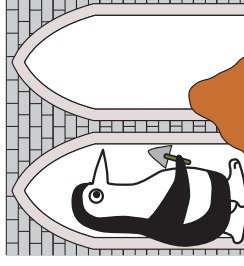


Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
IAS workshop on Advancing Scientific Machine Learning in Industry	8
planq baut Quantencomputer fürs LRZ	11
IQM liefert europäischen Quantencomputer ans LRZ	13
Next-Generation Earthquake Modelling	14
NHR@FAU bei der SC24 – Think big!	16
Auf Fritz und Alex folgt Helma AMD MI300X:	21
Eine Analyse der neuen GPU-Generation	23
How to simulate a molecule?	25
UK Student Cluster Competition auf der CIUK29	29
Ferienakademie 2024 - eine runde Sache	31
VDI Prize Munich goes to: Dr. Christina Mayr!	34
Notiz*Notiz*Notiz	35



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/startseite/>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.03.2025**

* Quartl: 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

Es weihnachtet. Und darum soll – ausnahmsweise – mal nicht die bissige Sottise im Editorial den Ton angeben, sondern die grenzenlose Freude über ein wunderbares Ereignis, über das am zweiten Adventswochenende alle Medien berichteten. Und ich meine ganz bestimmt nicht die Nachricht, dass sich zu unseren drei „Nun-ja“ Kanzlerkandidaten nun auch noch eine vierte „Oh-Schreck“ Kanzlerkandidatin gesellt hat. Nein, Notre Dame ist zurück – Wahrzeichen der Stadt der Städte, der Grande Nation, ja des Abendlands. Was für ein Geschenk, was für ein Glück!

Normalerweise erreichen uns dieser Tage ja primär schlechte Nachrichten. Umso willkommener ist deshalb diese Botschaft. Eigentlich dachte ich ja, meine seit Schulzeiten ausgeprägte Frankophilie sei nicht mehr zu toppen. Doch mein Mitleiden angesichts der schrecklichen Bilder von vor fünfzehn Jahren und mein Mitfreuen über die Auferstehung jetzt haben sie nochmals auf eine andere Ebene gehoben. Glückwunsch und danke, liebes Frankreich! Was für ein Kraftakt, was für ein kollektiver Gleichklang – bei allen Problemen, mit denen unser Nachbar im Westen gerade zu kämpfen hat. Und was für ein Gegensatz: Während die Möchtegern-Supermacht in unserer östlichen Nachbarschaft Frieden, Freiheit und Menschenrechte mit Füßen tritt, mit Volldampf ins Mittelalter düst, einen seiner Nachbarn mit einem Vernichtungskrieg überzieht und dabei geradezu in blinder Zerstörungswut alles kurz und klein bombt, baut Frankreich wieder auf, wird uns in Paris ein kunsthistorisches, kulturelles und identitätsstiftendes Juwel zurückgegeben, das schon für immer verloren schien. Hätte es noch eines weiteren Beweises bedurft, dass es diesen Blödsinn einer multipolaren Welt nicht braucht, jedenfalls solange die anderen selbsternannten Pole nur Mist und Leid produzieren – hier ist er!

Doch zurück zu Notre Dame. Erinnern wir uns. Unmittelbar nach der Katastrophe im April 2019 hatte sich Präsident Macron weit aus dem Fenster gelehnt mit einem außergewöhnlichen Versprechen: In gerade mal fünf Jahren werde man Notre Dame wiederaufbauen, schöner und erhabener als je zuvor werde die Kathedrale aller Kathedralen erstrahlen. Geben wir's ruhig zu: Angesichts unserer Erfahrungen mit dem Berliner Flughafen, mit Stuttgart 21 und ähnlich großen Prestigeprojekten glaubte wohl niemand ernsthaft daran, dass dieses Versprechen gehalten werden könne. Und in der Tat: Unsere staatlichen Bauämter hätten vermutlich schon mal ein Jahrzehnt gebraucht, um alle rechtlichen Randbedingungen zu klären. Schließlich könnte ja die Kathedrale von Reims gegen die Kraftanstrengung protestieren und klagen, weil es eine einseitige Bevorzugung der Hauptstadtkirche sei – und Rechtsicherheit geht ja bekanntlich für unsere Bürokratie über alles. Ferner seien im Brandschutz neue Maßstäbe gesetzt worden, so verlautet es aus Paris. Der Brandschutz hierzulande hätte auch ohne jeden neu gesetzten Maßstab Jahre in den Sand gesetzt, um jeder Verordnung gerecht zu werden. Bei Notre Dame wurden aus den versprochenen fünf Jahren zwar fünfzehn, aber das gilt schon noch als „Versprechen gehalten!“. Und somit steht man als Deutscher sprachlos am Spielfeldrand, staunt – und freut sich mit und für ganz Frankreich.

Dann heißt es immer, die Bereitschaft zum Engagement werde in der Gesellschaft immer geringer. Hier nun offensichtlich das krasse Gegenstück: Gut achthundert Millionen an privaten Spenden waren schnell zusammengetragen, knapp achthundert Millionen wurden, so heißt es, bis zum Tag der Wiedereröffnung ausgegeben. Chapeau! Ok, unter den Spendern war auch ein Bernard Arnault, laut Forbes 2024 mit einem Vermögen von immerhin über 230 Milliarden Dollar der reichste Mann der Welt, der schon ein paar Milllionchen vom Haushaltsgeld abzweigen kann. Aber nicht immer zeigen sich die Reichen ja von ihrer spendablen Seite. Insofern danke!

Offensichtlich hat sich in Frankreich auch die Fraktion der Weltverbesserrinnen und Weltverbesserer zurückgehalten. Ja, man hätte mit diesen 800 Millionen auch anderes Sinnvolles tun können, z.B. im Kampf gegen Armut, Hunger oder Krieg. Aber auch in dieser Größenordnung wird in Deutschland wie in Frankreich immer wieder viel Unsinniges gemacht. Insofern Glückwunsch zu dieser höchst wertvollen Investition in unser kulturelles Erbe!

Geradezu bewegend auch, mit welcher Leidenschaft und besonderen Einsatzbereitschaft die Pariser Feuerwehrleute an jenem Tag um ihre Kathedrale kämpfen, mit welcher Leidenschaft sich danach Hunderte von Handwerkern und Künstlerinnen an Wiederaufbau und Rekonstruktion machten, und mit welchem Respekt und welcher Dankbarkeit die französische Gesellschaft diesen Einsatz würdigt. Selten haben wirklich nahezu alle so an einem Strang gezogen.

