



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

A large white square is positioned in the lower-left quadrant of the page. Inside this square, the lowercase letters 'lrz' are printed in a bold, dark blue, sans-serif font.

lrz

The title '2023 JAHRESBERICHT' is written vertically on the right side of the page. The year '2023' is in a larger, bold, blue font, while 'JAHRESBERICHT' is in a smaller, white, all-caps, sans-serif font.

2023 JAHRESBERICHT

JAHRESBERICHT 2023



Stand: November 2024
LRZ-Bericht 2023





INHALTSVERZEICHNIS

01	Chronik	4
02	IT-Dienste für die Wissenschaft	10
03	Neue Technologien	28
04	Forschung	48
05	Aus- und Weiterbildung	62
06	Menschen	70
07	Kooperationen	78
08	Zahlen und Fakten	88



Von links: Prof. Dieter Kranzlmüller, Prof. Martin Schulz, Prof. Thomas Seidl, Prof. Hans-Joachim Bungartz

ERKENNTNIS- GEWINN AUSBAUEN, VERSTEHEN VERTIEFEN: WIR LASSEN WISSEN WACHSEN

Ein Jahr voller Dynamik: 2023 hat das LRZ neue Maßstäbe in Forschung und Technologie gesetzt. Ein Rückblick auf unsere wegweisenden Entwicklungen.

2023 war für das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ein Jahr voller Dynamik und Wachstum. Als Digitalisierungspartner für die Universitäten und Hochschulen in Bayern haben wir unser Angebot weiter ausgebaut; als nationales Höchstleistungsrechenzentrum und europäischer Quantencomputer-Standort haben wir die Leistungsfähigkeit unserer Systeme und Infrastrukturen nochmals deutlich gesteigert. Wie immer standen dabei nachhaltige IT-Lösungen und der verantwortungsvolle Umgang mit Ressourcen im Fokus unserer Arbeit (Kapitel 2 + 3).

Besondere Meilensteine in diesem Jahr waren die Inbetriebnahme der High-Performance Data Analytics Plattform terrabyte in Kooperation mit unseren Partnern vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), die Inbetriebnahme der weltweit ersten LED-basierten CAVE in unserem Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) sowie der Ausbau unserer Aktivitäten im Quantencomputing mit dem ersten Ionenfallen-basierten System am LRZ und dem Zuschlag als europäischer Quantencomputing-Standort (Kapitel 3).

MIT NEUEN TECHNOLOGIEN UND PARTNERSCHAFTEN UNTERSTÜTZEN WIR DIE SPITZENFORSCHUNG VON MORGEN



Diese Entwicklungen tragen dazu bei, dass das LRZ nicht nur ein verlässlicher Partner für die Wissenschaft bleibt, sondern auch zukunftsweisende Technologien für die Gesellschaft nutzbar macht. Mit den Geschichten über unsere Anwenderinnen aus verschiedensten wissenschaftlichen Gebieten – von Astrophysik über Bioinformatik bis hin zur Archäologie – zeigen wir in Kapitel 4 genau das!

Bei unserem Überblick über Aktivitäten, Erfolge und Herausforderungen stellen wir erneut gerne viele LRZ-Kolleginnen in den Fokus. Ihr Engagement, ihre Motivation, ihr Know-how und ihre Macherinnen-Mentalität sind der Schlüssel zur erfolgreichen Umsetzung unserer ambitionierten Ziele. Umso mehr freut es uns, dass wir 2023 die 300er-Marke bei der Anzahl der Beschäftigten knacken konnten und die LRZ-Familie nun deutlich größer und noch diverser geworden ist. Mehr dazu lesen Sie in den Kapiteln 5 und 6.

In einer Zeit, in der wissenschaftliche Forschung zunehmend auf digitalisierte Prozesse und herausragende IT-Ressourcen angewiesen ist, haben wir mehrfach unter Beweis gestellt, dass das LRZ nicht nur in technischer Hinsicht zu den führenden wissenschaftlichen Rechenzentren gehört, sondern auch in der Unterstützung interdisziplinärer Zusammenarbeit. Gemeinsam mit unseren Partnern, den Universitäten, Forschungseinrichtungen und Technologieanbietern konnten wir neue Synergien schaffen – wie die Beiträge in Kapitel 7 eindrucksvoll zeigen.

Ebenso eng verbunden ist unser Erfolg natürlich mit der vertrauensvollen Zusammenarbeit mit wichtigen Stakeholdern: Neben dem Präsidenten der BAdW, Prof. Dr. Markus Schwaiger und der Generalsekretärin Bianca Marzocca zählt dazu insbesondere unser direkter Ansprechpartner im Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst, Herr MR Georg Antretter. Durch den intensiven Austausch mit dem LRZ-Beirat, den langjährigen Ehrenbeiräten und dem SuperMUC-Lenkungsausschuss gewinnen wir immer wieder aufs Neue wertvolle Perspektiven und Inspiration.

Daher blicken wir gemeinsam zuversichtlich in die Zukunft und freuen uns darauf, auch im nächsten Jahr neue Maßstäbe in der digitalen Forschung zu setzen.

Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller
Vorsitzender des Direktoriums

Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz
Mitglied des Direktoriums

Prof. Dr. Martin Schulz
Mitglied des Direktoriums

Prof. Dr. Thomas Seidl
Mitglied des Direktoriums



01

CHRONIK

Zeitreise 2023

6

EXPEDITION DURCHS LRZ-JAHR 2023

FEBRUAR

SPIELEND ZU MEHR SICHERHEIT

Am LRZ tüfteln IT-Spezialistinnen in einem Planspiel die Prozesse für den Re-Start nach einem Blackout aus.

FEBRUAR

ZUKUNFT PLANEN



Judith Gerlach im Rahmen einer Veranstaltung des Münchner Kreis zu Quantencomputing am LRZ.

APRIL

WIEDER OFFEN



Girl's Day am LRZ.

Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) gibt's viel zu entdecken: Davon überzeugten sich im Herbst 2023 rund 700 kleine und große Menschen. Zum nationalen Maustag am 3. Oktober öffnete das LRZ seine Türen. Und wie die Gäste beim Besuch hatten rund 40 LRZ-Mitarbeitende sehr viel Spaß dabei zu zeigen, wie das LRZ Hochschulen und Forschungsinstitute mit zuverlässigen IT-Dienstleistungen, innovativen Hochleistungsrechnern und sicheren Datenspeichern versorgt. Hier visualisieren Forschende zudem Studienergebnisse und transformieren sie in virtuelle Welten – Zeit wird's für eine Expedition durchs LRZ.



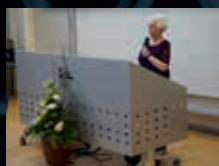
Mit einer Expedition durchs Leibniz-Rechenzentrum stimmen wir Sie ein auf die Highlights des Jahres 2023 und die Lektüre des LRZ-Jahresberichts.

MAI

JUNI

JUNI

BEWEGTES LEBEN



Dr. Agnes Kaposi erzählt vom Holocaust und von der Arbeit als Frau in der IT.

MIT BRIEF UND SIEGEL



EuroHPC Joint Undertaking beauftragt LRZ mit dem Aufbau eines hybriden Quantencomputer.

FÜR SICHER EMPFUNDEN

Externe Prüferinnen beurteilen das Servicemanagement und die Informationssicherheit am LRZ und erneuern die Zertifikate.

KI ERWEITERT DAS METHODEN-SET DER FORSCHUNG

Diese führt zuerst in den Doppelwürfel des LRZ, dort wurden 2023 hochmoderne Systeme aufgebaut: terrabyte heißt etwa die Hochleistungsplattform für die Auswertung von Satellitenaufnahmen. Sie entstand in Kooperation mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), macht durch schnelle Datenleitungen dessen Archiv in Oberpfaffenhofen für die Forschung zugänglich und unterstützt mit Hilfe von KI-Tools die Analyse von Daten sowie deren Verarbeitung an den Supercomputern des LRZ – etwa für Simulationen zu Klima und Umwelt.

Eine Etage darüber hat das LRZ-Flaggschiff, der SuperMUC-NG, Zuwachs bekommen: Zur Halbzeit seiner Laufzeit ergänzen die schwarzen Schränke von Phase 2 (SNG-2) das System. SNG-2 integriert erstmals Graphics Processing Units (GPU), die das High-Performance Computing (HPC) beschleunigen und sich für KI-Methoden eignen. Klassische Simulationen können nun mit statistischen Modellen kombiniert werden. Nebenbei tüfteln die LRZ-Spezialistinnen am Nachfolgesystem von SuperMUC-NG, und dabei wächst die Gewissheit, dass die Technik zur Energieversorgung und

Kühlung mehr Platz benötigen wird. Unter Hochdruck wird folglich eine Erweiterung des LRZ geplant.

QUANTENCOMPUTING FÜR DEUTSCHLAND UND EUROPA

Wie GPU könnten Quantenprozessoren (QPU) das Supercomputing beschleunigen. Im Keller des LRZ erlaubt das Quantum Integration Centre (QIC) einen Blick auf neueste Technologie, die für die Integration in Supercomputer vorbereitet wird. In Kooperation mit Instituten aus dem Munich Quantum Valley (MQV) wurde ein erster analog-digitaler Quantencomputer für Forschungszwecke konstruiert. Von diesen Erfahrungen will die Initiative EuroHPC Joint Undertaking profitieren und siedelte 2023 eines von sechs europäischen Quantensystemen am LRZ an. Schon erschließen

sie im QIC weitere Forschungsfelder: Neben die eleganten Kryostaten, die QPU auf Basis von Supraleitern kühlen, hat sich ein System auf Basis einer Ionenfalle von Alpine Quantum Technologies (AQT) gesellt.

FORSCHUNG ALS GROSSES KINO

Beliebt bei Jung und Alt ist das Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) über dem QIC. Hier wird Forschung in brillanten Bildern anschaulich und zum großen Kino. 2023 hat das LRZ seine CAVE erneuert. Der fünfseitige Würfel besteht als erster seiner Art komplett aus Leuchtdioden (Light Emitting Diodes / LED). 1620 LED-Panels verbessern die Bildqualität und ermöglichen stereoskopische Darstellungen mit bis zu 60 Bildern pro Sekunde für jedes Auge. So können Forschende in Simulationsdaten abtauchen, in Virtueller

JULI

AUGUST

OKTOBER

GUT ZU FORSCHEN



Wissenschaftsminister Markus Blume lässt sich am LRZ Quantencomputer erklären.

GROSSES INTERESSE



Prof. Dieter Kranzlmüller (LRZ), Dr. Rolf-Dieter Jungk (Bay. Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst), Prof. Markus Schwaiger (BAdW) und Prof. Stefan Dech (DLR) geben terrabyte für den Betrieb frei. Die Hochleistungsplattform unterstützt die Analyse von Satellitendaten

FORSCHUNG IM BILD



Das LRZ eröffnet seine neue CAVE und zeigt Simulationsergebnisse sowie Historisches in brillanten Bildern und in Virtueller Realität.

Realität (VR) agieren oder digitalisierte Räume wie die Villa des Tempelvorstehers Sîn-Nādā und seiner Frau Nuṭṭupum aus dem 2. Jahrtausend vor Christus betreten und erkunden.

ZUVERLÄSSIGE DIENSTE, SICHERE DATEN

Damit Computer und Netze, Datenspeicher und IT-Services jederzeit zuverlässig funktionieren, lässt das LRZ seine Prozesse von externen Inspektorinnen überprüfen. LRZ-Expertinnen spielen außerdem Ernstfälle durch oder ziehen teilweise brutal die Stecker. So beweisen sie sich selbst und den Prüferinnen, dass Doppelstrategien greifen und laufende Geräte die Arbeit eines ausgefallenen übernehmen. Das überzeugt: 2023 wurden die Abläufe des LRZ erneut als vertrauenswürdig und sicher zertifiziert.

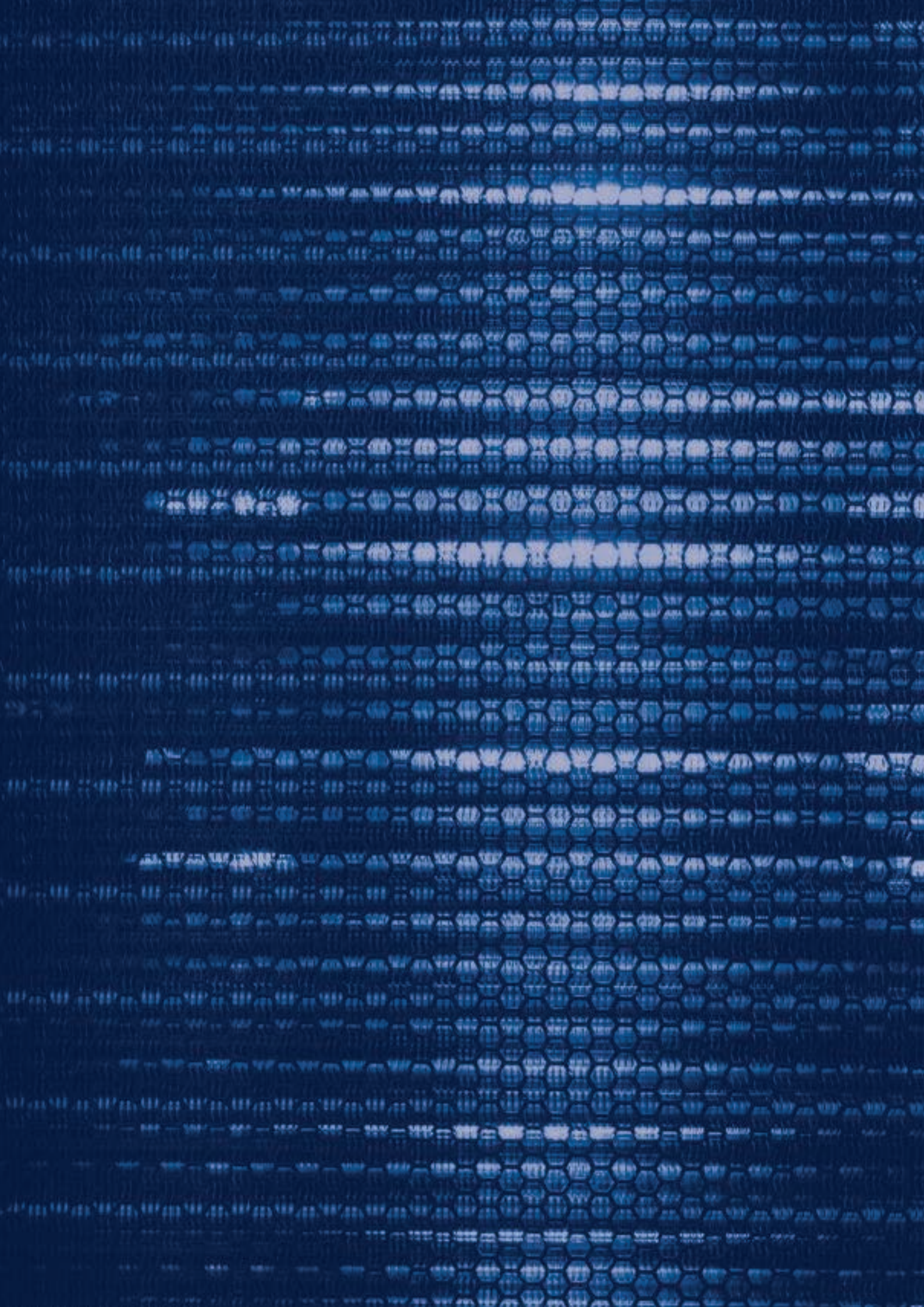
Im Digitalverbund Bayern kooperiert das LRZ mit bayerischen Hochschulen, um IT-Dienste und -Strategien zu verbessern. Das Hochschulübergreifende IT-Servicezentrum für Informationssicherheit (HITS-IS) schützt etwa durch Koordination, Sicherheitsüberprüfungen und Schadensabwehr die akademischen IT-Systeme. Weitere Initiativen zur Optimierung und Erkundung von Computern sind bereits in Vorbereitung, ebenso die Ansiedelung weiterer Zukunftstechnologien. Gewiss gibt es 2024 noch mehr zum Schauen und Staunen: #CU@LRZ. ■

DEZEMBER

IM VEREIN BESSER:



Prof. Harald Kosch und LRZ-Leiter Prof. Dieter Kranzlmüller besiegeln Zusammenarbeit im Digitalverbund Bayern.



02

IT-DIENSTE FÜR DIE WISSENSCHAFT

Technik für die Forschung	12
Schneller retten und löschen	16
Forschung vernetzt	18
Redundanztest geglückt	20
Planspiel Sicherheit	22
Gut gerechnet, SuperMUC-NG	24
KI und Supercomputing	26

IT-POWER FÜR DIE WISSENSCHAFT

Seit über 60 Jahren stehen wir als Leibniz-Rechenzentrum der Wissenschaft als IT-Partner zur Seite und versorgen dabei nicht nur die Ludwig-Maximilians-Universität (LMU), die Technische Universität München (TUM), und weitere Hochschulen in München, sondern auch die Bayerische Akademie der Wissenschaften (BAW) sowie zahlreiche weitere wissenschaftliche Einrichtungen in Bayern und darüber hinaus. Planung, Bereitstellung und Betrieb einer leistungsfähigen, zentral bereitgestellten IT-Infrastruktur zählen dabei zu unseren Kernaufgaben. Als Teil des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) betreiben wir einen von drei nationalen Höchstleistungsrechnern. Mit unserer eigenen Forschung und Entwicklung widmen wir uns wichtigen IT-Zukunftstechnologien wie KI und Quantencomputing sowie die energieeffizienten Betrieb unserer Systeme.

120.000

STUDIERENDE



30.000

BESCHÄFTIGTE

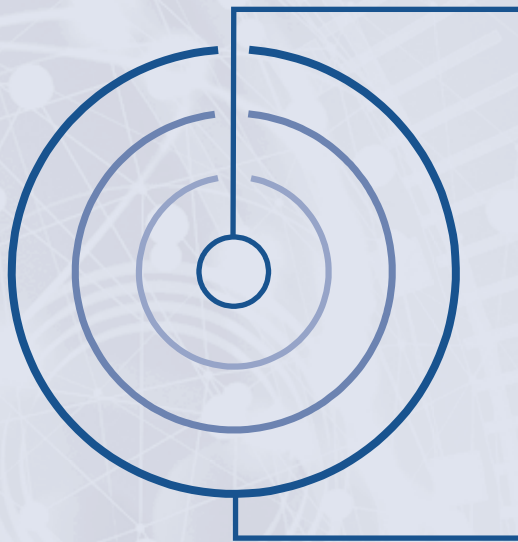


1.900

PROFESSORINNEN



DAS LRZ: REGIONAL, NATIONAL, EUROPÄISCH



Rechenzentrum für alle
Münchner Universitäten

Regionales Rechenzentrum
für alle bayerischen Universitäten

Nationales Höchstleistungs-
rechenzentrum (GCS)

Europäisches Quantencomputing-
zentrum



Detaillierte Anleitungen sowie Tipps und Tricks zu allen unseren Services
bietet die LRZ-Dokumentationsplattform: <https://doku.lrz.de/>

DIE DIENSTE IM ÜBERBLICK



Desktop und
mobile Clients



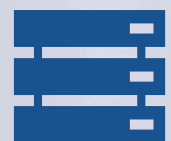
E-Mail und
Groupware



High Performance
Computing



Netz



Server-Hosting



Speicherlösungen



Unterstützende
Dienste



Virtuelle Realität
und Visualisierung



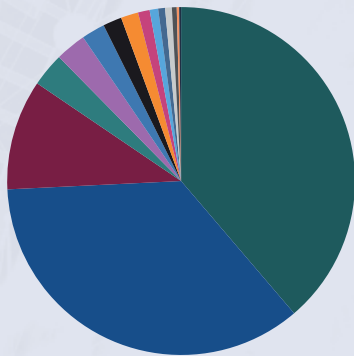
Vor-Ort Services



Webhosting und
Webservices

ZUVERLÄSSIGE DIENSTE STARK GEFRAGT

KENNUNGEN FÜR LRZ-DIENSTE



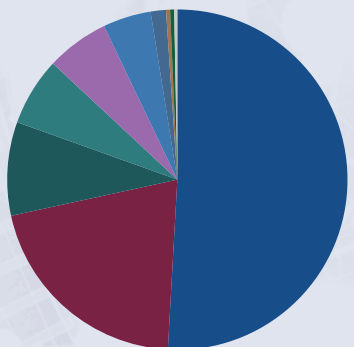
- LMU München
- TU München
- Hochschule München
- Hochschule Weihenstephan-Triesdorf
- Hochschule Landshut
- Hochschule Ansbach
- Öffentlich rechtliche Einrichtungen
- Nutzer:innen des SuperMUC-NG
- Hochschule für Musik und Theater
- Leibniz-Rechenzentrum
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Akademie der Bildenden Künste
- Hochschule für Fernsehen und Film
- Katholische Stiftungshochschule
- Sonstige Einrichtungen/Studierende
- Andere bayerische Hochschulen

279.645

**KENNUNGEN
ENDE 2023**



EXCHANGE NUTZERGRUPPEN



- TU München
- Hochschule München
- LMU München
- Hochschule Weihenstephan-Triesdorf
- Hochschule Landshut
- Hochschule Ansbach
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Staatl. Museen
- Staatl. Naturwissenschaftliche Sammlungen
- Akademie der Bildenden Künste

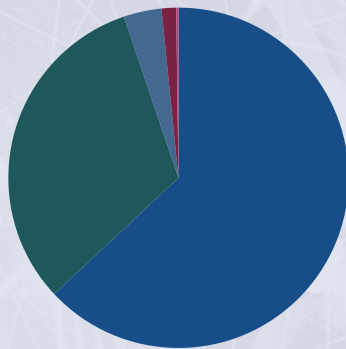
130.296

**NUTZERGRUPPEN
ENDE 2023**



Weitere Statistiken finden Sie in Kapitel 8.

MWN-PC



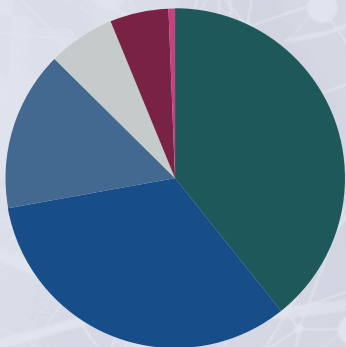
- TU München
- LMU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Hochschule München
- Hochschule für Musik und Theater

18.342

SYSTEME
ENDE 2023



MWN-MAC



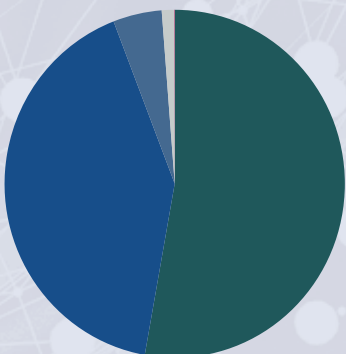
- LMU München
- TU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Akademie der Bildenden Künste
- Hochschule München
- Hochschule für Musik und Theater

1.128

SYSTEME
ENDE 2023



IOS-SYSTEME



- LMU München
- TU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Akademie der Bildenden Künste
- Hochschule für Musik und Theater

1.879

SYSTEME
ENDE 2023



SCHNELLER RETTEN UND LÖSCHEN

Die TUM-Werksfeuerwehr der Technischen Universität München digitalisiert ihre Informationen über Einsatzorte auf dem Forschungscampus. Dabei setzt sie auf Dienstleistungen und Beratung des LRZ.

Feueralarm im Forschungszentrum Garching: Jede Sekunde zählt. Die Werkfeuerwehr der Technischen Universität München (TUM) rückt aus. 2.500 Mal im Jahr nimmt die Wache einen Notfall über das Telefon an. Sie kontrolliert rund 30.000 Brandmelder im Forschungszentrum und sorgt für die Sicherheit von 270 Instituts- und Unternehmensgebäuden, inklusive Forschungsreaktor, Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) und U-Bahnhof. Das beinhaltet Brandschutz und Rettungsmedizin. „Hier tun Forschende das, was sie tun sollen: Sie probieren mit den unterschiedlichsten Materialien neue Dinge aus. Dabei kann auch mal etwas schiefgehen“, erzählt Jürgen Wettlaufer, Leiter der TUM-Werkfeuerwehr. „Mein Team hat zwar Respekt vor diesen Risiken, aber keine Angst.“ 14 von insgesamt 66 Feuerwehrleuten sind stets vor Ort. Alle sind als hauptamtliche, ausgebildete Einsatzkräfte. Die meisten, sagt Wettlaufer, haben „so wie ich, ihr Hobby zum Beruf gemacht“.

DIGITALISIERUNG SPART ZEIT

Schlägt ein Alarm an, muss es schnell gehen: Innerhalb von 90 Sekunden schätzt die Feuerwache die Gefahrensituation ein. Sie sucht dazu Informationen wie Lagepläne zum Unfallort und dort vorhandene Löschanlagen zusammen. Listet akute und mögliche Gefahren auf. Richtet notwendige Schlüssel zu Instituten und Gebäuden her. Und währenddessen macht sich das Team bereit. In acht Minuten, so die Vorgabe, muss die Feuerwehr vor Ort sein. Bei diesen Vorbereitungen helfen immer mehr Computer, mobile Geräte und Digitalisierung – eine Entwicklung, bei der das LRZ die Werkfeuerwehr unterstützt. Fortlaufend werden Informationen zu Gebäuden und Instituten digitalisiert.

Jedes Gebäude im Forschungszentrum verfügt über ein Feuerwehrinformationszentrum (FIZ), das Grundrisse und Pläne, die Laufkarten, bereithält. Diese zeigen den kürzesten Weg zum Brandmelder. Sie liegen auf Papier vor, immer mehr können digital und mobil abgerufen werden. Dazu finden die Feuerwehrleute in den Einsatzfahrzeugen Tablets an Dauerladestellen: „Das spart uns Minuten Zeit, weil wir die Laufkarten nicht mehr per Hand suchen müssen“, erzählt Wettlaufer, der mehrere Digitalisierungsprojekte der TUM-Feuerwehr vorantreibt. In digitaler Form können Laufkarten und andere Pläne einfacher aktualisiert und schnell



synchronisiert werden, sie liefern also einen aktuelleren Überblick. Mit Daten von Bewegungsmeldern und Sensoren könnten die Inhalte der Karten ergänzt werden – etwa mit Aufenthaltsorten von Menschen. „Das würde die Feuerwehrrarbeit revolutionieren, ist aber aus Gründen des Datenschutzes leider noch nicht möglich“, so Wettlaufer. Diese Vision braucht noch Einiges an rechtlicher und technischer Vorarbeit. Konkreter ist der Plan, die Tablets kommunikationsfähig zu machen, so dass die Einsatzzentrale mehr Informationen an die Fahrzeuge oder diese wiederum an die Menschen vor Ort weitergeben können. Dazu müssen Kommunikationsnetze, die nicht gestört werden können, sowie spezielle IT-Dienste und Tools entwickelt werden.

GEMEINSAM DIGITALISIEREN

Dabei unterstützt das LRZ die Werkfeuerwehr: So sind die Tablets via eduroam mit allen Gebäuden im Forschungszentrum vernetzt. Laufkarten und andere Informationen werden in der in der Cloud des LRZ und über Bayern Share gespeichert und sind so jederzeit

zugänglich. Außerdem berät das LRZ die Feuerwehr in Sicherheitsfragen. „Die Zusammenarbeit läuft gut“, sagt Wettlaufer, „allerdings würde ich mir noch einen direkten Ansprechpartner für unsere zwei IT-Fachkräfte wünschen, um konkrete Digitalisierungsprojekte besser umsetzen und die Einsatzzeiten dadurch noch weiter reduzieren zu können.“ Bei allen Digitalisierungsbemühungen – die analogen Pläne auf Papier werden weiterhin genutzt und immer als Backup bleiben. Aus Sicherheitsgründen, auch eduroam und Internet können ausfallen, vor allem aber, um zu überzeugen: „Im Gegensatz zu jüngeren Kollegen bevorzugen ältere Einsatzleiter die analogen Infos“, sagt Wettlaufer. „Da muss erst Vertrauen in die Technik aufgebaut werden. Wir standen schon immer für Innovation.“ Wettlaufer ist zuversichtlich, dass Zeitersparnis und unkomplizierte Anwendung der Tablets und Digitaltechnik auf Dauer überzeugen. ■

FORSCHUNG ZUVERLÄSSIG VERNETZT: DAS MWN

MWN – ZAHLEN UND FAKTEN

Weitere Daten zum Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) finden Sie in Kapitel 8

Als LRZ betreiben wir zentral das Münchner Wissenschaftsnetz, kurz MWN. Es ist das technische Bindeglied zwischen den Gebäuden der Münchner Universitäten und Hochschulen sowie vieler weiterer Forschungseinrichtungen im Großraum München. Und das MWN wächst ständig weiter: Die monatlich über das MWN-Backbone übertragene Datenmenge liegt mittlerweile bei 795 PB. Über die 2700 Switches und die 6500 Access Points sind 650 Gebäudebereiche angebunden, von Garching bis zum Schneefernerhaus auf der Zugspitze – vernetzte Forschung der Superlative ■



DATENMENGE PRO MONAT

6,3 PB Eingehend
2,7 PB Ausgehend



WLAN

300.000 verschiedene Geräte
56.000 Geräte in 5 Minuten



NETZKOMPONENTEN IM MANAGEMENT



2.673 Switches
6.441 Access Points

STANDORTE



650 Standorte

BANDBREITE



200 Gbit/s X-Win



10 Gbit/s M-net



VPN

4000 TB gleichzeitige Verbindungen
48.800 am LRZ registrierte Nutzer



DNS

366.145 eingetragene IPv4 Adressen
3.769 verwaltete Domains

DOPPELT, REDUNDANT UND ZUVERLÄSSIG

Damit die Zuverlässigkeit seiner Internet- und Mailsdienste garantiert ist, unterzog das LRZ die Ausfallsicherheit seiner Router einem Test – und zog dafür den Stecker.

Der Fernzugriff auf Computer, Programme und Datenspeicher läuft darüber, sowieso die Kommunikation zwischen Forschenden und Instituten oder zwischen Studierenden und Dozentinnen, außerdem Recherchen oder gut 1500 gehostete Websites: „Das Netz muss immer funktionieren, das Internet für unsere Nutzerinnen ständig zur Verfügung stehen, auch wenn es in einzelnen Rechnerräumen brennt oder der Strom ausfällt“, sagt Helmut Reiser. Der Informatik-Professor ist stellvertretender Leiter des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) und in dieser Funktion verantwortlich für die Zuverlässigkeit der Technik und Dienste. Am 19. September 2023, um 8.10 Uhr morgens zog Reiser daher die Stecker bei einem der beiden Hausrouter, mit denen sich das LRZ mit dem Internet, dem Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) und dem Rest der Welt verbindet.

