

Inhalt



Editorial	2
TUM PREP-Programm 2025	5
SC 25: Mal richtig einheizen!	13
25 Jahre HPC am LRZ	16
„Kein Geld verplempern“	18
Warmlaufen für Blue Lion	20
LRZ baut aus	21
Ferienakademie 2025	22
KONWIHR: New projects from round 2025-2	25
*News***From*the*Länd***News*	27
Termine	29

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

S. Herrmann, 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: hermasa@in.tum.de,

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

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.03.2026**

* 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 Engineering* (BGCE)

Editorial

Diesmal wollen wir uns quasi mit der Königin aller Sprachen befassen, mit Latein. Eins vorab: Ich bin da voreingenommen, war stets begeisterter Lateiner bis zum großen Latinum und meinen Eltern dankbar, dass sie mich am Ende der sechsten Klasse für den Latein-Zug motivierten. Französisch kam damit zwei Jahre später – und sollte dennoch meine Passion werden. Latein habe ich aber zu keiner Zeit bereut. Die Grammatik, der Einblick in eine ganz andere Zeit, die Freude daran, Inschriften auf Grabsteinen und andere Kostbarkeiten zu lesen, und natürlich – so viel Ehrlichkeit muss sein – das bildungsbürgerliche Vergnügen, dann und wann einen Sinnspruch à la „*quo usque tandem*“ abzusetzen: All das hat mich ab der siebten Klasse irgendwie begleitet.

Ob man Latein heutzutage noch braucht? Wohl schon. Ob man Latein im Gymnasium belegen sollte, eventuell sogar ein humanistisches Gymnasium wählen? Zumindest diskutabel. Aber manchmal wird's skurril. Wie z.B. in einer Email, die mich kürzlich von der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAfW) erreichte.

Es ging um eine Abstimmung, über die Wahl zum „Lateinwort des Jahres“. Also ich kenne das Wort des Jahres, das Unwort des Jahres, lernte neulich das Jugendwort des Jahres kennen – vom Lateinwort des Jahres hatte ich allerdings noch nichts gehört. *Mea culpa* (und schon schlägt Latein wieder zu ...). Dabei wird er bereits zum vierten Mal ausgetragen, dieser *Vox Anni* Wettbewerb. Organisiert wird das Ganze von der *Thesaurus Linguae Latinae* Community, die kürzlich die sechs diesjährigen Finalisten vorgestellt hat: (1) *rhabdomantia* – die Rutenwahrsagerei; (2) *rhoezos* – Lärm, Getöse; (3) *rhoncissator* – der Schnarcher; (4) *rir* – die lautmalerische Nachahmung des Knurrens eines Hundes; (5) *risum* – Reis; und (6) *roba* – das Gewand. Echt jetzt? Wurden da verschollene Texte von Cicero oder Horaz entdeckt? Be- klagt sich irgendwo in den Tiefen des *De bello Gallico* Caesar über seines schnarchenden Legionäre? Oder hat da jemand die sozialen Medien nach lateinischen Vokabeln durchforstet?



Picture: Harryarts, Freepik

Egal – alle dürfen mitmachen, wobei drei Gruppen in besagter Email explizit benannt werden: professionelle Althilolog:innen, Fans von Sandalenfilmen sowie Lateinliebhaber. Zu letzterer zähle ich mich natürlich, aber diese Auswahl sagt mir nicht wirklich zu. Lieber wären mir echt alltags- oder kulturrelevante Worte wie „absurditas imperialis – Kaiserschmarrn“, oder „dominus sigilli custos – Lordsiegelbewahrer“ gewesen. Aber halt – der gewöhnliche Lateinliebhaber darf nur an der Endauswahl teilnehmen, bei den Qualifiers war unsereiner außen vor. Also schauen wir kurz nach, was die Regularien dazu sagen:

„Um in den Finalistenkreis aufgenommen zu werden, musste jedes Wort drei Bedingungen erfüllen: Erstens wurden nur Lemmata berücksichtigt, deren Einträge im *Wahljahr im Thesaurus linguae Latinae* veröffentlicht wurden. Zweitens musste es sich um ein gänzlich „neues“ Wort handeln — neu in dem Sinne, dass man es bisher in keinem gängigen Lexikon des antiken Lateins findet, wie etwa dem *Oxford Latin Dictionary*. Georges oder Gaffiot. Drittens wurde bei der internen Vorauswahl darauf geachtet, welche Wörter aus formal oder inhaltlicher Sicht besonders interessant sind und sich eignen, eine Verbindung zwischen Antike und Gegenwart herzustellen. Das bedeutet, dass einige der bedeutendsten und unterhaltsamsten Beiträge, die in Faszikel R12 des *Thesaurus linguae Latinae* veröffentlicht wurden, von der Wahl ausgeschlossen sind. Zu diesen Wörtern gehören etwa *rex*, *rhetor*, *video*, *ridiculus*, *ripa*, *rite* und *robur*. Trotzdem hoffen wir, dass die diesjährige Auswahl einen robusten und rhetorisch reizvollen Beitrag zur Lateinforschung darstellt.“

