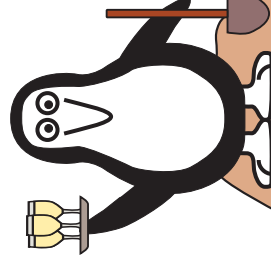


Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	5
Quantum Computing	6
Servus SuperMUC	11
Ferienakademie 2019	14
SPPEXA - ein Mosaik?	16
Time to Say Goodbye	22
Time to Say Hello	24
Notiz:*Notiz:*Notiz	25

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, www5.in.tum.de/quartl

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.03.2020**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,
→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Das Quartl erhalten Sie online unter <http://www5.in.tum.de/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-*
ring (BGCE)

Editorial

Zunächst lief das Projekt unter dem Arbeitstitel „Neue Mitte“ des Campus Garching, dann wurde „Galileo“ draus. Ein Paradebeispiel eines „Public Private Partnership“ – PPP – werde das sein, und es werde dem Campus eine völlig neue, lebendige Qualität geben. Also durchaus etwas, worauf man sich freuen darf. Lange wurde gebaut, inmitten des Garchingener Forschungscampus. Inzwischen steht die Webseite (galileo-tum.de), aber auch das beeindruckende Bauwerk steht, von außen wirkt es fast fertig. Ganz viel soll es einmal beherbergen: Hotel, Boarding House, Konferenzzentrum, Bürogebäude, Veranstaltungsstätte, Hörsaalkomplex, Shopping-Zentrum mit großem Supermarkt, Lifestyle-Oase mit Fitness-Studio, etc. etc. Einiges ist schon geraume Zeit geöffnet, andere Teile sind leider immer noch unzugänglich.

Als Erstes ging das Fitness-Studio in Betrieb, das von Anfang an durch sein innovatives und einzigartiges duales Fitness-Konzept bestach: Wer seinen Körper stählen wollte, musste längere Zeit zunächst einen Parcours überwinden – gewundene und sich immer mal wieder ändernde Pfade durch das Baustellengelände, Löcher und sonstige Hindernisse inklusive, sowie zugestellte Zugänge. Wer diesen mehr auf Ausdauer und Geschicklichkeit ausgerichteten ersten Teil seiner Ertüchtigungsstrategie erfolgreich durchlaufen hatte, durfte sich dann auf die bekannten nezeitlichen Folterwerkzeuge stürzen. Auch das Nord-Modul mit dem Büro-Trakt ist schon in Betrieb und wird von verschiedenen Einrichtungen genutzt.

Schlechter sieht's dagegen mit den drei anderen Modulen aus: Veranstaltungen und Hotels, sowie die darunter geplante Ladenzeile. Hier warten wir immer noch auf den Startschuss. Das ist umso ärgerlicher, als die vereinigten Lehre-Raumplaner der auf dem Forschungscampus versammelten TUM-Fakultäten die Räumlichkeiten (ein großes Audimax mit rund 1,400 Plätzen sowie knapp 20 kleinere Vorlesungs-, Übungs- und Seminarräume, die gemäß des ausgehandelten Nutzungskonzepts an bestimmten Tagen dem Lehrbetrieb an der TUM zur Verfügung stehen) dringend benötigen. An den

Informatik-Anfängervorlesungen beispielsweise nehmen inzwischen rund 2.000 Hörerinnen und Hörer teil, aktuell hat unser größter Hörsaal dagegen nur ca. 550 Plätze. Und es geht nicht nur um Hörsäle: 2.000 Studierende bedeuten rund 80 Übungsgruppen, die Räume benötigen. Zudem mussten bereits Tagungen verlegt werden, weil Galileo eben noch nicht zur Verfügung steht.

Immerhin gab es nun Mitte September ein „Soft Opening“: Doch dieser Begriff ist irreführend. Unter Soft Opening finden wir bei Wikipedia nämlich: *Als Soft Opening (englisch für Sanfte Eröffnung) wird eine inoffizielle Eröffnung für den Kundenbetrieb bezeichnet (meist bei Hotels), als Abgrenzung zum später angesetzten Grand Opening als offizieller Eröffnung. Ziel dieser Trennung ist es, das Hotel unter tatsächlichem Kundenbetrieb, jedoch unter Ausschluss der breiten Öffentlichkeit zu testen und den prominenten Gästen des Grand Openings ein eingespieltes Hotel anbieten zu können. Von „inoffizieller Eröffnung für den Kundenbetrieb“ kann nun allerdings kaum die Rede sein. Erstens ging es ganz schön offiziell zu, mit geladenen Gästen und ordentlich Prominenz. Zweitens war das nun wirklich kein „Kundenbetrieb“, wenn geladene Gäste in den Hörsaal strömen, den schlauen Redebeiträgen lauschen, ein paar Häppchen und Schlückchen konsumieren, und es dann aber wieder gut sein lassen. Keinesfalls also ein realistisches Test-Szenario.*

Nach wie vor gibt es keine verbindliche Aussage – nicht Januar, nicht März, nicht Juli; ja, nicht mal „vor dem Berliner Flughafen“ (oder vergleichbar). Aber vielleicht sollte man einfach schon mal das „Grand Opening“ planen. In der obigen Formulierung „den prominenten Gästen ein eingespieltes Hotel anbieten zu können“ muss man ja nur das Wort „anbieten“ durch „vorspielen“ ersetzen, und schon ist ein Trend gesetzt, ein neuer Begriff geboren – das „Potemkin Opening“.

