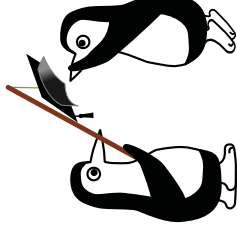


## Inhalt

|  |    |
|--|----|
| Editorial  | 2  |
| Iterationsschleife                                     | 6  |
| Die Max-Planck Exascale Initiative                     | 9  |
| Quantum Computing und<br>„Munich Quantum Valley“       | 14 |
| Wenn schnell nicht mehr schnell genug ist              | 16 |
| BGCE Opening Weekend 2021:<br>Unity in times of corona | 18 |
| KONWIHR: New projects from spring 2021                 | 21 |
| Notiz:*Notiz:*Notiz                                    | 23 |



---

### Quartl\* - Impressum

#### Herausgeber:

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

#### Redaktion:

S. Herrmann, S. Seckler, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

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

<https://www.in.tum.de/index.php?id=5353>

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **01.09.2021**

\* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

---

Das Quartl erhalten Sie online unter <https://www.in.tum.de/index.php?id=5353>

---



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

Aktuell befindet sich ja der Prozess der Neufassung der TUM-Promotionsordnung in der Endphase. Seit dem letzten Update 2013 ist doch erheblicher Anpassungsbedarf entstanden – nicht zuletzt durch den momentan laufenden Transitionsprozess von Fakultäten zu Schools. In diesem Zusammenhang erfährt auch das Muster für die von allen promotionsführenden Einrichtungen zu erstellende, so genannte Betreuungsvereinbarung (BV) eine Überarbeitung. In einem zeitgemäßen Promotionskontext ist die BV inzwischen weltweit ein zentraler Baustein – quasi ein Vertrag zwischen promovierender und betreuender \*Person\*, in dem beide die Rahmenbedingungen des jeweiligen Promotionsprojekts der TUM Graduate School gegenüber bestätigen und sich auf Grundsätze der vorgesehenen Arbeiten, des begleitenden Qualifikationsprogramms und der Betreuung verständigen. Auch Förderrichtungen wie die DFG haben inzwischen Empfehlungen für das Erstellen solcher Betreuungsvereinbarungen herausgegeben.

Wie fast alle Maßnahmen im Rahmen der Qualitätssicherung hat auch die BV primär die Problemfälle im Blick – also hier die hoffentlich geringe Zahl von Promotionsprojekten, in denen etwas heftiger schief läuft. An ihnen sind Formulierungen und Maßnahmen typischerweise ausgerichtet. Für die Beteiligten der zahlreichen problemlosen Fälle erscheint dann vieles als irgendwo zwischen überflüssig oder sogar unterstellend. Wir kennen das aus vielen Kontexten, nicht zuletzt der Akkreditierung. Man mag das als ärgerlich ansehen, und mir geht es auch das eine oder andere Mal so. Aber es gibt sie eben, leider – die Fälle, bei denen solche Mechanismen benötigt werden und ihre Kraft entwickeln.

Viel hat sich am vorgeschlagenen Text unserer Muster-BV gar nicht geändert. Der allgemeinen Praxis folgend – verschiedene Papiere sprechen ganz unvollkommen von Machtmissbrauch oder Ausnutzen eines Abhängigkeitsverhältnisses – haben wir, zugegeben, etwas mehr den Schutz der Interessen der Promovierenden im Blick. Dies deshalb, weil – und ich sage dies bewusst als Betreuer von Promotionen – natürlich eine Unsymmetrie, ein Abhängigkeits-

## \* Notiz \* Notiz \* Notiz \*

**Termine 2021 (falls Corona es erlaubt)**

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**  
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **International Supercomputing Conference 2021**  
The event for High Performance Computing, Machine Learning and Data Analytics – ISC DIGITAL: 24.06. - 02.07.2021  
<https://www.isc-hpc.com/>

## Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

[info@konwih.r.de](mailto:info@konwih.r.de)

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

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

Gerasimos Chourdakis

verhältnis besteht. Promovierende mögen nerven, können lästig sein; sie stellen aber nur „Steinchen“ im Berufsalltag Betreuender dar. Für Promovierende dagegen ist ihre Promotion der Kern ihres Berufsalltags; wird sie infrage gestellt, droht sehr viel zusammenzubrechen. Wir haben aber bewusst drastische Vokabeln vermieden – es geht schließlich um Schutz, nicht um Anklage, bevor irgend-etwas passiert ist.

Jetzt hat sich ein Fakultätsrat geweigert, die aus der Vorlage abgeleitete Be- treuungsvereinbarung dieser Fakultät zu beschließen – nachdem sich zuvor Widerstand im Professorium geregt hatte. Man bestehe auf einer symmetri- schen Auflistung von Pflichten Promovierender und Betreuender, hieß es. Alles im grünen Bereich – Gremien können natürlich immer nein sagen. Ein gewisses Problem ist zwar, dass ohne gültige BV demnächst in besagter Fakultät bzw. der entsprechenden neuen School keine Promotionen mehr möglich sein werden. Aber es werden nun rasch diverse Gespräche auf allen Ebenen folgen, das werden wir lösen.