„Fluctuat nec mergitur“, oder „Il est battu par les flots, mais ne sombre pas“ – so lautet seit Jahrhunderten das Motto der Hauptstadt Frankreichs. Und selten war es so lebendig, so kraftvoll, so erfolgreich wie in diesen Tagen der Wiedereröffnung der Kathedrale Notre Dame. Schließllich: Sogar der frisch gewählte amerikanische Präsident, unser aller Freund Donald Trump, erlag irgendwie dem Charme von Notre Dame, reiste an und verzichtete sogar mal auf seine rote Krawatte.

Doch nun wünscht Ihnen die gesamte Quartl-Redaktion Frohe Weihnachten, ein paar ruhigere Tage zwischen den Jahren, und dann einen guten Rutsch in ein hoffentlich rundum erfreuliches Neues Jahr 2025!

Zunächst aber wünsche ich natürlich viel Spaß mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.



Picture: Harryarts, Freepik

Iterationsschleife

N=52
04.12.2024

Am 11. September 1973 putschte in Chile^a das Militär. Dem Putsch gingen innenpolitische Auseinandersetzungen voraus. Im Jahr 1970 war der Kandidat der vereinigten Linken^b, Salvador Allende^c, knapp zum Präsidenten gewählt worden. Die vereingite Linke umfasste praktisch alle linken Parteien des Landes und damit auch die kommunistische Partei Chiles. Allendes Wahl wurde weltweit als Erfolg der Linken bewertet und reihte sich ein in eine Serie von linken Wahlerfolgen in der westlichen Welt^d. Gleichzeitig mussten die USA nach jahrelangen Verhandlungen im Pariser Abkommen^e zusagen, ihre Truppen aus Südvietnam abzuziehen, was als Niederlage gegen die Kommunisten Nordvietnams wahrgenommen wurde.

Salvador Allende begann in seiner Amtszeit, wichtige Bereiche der chilenischen Wirtschaft zu verstaatlichen. Aus Sicht der konservativen Opposition und der USA stand er damit im Verdacht, den Kommunismus auf demokratischem Weg in Chile einzuführen.

^aChile: südamerikanisches Land, feiert den 18. September 1810 als Tag der Unabhängigkeit von Spanien.

^bDie Vereinigte Linke (Unidad Popular) umfasste die Sozialistische Partei, Kommunistische Partei, Radikale Partei und die Sozialdemokratische Partei

^cSalvador Allende (26. Juni 1908 – 11. September 1973), Chilenischer Präsident vom 24. Oktober 1970 bis zum 11. September 1973.

^dLinke Wahlerfolge um 1970: Harold Wilson (Großbritannien 31.3. 1966), Willy Brandt (Deutschland 28.9.1969), Bruno Kreisky (Österreich 1.3.1970), Olof Palme (Schweden 20.9.1970), französische Parlamentswahlen (4. und 11. 3. 1973)

^eDas Pariser Abkommen (27.1.1973) regelte den Ausstieg der USA aus dem Vietnamkrieg, der US-amerikanische Außenminister Henry Kissinger (27.5.1923 – 29.11.2023) und der vietnamesische Politiker Lê Đức Thọ (14.10.1911 – 13.10.1990) wurden 1973 dafür mit dem Friedensnobelpreis ausgezeichnet. Lê Đức Thọ verweigerte die Annahme des Nobelpreises mit der Begründung, dass in Vietnam noch kein Frieden herrsche und dass die Verleihung an Kissinger und ihn eine unakzeptable Gleichstellung des Aggressors und des Opfers der Aggression darstelle.

Das kubanische Beispiel ^a hatte deutlich gemacht, welche weitere Entwicklung im Westen zu befürchten war. Der Militärputsch in Chile war daher die aus der Sicht des kalten Krieges logische Reaktion. Im Rahmen des Putsches wurden tausende Menschen ermordet und zehntausende gefoltert. Etwa eine Million Menschen aus dem linken Parteienspektrum flüchteten aus dem Land. Ausläufer dieser Flüchtlingswelle erreichten auch Europa^b.

Am 18. Mai 1980 demonstrierten 600 Studenten friedlich in der südkoreanischen Stadt Gwangju für die Freilassung eines Oppositionspolitikers und die Aufhebung des Ausnahmezustands. Die Regierung sprach von einem Aufstand von Kommunisten. Es kam zu Auseinandersetzungen mit Polizei und Militär, die sich über mehrere Tage zogen. Am 27. Mai stürmten rund 20.000 Soldaten der südkoreanischen Armee die Stadt Gwangju. Zahlreiche Menschen wurden getötet oder gefoltert. Die genaue Zahl der Opfer ist unbekannt. Die Sterberate in Gwangju lag im Mai 1980 jedoch rund 2300 über dem langjährigen Durchschnitt^c.

^aKuba: karibischer Inselstaat, kämpfte zwischen 1868 und 1898 um seine Unabhängigkeit von Spanien die formal 1902 erreicht wurde. 1958 stürzte eine von Fidel Castro angeführte Revolution den Diktator Fulgencio Batista, 1960 brachen die USA ihr Beziehungen zu Kuba ab, 1961 landeten 1500 Exilkubaner mit Hilfe der USA in der Schweinebucht, scheiterten aber mit dem Versuch, Fidel Castro zu stürzen. Das Scheitern der Invasion in der Schweinebucht wurde dem amerikanischen Präsidenten John F. Kennedy als mangelnde Härte im Kampf gegen den Kommunismus ausgelegt. Verschwörungstheorien zu Kennedys Ermordung als Komplott von Exilkubanern gestern noch heute durch das Internet.

^bEtwa 4000 Chilenen fanden Asyl in Westdeutschland. Rund 2000 wurden in der DDR aufgenommen.

^cDie südkoreanische Schriftstellerin Han Kang beschreibt in ihrem Roman „Menschenwerk“ das Massaker und seine Folgen. Sie wurde dafür 2024 mit dem Literaturnobelpreis ausgezeichnet.

* Notiz * Notiz * Notiz *

Kontaktanzeigen:

Doppelter Staatsbürger nahe 50 mit Wohnsitz in England sucht neue Freunde, da er kein Interesse an rechten politischen Botschaften, teuren Elektroautos und privater Raumfahrt mehr hat. Zudem sollen seine Daten nicht für X-beliebige AI-Training verwendet werden. Bittet um Kontaktaufnahme auf Bluesky unter @tobiasweinzierl.bsky.social und um die öffentliche Kontaktaufnahme anderer X-Abtrünniger im Quartl.

VDI Prize Munich goes to:

Dr. Christina Mayr!



Since 1984, the VDI District Association of Munich, has honored outstanding engineering achievements with the VDI Prize. The award winners are selected on the basis of outstanding theses or exemplary concepts or technical innovations that demonstrate a high degree of innovation and a direct benefit for the economy and society. This year 2024, Christina Mayr is one of the award winner with her dissertation “*Crowd management based on direct communication technology*”, supervised by Prof. Dr. Gerta Köster (Hochschule München) and Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz - congratulations!