Warum das alles so ist? Keine Ahnung, da spielen sicher viele Faktoren und Akteure rein; ist ja nicht das erste Mal, dass größere Projekte hierzulande so ihre Probleme haben. Aber wie dem auch sei, die Hoffnung stirbt zuletzt!

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, Frohe Weihnachten, ein paar ruhigere Tage, und dann erfolgreiche Soft und Grand Openings des Neuen Jahres 2020, das hoffentlich nur Gutes (darunter bitte auch die echte und vollständige Inbetriebnahme des Galileo!) bringen möge!

Hans-Joachim Bungartz.

* Notiz * Notiz * Notiz *

Termine 2020

- **Society for Industrial and Applied Mathematics:**
SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ20) –
SIAM UQ20 in Garching, Germany:
24.03.-27.03.2020 <https://www.siam.org/Conferences/CM/Conference/uq20>
- **preCICE Workshop 2020:**
The first Workshop of the coupling library preCICE (preCICE2020) –
preCICE 2020 in Garching, Germany:
17.02-18.02.2020 <https://www.precice.org/preCICE2020/>

Time to Say Hello



Seit Oktober 2019 ist Christian Mendl neuer Professor am Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen. Nach Stationen in Stanford und an der TU Dresden ist er nun an der TUM, die er aus Studienzeiten noch gut kennt. Christian Mendl forscht auf dem Gebiet Quantencomputing, einem Thema, das mittlerweile in vieler Munde ist¹, vor allem auch deswegen, weil diese neue Art von Hardware und Berechnung sehr vielversprechend bzgl. Leistung und Möglichkeiten ist.

Wir freuen uns sehr über Christian—nicht nur, aber auch, weil das den Abschied von Thomas leichter verschmerzen lässt.

Hans Bungartz, Tobias Neckel & Michael Rippl

¹siehe auch <https://www.datacenter-insider.de/ibm-und-die-universitaet-der-bundeswehr-muenchen-starten-ibm-qhub-a-734024/> und <https://www.unibw.de/home/presse-und-kommunikation/presstexte/presstext-quantencomputer.pdf/view>

Iterationsschleife

N=33

5. Dezember 2019

Francis Fukuyama hat ein neues Buch geschrieben. Diesmal erklärt er wieso es zu einer Krise der Demokratie kommt und führt diese Krise auf das Problem der Identität zurück. Nach dem Fall des Eisernen Vorhangs hatte Fukuyama noch den Siegeszug der Demokratie und damit das „Ende der Geschichte“ verkündet. Fast 30 Jahre danach zeichnet sich ein Siegeszug ab, aber es ist nicht der Siegeszug der westlichen liberalen Demokratie, sondern eher der Siegeszug der nicht-liberalen Demokratie. Zwei Diskussionen kommen mir dabei in Erinnerung. Ende der 90er hatte ich eine Diskussion mit einer chinesischen Mitarbeiterin. Sie ging davon aus, dass der Siegeszug des Kapitalismus automatisch auch zu einer Demokratisierung der Volksrepublik führen würde und war enttäuscht als ihre Struktur aufbauen kann aber nicht unbedingt in einer Demokratie enden muss. Seit einigen Jahren nun höre ich die Enttäuschung meiner osteuropäischen Kollegen, die erwartet hatten das umgekehrt die Demokratie notwendigerweise zu erfolgreichen marktwirtschaftlichen Strukturen führen würde und damit automatisch zu Wohlstand. Das vermeintliche Tandem „Marktwirtschaft und Demokratie“ erweist sich also als nicht notwendig gekoppelt. Das schliesst nicht aus, dass beide gleichzeitig auftreten. Es bleibt jedoch die Frage zu beantworten, wie man damit umgeht, dass Wohlstand und Demokratie auch auseinanderfallen können.^a

M. Resch

^aFrancis Fukuyama, Identität, Hoffmann und Campe, 2019

Quantum Computing

Quantum Computing hat sich von einer theoretischen Idee hin zu konkreten Umsetzungen in Forschungslaboren entwickelt, so dass sich High-Tech-Unternehmen einen wichtigen technologischen (Vor)sprung erhoffen. Etwa IBM investiert schon seit über zwei Jahrzehnten in die Entwicklung eigener Quantencomputer, und bietet sogar eine entsprechende Cloud-Infrastruktur an: im Rahmen der „IBM Q Experience“ kann man online einen Quantenschaltkreis grafisch aufstellen (siehe Abbildung 1 als Beispiel) und diesen dann entweder simulieren oder sogar auf einem „echten“ Quantencomputer laufen lassen. Die mittlerweile zu Google gehörende Forschungsgruppe um John Martinis in Santa Barbara, Kalifornien, verkündete diesen Oktober sogenannte „quantum supremacy“ [1], ein wohl eher unglücklich gewählter Begriff für die Entwicklung eines Quantencomputers (in diesem Fall mit 53 Qubits), dessen Rechenleistung in Spezialfällen die von (klassischen) Höchstleistungsrechnern übertrifft.

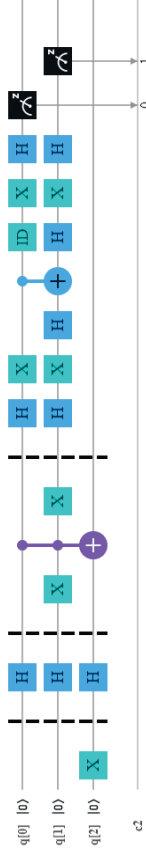


Abbildung 1: Quantenschaltkreis des Grover-Suchalgorithmus, der Einfachheit halber gezeigt für einen Zustandsraum der Größe 4. Jedes farbige Kästchen steht für eine bestimmte unitäre 2×2 Matrix. Der Abschnitt mit dem violetten Toffoli-Gate realisiert ein „Orakel“ das die gesuchte Lösung erkennt. Das Konzept eines Orakels lässt sich anhand der Primfaktorzerlegung erklären: es ist relativ einfach, einen Lösungsvorschlag zu überprüfen, aber für klassische Computer im Allgemeinen schwer, die Lösung zu finden.