Nachdem dies also geklärt wäre, vielleicht noch ein kurzer Exkurs zu dem jetzt schon mehrfach erwähnten Thesaurus: „*Der Thesaurus linguae Latinae* ist das maßgebliche Wörterbuch des antiken Lateins. In dem internationalen Vorhaben der BADW forschen Latinistinnen und Latinisten aus derzeit sieben Ländern, in der internationalen Thesauruskommission sind Forschungseinrichtungen aus 30 Ländern vertreten. Als einziges Lexikon bezieht der Thesaurus alle überlieferten lateinischen Texte von den Anfängen bis 600 n. Chr. ein, berücksichtigt also neben der klassischen Latinität auch ausführlich die Besonderheiten der spätantiken und christlichen Texte. Untersucht werden

nicht nur literarische Werke, sondern auch juristische und medizinische Gebrauchstexte, Inschriften, Graffiti und vieles mehr: „Wow, an die klassische Latinität hatte ich gar nicht gedacht. Und bei Graffiti fällt mir natürlich sofort das legendäre „Romanos eunt domo“, das in Monty Pythons „Leben des Brian“ ja einer sofortigen Sprachkorrektur unterzogen wird.

Ach ja, 2024 hat übrigens das Wort „retotatotato“ gewonnen, eine *„musikalische Silbensequenz in Nachahmung eines Blasinstruments“*. Dieses verbale Kunstwerk, so liest man, ist wohl nur einmal belegt, wurde kurz nach 79 n. Chr. in eine Wand in Pompeji geritzt. Fachleute hielten es zunächst für eine Zauberformel, ehe ein musikalischer Kontext eine Umdeutung nahelegte. Wer weiß, vielleicht setzt sich 2026 ja etwas aus der Schatzkiste von Lortot durch, z.B. eine lateinische Version von „brat fettlos mit Salamo Bratfett ohne“ ...

Doch nun wünscht Ihnen die gesamte Quartl-Redaktion eine schöne und hoffentlich friedvolle Weihnachtszeit (frohum festum!) und dann einen guten und sicheren Rutsch in ein hoffentlich rundum erfreuliches Jahr 2026. Trotz der vielen Fragezeichen – man darf sich seinen Optimismus nicht nehmen lassen. Doch zunächst natürlich ganz viel Spaß mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

* Termine * 2026 * Termine *

- **Durham HPC Days 2026:**
Durham, UK: 15.06.-19.06.2026
<https://hpc-days.github.io/Durham-HPC-Days-2026/>
- **KONWIHR News** <https://www.konwihhr.de>
- **SIAM Conferences & Deadlines**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **Supercomputing 2026:**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis – SC 26 in Chicago Illinois, USA: 15.11.-20.11.2026
<https://sc26.supercomputing.org>

the first time and discuss collaborations as well as problems which are similar at both locations. With new study programmes which are complementary to the ones offered in Garching and Munich, as well as with new professors being hired in The Länd, we are confident that all CIT locations will come closer together. Please take this as an invitation to drop by – we will be happy to show you around and to explore further opportunities for collaboration.

Welcome to The Länd!

**Baden-Württemberg
is THE LÄND.**

Carsten Trinitis

TUM PREP 2025: *Practical Research Experience Program*

In June 2025, we at the chair of Scientific Computation in Computer Science (SCCS) welcomed three Bachelor's students, two from the U.S. and one from the U.K., to participate in two research projects for eight weeks, organized through the *Practical Research Experience Program* (TUM PREP). It was a great pleasure to host the students; they did great research-wise, and sharing ideas and perspectives with students from other universities was also interesting. The feedback we received from the students was also highly positive, and they reported that it was both fun and rewarding, in terms of both research and social aspects. Although the feedback was not anonymous and $N = 3$, we decided to give a review of our experience with TUM PREP and what the students did during the eight weeks. Hopefully, this will be helpful for colleagues who are considering whether to submit a project. Before that, though, we should perhaps explain what TUM PREP even is.

The *Practical Research Experience Program* (TUM PREP) is a program that allows students from select universities in the U.S., Canada, and the U.K. to spend eight weeks in Munich working on exciting research projects. Different research groups at TUM create the projects that the applicants can choose from. Any professor, possibly collaborating with doctoral candidates, can write up a project and submit it around August in the year before the students arrive. The responsible person for the project receives the application in December, from which they can choose. No funding is required from the professor's side, and they receive an ambitious and talented student to assist with their research for eight weeks. The student receives a great introduction to life as a researcher and forms new connections in Germany, a so-called win-win situation.

We received some great applications and selected three students to work on two different projects. Aidan Chadha from Virginia Tech, who worked on landslide simulations, James Tay from Imperial College London, who worked on Uncertainty Quantification workflows for the aforementioned landslide

simulations, and Joshua Cheng from Princeton University, who worked on neural networks and optimal transport. After the selection of candidates, the organizational process went smoothly, and all that was left for us, besides an information meeting hosted by TUMPrep in May, was to welcome our three students in July and begin our research.

The projects and the research conducted

To provide insight into what our three students accomplished, we will present a brief overview of the two projects, along with some of the results they produced. Although they did not have much research experience, we were pleasantly surprised by the work they managed to produce in such a short time. First, let us look at the landslide simulations that Aidan Chadha and James Tay worked on.