STICHWORT REDUNDANT

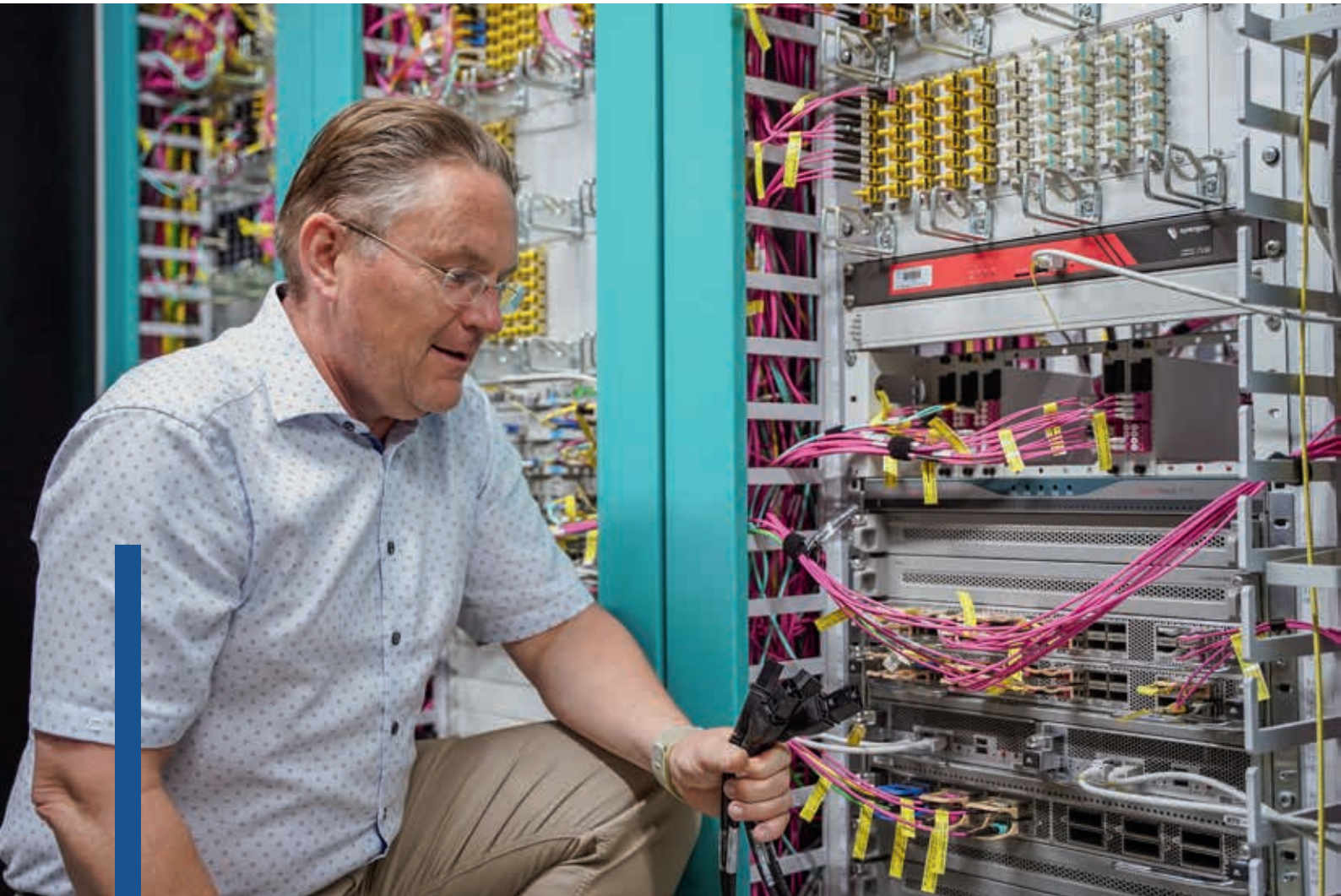


Redundanztests gehören zu den Vorarbeiten. Damit wird die Zuverlässigkeit technischer Ressourcen geprüft. Auch das Durchspielen von Prozessen nach Stromausfällen zählt auf die Zuverlässigkeit von IT-Diensten ein.

REDUNDANZTEST DER ROUTER

Aus Sicherheitsgründen sind diese beiden Geräte nicht nur in unterschiedlichen Racks installiert, sondern auch in verschiedenen Teilen des Rechnerwürfels platziert: „Sie sind außerdem so konzipiert, dass bei Ausfällen der eine den anderen sekundenschnell ersetzt“, erklärt Reiser. „Dazu sind sie außerdem in unterschiedlichen Gebäude- und Brandabschnitten untergebracht.“ Schwelen Kabel in einem Stockwerk, fängt Computertechnik Feuer oder fällt in Teilen des Rechenzentrums der Strom aus, übernimmt der sichere Router sofort die Arbeit des anderen. Ob dieses Redundanz-Konzept funktioniert und damit die LRZ-Online-Dienste zuverlässig erreichbar bleiben, sollte mit dem Ziehen der Stecker endlich bewiesen werden. „Gewöhnlich baut man als IT-Spezialist im Rechenzentrum komplexe Technik für Dienste zusammen und testet diese Konzepte und Konstrukte im Produktivbetrieb aber selten bis nie“, begründet Reiser die Aktion. „Es herrscht das Prinzip Hoffnung – am LRZ wie generell in Rechenzentren. Man glaubt an die Ausfallsicherheit, ohne sie wirklich überprüft zu haben.“ Solche Kontrollen gehören daher zum Maßnahmenpaket für die Service-Zertifizierungen des LRZ.

Die Folgen dieses ersten Redundanztests der Router haben die wenigsten Nutzerinnen bemerkt. Für knapp 10 Sekunden kam es zu kurzen



Verzögerungen. Online-Verbindungen lahmten, Mail-Server mussten einige Verbindungen neu aufbauen. Aber die meisten Online- und Webdienste liefen ohne Probleme, die Verlagerung auf nur einen Router war kaum zu spüren: „Nirgends sind die Internetverbindung oder Mails abgesoffen – der Test war erfolgreich“, meint Reiser, und neben Zufriedenheit schwingt auch Erleichterung im Bericht mit. Die Bedenken gegenüber dem Test waren im LRZ hoch, auch weil Technik-Prüfungen Restrisiken für Funktionsstörungen beinhalten. Seit anderthalb Jahren wurde die Kontrolle immer wieder verschoben: „Einige Kolleginnen befürchteten, dass die älteren Router, die wir bald austauschen werden, nach dem Test nicht mehr richtig oder nur teilweise hochfahren“, ergänzt Reiser. „Aber das dürfen natürlich keine Gründe sein, gar keine Tests zu fahren.“

FEHLER IM SYSTEM ERKANNT

Zumal die Kontrollen erfahrungsgemäß mehr Wissen zutage fördern als geplant: In diesem Fall stießen die LRZ-Spezialistinnen in zwei von den vier Sicherheitssystemen, mit denen die Router zusammenarbeiten und die – ebenfalls redundant geschaltet – den Internet-Verkehr analysieren, auf zwei nicht einwandfrei funktionierende Rechenknoten. Bei ihnen wurden Fehler behoben und die Internetverbindung manuell hergestellt: „Wir werden in Zukunft weitere Zuverlässigkeitstests fahren“, plant Reiser unternehmungslustig.

DEN ERNSTFALL TESTEN

Welche Computer und Dienste werden nach einem Stromausfall zuerst wieder hochgefahren? Welche Abteilungen werden dafür aktiv? Spannende Fragen für ein Planspiel und für den Test von Abläufen.

„Schwankungen im Stromnetz haben die Energieversorgung in Pakistan lahmgelegt“, vermeldete die Tagesschau am 23. Januar 2023. An diesem Tag saßen am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) 24 IT-Spezialistinnen aus allen Abteilungen zusammen, um diesen Ernstfall durchzuspielen: Blackout Europa, in Deutschland geht nichts mehr. Ohne Strom liegen alle Ressourcen des LRZ still – Hochleistungs- wie Speichersysteme, Netz, Kühltechnik und Kommunikationsverbindungen. Wie aber kommen sie in den Betrieb, wenn die Energie wieder fließt? „Wahrscheinlich würde es im besten Fall zwei, drei Tage dauern, bis erste Basisservices wieder funktionieren“, schätzt Stephan Peinkofer, Leiter der Gruppe Data Science Storage Infrastructures (DSI) am LRZ und Organisator des Planspiels „Disaster Recovery and Business Continuity“. „Bis zur vollen Funktionsfähigkeit brauchen wir sicher Wochen, wenn nicht sogar Monate, denn sicher werden wir auch Ersatzteile besorgen, Komponenten und Festplatten austauschen, Backups wiederherstellen müssen. Bei einem Stromausfall geht ja Einiges kaputt.“

NACHDENKEN, DISKUTIEREN, PROZESSE ENTWICKELN

Solche Planspiele stehen im Pflichtenheft von Organisationen, die sich wie das LRZ zertifizieren lassen. Sie bringen Erkenntnisse über Abläufe, vor allem die Sicherheit, dass im Team größte Notfälle zu bewältigen sind. Und sie machen durchaus Spaß: „Wir haben dis-

kutiert, oft auch gelacht, die Motivation und Konzentration war sehr hoch“, erzählt Peinkofer. „Es gab viele überraschende Details zu bedenken, ich hatte mir zum Beispiel nicht vorgestellt, wie viel beim Hochfahren vom Gebäude-Management abhängt und wie stark alle Abteilungen in so einem Fall in einander greifen müssen. Spannend.“

Einen Tag lang diskutierten die Expertinnen Maßnahmen, die im Ernstfall zu treffen sind. Oft genug stehen dann Fragen im Raum, die sich vorher keiner gestellt hat: Wie ist eigentlich der Zugang ins Rechnergebäude möglich, das elektronisch gesichert ist? Die Feuerwehr müsste gerufen werden, um Türen zu öffnen. „Viel wichtiger ist, dass wir Computertechnik und Infrastruktur kontrolliert wieder hochfahren. Das schont die Technik. Dazu müssten wir aber die Hauptschalter ausschalten können, bevor der Strom wieder kommt“, wirft Peinkofer ein weiteres Problem auf. Es ist schwer bis unmöglich zu planen, weil es erledigt werden müsste, bevor das LRZ geschlossen wird. Werden nach einem großflächigen Blackout Stromlieferungen zunächst begrenzt, müsste entschieden werden, ob die Batterien, mit denen das LRZ die unterbrechungsfreie Stromversorgung und die Zuverlässigkeit der IT-Services gewährleistet, abgekoppelt werden. Sie würden, um sich aufzuladen, sofort viel Strom ziehen und damit möglicherweise den Start wichtiger Infrastruktur verzögern. Andererseits wäre das LRZ im Falle



weiterer Stromschwankungen ungeschützt; ist es auch noch kalt, müssten die Rechnerräume vor dem Einschalten der Computer mit Heizlüftern auf Temperatur gebracht werden.

DIE REIHENFOLGE IST WICHTIG

Maßnahme, Nachdenken, Diskutieren, Lösungen finden: Schritt für Schritt erarbeiteten die LRZ-Expertinnen an einem Arbeitstag die Reihenfolge, wann welcher Dienst wieder angefahren wird. Netz, Geräte fürs Management von Strom, dann die Computer für die Basis-IT-Dienste. „Um die richtige Reihenfolge aufzubauen, ist es wichtig, dass beim Planspiel die Leute vom Gebäudemanagement und von unterschiedlichen Abteilungen und Arbeitsgruppen mitmachen. Sie stellen die richtigen Fragen“, erklärt Organisator Peinkofer. „Ich hatte anfangs Bedenken, dass es durcheinander geht, aber als wir dann zusammensaßen, lief es sehr konstruktiv ab.“ Nebenbei entstand eine Liste von offenen Fragen, die nach Dringlichkeitsstufen neu geordnet und geregelt werden können.

Planspiele sind nicht aufwändig, auch das eine Erfahrung: Papier und Stifte reichen, vor allem aber Moderation und Protokoll. Letztere führen die Teilnehmenden zum Thema zurück, wenn die sich in Detailfragen verlieren. „Wir alle waren in Zeitfragen zu optimistisch, aber Hauptsache ist doch, wir haben das einmal durchgespielt“, meint Peinkofer. „Das Planspiel hat gut funktioniert. Wir müssen mit dem Risiko eines Blackouts leben, aber wir sind gerüstet, kennen die Prozesse und die wichtigen Treiber der Wiederherstellung unserer Dienste.“



EIN SUPER-JAHR FÜR SUPERMUC-NG

Auch im Jahr 2023 arbeiteten die mehr als 300.000 Rechenkerne unseres SuperMUC-NG ununterbrochen für die Wissenschaft. Der Superrechner leistete insgesamt nicht weniger als 7 Milliarden Rechenstunden und lieferte damit zuverlässig seinen wertvollen Beitrag für verschiedenste Wissenschaftsfelder, die ihn für ihre Forschungszwecke nutzten. Über 1300 Wissenschaftlerinnen setzten den über das GCS von Bund und Land finanzierten nationalen Höchstleistungsrechner für ihre Spitzenforschung ein. Astrophysik und Strömungsmechanik gehörten dabei auch in 2023 wieder zu den Bereichen, die den Löwenanteil der Rechenzeit beanspruchten.



26,9 PetaFlop/s Peak Performance
= 26.900.000.000.000.000
Gleitkommaoperationen pro Sekunde

AUGUST 2019 – BIS ENDE 2023



7 Milliarden
Rechenstunden



2 Mio
Jobs



460
Projekte



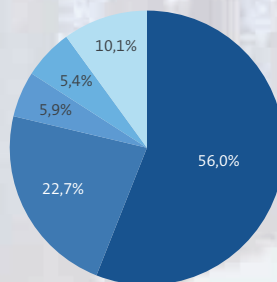
1300
Wissenschaftler:innen

KENNZAHLEN SYSTEM



Lenovo Intel (2019)
311.040 Rechenkerne
Intel Xeon Skylake
19,5 PetaFlops Linpack Leistung
719 TeraByte Hauptspeicher
70 PetaByte Disk

WISSENSCHAFTSBEREICHE



- Physik
- Thermodynamik
- Geowissenschaften
- Biologie
- Andere



SuperMUC-NG wird gemeinsam vom Freistaat Bayern und vom Bund über das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) finanziert.



KI BESCHLEUNIGT DAS SUPERCOMPUTING

Die Ausbaustufe von SuperMUC-NG – die Phase 2 – ist im Leibniz-Rechenzentrum installiert, wird nun auf Herz und Nieren getestet

Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) wurde die Erweiterung des aktuellen Spitzenrechners installiert: SuperMUC-NG Phase 2, kurz SNG-2, integriert und treibt künstliche Intelligenz (KI) im High-Performance Computing (HPC) voran. "Wir erweitern SuperMUC-NG mit KI-Fähigkeiten, um bahnbrechende wissenschaftliche Entdeckungen zu ermöglichen und zu beschleunigen, und zwar erstklassige HPC- und KI-Projekte der Lebens-, Umwelt-, Materialwissenschaften sowie aus vielen weiteren Forschungsbereichen", sagt Prof. Dr. Dieter Kranz Müller, Leiter des LRZ.

GPU ERMÖGLICHEN KI-VERFAHREN

SNG-2 wurde entwickelt, um die in Forschung und Wissenschaft stark nachgefragten KI-Methoden in etablierte HPC-Workflows zu integrieren. Das System bietet durch Graphics Processing Units (GPU) gleichzeitig eine Beschleunigung bei klassischen Modellierungs- und Simulationsaufgaben und eignet sich besonders gut für hoch skalierbare, rechen- und datenintensive Workloads. Der von Intel und Lenovo entwickelte und gelieferte Supercomputer enthält 240 Rechenknoten, die auf Lenovos ThinkSystem SD650-I V3 Neptune DWC Servern basieren. Er verfügt über 480 Intel-CPU's sowie 960 Intel-GPU's, die durch Lenovos Neptune-Technologie heißwassergekühlt werden. Darüber hinaus ist ein verteiltes, asynchrones Objektspeichersystem (DAOS) integriert, das Intel Xeon Scalable Prozessoren der dritten



Generation und den persistenten Intel Optane Speicher nutzt, um den Zugriff auf große Datenmengen zu beschleunigen.

Die Systeme des LRZ werden traditionell von Anwenderinnen aus unterschiedlichsten Fachdisziplinen äußerst stark genutzt. Damit auch SNG-2 breit eingesetzt wird und um die neuen Möglichkeiten und Workflows mit KI-Verfahren Forschenden näher zu bringen, hat das LRZ in den letzten Jahren sein KI-Trainingsangebot deutlich ausgebaut. Darüber hinaus hat das LRZ das Computational X- sowie das Big Data- und KI-Team mit Spezialist:innen für Machine Learning (ML), Large Language Models (LLM) und Surrogatmodelle erweitert. Sie unterstützen Forschende gezielt bei ihren Projektvorhaben und begleiten sie beratend.

TESTPHASE VOR DEM BETRIEB

Gerade wird das System auf Herz und Nieren geprüft, gleichzeitig wird eine Friendly-User-Testphase vorbereitet, in der die Nutzung des SNG-2 geprüft und optimiert wird. Phase 1 und Phase 2 von SuperMUC-NG werden beide in Betrieb bleiben, bis ein Nachfolgesystem einsatzfähig ist. SNG-2 wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) und dem Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (StMWK) finanziert. Die Rechenzeit wird über Ausschreibungen des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) zur Verfügung gestellt.



SUPERMUC-NG, PHASE 2 IN ZAHLEN

Total Memory: 123 terabytes of DDR
Performance: 27 PFlops/sec
Compute nodes: 240
Cores per node: 112
CPU per node: 2
GPU per node: 4
Memory per node: 512 GByte DDR5
Network: NVIDIA Mellnox HDR
Infiniband

Learn more:

<https://tiny.badw.de/zGslC6>

SUPERMUC-NG, PHASE 2: SCHNELLER ZUR ERKENNTNIS DURCH KI

Erstmals werden in SNG-2 verschiedene Prozessorientypen – CPU und GPU – kombiniert. Über das Wie und Warum informiert ein kurzes Video:

https://www.youtube.com/watch?v=ruYyR1_xflw



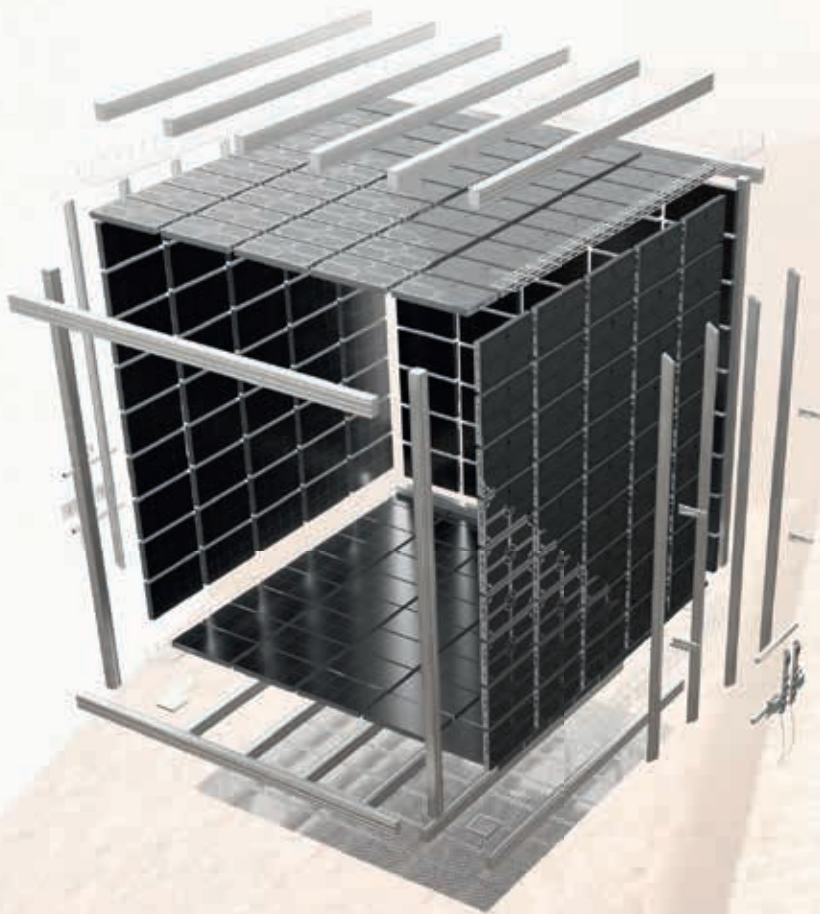


03

NEUE TECHNOLOGIEN

V2C: Forschung veranschaulichen	30
Brillante Optik mehrt das Wissen	32
Quantensystem auf Basis von Ionenfallen	34
Gemeinsam entwickeln	36
Interview Trends im HPC	38
Mit terrabyte die Erde erforschen	42
Energieeffizienz am LRZ	44

V2C: FORSCHUNG VERANSCHAULICHEN



AUSSTATTUNG

- Powerwall (2012)
- LED-Powerwall (2018)
- 5-seitige LED-CAVE (2023)
- Leistungsfähige Rechnerinfrastruktur
- 2 Labs für Head-Mounted Displays

DIENTSTLEISTUNG

- Bereitstellung der VC-Systeme
- Aufbereitung von Datensätzen
- Standard-Softwarelösungen
- Maßgeschneiderte Softwarelösungen

ANWENDUNGSGEBIETE

- Artenschutz
- Geophysik
- Klimaforschung
- Kunstgeschichte
- Geschichte, Zeitzeuginnen etc.



2011
Bau



2012
Eröffnung



2018
Erneuerung



2022
Jubiläum



2023
Erneuerung
CAVE

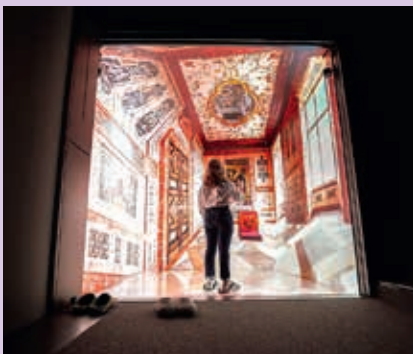


BRILLANTE OPTIK MEHRT DAS WISSEN



STECKBRIEF LRZ CAVE

- 1620 LED Panels
- Auflösung: 2400 x 2430 Pixel (pro Wand)
- Pixel Pitch: 1,25 mm
- Stereoskopische Darstellung mit 120 Bildern pro Sekunde. 60 Bilder/ Sekunde pro Auge
- Optisches Tracking-System von ART mit Kamera ArtTrack6
- 225 Cabinets/LED-Rahmen
- ca. 3,25 km Kabel
- Installation: Kraftwerk Living Technologies, Wels/Österreich



Das Leibniz-Rechenzentrum baut erstmals eine CAVE, eine Installation für die Darstellung von Virtueller Realität, komplett mit LED-Technologie auf.

Schärfere Bilder, leuchtendere Farben, höhere Auflösung: Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) modernisierte sein Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) und hat dabei seine Cave Automatic Virtual Environment, kurz: CAVE, komplett mit Leuchtdioden (LED/Light-Emitting Dioden) ausgerüstet. Die Höhle besteht aus 5 LED-Wänden, darin können sich Forschende in Simulationsdarstellungen bewegen wie in einer eigenen Welt: „Die LED CAVE ist eine der ersten, wenn nicht sogar die erste ihrer Art überhaupt, die komplett mit LED-Technologie gebaut wurde“, sagt Dr. Thomas Odaker, Leiter des V2C. „Sie bietet Forschenden eine höhere Auflösung und deutlich verbesserte Bildqualität, außerdem mehr Zuverlässigkeit und eine einfachere Nutzung als die vorherige Projektor-basierte Anlage.“

AUS VIRTUELLER REALITÄT MEHR ERKENNTNIS SCHÖPFEN

In vielen Natur- und Lebenswissenschaften, aber auch in Kunst, Architektur oder Archäologie werden Forschungsergebnisse schon seit Längerem visualisiert und in Virtueller Realität (VR) dargestellt, um daraus noch mehr Erkenntnis zu schöpfen: „In VR können wir die Grundlagen von medizinischen Symptomen, molekularen Prozessen und Naturphänomene oder Technik, Bauwerke, Kunstgegenstände viel umfassender wahrnehmen, begreifen, analysieren“, erklärt Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Die neue CAVE hilft, wissenschaftliche Erkenntnisse zu vertiefen und weiter zu präzisieren.“

Die LED CAVE des LRZ ersetzt die bisherige Rückprojektionstechnik: Ihre fünf Displays sind zwar jetzt um 30 Zentimeter länger, doch der Platz für die bisherigen Projektoren und Spiegelaufbauten entfällt. Die neue CAVE besteht aus insgesamt



1.620 LED-Panels sowie 225 LED-Rahmen (Cabinets), die sich leichter von Computern ansteuern lassen. Jede Wand bietet eine Auflösung von 2400x2430 Pixeln, deutlich mehr als die bisherigen 1920 x 1920 Pixel. Die höhere Pixeldichte sorgt für schärfere Bilder und mehr Helligkeit, Bewegungen in der CAVE sowie das Zoomen auf Ausschnitte funktionieren nahtlos. Der Aufbau ermöglicht stereoskopische Darstellungen mit bis zu 60 Bildern pro Sekunde für jedes Auge. Kombiniert mit einem optischen Tracking-System der neuesten Generation entsteht damit ein homogener Eindruck mit realistischen Farben und äußerst scharfen Bild-details. Wer sich beispielsweise durch die Visualisierung einer Simulation zur Erdgeschichte bewegt, die am Lehrstuhl Geo- und Umweltwissenschaften der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) erarbeitet wurde, kann die entstehenden Vorgänge im Erdmantel messerscharf entdecken: „Die Immersion wird durch keine Ruckler oder Brüche gestört, wenn Betrachterinnen sich in der CAVE drehen oder die Perspektive wechseln, um Details näher zu untersuchen“, erklärt

Odaker und nennt mehr praktische Vorteile: „Die Nutzung der LED CAVE ist deutlich einfacher, auch Komponenten lassen sich leichter auswechseln und warten, die LED-Module können mit wenigen Handgriffen ausgetauscht werden.“

VERGANGENE WELTEN DIGITAL ERSTEHEN LASSEN

Das modernisierte V2C präsentierte das LRZ Wissenschaftlerinnen und Studierenden in einem Open Lab mit Science Slams und anhand von Visualisierungen: Die LED-Technik und ihre Brillanz machen Projekte wie den Himmelsglobus aus dem digitalen Kulturschatz Bavarikon zu einem eindrucksvollen räumlichen Erlebnis. Auch die dreidimensionale, digitale Rekonstruktion der Villa des Tempelvorstehers Sîn-Nādā, die in Kooperation mit dem Lehrstuhl Vorderasiatische Archäologie der LMU entstand, wird in der LED CAVE begehbar und entführt Betrachterinnen in altbabylonische Zeiten. ■



QUANTENSYSTEM AUF BASIS VON IONENFALLEN

**Zusammen mit dem
Munich Quantum Valley
beschafft das
Leibniz-Rechenzentrum
einen Quantencomputer,
der auf der Technologie
gefangener Ionen basiert.**

Quantentechnologie für Forschung und Entwicklung: Mit dem Munich Quantum Valley (MQV) kauft das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) einen weiteren Quantencomputer für sein Quantum Integration Centre (QIC). Dieser arbeitet mit 20 Qubits, implementiert in einer Ionenfalle, und stammt vom Innsbrucker Start-up Alpine Quantum Technologies (AQT). Er steht den sieben Mitgliedsorganisationen des MQV vorrangig für Forschungszwecke im Bereich Systemsoftware zur Verfügung. Das neue Ionenfallen-System finanzieren die Bayerischen Staatsministerien für Wissenschaft und Kunst (StMWK) sowie für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie (StMWi) im Rahmen der Hightech Agenda Bayern mit rund 9,8 Millionen Euro.

Der Quantencomputer unterstützt die Software-Entwicklung. Ziel ist, Systemsoftware und Programmierumgebungen zu implementieren und diese anhand von praktischen Anwendungen und mit Unternehmen aus dem MQV-Ökosystem zu evaluieren. Außerdem soll der Computer zur Beschleunigung in die Hoch- und Höchstleistungs-Computer des LRZ integriert und effiziente Workflows für das Supercomputing entwickelt werden. Durch die Kooperation von AQT und MQV werden weitere Entwicklungsaufgaben entstehen, etwa im Bereich Kontrollelektronik oder Lasertechnologien.

IONENFALLEN-BASIERTE QUBITS, VON LASERSTRAHLEN GESTEUERT

Auch wenn Forschungsteams weltweit schon Quantencomputer nutzen und erste Applikationen programmieren, lässt diese Technologie viel Raum für Entwicklungen. Offen ist etwa, welche Hardware sich hinsichtlich Skalierbarkeit, Wirtschaftlichkeit und Zuverlässigkeit durchsetzen wird. Ebenso unklar ist, welche Art von Quantencomputern sich am besten für welche Aufgaben eignet. Das LRZ experimentiert bereits mit Systemen, in denen Quantenbits mit



Mit dem neuen Ionenfallen-Quantensystem von AQT erweitern wir das Spektrum der im Munich Quantum Valley verfügbaren Quantencomputer wesentlich. Das LRZ stellt diese Technologie allen MQV-Mitgliedern zur Erprobung von Quantencomputing-Anwendungen zur Verfügung. Wir freuen uns, dass wir auf diese Weise vielen Anwenderinnen einfachen Zugang zu Quantencomputern ermöglichen und damit ihrer breiten Nutzung in Forschung und Industrie den Weg bereiten können.

Prof. Dr. Rudolf Gross,
Wissenschaftlicher Leiter Munich Quantum Valley (MQV)

„Dass sich das Leibniz-Rechenzentrum für unser neues Ionenfallen-Quantensystem entschieden hat, werten wir als Bestätigung unserer Erfahrungen und Entwicklungsarbeiten. Mit den unterschiedlichen Anforderungen aus dem Munich Quantum Valley werden wir es weiterentwickeln.“

Dr. Thomas Monz,
CEO und Mitgründer AQT, Innsbruck

supraleitenden Schaltkreisen realisiert werden. Diese sind empfindlich gegenüber Störungen und lassen sich nur bei Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt (-273 Grad Celsius) betreiben. Gesteuert von Mikrowellen lassen sich aber Systeme mit einer großen Anzahl von Qubits skalieren. Das AQT-System arbeitet mit Qubits aus elektrisch aufgeladenen Atomen (Ionen), die in Fallen eingefangen und mit Laserstrahlen manipuliert werden. Zwar sind die Operationen an diesen Qubits langsamer, aufgrund der besseren Abschirmung und Unempfindlichkeit sind die Fehlerraten jedoch geringer, und das System kann bei Raumtemperatur betrieben werden. Das Quantensystem von AQT braucht keine spezielle Kühl-, Wasser- oder Energieinfrastruktur und benötigt im Betrieb nur etwa zwei Kilowatt elektrische Leistung – weniger als ein Wasserkocher. Sein Quantenregister aus 20 Ionen steuern

zwei Laserstrahlen mit 729 Nanometern, für Rechenoperationen können die Qubits damit gezielt paarweise zur Verschränkung gebracht werden.

