 1.3.2024 wurde Dr. Felix Dietrich, bislang Leiter einer Emmy-Noether-Gruppe am Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen des Departments of Computer Science der TUM School of Computation, Information and Technology, auf die Tenure-Track-Professur für „Physics-enhanced Machine Learning“ berufen. Zentrales Thema der Professur ist die Integration von vorhandenem Modellwissen in automatisierte Lernprozesse, also gewissermaßen die Zusammenführung modell- und datenbasierter Ansätze. Felix Dietrich, TopMath-Absolvent der TUM, kam nach Postdoc-Stationen in Princeton und an der Johns-Hopkins-University an die TUM zurück und wird seine Arbeiten nun als „Prof. Dietrich“ fortsetzen - herzlichen Glückwunsch!

Für ältere Hasen wie mich stellt sich hier natürlich ein Déjà-vu ein. Ende der Achtzigerjahre entstand das „Scientific Computing“ aus dem bloßen „Computing“, weil die steigenden Rechenzeit- und Speicherbedarfe – damals der Simulation – es erforderlich machten, sich eingehender mit effizienten, schnellen, maßgeschneidert implementierten Algorithmen zu befassen. Schon damals gab es die nimmersatten Forschenden, die ständig nach mehr Rechenkapazitäten riefen und, Klageweibern gleich, ihr wissenschaftliches Schicksal an die Verfügbarkeit von mehr Compute Power knüpften.

Ähnliches erleben wir aktuell mit dem „Machine Learning“. Auch hier ist die Zahl derer groß, die anscheinend nur dann etwas zum Vorzeigen haben, wenn man ihnen zuvor die dicksten GPU-Eumel hinstellt. Und erneut wäre es verantwortungslos – aus ökonomischer, klimatischer, aber auch rein fachli-

cher Hinsicht – diesem Gebrüll nachzugeben, so laut es auch sein mag. Und so bildet sich eben analog zum „Scientific Computing“ nun ein „Scientific Machine Learning“ heraus, das sich der zugrunde liegenden Modelle und Algorithmen annimmt und diese besser, genauer, schneller, effizienter macht. Ein Thema beim Streben nach Effizienz ist eben auch das Zusammenführen deduktiver – vom mathematischen Modell zu Daten (wie es die klassische Simulation macht) – und induktiver – von Daten zu Modellen (wie es das Machine Learning macht) – Vorgehensweisen. Alles mit dem Ziel einer „predictive science“. Insofern also der richtige Schritt zur richtigen Zeit – und für den Lehrstuhl gewissermaßen eine Komplettierung des Kleeblatts aus Scientific Computing, High-performance Computing, Quantum Computing und nun Scientific Machine Learning.

Hans-Joachim Bungartz





## New projects

The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of fall 2023. 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:

- *Performance Optimization for the SYCL implementation of UTBEST*  
by Prof. Dr. Vadym Aizinger,  
Chair of Scientific Computing, University of Bayreuth
- *Development and optimisation of a program package for simulations of strained polymer networks – CHEMBREAK*  
by Prof. Dr. Ana-Sunčana Smith,  
Professur für Theoretische Physik, PULS-Group, FAU
- *Modernizing Checkpointing and Output in the Earthquake Simulation Software SeisSol*  
by Prof. Dr. Michael Bader,  
Scientific Computing in Computer Science - group for Hardware-aware algorithms and software for HPC, Technical University of Munich
- *Memory optimization and OpenMP acceleration of large-scale GW calculations*  
by Dr. Jan Wilhelm,  
Institute of Theoretical Physics, University of Regensburg

You can find more details about these projects at

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

We would like to invite you to our online workshop on March 25, 15:00-17:00, in which new projects will present their goals and challenges. For more details, see <https://www.konwihhr.de/>.

Gerasimos Chourdakis

## Apply now!



Do you want to optimize your code, but you need some help (and funding)? The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria accepts applications for scientific HPC projects (up to 50 000 €), as well as for “basis” projects to establish contact points. **Tip:** Increase the success of your proposal and your project by contacting your local computing center before applying, to discover optimization potential in your code.

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.konwihhr.de/konwihhr-projects/>

Read more on [konwihhr.de](http://konwihhr.de) and join the [konwihhr-announcements](#) mailing list.

## Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

[info@konwihhr.de](mailto: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/>

Gerasimos Chourdakis

## **Ferienakademie 2024 & Bewerbung**

FERIENAKADEMIE

Im Herbst 2024 wird die Ferienakademie<sup>1</sup> ihr 40-jähriges Bestehen im Sarnatal (Südtirol) feiern. Die Sommerschule wird seit vielen Jahren von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert.