Earthquake simulation

To start with, we should perhaps discuss what we mean exactly by landslide simulations. The motivation there comes as part of the broader ChEES-2P project, which generously contributes to the funding of our chair. This project covers simulations of broader geohazardous events such as earthquakes, tsunamis, volcanic eruptions, glacier hazards, and, of course, landslides. Landslides can be the result of earthquakes or can cause further seismicological events, and can result in tsunamis if they collapse into large bodies of water. As such, we (by which I mean Mario Wille specifically) had already supervised a thesis on the subject of landslide simulation by Nikita Mashaev [1], which modeled landslides by the well-known Shallow Water equations supplemented by a friction term derived from the Voellmy-Salm rheological law [2]. After all, what are landslides if not the earth behaving like a particularly viscous incompressible fluid? This model had already been implemented in ExaHyPE 2 with the high-order ADER-DG solver with a-posteriori Finite Volume limiting, which is needed to handle numerically unstable areas, which can be caused, for example, by wetting-drying along the moving front. As we've alluded to previously, however, landslides can result in tsunamis, and the simulation of said resulting tsunamis was one large topic of interest that was just waiting for a motivated student to take it

From the Länd

**Baden-Württemberg
is THE LÄND.**

From the Länd – our regular report from Heilbronn

With the opening of the CIT branch in Heilbronn more than four years ago, a lot of things have happened. To many of us, this was seen as the dawn of a new era, most remained neutral, however, and to some, it was just yet another millstone around the neck. Four years have passed since then, and most of the professorships have been filled. TUM CIT has been successfully established in the far distant federal state of Baden-Württemberg (aka The Länd), the number of courses that are offered is growing, and new industry cooperations and research projects have been established. Feedback from students is very positive (also some colleagues claimed that there is still „Luft nach oben“), which on the other hand leads to rapidly growing numbers of student so we must be careful not to run into another Garching in terms of both room and staff capacities. Hence, as always, every success story comes with its little problems, which in turn reinforces the sceptics' opinion – „I told you so“. Therefore it is important to take everyone on board and to foster communication and cooperation between all colleagues in Munich, Garching, and Heilbronn alike (and Garmisch as well when we will move closer to Austria). This will probably be one of the most important tasks in the upcoming years.

What can we do to get to know each other better?

Heilbronn was first introduced to a broad audience of professors at the CIT retreat 2023, where Stephan Krusche and Carsten Trinitis made a passionate plea for the location. With more professors being hired, more joint project between both Garching and Heilbronn were started, and ties were strengthened. The next important step was the annual CIT retreat 2025 in Heilbronn which was an opportunity for many colleagues to travel there for

- *Implementierung und Validierung eines quantengestützten Optimierungsmodells für Wasserstoffsysteme*
by Prof. Dr. Helena Liebelt, Insitute Future Technologies,
Technische Hochschule Deggendorf

You can find more details about these projects at

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

We are looking forward to seeing you!

Your KONWIHR-Group

on.

Into the picture comes Aidan Chadha, starry-eyed and eager to see Munich, an undergraduate in Computational Modeling and Data Analytics at Virginia Tech. What more can a supervisor ask for? The requirements were clear then; we had a landslide model based on the Shallow Water equations, and we knew how to simulate tsunamis (more Shallow Water equations). All that was left was to combine the two. There are two ways to combine these: the first is to use a singular PDE containing the terms for both models, and the second is to use two separate PDEs, each of which is handled by its own solver that communicates with the others. The former approach is simpler to implement, however, since we are using ADER-DG with a-posteriori FV limiting, it reduces the areas which can be simulated with the high-order ADER-DG solver. If both models are contained in a singular PDE, then any area where either of them is unstable must be resolved with finite volumes. Separating the two models by contrast means that if one of the two models is unstable, the other can still be resolved using the high-order solver. This, however, requires four solvers, two ADER-DG and two FV, each of which combines with two of the others. Aidan implemented and tested both variants, and while the latter was quite a bit more effort, it did, in fact, show benefits, as the singular model showed asymmetric tendencies caused by the projections back and forth between the ADER-DG and FV solvers due to the constant limiting.

But exactly how certain can we be of these models' results? That's the question we asked our second visiting student, James Tay. James Tay's consisted of setting up an Uncertainty Quantification (UQ) workflow for Bayesian inference of the parameters of Aidan's landslide simulations by combining the UM-Bridge UQ interface with our own ExaHyPE 2 hyperbolic PDE engine. That's a bit of a mouthful, so perhaps we should start by elucidating some of the words in the previous sentence. Let's start with Uncertainty Quantification, as the name implies, this is the mathematical field that describes how confident we can be about a given outcome given some observed data. Say we suspect a friend of ours of cheating at dice. If

they roll one six, we might call that inconclusive. If they roll a hundred sixes in a row, however, our suspicion might turn into a quantified certainty. The Bayesian inference part of our confusing sentence then describes the two assumptions we are making as we observe our data. The first assumption is that our model is deterministic; if we flip the same coin in the exact same way, it should land on the same side each time. The second assumption is that our input data, on the contrary, is not deterministic but follows a normal distribution. Try as you might, you cannot flip the coin in the exact same way each time, and as such, it will on occasion land on the other side. The UM-Bridge UQ interface, then, is a piece of code developed by the team of chair alumnus and current associate Professor in Durham, Anne Reinarz [3], which helps perform said predictions for different software.