Das AQT-Quantensystem aus Ionenfalle, Laser- und Kameraeinheit plus Steuerelektronik passt in zwei 19-Zoll-Racks wie sie in Rechenzentren üblich sind. Das Start-up liefert seinen Computer, der in Zusammenarbeit mit der Universität Innsbruck entwickelt wurde, mit Software-Bibliotheken aus, die mit gängigen Plattformen wie Qiskit, Cirq, Pennylane, Project Q oder Qoqo kompatibel sind und damit das Programmieren vereinfachen.

TECHNISCHE VIELFALT BEREICHERT DEN MUNICH QUANTUM SOFTWARE STACK

Seinen Platz bekommt das Ionenfallen-System im QIC des LRZ, dem Forschungslabor für die Integration von Quantensystemen in Supercomputer. Über eine Cloud-Anbindung können die Partner-Organisationen von MQV und LRZ auf den AQT-Quantencomputer zugreifen. Später wird das System in die High-Performance Computing-Ressourcen des LRZ eingebunden, das Supercomputing ergänzen sowie wissenschaftliche Simulationen beschleunigen. Zentrales Ziel: Schnittstellen zu klassischen Computern und zwischen den unterschiedlichen Quantentechnologien zu entwickeln. Diese Arbeiten werden im Rahmen von Q-DESSI, einem Forschungsprogramm des MQV, und weiteren Projekten am LRZ vorangetrieben und münden im plattformunabhängigen Munich Quantum Software Stack. Dabei werden nun auch Bedingungen eines Ionenfallen-Systems berücksichtigt, wodurch die Programmier-Umgebung flexibler und universeller wird. ■



GEMEINSAM ENTWICKELN

Als erstes Supercomputing-Zentrum in Europa setzt das Leibniz-Rechenzentrum auf eine Innovationspartnerschaft zur Beschaffung des nächsten Höchstleistungsrechners. Bei seiner Planung und Entwicklung sind viele Kolleg:innen und Abteilungen involviert.

Zurzeit wird viel über Computertechnologien am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) diskutiert: Einmal in der Woche treffen sich je drei Kolleg:innen aus den Arbeitsgruppen Future Computing, Künstliche Intelligenz und Big Data sowie Computational X Support (CXS) mit den Vertreterinnen von HPE oder Lenovo und besprechen das Design von Prozessortypen, Netztechnologien und weiteren Komponenten. „Es geht darum, verschiedene Design-Optionen zu verstehen, ihre Leistung, aber auch die entstehenden Kosten abzuwägen oder Benchmark-Ideen zur Bewertung dieser Möglichkeiten zu entwickeln“, sagt Amir Raoofy, Ingenieur aus dem Team Future Computing. In den Gesprächsrunden wird das nächste HPC-System spezifiziert.

Die Technologie fürs Supercomputing differenziert sich zurzeit schnell aus. Neben Central Processing Units (CPU) stehen heute eine Vielzahl von Beschleunigern, etwa Graphics Processing Units (GPU) oder Field Programmable Gate Arrays (FPGA), zur Verfügung, außerdem diverse Techniken für den schnellen Datenfluss. So wird die Entwicklung eines Supercomputers komplexer: „Deshalb entsteht unser nächstes HPC-System im Co-Design mit Technologieanbietern“, erklärt Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Hard- und Software werden dabei mit unseren Spezialistinnen für den Einsatz-



zweck abgestimmt.“ Für diese Zusammenarbeit setzt die Innovationspartnerschaft den Rahmen: ein neues Beschaffungsverfahren in Form eines Wettbewerbs zwischen Integrator-Unternehmen, die für das LRZ den Supercomputer aufbauen können und dafür Prototypen entwickeln.

Höchstleistungsrechner sollen heute nicht mehr nur größte Datenmengen berechnen, sondern auch Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) beherrschen, möglichst energieeffizient arbeiten und bald Quantentechnologien aufnehmen können. Für die Planung sind diverse Erfahrungen gefragt. Daher sind so viele Kolleginnen wie nie in die Entwicklung des nächsten Supercomputers eingebunden. Wenigstens 12 Spezialist:innen aus 7 Arbeitsgruppen sowie die Führungsebenen setzen sich ständig mit den Entwicklungsschritten auseinander.

DISKUTIEREN, ZUHÖREN, DIE ANDEREN INFORMIEREN

Die erste Konzeptphase der Innovationspartnerschaft entschieden HPE und Lenovo 2022 für sich. Inzwischen haben sie in getrennten Räumen Racks mit Prototypen aufgebaut und erörtern im Wochentakt diese

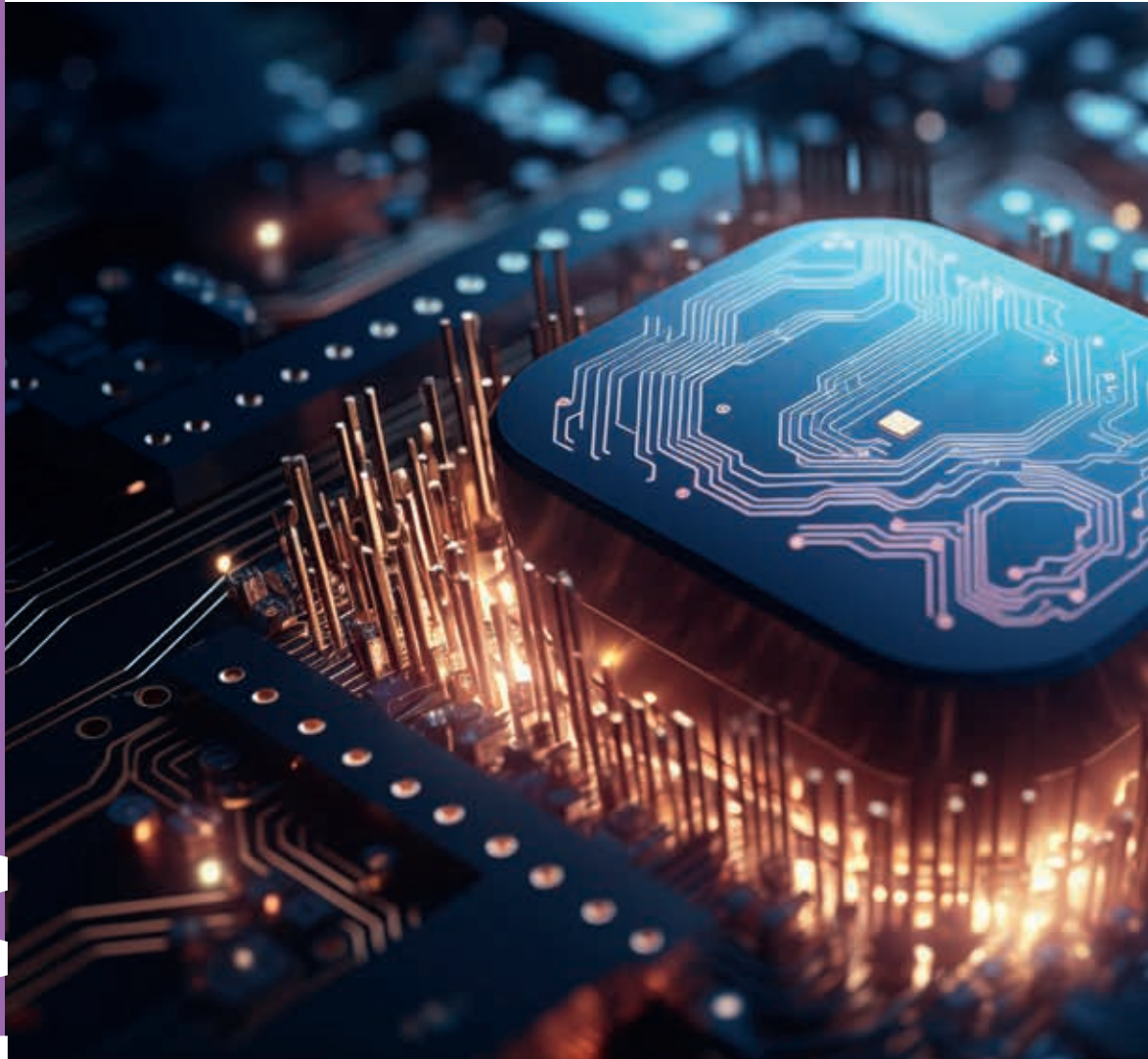
Lösungen mit ihrem jeweiligen LRZ-Team. „Die Unternehmen wollen wissen, wozu ein Supercomputer genutzt wird und welche Anwendungen einmal darauf laufen werden“, sagt Dr. Josef Weidendorfer, Leiter des Programms Future Computing. Um einen fairen Wettbewerb zu gewährleisten, sind alle Beteiligten zur Verschwiegenheit verpflichtet. Die Prototypen werden nicht nur in abgeschlossenen Räumen installiert, jedem Hersteller ist ein abteilungsübergreifendes Trio zugeordnet, das die anderen Kolleginnen über mögliche Leistungen und Funktionalitäten informiert, dabei aber nicht detailliert über die Technik sprechen darf. Das würde das geistige Eigentum beider Unternehmen berühren. „Die eigentliche Hardware wird ja noch nicht hergestellt“, stellt Raoofy fest. „Diese Prototypensysteme können aber helfen, die Technologie des HPC-Systems abzuschätzen, andererseits kann die Entwicklung von Systemsoftware schon gestartet werden.“

Was in den Sitzungen mit den Teams, in denen das Future Computing und die Bereiche Daten und KI sowie HPC vertreten sind, besprochen wird, kommt danach in Abteilungen und auch in den Führungsebenen zur Sprache. So haben alle den gleichen Informationsstand und bekommen die Firmen bei Bedarf Feedback, etwa zur Ausgestaltung von Speicher- oder Betriebskonzepten.

ANWENDUNGSGRUPPEN AN PLANUNGEN BETEILIGEN

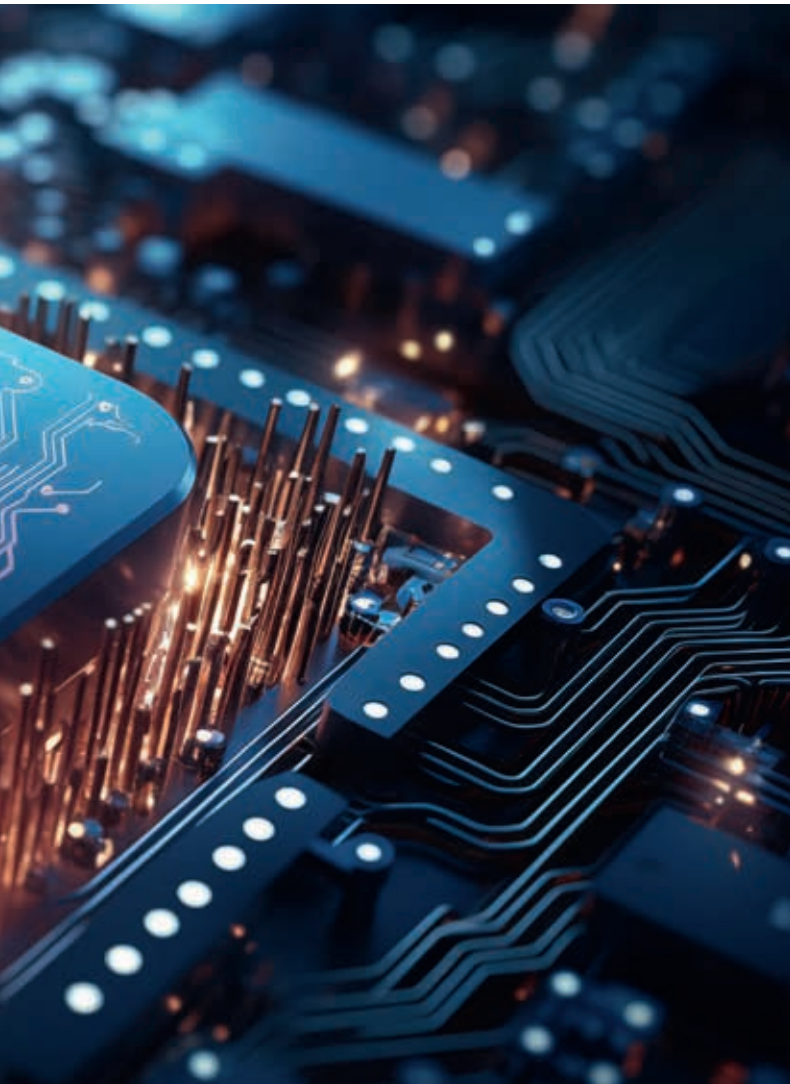
Daneben baut BEAST noch eine Brücke zwischen verfügbarer Technik und geplanten Innovationen: Das Testfeld wird durch Anschaffungen und Leihgaben ergänzt. Schon im Vorfeld flossen die Ergebnisse aus Experimenten, Beobachtungen mit diversen Chip-Konzepten oder Leistungs- und Vergleichsdaten in das Lastenheft für den Supercomputer ein. Mit Hilfe von BEAST wurden außerdem Anwenderinnen an den Planungen zum neuen Supercomputer beteiligt. Forschende prüfen im Testfeld, wie ihre Applikationen auf diversen Chip-Architekturen funktionieren. So entstanden Anwendungsszenarien und Benchmarks, mit denen die Integrator-Unternehmen nun Konzepte spezifizieren können. Die Unternehmen passen Technik eng an den Einsatz an, das LRZ empfiehlt sich indes als Ideengeber – ein fruchtbares Geben und Nehmen. ■

INTERVIEW



DIE HARDWARE WIRD
SPEZIELLER, DIE
ARCHITEKTUR EINES
SUPERCOMPUTERS
KOMPLEXER

”



Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ist SuperMUC-NG Phase 2 aufgebaut, das nächste High Performance Computing-System (HPC) ist in Planung: Dafür stehen so viele Komponenten wie nie zur Verfügung. Mit Hilfe des Testfelds Bavarian Energy Architecture and Software Testbed (BEAST) beurteilt das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) Technologien. Ein Interview mit den Spezialisten Dr. Josef Weidendorfer, Dr. Michael Ott und Dr. Juan Durillo Barrinuevo über Computer-Trends.

Welche technischen Trends seht ihr zurzeit fürs Supercomputing?

Dr. Josef Weidendorfer: Wir könnten bei gleichem Platzbedarf zwar mehr Transistoren auf einen Chip integrieren, aber dadurch steigt die Energieaufnahme und muss folglich beim Computing noch mehr Hitze abgeführt werden. Deswegen versuchen Hersteller, dass mehr Transistoren auf den Chips nicht zu mehr Abwärme führen, etwa indem pro Task nur ein Teil aktiv wird. Außerdem arbeiten sie daran, mehr Rechenleistung aus den Transistoren herauszukitzeln. Folglich wird die Hardware spezieller, vielfältiger, die Architektur eines Supercomputers komplexer. Ein Beispiel für Spezialisierung sind die GPU, die zunächst für

den Spielemarkt entwickelt waren, jetzt für die HPC-Community nutzbar werden und sich für Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) eignen.

Dr. Juan Durillo Barrinuevo: Aus Perspektive der KI ist die Differenzierung notwendig. Mit seinem CS-2-System hat Cerebras einen Chip für den KI-Workload geliefert, auch die Prozessoren von Graphcore, Sambanova gehen in diese Richtung. Grund dafür ist der steigende Bedarf an Rechenleistung.

Dr. Michael Ott: Die Leistungsdichte nimmt weiter zu. Der Trend zu GPU-basierten Systemen führt dazu, dass sich mehr Rechenleistung in ein einzelnes Rack packen lässt. Dadurch nimmt der Strom- und damit der Kühlungsbedarf zu. Das Positive ist, dass sich die entstehenden Wärmemengen nicht mehr mit Luft kühlen lassen und sich die Warmwasserkühlung weiter durchsetzen wird. Die Spezialisierung von Hardware eröffnet neue Chancen für effizientere HPC-Systeme. Dadurch verschiebt sich aber die Bringschuld von den Betreibern der Rechenzentren zu den Nutzerinnen, sie müssen ihre Anwendungen an neue Hardware anpassen.

Wie entsteht heute mehr Leistung?

Weidendorfer: Die Zahl der Prozessoren kann weiterwachsen, wenn spezialisierte Chips energieeffizient arbeiten. Um aber Rechenaufträge zu lösen, müssen Daten durch HPC-Systeme fließen. Je mehr Prozessoren daran beteiligt sind, umso weiter die Transportwege, die ebenfalls viel Energie brauchen. So gesehen wird die Zahl der Prozessoren durch ein Optimum begrenzt, danach verschlechtert jeder Chip die Leistung. Eine Lösung ist, Algorithmen zu entwickeln, die weniger Datentransfer benötigen.

Durillo Barrinuevo: Effizientere Algorithmen führen mit weniger Aufwand zur gleichen Lösung. Im Kontext von Machine Learning (ML) würde das bedeuten, Aufwand und Energie durch weniger Iterationen beim Training einzusparen. Dafür finde ich zwei Methoden spannend: Mit der Hesse-Matrix ließe sich die Zahl der notwendigen Trainingspunkte verringern, und mit Hilfe der Destillation können große Trainingsmodelle für spezifische Aufgaben aufgeteilt werden.

Auf welche Technologien setzen die ersten Exascale-Rechner?

Durillo Barrinuevo: Laut aktueller Top500-Liste nutzen Exascale-Computer derzeit GPU verschiedener Anbieter.

Weidendorfer: Interessant ist der japanische Supercomputer Fugaku, der etwas unter ein Exaflop kommt: Er soll Anforderungen von HPC-Codes gut abbilden, ohne auf GPU angewiesen zu sein.

Wäre ein Supercomputer denkbar, der ausschließlich aus GPUs besteht?

Durillo Barrinuevo: Nein, das funktioniert nicht, CPU sind für das Betriebssystem zuständig, orchestrieren Datenbewegungen, den Zugriff auf Festplatten und andere Aufgaben.

Welche Technologien werden gerade im Testfeld BEAST analysiert?

Weidendorfer: Wir schauen uns verschiedene Architekturen mit CPU und GPU an und testen ihre Eignung für Anforderungen von Codes unserer Anwenderinnen. Auf CPU-Seite arbeiten wir mit neuesten x86-Architekturen von Intel und AMD, aber auch mit Chips von ARM, Marvell und Fujitsu. BEAST enthält außerdem A100-GPU von NVidia, MI-210 von AMD, und Ponte Vecchio-GPUs von Intel sind in Phase 2 von SuperMUC-NG verfügbar.

Wie erweitern GPU die Möglichkeiten von Forschenden?

Durillo Barrinuevo: Simulationen können mit Hilfe von Datenanalysen verbessert und beschleunigt werden. KI kann außerdem Inhalte und Details ergänzen helfen, die mit klassischen Simulationsberechnungen noch nicht zu lösen sind. So steigt die Qualität der Simulation.

SuperMUC-NG Phase 2 enthält neben CPU auch GPU – was bringt diese Architektur energetisch und für Nutzerinnen?

Durillo Barrinuevo: SuperMUC-NG Phase 2 ist der erste LRZ-Supercomputer, der sich sowohl für klassische



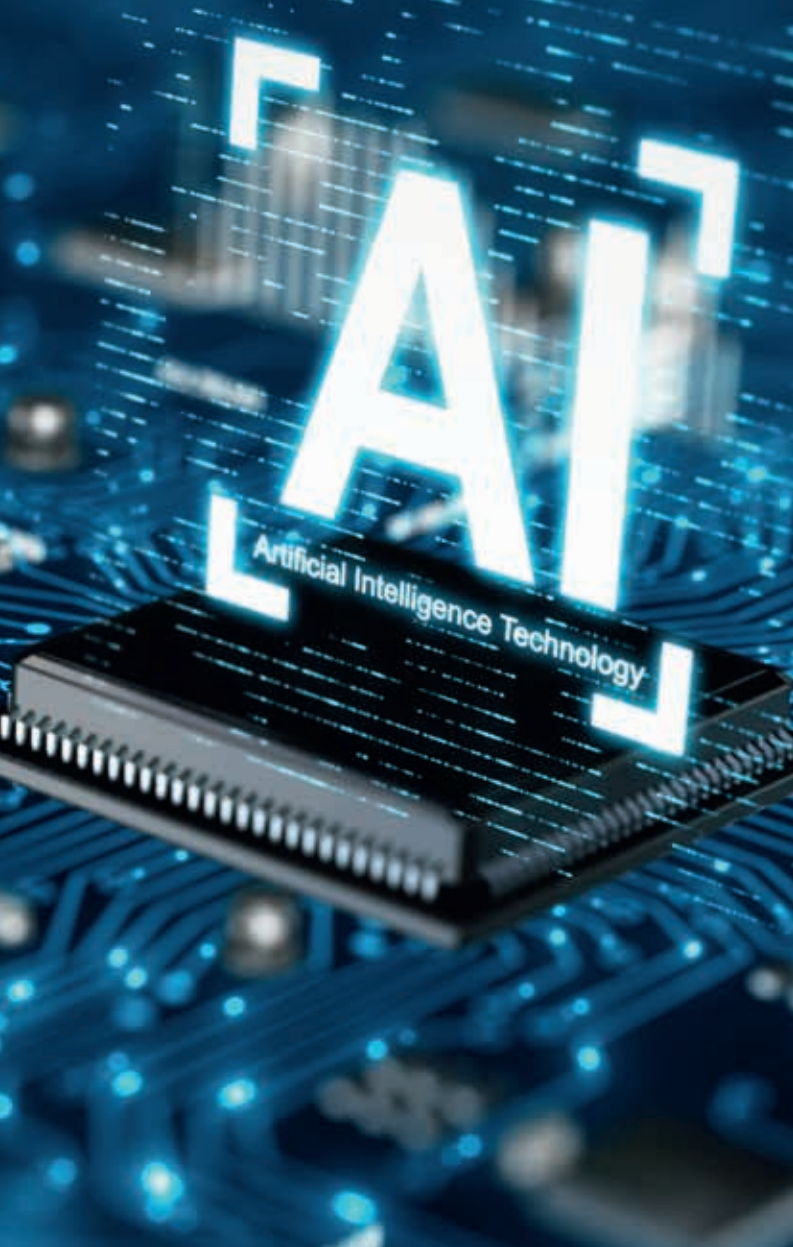
Modellierung als auch für KI-Workloads eignet.

Ott: GPU gehen deutlich effizienter mit Energie um. Das lässt sich auch an der Top500-Liste beobachten: So gut wie alle gut positionierten Systeme schöpfen ihre Rechenleistung aus GPU.

Weidendorfer: GPU spielen ihr Potential aus, wenn man Jobs in viele, viele kleine, möglichst wiederkehrende Aufgaben zerlegen kann, und zwar so, dass alle Rechnungen auf dieselbe Art abgearbeitet werden und es keine Datenstaus gibt. Anwenderinnen sollten daher Codes so umschreiben, dass diese auf Algorithmen mit diesen Eigenschaften zurückgreifen. Das dürfte nach unseren ersten Beobachtungen bei manchen Anwendungen schwerfallen, aber das ist einer der Punkte, wo wir Nutzerinnen unterstützen.

Was müssen Nutzerinnen dafür bedenken?

Weidendorfer: GPU im HPC haben einen Nachteil: Code muss umgeschrieben werden, außerdem gibt es verschiedene Schnittstellen der Anbieterfirmen. Dringend notwendig wird ein portabler Code, der auf



allen Architekturen läuft, er ist aus LRZ-Sicht die aktuell größte Herausforderung. Es gibt Ansätze für standardisierte Schnittstellen, die Hersteller aber oft unterlaufen, um Wettbewerbsvorteile zu erhalten. Als kleinster gemeinsamer Nenner kann „OpenMP Offloading“ für die GPU-Programmierung verwendet werden, eine Alternative ist der Einsatz abstrakter Schnittstellen wie Kokkos oder Raja. Am LRZ entwickeln wir gerade ein Tool, das automatisch zwischen GPU-Schnittstellen übersetzen kann. Es gibt noch viel zu tun.

Helpen GPUs wirklich, den Energiebedarf der Supercomputer zu senken?

Ott: Eigentlich helfen GPU nicht, den Energiebedarf der Supercomputer zu senken, sondern nur dessen Anstieg zu bremsen. Noch wird mehr Rechenleistung gebraucht, deshalb kommt es zu klassischen Rebound-Effekten: Zwar steigt die Effizienz, aber das Mehr an Rechenleistung wird durch die Nutzerinnen sofort absorbiert. ■



PROZESSORENTECHNIK UNTER DIE LUPE GENOMMEN

Dr. Josef Weidendorfer leitet am LRZ die Forschungsgruppe Future Computing. Diese zeichnet verantwortlich für die Testumgebung BEAST und erkundet zusammen mit Forschenden innovative Hardwarelösungen.

Dr. Michael Ott ist Informatiker, gehört ebenfalls zum Future Computing-Team, beurteilt neue Komponenten aber unter Aspekten der Energieaufnahme. Ott zieht dazu oft Sensordaten aus HPC-Systemen und dem Rechnerwürfel hinzu.

Dr. Juan Durillo-Barionuevo gehört zur Arbeitsgruppe Big Data & Artificial Intelligence. Er nimmt bevorzugt die Entwicklung von Graphics Processing Units (GPU) ins Auge, die Methoden Künstlicher Intelligenz (KI) ausführen. Außerdem fokussiert sich der Informatiker auf Möglichkeiten, wie der Energiehunger von KI-Modellen zu drosseln ist.

MIT TERRABYTE DIE ERDE ERFORSCHEN

**Das Deutsche Zentrum für
Luft- und Raumfahrt
betreibt mit dem
Leibniz-Rechenzentrum
terrabyte:
Auf der Hochleistungsplatt-
form werden Erderkundungs-
daten mit KI analysiert**



GUT ZU WISSEN

Die Hochleistungs-Plattform terrabyte steht Forschenden aus Bayern zur Verfügung. Mit einem Kurzexposé ihres Projektes können sich Forschende aus Bayern und Deutschland Zugang zu terrabyte verschaffen.

Mehr Information: <https://tiny.badw.de/rW4mme>

Ein riesiger Datenschatz, prall gefüllt mit Informationen über den Zustand der Erde: Das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) und das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) haben terrabyte in Betrieb genommen. Auf dieser High Performance Data Analytics-Plattform (HPDA) können Forschende künftig Satelliten- und Erderkundungsdaten für klassische Simulationen berechnen oder mit Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) auswerten. Gefördert wird die innovative Plattform mit Mitteln des Bayerischen Staatsministeriums für Wissenschaft und Kunst (StMWK) sowie des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK).

terrabyte kombiniert klassische Prozessoren (CPU) mit Beschleunigern und Graphics Processing Units (GPU). Den Kern der Plattform bilden ThinkSystem SD650-N V2-Server sowie DSS-G-Speicher von Lenovo. Für Modellierungen und Berechnungen mit KI-Methoden enthalten sie neben 61 CPU-Knoten mit je zwei 40-Kern Intel Xeon Platinum-Prozessoren noch 15 GPU-Knoten mit jeweils vier A100-Beschleunigern von NVIDIA. Durch Infiniband HDR-Verbindungen kann terrabyte Daten mit einer Geschwindigkeit von 320GB/s verarbeiten. Über eine direkte Netzanbindung mit 100 Gigabit pro Sekunde fließen die Daten aus dem Deutschen Satellitendatenarchiv des DLR in Oberpfaffenhofen zu terrabyte am LRZ in Garching. Mit dieser Ausstattung erreicht die HPDA-Plattform eine Leistung von bis zu 1,3 Petaflops, sie bewältigt pro Sekunde bis zu 1,3 Milliarden Gleitkommaberechnungen. Für den energie-effizienten Betrieb sorgt eine Warmwasserkühlung.

SO EINFACH ZU NUTZEN WIE CLOUD-DIENSTE

Nach dem Vorbild des LRZ Data Science Storage (DSS) ergänzen rund 50 Petabyte Online-Speicher die Plattform. Neben dem Betriebssystem integriert das LRZ auf terrabyte den Softwarestack für seine Hoch- und Höchstleistungsrechner, außerdem oft eingesetzte, frei verfügbare Anwendungen fürs High-Performance Computing (HPC). Zudem finden Nutzer:innen auf terrabyte Open-Source-Software, Werkzeuge und Algorithmen des Earth Observation Centers (EOC) und von weiteren DLR-Instituten, mit denen sich Geoinformationen verarbeiten oder Anwendungen des maschinellen Lernens trainieren lassen. Forschende können außerdem eigene Algorithmen implementieren. Mit einer Kennung des LRZ können Wissenschaftler:innen auf terrabyte online zugreifen und dort Datensätze so komfortabel verwalten wie bei Cloud-Diensten. Ein großer Teil der Satellitendaten ist vorverarbeitet und kann in vorinstallierten Applikationen verwendet werden.



Terrabyte ermöglicht damit eine Vielfalt von geowissenschaftlichen Analysen, die bislang aufgrund der Datenmengen und begrenzter Rechenleistungen nur auf kommerziellen Plattformen möglich waren.

DATEN VERBESSERN PLANUNGEN UND KATASTROPHENSCHUTZ

Der Datenschatz des DLR beinhaltet Informationen aus 50 Jahren Erderkundung sowie aktuelle Radar- und Multi-spektralbilder, die Satelliten täglich zur Erde schicken. Auf ihnen basieren Projekte wie der „World Settlement Footprint“ des DLR, der die Entwicklung von Siedlungen seit 1985 weltweit nachvollzieht und damit Stadt- sowie Verkehrsplanungen unterstützt. Die Datensätze werden von den Vereinten Nationen, der Weltbank und vielen anderen Institutionen eingesetzt. Mit Hilfe von Satellitendaten lassen sich zudem Standorte für Offshore-Windanlagen evaluieren und deren Betrieb untersuchen, um etwa den Beitrag dieser Anlagen zur Stromgewinnung einzuschätzen. Besondere Bedeutung haben Erdbeobachtungsdaten im Katastrophenschutz: Satelliten liefern heute Hinweise zum Zustand der Erde, etwa der Trockenheit von Wäldern, mit denen Warnungen und Maßnahmen gegen Brände geplant werden können. Das DLR investierte mit Bundesmitteln rund 19 Millionen Euro in den Auf- und Ausbau von terrabyte. Das LRZ stellt den Betrieb der High-Performance-Data-Analytics Plattform sicher, übernimmt die Betriebskosten und bringt Personalressourcen ein.



