



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften



2021 JAHRESBERICHT

JAHRESBERICHT 2021



Stand: April 2023
LRZ-Bericht 2021



INHALTSVERZEICHNIS

01	Chronik	08
02	IT-Dienste für die Wissenschaft	14
03	Neue Technologien	38
04	Forschung	52
05	Aus- und Weiterbildung	64
06	Menschen	74
07	Kooperationen	84
08	Zahlen und Fakten	100




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

HEUTE SCHON DAS MORGEN GESTALTEN – NEUE TECHNOLOGIEN BESTIMMEN 2021

Das LRZ wächst und wächst – so lässt sich 2021 in Kürze zusammenfassen. Das gilt sowohl in technologischer Hinsicht mit Blick auf die Themen Quantencomputing, KI oder auch Speicher – genauso wie für das LRZ-Team. Ein spannendes, herausforderndes, ein erfolgreiches Jahr liegt hinter uns.

Die Gründung des LRZ Quantum Integration Centre (QIC), das Kick-off des Projektes Q-Exa (Quantum Computing for Exascale-HPC), die Planung für die Erweiterung unseres Supercomputers – SuperMUC-NG Phase 2 – die Inbetriebnahme der High Performance Data Analytics (HPDA)-Plattform für terrabyte: Die News rund um neue Systeme und Technologien am LRZ überschlugen sich in 2021. Sie sind ein Beleg dafür, dass wir am LRZ stets künftige Infrastrukturen und Services im Blick haben und diese bereits frühzeitig planen (Kapitel 2, 3 und 4). Unser Credo ist, nie still zu stehen und uns immer weiterzuentwickeln. So wachsen



KOOPERATIONEN MACHEN UNS ZUKUNFTSFÄHIG – GEMEINSAM MIT UNSEREN PARTNERN SIND WIR STARK



die Aufgaben des LRZ ständig. Der Bedarf an qualifiziertem Fachpersonal natürlich auch (Kapitel 6).

Unsere Kooperationen machen uns zukunftsfähig auf unserem Wachstumskurs – gemeinsam mit unseren Partnern sind wir stark. Die Expert:innen-Gespräche mit unserem LRZ-Beirat beflügeln uns seit Jahren; unser Netzwerk im Munich Quantum Valley liefert ein weltweit herausragendes wie anregendes Umfeld für Forschung und Industrie (Kapitel 7). Für das Projekt terrabyte ziehen wir an einem Strang mit unserem Kooperationspartner, dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) – angetrieben von der Mission, Erdbeobachtungsdaten für eine Vielzahl an Wissenschaftler:innen einfach zugänglich und verwertbar zu machen (Kapitel 3). Gemeinsam mit dem Munich Center for Machine Learning (MCML) bringen wir die KI-Grundlagenforschung am Standort voran (Kapitel 3). Nicht zu vergessen ist der kontinuierliche Austausch mit unseren Nutzer:innen, die im ganzen Jahresbericht zu Wort kommen.

Neben starken Partnern basieren unser Wachstum und unsere Entwicklung auf einem starken Fundament: der fortwährenden Unterstützung unserer Förderer und unserer Mutterorganisation, der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAdW). Ihnen möchten wir an dieser Stelle im Namen des Direktoriums ein herzliches Dankeschön aussprechen. Allen voran gilt der Dank natürlich der Bayerischen Staatsregierung und dem Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst – hier ist besonders unser direkter Ansprechpartner Herr Georg Antretter zu erwähnen. Gewohnt vertrauensvoll war auch die Zusammenarbeit mit dem Präsidenten der BAdW Prof. Dr. Thomas O. Höllmann und der Generalsekretärin Bianca Marzocca – wir wissen dies sehr zu schätzen. Aber auch der fachliche Austausch mit unseren ehemaligen Direktoren Prof. Dr. Arndt Bode und Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering bereichert uns sehr. Nicht zuletzt gilt unser Dank dem stellvertretenden LRZ-Leiter Prof. Dr. Helmut Reiser, auf dessen unermüdliches Engagement für die LRZ Mitarbeiter:innen und die Zukunft des Hauses wir stets bauen können.

Wir bedanken uns für Ihr Vertrauen herzlich und freuen uns auf die weitere Zusammenarbeit.