Seitens der TUM Graduate School hatten wir uns im Vorfeld der Neuaufgabe natürlich ein Bild gemacht, wie oft Problemfälle bei der Betreuung auftreten und wie diese aussehen. Entwarnung beim ersten Punkt – es kommt nur sehr selten vor, dass etwas aus dem Ruder läuft, das nicht durch Beratung oder Mediation relativ schnell gelöst werden könnte. Verwunderung aber beim zweiten Punkt – wenn etwas passiert, dann reibt man sich schon die Augen, im Jahr 2021. Nachfolgend exemplarisch drei Fälle aus dem Nähkästchen, die wir aus den Graduiertenzentren zurückgespielt bekommen haben – natürlich anonymisiert in jeder Hinsicht, und alle Angaben ohne Gewähr. So mögen sich jeder und jede selbst ein Bild machen.

(1) Eine Doktorandin, Mutter zweier kleiner Kinder, arbeitet aktiv an ihrer Promotion. Als ihre Mutter schwer erkrankt, Betreuung und Pflege benötigt und schließlich verstirbt und sich die Doktorandin dann auch um ihren Vater kümmern muss, sieht sie sich gezwungen, ihr Promotionsprojekt zu unterbre- chen. Die Betreuerin reagiert ohne Verständnis, sagt der Doktorandin, dass sie die Promotion beenden würde, wenn die Doktorandin nicht weiter an

dem Projekt arbeite. Auch in einem Gespräch mit dem Graduiertenzentrum vertritt die Betreuerin die Position, dass sie „mit solchen Doktoranden“ nicht arbeiten könne und daher die Promotion abbrechen werde. (Anmerkungen des Verfassers: Gut, dass sie das gar nicht so einfach kann!)

(2) Eine Doktorandin macht ein Experiment, von dem der Betreuer eine genaue Vorstellung hat, was herauskommen soll, und wertet es aus. Bei einem ersten Durchlauf mit wenigen Versuchen stellen sich auch Ergebnisse in dieser Richtung ein, bei einem zweiten Schwung dann allerdings andere. Die Doktorandin schlägt einen dritten Durchlauf mit einem verbesserten Design und einer größeren Versuchszahl vor. Der Betreuer verweigert das und besteht darauf, dass die Doktorandin für die geplante Publikation und ihre Dissertation ausschließlich Daten des ersten Durchlaufs zu verwenden habe.

(3) Es gab einen Fall, in dem ein Doktorand für private Erledigungen missbraucht wurde. Als dieser sich schließlich weigerte, weiterhin Reinigungsgänge, Haus-Sitting, Autozulassung, etc. für den Betreuer zu erledigen, wurde ihm damit gedroht, dass das Betreuungsverhältnis aufgelöst werde, wenn er diese Arbeiten nicht weiter übernehme.

Wie bitte? Wie war das doch gleich mit guter wissenschaftlicher Praxis, mit Vereinbarkeit von Beruf und Familie? Kein Wunder, dass „Mental Health“ inzwischen eines der in der internationalen Promotionswelt am heftigsten diskutierten Themen ist. Und beim dritten Punkt fühle ich mich sehr an meinen Doktorvater Christoph Zenger erinnert, der einst nach einer China-Reise „begeistert“ von professorale Autos waschenden Doktoranden berichtete und – allerdings alles andere als ernst – in den Raum stellte, dies auch bei uns einzuführen ...

## KONWIHR: New projects from spring 2021



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of spring 2021. 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:

- Optimisation of SeisSol for Large Scale Simulations of Induced Earthquakes
  - Prof. Michael Bader (TUM Chair of Scientific Computing in Computer Science)
- Fast and scalable finite element algorithms for coupled multiphysics problems and non-matching grids
  - Dr. Martin Kronbichler, Prof. Wolfgang Wall (TUM Institute for Computational Mechanics)

You can find more details about these projects at

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

The new projects are going to participate in an online workshop on October 11, 2021, at 15:00, presenting their goals and challenges, which you are very welcome to join. For more details, please watch our konwihr-announcements mailing list.



**Figure 3:** Final Group Zoom Photo

As has so often been the case in recent years, we fully enjoyed the interaction with this group of motivated and committed students and have received significant positive feedback to the first virtual Opening Weekend. We are very much looking forward to an eventful year with BGCE and hope for future in-person meetings.

Keefe Huang

Wie gesagt, alles extreme Einzelfälle, vielleicht auch etwas überzeichnet – aber fraglos schlicht und ergreifend skandalös. Und sie zeigen, dass gewisse Mechanismen sehr wohl ihre Berechtigung haben. Und das müssen alle involvierten Parteien (oder Stakeholders, wie das neudeutsch heißt) auch irgendetwas einsehen – auch die Damen und Herren Professor\*innen in besagter Fakultät. Und bis dahin werden wir weiter Überzeugungsarbeit für unsere neue Betreuungsvereinbarung leisten. Vor diesem Hintergrund erscheint es übrigens als noch fragwürdiger, dass aus der Professorenenschaft mehrerer Fakultäten der Ruf nach einer „Exit-Strategie“ erschallt: Es müsse für die Betreuenden eine Möglichkeit geben, eine Promotion einseitig zu beenden. Dazu schreibe ich jetzt nichts weiter.