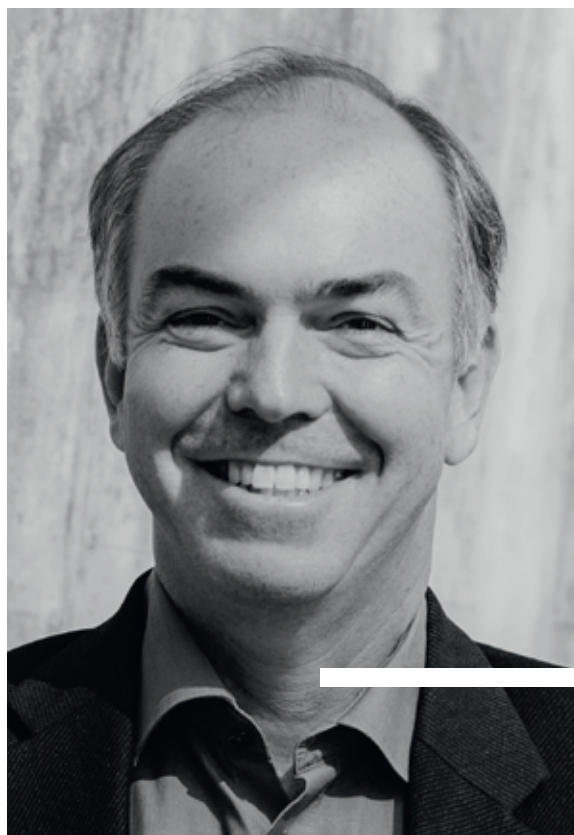
Gemeinschaftsprojekt terrabyte:

Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ, Dr. Rolf-Dieter Jungk, Amtschef des Bayerischen Staatsministeriums für Wissenschaft und Kunst, Prof. Markus Schwaiger, Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften sowie Prof. Stefan Dech, Direktor des DLR-Fernerkundungszentrums starteten die Hochleistungsplattform terrabyte für die Analyse von Satellitendaten.



In Sachen Energie sind Supercomputing und Künstliche Intelligenz (KI) kritisch zu sehen:

Seit 2006 arbeitet das LRZ daran, den Energiebedarf seiner Systeme zu drosseln. Ein Gespräch mit Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ, übers Stromsparen und Forschen für neue Lösungen.



Prof.
Dieter Kranzlmüller

ENERGIEEFFIZIENZ AM LRZ

Die Wissenschaft braucht die Methoden der KI, das LRZ nahm 2022 ein Cerebras CS-2-System in den Betrieb – wie viel Energie braucht es bei hoher Auslastung?

Prof. Dieter Kranzlmüller: Mit seinen 850.000 Rechenknoten ist das Cerebras-System ein Supercomputer, spezialisiert auf KI-Methoden. Für das Training von neuronalen Netzen können dabei auf einem einzigen Chip bis zu 40 Gigabyte Daten ausgetauscht werden. Doch braucht das System im Standby-Betrieb 15, unter Volllast rund 35 Kilowatt. Nicht viel im Vergleich mit Supercomputern, trotzdem ist der Energiebedarf von KI ein Thema.

Sie dringt immer tiefer in unseren Alltag ein, in der Forschung wachsen die Modelle und neuronalen Netze und damit ihr Strombedarf rasant. Allein die letzte Trainingsrunde des Textgenerators ChatGPT soll nach Schätzungen der Universität Kopenhagen knapp 190.000 Kilowatt-Stunden Strom gekostet haben. Wir könnten uns darauf berufen, dass an unseren Supercomputern Szenarien modelliert werden, mit denen wir Strategien gegen den Klimawandel entwickeln können. Doch seit 2006 arbeiten wir am LRZ daran, den Energiebedarf unserer Computer-Anlagen zu reduzieren. Das Cerebras-System ist auch in dieser Hinsicht ein spannendes Test- und Forschungsfeld.

Phase 2 von SuperMUC-NG wird mit Graphics Processing Units (GPU) ausgestattet. Wie wirken sie sich auf den Energiebedarf des Supercomputers aus?

Kranzlmüller: GPU eignen sich besonders für KI-Methoden und beschleunigen Rechenleistung, benötigen aber mehr Strom. Mit seinen 240 Rechenknoten wird Phase 2 im Normalbetrieb schätzungsweise 500 Kilowatt Strom brauchen. Andererseits: Werden Simulationen mit GPU schneller bewältigt, hilft uns das, eine Menge Energie einzusparen.

Der KI-Rechenbedarf von Forschenden verdoppelt sich etwa alle 4 Monate. Trainingsmodelle wachsen und brauchen mehr Strom. Um Modelle aufzubauen, werden oft hunderte Andere verworfen. Auch dadurch wächst der Energiebedarf von KI. Kann man dagegen etwas tun?

Kranzlmüller: Wer heute mit KI-Methoden experimentiert, kümmert sich wahrscheinlich nicht um den Energiebedarf. Auf Dauer ließen sich bei KI-Modellen Redundanzen vermeiden. Um die Größe der KI-Systeme zu mindern, könnten einige Aufgaben programmiert werden statt alle zu trainieren. In dieser ersten Nutzungsphase von KI können wir als wissenschaftliches Rechenzentrum den Energiebedarf vor allem begrenzen, wenn wir an der Kühlung der Systeme

WENN SIMULATIONEN SCHNELLER BEWÄLTIGT WERDEN, HILFT UNS DAS, EINE MENGE STROM EINZUSPAREN



und unseren Räumlichkeiten arbeiten. Cerebras wird mit Wasser gekühlt, beim Supercomputer sparen wir durch die Heißwasser-Kühlung etwa 20 Prozent Energie. Generell stellt der wachsende Energiebedarf bei uns Fragen nach Nutzungsregeln: Heute vergeben wir Rechenzeit an die Forschung, aus Sicht der Nutzer:innen ist es egal, ob Computer viel oder wenig Strom brauchen. Fürs High-Performance Computing könnten auch Energieeinheiten vergeben werden, das könnte mittelfristig auch für KI-Systeme eine Alternative sein.

Wie stark beeinflusst die Programmierung beim Supercomputing oder bei KI-Modellen den Energiebedarf?

Kranzlmüller: Daran wird in der Informatik gerade intensiv geforscht, zwei Aspekte sind dabei wichtig. Man überlegt einerseits, wie Software energieeffizient entwickelt wird, andererseits, wie die Leistung eines Programms bei der Ausführung zu optimieren ist. Tatsächlich gibt es Programmiersprachen wie Python oder Perl, die energieintensiver sind als zum Beispiel Rust oder C. Wenn ich darüber hinaus die Leistung eines Programms verbessere, so dass es nur halb so lange für die Funktionen braucht, sinkt damit der Energieverbrauch auch dann, wenn die Anwendung etwas mehr Strom benötigt, den aber kürzer. Beim Supercomputing optimieren wir mit Wissenschaftler:innen Algorithmen, damit sie flüssiger, schneller und effizienter laufen.

Die Komplexität von Anwendungen zu reduzieren – könnte das wie bei der KI auch beim HPC helfen, den Strombedarf zu senken?

Kranzlmüller: Nein, beim HPC setzen wir jetzt auf GPU und andere Beschleuniger, die für einige Funktionen höhere Leistungen bringen und schneller ausführen, folglich weniger Energie benötigen. Mittelfristig ruht die Hoffnung auf der Integration von Quantencomputern, die hoffentlich ebenfalls Rechenleistung beschleunigen.

Gibt's noch weitere Maßnahmen, um die Energieeffizienz der Supercomputer und AI-Systeme am LRZ zu steigern?

Kranzlmüller: Unser Ansatz ist ganzheitlich, für mehr Energieeffizienz arbeiten wir am LRZ in vier Bereichen: In den Gebäuden sorgen wir unter anderem für eine energieeffiziente Kühlung der Systeme. Durch dynamisch angepasste Taktfrequenzen und durch Beschleuniger können wir den Energiebedarf der Hardware um rund 30 Prozent senken. Intelligente Steuerung sowie Virtualisierung von Hardware helfen ebenfalls beim Stromsparen, ebenso die Optimierung von Betriebssystemen, Bibliotheken und Software. Unter Vollast benötigt SuperMUC-NG daher statt der 3400 nur 2500 Kilowatt Energie. Im Bereich Hardware sind die Möglichkeiten ziemlich ausgereizt, im Bereich Software und Anwendungen kann der Energiebedarf eventuell durch den Einsatz von KI und intelligenter Steuerung weiter sinken. ■



Im November 2023 trat das neue Energieeffizienzgesetz in Kraft, das auch den Betrieb von Rechenzentren beeinflusst. Arbeiten dort Höchstleistungsrechner, ist der Strombedarf hoch. Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ist traditionell Vorreiter bei der Senkung des Energiebedarfs:

- Es betreibt seine Ressourcen zu 100 Prozent mit Strom aus erneuerbaren Quellen.
- Bald werden auf seinen Bürogebäuden Photovoltaikmodule installiert: Die Solarpaneele sollen in Spitzenzeiten bis zu 300 Kilowatt Energie liefern. Auf's Jahr gesehen ließe sich der Strombedarf des LRZ decken – die Computing-Ressourcen ausgenommen.
- Seit 2012 kühlt es die Höchstleistungsrechner mit Warmwasser. Dieses Kühlverfahren wurde mit IBM und Lenovo für Supercomputer entwickelt und stetig optimiert. Es kommt heute weltweit zum Einsatz, wird am LRZ auch in kleineren Clustern eingesetzt. Dafür fließt heißes Wasser durch die Racks und wird durch deren Abwärme weiter erhitzt. Die so gespeicherte Wärme heizt die LRZ-Büros und erzeugt mit Hilfe von Adsorptionskältemaschinen noch Kaltwasser für ältere Computer. Die Abwärme der Computer könnte neben dem

Fernwärmenetz als weitere Wärmequelle für den Forschungscampus in Garching genutzt werden.

- Im Verbund des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) arbeitet das LRZ daran, die Leistung von Supercomputern weiter zu steigern, dabei aber den Energiebedarf zu drosseln. Unter Volllast würde SuperMUC-NG rund 3.400 Kilowatt Strom aufnehmen, doch meistens läuft das System mit reduzierter Taktfrequenz von 2,3 statt der möglichen 2,7 Gigahertz. So sinkt der Stromverbrauch im Jahresdurchschnitt um rund 30 Prozent.
- Durch das Energy Aware Scheduling (EAS) werden Aufträge für den SuperMUC-NG so kombiniert, dass Speicher und Prozessoren so gut wie möglich ausgelastet sind. Für das EAS werden neue Tools entwickelt, die den Stromverbrauch beim Datentransfer senken helfen.
- In den mehr als 6.480 Rechenknoten des SuperMUC-NG sammeln rund 15 Millionen Sensoren Daten über Leistung, Temperatur, die Auslastung von Komponenten und den Umgang der Maschine mit Software und Anwendungen. Diese Betriebsdaten bilden die Grundlage für weitere smarte Steuerungen oder zur Automatisierung weiterer Prozesse. ■



04

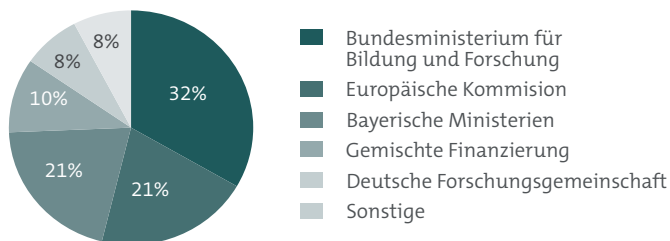
FORSCHUNG

Für die Zukunft der IT forschen	50
Die Sprache des Lebens verstehen	52
Ideen für den Verkehr der Zukunft	54
Wie Reiche vor 4000 Jahren lebten	56
Datenschatz für Grundsatzfragen	58
Kombiniere Simulation und KI	60

FÜR DIE ZUKUNFT DER IT FORSCHEN

KI, Quantencomputing, Data Analytics, Big Data, Virtual Reality, IT-Management und Sicherheit – dem Bereich Forschung und Entwicklung kommt bei uns am LRZ seit jeher eine bedeutende Rolle zu. In nahezu 50 Forschungsprojekten widmet sich unser Team der Entwicklung von IT-Technologien und Software, beispielsweise für wissenschaftliche Anwendungszwecke in der Medizin, oder für den Bereich Sustainable Computing und Energieeffizienz in der IT. Die Projekte werden über Mittel aus bayerischen, nationalen oder europäischen Fördertöpfen finanziert und in Zusammenarbeit mit Kooperationspartnern in ganz Europa durchgeführt.

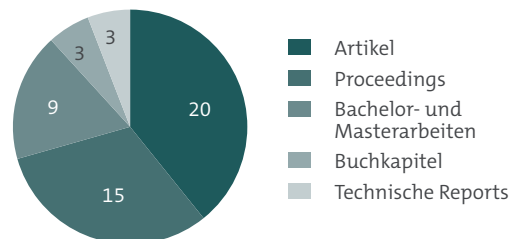
FÖRDERGEBER



PUBLIKATIONEN



51
Publikationen
gesamt

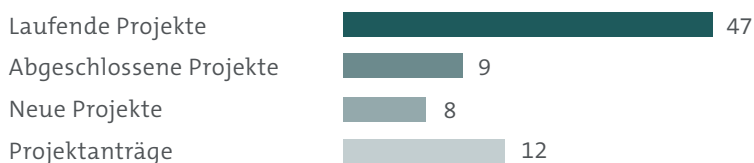


LAUFENDE PROJEKTE



47
Projekte
gesamt

FORSCHUNGSMANAGEMENT



Die Gesamtübersicht der
Publikationen finden Sie
in Kapitel 08.

FORSCHUNGSBEREICHE



1 Quantum Computing



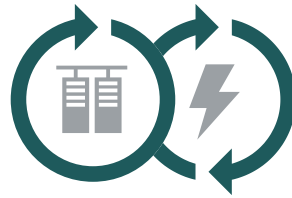
2 Forschungsdaten-Management



3 Infrastruktur



4 Umweltwissenschaften



5 Future Computing & Energieeffizienz



6 Medizin



7 Big Data & KI



8 Visualisierung



9 IT-Management & IT-Sicherheit

1| BayQS, DAQC, Q-Exa, Euro-Q-Exa, MAQCS, MILLENION-SGA1, MQV K5 (Q-DESSI), MQV K7 (QACI), MUNIQC-ATOMS, MUNIQC-SC, QuaST, OpenSuperQPlus100 2| FAIRmat, EXA4MIND, NFDI4Earth, NFDI4Ing, NFDI4Memory, NFDI4CS, BERD@NFDI, GHGA, OpenWebSearch.eu, InHPC-DE, TRR356, PUNCH4NFDI 3| OpenWebSearch.eu, GEANT GN5-1, InHPC-DE, SiVeGCS, Hochschulstart (DoSV), Bavarian Genomes, Terra_byte, Cluster Origins, DigiMed Bayern, ePIN 4| BAYSICS, LandKlif, K2I, Nutzwasser, HyBBEX, Terra_byte I4 Earth, NFDI4Ing, NFDI4Memory, NFDI4CS, BERD@NFDI, GHGA, OpenWebSearch.eu, InHPC-DE, TRR356, PUNCH4NFDI 5| DEEP-SEA, REGALE, ScalNEXT, CoMPS, SiVeGCS, BEAST- 6| CompBioMed2, MuDS, DigiMed, Bavarian Genomes, ePIN, GHGA 7| K2I, InHPC-DE, MCML*, BEAST 8| LediZ, InHPC-DE- 9| CONCORDIA, GEANT GN5-1

Bitte beachten Sie, dass mehrere laufende Forschungsprojekte verschiedene Themenbereiche abdecken und damit unterschiedlichen Forschungsbereichen zugeordnet werden – z.B. gleichzeitig Umweltwissenschaften und KI.

DIE SPRACHE DES LEBENS VERSTEHEN UND SPRECHEN LERNEN

Das Cerebras System am Leibniz-Rechenzentrum unterstützt Bioinformatikerinnen dabei, die Codes von Proteinen zu entschlüsseln. Damit können neue Heilverfahren entstehen oder Umweltfragen gelöst werden.

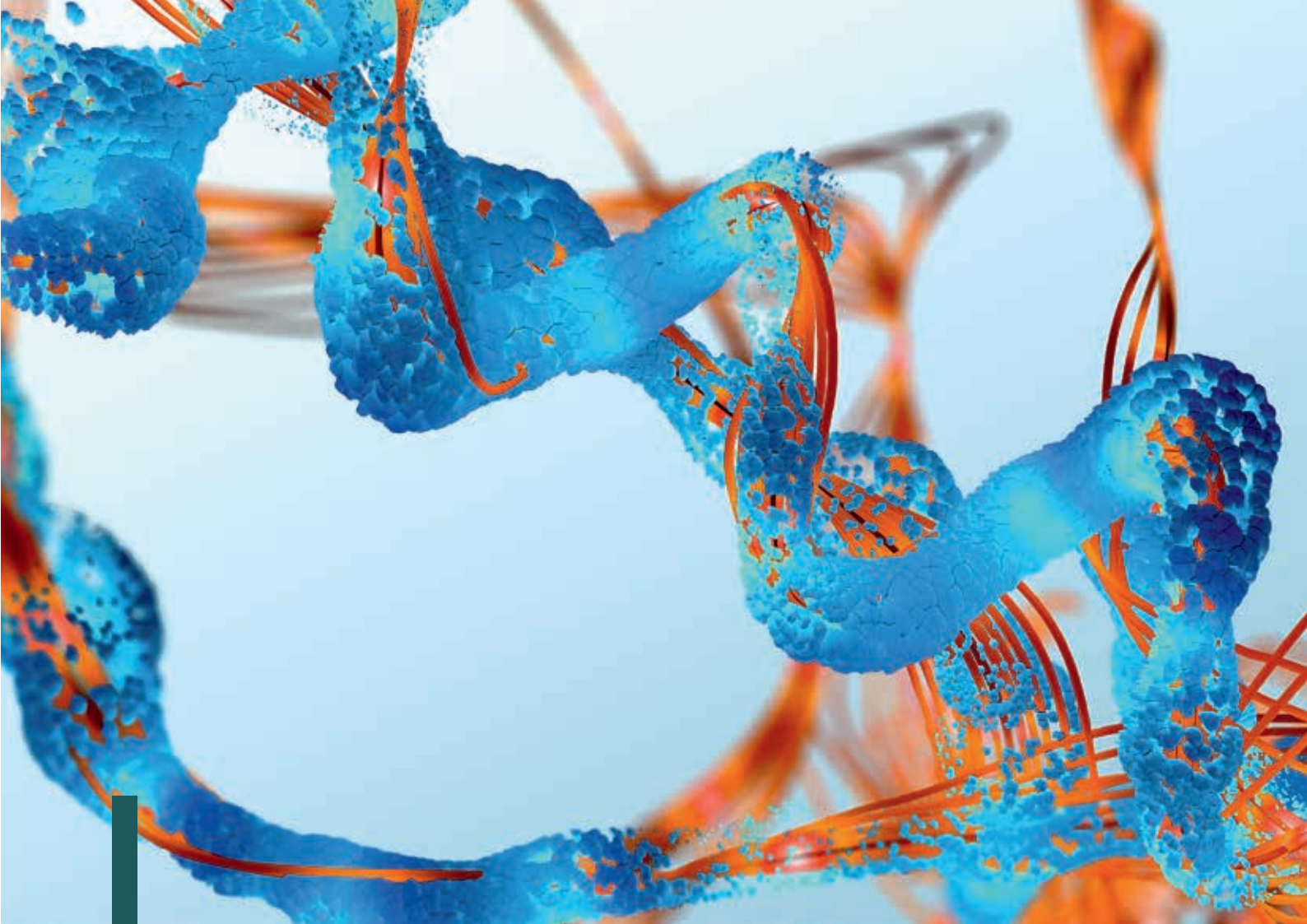
Proteine bestimmen Form, Aufbau und Funktionen von Zellen, Gewebe, Organen sowie den Stoffwechsel und das Wachstum, und zwar von allen Lebewesen. Ein Großteil von ihnen setzt sich aus etwa 20 Aminosäuren zusammen. Zwar sammeln sich inzwischen in Datenbanken Milliarden von Aminosäure-Kombinationen, doch wie diese Eiweißstoffe für Wachstum sorgen, ist noch immer ein Rätsel. Künstliche Intelligenz (KI) und Mustererkennung, neuerdings auch Modelle zur Verarbeitung menschlicher Sprache helfen, den Code des Lebens zu knacken: „Sprachmodelle verkürzen den Such- und Analyseprozess und geben uns neue Werkzeuge an die Hand, um das Verständnis von Proteinen zu verbessern“, erklärt Dr. Michael Heinzinger, Mitarbeiter am Lehrstuhl Bioinformatik und numerische Biologie der Technischen Universität München (TUM).

SPRACHMODELLE ENTSCHLÜSSELN DEN PROTEIN-CODE

Die Suche nach Proteinstrukturen anhand von Mustern dauert. Vor etwa vier Jahren entdeckte das TUM-Team die Analogie von menschlicher Sprache und Proteinen: Die 20 wichtigsten Aminosäuren funktionieren wie Buchstaben, fügen sich wie Wörter und Sätze zu Proteinen und Sequenzen zusammen. Statt mit Artikeln von Wikipedia wurde daher ELMo, das Embeddings from Language Model, mit Proteinsequenzen gefüttert und trainiert.

Das Ergebnis war ein erstes Sprachmodell zur Verarbeitung von Protein-Codes, das Datenbanken nicht mehr nach Mustern durchsucht, sondern direkt den Protein-Code aufnimmt und mit diesen lernt. Nach dessen Vorbild trainierten Forschende weltweit mit Large Language Models (LLM) und entwickelten immer bessere Trainingsmodelle. Entstanden die ersten Proteincode-Modelle der TUM noch am Computercluster des Lehrstuhls sowie an den KI-Systemen des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ), steht den Forschenden seit 2022 noch ein Cerebras CS-2 System zur Verfügung. „Ein völlig anderes KI-System“, sagt Heinzinger. „Mit seinem großen Chip und der hohen Speicherkapazität vereinfacht es viele Arbeitsschritte des verteilten Trainings.“ Modelle könnten schneller optimiert werden, das Training mit großen Datenmengen wird beschleunigt.

Die neuen Modelle trainieren nicht mehr nur mit den Mustern von Protein-Sequenzen, sondern üben sich nun auch in der Grammatik und zeigen so auf, wofür Eiweißstoffe dreidimensionale Strukturen bilden. „Wir können mit größeren Sprachmodellen Proteine zielgerichtet manipulieren, um damit den Herausforderungen des 21. Jahrhunderts zu begegnen“, so Heinzinger. „Durch ihr breites Funktionsspektrum sind Proteine in vielen pharmakologischen und biotechnologischen Prozessen unentbehrlich.“ Wer den Code der Proteine beherrscht, kann damit neue Moleküle oder Materialien schaffen.



RECHENKRAFT VERKÜRZT DAS TRAINING

Um Computern und Sprachmodellen die Eigenheiten von Proteinen zu vermitteln, konfrontierten die Spezialistinnen der TUM ELMo und weitere LLM mit Datensets, die zwischenzeitlich 2,3 Milliarden und mehr Proteinsequenzen enthalten. Normalerweise registrieren Sprachmodelle Buchstaben- und Wortkombinationen, in diesem Fall, wann sich welche Aminosäuren aneinanderreihen. Ähnlich einem Lückentext füllen die Programme danach künstlich erzeugte Leerstellen und beweisen damit, dass sie den Aufbau der Proteine nachvollziehen. Schrittweise werden danach Parameter verändert oder hinzugefügt. Mehrere Dutzend Trainingsläufe sind die Regel. Mit jedem Parameter wachsen zudem die Modelle: Das jüngste Modell der TUM-Bioinformatikerinnen, ProtT5, enthält schon drei Milliarden Verknüpfungen.

Je nach verfügbarer Rechenleistung und Modellgröße dauern Trainingsläufe Stunden oder mehrere Wochen. Dabei werden Daten immer wieder durch Prozessoren und Speichereinheiten geschleust, neu kombiniert, ausgewertet, überprüft, abgespeichert, weiterverarbeitet. Stehen im LRZ AI-Cluster 68 parallel geschaltete GPUs mit dynamischem Arbeitsspeicher (DRAM) von jeweils zwischen 16 und 80 Gigabyte zur Verfügung, bietet das Cerebras-System einen einzigen Chip, auf dem sich insgesamt 850.000 Arbeitseinheiten rund 40 Gigabyte on-chip SRAM Speicher teilen. Dieser ist mit HPE Superdome Flex Servern verbunden, die weitere 10 Terabyte Arbeits- sowie 100 Terabyte Datenspeicher mitbringen. Daten können auf diesem System blitzschnell zwischen Arbeits- und Speichereinheiten fließen. „Ein Training mit ProtT5 würde auf den anderen LRZ AI-Systemen Jahre dauern“, sagt Heinzinger. „Sprachmodelle trainieren direkt auf den Rohdaten einer Datenbank, die so aufgenommenen Proteincodes können danach auf andere Proteine angewandt werden.“ Zurzeit versucht der Bioinformatiker, weitere LLM auf dem CS-2-System zu implementieren und deren Tauglichkeit für Fragen aus der Biologie zu überprüfen. Es geht dabei auch darum, die neue Technologie in den Griff zu bekommen. „Sprachmodelle eröffnen neue Möglichkeiten, etwa die Generierung von Proteinsequenzen“, so Heinzinger. Einmal austrainiert bieten Modelle wie ProtT5 die Grundlagen für die Entwicklung von Software: etwa zur Analyse von Organismen und Gewebe, zum Erkennen und Behandeln von Krankheiten, auch zur Gestaltung neuer Materialien. Auch dafür lohnt sich der hohe Aufwand des Trainings. ■

IDEEN FÜR DEN VERKEHR DER ZUKUNFT

Wie wir morgen unterwegs sein werden, wird am Lehrstuhl für Verkehrstechnik der TUM mit Hilfe von Supercomputern simuliert und berechnet.

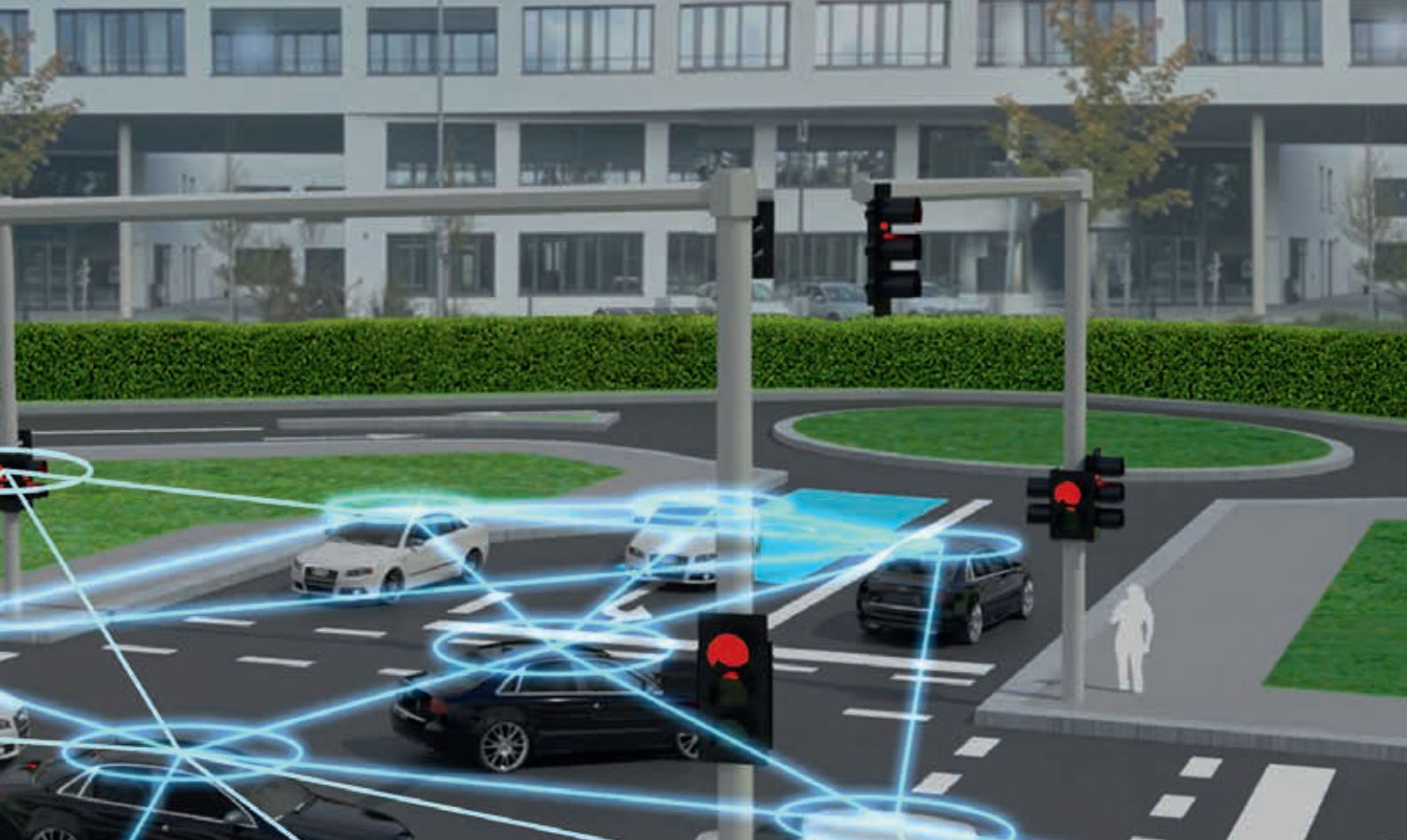


Wer in München auf den öffentlichen Personennahverkehr setzt, muss mit Enttäuschungen leben: Dem Unternehmen fehlen im Spätsommer 2023 wenigstens 50 Fahrerinnen, folglich fallen oft Busse und Bahnen aus. „Wir verzeichnen einen extremen Fachkräftemangel im Verkehrsbereich“, stellt Dr. Klaus Bogenberger, Professor für Verkehrstechnik an der Technischen Universität München (TUM), fest. „An der Automatisierung von Verkehrsträgern führt kein Weg vorbei.“ Autonome Fahrzeuge können den Personalmangel beseitigen helfen und die Mobilität in den Städten moderner und sicherer machen.