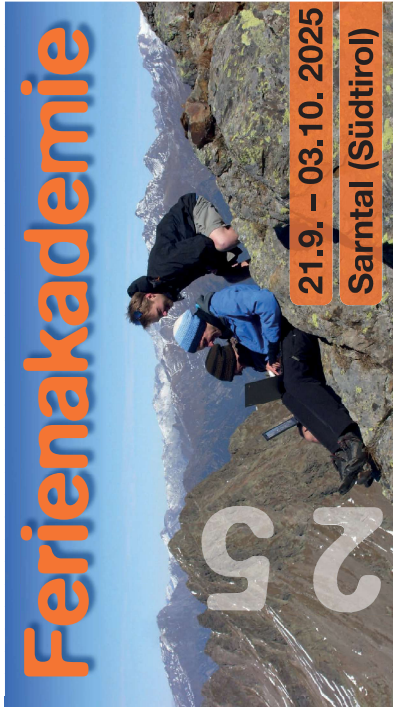
What is there to be uncertain about in landslide simulations, I hear you ask through page and time? No less than everything, of course! The exact position at which the landslide might trigger, the geometry of the domain when the landslide triggers, the quantity of material that could be made to shift, and the exact composition of the material are all things we likely have incomplete information about. It is the latter we chose to focus on, and the specific question we were looking to answer was: "given some data about a landslide which has already happened, can we deduce the material it was composed of?". James implemented two algorithms to quantify our uncertainties, the *Metropolis-Hastings algorithm* and the *multi-level Markov Chain Monte Carlo*. The details of these go beyond the remit of this humble paragraph, but in essence, they both generate a sequence of samples on which we can perform our Bayesian inference. To do so, we start with an initial guess about the material we might be using, perform a landslide simulation using Aidan's model and this initial guess, and assess how well the results align with the correct results. If the results are very close, we continue taking samples in the vicinity of our first guess. If not, we move on to an area where the errors are hopefully lower and continue there. Eventually, we have enough samples that we can try and fit them to a Gauss curve, which gives us both our best guess as to what the correct parameter was and a confidence in the form of that curve's standard deviation.

KONWIHR: New projects from round 2025-2



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round 2025-2. 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:

- *DynaTok: Flexible KV caching for selectively changing tokens during LLM training* by Prof. Dr. Timo Baumann, Computer Science and Mathematics, Ostbayerische Technische Hochschule (OTH) Regensburg
- *Jump-robust and GPU-supported Solvers for Geophysical Flow Problems* by Prof. Dr. Harald Köstler, Computer Science 10 - System simulation(LSS), FAU
- *Managing Centra Data Structures in Distributed Path Tracing Applications: Porting Recent Stochastic Methods to Compute Cluster Rendering* by Prof. Dr.-Ing. Kai Selgrad, Computer Science and Mathematics / Computer Graphics, Ostbayerische Technische Hochschule (OTH) Regensburg
- *Mechanistic Simulations of Adaptive Redistribution under Global Change: A Scalable HPC Workflow for Inferential and Predictive Movement Ecology* by Prof. Dr. Ralph Kühn, Chair of Zoology, TUM School of Life Sciences
- *Enabling FAIR Digital Objects: Semantic Metadata Pipelines for HPC Research Data* by Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Stemmer, Chair of Aerodynamics and Fluid Mechanics, Technical University of Munich



Ferienakademie

2025

21.9. – 03.10. 2025

Sarntal (Südtirol)

Kurz Thema	Dozent/innen	Fachrichtungen (und Fachbereiche)
1 Medien, Algorithmen, Randomness, online algorithms	B. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
2 Innovation, Learning with Gaussian Mixture Models, Deep Learning, Reinforcement Learning	S. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
3 Building the Internet of Cells, with Synthetic Biological Communication	H. Brack, München A. Brack, Erlangen	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
4 Reasoning about Approximate Reasoning	M. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
5 Logic, Smalltalk Physics, for Games	D. Brack, Stuttgart A. Brack, Erlangen	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
6 Abstracting a Game World and Cross-Game Semantics for a Parallel World	H. Brack, München S. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
7 Wide Bandwidth and Ultra-Wide Bandwidth Semantics for a Parallel World	J. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
8 Quantum Computing: From Power to Production	C. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
9 Quantum Computing: From Power to Production	A. Brack, Erlangen	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)
10 Quantum Computing: From Power to Production	B. Brack, Stuttgart	Informatik, Wirtschaftsinformatik, Games Engineering, Software Engineering (Bachelor ab dem 1. Studiengang oder Master)

Bewerbungsschluss 1. Mai 2025



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg



Technische Universität München



Universität Stuttgart

www.ferienakademie.de

Abbildung 2: Das Programmposter der Ferienakademie 2025.

Indeed, both algorithms were able to find the correct parameter to within a few percentage points and could be similarly applied in the future to any number of other parameters for all kinds of different simulations. Quite the proof of concept and quite the nifty tool to have access to in the future if I may say so myself.

NeuralNets Dual Space

The second project, which Joshua Cheng worked on, concerned itself with feedforward neural networks and using optimal transport theory to map between different parameter probability distributions. This was done to better understand the difference between distributions defined by us and the resulting distribution after training with gradient descent, in particular, backpropagation.

We should first take a few steps back for those of you less familiar with the topic of machine learning. Deep learning methods have proven successful in many different fields, such as image generation (DALL-E, Midjourney), natural language processing (GPT), and operator learning (DeepONet, FNO), to name a few. The process of gradient optimization by backpropagation has been a key factor in its success. However, this training process and the resulting models are still difficult to understand, with the networks often referred to as "black-box models". Gaining a better understanding of the algorithms and models used in deep learning is an important scientific task.