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, eine schöne Sommerzeit, mit möglichst wenig Corona-Ärger. Bleiben Sie gesund und haben Sie viel Spaß mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

### Iterationsschleife

N=39

30. Mai 2021

Kassiopeia ist, der Sage nach, die Mutter der Andromeda. Heute ist sie aber eher Astronomen ein Begriff. Es gibt ein Sternbild, das nach ihr benannt ist: Es zeigt sich am nördlichen Himmel, also für uns recht gut zu finden. Es hat die Form eines W oder eines M<sup>a</sup>. Wiewohl mich Sterne nie besonders interessiert haben. Aufgewachsen in den Alpen waren sie nachts sehr gut zu sehen. Lichtverschmutzung war ein geringeres Problem als heute in Stuttgart. Trotzdem waren Sterne nie hilfreich oder notwendig. Die Grenzen und Richtungen waren eindeutig durch die Bergketten definiert. Sterne als Wegweiser keine echte Notwendigkeit. Im Osten stand die Schwalbenwand. Im Süden stand das Kitzsteinhorn. Im Westen standen Biberg und die Leoganger Steinberge mit dem Birnhorn<sup>b</sup>. Im Norden stand das steinerne Meer<sup>c</sup>. Als Wegweiser waren also Berge geeigneter als Sterne. Tagsüber war jederzeit am Betrachtungswinkel der Berge erkennbar wo man sich geografisch befand. Darüber hinaus war in den Bergen ohnehin der Weg nach unten immer richtig, wenn man nur nach Hause wollte. Die Kenntnis über Felswände im Gelände war dabei natürlich hilfreich. Aber in der kleinen Welt des Saal-feldner Beckens waren die alle bekannt und damit war eine Landkarte verinnerlicht, die durch den Blick auf die Berge jederzeit kalibriert werden konnte. Nachts wären Sterne vielleicht eine Hilfe gewesen. Doch auch nachts genügte ein Blick auf die Berge – eigentlich ihre Silhouetten – um die eigene Position unmittelbar bestimmen zu können. So blieben nur die Betrachtung des großen Wagens und die Bestimmung des Nordlichts als Spiele-rei und weiter nichts was am Sternhimmel spannend gewesen wäre<sup>d</sup>. Aber zurück zum Thema: Kassiopeia soll – glaubt man der Sage – Unglück über die eigene Familie gebracht haben, weil sie sich zu sehr ihrer eigenen Schönheit gerührt hat.

<sup>a</sup>Die mittlere Spitze zeigt auf den Nordstern. Auch das ein weiterer Hinweis, um das Sternbild zu erkennen.

<sup>b</sup>Das Birnhorn war als Wetterbote wichtig. „Hat das Birnhorn einen Hut, wird das Wetter heute gut“.

<sup>c</sup>Sie stehen vermutlich heute noch dort auch wenn die Frage nach ihrem Verbleib sinnlos erscheint, da Berge sich mit einer Geschwindigkeit bewegen, die von Menschen nur selten erfasst wird.

<sup>d</sup>Noch heute verbindet den Autor nur wenig mit der Astrophysik.

On Saturday, the BGCE members took part in the Soft Skills courses “When Teamwork Works” and “Step Out”, designed to foster some *Esprit de corps* and teach teamwork skills. While the juniors focused on fundamental teamwork, the seniors were tasked with execution and were able to produce a completely original music video<sup>4</sup>.



Figure 2: Snapshot of BGCE seniors’ funky clip project

The final day of the Opening Weekend took place on Sunday, April 11th. There, the juniors and seniors worked through the “Group Challenge” activity together; this involved completing complicated manoeuvres with minimal information under time pressure to defuse virtual bombs. This finally culminated in the final *Consulting Circle*, where the juniors could clarify their doubts and the seniors passed on their learned experiences and gathered wisdom to the juniors.

<sup>4</sup><https://www.bgce.de/2021/04/19/bgce-opening-weekend-12/>

## Opening Weekend 2021: Unity in times of corona



In the wake of a corona-quarantined spring, comes the yearly initial gathering of the BGCE family to welcome the newest cohort of the Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) program. This year, we see an intake of 19 new juniors that have started their studies in the Winter Semester 2020/21. While the abate of the pandemic does not yet allow large gatherings, an online variant of the opening weekend has been introduced, running from the April 9-11th, 2021.

After a short crash-course to the BGCE program, the incoming students broke the ice on Friday, led by the two coordinators Annette Reiners and Pit Forster. Other than introducing the new BGCE members to each other, the seminar help to compile a list of needs, expectations and offerings from a students point of view. These finalized tables were shared with the BGCE coordinators and responsible professors at the end of the seminar. This allowed to collect expectations, obligations and needs of both sides, in order to make the BGCE studies as optimal as possible.