MIT ZUKUNFTSSZENARIEN DIE GEGENWART VERBESSERN

Mit Hilfe der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) bereiten Bogenberger und sein Team diese Zukunft vor: Sie simulieren Szenarien – etwa mit Robo-Shuttles in München oder wie sich Radlerinnen und autonome Fahrzeuge auf der Straße begegnen. Ebenfalls spannend für die Theorie des Verkehrsablaufs – Bogenbergers Fachgebiet – ist die Frage, wie der Verkehr flüssiger und sicherer wird: „Wir lösen Optimierungsprobleme – und dazu braucht es schnelle Algorithmen und Rechenverfahren, außerdem die Rechenpower von Supercomputern“, erläutert Bogenberger. „Man kann Verkehr und ganze Ballungsräume simulieren, doch ein wesentlicher Punkt ist, die dafür notwendigen Simulatoren immer realistischer und besser zu machen.“

Entwickeln Forschungsdisziplinen Modelle gewöhnlich dazu, um Systeme oder Prozesse zu verstehen, verfahren sie am Lehrstuhl für Verkehrstechnik umgekehrt: Sie modellieren Zukunftsszenarien, überprüfen diese mit Hilfe von Experimenten im Straßenalltag. Und verbessern mit den Realitätsdaten



wiederum die Simulationen. „Wie Robo-Autos genutzt werden, können wir nicht wissen, weil es bis auf wenige Testfahrzeuge noch keine gibt. Also brauchen wir viele unterschiedliche Modelle und Simulation“, sagt der Forscher. „Der Verkehrssektor fasziniert die Wissenschaft, weil er die ganze Gesellschaft betrifft, jede von uns ist täglich irgendwie mobil.“

Zuletzt simulierte Bogenbergers Team das Ridepooling, den Transportservice auf Zuruf, bei dem sich mehrere Personen mit unterschiedlichen Zielen einen autonom fahrenden Kleinbus teilen. Die Szenarien variierten nach Flotten- und Fahrzeuggrößen, Passagierzahlen und gewünschten Strecken. Sie zeigten auf, wie so ein Service organisiert werden kann. Eine Erkenntnis: „Um genutzt zu werden, muss Ridepooling in hoher Qualität und rund um die Uhr angeboten werden“, so Bogenberger. „Das aber ist ein komplexes Optimierungsproblem, das in Echtzeit gelöst werden muss.“

Neue Mobilitätsangebote sind Inhalt verschiedener Forschungsprojekte in München, an denen unter anderem die MVG sowie die Stadtwerke München, sowie weitere Unternehmen beteiligt sind und die vom Bundesministerium für Digitales und Verkehr (BMDV) gefördert werden. Für TEMPUS, das Testfeld für automatisierte und vernetzte Mobilität in München und Umgebung, sind im Norden Münchens immer wieder autonome Fahrzeuge von BMW und Ebusco unterwegs. Wie Kameras, Drohnen und Kontaktschleifen im Testfeld Straßen und Verkehr kontrollieren, wurde auf der Internationalen Automobilausstellung IAA Mobility 2023 gezeigt. „Ein solches Testfeld aus allen Straßenkategorien ist weltweit einzigartig, es geht nicht nur um automatisierten Verkehr in der Stadt, die Vorbereitung der Infrastruktur und neue Transportkonzepte“, so Bogenberger. „Weiteres Ziel ist die Standardisierung der Datenflüsse.“ Informationen von smarten

Ampeln, Kameras, aus Testfahrzeugen und aus Service-Apps fließen zusammen, sollen nutzbar werden. Dann könnten daraus digitale Zwillinge von Mobilitätsdiensten oder Straßenzügen konstruiert werden, mit denen sie der Verkehr intelligenter managen ließe.

FREI VERFÜGBARE DATEN GEFRAGT

Noch ist das eine Zukunftsvision: „Jeder Gerätehersteller, Mobilfunkanbieter oder Fahrzeughersteller speichert Bewegungsdaten weltweit. Das große Dilemma der Forschung ist, dass sie zu diesen Daten keinerlei Zugang haben“, klagt Bogenberger. Daher setzen sie am Lehrstuhl auf Kooperationen mit Unternehmen, kaufen Daten zu – oder erheben sie selbst. Natürlich werden diese und andere Datensätze längst auch mit den Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) ausgewertet. „Der Verkehr produziert laufend wiederkehrende Muster, etwa Staus im Pendel- oder Ferienverkehr“, berichtet Bogenberger. „Aber neuronale Netze mit den Ergebnissen aus unseren Zukunftsszenarien oder den Simulationsdaten von großen Flotten zu trainieren, macht noch keinen Sinn. Dafür brauchen wir mehr empirische Experimente und Daten.“ Verkehrstechnik geht eben vom künftigen Ideal aus, um Fragen der Gegenwart zu klären.

WIE REICHE VOR 4000 JAHREN LEBTEN

16 Zimmer im Erdgeschoss, ausgeklügelte Abwasserinstallationen, ein Garten: Mit Archäologinnen der Ludwig-Maximilians-Universität München hat das Leibniz-Rechenzentrum eine altbabylonische Villa in Virtueller Realität rekonstruiert.

Betritt man das Haus, geht es zuerst in Vorräume und einen Hof. Von dort ist die Küche mit zwei Öfen und aufwändigen Abflüssen erreichbar. Der Innenhof flutet Küche und Zimmer mit Sonne. „Dieses Haus kommt einem so normal vor, aber es wurde in der Zeit um 1850 vor Christus in der Stadt Ur gebaut“, meint Adelheid Otto, Professorin für Archäologin und Leiterin des Instituts für Vorderasiatische Archäologie an der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU). „Zu dieser Zeit lebten die Menschen in Bayern und Mitteleuropa in einfachsten Behausungen, in Ur gab es schon luxuriös ausgestattete Villen.“

Die Villa mit ihren hohen Räumen und Wänden aus Backstein und Lehmziegeln wirkt real, wurde aber am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) digital rekonstruiert. „Virtuelle Realität ist etwas Neues, das wir jetzt in unserem Fach für Lehre und Forschung einsetzen können“, sagt Otto. „Mit digitalen Modellen können wir unsere Erkenntnisse einem größeren Publikum zugänglich machen und Lebensweisen veranschaulichen.“ Die Villa von Sin-nada, dem Manager des Ningal-Tempels von Ur, lässt nicht nur Rückschlüsse auf eine Hochkultur zu, in der Männer und Frauen lesen und schreiben konnten und sich sehr gesund ernährten, sie zeigt auch die Langlebigkeit der Lehmbauweise: „Lehmziegel halten Wohnungen im heißen Sommer kühl und im Winter warm, und haben sich dort seit Jahrtausenden bewährt“, erklärt Otto.

MIT FOTOS, SKIZZEN UND PLÄNEN MODELLIEREN

Zwei Jahre lang arbeiteten die LRZ-Expertinnen des Zentrum für Visualisierung und Virtuelle Realität (V2C) immer wieder mit den Archäologinnen zusammen, um die Villa aufzubauen. Auf den ersten Blick wirken die Raumverhältnisse eng, doch wer die Zimmer in virtueller Realität (VR) erlebt, erkennt: Sin-nada lebte mit seiner Frau Nuṭṭupum, die unterrichtete und Schafe für den

Tempel mästete, in herrschaftlichen Verhältnissen. „Das Haus verfügte verteilt auf zwei Stockwerke sicher über mehr als 20 Räume und bot schon im Erdgeschoss eine Fläche von 236 Quadratmetern“, erklärt Dr. Berthold Einwag, der die Digitalisierung koordinierte. „Aus Briefen und anderen Texten wissen wir, dass in dem verschwenderisch ausgestatteten Haus repräsentiert, Handel getrieben und Opferrituale für die Ahnen durchgeführt wurden.“

Bei der Rekonstruktion halfen Fotos, Luftbilder und Planzeichnungen, die das Team um Otto und Einwag in drei Ausgrabungen 2017, 2019 und 2022 sammelte. Ur liegt im Süden des heutigen Iraks, wurde bereits in den 1920er Jahren von dem britischen Archäologen Sir Leonard Woolley entdeckt: „Wir haben jeden Millimeter der Villa erkundet, genau ausgewiesen, wo Reste von Gefäßen und Geräten oder Überreste von Mahlzeiten lagen und wo Figurinen, Tontafeln oder Behälter aufbewahrt wurden“, erzählt Otto. Jedes Detail schärfte den Eindruck von der Lebensweise im Süden von Ur. Die Erkenntnis wuchs, dass hier eher wohlhabende Menschen wohnten.





IM AUSTAUSCH EIN HISTORISCHES GEBÄUDE AUSGESTALTEN

„Die digitale Rekonstruktion haben wir mit dem LRZ in ständigem Hin und her entwickelt“, berichtet Einwag. Aus Bildern und Grundrissen entstand ein erstes 3D-Modell im Photogrammetrie-Verfahren. Danach wurden schrittweise die Villa gerendert sowie die Texturen von Wänden und Böden gestaltet. Dieses detaillierte Modell wurde mit Hilfe von Game Engines, spezieller Software zur Gestaltung von Online-Spielen, in VR umgesetzt. „Das digitale Modell ist vorführbar“, sagt Archäologin Otto, „aber sicher kein Endprodukt, wir wollen und sollten das ausbauen – wenigstens die virtuelle Tour durchs Haus vertonen oder verschriftlichen.“ Auch ohne Einrichtung kann damit geforscht werden: „Mit Head-Mountain-Displays können Studierende mit dem Modell arbeiten“, sagt Otto, „und wir werden darin Arbeitshypothesen klären können – etwa zu den Lichtverhältnissen in den Räumen, zur Anzahl von Fenstern, zum zweiten Geschoss, aber auch zum Leben in dieser Villa.“



FINANZIERUNG GESUCHT

Die Villa und Umgebung von Ur ließen sich noch lebendiger, also mit Bildern von Menschen oder Gegenständen und vielleicht sogar Möbeln ausstatten. Das könnte Raum- und Größenverhältnisse verdeutlichen, zudem den Alltag in Ur veranschaulichen. Doch zur Finanzierung dieses Aufwands sucht das Projekt noch Sponsoren und Mitstreiterinnen.

Kontakt: <https://www.vorderas-archaeologie.uni-muenchen.de/spenden-an-stiftungsfonds-vaa/index.html>

DATEN-SCHATZ FÜR GRUNDSATZ-FRAGEN



Millennium TNG heißt eine Serie von Simulationen, die an den Supercomputern des Leibniz-Rechenzentrums und der Universität Durham berechnet wurden: Die Analyse beschäftigt rund 50 Forschungsgruppen in aller Welt.

Dem Wissen über das Universum, der Entstehung des Universums und der möglichen Kollision von Galaxien einen Riesenschritt nähergekommen. Ein internationales Forschungsteam um Prof. Dr. Volker Springel, Direktor des Max-Planck-Instituts für Astrophysik, legt die bisher größte, hochaufgelöste Dunkle-Materie-Simulation vor, die eine Region von fast 10 Milliarden Lichtjahren abdeckt. Sie wurde auf den Supercomputern SuperMUC-NG des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) sowie Cosma8 der Universität Durham berechnet. Die Modellierung gehört zu MillenniumTNG – eine Reihe großvolumiger Simulationen zu unserem Universum. Diese haben bislang annähernd 50 Forschungsprojekte angestoßen.

Sie erforschen den Kosmos: Was bringen uns Ihre Erkenntnisse?

Prof. Dr. Volker Springel: Sicher keinen ökonomischen Nutzen, es ist reine Grundlagenforschung. Viele Menschen sind fasziniert vom Universum, vom Ursprung der Welt und sie möchten gerne verstehen, wie sich Alles entwickelt hat. Antworten auf diese existenziellen Fragen gibt die kosmologische Forschung. Nicht zuletzt treibt Astrophysik die technische Entwicklung.

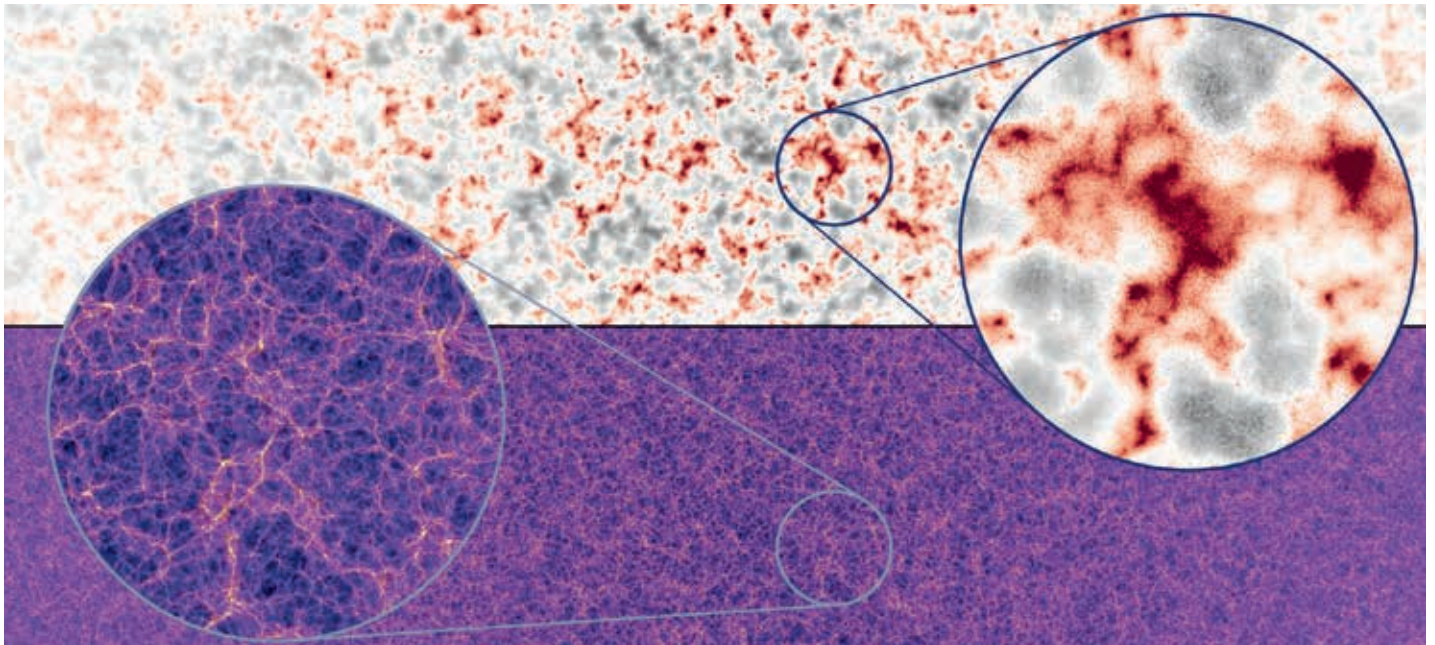
MillenniumTNG zeigt nun die Galaxien- und Materieverteilung für ein Volumen, das das gesamte Universum repräsentieren kann – wer kann diese Simulationen nutzen?

Springel: Die Forschenden der Kosmologie und der theoretischen Astronomie. Wir benutzen dieses Modell, um unsere Theorien über das Universum zu testen und mit

neuen Beobachtungsdaten abzugleichen. Momentan liefern sehr viele Beobachtungsmissionen Informationen zum frühen Geschehen im Universum. Das James-Webb-Weltraumteleskop beobachtet die Kinderstube unseres Kosmos, auch der gerade gestartete Euclid-Satellit wird sehr präzise Beobachtungen von einer Milliarde Galaxien liefern und damit gewaltige Karten des Universums produzieren. Um diese statistischen Daten auszuwerten, brauchen wir theoretische Modelle und Computer, um unsere Vorstellungen vom Geschehen im All zu validieren.

Sie beschäftigen sich mit Numerik, entwickeln die Formeln und Modelle, mit denen Messwerte und Beobachtungsdaten verarbeitet werden. Erst Millennium, dann IllustrisTNG und jetzt MillenniumTNG – was unterscheidet diese Modelle voneinander?

Springel: Diese Modelle bauen aufeinander auf und wurden in mehr als zehn Jahren immer detailreicher, vollständiger. Das Konzept dahinter: Wir versuchen, mit numerischen Modellen die Entwicklung des Universums nach dem Urknall nachzuvollziehen, immerhin ein Zeitraum von mehr als 13,5 Milliarden Jahren. Realisieren wir dabei die Anfangsbedingungen auf dem Computer und rechnen die korrekten, physikalischen Gesetze vorwärts in der Zeit, müsste ein Universum herauskommen, wie wir es heute sehen können. So gleichen wir Theorie und Beobachtung ab. Die Serie von Simulationen, die wir auf dem SuperMUC-NG und Cosma8 gerechnet haben, beachtet eine neue Kom-



ponente, die Neutrinos. Das sind Geisterteilchen, die nur ein bis zwei Prozent der Materiedichte ausmachen, weshalb man sie früher vernachlässigte. Jetzt aber sind die kosmologischen Daten so präzise, dass man diese kleinen Einheiten vermessen kann. Das macht die Simulation besonders interessant – wir können nun mehr über die Neutrinos erfahren, ihre Eigenschaften und vielleicht sogar ihre Masse kennenlernen.

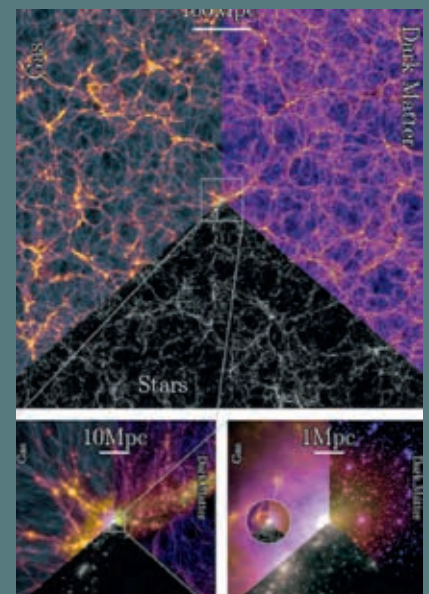
Kann MillenniumTNG auf andere Fragestellungen übertragen werden?

Springel: Das MillenniumTNG-Modell und die entsprechenden Simulationen kann man für sehr viele wissenschaftliche Fragen einsetzen. Gerade wurden die ersten zehn wissenschaftlichen Arbeiten aus unterschiedlichen Fachbereichen der Astrophysik publiziert, die auf Basis der Simulations-Serie entstanden, ungefähr 45 weitere Analyseprojekte sind derzeit in Planung. Mit MillenniumTNG lassen sich nicht nur kosmologische Aspekte berechnen, sondern auch astrophysikalische Fragen zur Entstehung und Entwicklung von Galaxien klären sowie das kosmische Netz intensiv untersuchen.

Was sind die nächsten Pläne für MillenniumTNG?

Springel: Wir wollen noch eine Reihe an Themen bearbeiten, etwa die Galaxienhaufen. Im Vergleich zu früheren Rechnungen hat die Simulation ja ein sehr großes Volumen, und das ermöglicht es erstmals, sehr schwere, massereiche Galaxienhaufen zu studieren. Die sind sehr selten und haben einen großen Abstand untereinander. Wir werden hoffentlich viele Dinge entdecken, die uns überraschen. ■

BLICK INS UNIVERSUM



Volker Springel erklärt seine Forschung

<https://tiny.badw.de/ETaEW>

Alles über das Projekt

<https://www.mtnq-project.org/>

Infos zu Millennium TNG

<https://tiny.badw.de/zrwEzs>



KOMBINIERE – SIMULATION PLUS KI – SU

Am Leibniz-Rechenzentrum lassen sich Supercomputing und Methoden der Künstliche Intelligenz kombinieren. Das bereichert und beschleunigt klassische Simulationen.

Höher aufgelöste Bilder stammen heute nicht immer aus Kameras und anderen Aufnahmegeräten. Sie können auch das Ergebnis von Datenverarbeitung sein. Das zeigt das Beispiel World Settlement Footprint (WSF), eine Reihe von Datensätzen, die das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) aus Satellitenbildern erstellt. Sie zeigen die Entwicklung weltweiter Siedlungsflächen seit 1985. Durch das Ergänzen von Referenzbildern mit Methoden Künstlicher Intelligenz (KI) wird ihre Auflösung auf unter 10 Meter verbessert. Weitere Zoomeffekte wird KI einmal aus diesen Bilddaten simulieren, dann lassen sich auf den WSF-Ansichten Wirtschafts- von Wohngebäuden unterscheiden.

Klassische Simulationsverfahren und KI-Modelle rücken näher zusammen. Mit vielen neuen Graphics Processing Units (GPU), die auf die Verarbeitung großer Volumen aus Bild- und Grafikdaten spezialisiert sind, wird das High-Performance Computing beschleunigt und mit KI-Verfahren kombiniert: „HPC und KI werden von Beschleunigern angetrieben, insbesondere von GPU“, sagt Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ). „Wir erweitern unsere Infrastruktur stetig mit KI-Fähigkeiten, um neue Erkenntnisse und Entdeckungen zu ermöglichen. Im Zusammenspiel von Simulationen und KI liegt neues Wissen.“ Bislang werden Simulationen noch oft an Supercomputern berechnet, die Resultate an KI-Clustern ausgewertet. Jetzt sind beide Aufgaben auf einer Infrastruktur möglich. Projekte, die mit KI-Methoden arbeiten, stoßen in allen Forschungsdisziplinen auf höchstes Interesse; in vielen Fachrichtungen wird bereits mit KI-Methoden zur Analyse von Daten und deren Integration in bestehende Modellierungsverfahren experimentiert. Nach Recherchen des LRZ lassen sich bereits diese Szenarien beobachten:



SCENARIO 1: MIT KI SIMULATIONSERGEBNISSE AUSWERTEN

Klassische Simulationen basieren auf Naturgesetzen, die mit Hilfe von Differenzialgleichungen formuliert werden. Die Gültigkeit der Ergebnisse wird durch Beobachtungen in der Realität oder durch Experimente nachgewiesen. Simulationen sind präzise, benötigen aber viel Zeit und Rechenkraft. Beispiel ClimEx: Das Forschungsprojekt zeigt die Klimaentwicklung Bayerns für einen Zeitraum von 150 Jahren. Für jedes Jahr wurden aus Klima- und Wasserwirtschaftsdaten 50 Szenarien berechnet, um die Folgen von Extrem-Wetterereignissen zu beurteilen. Zur Berechnung der 7500 Modelljahre benötigte der Supercomputer des LRZ insgesamt knapp 90 Millionen Rechenkernstunden, danach lag ein Datensatz von mehr als 500 Terabyte vor. Das ClimEx-Team wertete ihn auch mit KI-Methoden aus, klassifizierte etwa Muster in Luftdruck-Konstellationen.

SCENARIO 2: AUS SIMULATIONEN TRAININGSDATEN GEWINNEN

Wird KI mit Ergebnissen von Simulationen trainiert, entstehen Surrogatmodelle: Darauf setzte das internationale Projekt TNG Millennium (siehe Bericht S.58) – eine Serie großvolumiger Simulationen über das

Universum, die eine Region von zehn Milliarden Lichtjahren beschreibt. Die Datensätze umfassen immerhin drei Petabyte an Informationen und werden nun mittels KI ausgewertet: Auf Basis einzelner Punkte, die präzise simuliert wurden und zwischen denen man interpoliert, werden etwa sogenannte Emulatoren trainiert. Diese wiederum bilden Funktionsweisen der Simulation nach, indem sie Berechnungen durch Beobachtungsdaten und Messwerte ersetzen und auf diese Art schnelle Aussagen ermöglichen oder Hypothesen bestätigen helfen.

SCENARIO 3: MIT SURROGATMODELLEN SIMULATIONEN VARIIEREN

Speziell entwickelte KI-Modelle für das Training mit Simulationsdaten erstellen mit weniger Aufwand und Zeit Varianten. So leiten sie am DLR aus den Simulationen des WSF mit veränderten Parametern weitere Szenarien ab. Führen diese zu vergleichbaren Ergebnissen, stützt das die Plausibilität der Originalsimulation. Das DLR-Team arbeitet daran, mit Surrogat-Modellen außerdem kurzfristige Veränderungen von Siedlungen und Mega-Cities abzubilden.

SCENARIO 4: MIT KI-MODELLEN BERECHNUNGEN ERGÄNZEN

Schließlich gibt es in der Natur Phänomene und Systeme, die sich mit klassischen Rechenmethoden nur unzureichend beschreiben lassen. So schwanken Temperaturen oder Wasserqualitäten im Umfeld von Unternehmen oder Staudämmen, über Acker- und Waldböden herrschen auch unterschiedliche Temperaturen oder Luftströmungen. Solche Aspekte wären nur mit höchstem Mess- und Datenaufwand zu berechnen. In diesem Fall wird die Simulation aus Daten von KI-Modellen ergänzt, die aus Observations- oder Messdaten heraus Zusammenhänge erschließt. Dieses Verfahren hilft auch in der Molekularchemie und Teilchenphysik das Verständnis von Zusammenhängen zu verbessern. ■

DAS SURROGATMODELL

Surrogat-Modelle entstehen aus statistischen Daten. Sie ersetzen rechenintensive Teile einer klassischen Simulation oder ergänzen Werte, die nur schwer oder mit höchstem Aufwand zu berechnen sind. Surrogatmodelle werden auch mit Ergebnissen aus Simulationen trainiert, um schneller weitere Szenarien zu berechnen.







05

AUS- UND WEITERBILDUNG

Übung macht den Meister	64
Start in die IT: Ausbildung am LRZ	66
Meister wissenschaftlicher Vielfalt	68

ÜBUNG MACHT DEN IT-MEISTER

Nutzerinnen der LRZ-Infrastrukturen interessierten sich auch 2023 wieder rege für das umfassende Kursprogramm, das wir am LRZ und gemeinsam mit unseren Partner-Institutionen anbieten. Getreu dem Motto nur Übung macht IT-Meisterinnen nahmen fast 1000 User an Kursen zu KI und Deep-Learning, Quantencomputing oder Code-Optimierung teil. Teilnehmende erhalten so einen direkten Einblick in den aktuellen Stand der IT-Wissenschaft und Technik.

Ein großer Erfolg für die internen Weiterbildungen blieb weiterhin der Einsatz der Plattform Udemy. Darüber bieten wir unserem Personal Fortbildungskurse von Zeitmanagement bis zu Scrum. Viel Engagement floß zudem in die Ausbildung von IT-Fachinformatikerinnen, die wir am LRZ mit viel Herzblut, Know-how und Praxisübungen ermöglichen. ■



TRAINING IN HPC UND FUTURE COMPUTING

QUICK FACTS



36 Kurse

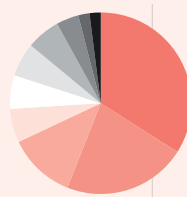


59,5 Kurstage



990 Teilnehmerinnen

THEMENGEBIETE HPC + FUTURE COMPUTING



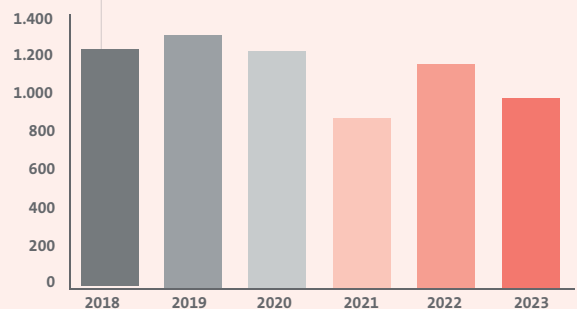
- Deep Learning, Machine Learning and AI
- LRZ Systems
- CFD (Computational Fluid Dynamics)
- Code Optimisation
- GPU Programmierung
- Programming Languages
- Quantum Computing
- Parallel Programming
- Data Analytics
- Numerical Mathematics

TRAININGSPARTNER



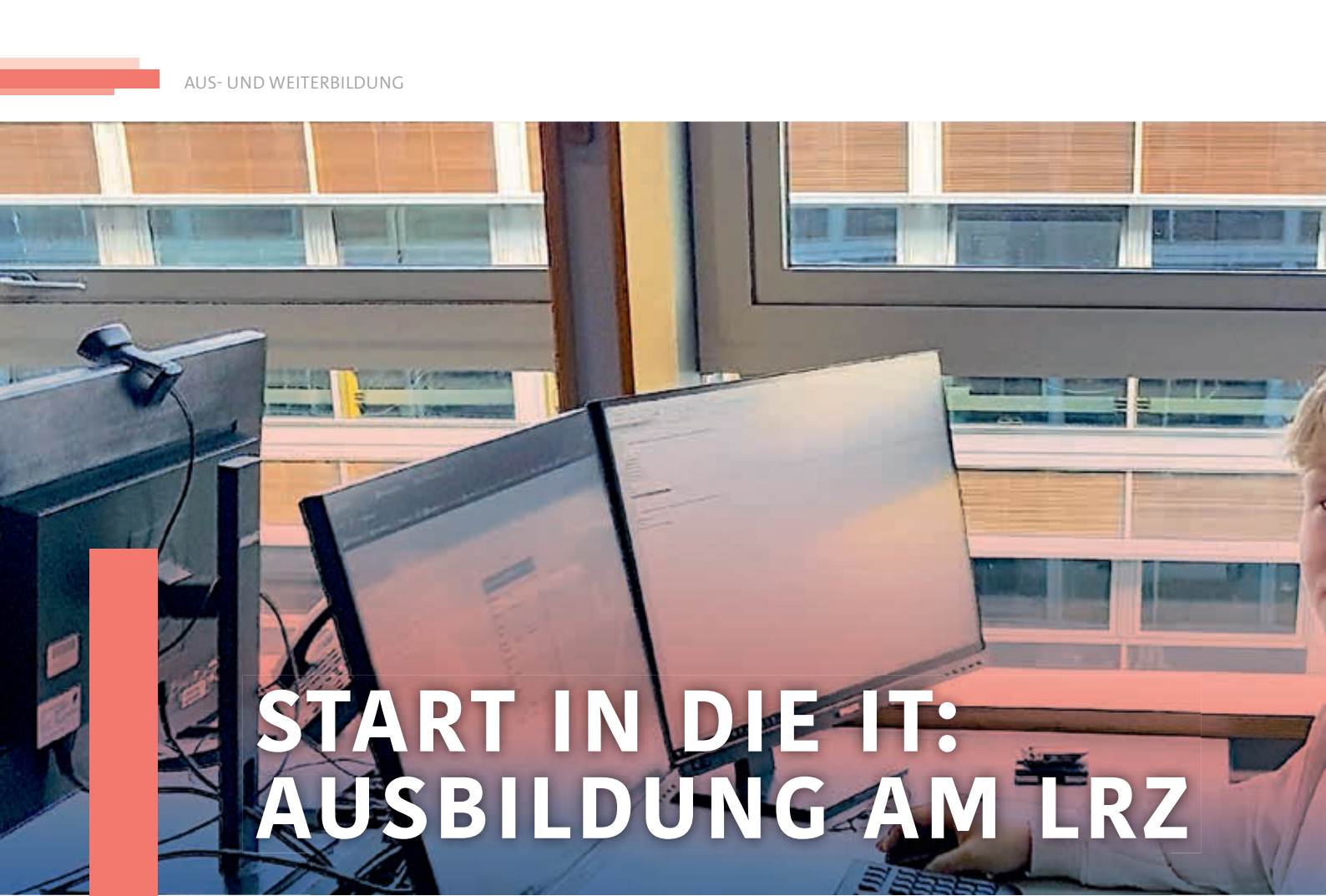
CADFEM	CADFEM GmbH
EuroCC	National Competence Centres in the Framework of EuroHPC
Eviden	Eviden Germany GmbH
GCS	Gauss Centre for Supercomputing
HQS	HQS Quantum Simulations GmbH
Intel	Intel Corporation
NHR@FAU	Zentrum für nationales Hochleistungsrechnen Erlangen
NVIDIA	NVIDIA Corporation
SMB	SMB Corporation
VI-HPS	Virtual Institute – High Productivity Supercomputing
VSC	Vienna Scientific Cluster, TU Wien, Österreich
Xanadu	Xanadu Quantum Technologies Inc.