To train neural networks means to find good parameters based on data. There are some existing mathematical connections between the input space (or data space) and the parameter space (or weight space), namely, they are dual to each other [4]. With this in mind, a method called "sampling where it matters" (SWIM) [5] was developed in our group. SWIM makes the connection between data and parameters even more explicit by taking an approach different from backpropagation when constructing feed-forward networks: For each neuron, one samples a pair of points from the dataset and constructs the weight and bias parameters using this pair. This means the parameter space is directly related to the input space (specifically, the space of pairs of input

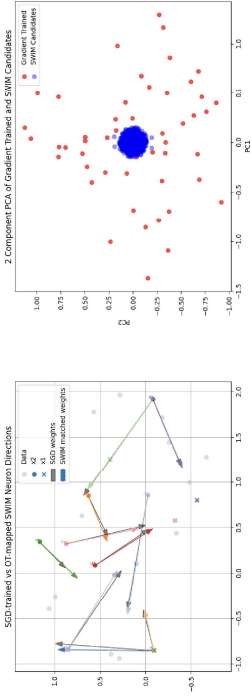


Figure 1: On the left, we see for a 2D toy dataset that the gradient-trained weights and the data-constructed weights from the optimal transport map are quite similar. On the right, we see how weights constructed through data are centered closer to the origin than gradient-trained ones.

points). However, the seemingly reduced parameter space is as expressive and flexible as regular neural networks (proven in [5]). This means that one can more explicitly explore the connection between the input and parameter spaces.

The focus of Joshua’s work was to create a map from the resulting parameter space obtained through iterative optimization (SGD, Adam optimizers) to the parameter space explicitly defined by the input space sampling method (SWIM, [5]). Finding good maps can be used to identify pairs of points in our dataset that are important for the training, and from this, refine the distributions in SWIM. Additionally, this would enable us to better understand the gradient optimization techniques and explain the resulting model more effectively. An interesting extension of this is to create such mappings during training iterations and see how the emphasis on different data points changes over the iterations. Finally, we are also interested in the inverse map, where we start with the weights constructed by SWIM and improve upon such weights by mapping them to the parameter space induced by optimization.

Dieses Jahr hatte die Ferienakademie mit einer auffällig hohen Zahl an kurzfristigen Absagen zu kämpfen, die manche Kurse empfindlich ausgedünnt haben. Andere Kurse blieben erstaunlicherweise komplett verschont. Die anwesenden ließen sich davon den Spaß nicht verderben, und legten sich dafür umso mehr ins Zeug. Die Krankheitsentwicklung dieses Jahr ließ zudem auch keinen Grund zur Klage. Dafür war das Wetter während der ersten Woche durchwachsen. Damit blieb reichlich Gelegenheit, sich der Kursarbeit zu widmen. Pünktlich zum mittleren Wochenende drehte sich das Wetter dann, und gerade rechtzeitig zur Tageswanderung konnten wir mit ordentlich Sonne rechnen – auch wenn es schon relativ kalt war. Die Bilanz war sehr erfreulich: 164 Teilnehmer konnten auf eine erfolgreiche Programmteilnahme 2025 zurückblicken.



Abbildung 1: Teilnehmer der Ferienakademie auf dem Weg zum Gipfel. Foto: M. Petter, 2025

Die Planungen für die neue Runde laufen inzwischen auf Hochtouren, und wir freuen uns schon auf eine ebenso schöne wie erfolgreiche Ferienakademie 2026. Alles Weitere unter <https://ferienakademie.de>.

Michael Petter

Ferienakademie 2025

FERIENAKADEMIE

Auch im Herbst 2025 fanden wir uns wieder im schönen Samtal in Südtirol zusammen, um gemeinsam mit der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart die Ferienakademie nun schon zum 41. mal ein spannendes Kursprogramm für 200 Studenten und Dozenten zu veranstalten. Dieses Jahr hatten wir 10 Kurse (siehe auch <https://ferienakademie.de/kurse-2025/>):

1. Moderne Algorithmik: Randomisiert, online, approximativ
2. Innovative Learning with Generative AI: Developing Intelligent Educational Applications
3. Building the Internet of Cells with Synthetic Molecular Communication
4. Random Material Microstructures Meet Data/Physics-driven Methods
5. Let's Play! Simulated Physics for Games
6. Achieving a Climate Neutral and Circular Economy in a Polarized World
7. Wide Bandgap and Ultra-Wide Bandgap Semiconductors: From Power Electronics to Quantum Materials
8. Quantencomputer: Vom Bau bis zur Anwendung
9. Context-based mixed reality support for production environments
10. Acoustical Signal Analysis and Processing

Over the eight weeks, Joshua conducted initial research into previous work, including a Bachelor's thesis by one of our students [6], and also familiarized himself with optimal transport theory. He implemented the Sinkhorn-Knopp algorithm from optimal transport and LAPJV as a scalable linear assignment problem (LAP) algorithm. We trained neural networks with gradient methods and applied the algorithms to map from a weight and bias in the trained neural network to a weight and bias constructed by a pair of data points. Some of his results can be seen in the figure. We found that a mapping was relatively easy to find for low-dimensional toy data sets. However, when the gradient-trained weights had different magnitudes than the bias, the mappings we acquired were less than ideal. From the right side of the figure, we see that the magnitudes of weights from gradient-trained vs. weights constructed from data points are quite different, partly explaining the problem of finding good maps. From this, we find that the dependency between weights and biases in algorithms such as SWIM can become problematic when a well-fitted neural network requires weights and corresponding biases with different magnitudes. This is a promising insight from Josh's work, introducing several interesting future work directions.