Sowohl IBM als auch Google setzen hierbei auf sogenannte „superconducting transmon qubits“, bestehend aus einem kleinen Schwingkreis, der den Josephson-Effekt zwischen zwei Supraleitern ausnutzt. Ein großer Vor-

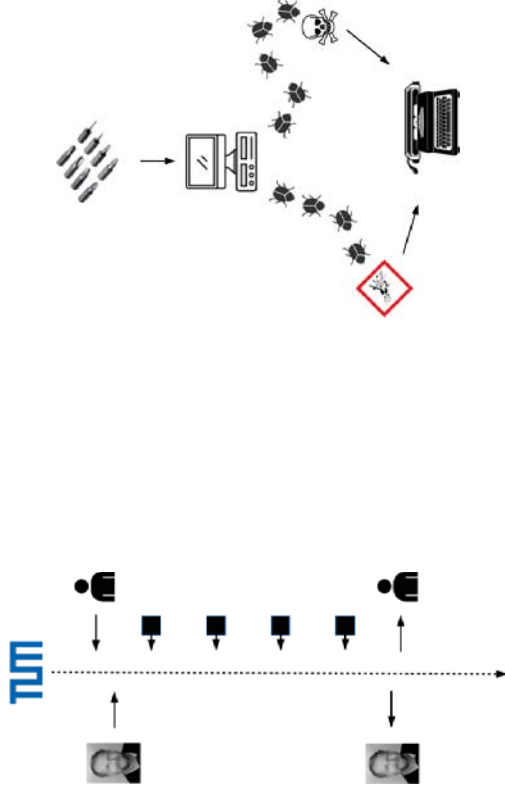


Abbildung 1: Bilderrätsel aus dem Buch „Ein wissenschaftliches Leben in Bildern“ Links Bild: Lösung Wolfgang A. Herrmann - Er wurde Präsident kurz bevor Thomas an die TUM kam und ging wenige Wochen nach ihm in Ruhestand. Währenddessen wurde er vier mal wiedergewählt. Rechtes Bild: Einsendungen der richtigen Lösung können bis zum 15.02.2020 an die Quartl-Redaktion erfolgen.

Zumindest bei der ein oder anderen Lehrveranstaltung gelten die anfangs angesprochenen Regeln aber doch noch, denn Thomas Huckle wird uns in Form von Lehraufträgen glücklicherweise noch für eine gewisse Übergangszeit zur Verfügung stehen.

Tobias Neckel & Michael Rippl

Time to Say Goodbye



Manche Dinge im (Arbeits-)Leben ändern sich gefühlt nie, getreu den Regeln „Das haben wir immer schon so gemacht!“, „Das haben wir noch nie anders gemacht!“ und „Da könnte ja jeder kommen!“. So einschränkend die Regeln bei organisatorischen Dingen sind, so angenehm sind sie, wenn es um die personelle Kontinuität geht. Deswegen haben wir die Pensionierung von Prof. Thomas Huckle (beim Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen, TUM) durchaus mit einem weinenden Auge gesehen; natürlich auch mit einem lachendem, denn wir gönnen jedem und insbesondere Thomas auch den wohlverdienten Ruhestand.

Er wechselte 1995 von Chemnitz kommend an die TUM und war der erste vom ehemaligen Präsidenten Wolfgang Herrmann berufene Professor. Nach 24 Jahren am Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen beginnt dort nun eine neue Zeitrechnung – ebenso für die TUM, da Präsident Herrmann praktisch gleichzeitig mit Thomas Huckle im vergangenen September in Pension ging.

Um ihm ein paar kurzweilige Momente im Ruhestand zu schenken wurde das kleine Rätselbüchlein „Ein wissenschaftliches Leben in Bildern“ entworfen und in Druck gegeben. Es beinhaltet Bilderrätsel wie sie Thomas für die Lehrstuhlweihnachtsfeier einige Male vorbereitet hat.

Wer den obigen Text aufmerksam gelesen hat, der sollte mit dem folgenden Rätsel aus dem Buch in Abb. 1 links beispielsweise keine Probleme haben. Zu erraten ist eine Person. Für die Profis unter den Ratetüchsen ist das rechte Rätsel gedacht.

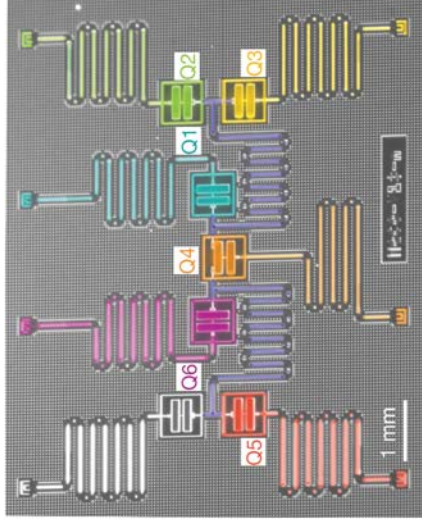


Abbildung 2: Ein von IBM entwickelter Quantenprozessor [2]. Die Komponenten sind in Falschfarben dargestellt. Einzelne superconducting qubits (Schwingkreise innerhalb der Quadrate) werden mittels des violetten Wellenleiter-Resonators gekoppelt.

teil besteht darin, dass etabliertes Know-How aus der Hochfrequenztechnik zum Steuern des Prozessors eingesetzt werden kann. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel eines solchen Prozessors aus dem Jahr 2017. Die einzelnen Komponenten sind relativ groß, so dass man sie fast noch mit bloßem Auge erkennen könnte.