ENTWICKLUNG TEILNEHMERINNEN HPC UND FUTURE COMPUTING-KURSE SEIT 2018



Eine Gesamtübersicht über alle Kurse 2023 finden Sie im Kapitel 8.





START IN DIE IT: AUSBILDUNG AM LRZ

Sieben Frauen und Männer lassen sich zurzeit am Leibniz-Rechenzentrum zu Fachinformatikerinnen ausbilden. Alexander Darras hat die Lehre gerade abgeschlossen, verstärkt jetzt das Archiv- und Backup-Team und plant seine Zukunft.

Mit „gut“ bewertet Alexander Darras die Ausbildung am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). Nochmals vor die Entscheidung gestellt, würde er sie sofort wieder machen: „Wer am LRZ Fachinformatikerin lernen will, sollte sich für Computer-, Netztechnik und die Konfiguration von digitalen Arbeitsplätzen interessieren und Spaß am Lernen mitbringen“, sagt er. „Nur in die Arbeit zu gehen und Aufgaben erledigen, reicht hier nicht, man muss viel und eigenständig lernen.“ Selbständiges Arbeiten war besonders gefragt: Alexander startete 2020 am LRZ, kurz vor dem Corona-bedingten Lock-down, der die Auszubildenden ins Homeoffice zwang.

EINBLICKE IN VERSCHIEDENE IT-BEREICHE
Fachinformatikerinnen für Systemintegration

planen, konfigurieren und administrieren digitale Arbeitsplätze. Sie stellen dazu Computer, Notebooks, Clients sowie Software und Tools bereit, unterstützen Anwenderinnen bei Problemen, entweder am Telefon oder per Mail. Drei Jahre dauert die Ausbildung am LRZ. Zwischen den Unterrichtsblöcken in der Berufsschule durchlief Alexander verschiedene Abteilungen und gewann Einblicke in Technologien: vom Supercomputer bis Servicedesk, von Hardware über Software bis zu Online-Tools, von On-Premise-Lösungen bis hin zu Cloud-Anwendungen. „Wir haben Kabelarten, den Aufbau und die Struktur von Netzen kennengelernt, außerdem Workstations mit den Betriebssystemen Linux, Windows oder MacOS und dazu passender Software installiert“, beschreibt Alexander. Daneben kümmerte er sich mit den Kolleginnen um die Aktualisierung der Programme, damit die IT-Systeme sicher bleiben.



Das LRZ als Ausbildungsbetrieb hatte Alexander nach der Schule nicht auf dem Schirm. Von einer Freundin erfuhr seine Mutter vom LRZ und diese machte ihn auf das Rechenzentrum aufmerksam, das Universitäten mit IT-Diensten versorgt und als Supercomputing-Zentrum die Wissenschaft unterstützt. „Das klang ziemlich spannend“, meint Alexander. „Und im Vergleich zu den Erzählungen von Leuten aus der Berufsschule waren die Lehrinhalte am LRZ sehr abwechslungsreich, ich habe mehr Betriebssysteme, Programme und Techniken kennengelernt als andere in meiner Klasse.“

LERNPLATTFORM UND SELBSTORGANISATION

Durch die Digitalisierung können Fachinformatikerinnen der Richtung Systemintegration einen Teil ihrer Aufgaben zuhause erledigen. Wegen Corona arbeitete Alexander einmal pro Woche im LRZ, den Rest zuhause. „Das LRZ hat die Ausbildung mit der Lernplattform Moodle und Videokonferenzen gut organisiert“, sagt Alexander. „Ich habe viel gelernt.“ Indirekt stand Selbstorganisation auf der Agenda: Die Auszubildenden planten selbst, wann sie Aufträge für den Servicedesk lösen oder digitale Lektionen absolvieren. Unterstützen normalerweise ältere Kolleginnen die Auszubildenden, mussten Alexander und die Anderen oft eigenständig Lösungen finden: „Das war heraus-

fordernd, aber so soll es ja auch sein.“ Einziger Kritikpunkt an der Lehre ist die fehlende Zusammenarbeit zwischen Berufsschule und der Industrie- und Handelskammer (IHK), die die Prüfungen abnimmt. Aus Alexanders Berufsschulklasse fielen neun von 24 Schülerinnen durch. „Keiner wusste, was abgefragt wird, selbst die Lehrerinnen nicht, die Kommunikation könnte deutlich besser sein“, kritisiert der Fachinformatiker. „Aber dafür kann ja das LRZ nichts.“ Im Gegenteil – am LRZ können die Azubis online immer wieder ihr Wissen testen und sich so gezielter auf die Prüfungen vorbereiten. Alle schafften die Prüfungen.

UND JETZT: WEITERLERNEN UND STUDIEREN

„IT macht mir Spaß“, sagt der junge Fachinformatiker. Inzwischen arbeitet er am LRZ im Archiv- und Backup-Team: „Ich kann hier einiges aus der Ausbildung anwenden, aber ich lerne immer noch viel Neues.“ Das wird so bleiben. Inzwischen plant Alexander den nächsten Schritt: Ab Herbst 2024 will er an der Fernuni in Wismar IT-Forensik studieren und gleichzeitig in Teilzeit am LRZ arbeiten: „IT-Sicherheit gehört dazu, das fand ich schon in meiner Ausbildung ziemlich interessant. Es wird bestimmt cool, darüber im Studium noch mehr zu lernen.“

BERUFSSTART AM LRZ

Das LRZ bildet Fachinformatikerinnen Systemintegration aus. Die Auszubildenden lernen

- IT-Bereiche von Supercomputing bis Servicedesk sowie Software und Cloud-Diensten kennen.
- den Umgang mit diversen Betriebssystemen und innovativen Netzen.
- den Aufbau und die Wartung von Arbeitsumgebungen.
- wie sie Anwenderinnen unterstützen und beraten.

Programme wie Teamviewer oder die Confluence-Plattform gehören daher zu ihren Werkzeugen.

MEISTER WISSENSCHAFTLICHER VIELFALT

Alle zwei Jahre findet am Leibniz-Rechenzentrum der Status- & Results-Workshop statt. Die internationale HPC-Community informierte sich hier über Projekte, die auf dem SuperMUC-NG gerechnet werden, und tauschte Erfahrungen aus.



GUT ZU WISSEN

Einige Vorträge des Status & Ergebnis-Workshops sind auf YouTube verfügbar.



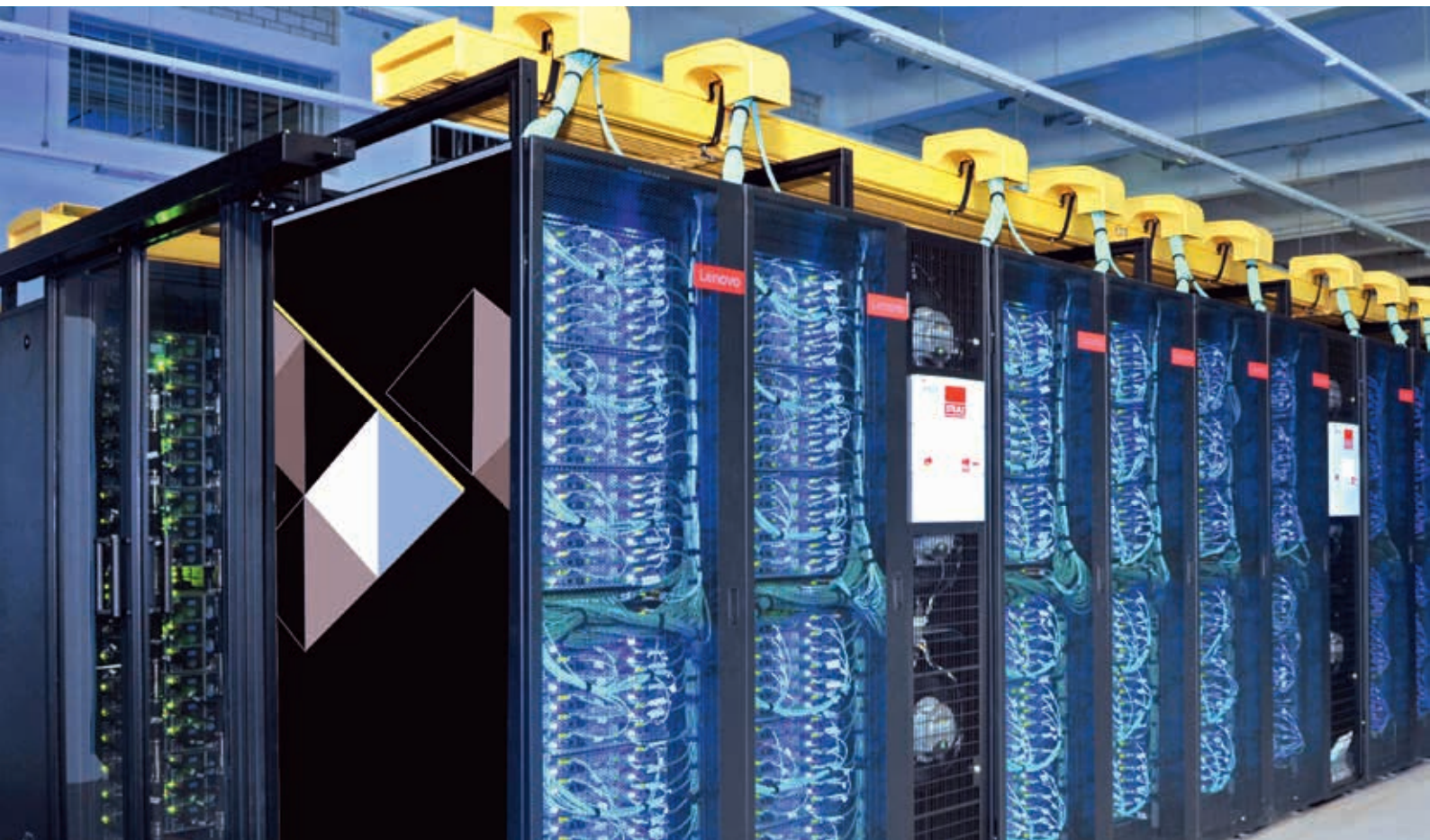
Beschreibungen weiterer Projekte und Erfahrungen finden Sie in "High Performance Computing in Science and Engineering"



Die Zahlen sprechen für sich: Seit 2019, dem Betriebsstart des SuperMUC-NG, arbeiteten dessen 311.040 Rechenkern fast 7,5 Milliarden Rechenkernstunden. Der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) in Garching bei München erledigte damit mehr als zwei Millionen Jobs für annähernd 500 Forschungsprojekte. Im Mai 2023 zeigten Anwenderinnen während des virtuellen, drei Tage dauernden Status & Results Workshop ausgewählte Arbeiten. „Wir sind begeistert, auf wie viel Interesse dieser Workshop international stößt“, sagte Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Wir erfahren dabei von Forschenden, wie wir unsere HPC- und IT-Angebote noch weiter verbessern können.“ Zusammenfassungen der Vorträge finden sich im Berichtsband "High Performance Computing in Science and Engineering" oder als "Lectures on Demand" auf dem YouTube-Kanal des LRZ (siehe Kasten).

VON MATHEMATIK BIS MEDIZIN

Die 20 Vorträge verdeutlichten die Vielfalt der Wissenschaftsdisziplinen, die den SuperMUC-NG am LRZ fordern: So zeigte Prof. Andreas Hinz von der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU), wie Supercomputing dazu beiträgt, alte mathematische Rätsel zu lösen. Hinz und sein Team erforschen die metrische Struktur von Hanoi Graphen, auf denen das Strategiespiel Tower of Hanoi basiert. Diese liefern mathematische Modelle auch für Fachdisziplinen von Neuropsychologie bis Informatik. Prof. Frauke Gräter beschäftigt sich an der Universität Heidelberg



indes mit Molecular Biomechanics und spürt Ermüdungserscheinungen von Geweben nach. Mit Hilfe von SuperMUC-NG modellierte ihre Arbeitsgruppe, unter welchen mechanischen Belastungen Kollagen – das Protein verleiht dem Bindegewebe Stabilität – reißen kann.

Strömungsmechanik und Turbulenzen sind wiederum das Forschungsfeld von Prof. Jörg Schumacher an der Technischen Universität Ilmenau: Mit HPC analysiert er thermisch getriebene Strömungen, wie sie in technischen Geräten oder in der Astrophysik vorkommen. SuperMUC-NG simulierte außerdem Erdbeben, Emissionen des Straßen- und Luftverkehrs oder den Blutfluss in Venen und Adern, dieses Modell des Exzellenz-Clusters CompBioMed2 wurde am LRZ auch visualisiert. "Wir beobachten in den letzten Jahren eine stetige Zunahme von Projekten im Bereich der Hochenergiephysik, insbesondere der Quantenchromodynamik (QCD) sowie in den Natur-, Ingenieur-, Bio- und Umweltwissenschaften, auch in der Pharmazie und Medizin wächst der Bedarf an Supercomputing", fasst Dr. Gerald Mathias, Leiter des Computational X Support (CXs) Teams am LRZ, zusammen. "Immer mehr Projekte nutzen Techniken wie Deep Learning und Machine Learning, um riesige Datenmengen zu analysieren."

SCHNELLER RECHNEN MIT GPU

Deshalb werden in die 240 Rechenknoten von SuperMUC-NG Phase 2 – sie startet demnächst in den Betrieb – neben Central Processing Units (CPU) neueste Ponte Vecchio Graphics Processing Units (GPU) von Intel integriert, die Berechnungen beschleunigen und für Verfahren Künstlicher Intelligenz (KI) spezialisiert sind. Das neue System war wie weitere Services des LRZ Thema des Extended User Forums an den Workshop-Nachmittagen: Neben Speichermöglichkeiten, Cloud-Diensten und Kursangeboten wurden insbesondere die technischen Ressourcen für Deep and Machine Learning vorgestellt – die LRZ-Systeme zur Analyse von Big Data mit Methoden der KI, etwa das CS-2-System von Cerebras Systems mit extragroßem Chip und flexiblen Datenspeichern. Auf großes Interesse der rund 100 User stießen zudem die ersten Services im Bereich Quantencomputing sowie die praktischen Tools für ein strukturiertes, professionelles Management von Forschungsdaten. ■

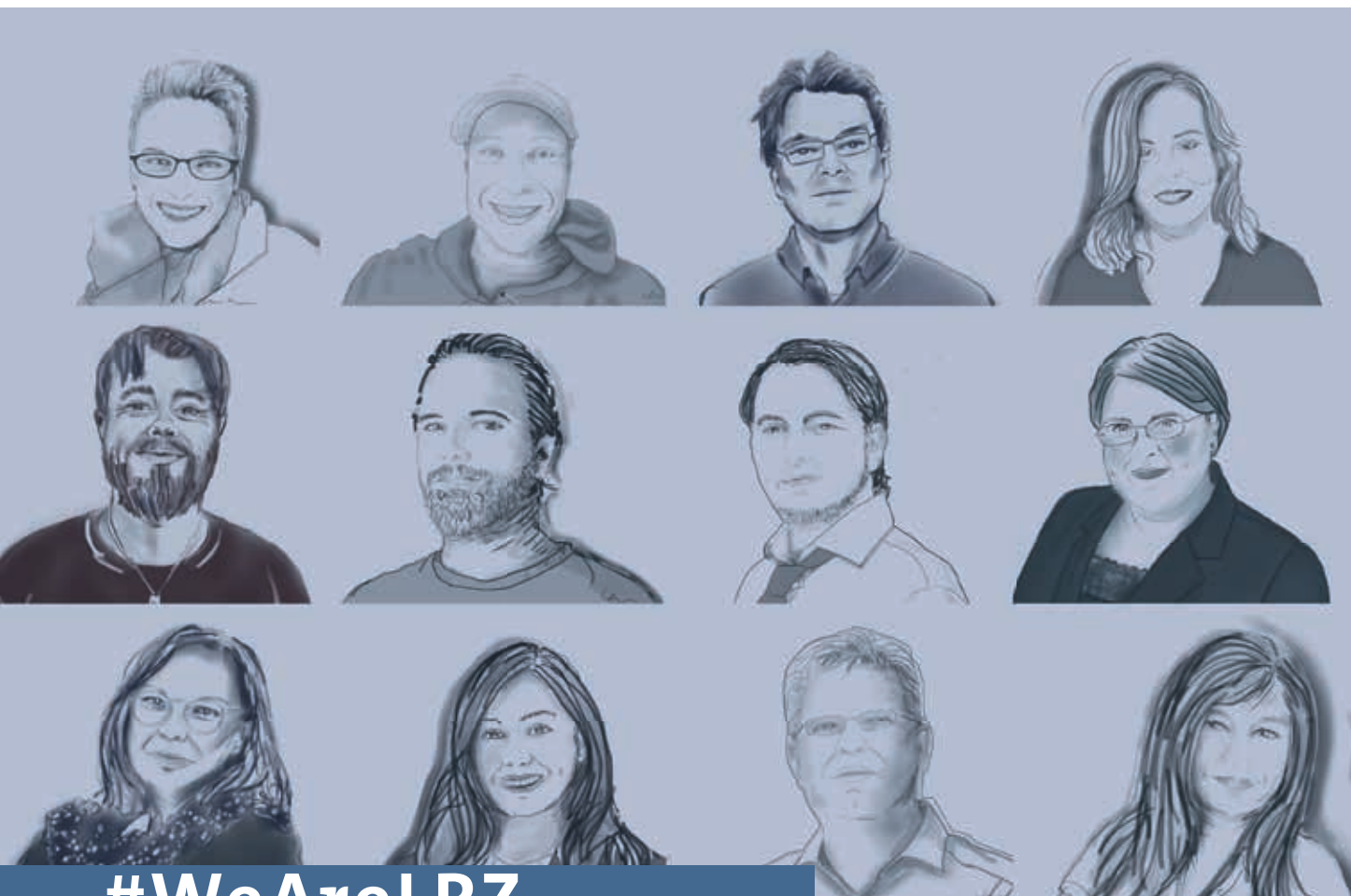


06

MENSCHEN



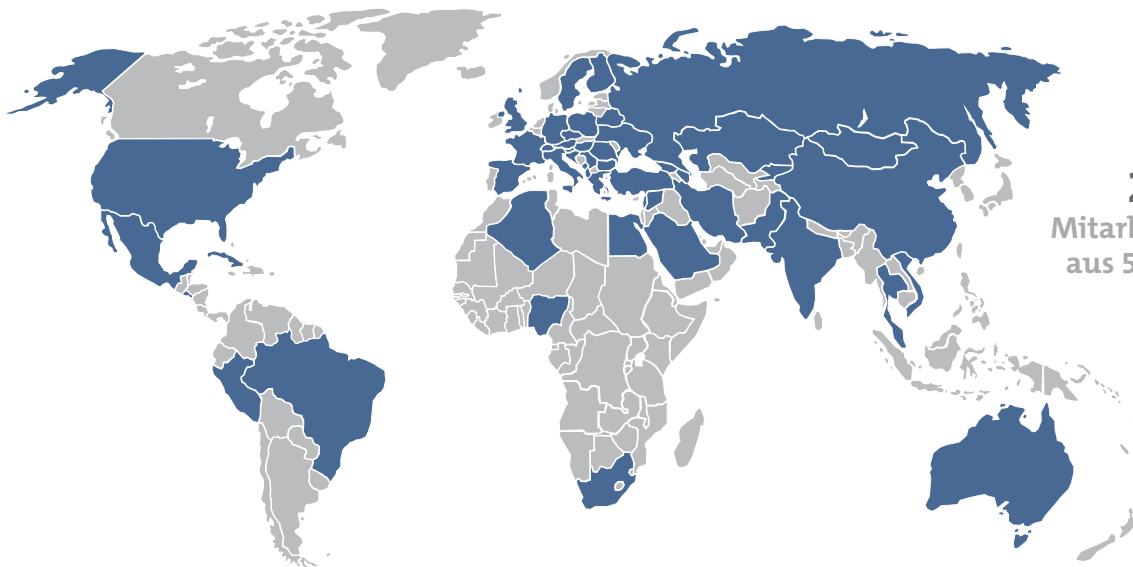
In Garching daheim, in der Welt zu Hause	72
Mit Sicherheit pragmatisch	74
Schauen, Fragen, Lernen, Spaß haben	76



IN GARCHING DAHOAM, IN DER WELT ZUHAUSE

Wir sind als LRZ fest mit unserem Standort Garching verwurzelt. Nicht nur wegen unserer zahlreichen internationalen Partnerschaften, sondern vor allem aufgrund der internationalen Wurzeln unseres Teams sind wir in der Welt zu Hause. Insgesamt arbeiten bei uns mehr als 300 Personen aus nahezu 50 Ländern. Wir schätzen das breite Spektrum an Wissen, Fähigkeiten und neue Perspektiven, die jeder einzelne in die Organisation mit einbringt. Wir setzen auf diese Diversität, um auch künftig unsere Ziele erfolgreich verwirklichen zu können. ■

HIER KOMMEN UNSERE MITARBEITER:INNEN HER



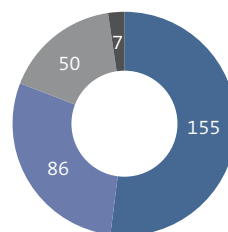
298

Mitarbeiterinnen
aus 50 Ländern

Unsere Diversität zeigt, welch hohe internationale Strahlkraft das LRZ mittlerweile besitzt, und das macht uns besonders stolz.

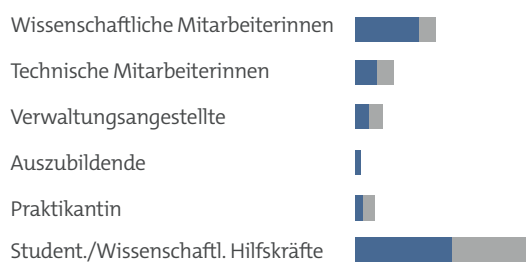
Severine Müller,
Diversity Team am LRZ

MITARBEITERINNEN IN ZAHLEN



- Wissenschaftl. Mitarbeiterinnen
- Technische Mitarbeiterinnen & Verwaltungsangestellte
- Student./Wissenschaftl. Hilfskräfte
- Auszubildende

ZU- UND ABGÄNGE



Zugänge 76

Abgänge 49

MIT SICHERHEIT PRAGMATISCH

Studium, Professur, Leibniz-Rechenzentrum: Seit 2017 ist Prof. Dr. Helmut Reiser hier stellvertretender Leiter, jetzt wurde der Experte für Sicherheitsfragen und Servicequalität in den Vorstand des Deutschen Forschungsnetzes berufen.

Das ist typisch: Zum 60. Geburtstag des Leibniz-Rechenzentrums sollten zwischen den Gebäuden noch die Initialen L, R und Z in bunten Farben erblühen. Für diese Idee suchte Helmut Reiser Mitstreiterinnen und griff selbst zum Spaten. Pünktlich zu den Feierlichkeiten im Sommer standen Blüten im Innenhof. Der stellvertretende Leiter des LRZ packt zu, ist unkompliziert und offen. Er redet Tacheles – Bayrisch natürlich – lacht gern, auch über sich selbst. Und er bringt Dinge mit Erfahrung und Kraft voran: „Ich schätze sein pragmatisches und lösungsorientiertes Vorgehen“, sagt Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ. „Er setzt unsere LRZ-Strategien mit Bodenhaftung und Pragmatismus um.“ Tatkraft gehört zu Reisers Job-Beschreibung und prägt seine Persönlichkeit. Am LRZ verantwortet er die operativen Geschäfte, Pragmatismus lebt er auch als Wissenschaftler aus: „Mir ist wichtig, dass Forschungsthemen einen praktischen Bezug haben, und mir hat es immer gefallen, wenn ich bestehende Anwendungen hinterfragen und verbessern konnte“, erzählt der Professor, der an der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) lehrt.

MACHEN, ENGAGIEREN, LERNEN

Fachlich hat sich Reiser auf den Aufbau von Kommunikationsnetzen, Managementsystemen und IT-Sicherheit spezialisiert – Wissen und Erfahrungen, die er seit 2005 ins LRZ und in diverse Ehrenämter einbringt. Vom Verein Deutsches Forschungsnetz (DFN), der mit über 10.250 Kilometer Glasfaser Forschung in Deutschland zusammenbringt, wurde er gerade in den Vorstand berufen: Für ihn Ehre, Chance, Herausforderung: „Wenn man sich Gedanken für andere macht, lernt man auch was für sich selbst“, sagt der gebürtige Freisinger. „Netze sollten universell aufgebaut und nutzbar sein, das DFN versorgt kleine Hochschulen ebenso wie Exzellenzuniversitäten.“ Zuverlässigkeit ist dabei wie am LRZ wichtig, und Sicherheit. Reiser erkannte schon während des Studiums in den 1990er Jahren, dass IT-Sicherheit den Aufbau von Netzen, Systemen sowie deren Management flankieren sollte. Am LMU-Lehrstuhl für Kommunikationssysteme und Systemprogrammierung promovierte Reiser 2001 über Sicherheitsmanagement und verantwortete als Wissenschaftlicher Assistent die IT. Hier wie später



am LRZ etablierte er Sicherheitsstrategien und -Maßnahmen. 2008 habilitierte er über föderiertes Sicherheitsmanagement. Nicht umsonst lässt das LRZ für die Zertifikate Informationssicherheits- und Servicemanagement seine Prozesse regelmäßig überprüfen. Um sich selbst, den Kolleginnen und Prüfinstanzen zu beweisen, dass die Redundanz- oder Doppelstrategie für mehr Sicherheit in der IT sorgt, zieht Reiser sogar Stecker: „Als IT-Spezialist im Rechenzentrum baut man komplexe Technik zusammen, testet diese Konstrukte aber selten bis nie im Produktivbetrieb. Es herrscht das Prinzip Hoffnung. Man glaubt an die Ausfallsicherheit, ohne sie überprüft zu haben.“

NEUGIER UND DIE FASZINATION FÜR NETZE

Mitarbeitende und Kolleginnen mögen Reisers klare, wertschätzende Kommunikation und Stressresistenz. „Beim Reiser“, heißt es oft, „weiß man, woran man ist.“ Seit 2017 teilt er sich die Leitung mit Dieter Kranzlmüller. Beide bezeichnen ihr Verhältnis als konstruktiv, inspirierend, offen. „Er weiß unglaublich gut, wie administrative Prozesse funktionieren, wo bei Projek-

ten und Aufgaben Fallstricke lauern“, meint Kranzlmüller, „und ist ein hervorragender Sparringspartner, mit dem ich mich gerne austausche.“ In der Rolle als Ratgeber ist er hoch geachtet: „Ich kenne Helmut Reiser schon seit Jahren, schätze sein technisches Wissen“, sagt Harald Kosch, Professor der Universität Passau und Leiter des noch jungen Digitalverbunds Bayern. „Er hat mir einige sehr wichtige Ratschläge bei schwierigen Entscheidungen gegeben.“ Helmut Wunsch, Leiter Kommunikationssysteme am Regionalen Rechenzentrum der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg ist dankbar, dass Reiser ihm mit Rat und Tat zur Seite steht: „Ich mag seine unkomplizierte Art, er hat Humor, lockert Verhandlungen auf und arbeitet konsequent an Zielen.“ Wie am LRZ will Reiser als DFN-Vorstand das Servicespektrum des Vereins breiter aufstellen. Im Persönlichen ist er angekommen: „Ich hab’ mir meinen Traum schon erfüllt“, sagt er, „ich bin an der Stelle, wo ich mich sehr wohlfühle.“ ■

SCHAUEN, FRAGEN, LERNEN, SPASS HABEN

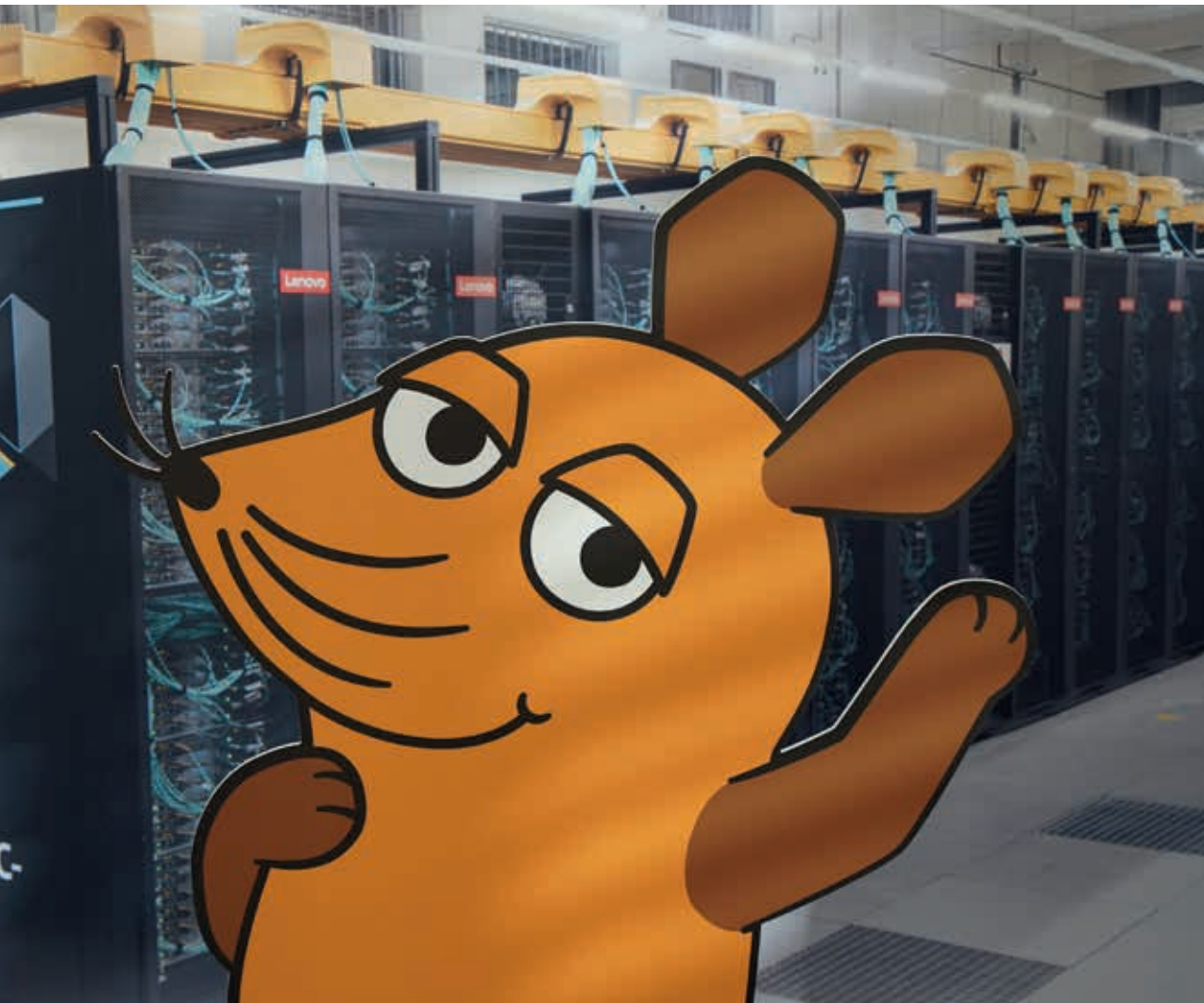
Im Leibniz-Rechenzentrum erlebten Familien am Maustag 2023 IT zum Anfassen und entdeckten dabei Supercomputer, Quantentechnologien sowie beeindruckende Forschungsergebnisse.