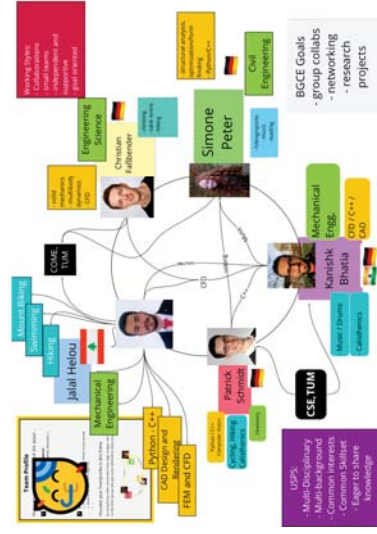


Figure 1: Introductory Billboard for BGCE juniors

Sie soll behauptet haben, schöner zu sein als die Nereiden<sup>a</sup>, Töchter des Nereus<sup>b</sup>. Die Nereiden beschwerten sich bei Poseidon und dieser schickte eine fürchterliche Strafe<sup>c</sup>. Ein Ungeheuer sollte die Tochter Kassiopeias Andromeda verschlingen<sup>d</sup>. Natürlich wird die Tochter gerettet - von Perseus<sup>e</sup> und die beiden lebten lange glücklich und zufrieden und hatten viele Kinder<sup>f</sup>.

Das Problem der Schönheit scheint eine griechische Spezialität zu sein. Die schöne Helena löst bekanntlich sogar einen Krieg aus<sup>g</sup>. Aber eigentlich schuld sind drei Göttinnen<sup>h</sup> die sich über ihre Schönheit streiten<sup>i</sup> und Paris<sup>j</sup> erst auf die Spur der Helena bringen. Es steht zu fragen, wieso Schönheit – oder sich der Schönheit zu rühmen – eine derart schreckliche Sache ist. Die Schuld Kassiopeias scheint ja sowohl in ihrer Schönheit als auch in ihrer Eitelkeit zu liegen. Die Sache mit der Schönheit und der Schuld muss hier aber ungeklärt bleiben.

<sup>a</sup>Es sollen 50 oder 100 Töchter gewesen sein – von nur einer Frau. Die Namen tun hier wenig zur Sache doch sei erwähnt, dass einer der Töchter Kalyppo war – eben, jene die Odysseus an sich zu binden suchte aber an der Sehn-sucht des Helden nach seiner Frau gescheitert ist.

<sup>b</sup>Griechischer Meeresgott. Nicht zu verwechseln mit Poseidon bei dem es sich bekanntlich um DEN Gott des Meeres handelt und nicht nur um einen Meerestgott. Aber Genauerer weiß auch der Autor nicht und hüllt sich daher in delphische Nebelschwaden.

<sup>c</sup>Überhaupt scheint Poseidon ein besonders rachsüchtiger Gott gewesen zu sein, war er doch auch maßgeblich an den Irrfahrten des Odysseus beteiligt.

<sup>d</sup>Auch das so eine erstaunlich langlebige Geschichte. Das Verschlingen von Jungfrauen scheint die Menschen lange Zeit fasziniert zu haben.

<sup>e</sup>Auch er ein Halbgott und als Sohn des Zeus offenbar auch berechtigt, Poseidon ein Schnippchen zu schlagen. So werden Hierarchien sichtbar gemacht.

<sup>f</sup>Offenbar gab es damals noch keine Pandemien oder zumindest keine Quarantäne sodass die Kinderschar die beiden nicht in den Wahnsinn trieb.

<sup>g</sup>Der trojanische Krieg soll 10 Jahre gedauert haben und war vermutlich bis ins 20te Jahrhundert der bekannteste Krieg.

<sup>h</sup>Hera, Athene und Aphrodite versprechen Macht, Ruhm und Schönheit und Paris entscheidet sich – völlig unrealistisch – weder für Macht noch für Ruhm.

<sup>i</sup>Streitende Götter sind bei den Griechen ganz normal denn während manche Religionen Götter als auch moralisch über den Dingen stehende Wesen gestalten sind die Götter der Griechen eher ziemlich menschlich und nur durch Unsterblichkeit und Macht über den Menschen stehend. Unsterblichkeit ist übrigens auch das was Gilgamesch sucht und letztlich nicht findet – es scheint also auch die Sehnsucht nach Unsterblichkeit eine zutiefst menschliche Regung zu sein.

<sup>j</sup>Sohn der Kassandra, die – Sie haben es erraten – wunderschön war und nebenher auch noch weissagen konnte – aber auf der der Fluch lag, dass niemand ihren Weissagen glaubte. Christa Wolf hat eine Erzählung „Kassandra“ geschrieben, die es sich lohnt zu lesen.

Nun stellt sich aber die Frage, was eigentlich Cyborg (N=38) und Kassiopeia (N=39) miteinander zu tun haben. Beide haben mich stundenlang in meinem Auto begleitet. Natürlich nicht als Personen, sondern in einer Audi-CD die meine Kinder ständig gehört haben. Da sie chinesisch war verstand ich nur zwei Wörter richtig „Cy-borg“ und „Kassiopeia“ – so schien es mir wenigstens. Meine Gedanken wanderten also zwischen dem Mensch-Maschine Wesen und der schönen eiteln Frau hin und her und versuchten zu ergründen, ob es sich hier um eine Adaption der Geschichte Kassiopeias handeln könnte, die im 21ten Jahrhundert durch die Umwandlung in einen Cyborg Unsterblichkeit erlangt<sup>a</sup>.