Figure 1: VDI award ceremony in Munich, <https://www.vdi-sued.de/vdi-vor-ort/vdi-preis,Dr.Christina.Mayr>,
Picture: VDI Tom Bauer

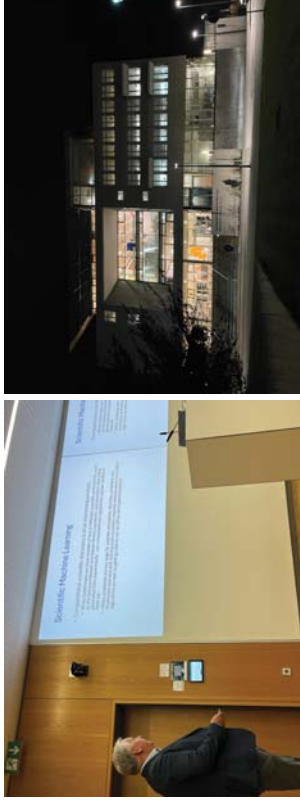
Am 3.12.2024 erklärte der südkoreanische Präsident Yoon Suk Yeol den Ausnahmezustand und mobilisierte das Militär. Er begründete das damit, dass die Opposition einen kommunistischen Aufstand geplant habe, um gemeinsam mit Nordkorea die Demokratie in Südkorea zu beseitigen. Noch in der Nacht zum 4.12. gelang es dem südkoreanischen Parlament trotz eines Versuchs des Militärs, eine Sitzung des Parlaments zu verhindern, in einer Abstimmung die Aufhebung des Ausnahmezustands zu fordern. Auch die USA forderten Präsident Yoon Suk Yeol auf, die Verfassung einzuhalten. Dieser kündigte nur Stunden nach der Ausrufung des Ausnahmezustands die Aufhebung an.

Hier stehen wir, 50 Jahre nach dem Putsch in Chile.

M. Resch

IAS workshop on Advancing Scientific Machine Learning in Industry

In October 2024, the Hans Fischer Senior Fellow Prof. Wil Schilders¹ organized a two-day workshop (15. and 16. October, 2024) on “Advancing Scientific Machine Learning in Industry” at the Institute for Advanced Study (IAS) at TUM, jointly with Dr. Dirk Hartmann from Siemens. The workshop was the “grand finale” of a very successful fellowship. The organization of the scientific programme and the day-to-day activities were done by the doctoral candidate involved in the fellowship, Chinmay Datar² at TUM.



Wil Schilders presenting Scientific Machine Learning (left), and TUM-IAS venue at night (right). Images created and copyright by Dirk Hartmann.

The workshop was dedicated to exploring recent advancements in the implementation of techniques from scientific machine learning. Leading experts in the field were present, who are actively engaged in refining these methodologies to ensure their practical viability and scalability, particularly in industrial sectors where digital and physical components converge. The goal of the workshop was to formulate a research roadmap for advancing scientific machine learning in industry, and to address application and industrialization challenges.

¹<https://www.ias.tum.de/ias/schilderswil/>

²<https://www.cs.cit.tum.de/en/sccs/people/people/chinmay-datar/>

Ferienakademie
2024
22.9. – 4.10.2024
Sarntal (Südtirol)

Topics

- 1** ChatGPT: Creating 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** Lets Play! Simulated Physics for Games
- 6** Climate Migration, Energy Transitions, and the Role of Science, Technology and Policy Instruments
- 7** Deep Learning in Image and Video Processing
- 8** Learning with Music: Signals and Spectra
- 9** Neural Language Processing: Computational Linguistics
- 10** Latent Biomimetic Methods in Solid Mechanics

Organisator:
T. Niekamp, nicke@cs.cit.tum.de
Chinmay Datar, chinmay.datar@cit.tum.de
J. Pfeifer, j.pfeifer@tcs.iaf.fhn-stgallten.ch

DozentInnen (und Fachlehrer)

DozentInnen (und Fachlehrer)	DozentInnen (und Fachlehrer)	FachlehrerInnen (und Fachlehrer)
S. Gombauer, Erlangen	S. Gombauer, Erlangen	Informatik, Mathematik (Bachelor im 1. oder 2. Semester)
H. Seitz, München	B. Brügge, München	Informatik, Software Engineering, Mathematik (Bachelor im 2. Semester oder Master)
J. Bernus, Siemens AG (GD)	J. Bernus, Siemens AG (GD)	Engineering, Informatik, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
A. Seitz, Siemens AG (GD)	A. Seitz, Siemens AG (GD)	Engineering, Informatik, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
A. Wörle, München	R. Heilig, Stuttgart	Physik, Ingenieurwissenschaften, Maschinenbau, Informatik (Master)
H. Köster, Erlangen	P. Schauer, Erlangen (GD)	Ingenieurwissenschaften, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
H.-J. Bungartz, München	H. Köster, Erlangen	Sozial-, Natur- und Ingenieurwissenschaften, Informatik (alle Präsemester)
M. Schreum, München	M. Schreum, München	Sozial-, Natur- und Ingenieurwissenschaften, Informatik (alle Präsemester)
A. Müller, Erlangen	A. Müller, Erlangen	Elektrotechnik, Informatik, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
E. Seebach, München	B. Yang, Stuttgart (SD)	Elektrotechnik, Informatik, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
M. Seifried, Stuttgart (GD)	M. Seifried, Stuttgart (GD)	Elektrotechnik, Informatik, Informatik (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
P. Hagen, München	P. Hagen, München	Mathematik, Informatik, Physik, Ingenieurwissenschaften, Simulationstechnologie (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
H. Seitz, Stuttgart	H. Seitz, Stuttgart	Mathematik, Informatik, Physik, Ingenieurwissenschaften, Simulationstechnologie (Bachelor ab 2. Semester oder Master)
B. Wolfrum, München	B. Wolfrum, München	Mathematik, Informatik, Physik, Ingenieurwissenschaften, Simulationstechnologie (Bachelor ab 2. Semester oder Master)

Dozent:
H.-J. Bungartz, München
M. Schreum, München
M. Seifried, Stuttgart
Dirk of Computer Science

Universität Stuttgart
www.ferienakademie.de

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
Technische Universität München

Bewerbungsschluss 1. Mai 2024

Abbildung 1: Das Poster der Ferienakademie 2024.

Das Jubiläum wurde in Form einer erweiterten Abendveranstaltung gefeiert. Neben Honoratioren aus dem Samtal waren auch verdiente Unterstützer der FA anwesend — allen voran die Gastgeber der mittlerweile fünf Gasthöfe im Tal, die uns jedes Jahr so toll bewirten. Auch einige Gäste der FA wie ehemalige treue Dozenten oder Gasthoforganisator*innen waren mit von der Partie. Dabei mussten/durften wir auch Dr. Herbert Ehler verabschieden, der als “Urgestein” nach 37 Jahren Ferienakademie (u.v.m.) heuer in den wohlverdienten Ruhestand wechselte. Eine gebührende Umrahmung stellte u.a. der Zauberauftritt von Prof. Bernd Brüggge dar.