Aufgrund der „Universalität“ der Quantenmechanik gibt es neben superconducting qubits auch andere vielversprechende Ansätze, wie ein abstraktes Qubit („Quanten-Bit“) oder auch eine kontinuierliche Quantenvariable, die physikalisch umgesetzt werden könnte. Zum Beispiel wird am benachbarten Max-Planck-Institut für Quantenoptik unter anderem an der Kopplung von Photonen geforscht; auf diese setzt z.B. das Unternehmen Xanadu mit Sitz in Toronto. Ionenfallen zum Zweck von Quantum Computing verwenden den Elektronenzustand einzelner Atome als Informationsträger, wie z.B. das Startup-Unternehmen IonQ mit Ytterbium-Ionenfallen. D-Wave mit Haupt-

sitz in Kanada setzt „quantum annealing“ ein, um das globale Minimum einer Zielfunktion zu finden; hierzu muss die gewünschte Berechnung allerdings als „Grundzustandsproblem“ eines Quanten-Hamiltonoperator formuliert werden, was weniger intuitiv ist als die gebräuchlichen Quantenschaltkreise. Ein etwas exotischerer Ansatz sind sogenannten topologische Quantencomputer: hierbei definieren die Raumzeit-Trajektorien von Anyon-Quasiteilchen die Quantenoperationen.

Da jetzt die prinzipielle Machbarkeit von Quantencomputern gezeigt ist, sind weltweit stark wachsende Investitionen und weiterführende Forschung zu erwarten. Aktuell könnte man schon ein Dutzend (Startup-)Firmen aufzählen. Europa bündelt seine Anstrengungen im „Quantum Technologies Flagship“, insbesondere im OpenSuperQ-Projekt (<https://opensuperq.eu>), das am Bau eines funktionierenden Prototyps am Forschungszentrum Jülich arbeitet. Innerhalb Europas sind auch das Quantum Device Lab an der ETH Zürich und das Startup IQM in Finnland (<https://www.meetiqm.com>) zu erwähnen, das engen Kontakt zum Walther-Meißner-Institut für Tieftemperaturphysik am Campus in Garching hat. Dieses Institut betreibt Grundlagenforschung unter anderem zu superconducting qubits.

Trotz der berechtigten Aufbruchstimmung sollte man sich vor Augen führen, dass Quantencomputer nicht einfach für schnellere Rechenoperationen stehen und aller Voraussicht nach klassische Computer nicht ersetzen, sondern lediglich als Spezialanwendung ergänzt werden (z.B. hochdimensionale Optimierungsprobleme und Sampling oder Quantensimulation mit Anwendungen in der Quantenchemie). Außerdem betreten wir jetzt erst die sogenannte „Noisy Intermediate-Scale Quantum“ (NISQ)-Ära [3], d.h. die Fragilität und experimentellen Einschränkungen (z.B. maximale Anzahl von Quantenoperationen, Akkumulierung von Störeinflüssen etc.) müssen bei der Entwicklung und Auswahl von Quantenalgorithmen berücksichtigt werden. Anders ausgedrückt arbeiten aktuelle Quantencomputer noch nicht auf einem ähnlichen Abstraktionsniveau wie klassische Rechner. Dies wird voraussichtlich erst mit Hilfe von „quantum error correction“ möglich, bei der allerdings pro logischem Qubit eine Größenordnung von 100 physikalischen Qubits benötigt

der deutschen Industrie 4.0), woraufhin Forschung zu intelligenten Geräten für eine digitale Gesellschaft gefördert wird. Außerdem dreht sich viel um Japans (bald) neuen Kronprinz (unter Supercomputern): Fugaku. Ein Teilnehmer analysierte „China arbeitet an einer regelungs-orientierten Künstlichen Intelligenz (AI, *artificial intelligence*)“, die Forschung über AI in den USA ist getrieben von GAFA (Google, Amazon, Facebook, Apple). Wie wäre es mit einem Programm von Ländern (F, J, D), die sich in den Werten nahestehen. *Human-centered AI?*“.

Außer Interessensbekundungen können wir leider konkret keine Nachfolgeförderung im HPC-Feld ankündigen. Ein paar SPPEXA-Abkömmlinge sind Partner in japanischen Projekten, aber einen Zoo (wie SPPEXA) wird es nicht geben. Doch vielleicht gibt es nach einer Dürreperiode, auch mal wieder f(r)uchtbare (nicht furchtbare) und das neue/weitere Zusammenarbeiten ergibt sich erst Jahre später.

Stay tuned - im Januar 2020 erscheint der Tagungsband in OpenAccess: SPPEXA 2016–2019.



Die rund 100 Teilnehmer in Tokio. Von deutscher SPPEXA Seite waren etwa ein Dutzend vor Ort.