Weit gefehlt. Die Geschichte handelte vom Räuber Hotzenplotz<sup>b</sup>. Kassiopeia – wie ich meinte verstanden zu haben - war in Wirklichkeit der Kasperl und Cyborg entpuppte sich als Seppel. Das Ganze war nur die ganz normale Geschichte vom Räuber Hotzenplotz und meine Überlegungen zu Mensch-Maschine Wesen und über als Sterne entrückte griechische Schönheiten waren nur ein Hirngespinnst. Man sieht wozu klassische Bildung führen kann.

Fazit: It's the Hotzenplotz, stupid!

M. Resch

<sup>a</sup>Sie könnte natürlich auch Künstliche Intelligenz erlangen, aber der Gedanke daran, scheint doch absurd.

<sup>b</sup>Räuber Hotzenplotz ist eine Erfindung von Otfried Preußler (1923 – 2013). Eine Aufführung eines modernen Theaterstücks mit dem Räuber Hotzenplotz erlebte ich im September 2011 in Shanghai wobei mir nur die dramatische Intonation des „Hooooooooootzenpltz“ in Erinnerung verblieben ist und die Verwunderung darüber wie dieses Kinderbuch Grundlage eines am absurden Theater ausgerichteten Stücks einer kleinen Theaterkompanie in Shanghai werden konnte. Offenbar auch hier Auswirkungen der Globalisierung die uns unbekannt an unseren offiziellen Wegen vorbei in die interkulturellen Lücken dringt und Sprengkraft entwickelt.

puterarchitekturen sehr viel effizienter als die FFT verarbeitet werden. Dazu wurde die Implementierung der sog. Ultrasofen Pseudopotentiale (USPP) komplett überarbeitet und optimiert. Das LRZ brachte hierbei seine umfangreiche Erfahrung mit Algorithmen für sehr große Knoten und Core-Zahlen und deren Kommunikationsmuster ein. Dadurch wurde die schnelle Kommunikation innerhalb der Knoten mit OpenMP ausgenutzt und die wesentlich langsamere Kommunikation über das Netzwerk zwischen den Rechenknoten über MPI stark reduziert. Gleichzeitig wurden Kommunikations- und Rechenphasen im Programm überlagert, was die Skalierbarkeit weiter verbesserte.

Das Ergebnis der Kombination geeigneter physikalisch-chemischer Ideen und paralleler Algorithmen auf moderner Rechnerarchitekturen kann sich sehen lassen. Eine Beschleunigung um Faktoren 10-100 und exzellente Skalierung bei Erhöhung der Rechenkerne auf SuperMUC-NG beeindruckt und führt zu einer der aktuell schnellsten Implementierungen der ab initio Molekulardynamik. Die hervorragende Skalierung bedeutet auch, dass nun wesentlich größere Systeme mit besserer Genauigkeit simuliert werden können. Dies ist vor allem für Physik, Chemie und Materialforschung wichtig.

Mehr unter <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107745>  
sowie unter <https://arxiv.org/abs/2003.08477h>.

Ludger Palm, Gerald Mathias



## Wenn schnell nicht mehr schnell genug ist



Leibniz-Rechenzentrum  
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Als Cooley und Tukey 1965 ihren Algorithmus für die Schnelle Fouriertransformation, Fast Fourier Transformation, FFT, vorschlugen, lösten sie damit für einige Bereiche des elektronischen Rechnens eine Revolution aus. Die dramatische Verringerung des Rechenaufwands und Speicherbedarfs beschleunigte viele Bereiche der numerischen Simulation, so auch in der Car-Parrinello-Molekular-Dynamik, CPMD. Die Bewegung von Atomen und Molekülen wird darin simuliert, indem die Energien und Kräfte mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) angenähert werden und dazu die quantenmechanische Wellenfunktion des Systems nach ebenen Wellen (plane waves) entwickelt wird. Bei der Lösung all dieser Gleichungen spielt die FFT eine zentrale Rolle, da sie eine einfache und gleichzeitig stabile Berechnung der notwendigen Ableitungen ermöglicht. Allerdings stellt die globale AllToAll-Kommunikation bei der FFT einen Flaschenhals bei der Parallelisierung der Rechnungen dar.

Die Entwicklung der Rechnerarchitekturen hin zur Nutzung immer größerer Rechenknoten mit immer mehr Rechenkernen (Cores) hat dazu geführt, dass die Kommunikation zwischen den Knoten über das Message-Passing Interface (MPI) im Vergleich zur Kommunikation innerhalb eines Knotens über den gemeinsamen Arbeitsspeicher über das Open Multi-Processing (OpenMP) Protokoll immer langsamer wurde.