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 2021

10

ZUKUNFTSTECHNOLOGIE MITGESTALTEN

JANUAR

ZUKUNFT GESTALTEN



Fünf Forschungs-Institutionen bauen mit dem Munich Quantum Valley ein anregendes Umfeld für Forschung und Industrie auf.

FEBRUAR

STRENGES VOTUM

Der Lenkungsausschuss wird neu gewählt, 15 Wissenschaftler:innen bewerten den Nutzen von Rechenzeit für Forschende.

MÄRZ

KONZENTRIERT FORSCHEN



Im Quantum Integration Centre (QIC) bündelt das LRZ seine Quantenaktivitäten. Zum Start kommen Ministerpräsident Markus Söder und Wissenschaftsminister Bernd Sibler.

Zeit für neue Technologien: 2021 markiert den Start des Quantum Integration Centre am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ), weshalb diese Chronik von ihrem Ende her aufgerollt wird. Im November 2021 gibt das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) grünes Licht für den Kauf eines ersten Quantencomputers samt Emulator und Software: „Das Projekt Q-Exa wird einen (...) Quantencomputer-Demonstrator auf der Grundlage supraleitender Schaltungen für die Integration in ein Exascale-System liefern“, lautet der Forschungsauftrag, und: „Mit Hilfe klassischer Computertechnologie soll das Computing der Zukunft weiterentwickelt und (...) in den Alltag von Forschung und Wissenschaft gebracht werden.“



In diversen Partnerschaften und Initiativen treibt das LRZ die Zukunftstechnologien Künstliche Intelligenz und Quantencomputing voran.

APRIL

MAI

JULI

DIENTE PRÜFEN

Zuerst bewertet die Universität Bayreuth die Servicequalität des LRZ, im Juli die DEKRA offiziell. Beide Instanzen haben nichts zu bemängeln.

SMART RECHNEN

SuperMUC-NG Phase 2 wird mit Graphics Processing Units (GPU) ausgerüstet werden, die Künstliche Intelligenz ins Supercomputing bringen.



DATEN AUSWERTEN

Die erste Hochleistungs-Plattform für die Analyse von Satellitendaten, terrabyte, nimmt ihren Betrieb auf. Für sie kooperieren DLR und LRZ.

Für diese Aufgabe hat sich das LRZ vorbereitet: Es initiierte 2019 die Bavarian Quantum Computing eXchange (BQCX) als Forum für Quanten-Enthusiasten aus aller Welt. Am LRZ können Forschende mit Quanten-Annealern Algorithmen für die Computer der Zukunft entwickeln. Und im Januar 2021 schließen sich das LRZ und das Walther-Meißner-Institut – als Vertreter der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAdW) – mit den Münchner Exzellenz-Universitäten sowie der Fraunhofer- und der Max-Planck-Gesellschaft zum Munich Quantum Valley zusammen: Hier sollen sich Forschung, Wissenschaft und Wirtschaft treffen, um

Lösungen fürs Quantencomputing zu entwickeln und Spezialist:innen auszubilden oder aus dem Ausland anzuziehen.

TECHNOLOGIEN INS SUPERCOMPUTING INTEGRIEREN

In der Boltzmannstraße 1 zu Garching wird derweil Platz geschaffen für das Quantum Integration Centre (QIC), in dem das LRZ Forschung und Quantentechnologien bündelt. Entsprechend zu der Zeit geltender Corona-Hygieneauflagen wird das QIC im März mit Prominenz eingeweiht. Geht es um neue IT und deren zunehmend komplexere Aufgaben, setzt das LRZ auf

Integration und (Energie)Effizienz: So sollen Quantenprozessoren das Supercomputing beschleunigen und ergänzen. Das Projekt Q-Exa bildet eine Blaupause für weitere Projekte, die das LRZ 2021 anschiebt.

Sind Quantenprozessoren Zukunftsmusik (wenn auch eine laut hörbare), so verbreiten sich die Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) weiter in der Forschung. SuperMUC-NG Phase 2, dessen Förderung das BMBF sowie das bayerische Ministerium für Wissenschaft und Kunst im Mai bewilligen, soll daher Verfahren des maschinellen Lernens sowie smarte Bild- und Texterkennung beherrschen. Dazu werden hochmoderne Graphics Processing Units oder GPU von Intel sowie spezielle Speicher in seine Architektur eingebettet. Denn diese ermöglichen den effizienten Transfer von und das Training mit Forschungsdaten. Von diesen neuen Fähigkeiten werden auch Plattformen wie terra-

byte profitieren: Mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) aufgebaut, startet das System für hochperformante Datenanalyse im Sommer in den Betrieb. Im ersten Jahr verarbeiten vorwiegend DLR-Spezialist:innen daran Satellitendaten, doch schon bald werden auch Forschende aus ganz Bayern terrabyte nutzen können.