Wir bedanken uns — auch im Namen der Studierenden — bei allen, die dazu beigetragen haben und auch immer noch beitragen und freuen uns schon auf die nächsten 40 Jahre.

Tobias Neckel

There were around 120 participants with around 40% international participants (from outside Germany), from around 20 countries all over the world. Representatives of major industries and start-ups (Siemens, Roche, ASML, Signify, BMW, 100Kelvin, Simscale, Robert Bosch GmbH, IDEKO), participated in the workshop. Research institutes (DLR, Max-Planck Institutes, Fraunhofer, German Research Center for Artificial Intelligence (DFKI)) were also well-represented, in addition to several universities.

George Karniadakis from Brown University (USA) talked about Neural Operators as Foundation Models for Digital Twins, including DeepONets, RiemannONets, DeepM&M Net, and their applications in digital twins. Yannis Kevrekidis from Johns Hopkins University (USA) talked about learning optimal algorithms and ideas at the intersection of machine learning and dynamical systems. Victorita Doolean from TU Eindhoven (Netherlands) presented work about domain decomposition methods for scientific machine learning. Felix Dietrich from TUM (Germany) talked about Learning Hamiltonian dynamics without backpropagation, combining ideas from Hamiltonian neural networks and sampling network parameters using data-dependent or data-agnostic distributions.

During the workshop, the participants were split into six groups to discuss on a diverse set of topics related to scientific machine learning. The results were then discussed during dinner at the IAS, and will be summarized in a report. Wil Schilders is supervising and collaborating with the doctoral candidate Chinmay Datar, who is located at the chair of Scientific Computing in Computer Science. He works mostly with the group of Prof. Felix Dietrich on topics related to scientific machine learning.

The collaboration has produced a number of scientific publications and pre-prints over the course of the fellowship:

1. Erik L Bolager, Iryna Burak, Chinmay Datar, Qing Sun, and Felix Dietrich. Sampling weights of deep neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 36, pages 63075-63116. Curran Associates, Inc., 2023.
2. Adwait Datar, Chinmay Datar, Zahra Monfared, and Felix Dietrich. Role of Parametrization in Learning Dynamics of Recurrent Neural Networks. In *NeurIPS 2024 Workshop on Optimization for Machine Learning*, 2024.
3. Chinmay Datar, Adwait Datar, Felix Dietrich, and Wil Schilders. Continuous-time neural networks for modeling linear dynamical systems. In *ICLR 2024 Workshop on AL4DifferentialEquations In Science*, 2024.
4. Chinmay Datar, Adwait Datar, Felix Dietrich, and Wil Schilders. Systematic construction of continuous-time neural networks for linear dynamical systems. arXiv:2403.16215, March 2024.
5. Chinmay Datar, Taniya Kapoor, Abhishek Chandra, Qing Sun, Iryna Burak, Erik Lien Bolager, Anna Veselovska, Massimo Fornasier, and Felix Dietrich. Solving partial differential equations with sampled neural networks. arXiv:2405.20836, May 2024.
6. Atamert Rahma, Chinmay Datar, and Felix Dietrich. Training Hamiltonian neural networks without backpropagation. arXiv:2411.17511, November 2024.

Chinmay Datar, Felix Dietrich

Ferienakademie 2024 - eine runde Sache

FERIENAKADEMIE

In 2024 fand die Ferienakademie www.ferienakademie.de das 40. Mal im Sarntal (Südtirol) statt, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird. Wegen des Ausfalls 2020 aufgrund von Corona war es heuer auch gleichzeitig das 40-jährige Jubiläum. Jedes Jahr wurden im Durchschnitt ca. 10 Kurse organisiert. In diesem Herbst wurden folgende Kurse angeboten (Details vgl. <https://www.ferienakademie.de/kurse-2024/>):

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

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

nach acht Challenges nur wenige Punkte, das zweite Team tat sich etwas schwer. Die Teams heißen übrigens ClusDur und CompuDur. Beim zweiten Kunstwort war kein Franke im Spiel, sondern meines Wissens nach ChatGPT.

Unser Cluster-Team besteht ausschließlich aus Freiwilligen—die Studenten bekommen keine Credits—und inzwischen ist die Kohorte auf gut 20 Studenten angewachsen, die sich jede Woche einmal treffen. Für die Zukunft müssen wir schauen, wie wir das managen. Ideen haben wir viele, Zeit sehr wenig. Eine konkrete Idee ist, einen internen Wettbewerb zu starten, weil wir sicher auch in Zukunft höchstens zwei Teams nach Manchester schicken werden dürfen. Eine andere Idee ist, die Cluster Challenge in einen neuen MSc zu integrieren, der Systemadministration zum Kerninhalt hat. Egal was kommt, wir werden uns weiter in diesem Gefilde engagieren und was ich persönlich hoffe ist, dass wir Links zu anderen Teams in anderen Ländern aufbauen können.

CIUK24 <https://www.scd.stfc.ac.uk/Pages/CIUK2024.aspx>



Abbildung 1: Teilnehmer der Student Cluster Competition auf der CIUK,
Foto: privat

Tobias Weinzierl

planqc baut Quantencomputer mit neutralen Atomen fürs LRZ



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Die nächste Quantentechnologie wird für die Integration in die Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) vorbereitet: Für das Projekt „Multi-core Atomic Quantum Computing System“ (MAQCS) entwickelt das Garching Start-up planqc derzeit ein Quantensystem, das auf neutralen Atomen basiert und 1000 Qubits für Berechnungen bietet. Dritte Institution im Projekt-Bund ist das Max-Planck-Institut für Quantenoptik (MPQ), das die Entwicklung unterstützt. Forschende erhoffen sich von dieser hohen Anzahl verfügbarer Qubits einen echten Mehrwert, um Fragen etwa der Materialwissenschaften, Pharmakologie, Finanzen, Transport oder vieler weiterer Disziplinen zu lösen, die heute nur höchst aufwändig oder mit Verfahren, die jetzt zur Verfügung stehen, noch nicht zu berechnen sind.