Hopefully, this has given the reader a little bit of insight into what the TUM PREP experience is, at least for us. We would like to take this opportunity to thank the three students, Joshua Cheng, James Tay, and Aidan Chadha, for their contributions, as well as the organizational team behind TUM PREP, who made our job much easier.

Felix Dietrich
Erik Lien Bolager
Mario Wille
Marc Marot-Lassauzaie

1. N. Mashaev: *High-Order Landslide Simulation based on the Voellmy-Salm Friction Model with Stiff Source Term* <https://mediatum.ub.tum.de/1782165>
2. B. Salm, *Flow, flow transition and runout distances of flowing avalanches*, Annals of Glaciology, vol. 18, pp. 221–226, 1993.
3. Seelinger, L., Cheng-Seelinger, V., Davis, A., Parno, M., & Reinartz, A. *UM-Bridge: Uncertainty quantification and modeling bridge*, Journal of Open Source Software, 8(83), 4748, 2023.
4. L. Spek, T. J. Heeringa, F. Schwenninger, C. Brune: *Duality for neural networks through Reproducing Kernel Banach Spaces*. Applied and Computational Harmonic Analysis, Volume 78, 2025.
5. E. L. Bolager, I. Burak, C. Datar, Q. Sun, F. Dietrich: *Sampling weights of deep neural networks*, NeurIPS, 2023.
6. D. Bouassida, *Converting Neural Networks to Sampled Networks*, TUM Bachelor thesis, 2023.

LRZ baut aus



Der Freistaat Bayern investiert bis zu 500 Millionen Euro ins Leibniz-Rechenzentrum (LRZ): In den nächsten Jahren werden damit das Rechengebäude erweitert sowie die Technik zur Stromversorgung und Kühlung ergänzt, damit die nächsten Generationen von Hoch- und Höchstleistungsrechnern, KI-Clustern und Quantensystems zuverlässig betrieben werden können. „Das ist ein großartiger Schub für die Wissenschaft und Forschung in Bayern und damit für die Innovationskraft im Land“, sagt Prof. Helmut Reiser, stellvertretender Leiter des LRZ. „Wir freuen uns sehr, dass wir mit dieser großen Unterstützung das LRZ ausbauen und resilient für die Zukunft aufstellen können.“

Die ersten Bauarbeiten haben bereits begonnen: So lud Anfang Oktober das Bayernwerk, eine Tochter des Stromversorgers E.ON, nach Garching zum Spatenstich für das LRZ-Umspannwerk. Dieses wird in der Nähe der Speicherbibliothek der Bayerischen Staatsbibliothek (BSB) am Campus entstehen. Ab 2028 wird es mit zwei Trafos eine Kapazität von jeweils 50 Megavoltampere (MVA) für eine redundante, sichere Stromversorgung des LRZ bereitstellen. Mehr zum Ausbau: <https://tiny.badw.de/rtfvX4>.

Susanne Wieser

Warmlaufen für Blue Lion



Der Blaue Löwe schickt seine Jungen vor: Für Test- und Trainingszwecke hat Hewlett Packard Enterprise (HPE) gerade Blue Cubs (engl: kleine Löwen) am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) installiert. Das Testsystem verfügt über acht Grace Hopper-Superc Chips in zwei Knoten mit jeweils vier GPU und soll Mitarbeitende und Anwenderinnen auf den Start von Blue Lion, den LRZ-Superc Computer der nächsten Generation, vorbereiten. Forschende können damit experimentieren, erste Codes portieren und Workloads einrichten. Weil die Komplexität von Superc Computern zunimmt und die Kosten für IT-Technik steigen sind Testsystem und Trainingsphase ausdrücklich Teil der Beschaffung des Superc Computers, der voraussichtlich Ende 2026 installiert wird.

Die Anfangsinvestition und der Betrieb von Blue Lion belaufen sich auf 250 Millionen Euro und werden vom Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt (BMFTR) sowie dem Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (StMWK) finanziert. Mehr zum Testsystem: <https://tiny.badw.de/r20yrj>, mehr zu Blue Lion: <https://tiny.badw.de/zr3zwm>.

Susanne Wieser

SC 25: Mal richtig einheizen!



Die Supercomputing Conference 2025 (SC25) fand vom 16. bis 21. November in St. Louis, Missouri statt. Gerade noch rechtzeitig fand drei Tage vorher auch der US-Shutdown ein Ende, und so war bis auf wenige Ausnahmen wieder die ganze HPC-Community versammelt. Unter dem energiegeladenen Motto „HPC Ignites“ glühte die Konferenz im besten Sinne: Mit beeindruckenden 16.500 Teilnehmenden und 560 Ausstellern war die SC25 erneut ein Gigant unter den Fachkonferenzen. Das NHR@FAU war mittendrin und hat mitgefeuert!