GEFRAGTES WISSEN AUS DEM LRZ

Technologien nutzbar machen und Computerarchitekturen entwickeln: Das erfordert engagierte Mitarbeitende – und konstruktive Berater:innen: Anfang 2021 werden der Lenkungsausschuss des LRZ – er bewertet Anträge auf Rechenzeit aus der Wissenschaft – und der LRZ-Beirat neu gewählt. Mit beiden Gremien besprechen LRZ-Spezialist:innen Trends und Wünsche von Nutzer:innen. Sie regen Services sowie Verbesserungen an. Seit 2019 lässt das LRZ zudem die Qualität

JULI

AUGUST

SEPTEMBER

ONLINE TAGEN

Die wichtigsten Supercomputing-Konferenzen, die ISC und SC, finden erneut online statt. Das LRZ präsentiert sich in seinen virtuellen Welten.

WISSEN AKTUALISIEREN

Die beiden bayerischen Politiker Benjamin Adjei (Grüne) und Korbinian Rieger (SPD) informieren sich am LRZ über Entwicklungen in der IT.

PROGRAMME OPTIMIEREN

Die EuroMPI tagt in Garching und diskutiert online Verbesserungen am 4. Major Release von Programmierschema MPI.

seiner Services zertifizieren. Universitäten nahmen sich daran ein Beispiel, und so entstanden weitere Zirkel zum Wissensaustausch. Im Februar beurteilten Kolleg:innen der Universität Bayreuth die Prozesse im LRZ, im Sommer die DEKRA. Beide Instanzen empfahlen Verbesserungen und lobten den Teamgeist der LRZ-Mitarbeitenden.

Es sind deren Ideen und Erfahrungen, die das LRZ zum Leuchten bringen: Unter Bayerns Politiker:innen gilt das LRZ längst als Mitgestalter der Hightech Agenda. Die Expertise des LRZ ist auch auf Fachkonferenzen, Diskussionsrunden und Veranstaltungen gefragt: Im Spätjahr präsentierten das Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) sowie das neue QIC Arbeiten auf dem Hi!A-Festival Bayern, bei den Münchner Medientagen und im Deutschen Museum bei „Wissenschaft für jedermann“: Wissen über neue Technologien kommt an.



Das LRZ macht international von sich reden: im November besuchte Premierminister Abdulla Aripov aus Usbekistan das Rechenzentrum.

OKTOBER

NOVEMBER

DEZEMBER

ZUKUNFT ERFAHREN

Im ersten Workshop erfahren Teilnehmende, wie Quantencomputing Simulationen und HPC bereichern kann.

ANDERS RECHNEN



Gefördert vom BMBF bestellt das LRZ seinen ersten Quantencomputer beim finnisch-deutschen Start-up IQM. Startschuss für Projekt Q-Exa.

WISSENSCHAFT ERKLÄREN



Das LRZ präsentiert beim Hi!A Festival Ideen fürs Quantencomputing und Visualisierungen von Forschungsarbeiten.



02

IT-DIENSTE FÜR DIE WISSENSCHAFT

Das LRZ als Dienstleister	16
Von Garching in die Welt	20
Sicherer Zugang zu den LRZ-Diensten	22
Gut gerechnet, SuperMUC-NG	24
Forschungsaufgaben unterstützen	26
Modellfall – Lunge	28
Codes modernisieren	30
Ein Datenschatz für Umweltforschende	32
Autorennen mit künstlicher Intelligenz	34
XR-Technik für die Forschung	36