Abbildung 1: Bayerischer Ministerpräsident Söder bei der Eröffnung des planqc Büro in Garching. Bild: planqc

Das MAQCS-Projekt läuft bis in das Jahr 2027. Der entwickelte Quantencomputer wird ausgewählten Forschenden zur Verfügung stehen und in die High-Performance Computer (HPC) des LRZ integriert. Nach mehreren Quantencomputern, die auf supraleitenden Schaltkreisen von IQM basieren, sowie einem 20-Qubit-Ionenfallen-basierten System von AQT, ist dies die dritte Quantencomputertechnologie im Portfolio des LRZ. Mehr zum neuen System von planqc lesen Sie in der aktuellen Pressemitteilung des Unternehmens https://planqc.eu/news/20241113-1000_qubit_quantum_computer_for_lrz/.

Susanne Wieser



UK Student Cluster Competition auf der CIUK

Manchester ist gemeinhin bekannt für zwei Dinge: Alle Bands hier klingen gleich oder versuchen gleich zu klingen, also so wie Oasis, und das Wetter ist immer schlecht. Dann gibt es natürlich auch noch Fußball. Wenn alljährlich die HPC Elite des Inselreiches nach Manchester strömt, sind alle diese Aspekte—vielleicht außer dem Wetter und das was so wie beschrieben, d.h. nass und kalt—irrelevant. Stattdessen geht es zur CIUK, der Computing Insight UK. Früher einmal griffig Machine Evaluation Workshop genannt, hat sich das Event mit etwa 800 Teilnehmern zu so einer Mini-Mini-ISC gemausert und ist de facto das Stelldichein der englischen HPC-Szene. Ich war auch da.

Neben den Workshops, Ausstellungen und Talks hofiert die CIUK auch die UK-eigene Student Cluster Challenge, die den großen Vorbildern auf ISC und SC zwar ähnelt, aber dennoch ganz eigen ist: Teams von sechs Studenten müssen nämlich im Konferenzvorlauf über 4–6 Wochen hinweg an vier virtuellen Challenges teilnehmen, die jeweils von anderen Vendors gestellt sind. Da folgt auf die Konfiguration eines Graphcore-Systems schon mal das Benchmarken auf einem kleinen Grace-Hopper-Cluster. Auf der Konferenz selber kommen die Teams dann tatsächlich zum ersten Mal in 3D zusammen und müssen weitere vier Challenges, abermals von den gleichen Firmen gestellt, meistern. Durch dieses Gesamtkonzept bietet die Konferenz eine echt hybride Erfahrung und setzt die Studenten vielen verschiedenen Systemen aus. Auch ist es interessant, wenn sie nach dem virtuellen Vorlauf auf die Leute hinter den Kulissen treffen, die die Aufgaben stellen.

Seit der Geburt vor fünf Jahren stellt Durham immer ein Team, und bisher haben wir noch nie schlechter als Platz zwei abgeschnitten. Diesmal war das etwas anders, aber nur weil wir tatsächlich zwei Teams nominieren konnten. Eines wurde ganz knapp auf Platz zwei verwiesen, aber es waren



Figure 2: Evening dinner with Luca Frediani (middle right) and Evgueni Dinvai (very left)

breakthrough; so far, it's based on numerical evidence. Unfortunately (or maybe blessedly), the large power-law degree (on the order of input bit length to the power of 9) would prohibit the use of the algorithm for practically relevant RSA keys... In detail, Marco used tree tensor network quantum states to sample low-energy eigenstates. We certainly had many interesting discussions, in particular, due to the overlap with tensor network methods.

The Quantum Group@TUM's Computer Science Department:
 Christian Mendl, Manuel Geiger, Keeffe Huang, Isabel Le,
 Martina Nibbi, Philipp Seitz, Yu Wang

IQM liefert europäischen Quantencomputer ans LRZ



Leibniz-Rechenzentrum
 der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Innovative Quantentechnologien für Europas Wissenschaft: EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) hat mit dem deutsch-finnischen Unternehmen IQM Quantum Computers einen Kaufvertrag für einen leistungsstarken Quantencomputer auf Basis von Supraleit-Technik sowie modernster Verschränkungstechnik abgeschlossen. Das erste Radiance-System bietet zunächst 54 Qubits und wird 2026 um ein zweites System mit 150 Qubits erweitert. Es wird in den nationalen Höchstleistungsrechner des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften integriert und steht dann Wissenschaftlern und Forscherinnen, sowie Endnutzern aus der Industrie aus ganz Europa für hybride Workflows aus klassischem Super- sowie Quantumcomputing zur Verfügung, die im Rahmen der Arbeiten am Munich Quantum Software Stacks entwickelt wurden. Das LRZ gehört damit zu den aktuell acht europäischen Standorten, die hybride, durch verschiedene Quantentechnologien beschleunigte Supercomputer im Auftrag von EuroHPC JU beherbergen, betreiben und in Forschungspartnerschaften weiterentwickeln.

Mehr Infos unter <https://www.quantum.lrz.de/de/bits-von-qubits/detail/iqm-selected-to-deliver-two-advanced-quantum-computers-as-part-of-euro-q-exa-hybrid-system>.

Susanne Wieser

Next-Generation-Earthquake Modelling Highlights Differences in Large and Small Earthquake Dynamics



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Dr. Alice-Agnes Gabriel, Professor at Ludwigs-Maximilians Universität München (LMU) and the University of California at San Diego (UCSD), dedicates her research efforts to understanding earthquakes at a fundamental level. She and her collaborators at the Technical University of Munich (TUM), led by Dr. Michael Bader, use high-performance computing (HPC) at the Leibniz Supercomputing Centre (LRZ) to model earthquake dynamics and propagation under a variety of conditions, including coupled with subsequent tsunami risks. Recently, Gabriel and her colleagues ran a suite of simulations focused on understanding the differences in earthquake behavior and intensity based on fault size and how so-called “cascading” earthquakes can follow an initial large earthquake in unpredictable ways.

Between simulations and sensors, scientists have a good understanding of how the powerful seismic waves unleashed by earthquakes propagate through Earth and at the surface that can shake and ultimately damage structures. Less understood, however, are the small-scale dynamics taking place deep below the Earth’s surface and how that energy can spread to other faults. While much of the tectonic energy released does travel as seismic waves to the surface, there is a significant portion of energy spent overcoming the surface friction between tectonic plates. That fracture energy can determine if earthquakes stop or jump between weak faults within the rock and result in a so-called “cascade” event. The 2023 earthquakes near the Turkish-Syrian border, for instance, cascaded out from the initial 7.8-magnitude event, triggering a 7.7 magnitude quake from a nearby fault line just 9 hours later and over 500 small and large aftershocks during the following day.