Selbst die Sonne lachte über dem Forschungscampus: Am 3. Oktober 2023 zog die Maus Klein und Groß nach Garching. Die Technische Universität München (TUM) und viele andere Forschungsinstitute öffneten dort ihre Türen und erklärten Wissenschaft, Forschungsergebnisse sowie Computer- und Informationstechnologien. Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ließen sich mehr als 660 Menschen in 64 Führungen die ersten Quanten- und die Supercomputer, speziell den SuperMUC-NG, sowie die imposanten Datenspeicher zeigen oder im gerade modernisierten Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) anschauliche Forschungs- und Simulationsergebnisse erklären: „Wir konnten mit 3D-Brillen räumlich sehen, wie sich die Kontinente auf der Erde entwickelt haben, und durch einen Saal im Bamberger Schloss fliegen“, erzählt Korbinian (10) begeistert von diesem Besuch. Und Laura (6) ist ganz erstaunt, wie warm es beim SuperMUC-NG war, mit 311.040 Rechenknoten gehört er zu den schnellsten Supercomputer Europas: „Wenn man da öfters durchläuft, kommt man ganz schön ins Schwitzen.“

INTERESSE WECKEN UND FRAGEN BEANTWORTEN

Jedes Jahr veranstalten die Macher der „Sendung mit der Maus“ einen Maustag: Wenn Unternehmen, Werkstätten, Labore, Forschungsinstitute und Universitäten ihre Türen für die Maus öffnen, sollen Kinder (und ihre Eltern oder Großeltern) Naturwissenschaften und neue Technologien entdecken, Spaß haben und lernen. In diesem Jahr beteiligten sich Institute und Initiativen des Forschungscampus Garching an der bundesweiten Aktion, neben dem LRZ öffneten 14 Forschungseinrichtungen sowie das Munich Quantum Valley ihre Türen für Maus, Kinder und Kegel. Beste Erkenntnis daraus: Wissenschaftler:innen können viel von Kindern lernen und IT-Spezialist:innen freuen sich über das Interesse an ihrer Arbeit. „Ich bin immer wieder erstaunt, was Kinder so alles aufschnappen, wissen und hinterfragen“, sagt Helmut Reiser und lacht. Der Professor für Informatik und stellvertretender Leiter des LRZ präsentierte am Maustag die Supercomputer des LRZ. „Da fragen sogar Kleine nach Prozessorenteknik, nach CPU oder GPU, und mit jeder Frage kann ich dazu lernen – spannend.“ Ähnliche Erfahrungen teil-





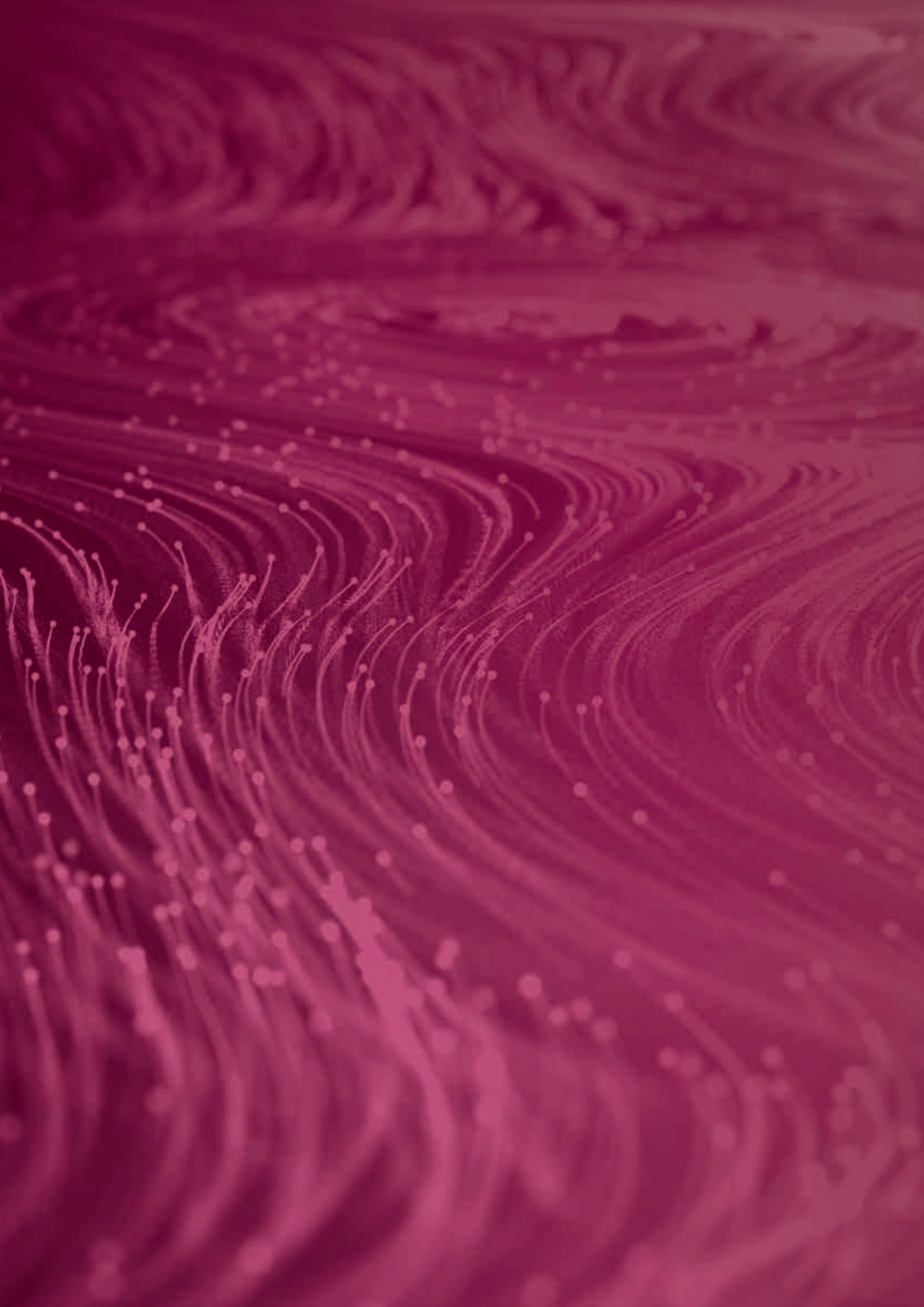
ten die rund 40 LRZ-Mitarbeitenden, die sich am Maustag mit viel Elan um die Besucher:innen und Organisation kümmerten.

BESSER SUCHEN UND EIGENE DATEN SCHÜTZEN

Neben Supercomputern und virtuellen Forschungswelten konnten Familien am LRZ spielerisch noch mehr entdecken: Sie bauten zusammen mit Auszubildenden des Rechenzentrums PCs auseinander und wieder zusammen, konnten dabei Festplatten, Prozessoren, Arbeitsspeicher anfassen und untersuchen. Oder sie erfuhren, wie sie besser im Internet nach Informationen suchen. Die Open Search Foundation (OSF) organisierte im LRZ Schnitzeljagden, durch die Kinder die Funktionsweisen von Suchmaschinen nachvollziehen und eigenes Suchverhalten hinterfragen konnten. Rund 200 kleine Gäste nahmen daran teil, oft mit ihren Eltern, darunter einige Lehrer:innen: „Schon die Kleinsten sollten Bescheid wissen über die Vor- und Nachteile der Internetsuche, etwa Gefahren wie die Herausgabe privater Daten oder die Intransparenz bei den Suchergebnissen“, sagt Christine Plote

von der OSF. „Mit sicheren Alternativen suchen sie besser. Das Interesse fürs Thema war riesengroß.“

Auch an Notebooks und Tablets gab's zuweilen Warteschlangen: Daran konnten Kinder mit pädagogisch wertvollen Wissensapps spielen oder erste Programmier-Kenntnisse aufbauen. Am Ende des Tages war der SuperMUC-NG außerdem in vielen bunten Farben auf 150 Baumwoll-Rucksäcken ausgemalt: ein Sack voller Erinnerungen an den Maustag im LRZ und am Forschungscampus.



07

KOOPERATIONEN

Unsere Partner weltweit	80
Herausragende Digitalisierungs- kooperation	82
Generative KI für die Wissenschaft	84
BayernCollab	86

UNSERE PARTNER WELTWEIT



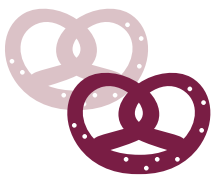
~ 50

KOOPERATIONEN
WELTWEIT



MÜNCHEN

- Digital Humanities München (dhmuc)
- Helmholtz Artificial Intelligence Cooperation Unit (HAICU)
- Hochschule München (HM)
- Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU)
- Munich Center for Machine Learning (MCML)
- Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST)
- Munich Network Management Team (MNM)
- Munich Quantum Valley (MQV)
- Munich School of Data Science (MUDS)
- Technische Universität München (TUM)
- Universität der Bundeswehr München (UniBW)



BAYERN

- Bavarian Quantum Computing eXchange (BQCX)
- Bayerische Forschungsallianz (BayFOR)
- Bayerische Staatsbibliothek (BSB) und Bibliotheksverbund Bayern (BVB)
- Bayerisches Hochschulnetz (BHN)
- Digitalverbund Bayern
- Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR)
- NHR@FAU
- Rechenzentren Bayern
- Regionales Rechenzentrum Erlangen (RRZE) & Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU)
- Technische Hochschule Deggendorf (THD)
- Universität Regensburg (UREG)
- Universität Augsburg und Hochschule Augsburg



INTERNATIONAL

- Argonne National Laboratory (ARGONNE), USA
- Lawrence Berkeley National Laboratory (LBL), USA
- Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), USA
- National Energy Research Scientific Computing Center (NERSC), USA
- Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA



EUROPA

- Barcelona Supercomputing Center (BSC), Spanien
- CSC IT Center for Science, Finnland
- GÉANT
- Hartree Centre Science & Technology Facilities Council (STFC), UK
- Irish Centre for High-End Computing (ICHEC), Irland
- IT4Innovations (National Supercomputing Center), Tschechien
- Open Search Foundation (OSF), Hauptsitz Deutschland
- Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)
- Poznan Supercomputing and Networking Center (PSNC), Polen
- Technical University of Denmark (DTU), Dänemark
- VSC Technische Universität Wien, Österreich



NATIONAL

- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)
- Gauss Centre for Supercomputing (GCS)
- Gauß-Allianz (GA)
- Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN-Verein)
- Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung e.V. (ZKI)
- Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI)

HERAUSRAGENDE DIGITALISIERUNGS- KOOPERATION

**Am Leibniz-Rechenzentrum konstituierte sich der Digitalverbund Bayern:
Künftig kooperieren die Hochschulen bei IT- und Sicherheitsstrategien.**

Rund 80 Vertreterinnen bayerischer Hochschulen und Universitäten sowie Repräsentantinnen trafen sich im Dezember 2023 am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), um offiziell und feierlich den Digitalverbund Bayern (DVB) zu gründen. In diesem Zusammenschluss werden die bayerischen Hochschulen nun gemeinsam Strategien für die Digitalisierung von Forschung und Lehre sowie für IT-Sicherheit entwickeln und umsetzen.

DIGITALISIERUNG BRINGT MEHR IT-TECHNIK AN DIE HOCHSCHULEN

„Die Herausforderungen, die im Rahmen der Digitalisierung auf die Bayerischen Hochschulen zukommen sind gewaltig. In Zeiten von Fachkräftemangel und steigenden Kosten kann keine Hochschule es sich leisten, die Themenfelder allein zu bearbeiten“, stellte Prof. Dr. Dr. h.c. Gordon Thomas Rohrmair, Präsident der Technischen Hochschule Augsburg (THA), bei seinem Grußwort für den Verein Hochschule Bayern fest. „Synergien nutzen und gemeinsam Arbeitspakete schnüren ist das Gebot der Stunde.“

Nach einer Begrüßung durch Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, Leiter des LRZ, erklärte Dr. Rolf-Dieter Jungk, Amtschef

im Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst: „Durch die zunehmende Digitalisierung der bayerischen Hochschulen steigen die Anforderungen an deren Informationstechnologie und an die einzelnen Rechenzentren stetig, was kooperative und hochschulübergreifende Lösungen erforderlich macht. Es macht mich stolz, dass diesen Herausforderungen mit diesem bundesweit einmaligen Projekt gemeinsam begegnet wird, um die Digitalisierung der Hochschullandschaft weiter voranzutreiben.“

Anschließend erläuterten die beiden Sprecher des Leitenden Ausschusses des Digitalverbunds, Prof. Dr. Rainer Groß (CIO Technische Hochschule Nürnberg) und Prof. Dr. Harald Kosch (CIO Universität Passau), die ersten Meilensteine seit der Gründung vor einem Jahr. So konnte mit Hilfe des hochschulübergreifenden IT Servicecenters (HITS) allein durch die bayernweite Bündelung des IT-Bedarfs bei der Beschaffung ein zweistelliger Millionenbetrag eingespart werden. Das HITS Informationssicherheit (HITS-IS) reduzierte durch Sicherheits-Audits und automatisierte Systemchecks mögliche Angriffsziele für Cyber-Attacken. Inzwischen bereitet das Team weitere Services für die Vorsorge und Reaktion vor.



Von links: Prof. Rainer Groß (Technische Hochschule Nürnberg), Prof. Helmut Reiser (LRZ), Prof. Harald Kosch (Universität Passau), Franz Hohl (StMWK), Prof. Christian Zens (FAU)

IN PLANUNG: ZENTRALES FORSCHUNGSDATEN-MANAGEMENT

Weitere Themen für die hochschulweite Zusammenarbeit sind unter anderem:

- die Einführung eines zentralen Forschungsdaten-managements,
- die Vereinfachung der datenschutzkonformen Nutzung kommerzieller Cloud-Lösungen,
- Konzepte im Umfeld Green IT sowie die Entwicklung von IT-Verwaltungs-Services.

„Die erste Konferenz des Digitalverbunds war ein voller Erfolg“, betonte der Sprecher des Leitenden Ausschusses des Digitalverbunds, Prof. Dr. Harald Kosch. „Viele Impulse für die Zusammenarbeit konnten gesammelt und Kooperationen gestärkt werden.“ Prof. Dr. Helmut Reiser, stellvertretender Leiter des LRZ, ergänzte: „Die Auftaktkonferenz hat gezeigt: Die hochschulübergreifende Zusammenarbeit, der Wissensaustausch und die Abstimmungen funktionieren. Gemeinsam im Verbund werden wir diese weiter intensivieren. Das LRZ wird auch weiterhin den Digitalverbund mit Expertise und Ressourcen tatkräftig unterstützen.“



IM PROFIL: DIGITAL-VERBUND BAYERN

- Partnerschaft: 20 Hochschulen, 13 Universitäten und weitere 5 assoziierte Institutionen sowie das Leibniz-Rechenzentrum.
- Finanzierung: Bayerisches Staatsministerium für Wissenschaft & Kunst
- Ziele: Koordination von IT- und Digitalisierungs-Kooperationen, Beratung, Vernetzung der Mitglieder bei der Digitalisierung
- <https://digitalverbund.bayern>





GENERATIVE KI FÜR DIE WISSENSCHAFT

Vertrauenswürdig soll sie sein, möglichst vielseitig einsetzbar und nützlich für die Forschung: Das Trillion Parameter Consortium (TPC) bringt 60 Forschungsinstitutionen aus aller Welt zusammen, um zuverlässige, generative KI-Modelle für die Wissenschaft zu entwickeln.

Die Idee entstand am Argonne National Lab (ANL), dem Rechenzentrum des Energieministeriums der USA südwestlich von Chicago: Als Antwort auf kommerzielle Angebote von Unternehmen wie OpenAI, Google, Amazon und Facebook nahmen sich Expert:innen dort vor, die Grundlagen für generative Künstliche Intelligenz (KI) in der Forschung zu studieren: „Wie am ANL starten überall Teams in Hochschulen und Rechenzentren mit der Entwicklung bahnbrechender KI-Modelle für den wissenschaftlichen Einsatz“, meint der Informatiker Prof. Dr. Rick Stevens von der University of Chicago und stellvertretender Leiter des ANL. „Sie bereiten riesige Sammlungen bisher unerschlossener wissenschaftlicher Daten für das Training vor.“ Aus dieser Beobachtung und der ursprünglichen Idee wuchs das Trillion Parameter Consortium (TPC). Dieses bündelt die globalen Bemühungen, soll die Arbeit an der generativen KI für Wissenschaft und Forschung beschleunigen und gleichzeitig für alle Beteiligten den Aufwand begrenzen. TCP bringt inzwischen 60 Hochschulen, Forschungsinstitute und Unternehmen zusammen, darunter auch das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), das Konsortium formte sich während der Supercomputing23 (SC23), der Messe und Konferenz rund ums Hochleistungsrechnen, die 2023 in Denver/USA stattfand.

Rund **62.000**
Patente wurden 2023 weltweit im
Zusammenhang mit KI erteilt.



DATEN KURATIEREN, WISSEN AUSTAUSCHEN

Ziel von TPC sind vertrauenswürdige, frei verfügbare und groß angelegte KI-Modelle für die Wissenschaft, außerdem der Aufbau dazu notwendiger, skalierbarer Architekturen und Trainingsstrategien, vor allem aber die Organisation und Kuratierung von notwendigen Forschungsdaten aus unterschiedlichsten Fachrichtungen und Quellen. Das Alles soll erreicht werden

- durch den Aufbau einer Forschungsgemeinschaft, die sich über Methoden, Werkzeuge, Erkenntnisse und Arbeitsabläufe austauscht und diese vorantreibt.
- durch die Koordination entsprechender Forschungsprojekte, um Doppelarbeiten zu vermeiden, sowie der raschen Verbreitung der Resultate unter Forschenden.
- durch die Schaffung eines globalen Netzwerkes aus technischen Ressourcen wie Supercomputern und KI-Clustern sowie Fachwissen, um die nächste Generation von KI-Modellen zu verbessern und den Wissenstransfer zu fördern.

Schon kurz nach der Gründung kristallisierten sich während der SC23 grundsätzliche Aufgabenbereiche rund um die Erstellung großer, generativer KI-Modelle heraus: Daher organisieren einige Teams aus verschiedenen Forschungsrichtungen die Auswahl und das Aufbereiten relevanter, zuverlässiger Trainingsdaten aus ihren spezifischen Informationsquellen. Weitere Arbeitsgruppen widmen sich wiederum dem Aufbau von Modellen sowie der Entwicklung nachgelagerter Anwendungen, aber auch die Bereitstellung notwendiger technischer Ressourcen. Nicht zuletzt kümmern sich Experten und Spezialistinnen um die Bewertung und Kontrolle von KI-Modellen, sie erkunden deren Arbeits- und Funktionsweise, prüfen die Ergebnisse vor allem im Hinblick auf das Risiko impliziter Voreingenommenheit und des Halluzinierens bei stetigem Einsatz.

TECHNISCHE RESSOURCEN BEREITSTELLEN

Ebenfalls im Visier von TPC sind die Exascale-Computer. Diese werden mit den Graphics Processing Units (GPU) beschleunigt, die neben dem High-Performance Computing auch KI Rechenverfahren und vor allem die Entwicklung groß angelegter Sprachmodelle (Large Language Models - LLM) und weiterer KI-Systeme ermöglichen sollen. LLM wie GPT und andere basieren schon heute auf Milliarden unterschiedlicher Milliarden von Parametern, erfordern fürs Training höchste Rechenleistungen und Speicherkapazitäten wie sie nur Supercomputer und insbesondere die der Exascale-Klasse bieten können. Und noch verbraucht das Training viel Zeit und damit Energie. Folglich wird ein weiteres Ziel von TPC sein, den Energiehunger dieser Modelle beim Training wie auch beim Einsatz in der Forschung zu dämpfen. ■

149 große, generative KI-Modelle wurden
2023 entwickelt.

Weniger als **20 %**
der KI-Modelle stammten 2023 aus
der Wissenschaft.

BAYERNCOLLAB: BESSER ZUSAMMENARBEITEN

Im Auftrag des Digitalverbundes Bayern hat das Leibniz-Rechenzentrum BayernCollab aufgebaut, eine Plattform für die Zusammenarbeit von Teams sowie für hochschulübergreifende Projekte.



Besprechungen protokollieren oder Arbeitsschritte dokumentieren. Informationen miteinander teilen oder gemeinsam Dokumente bearbeiten und erstellen. Eine einfache Website aufbauen und online veröffentlichen: Das alles sind Funktionen von BayernCollab, einer Online-Plattform für die Organisation und Kooperation von Teams auf der Basis der Wiki-Software Confluence des Unternehmens Atlassian. Das Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) hat diese im Auftrag des Digitalverbundes Bayern (DVB) aufgebaut und verbreitet. BayernCollab fördert die hochschulübergreifende Zusammenarbeit und die Koordination von Arbeitsgruppen. Damit die Universitäten Synergieeffekte

nutzen können, baute das LRZ in wenigen Wochen ein Servercluster auf, richtete darauf eine Confluence-Instanz für die bayernweite Nutzung ein. So entstand eine kostengünstige Plattform und eine Alternative zur Atlassian Cloud, die sich aus Gründen des Datenschutzes, der Zuverlässigkeit von Services und der Skalierung für einzelne Hochschulen nicht lohnt. BayernCollab ist so aufgebaut, dass Hochschulen ihre Bereiche selbst administrieren und einrichten. Benutzen sie Confluence, können sie bestehende Seiten samt Inhalten und Verlinkungen in die Plattform migrieren. Seit Herbst 2023 verbreitet das LRZ das Angebot, 19 Hochschulen mit rund 133.000

BAYERNCOLLAB IM ALLTAG

PROTOKOLLIEREN

Am LRZ teilen Teams auf BayernCollab Informationen, planen und protokollieren Arbeitsschritte oder Besprechungen.

DOKUMENTIEREN

Im IT-Service und Sicherheitsmanagement sowie bei den Arbeiten für die Informationssicherheit bewährt sich BayernCollab als Tool für die technische Dokumentation. Hier finden sich Beschreibungen aller Prozesse zur Erstellung und zum Betrieb von IT-Diensten sowie die Anweisungen für Notfälle.

KOORDINIEREN

Das Hochschulübergreifende IT-Service-Zentrum Informationssicherheit organisiert mit BayernCollab die Arbeit von Teams an unterschiedlichen Standorten. Hier tauschen sich die Spezialistinnen über Maßnahmen zur IT-Sicherheit aus.



potenziellen Anwenderinnen setzen inzwischen BayernCollab ein, weitere 25 Einrichtungen haben bereits Interesse daran signalisiert.

Gute Erfahrungen am LRZ sowie bei der Technischen Universität München (TUM) und der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) haben die Wahl der Software beschleunigt. Confluence und damit BayernCollab sind außerdem intuitiv zu bedienen und bilden viele Nutzungsszenarien ab. Ohne weitere Tools und lediglich über einen Browser können damit gemeinsam Texte online erstellt und bearbeitet werden. Die Plattform eignet sich für kleine Teams ebenso wie für Institutionen, sie kann über Standortgrenzen hinweg mit einer

Kennung weltweit genutzt werden. Für Planung, Organisation und Zusammenarbeit stehen viele Werkzeuge und ein praktischer Editor bereit. Damit lassen sich Inhalte strukturieren und visualisieren, in interaktiven Tabellen und Diagrammen sammeln oder Umfragen oder Formulare erstellen. Durch Einladungen bestimmen die Anwenderinnen, wer Zugriff auf ihre Collab-Seiten und Inhalte bekommt und wer diese aktualisieren oder verändern darf. BayernCollab versioniert automatisch Änderungen, die Nutzerinnen nachverfolgen können. Durch die Einladungsfunktion lassen sich Seiten veröffentlichen. ■

INFORMIEREN

Das Munich Data Science Institute (MDSI) der TUM baut mit Hilfe von BayernCollab einfache, informative Websites auf, um online über Veranstaltungen zu informieren.

ANMELDEN

Mit BayernCollab lassen sich Formulare gestalten, etwa für Bewerberinnen oder zur Anmeldung von Veranstaltungen.

VERÖFFENTLICHEN

Die grafischen Tools und die Chance, Informationen online zu veröffentlichen, macht BayernCollab interessant für die Forschung. Die EU fordert bei Projekten, die sie fördert, Transparenz und eine Webpräsenz.

08

ZAHLEN UND FAKTEN

Benutzernahe Dienste	90
Datenspeicher	91
Hoch-und Höchstleistungsrechnen	92
Münchner Wissenschaftsnetz	93
Gesamtübersicht	
Kurse Supercomputing	96
Publikationen	98

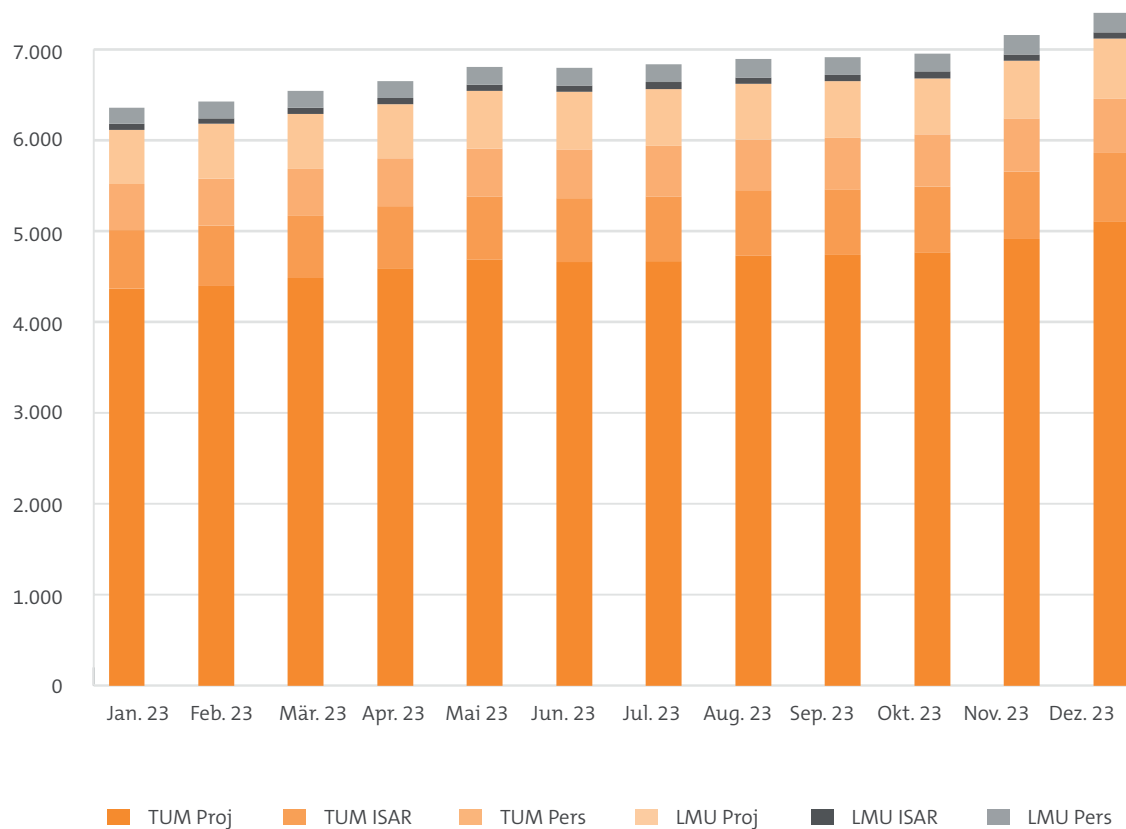
BENUTZERNAHE DIENSTE

ANGENOMMENE UND ABGEWIESENE E-MAILS

Behandlung eingehender E-Mails	Anzahl pro Tag	Anteil in Prozent
Von den Post- & Mailrelays abgewiesene Mails		
• aufgrund allgemeiner Abwehrmechanismen	859.556	78,55 %
• als Spammails erkannt	20.343	1,86 %
• als Virenmails erkannt	95	0,01 %
Von den Post- & Mailrelays angenommene Mails		
• „gute“ E-Mails	202.781	18,53 %
• als mögliche Spammails markiert	11.600	1,06 %
Gesamt	1.094.308	100%

DATENSPEICHER

BELEGTER SPEICHER IN GB IM MWN CLOUD STORAGE



ÜBERSICHT HOCH- UND HÖCHSTLEISTUNGS- SYSTEME

System	Size	Peak Performance (DP Tflop/s)	Purpose	User Community
SuperMUC-NG Intel/Lenovo ThinkSystem	6,336 nodes, 304,128 cores, Skylake 608 TByte, Omni-Path 100G	26,300	Capability Computing	German universities and research institutes (Tier-1)
	144 nodes, 6,912 cores Skylake 111 TByte, Omni-Path 100G	600	Capability Computing	
SuperMUC-NG Compute Cloud	64 nodes, 5,120 cores, Intel Xeon ("Skylake"), 64 Nvidia V100	644 (CPUs + GPUs) 7,168 AI Performance*	Cloud Computing	German Universities and Research Institutes (Tier-1)
SuperMUC-NG Phase 2	240 nodes, 26.880 Intel Xeon Platinum 8480+ compute cores (Sapphire Rapids), 122,88 TByte of memory, 960 accelerators (Intel Ponte Vecchio), NVIDIA HDR Infini- band interconnect	Pilot operation started	Capability Computing & Machine Learning, AI applications	German Universities and Research Institutes (Tier-1)
CoolMUC-2 Lenovo Nextscale	812 nodes, 22,736 cores, 51.968 TByte, NVIDIA FDR 14 Infiniband interconnect	1400	Capability Computing	Bavarian Universities (Tier-2)
CoolMUC-3 Megware Slide SX	148 nodes, 9,472 cores, Knights Landing, 17.2 TByte, Omnipath	459	Capability Computing	Bavarian Universities (Tier-2)
LRZ AI Systems	17 nodes (NVIDIA GPU-based), HDR Infiniband 88 NVIDIA GPUs, 3,328 GB HBMemory 1,424 CPUs, 5,824 GB DDR4 Memory	2,302 66,690 AI Performance*	Machine Learning, AI applications	Bavarian Universities
Cerebras CS-2	1 node with 850,000 compute cores, 40GB SRAM, 20 PB/s memory bandwidth and 220Pb/s interconnect	3,570,000 AI Performance*	Purpose-built Deep Learning System	select users, not part of the public-facing AI Systems
LRZ Quantum Computing Ressoutces	Eviden Qaptiva 1		Quantum simulation	Bavarian Universities
	Eviden Qaptiva 1		Quantum simulation	Q-Exa project re- search partners and internal LRZ staff
	QMWare		Quantum simulation	Bavarian Universities
	IQM 5-qubit system		Quantum simulation	DAQC project re- search partners and internal LRZ staff
	IQM 20-qubit system 2		Quantum simulation	TBD
	AQT 20-qubit ion-trap system		Quantum simulation	MQV research partners

*AI Performance refers to GPU peak performance for FP16 operations. For Nvidia GPUs, it is specific to different architectures. P100 architecture: CUDA core performance. V100 architecture: Mixed precision Tensor Core performance. A100: Structured sparsity Tensor Core performance.