Jan Laukemann und Georg Hager enthüllten in ihrem Tutorial „Core-Level Performance Engineering“, was wirklich im Herzen eines CPU-Kerns passiert, wenn Code ausgeführt wird. Angesichts des „Old-School-Themas“ (keine KI, kein Quantum Computing, nicht einmal Storage oder Workflows) war es etwas überraschend, aber auch erfreulich, dass der Raum kaum groß genug für den Andrang an Teilnehmern war. In einem weiteren Tutorial „Performance Engineering for Sparse Linear Solvers“ zeigten Georg Hager und Christie Alappat (zusammen mit Partnern der TU München und TU Delft), wie man extrem dünn besetzte lineare Gleichungssysteme in den Griff bekommt. Beide Tutorials boten umfangreiche Hands-on-Sessions – perfekt für alle, die nicht nur zuhören, sondern auch tüfteln wollten. Georg Hager stellte zudem seine Sicht auf ressourcenbasierte Performancemodellierung beim „5th International Symposium for the Quantitative Co-Design of Supercomputers“ vor. Und Jean-Yves Verhaeghe landete mit seinem Poster „ParaViz3D: MPI Trace Visualization with 3D Video“ einen Publikumsmaximierten. Wer hätte gedacht, dass MPI-Traces in 3D so fesselnd sein können?

Am „Bavarian Supercomputing“ Messestand – einem Gemeinschaftsstand von LRZ, LMU, TUM, NHR@FAU und dem Munich Quantum Valley – präsentierte das NHR@FAU seine Software-Highlights, darunter die ClusterCockpit-



Abbildung 1: Das Erlanger IndySCC-Team „FAUltier“ mit ihrem Betreuer Jan Laukemann. (Bild: Lillie Elliot, SC Photography)

Monitoring-Plattform, das OSACA-Performance-Modelling-Tool und insbesondere die LIKWID-Tool-Suite, persönlich vorgestellt vom Hauptentwickler Thomas Gruber. Ein Quiz zu HPC und Computergeschichte, gesponsert von der finnischen Quantencomputerschmiede IQM, sorgte für zusätzlichen Spaß und so manche knifflige Denkminute.

Mut und Ausdauer bewies das FAU-Studierendenteam „FAUltier“, das erstmals am remote ausgetragenen IndySCC-Wettbewerb teilnahm. Nach monatelanger Vorbereitung – optimieren, üben, verfluchen, optimieren, Kaffee trinken, weiter optimieren – stürzten sie sich auf der Messe in einen 48-Stunden-Benchmark-Marathon. Am Ende ging der Sieg zwar an die Zhejiang University aus China, aber das FAUltier-Team kehrte reich an Erfahrungen, Erkenntnissen, etwas Schlafmangel und der Lust auf mehr zurück.



Abbildung 1: Diskussions-Panel: Die beiden KONWIHR-Sprecher, Prof. Hans-Joachim Bungartz (re) von der TUM und Prof. Gerhard Wellein von der FAU (2 v. re), diskutieren am LRZ mit den Professoren Michael Manhart (TUM) (li) und Fakher Assaad (Mi., Universität Würzburg) über die Vorteile von KONWIHR. Foto: V. Hohenegger/LRZ

Das ganze Gespräch über Hochleistungsrechnen in Bayern und die technischen Entwicklungen gibt es hier zum Nachlesen: <https://www.lrz.de/news/detail/konwihr-kein-geld-verplempern>.

Susanne Wieser

„Kein Geld verplempern durch den Einsatz von ineffizienter Software“



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Effizienz und Nachhaltigkeit fürs High Performance Computing stehen im Mittelpunkt von KONWIHR: Dafür fördert das Programm seit 25 Jahren die Entwicklung von wissenschaftlichen Codes mit Geld und Expertise.

Erfahrungen fürs High Performance Computing (HPC) in Bayern auf- und ausbauen: Das war und ist das Ziel des Kompetenznetzwerkes für wissenschaftliches Hochleistungsrechnen, kurz KONWIHR, das 2000 zum Start des ersten nationalen Höchstleistungsrechners am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) als Förderprogramm in Bayern initiiert wurde. KONWIHR hat in den letzten 25 Jahren rund 300 Forschungsgruppen bei der Entwicklung und Optimierung von Codes unterstützt – nicht nur mit Geld, sondern vor allem durch die Erfahrung der Computerspezialistinnen des Regionales Hochleistungsrechnen (RRZE), das heute ein Standort für Nationales Hochleistungsrechnen ist (NHR@FAU), sowie des LRZ, das sich seinen Namen als europäisches Supercomputing-Zentrum machte.

Nebenbei entstand ein lebendiges Netzwerk aus Wissenschaftlerinnen und Forschenden, die mit Hilfe von Hoch- und Höchstleistungsrechnern Wissen schufen und gleichzeitig Codes, frei verfügbare Programme hinterließen, die heute noch eingesetzt werden. „KONWIHR-Projekte sind meistens klar umrissen und zielen auf ein konkretes, technisches Detail der Forschungsarbeit, zum Beispiel auf die Erweiterung der Funktionalität von Software oder deren Implementierung auf einem Parallelrechner“, erläutert Prof. Hans-Joachim Bungartz, einer der Sprecher des Netzwerks, sein Kollege Prof. Gerhard Wellein ergänzt: „Sie werden meist von einer Gruppe, einem Wissenschaftler oder einer Professorin beantragt. Wir haben sogar eine Stammkundschaft, die regelmäßig Anträge stellt. Das ist der Tatsache geschuldet, dass viele Arbeitsgruppen über Jahrzehnte HPC-Software weiter entwickeln und dabei die Promovierenden oft wechseln.“