Gabriel’s team wanted to update earthquake simulation approaches to better consider the distinct physics taking place in large earthquakes separately

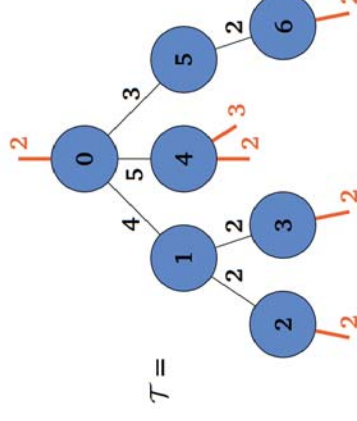


Figure 1: A tree tensor network as used in PyTreeNet

for representing tensors with a block-sparse structure, which emerges from conservation laws (like particle number conservation) in quantum systems. Quantum Member: Christian

Research visits

Luca Frediani and Evgueni Dinvay.

Between 25. - 29. October 2024, we have hosted Luca Frediani and Evgueni Dinvay as guests from Tromsø. The topic is a scientific collaboration headed by Martina for combining the multiwavelet code developed in Luca’s group (see <https://github.com/MRChemSoft>) with DMRG-based gradient computations to optimize electronic orbitals.

Marco Tesoro.

Just a week later, between 4. - 6. December 2024, we had another visitor: Marco Tesoro from Padova, Italy. The starting point was his recent preprint “Quantum inspired factorization up to 100-bit RSA number in polynomial time” (<https://arxiv.org/abs/2410.16355>). In his presentation, he had the opportunity to learn a lot about number theory. If a mathematical proof for polynomial time scaling could be found, this would be a major

tensor network contraction is formally straightforward. However, doing so while avoiding the exponential memory requirements is a pain. Noting that the final output of a quantum simulation is often an expectation value (scalar), we sneakily change the order of operations to minimize the size of intermediate results, never forming a full quantum state in the process. Our work implements an HPC-oriented library that works with optimizing this order of operations, written in Rust for safety. One key aspect is the consideration of distributed computation and the benefits of considering things with parallelism in mind. The main results are still in the works, but a paper is certainly on its way.

Quantum Members: Manuel, Keefe

Global Krylov methods for simulating molecules.

When simulating Hamiltonians, the density matrix renormalization group (DMRG) faces local minima and parallelization difficulties. Alternatively, we explore global Krylov methods (e.g., the Lanczos algorithm) using tensor network representations. We developed a matrix product operator (MPO) construction based on the tensor hypercontraction (THC) format for ab initio molecular Hamiltonians to reduce memory consumption and cost scaling.

Quantum Member: Yu

PyTreeNet.

Besides quantum algorithms intended for (future) quantum computers, we work in the group on classical, tensor network-based algorithms for simulating quantum systems. A recent development is Richard's PyTreeNet (<https://github.com/Drachier/PyTreeNet>) software package, which – as one might guess – focuses on tensor networks with a tree topology.

ChemTensor.

ChemTensor (see <https://github.com/qc-tum/chemtensor>) is a software library written in C with the intention to have an HPC-optimized implementation of the tensor network algorithms developed in the group available. This project is work-in-progress. A particular feature is a data structure

from those happening in small earthquakes and how those differences can impact an earthquake's destructiveness.

Read full Science Feature at GCS: <https://www.gauss-centre.eu/news/research-highlights/next-generation-earthquake-modelling-highlights-differences-in-large-and-small-earthquake-dynamics>.

Related Publication: Gabriel, A. et al. (2024). "Fault size-dependent fracture energy explains multiscale seismicity and cascading earthquakes," Science 385 (6707). DOI: 10.1126/science.adj958

Susanne Wieser

NHR@FAU bei der SC24 – Think big!



„HPC creates“ war das Motto der diesjährigen Supercomputing Conference (SC24), die vom 17. bis 22. November in Atlanta, Georgia, stattfand. Wieder einmal bot die größte internationale Konferenz für High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis nicht nur ein vielfältiges technisches und wissenschaftliches Programm, sondern auch zahlreiche Möglichkeiten zum Austausch über Innovationen und Best Practices. Im Fokus standen die Themenfelder Quantencomputing, Big Data und Künstliche Intelligenz.

Supercomputing und Sport: Wie passt das zusammen? Ziemlich gut sogar, betrachtet man die sportlichen Erfolge unseres Doktoranden Jan Laukemann. Er gewann noch vor dem Beginn der eigentlichen Konferenz erneut den „SCinet 5K“-Lauf und bewies durch satte zwei Minuten Vorsprung auf den Zweitplatzierten, wie gut Muskeln und Hirn miteinander „vernetzt“ sein können. Jan konzentriert sich am NHR@FAU auf Anwendungsoptimierung und Performance Engineering für HPC-Systeme, skalierbare Algorithmen für lineare Algebra, Tensorzerlegung und Graphberechnungen. Beim Konferenzprogramm (siehe unten) konnte Jan gleich bei mehreren Gelegenheiten die NHR@FAU-Flagge hoch halten. Er war außerdem beim SCinet-Team dabei, das die Netzwerk-Infrastruktur der Konferenz aufbaut und betreut.

Gemeinsam mit Kollegen der LMU München, der TU München und dem Munich Quantum Valley freute sich das NHR@FAU über zahlreiche interessierte Gäste am LRZ-Gemeinschaftsstand „#Bavarian HPC – Driving Scientific Discovery“. Geplaudert wurde unter anderem auch darüber, wie die Zentren die Wissenschaft mit hybridem Quanten- und Supercomputing, Software und Werkzeugen unterstützen. „Mr. LIKWID“ Thomas Gruber konnte man am Stand vortrefflich in technische Diskussionen verwickeln, was unter anderem „Dr. Bandwidth“ a.k.a. John McCalpin ausgiebig nutzte. Und schließlich konnten Besucher dank Sponsor MEGWARE bei einem Quiz zu HPC und Computergeschichte tolle Preise gewinnen.

How to simulate a molecule? – Finding answers at conferences



Oxford, 1st of September 2024, the first day of the “Seeking Quantum Advantage” conference. Everyone wonders the same looming question: “Will there ever be quantum advantage or utility in my field of research?” Potentially, eventually, maybe, there is a molecule that can be simulated on a quantum device. And potentially, eventually, maybe, it will be faster than on classical hardware. Unfortunately, the most promising candidate, VQE, will not do the job. But maybe analog quantum simulation will, at least according to the people selling the fitting hardware for such simulations. Speaking of hardware, we are running out of transistors ..., uuhm qubits. The scaling issues have not been solved either. Alas, poor experimentalists. But at least we know now how to do error correction; we only need a full cluster running decoding problems while just maintaining the state of a single logical qubit. Anyways, returning to our beloved molecules: Maybe we want to run a hybrid calculation instead for chemistry beyond classical accuracy? Having access to the first European quantum computer coupled with a supercomputer here at LRZ will surely offer new interesting paths. Oxford, 5th of September 2024, the last day of the “Seeking Quantum Advantage” conference. Everyone leaves with the following answer to their long-lasting doubts: “Maybe... if your field consists of factoring numbers or simulating molecules”. “Will there ever be any other quantum advantage or utility?” We need more opinions, possibly of all the physicists in the world. We will – maybe – find out at the next APS March Meeting.