IT-SERVICES FÜR WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG

Seit der Gründung im Jahr 1962, sind wir, das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, ein fester Partner für die Wissenschaft. Als IT-Dienstleister bieten wir rund 120.000 Studierenden, 27.000 Beschäftigten und 1.900 Lehrenden an Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in München, Bayern und Europa Zugang zu klassischen IT-Services wie E-Mail- und Internet-Services, Webhosting- und Webserver-Dienstleistungen, Cloud-Services; aber auch zu großen IT-Infrastrukturen wie dem Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) oder nationalen Höchstleistungsrechnern. Sicherheit und Zuverlässigkeit genießen dabei stets oberste Priorität. Dafür setzen wir auf das Know-how und die Erfahrung unserer Beschäftigten, sowie auf nachvollziehbare Prozesse und IT-Dienste, für die wir seit 2019 nach den ISO/IEC-Normen für IT-Service-Management (20000) und Informations-Sicherheit (27001) zertifiziert sind.

120.000
STUDIERENDE



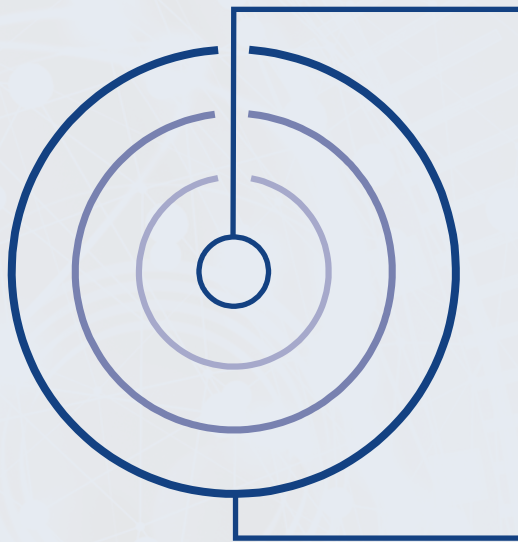
27.000
BESCHÄFTIGTE



1.900
PROFESSOR:INNEN



DAS LRZ ALS



Rechenzentrum für alle Münchner Universitäten

Regionales Rechenzentrum für alle bayerischen Universitäten

Nationales Höchstleistungsrechenzentrum (GCS)

Europäisches Höchstleistungsrechenzentrum (PRACE)



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



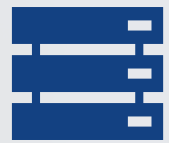
E-Mail und Groupware



High Performance Computing



Netz



Server-Hosting



Speicherlösungen



Unterstützende Dienste



Virtuelle Realität und Visualisierung



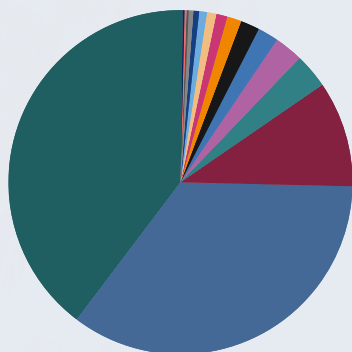
Vor-Ort Services



Webhosting und Webservices

ZUVERLÄSSIGE DIENSTE STARK GEFRAGT

KENNUNGEN FÜR LRZ-DIENSTE



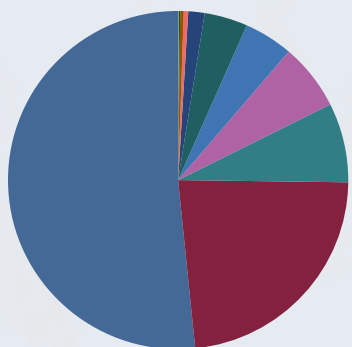
- LMU München
- TU München
- Hochschule München
- Hochschule Weihenstephan-Triesdorf
- Hochschule Landshut
- Hochschule Ansbach
- Öffentlich rechtliche Einrichtungen
- Nutzer:innen des SuperMUC-NG
- Hochschule für Musik und Theater
- Leibniz-Rechenzentrum
- Kurskennungen
- Akademie der Bildenden Künste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