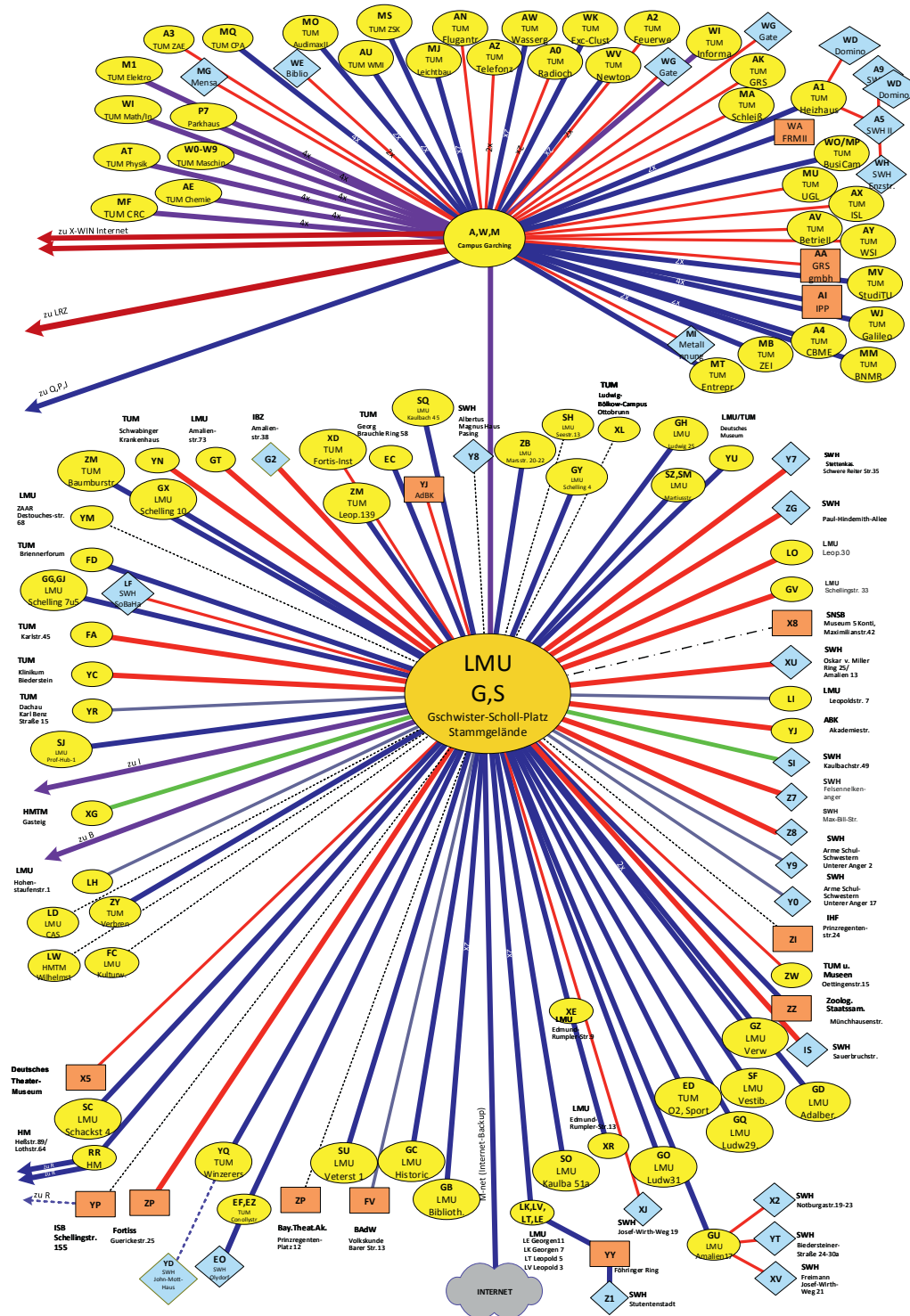
MÜNCHNER WISSENSCHAFTSNETZ

ANZAHL DER IM MWN EINGESETZTEN SWITCHES UND PORTS

Jahr	2023	2022	2021	2020	2019	2018	2017
Switches	2.673	2.654	2.592	2.206	1.950	1.858	1.528
Ports	162.095	157.367	152.612	134.098	125.085	119.367	112.137

Jahr	2016	2015	2014	2013	2012	2011
Switches	1.564	1.507	1.469	1.406	1.310	1.247
Ports	111.046	104.576	100.557	97.000	88.777	85.161





GESAMTÜBERSICHT KURSE SUPERCOMPUTING

KURSE & WORKSHOPS 2023

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Tage	Art	TN	TN-Tage
15.02.23	15.02.23	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	11	5,5
22.02.23	24.02.23	Programming with Fortran	LRZ	online	3	GCS-Kurs	16	48
07.03.23	09.03.23	Parallel Programming of High Performance Systems	LRZ/NHR@FAU	online	3	PRACE-Kurs	44	132
16.03.23	27.04.23	Introduction to ANSYS CFX on LRZ HPS Systems	LRZ	online	6	GCS-Kurs	6	36
12.04.23	13.04.23	AI Training Series - Orientation Session	LRZ	LRZ/ online	2	GCS-Kurs	64	128
17.04.23	18.04.23	EuroCC AI for Science Bootcamp	EuroCC, GCS, VSC, NVIDIA	online	1,5	EuroCC-Kurs	104	156
19.04.23	19.04.23	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	12	6
26.04.23	26.04.23	AI Training Series - Intro to Container Technology & Application to AI at LRZ	LRZ	online	1	GCS-Kurs	48	48
03.05.23	03.04.23	Introduction to the LRZ AI Systems	NVIDIA/LRZ/ HLRS/JSC	online	1	GCS-Kurs	38	38
04.05.23	04.05.23	AI Training Series - Intel AI Workshop - Accelerated Machine Learning with Intel	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	13	6,5
09.05.23	09.05.23	AI Training Series - Introduction to the LRZ Linux Cluster	LRZ	online	1	GCS-Kurs	19	19
11.05.23	11.05.23	Working with Noisy Quantum Computers	LRZ	online	1	GCS-Kurs	26	26
12.05.23	12.05.23	AI Training Series - High Performance Data Analytics Using R at LRZ	LRZ	online	1	GCS-Kurs	16	16
15.05.23	16.05.23	EuroCC N-Ways to GPU Programming Bootcamp	EuroCC, GCS, VSC, NVIDIA	online	1,5	EuroCC-Kurs	69	103,5
17.05.23	17.05.23	AI Training Series - Introduction to the LRZ Compute Cloud	LRZ	online	1	GCS-Kurs	14	14
05.06.23	07.05.23	OneAPI Hybrid Workshop	LRZ/Intel	LRZ/ online	3	EuroCC-Kurs	129	387

KURSE & WORKSHOPS 2023

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Tage	Art	TN	TN-Tage
13.06.23	13.06.23	Debugging with TotalView	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	24	12
20.06.23	22.06.23	Introduction to C++	LRZ	online	3	GCS-Kurs	16	48
11.07.23	13.07.23	Deep Learning and GPU Programming using OpenACC @ HLRS	HLRS	HLRS	3	GCS-Kurs	20	60
19.07.23	20.07.23	Eviden Qaptiva (QLM) Fast-Start Training	LRZ	LRZ	2	GCS-Kurs	16	32
19.07.23	19.07.23	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	19	9,5
05.09.23	07.09.23	Iterative Solvers for Linear Systems	LRZ	online	3	GCS-Kurs	16	48
15.09.23	15.09.23	CompBioMed - SEAVEA Hackathon	LRZ	LRZ	1	EuroCC-Kurs	16	16
05.10.23	05.10.23	Data Parallelism - How to Train Deep Learning Models on Multiple GPUs	LRZ	LRZ	1	GCS-Kurs	10	10
09.10.23	10.10.23	AI Training Series - Orientation Session	LRZ	LRZ/ online	2	GCS-Kurs	22	44
17.10.23	17.10.23	Data Parallelism - How to Train Deep Learning Models on Multiple GPUs	LRZ	online	6,5	GCS-Kurs	44	286
18.10.23	18.10.23	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	18	9
23.10.23	23.10.23	AI Training Series - Intro to Container Technology & Application	LRZ	online	1	GCS-Kurs	10	10
25.10.23	25.10.23	Quantum Machine Learning with PennyLane	LRZ	LRZ	1	GCS-Kurs	21	21
25.10.23	27.10.23	Modern C++ Software Design	LRZ	online	3	GCS-Kurs	31	93
06.11.23	08.11.23	Deep Learning and GPU Programming Workshop	LRZ	online	3	GCS-Kurs	43	129
07.11.23	07.11.23	AI Training Series - Introduction to the LRZ AI Systems	LRZ	LRZ/ online	1	GCS-Kurs	16	16
16.11.23	16.11.23	AI Training Series - Introduction to the LRZ Linux Cluster	LRZ	online	1	GCS-Kurs	10	10
01.12.23	01.12.23	AI Training Series - The LRZ Compute Cloud for AI Support	LRZ	online	1	GCS-Kurs	12	12
04.12.23	06.12.23	Node-Level Performance Engineering	LRZ	online	3	GCS-Kurs	19	57
13.12.23	13.12.23	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	online	0,5	GCS-Kurs	12	6
Gesamt			36		59,5		990	1822,0

PUBLIKATIONEN

JOURNAL ARTICLES / ARTIKEL IN WISSENSCHAFTLICHEN ZEITSCHRIFTEN

9

Brambilla, N., Delgado, R. L., Kronfeld, A. S., Leino, V., Petreczky, P., Steinbeißer, S., Vairo, A., Weber, J. H., & TUMQCD Collaboration. (2023). Static energy in $(2 + 1 + 1)$ -flavor lattice QCD: Scale setting and charm effects. *Physical Review D*, 107(7), 074503. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.107.074503>

Granitzer, M., Voigt, S., Fathima, N. A., Golasowski, M., Guetl, C., Hecking, T., Hendriksen, G., Hiemstra, D., Martinovič, J., Mitrović, J., Mlakar, I., Moiras, S., Nussbaumer, A., Öster, P., Potthast, M., Srdić, M. S., Shari-kadze, M., Slaninová, K., Stein, B., ... Zerhoubi, S. (2023). Impact and development of an Open Web Index for open web search. *Journal of the Association for Information Science and Technology*, asi.24818. <https://doi.org/10.1002/asi.24818>

Batsaikhan, A., Jung, S., & Hachinger, S. (2023). The state of online citizen science in Mongolia and its potential for environmental challenges. *PLOS ONE*, 18(8), e0289924. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0289924>

Foglieni, M., Pantiri, M., Di Dio, E., & Castorina, E. (2023). Large scale limit of the observed galaxy power spectrum. *Physical Review Letters*, 131(11), 111201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.131.111201>

Schmidt, M. (2023). Information security risk management terminology and key concepts. *Risk Management*, 25(1), 2. <https://doi.org/10.1057/s41283-022-00108-8>

Zhao, X., Chen, J., Marshall, J., Gałkowski, M., Hachinger, S., Dietrich, F., Shekhar, A., Gensheimer, J., Wenzel, A., & Gerbig, C. (2023). Understanding greenhouse gas (GHG) column concentrations in Munich using the Weather Research and Forecasting (WRF) model. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 23(22), 14325–14347. <https://doi.org/10.5194/acp-23-14325-2023>

Raoofy, A., Elis, B., Bode, V., Chung, M., Breiter, S., Schlemon, M., Herr, D.-F., Fuerlinger, K., Schulz, M., & Weidendorfer, J. (2023). The BEAST LAB: A Practical Course on Experimental Evaluation of Diverse Modern HPC Architectures and Accelerators. *Journal of Computational Science Education*, 15. (confirmed to be published) Preprint url: https://syncandshare.lrz.de/getlink/fiLH3NvVH8Up4HWWUDPZv/acmart_pre_print.pdf (accessible until December 2024)

Aldana-Martín, J. F., Durillo, J. J., & Nebro, A. J. (2023). Evolver: Meta-optimizing multi-objective metaheuristics. *SoftwareX*, 24, 101551. <https://doi.org/10.1016/j.softx.2023.101551>

Chung, M. T., Weidendorfer, J., Furlinger, K., & Kranzlmüller, D. (2023). From reactive to proactive load balancing for task-based parallel applications in distributed memory machines. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 35(24), e7828. <https://doi.org/10.1002/cpe.7828>

BOOK CHAPTERS / BUCHKAPITEL

3

Metcalf, M., Reid, J., Cohen, M., & Bader, R. (2023). Modern Fortran Explained: : Incorporating Fortran 2023 (6th Edition). Oxford University Press. <https://global.oup.com/academic/product/modern-fortran-explained-9780198876588?cc=de&lang=en&>

Pribe, I., Hachinger, S., Hayek, M., Pringle, G. J., Bruchle, H., Jamitzky, F., & Mathias, G. (2023). Efficient and Reliable Data Management for Biomedical Applications. In A. Heifetz (Ed.), High Performance Computing for Drug Discovery and Biomedicine (Vol. 2716, pp. 383–403). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-1-0716-3449-3_18

Raoufy, A., Karlstetter, R., Schreiber, M., Trinitis, C., & Schulz, M. (2023). Overcoming Weak Scaling Challenges in Tree-Based Nearest Neighbor Time Series Mining. In A. Bhatele, J. Hammond, M. Baboulin, & C. Kruse (Eds.), High Performance Computing (Vol. 13948, pp. 317–338). Springer Nature Switzerland. https://doi.org/10.1007/978-3-031-32041-5_17

PROCEEDINGS / BEITRÄGE ZU TAGUNGSBÄNDEN

20

Weber, J. H., Brambila, N., Delgade, R. L., Kronfeld, A., Leino, V., Petreczky, P., Steinbeißer, S., & Vairo, A. (2023). Charm mass effects in the static energy computed in 2+1+1 flavor lattice QCD. Proceedings of The 39th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2022), 430, 089. [https://doi.org/10.22323/1.430.0089 \(OA\)](https://doi.org/10.22323/1.430.0089 (OA))

Bauer, T., Miller, J., Gottfriedsen, J., Mollière, C., Durillo Barrionuevo, J., & Hammer, N. (2023). ML-based fire spread model and data pipeline optimization. EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria. <https://doi.org/10.5194/egusphere-equ23-14126>

Dufour, F., Zhou, N., Bode, V., Zinterhof, P., Hammer, N. J., & Kranzlmüller, D. (2023). Towards Confidential Computing: A Cloud Architecture for Big Data Analytics and AI in Biomedical Research. ISC High Performance 2023, Hamburg, Germany. <https://www.isc-hpc.com/project-posters-2023.html>

Zhou, N., Dufour, F., Bode, V., Zinterhof, P., Hammer, N. J., & Kranzlmüller, D. (2023). Towards Confidential Computing: A Secure Cloud Architecture for Big Data Analytics and AI. 2023 IEEE 16th International Conference on Cloud Computing (CLOUD), 293–295. <https://doi.org/10.1109/CLOUD60044.2023.00042>

Pöppl, A., Cielo, S., & Egelhofer, M. (2023). Portability and Scaling of the DPEcho GR-MHD SYCL code: What's new for numerical Astrophysics in SYCL2020. Proceedings of the 2023 International Workshop on OpenCL. <https://doi.org/10.1145/3585341.3585382>

Mayer, E., García Hernández, R. J., Kolb, D., Dreer, J., Müller, S., Odaker, T., & Kranzlmüller, D. (2023). Ten years Center for Immersive Visualizations—Past, Present, and Future. 2023 IEEE Conference on Virtual Reality and 3D User Interfaces Abstracts and Workshops (VRW), 206–210. <https://doi.org/10.1109/VRW58643.2023.00051>

Mayer, E., García Hernández, R. J., Kolb, D., Dreer, J., Müller, S., Odaker, T., & Kranzlmüller, D. (2023). Ten years of Immersive VR Installations—Past, Present, and Future. 2023 IEEE Conference on Virtual Reality and 3D User Interfaces Abstracts and Workshops (VRW), 765–766. <https://doi.org/10.1109/VRW58643.2023.00225>

Batsaikhan, A., & Hachinger, S. (2023). A progressive web app template for citizen science projects involving spatial data collection. 2023 IEEE 19th International Conference on E-Science (e-Science), 1–6. <https://doi.org/10.1109/e-Science58273.2023.10254925>

Mizani, M., Schmidt, M., Weber, D., Metzger, S., & Reiser, H. (2023). Transition zur neuen ISO/IEC 27001 – Erfahrungen zum neuen Anhang A. 30. DFN-Konferenz „Sicherheit in vernetzten Systemen“, Hamburg, Germany.

Pribec, I. (2023). Bridging the Language Gap: Fc++: Classes for C++/Fortran Interoperability. Platform for Advanced Supercomputing (PASC) 2023, Davos, Switzerland. <https://tiny.badw.de/zOEChP>

Plamen, D., Pribec, I., & Mathias, G. (2023). GPU Benchmarking on Fully Occupied Accelerated Cluster Nodes via Molecular Dynamics Software Packages. CompBioMed Conference 2023, Garching near Munich, Germany.

Farooqi, M. N., & Ruefenacht, M. (2023). Exploring Hybrid Classical-Quantum Compute Systems through Simulation. 2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE), 127–133. <https://doi.org/10.1109/QCE57702.2023.10196>

Schumann, M., Munke, J., Hachinger, S., Hannawald, P., Beck, I., Götz, A., Goussev, O., Handschuh, J., Heller, H., Mair, R., Rehm, T., Wittmann, B., Wüst, S., Bittner, M., Schmidt, J., & Kranzlmüller, D. (2023). Scheduling System for Remote Control of Instruments used for Atmospheric Observation. EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria. <https://doi.org/10.5194/egusphere-equ23-237>

Harsh, P., Hachinger, S., Derquennes, M., Edmonds, A., Karagoz, P., Golasowski, M., Hayek, M., & Martinovič, J. (2023). Wine in the Cloud, or: Smart Vineyards with a Distributed ‘Extreme Data Database’ and Supercomputing. Proceedings of International Symposium on Grids & Clouds (ISGC) 2023 in Conjunction with HEPiX Spring 2023 Workshop — PoS(ISGC&HEPiX2023), 021. <https://doi.org/10.22323/1.434.0021>

Chadha, M., Arima, E., Raoofy, A., Gerndt, M., & Schulz, M. (2023). Sustainability in HPC: Vision and Opportunities. Proceedings of the SC '23 Workshops of The International Conference on High Performance Computing, Network, Storage, and Analysis, 1876–1880. <https://doi.org/10.1145/3624062.3624271>

Scheipl, J., Raoofy, A., Ott, M., & Weidendorfer, J. (2023). Phase-aware System-Side Sampling for HPC. Proceedings of the 20th ACM International Conference on Computing Frontiers, 220–221. <https://doi.org/10.1145/3587135.3592181>

Koch, A., Petry, M., Ghiglione, M., Raoofy, A., Dax, G., Furano, G., Werner, M., Trinitis, C., & Langer, M. (2023). Machine Learning Application Benchmark. Proceedings of the 20th ACM International Conference on Computing Frontiers, 229–235. <https://doi.org/10.1145/3587135.3592769> (Invited talk)

Koch, A., Dax, G., Petry, M., Gomez, H., Raoofy, A., Saroliya, U., Ghiglione, M., Furano, G., Werner, M., Trinitis, C., & Langer, M. (2023). Reference Implementations for Machine Learning Application Benchmark. Proceedings of the First European Data Handling & Data Processing Conference. EDHPC 2023, Juan-Les-Pins, France. Preprint url: https://www.bgd.ed.tum.de/pdf/2023_MLAB2_Andreas.pdf

Mujkanovic, N., Durillo, J. J., Hammer, N., & Müller, T. (2023). Survey of adaptive containerization architectures for HPC. Proceedings of the SC '23 Workshops of The International Conference on High Performance Computing, Network, Storage, and Analysis, 165–176. <https://doi.org/10.1145/3624062.3624588>

Breiter, S., Weidendorfer, J., Chung, M. T., & Furlinger, K. (2023). A Profiling-Based Approach to Cache Partitioning of Program Data. In H. Takizawa, H. Shen, T. Hanawa, J. Hyuk Park, H. Tian, & R. Egawa (Eds.), Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (Vol. 13798, pp. 453–463). Springer Nature Switzerland. https://doi.org/10.1007/978-3-031-29927-8_35

MASTER AND BACHELOR THESIS / BACHELOR- UND MASTERARBEITEN

16

Stephan Hachinger (advisor), Dieter Kranzlmüller (supervisor), Brunati R.S. (author). Evaluation of Database Management Systems for the EXA4MIND Project - A Benchmarking Methodology. Bachelor thesis. Ludwig-Maximilians-Universität München, September 2023.

Stefan Metzger (advisor), Helmut Reiser (supervisor), Buggele M. (author). FIDO2 for Institute Employees: A case study about authentication security. Bachelor thesis. Ludwig-Maximilians-Universität München, December 2023.

Stefan Metzger (advisor), Helmut Reiser (supervisor), Kilgenstein M. (author). Das Zero Trust Konzept und seine Anwendung - Design und Evaluation einer prototypischen Architektur am Leibniz-Rechenzentrum. Bachelorarbeit. Ludwig-Maximilians-Universität München, September 2023.

Stefan Metzger, Florian Kraft, Florian Gleaner (advisors), Helmut Reiser (supervisor), Colberg R. (author). Evaluation of Cloud Native Storage technologies for Kubernetes. Master thesis. Ludwig-Maximilians-Universität München, November 2023.

Stefan Metzger, Miran Mizani (advisors), Helmut Reiser (supervisor), Jashari, E. (author). Realisierung eines modernen und sicheren Zutrittskontrollsystems am Leibniz-Rechenzentrum. Bachelorarbeit. Ludwig-Maximilians-Universität München, January 2023.

Daniel Weber (advisor), Sedlmeir, S. J. (author), Attack Replay Framework: Automatisierte Verifikation bekannter Schwachstellen durch detektierte Angriffsversuche, Masterarbeit, Ludwig-Maximilians Universität München, Juli 2023.

Miran Mizani, Daniel Weber (advisors), Anderle, M. (author), Guidelines für die Etablierung von Cyber Deception im Hochschulumfeld anhand der prototypischen Umsetzung am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians Universität München, Januar 2023.

Juan J. Durillo, Nicolay Hammer (advisors), Josef Weidendorfer (supervisor), Tobias Bauer (author). Optimization of Data Pipelines and Performance of AI-based Fire Propagation Models. Master thesis. Technical University of Munich, April 2023.

Juan J. Durillo (advisor), Josef Weidendorfer (supervisor), Moritz Unseld (author). TRAIL: TRansfer learning And Intelligent data pruning for Language models. Bachelor thesis. Technical University of Munich, July 2023.

Michael Schmidt (advisor), Helmut Reiser (supervisor), Christopher Faber (author). Eine Marktanalyse für werkzeugunterstütztes Incident, Service Request und Change Management. Bachelorarbeit. Ludwig-Maximilians-Universität München, March 2023

Elisabeth Mayer, Thomas Odaker (advisors), Klaus Bengler (supervisor), Christine Dichtl (author). Virtual Reality versus Desktop-Anwendung zum Erlernen von Ergonomie am Arbeitsplatz. Masterarbeit. Technical University of Munich, March 2023.

Elisabeth Mayer, Thomas Odaker (advisors), Dieter Kranzlmüller (supervisor), Kristin Wloka (author). Utilizing a Game Engine to Create an Efficient Real-Time Visualization of Spatial and Temporal Simulation Data. Bachelor thesis. Ludwig-Maximilians-Universität München, October 2023.

Amir Raoofy (advisor), Josef Weidendorfer (supervisor), Julian Scheipl (author). Phase-aware Statistical Sampling for Always-on Performance Monitoring of HPC Systems. Bachelor thesis. Technical University of Munich, February 2023.

Amir Raoofy (advisor), Josef Weidendorfer (supervisor), Lukas Neef (author). Development and Comparison of Shared Memory Usage Model Schemes in a LAIK Backend. Bachelor thesis. Technical University of Munich, September 2023.

Amir Raoofy (advisor), Josef Weidendorfer (supervisor), Ibrahim Erdurucan (author). Malleability for the HPCG Benchmark Using LAIK. Bachelor thesis. Technical University of Munich, December 2023.

Amir Raoofy (advisor), Josef Weidendorfer (supervisor), Lukas Heine (author). Topology-Aware Communication Optimization in LAIK. Bachelor thesis, Technical University of Munich, December 2023.

TECHNICAL REPORTS / TECHNISCHE BERICHTE

3

Heikonen, J., Markomanolis, G., Achim, C.-V., Krishnasamy, E., Azab, A., Ojeda-May, P., Martone, M., Krotkiewski, M., Agueny, H., Guadalupe, M., & Sazo, B. (2023). Best Practice Guide LUMI. <https://zenodo.org/record/7510240>

Mutz, M., Grimm, P., Parniske, J., Pauw, V., & Maehle, E. (2023). Aktuelle Herausforderungen von Anwendungen Künstlicher Intelligenz und lernender Systeme im Bereich der Umwelttechnik [Whitepaper]. Netzwerk Digital GreenTech (NetDGT). [https://digitalgreentech.de/fileadmin/PR/DigitalGreenTech/PDF/Aktuelle Herausforderungen von Anwendungen Kuenstlicher Intelligenz und lernender Systeme im Bereich der Umwelttechnik.pdf](https://digitalgreentech.de/fileadmin/PR/DigitalGreenTech/PDF/Aktuelle_Herausforderungen_von_Anwendungen_Kuenstlicher_Intelligenz_und_lernender_Systeme_im_Bereich_der_Umwelttechnik.pdf)

Foglieni, M. (2023). Large Scale Limit of the Observed Galaxy Power Spectrum [An invited talk (virtual) on 10th October 2023] at SPHEREx team, the California Institute of Technology (Caltech), CA, USA] Invited by Dr. Henry S. Gebhardt <https://pma.caltech.edu/people/henry-s-gebhardt>.



IMPRESSUM

Herausgeber

Leibniz-Rechenzentrum der
Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Konzeption und Redaktion

PR-Team LRZ

Autoren

Susanne Vieser
Sabrina Schulte
Simon Schlechtweg

Grafik & Layout

Erika Krimmer
Veronika Hohenegger

Bildnachweise

Sofern nicht hier gelistet, sind die Bilder Eigentum des LRZ
oder wurden über Stock-Lizenzen erworben.
Die Portraitbilder wurden von den jeweiligen Interviewpartnerinnen
bereit gestellt.

S. 17 Werkfeuerwehr Technische Universität München
S. 34 AQT (Ionenfalle)
S. 42 Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (Bild Satellit)
S. 44 Dirk Bruniecke für BAdW
S. 59 Max-Planck-Institut für Astrophysik (MPA)

Kontakt

Leibniz-Rechenzentrum
Boltzmannstraße 1
85748 Garching b. München
Tel: (089) 35831 8000
Email: presse@lrz.de

Stand: November 2024

ÜBER DAS LRZ

Über das LRZ

Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ist seit knapp 60 Jahren der kompetente IT-Partner der Münchner Universitäten und Hochschulen sowie wissenschaftlicher Einrichtungen in Bayern, Deutschland und Europa. Es bietet die komplette Bandbreite an IT-Dienstleistungen und -Technologie sowie Beratung und Support – von E-Mail, Webserver, bis hin zu Internetzugang, virtuellen Maschinen, Cloud-Lösungen und dem Münchner Wissenschaftsnetz (MWN). Mit dem Höchstleistungsrechner SuperMUC-NG gehört das LRZ zu den international führenden Supercomputing-Zentren und widmet sich im Bereich Future Computing schwerpunktmäßig neu aufkommenden Technologien, Künstlicher Intelligenz und Machine Learning sowie Quantencomputing.

MIT UNS KÖNNEN SIE RECHNEN!

**Kontakt**

Leibniz-Rechenzentrum
Boltzmannstraße 1 • 85748 Garching b. München
Tel: (089) 35831 8000 • Internet: www.lrz.de