Quantum Members: Philipp, Martina, Isabel

HPC tensor network contraction.

While we await quantum supremacy, a stop-gap measure is required to allow researchers to examine quantum systems larger than five qubits. In this interim, tensor network simulations remain the go-to for large-scale quantum system simulation. Encoding a quantum system simulation to a

Abhängigkeiten setzen beide Anbieter verstärkt auf containerisierte Lösungen. Langfristig ist jedoch die Reduktion von Abhängigkeiten und die Fokussierung auf grundlegende Bibliotheken wie PyTorch entscheidend, um die Kompatibilität auf beiden Plattformen zu gewährleisten.

Erfahrungen und Herausforderungen

Während unserer Tests zeigte die MI300X ihre Stärken bei Inferenz-Workloads. Komplexere Trainingsaufgaben profitieren zwar ebenfalls vom hohen Speicher, erfordern jedoch teilweise spezifische Optimierungen, um das volle Potenzial auszuschöpfen. Eine technische Einschränkung trat auf, als eine GPU aufgrund von Speicherfehlern ausfiel, was den gesamten Knoten unbrauchbar machte. Nach der Reparatur (RMA) war das System wieder voll einsatzfähig.

Schlussfolgerung

Die AMD MI300X hat sich als beeindruckendes Produkt erwiesen, das insbesondere für KI- und Forschungsanwendungen attraktiv ist. Der zunehmende Einsatz von AMD-Hardware, wie etwa die hohe Auslastung von MI250-Knoten in Clustern wie Adastra (Frankreich), zeigt die steigende Akzeptanz in der wissenschaftlichen Gemeinschaft. Mit ihrer hohen Speicherkapazität und Leistungsfähigkeit eröffnet die MI300X neue Möglichkeiten für das Training und die Inferenz von KI-Modellen. Dennoch bleibt die Optimierung von Software eine zentrale Herausforderung. Die langfristige Etablierung von AMD im KI-Bereich wird davon abhängen, wie gut sich die Software-Ökosysteme anpassen und weiterentwickeln lassen.

NHR@FAU-Team



Jan Laukemann beim Tutorial „Core-Level Performance Engineering“, Foto: NHR@FAU



SCinet kümmert sich bei der SC um den Aufbau und die Wartung des größten ad-hoc-Netzwerks der Welt. NHR@FAU war dabei, denn Jan Laukemann war Teil des SCinet-Teams. Foto: NHR@FAU

Daneben beteiligte sich das NHR@FAU auch aktiv am wissenschaftlichen Programm mit Tutorials, Workshop-Beiträgen und Posterpräsentationen. Auftakt war die Präsentation des Papers „EE-HPC, a Framework for Energy-Efficient HPC System Management“ bei einem Workshop zum Thema nachhaltiges Supercomputing. Das Paper entstand in Kooperation zwischen der RWTH Aachen, HPE, NHR@FAU und DKRZ im Rahmen des BMBF-geförderten Projekts EE-HPC. Das eng getaktete NHR@FAU-Programm setzte sich im Rahmen des renommierten Workshops „Performance Modeling, Benchmarking and Simulation of High Performance Computer Systems“ (PMBS) mit Jan Laukemanns Präsentation seiner Arbeit „Microarchitectural Comparison and In-Core Modeling of State-of-the-Art CPUs: Grace, Sapphire Rapids, and and Genoa“ fort, die Mikroarchitekturen der neuesten CPU-Kerne von Intel, AMD und NVIDIA vergleicht. Gut, dass Jan eine sportliche Konstitution hat, denn den Vortrag konnte er nur halten, weil er in einem olympiareifen Sprint fast die volle Länge des wirklich aberwitzig großen Konferenzentrums in Atlanta zurücklegen konnte. Am gleichen Tag fand nämlich auch das Halbtages-Tutorial „Core-Level Performance Engineering“ statt, in dem er zusammen mit Georg Hager in die Codeausführung und -optimierung auf der CPU-Kernebene einführte. Und auch der nächste Termin ließ nicht lange auf sich warten: In ihrem Tutorial über „Performance Engineering for Linear Solvers“ behandelten Christie Alappat und Georg Hager zusammen mit Hartwig Anzt (TU München) Codeanalyse, Leistungsmodellierung und Optimierung für dünn besetzte lineare Löser auf CPU- und GPU-Knoten.

Im „Research Poster Track“ war das NHR@FAU mit dem Poster „Exploiting Data Compression and Low Precision for Exascale Fusion Turbulence Simulations“ von Jan Laukemann und Mitarbeitern aus dem laufenden BMBF-Projekt „DaREXA-F“ sowie „DisCostiC: Simulation MPI Applications Without Executing Code“ von Ayesha Afzal, Georg Hager und Gerhard Wellen vertreten. Ayeshas Poster verpasste den „Best Research Poster Award“ nur knapp, schaffte es aber in die letzte Runde. Ihre Forschung konzentriert sich auf Leistungsmodellierung, Visualisierung und Simulation hochparalleler

AMD MI300X: Eine Analyse der neuen GPU-Generation



Im September 2024 erhielt das FAU@NHR seinen ersten AMD-Rechenknoten des Typs MI300X. Die MI300X repräsentiert einen bedeutenden Fortschritt in der GPU-Entwicklung für AMD und bietet auf dem Papier beeindruckende Spezifikationen. Mit mehr Transistoren, größerem Speicher und höherer Bandbreite übertrifft sie den NVIDIA H100 SXM in nahezu allen Metriken: FP64, FP32, FP16, FP8 und INT8 (wobei einige NVIDIA-Werte unter Annahme von Sparsität angegeben sind). Doch wie schlägt sich die MI300X in der Praxis?

Hardware und Software

Die MI300X bietet den größten verfügbaren Speicher unserer Rechenknoten, was sie besonders geeignet macht für das Training von KI-Modellen mit vielen Parametern oder auf langen Sequenzen. In umfangreichen Tests, bei denen wir unter anderem große Sprachmodelle (LLMs) und Stable Diffusion trainierten, zeigte sich die Leistungsfähigkeit der Hardware. Ein Training eines 14-Milliarden-Parameter-Modells (LLM) mit einer Kontextlänge von 65.000 Tokens war möglich. Beim Training von Stable Diffusion traten jedoch Optimierungsprobleme auf, da wir CUDA-Bibliotheken ohne spezielle Anpassungen für ROCm kompilierten.