Tobias Klöffel und Bernd Meyer von der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen (FAU) und Gerald Mathias vom LRZ haben in den vergangenen Jahren unterstützt im Rahmen von KONWIHR eine optimierte Version des CPMD-Programms entwickelt, bei der ein Großteil des Rechenaufwands der FFT auf Matrixmultiplikationen verlagert wird. Diese können auf modernen Com-

## Die Max-Planck Exascale Initiative

Noch heuer sollen in den USA die ersten Exascale Systeme realisiert werden und auch in Europa wird es vielleicht schon nächstes Jahr erste solche Systeme geben, möglicherweise auch in Deutschland. Ohne jetzt auf die Diskussion, was denn „Exascale“ wirklich ist und wie es definiert wird<sup>1</sup>, näher einzugehen, ist eines jedenfalls klar: diese Hochleistungsrechner (HPC) Systeme werden um ein Vielfaches größer und leistungsfähiger als derzeitige Systeme sein und letztendlich wird ihr Erfolg an der effizienten Nutzung und den wissenschaftlichen Problemen, zu deren Lösung sie beitragen, gemessen werden.

Um HPC Systeme effizient nutzen zu können, ist es natürlich wichtig, deren Charakteristiken zu kennen und darauf abgestimmte Software und Tools zur Verfügung zu haben. Leider sind die technischen Details neuer großer HPC Systeme oft bis kurz vor deren Realisierung unbekannt bzw. größeren Änderungen unterworfen. Speziell vor großen Meilensteinen, wie eben jetzt den Exascale Systemen oder vor 15 Jahren bei den damals neuen Petascale Systemen, werden auch immer wieder neuartige Technologien ins Spiel gebracht. Ich erinnere mich noch an einen Vortrag von Thomas Sterling um die Jahrtausendwende, wo er ein Design eines Petaflopsrechners mit Kryo-Prozessoren, PiMs (processors in memory – wer sich erinnert) und – es war ja ein Vortrag von Thomas Sterling – unterstützenden Beowolfclustern präsentierte. Eine Visualisierung des Systems sah aus wie die Kommandobrücke des Raumschiff Enterprise! Die Realität sah dann etwas einfacher aus, die effiziente Nutzung des ersten Petascalesystems, Roadrunner, war aufgrund seiner hybriden Architektur mit AMD Prozessoren sowie dem IBM Cell Prozessor, jedoch immer noch eine Herausforderung.

Ähnlich war es im Vorfeld der Exascale Systeme. Die DARPA Exascale Study<sup>2</sup> identifizierte Herausforderungen, die im Vorfeld der Exascale Systeme zu lösen wären und initiierte viele Diskussionen, welche Technologien

<sup>1</sup> Sind es ExaOps, ExaFLOPS, welche Präzision, einzelne Simulationen vs. Ensembles, etc.?

<sup>2</sup> <http://www.cse.nd.edu/Reports/2008/TR-2008-13.pdf>

hierfür am geeignetsten wären – und hier wurden auch Technologien wie Neuromorphic Computing oder Quantencomputing durchaus in Erwägung gezogen, welche die Nutzbarkeit der Systeme deutlich verkompliziert hätten. Mittlerweile sind jedoch die Eckpunkte der ersten Exascale Systeme bekannt: sie werden auf Standardprozessoren von Intel oder AMD (vielleicht auch ARM) basieren und viele GPUs (von NVIDIA, Intel oder AMD) verbaut haben. Mehr Unsicherheiten gibt es noch bei der Speicherhierarchie, insbesondere inwieweit neue Technologien wie HBM (high-bandwidth memory) oder NVM (non-volatile memory) angewandt werden. Ebenso fehlt es an Programmiermodellen, welche bestmögliche Portierbarkeit und Wartbarkeit bei gleichzeitiger guter Ausnutzung der jeweiligen Zielhardware gewährleisten. Trotzdem sind bereits genügend Details bekannt, um Anwendung für ihren Einsatz auf diesen Systemen vorzubereiten, wenn auch noch nicht final zu optimieren.

Gemeinsam mit der HGF organisierte die MPG im vergangenen Jahr zwei Workshops, bei denen potentielle Exascale Anwendungen aus den beiden Organisationen diskutiert wurden und welche technischen Herausforderungen es dabei zu überwinden gilt. Diese reichen von allgemein gültigen Herausforderungen wie die notwendige Steigerung der Parallelität und Skalierbarkeit von Anwendungen zu neuen methodischen Herangehensweisen in einigen Wissenschaftsgebieten. Basierend auf diesen Überlegungen, formulierten 9<sup>3</sup> Max-Planck-Institute gemeinsam mit der Max Planck Computing and Data Facility (MPCDF) und dem Deutschen Klimarechenzentrum (DKRZ) einen Plan, wie für diese Institute wichtige Codes für Exascale Computing fit gemacht werden können und suchten um MPG-interne Fördermittel für dieses Unterfangen an. Zum Zeitpunkt des Erscheinens dieses Artikels steht die Förderentscheidung noch aus, wir können hier aber die wichtigsten Stoßrichtungen des Projektes zusammenfassen:

<sup>3</sup>Fritz-Haber-Institut der MPG, MPI für Astrophysik, MPI für Biophysik, MPI für Biophysikalische Chemie, MPI für Festkörperforschung, MPI für Meteorologie, MPI für Plasmaphysik, MPI für Polymerforschung, MPI für Struktur und Dynamik der Materie

Ein Quantencomputer ist nicht ganz richtig, tatsächlich sollen es drei werden, die jeweils auf anderen Hardware-Prinzipien basieren: einmal die *superconducting qubits* (womit auch die bekanntesten Quantencomputer von IBM und Google arbeiten) am Walther-Meißner Institut in der Gruppe von Stefan Filipp, dann *ultracold atoms* in der Gruppe von Immanuel Bloch am Max-Planck-Institut für Quantenoptik, und schließlich Ionenfallen-basierte Quantencomputer, die von dem Startup Alpine Quantum Technologies (AQT, [www.aqt.eu](http://www.aqt.eu)) aus Innsbruck entwickelt werden; AQT soll fürs MQV einen solchen Quantencomputer in München aufbauen.