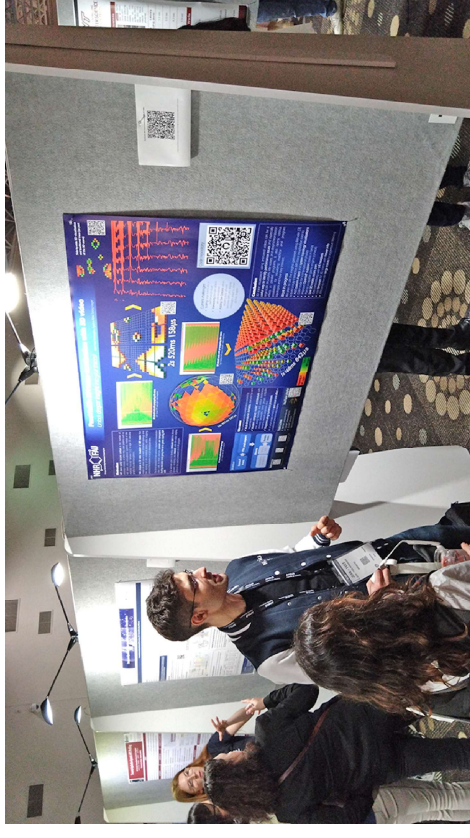


Abbildung 2: Jean-Yves Verhaeghe zeigte auf seinem Research Poster, wie man MPL-Traces mit 3D-Video verheiraten kann. (Bild: G. Hager)

In guter Gesellschaft fanden sich die vier Studierenden, die ein Reisetipentium des „Women in HPC“-Chapters im NHR-Verbund gewonnen hatten. Mit ihren vier Mentoren erkundeten sie die Konferenz, die gerade für junge „Neulinge“ überwältigend sein kann. Insgesamt war die SC25 in St. Louis wieder einmal ein Ereignis, das Funken sprühte – ganz im Sinne von „HPC Ignites“: voller Energie, neuen Kontakten, inspirierender Gespräche und bleibender Eindrücke. Wir haben ein paar kleine Fünkchen beigetragen und freuen uns schon aufs nächste Mal!

NHR@FAU Team

25 Jahre HPC am LRZ



Von technischen und wissenschaftlichen Highlights: 25 Jahre Hochleistungsrechnen am LRZ

Im Jahr 2000 stieg das LRZ mit dem HLRB 1 erstmals in das nationale High Performance Computing (HPC) ein. Der Supercomputer brachte es mit 1344 Hitachi-Prozessoren auf 1653 GFlop/s und markierte einen Meilenstein in der Geschichte des Rechenzentrums, das seit 2007 im Gauss Centre for Supercomputing (GCS) europäisch und international vernetzt ist. Seitdem prägen technische Innovationen und wissenschaftliche Spitzenleistungen das Supercomputing am Standort.

Aha-Effekte für die Forschung

Die Rechenleistung der LRZ-Systeme wuchs rasant, doch im Vordergrund sehen die wissenschaftlichen Ergebnisse:

- Ein TUM-Team modellierte die menschliche Lunge neu und zeigte ihre schwammartige Struktur.
- LMU-Forschende simulierten die Entstehung der Kontinente - heute im American Museum of Natural History zu sehen.
- Das IKite-Projekt rekonstruierte 2013 Stammbaumstrukturen von Insekten und Vögeln.
- Für Millenium TNG wurden wiederholt Simulationen Dunkler Materie gerechnet.
- SuperMUC-NG unterstützte 2020 die Suche nach Wirkstoffen gegen Covid-19.

Auch großskalige Turbulenzsimulationen – 2021 und erneut 2025 – zeigen den wachsenden Bedarf an Rechenleistung: mehr Kerne, mehr Speicher, mehr Daten. Die Nachfrage der Wissenschaft steigt ungebremst.

Unterstützung bringt Vielfalt ins HPC

Simulation und Modellierung haben sich als dritte Säule der Forschung etabliert. Am LRZ rechnen heute nicht nur Astrophysik und Ingenieurwissenschaften, sondern auch Biologie, Medizin, Mathematik oder Klimaforschung. Wichtige Treiber dieser Entwicklung sind das Kompetenznetzwerk KONWIHR und seine Unterstützung bei Code-Optimierung und HPC-Know-how. In Zukunft werden KI-Methoden und interdisziplinäre Projekte das Feld weiter verbreitern.

Forschen in eigener Sache

Da Moore'sches Gesetz und Dennard-Skalierung an Grenzen stoßen, wächst die Bedeutung energieeffizienter und intelligenter Architekturen. Das LRZ arbeitet daher daran, nicht das schnellste, sondern das beste System für die Wissenschaft zu entwickeln. Eine Schlüsselinnovation ist die vom LRZ mit IBM eingeführte Heißwasserkühlung, heute Standard im Supercomputing. SuperMUC-NG nutzt sie vollständig und führt Abwärme als Heizenergie zurück.

Die neuesten Erweiterungen kombinieren rund 27.000 CPU mit etwa 1000 GPU, verbinden SuperMUC-NG mit Quantencomputern und testen erstmals photonische Prozessoren, die mit Licht arbeiten und neue Hybridarchitekturen ermöglichen. Mehr Stimmen und der vollständige Artikel <https://www.lrz.de/news/detail/25-jahre-hpc-am-lrz>.

Susanne Wieser