Severin Reiz



Equality at Exascale: SPPEXA beim Bosch Research Campus in Renningen

SPPEXA goes Tokyo:

Anfang November dieses Jahres begab sich SPPEXA auf die politische Bühne nach Tokio. Wir waren zu Gast in der französischen Botschaft, und wurden von der deutschen Botschafterin, dem französischen Botschafter, und einem japanischen Vertreter für Wissenschaftszusammenarbeit begrüßt. Für SPPEXA ist dieses politische Terrain kein Neuland mehr: 2017 veranstaltete SPPEXA in der französischen Botschaft, 2018 in der deutschen, und 2019 wieder in der französischen (alle in Tokio) einen Workshop für die trilaterale Zusammenarbeit im HPC. Der Workshop hieß diesmal Convergence of HPC and Data Science for Future Extreme Scale Intelligent Applications, und nachdem SPPEXA zum 30. April 2020 kostenneutral ausläuft, ist es *kurz vor zwölf* was zukünftige Förderkanäle angeht.

Nach der Abtast-Phase am ersten Tag mit strukturellen Vorträgen, ging es am zweiten Tag thematisch in die Tiefe mit Fach-Vorträgen. Am dritten Tag diskutierten wir in Arbeitsgruppen, wie sich das HPC-Umfeld verändert, und welchen Teil Deutschland, Frankreich und Japan spielen könnte. In Japan dreht sich (förderpolitisch) viel um Society 5.0, (scheinbar inspiriert von

wird. Bei 100 logischen Qubits also etwa 10.000 physikalische, anstatt gegenwärtig 50!

Worin besteht nun der Vorteil von Quantencomputern im Vergleich zu klassischen Rechnern? Entscheidende Zutaten sind das Superpositionsprinzip und Verschränkung: im Unterschied zum klassischen Bit kann ein Qubit eine Überlagerung (Superposition) von 0 und 1 annehmen. In quantenmechanischer Notation wird ein Qubit beschrieben durch

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

wobei $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ komplexe Koeffizienten sind, die gemäß $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ normiert sind.

Durch geschickte Ausnutzung des Superpositionsprinzips kann man (vereinfacht gesagt) beide Fälle, 0 oder 1, gleichzeitig durchrechnen. Bei n Qubits ergibt das einen 2^n -dimensionalen Zustandsraum, d.h. exponentiell viele Möglichkeiten, die ein Quantencomputer sozusagen in einem Aufwasch abarbeiten kann (siehe z.B. [4] für eine Einführung in Quantum Computing). Eine der bekanntesten Anwendungen ist der Shor-Algorithmus [5] zur Primzahlzerlegung mit polynomieller Laufzeit in der Anzahl der Eingabe-Bits. Dies lässt sich als einen tiefgehenden, prinzipiellen Unterschied zwischen der klassischen und der Quantenwelt interpretieren, und könnte (aus praktischer Sicht) in Zukunft das RSA-Kryptosystem unsicher machen. Mittlerweile wurde mathematisch bewiesen, dass ein Quantencomputer bestimmte Problemstellungen aus der linearen Algebra „besser“ lösen kann als ein klassischer Rechner [6].

Auch wenn (oder gerade weil) die Prinzipien der Quantenmechanik recht bizarr erscheinen, kann es erhellend sein, sie auf scheinbar unverwandte Gebiete anzuwenden, etwa auf das Gefangenendilemma [7] aus der Spieltheorie. „Quantum games“ umfassen mittlerweile Quanten-Puzzles, Quanten-TicTacToe oder sogar Quanten-Schach. Ein befreundeter Kollege von mir hat Quanten-TicTacToe (<https://quantumtictactoe.com>) als Handy-App implementiert. Neben dem Spaßfaktor eignen sich solche Quantenspiele meiner Meinung nach gut als didaktische Werkzeuge, um quantenmechanische Prinzipien einem breiteren und jüngeren Publikum näherzubringen.

Zusammengefasst kann man sicher davon ausgehen, dass Quantentechnologie in Zukunft eine wichtige Rolle spielen wird. Hierzu gehören auch verwandte Anwendungen wie Quantenkommunikation und -kryptographie oder hochgenaue Messungen bzw. Sensoren, die auf Quanteneffekten basieren. Europa sollte deshalb die Forschung und Investitionen in diesem Feld weiter ausbauen.

Christian B. Mendl

Literatur

- [1] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, and et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574:505–510, 2019.
- [2] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, and et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549:242–246, 2017.
- [3] J Preskill. Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, 2:79, 2018.
- [4] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.
- [5] P. W. Shor. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 124–134, 1994.
- [6] S. Bravyi, D. Gosset, and R. König. Quantum advantage with shallow circuits. *Science*, 362:308–311, 2018.
- [7] J. Eisert, M. Wilkens, and M. Lewenstein. Quantum games and quantum strategies. *Phys. Rev. Lett.*, 83:3077 – 3080, 1999.

Chancengleichheit in SPPEXA:

Wichtig für SPPEXA ist nicht nur der kurzfristige wissenschaftliche Fortschritt, sondern das Bauen eines langfristig nachhaltigen Wissenschaftsumfelds mit ausgewogenem Nachwuchs. Mit nachhaltigem Nachwuchs meine ich nicht den jüngsten im Bosch-Bild ;-), sondern ein Arbeitsumfeld, das unterrepräsentierte Gruppen fördert. Bewerte ich eine/n Bewerber/in positiv, weil sie/er ähnlich zu meinem Hintergrund ist? Oder bin ich werteneutral?