Ein häufig geäußerter Vorbehalt gegenüber AMD-GPUs betrifft die Software-Kompatibilität. Viele Forscher und Entwickler vermuten, dass ihr Code auf AMD-Systemen weniger reibungslos läuft als auf NVIDIA-Hardware. Diese Annahme trifft teilweise zu, wird jedoch durch umfangreiche Dokumentationen und Portierungen, wie sie beispielsweise in den <https://github.com/ROCm/rocm-blogs/tree/release/blogs> ROCm-Blogs beschrieben sind, zunehmend entkräftet. Der Installationsprozess von Software auf Rechenknoten bleibt jedoch eine Herausforderung – sowohl bei NVIDIA als auch bei AMD. Aufgrund der wachsenden Komplexität der



Neues NHR@FAU-Cluster „Helma“ auf Platz 79, Foto: NHR@FAU

Namensgeberin für den neuen Cluster ist <https://ub.fau.de/history/wilhelmine-von-bayreuth/> Wilhelmine von Brandenburg-Bayreuth, Markgräfin von Bayreuth und verheiratet mit Friedrich III. (aka Fritz) von Brandenburg-Bayreuth, einem der Stifter und Namensgeber der FAU. Während ihrer Zeit in Bayreuth „wurde in Bayreuth eine Universität gegründet, allerdings nach einem Jahr in die Nebenresidenz Erlangen verlegt, die heutige Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg“.

Weitere Informationen: Bayern KI unter <https://hpc.fau.de/about-us/bayern-ki/>

Gerhard Wellein

Programme. Darüber hinaus engagiert sie sich bei „NHR Women in HPC“, um Frauen zu fördern, die in der Wissenschaft oder Industrie in Deutschland arbeiten.

Der wissenschaftliche Nachwuchs konnte bei der Student Cluster Competition (SCC) sein Wissen unter Beweis stellen. „FAUcet“, ein Team aus sechs FAU-Studierenden, wetteiferte mit zehn anderen internationalen Studierenden-Teams, um innerhalb enger Grenzen ein möglichst leistungsfähiges Cluster zu konstruieren; dabei muss insbesondere auf den Energiehunger der Knoten geachtet werden. In diesem Jahr waren der Molekulardynamikcode NAMD und der numerische Wettervorhersagecode ICON Teil der Anwendungssuite, außerdem ein „Mystery Benchmark“, der erst vor Ort enthüllt wurde. MEG-WARE unterstützte das Team wie in den Vorjahren mit modernster Hardware. Den Siegerpokal konnte FAUcet zwar nicht mit nach Hause nehmen – gravierende Netzwerkprobleme verhinderten einen reibungslosen Cluster-Aufbau –, dafür aber tolle Eindrücke, reichlich neue Erfahrungen und nach vier Tagen Benchmarking bis zum Umfallen auch ein massives Schlafdefizit. Gewinner des begehrten Nachwuchspreises war das Team der Tsinghua-Universität in Peking.

„HPC creates“ war zwar das Motto der SC24, „Think Big“ war aber der bleibende Eindruck, den die Supercomputing bei uns, mehr als in den Jahren zuvor, hinterlassen hat. Die „etwas“ kleinere „ISC High Performance“ in Hamburg steht aber schon in den Startlöchern: Beim Erscheinen dieses Quartls stehen diverse Deadlines für das wissenschaftliche Programm an. Dabei lockt die ISC vor allem mit kostenlosem Open Access für alle akzeptierten Paper, Freipässen für Vortragende und diversen anderen Goodies. Also dann, Goodbye Atlanta – und auf Wiedersehen in Hamburg von 10. bis 13. Juni 2025!

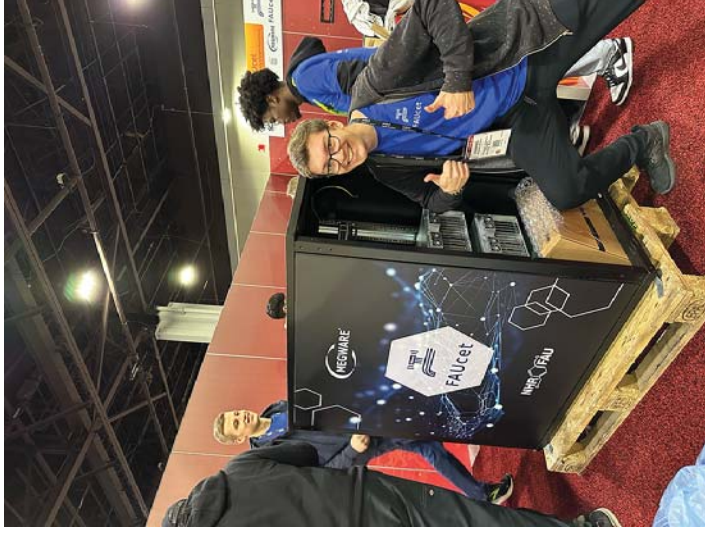
NHR@FAU-Team

Auf Fritz und Alex folgt Helma: H100-System am NHR@FAU springt in die TOP100



Rechtzeitig zur Supercomputing 2024 und der damit aktualisierten TOP500 Liste konnte ein neues GPU-System nach Franken an das NHR@FAU geliefert werden. Die 384 NVIDIA H100 GPUs des MEGWARE-Systems erzielen eine LINPACK-Leistung von 16,94 PF/s und platzieren „Helma“ als Nummer 79 der weltweit leistungsstärksten Rechner. Gerücheweise stoppte MEGWARE seine Bemühungen den LINPACK-Wert weiter zu optimieren, um die bayerisch-fränkische Freundschaft nicht zu gefährden: SuperMUC-NG (Phase 2) am LRZ liegt mit einem hauchdünnen Vorsprung von 0,25 PF/s auf dem Platz vor Helma. Für das NHR@FAU und die FAU bringt die neueste Liste mehrere Superlative mit sich: Noch nie schaffte es ein fränkisches System in die TOP100 und niemals konnte die FAU drei Systeme in der TOP500 platzieren: Mit Fritz (#283) und Alex (#252) finden sich zwei weitere Verwandte der fränkischen Linie des preußischen Königshauses in der TOP500.

Helma selbst besteht aus 96 warmwassergekühlten Knoten mit je 4 H100 (94 GB HBM2e), untergebracht in nur 4 Racks. Das NDR200 Netzwerk bietet einen Uplink pro GPU und ist innerhalb eines Schrankes mit 96 GPUs nicht-blockierend. Mit Helma wird die erste Stufe der BayernKI an der FAU realisiert – immerhin 200 GPUs stehen ab Ende Januar dediziert für Forschende an bayerischen Universitäten und Hochschulen zur Verfügung. Zu den weiteren Sponsoren und entsprechend Nutznießern zählen das NHR, die FAU, die UTN, die HS Hof, die HS Landshut sowie die KU Eichstätt.



Team FAUcet, hochmotiviert beim Aufbau ihres Clusters, Foto: NHR@FAU