Zur Koordination (und um nicht ganz den Überblick zu verlieren, wer für was zuständig ist), ist das MQV in acht Konsortien eingeteilt. Die Hardware-Plattformen bilden die ersten drei Konsortien, und die weiteren fünf sind dann für alle Bereiche über der eigentlichen Hardware zuständig, wie z.B. Algorithmenentwicklung. Mit meiner Gruppe soll/darf ich vor allem beim Quantum Software Stack und anwendungsorientierten Algorithmen beitragen, konkret Laufzeitumgebungen, Software-Tools und Simulation, sowie Forschung zum Abbilden von Anwendungsproblemen auf Quantencomputer.

Eine zusätzliche „Komplexitätsebene“ ist aktuell die Förderlandschaft, d.h. die verschiedenen Förderungen und Ausschreibungen, für die ja entsprechende Anträge einzureichen sind: Ein BMW-Stiftungslehrstuhl für „Quantenalgorithmen und -anwendungen“ ging gerade durch die Presse, es gibt zwei BMBF-Förderprogramme („Quantencomputer-Demonstrationsaufbauten“ und „Anwendungsnetzwerk für das Quantencomputing“, jeweils mit Einreichungsfrist 14. Juni 2021), dann ein BMWi-Förderprogramm „Quanten-Computing – Anwendungen für die Wirtschaft“ (Einreichungsfrist 30. Juni 2021), sowie die Ausschüttung der bayerischen Fördergelder, für die weitere Anträge bis Anfang Juli 2021 zu stellen sind — also alles zeitlich recht nahe beieinander. Das mit sämtlichen beteiligten Instituten und Firmen zu koordinieren, ist quasi eine Optimierungsaufgabe an sich, für die man vielleicht irgendwann einen Quantencomputer einsetzen könnte...

Christian Mendl

## Quantum Computing und „Munich Quantum Valley“

Momentan befinden wir uns sozusagen in einer Hoch-(Antrags-)Phase fürs Quantum Computing. Das Munich Quantum Valley (MQV, [www.munich-quantum-valley.de](http://www.munich-quantum-valley.de)) hat sich zum Ziel gesetzt, einen kompletten „Quantum Computing Stack“ in München bzw. Bayern zu entwickeln und zu etablieren. Das heißt, angefangen von der Quanten-Hardware (also einem physikalischen Quantencomputer) über hardware-nahe Compiler, Schnittstellen und HPC-Anbindung, zwischengeschaltete Quantenschaltkreis-Optimierung, bis hin zum Cloud-Access für Benutzer und anwendungsorientierte Algorithmenentwicklung. Also insgesamt ein (milde gesagt) „recht umfangreiches“ Vorhaben. Dementsprechend sind neben den Münchner Unis und der FAU Erlangen-Nürnberg auch Max-Planck-Institute, Fraunhofer, das LRZ, das Walther-Meißner Institut sowie zahlreiche Firmen beteiligt.

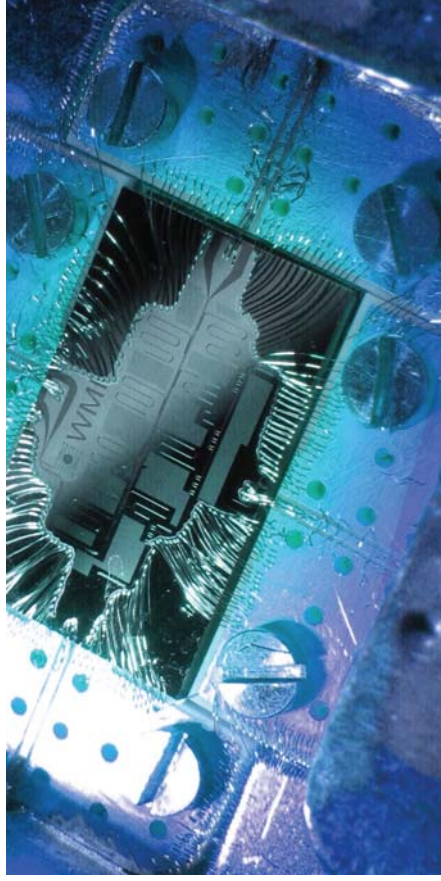


Abbildung 1: Quantenchip am Walther Meißner Institut. Quelle: [www.wmi.badw.de](http://www.wmi.badw.de)

- **Verfahren zur adaptiven Auflösung und Lastverteilung:**

In vielen Problembereichen, z.B. in der Materialforschung, der Astrophysik oder der Polymerforschung, gibt es große Inhomogenität bzw. statische oder dynamische Änderungen der Partikeldichte, oftmals über mehrere Größenordnungen. Dies führt oft zu Lastverteilungsproblemen und damit einhergehenden Ineffizienzen. Statische und dynamische Adaptionsverfahren können helfen, diese Probleme zu minimieren.