„Gleiche Chance für alle“: Im high-performance computing (HPC) sind Männer überproportional vertreten, und so richten sich Chancengleichheitsmaßnahmen hauptsächlich auf die Förderung von weiblichen Forscherinnen. Im Vorhinein an das Abschluss-Symposium in Dresden (am 21. Oktober 2019) diskutierten SPPEXA Wissenschaftlerinnen verbessernde Maßnahmen für unser HPC-Feld ”Women in HPC: Diversity, equality and representation now and in the future”.

Doch damit nicht genug: Auf Idee (federführend von Neda Ebrahimi Pour und Theresa Pollinger) organisierte SPPEXA am 2. und 3. Dezember 2019 den Workshop: Equality at Exascale. Nachdem SPPEXA ausläuft, stellt sich für viele die Frage: *Quo vadis?* Bosch Research und IBM luden eine Gruppe von SPPEXA’lern ein, um mit ihnen über ihre Diversitätsmaßnahmen zu diskutieren. Zur Diversität gehören ja auch (mindestens?) zwei Geschlechter, und so nahmen 8 männliche und 8 weibliche (Post-)Doktoranden teil.

Bei Wissenschaftlern darf aber auch der technische Inhalt nicht fehlen: beginnend mit der Rolle von HPC bei IBM/Bosch ging’s an beiden Tagen am Ende immer ums Neueste/Innovativste, *Quantum Computing*.

zwei sehr eng kollaborierende Doktoranden: Christian Schmitt und Sebastian Kuckuck beschäftigten sich beide mit *domain-specific languages* für HPC an der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg. Titel waren respektive „A Domain-Specific Language and Source-to-Source Compilation Framework for Geometric Multigrid Methods“ und „Automatic Code Generation for Massively Parallel Applications in Computational Fluid Dynamics“. Ganz im Sinne von SPPEXA: Wissenschaft ist kein Einzel-Wettkampf, sondern ein „Mannschaftssport“. Wissenschaft profitiert von Zusammenarbeit. Bei den Studenten-Preisen gewann Piet Jarmatz, der seine Masterarbeit an der TUM schrieb. Titel: „Parallel Noise Reduction for Transient Molecular-Continuum Coupled Flow Simulations“. Die Nachwuchsförderung zeigt Früchte: Nun ist Piet Doktorand an der Helmut-Schmidt-Universität in Hamburg bei dem neu-berufenen ehemaligen SPPEXA Programm-Manager Professor Dr. Philipp Neumann.



Die SPPEXA Thesis Award Preisträger. Links PhD Preisträger Sebastian Kuckuck und Schmitt's betreuender Professor Jürgen Teich. Rechts Masterand Piet Jarmatz mit Hans Bungartz.



Servus SuperMUC

Er wiegt so viel wie 42 Elefanten und gehört jetzt zum alten Eisen: Nachdem er mehr als neun Milliarden Stunden gerechnet und damit 6,3 Millionen Aufträge für Forscherinnen erledigt hat, wurde der 250 Tonnen schwere SuperMUC, eigentlich ein System aus zwei Computer-Anlagen, teilweise abgebaut und der Wiederverwertung zugeführt. Rund 133 Millionen Euro haben der Freistaat Bayern und der Bund in die nationalen Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) investiert. „Die rasante Entwicklung der Informatik führt dazu, dass so ein Rechner innerhalb von sechs bis sieben Jahren so veraltet ist, dass sein Betrieb nicht mehr wirtschaftlich ist, ein neues System also mehr Leistung für weniger Geld bringt“, erklärt Professor Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Aber Rechenleistung ist nicht alles. Als Dienstleister unterstützen und beraten wir Wissenschaftler bei der Modellierung von Daten und bei der Entwicklung von Simulationen für die Höchstleistungsrechner.“

6 Computerjahre ersetzen 24.000 Menschenjahre

Zwischen 2012 und 2018/19 rechnete der SuperMUC für 820 Projekte und 2230 Forscherinnen aus 23 Nationen. Mit dem größten Auftrag, „Beobachtbare Nukleone als Testfall für die (Teilchen)Physik jenseits von Standardmodellen“, war der Computer knapp 212 Millionen Rechnerstunden beschäftigt: Wenigstens 300 Menschen hätten 80 Jahre lang rechnen müssen, um die Bewegungsdaten von Neutronen und Protonen auszuwerten und damit den Auftrag des Deutschen Elektronen Synchrotron (DESY), dem Zeuthener Zentrum für Grundlagenforschung, zu erledigen. Diese Berechnungen helfen, die schwarze Materie im All zu bestimmen, vielleicht liefern sie noch Ideen für High-Tech-Materialien.

„Es ist unwürdig, die Zeit von hervorragenden Leuten mit knechtischen Rechenarbeiten zu verschwenden“, meinte einst der Forscher Gottfried Wilhelm Leibniz. Weil Maschinen genauer und schneller rechnen, wurde der SuperMUC (Phase 1 und 2 zusammen) aus 12525 Knoten und rund 240.000 Rechenkernen erbaut. In 238 Racks angeordnet und mit mehr als 250 Kilome-

tem Glasfaserkabel und 46 Kilometern Kupferrohren vernetzt, erreichte der Supercomputer in seinen Glanzzeiten eine Spitzenleistung von 6,8 PFLOP/s. Im Jahr 2012 wurde die erste Implementierung von SuperMUC – SuperMUC Phase 1 – zum viertschnellsten Computer der Welt gekürt, 2018 erreichte er nur noch den 64.