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

1. OshrEQ: Crafting your Homework Proof Mate
2. Engineering Industrial Applications with Generative AI
3. Dark Matter and the Cosmos
4. Multi-scale models for flow simulations
5. Let's Play! Simulated Physics for Games
6. Climate Mitigation, Energy Transitions, and Sustainable Development: Where Science, Technology, and Policy Intertwine
7. Deep Learning in Image and Video Processing
8. Learning with Music Signals
9. Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry and Medicine
10. Lattice Boltzmann Methods in Solid Mechanics

---

<sup>1</sup>[www.ferienakademie.de](http://www.ferienakademie.de)

Zusätzlich wird es auch noch einen Doktorandenkurs im Bereich der Elektro- und Informationstechnik zu Halbleitertechnik und Technologie geben. Details zu den Kursen sind unter <https://www.ferienakademie.de/kurse-2024/> zu finden. Die Bewerbung für die Studierenden wird im Onlineportal bis zum 1. Mai dieses Jahres möglich sein. Wir freuen uns bereits jetzt über hoffentlich viele sehr gut qualifizierte Bewerber\*innen wie in den letzten Jahren.

Tobias Neckel

# Ferienakademie

**22.9. – 4.10.2024**

**Sarntal (Südtirol)**

Programm 2024

Kurs	Thema	Dozent*innen Gastdozent*innen (GD)	Fachrichtungen (und Fachsemester)
1	OshEQ: Crafting your Homework Proof Mate	S. Goncharov, Erlangen H. Seidl, München	Informatik, Mathematik (Bachelor im 1. oder 2. Studienjahr)
2	Engineering Industrial Applications with Generative AI	B. Brügge, München J. Franke, Erlangen J. Bembus, Siemens AG (GD) A. Seltz, Siemens AG (GD)	Informatik, Software Engineering, Mathematik, Physik, Ingenieurwissenschaften, Fertigungsautomatisierung (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)
3	Dark Matter and the Cosmos	S. Schönert, München A. Weiler, München	Physik, Physik-interessierte Studierende (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)
4	Multi-scale models for flow simulations	R. Helmig, Stuttgart M. Manhart, München P. Schaller, Erlangen (GD)	Physik, Ingenieurwissenschaften, Maschinenwesen, Informatik (Master)
5	Let's Play! Simulated Physics for Games	H.-J. Bungartz, München H. Köstler, Erlangen	Ingenieurwissenschaften, Informatik, Mathematik, Physik (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)
6	Climate Mitigation, Energy Transitions, and Sustainable Development: Where Science, Technology and Policy Intertwine	M. Schreurs, München	Social-, Natur- und Ingenieurwissenschaften, Informatik (alle Fachsemester)
7	Deep Learning in Image and Video Processing	A. Kaup, Erlangen E. Steinhilber, München B. Yang, Stuttgart (GD)	Elektrotechnik, Informations- und Kommunika- tionstechnik, Informatik, Mathematik, Physik (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)
8	Learning with Music Signals	M. Müller, Erlangen M. Sedlmair, Stuttgart (GD)	Elektrotechnik, Informations- und Kommunika- tionstechnik, Informatik, Mathematik, Physik (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)
9	Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry and Medicine	D. Bucher, München F. Hagen, München	Chemie, Physik, Biochemie, Biologie, Medizin (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)
10	Lattice Boltzmann Methods in Solid Mechanics	H. Steeb, Stuttgart B. Wohlmut, München	Mathematik, Informatik, Physik, Ingenieur- wissenschaften, Simulation Technology (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)

**Organisation:**  
 T. Neckel, neckel@cit.sum.de  
 M. Windshelmer, marc.windshelmer@fau.de  
 J. Petzer, julia.petzer@ipvs.uni-stuttgart.de

**Universitätsbeauftragte:**  
 G. Müller, München  
 A. Kaup, Erlangen  
 M. Schulte, Stuttgart

**Direktor:**  
 H.-J. Bungartz,  
 TUM School of CIT  
 Dep. of Computer Science

**Bewerbungsschluss 1. Mai 2024**

Friedrich-Alexander-Universität  
Erlangen-Nürnberg

Technische  
Universität  
München

Universität Stuttgart

[www.ferienakademie.de](http://www.ferienakademie.de)

Abbildung 1: Das Poster der Ferienakademie 2024.

**\* Notiz \* Notiz \* Notiz \***

**Termine 2024**

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadlines**

<https://www.siam.org/conferences/calendar>

- **Supercomputing 2024:**

The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC23) – SC 24 in Atlanta, GA, USA: 17.11.-22.11.2023 <https://sc24.supercomputing.org/>

- **KONWIHR News** <https://www.konwihhr.de/>

---

## Quartl<sup>\*</sup> - 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

School of Computation, Information and Technology

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

**e-mail:** herrmasa@in.tum.de,

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

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **01.06.2024**

---

\* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)