- **Reduzierte Genauigkeit für Gleitkommaarithmetik:**

Gleitkommaarithmetik mit reduzierter Genauigkeit kann die Rechenleistung deutlich erhöhen, insbesondere auf spezieller Hardware wie tensor-cores oder GPUs. Reduzierte Genauigkeit kann entweder explizit durch Nutzung entsprechender Datentypen und Sprachkonstrukte, oder transparent z.B. in Bibliotheken genutzt werden. Hierbei ist besonders auf die numerische Robustheit zu achten, welche oft ein Problem darstellt.

- **Verfahren Höherer Ordnung:**

Datenbewegungen (über das Netzwerk oder über die Speicherhierarchie) werden im Vergleich zu Rechenoperationen zunehmend teurer. Numerische Verfahren höherer Ordnung benötigen weniger Datenbewegung auf Kosten höherer Rechenintensität und können daher insgesamt effizienter sein.

- **Intelligentes Sampling und Ensembles:**

Statistische Verfahren wie (adaptives) Sampling vieler kurzer Trajektorien oder von Ensembles werden vor allem in der klassischen Molekulardynamik sowie den Wetter- und Klimaforschungen seit längerem erfolgreich eingesetzt. Durch diese Kombination kleinerer paralleler Berechnungen können große Rechnersysteme oftmals effizienter ausgenutzt werden, als durch größere monolithische Simulationen. Darüber hinaus ermöglichen diese Methoden die Ausnutzung freier Ressourcen durch „opportunistic computing“, sowie Fehlertoleranz. Mit der Hilfe von Methoden der Künstlichen Intelligenz sollten

nutzerfreundliche Umgebungen entwickelt werden, die tausende solcher kleinerer Berechnungen effizient ausführen und dynamisch an die verfügbaren Ressourcen anpassen.

- **Künstliche Intelligenz:**

Methoden der Künstlichen Intelligenz können helfen, die Ausführung großer Simulationen, insbesondere Ensemblesimulationen, zu orchestrieren und dynamisch auf die vorhandenen Rechenressourcen anzupassen. In manchen Fällen können KI Methoden auch Teile aufwendiger Simulationen ersetzen, z.B. bei teuren Kräfteberechnungen in Elektronenstruktur-Problemen, wodurch die Simulation größerer Systeme und längerer Zeitskalen ermöglicht wird.

- **Effiziente Implementierungen und Parallelisierungsmethoden:**

Da ein Großteil der erwarteten Rechenleistung der ersten Generation von Exascale Systemen durch GPUs beigesteuert wird, ist es unabdingbar, Anwendungen für GPUs respektive heterogene Knoten zu adaptieren und optimieren. Leider gibt es bis heute kein allgemein portables Programmiermodell für GPUs unterschiedlicher Hersteller. Zwar sind Programmiermethoden ähnlich, Unterschiede in den Details erfordern jedoch verschiedene Implementierungen und zielgerichtete Optimierungen für die jeweilige Zielarchitektur. Durch die Verwendung von Direktiven-basierten Modellen wie OpenMP und OpenACC oder höheren abstrakterer Frameworks wie RAJA oder Kokkos sollte es möglich sein, größtmögliche Portabilität und geringen Optimierungsaufwand zu erreichen.

Weiters erfordern die enormen Parallelitätsgrade von Exascale Systemen effiziente Kommunikationsmethoden (asynchrone, überlappende Kommunikation, Kommunikation über shared memory und RDMA) sowie neue Parallelisierungstechniken, wie parallel-in-time.

Diese Arbeiten werden an einer Anzahl von Anwendungen durchgeführt, die über die MPG hinaus einen breiten Anwenderkreis haben. Dazu zählen AREPO und GADGET-4 (Astrophysik), BSL6D und GENE (Fusionsforschung), FHI-aims, ESPResSo++, OCTOPUS und i-PI (Materialforschung), ELPA (Eigenlöser), GROMACS (Molekulardynamik), ICON (Klimaforschung) und NECI (Quantenchemie).

Durch die Einbettung der geplanten Arbeiten in größere nationale und internationale Verbünde, können Synergieeffekte erzielt werden. So planen wir weiterhin Zusammenarbeit mit der HGF, insbesondere dem FZI; dem Gauss-Zentrum, der TUM, sowie internationalen Exascale Projekten, bei denen einige Projektpartner bereits engagiert sind, wie die EU Centers of Excellence BIOEXCEL, ESIWACE2, NOMAD und TREX; das PRACE-6IP Projekt MoPHA; und das US ECP Projekt.

Bei positiver Begutachtung ist geplant, mit den Arbeiten im Herbst 2021 zu beginnen, wobei Vorarbeiten schon jetzt laufen.

Erwin Laure