Big Data in der Wissenschaft

Zum Start des SuperMUC produzierten vor allem Strömungsmechanik (insg. 2,16 Mrd. Rechenstunden), Astrophysik (1,9 Mrd.) oder Bioinformatik (1 Mrd.) so viele Daten, dass nur ein Supercomputer sie auswerten konnte. Durch die Digitalisierung explodierten in weiteren Wissensgebieten die Zahl der Daten. SuperMUC rechnete für Meteorologen (153 Mio. Rechenstunden), Plasmaphysikerinnen (80 Mio.), Ingenieure (Strukturmechanik) und Materialexpertinnen (je rund 35 Mio.) und für Mediziner (9 Mio.), zuletzt sogar für Wirtschaftsspezialistinnen (10.000 Std.) und chemische Physik (42239 Std).

Die Datenmengen wachsen weiter, der Bedarf an Virtualisierung und Visualisierung ebenfalls. Aus Tausenden von Fotos, Plänen, Malereien errechnete der SuperMUC räumliche Modelle des Kaisersaals der Neuen Residenz Bamberg oder des Gebetsraums in Schloss Oberschleißheim: „Virtualisierungen und Visualisierungen benötigen enorme Rechenkraft und werden heute auch von Sozial- und Kultur-Wissenschaften nachgefragt“, berichtet Krankl. „3D-Modelle öffnen Forschung und Öffentlichkeit unzugängliche Kunstwerke, Simulationen helfen Gesellschafts- und Naturphänomene besser zu veranschaulichen und zu verstehen.“ Rechenzentren erforschen die dafür notwendigen Anwendungen: In 150 Workshops und Kursen wurden 4000 Spezialisten für die Arbeit am SuperMUC qualifiziert. Zudem vernetzen sich Wissenschaft und Forschung: So arbeitete SuperMUC knapp 5,4 Millionen Aufträge aus Deutschland ab, vor allem aus Bayern (4,5 Mio.) und Nordrhein-Westfalen (171.426). 10 Prozent seiner Rechenzeit oder 3 Prozent seiner Aufträge wurden an Forscherinnen im Ausland vergeben, vor allem nach Italien (34.381 Jobs) und Frankreich (34.170). Aus der EU wurde der SuperMUC knapp 114.000 Mal beansprucht, 30.000 Mal indes aus Norwegen, der Schweiz, der Türkei und Israel, aus Neuseeland und den USA.



Die rund 150 Konferenzteilnehmer vor dem Tagungshotel in Dresden

SPPEXA in Dresden:

Das Abschluss-Symposium von SPPEXA fand vom 21.-23. Oktober 2019 in Dresden statt. SPPEXA wurde in zwei drei-jährigen Phasen – also insgesamt von 2013 bis 2019 – von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert. Solch ein Abschluss-Symposium ist üblich bei DFG Projekten, und so konnten wir uns über rund 150 Teilnehmer freuen.

Jedes Teilprojekt von SPPEXA (17 Projekte) organisierte ein Mini-Symposium: es bestand üblicherweise aus vier 20-minütigen Vorträgen, jeweils zwei intern von Wissenschaftlern aus dem Projekt, und zwei von externen Wissenschaftlern. Ziel war es, die Ergebnisse zum Projekt-Ende zu diskutieren, und zusätzlich durch die externen Vorträge auch den Weitblick zu behalten.

Viele der Sprecher kamen aus dem Ausland nach Dresden (30 aus 66), und förderpolitisch interessant, die Vortragenden waren ansatzweise geschlechterausgewogen mit 15 weiblichen Sprechern.

Ebenfalls wurden auf dem Event auch Preise für herausragende Doktor-, Bachelor- und Master-Arbeiten vergeben. Dieses Jahr gabe es zwei Novi: Zum einen wurde der Zeitraum der Arbeiten nicht wie üblich jährlich, sondern von Anfang 2018 bis Mitte 2019 betrachtet (Förderungsgründe). Zum anderen gewann diesmal nicht ein einziger Neu-Doktor, sondern *ex aequo*

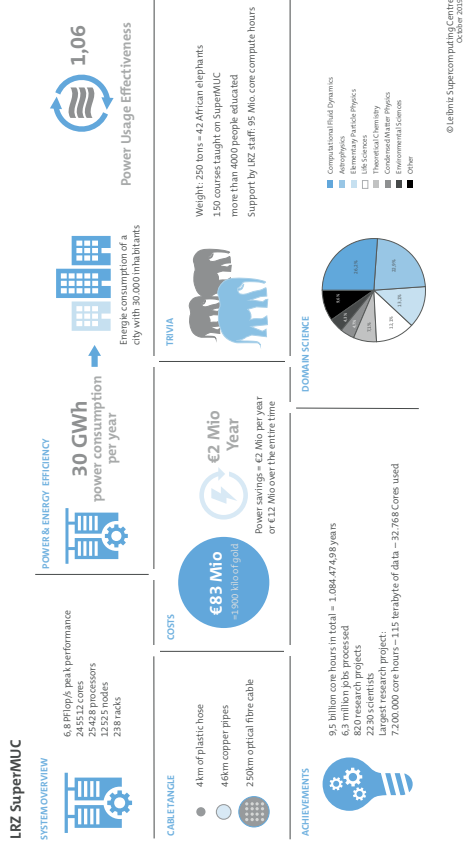
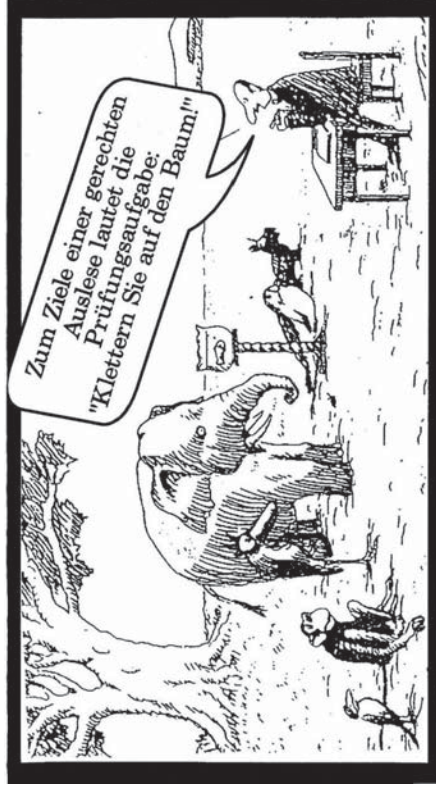
SPPEXA - ein Mosaik?



Das letzte Quartal war sehr lebhaft im Schwerpunktprojekt „Software for Exascale Computing“, kurz SPPEXA: unser Abschluss-Symposium in Dresden, Gleichstellungs-Aktivitäten, und ein tri-lateraler Workshop in Tokio. Und dann kommt dann bald noch ein 600-seitiger Tagungsband...

*SPPEXA - ein Mosaik aus vielen Aspekten.
Oder: SPPEXA - eine Sinfonie in vier Sätzen.
Oder: SPPEXA - ein Zoo aus aller Welt.*

Wohlgemerkt, mit dem Zoo meine ich nicht die Wissenschaftler selbst, obwohl die (*wir?*) bekanntlich ja auch ab und zu abgedrehte Vögel sein können. Mit dem Zoo will ich auf verschiedene Methoden anspielen: Ein Zoo aus Methoden und Arbeitsweisen. Ein interdisziplinärer (und internationaler) Zoo sozusagen – Anwendungs-Wissenschaftler (z.B. Geo-Physiker) in einem Projekt mit beispielsweise Mathematikern und Informatikern. Synergie durch Interdisziplinarität, und nicht nur „das schnellste Tier gewinnt“.



Ausgezeichnete Ergebnisse mit wenig Energie

Die Ergebnisse, die der Garching Supercomputer vorlegte, gewannen internationales Lob: So schuf er für das Projekt SeisSol zur Darstellung von Erdbebenwellen mehrere 2D- und 3D-Modelle. Eine der Simulationen des internationalen Teams erreichte 2014 das Finale des Gordon Bell Awards für Hochleistungsrechnen. Doch schnelles Rechnen benötigt Energie – seit den Anfängen des SuperMUC kommt die aus erneuerbaren Quellen. Der Supercomputer brauchte im Schnitt 30 GWh pro Jahr – etwa so viel wie 7500 Vier-Personen-Haushalte oder eine Stadt mit etwa 30.000 Einwohnern.

Hört sich nach viel an, war aber extrem sparsam. Durch den mehrfach ausgezeichneten Kühl-Kreislauf sparte SuperMUC mehr als 32 Millionen Kilowatt-Stunden Strom. Summa summarum waren das 5 Millionen Euro, die in andere Wissenschaftsprojekte fließen konnten.

Sabrina Schulte

Ferienakademie 2019: ‘Oh, dear!’

FERIENAKADEMIE

Two weeks on the Italian Alps, 3 universities, 11 courses, several hikes, three full meals and a coffee break per day, two tournaments, a race, and a clear win in the Kaiserschmarrn-refill game. What else could one expect from Ferienakademie?

Internal information from the hotel Murrerhof report explosions, students dancing strangely in front of a computer, endless clapping for every sentence of some guy with long hair, and faces puzzled to the word “vegetarian”. The locals are, however, used to the strange traditions of Ferienakademie coming to Sarntal every September. Relaxed days full of presentations and perfectly-orchestrated (scaled) scrum sessions, adventurous days of wandering on the mountains, and cozy evenings including wine, improvised music, extended *Bang!* sessions, and a scent of fireplace. Particularly welcome was this year Prof. Denninger’s farewell, homemade wine for his last day in office.

Students of every hotel participated also in the *Table-tischtennis*® and chess tournaments, as well as the traditional run-around-the-lake, giving Murrerhof a “medal” in every sport. It remains unclear though, what happened to those that overtook the director during the run.

Extending the long tradition of fence studying, the participants of courses #3 and #5 also contributed a new type of fence to the research community: the *human fence* (pictured).



Figure 1: Many fences, there are. But human fences? Only one!



Figure 2: Course #5 demonstrating their (professor-incompatible) game.

In a different area of research, students of course #5 developed a Kinect-enabled Fluid-Structure-Interaction game, based on a parallel 2D LBM simulation, with pseudo-3D visualization. Even though impressive, the game was characterised as “professor-incompatible” by the clients, Prof. Bungartz and Prof. Pflüger, while Prof. Rüde also had a chance to witness an early version. Interested in comparing with their scores? Try the game in one of the next open doors days!

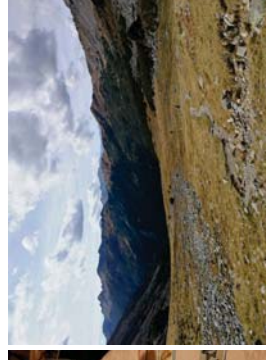


Figure 3: Left: Explosive experiments with Prof. Denninger.
Middle: Cozy nights with local wine and computer-aided *Bang!*.
Right: Endless hikes on top of endless mountains.

Gerasimos Chourdakis