273.574

**KENNUNGEN
ENDE 2021**



EXCHANGE NUTZERGRUPPEN



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

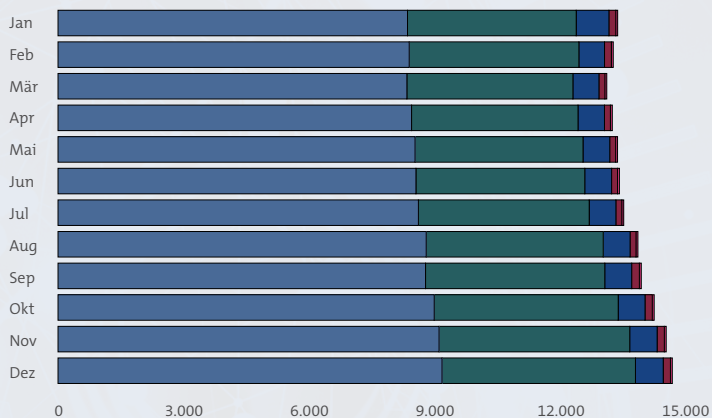
115.427

**NUTZERGRUPPEN
ENDE 2021**



Weitere Statistiken finden Sie in Kapitel 8.

MWN-PC



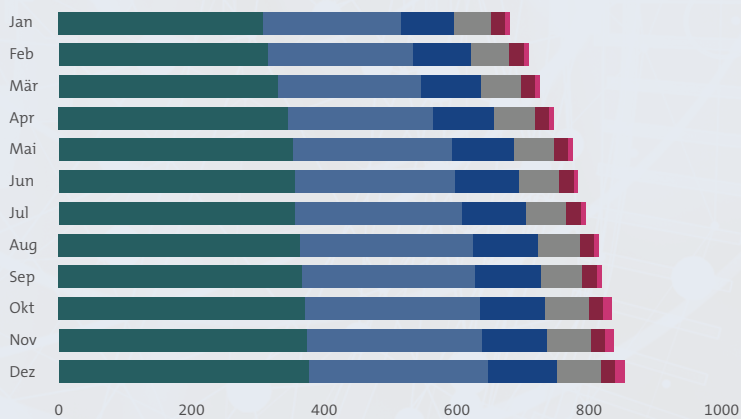
- TU München
- LMU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Hochschule München
- Hochschule für Musik und Theater

14.716

SYSTEME
ENDE 2021



MWN-MAC



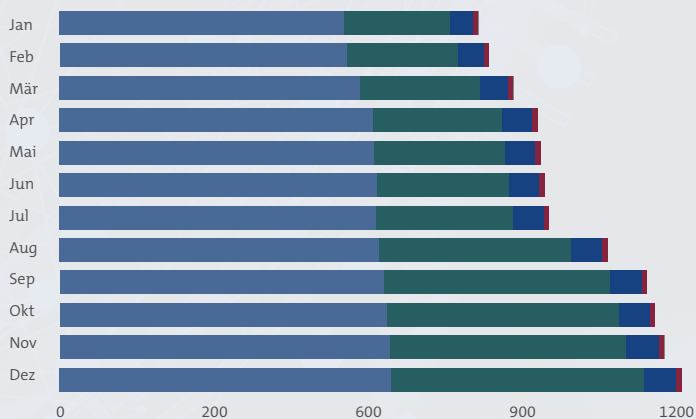
- LMU München
- TU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Akademie der Bildenden Künste
- Hochschule München
- Hochschule für Musik und Theater

854

SYSTEME
ENDE 2021



IOS-SYSTEME



- TU München
- LMU München
- Bayerische Akademie der Wissenschaften
- Hochschule München
- Akademie der Bildenden Künste

1207

SYSTEME
ENDE 2021



VON GARCHING IN DIE WELT

MWN – ZAHLEN UND FAKTEN

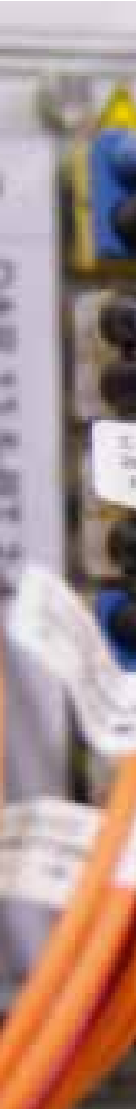
Weitere Daten zum Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) finden Sie in Kapitel 8



Als Betreiber des Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) bieten wir nicht nur einen bequemen Internetzugang an den schönsten Plätzen Bayerns wie dem Starnberger See, Weihenstephan, der Zugspitze und den Münchner Museen. Unsere Netz-Dienste stehen selbstverständlich allen Münchner Hochschulen, Studentenwohnheimen, weiteren Forschungseinrichtungen, sowie z.B. auch der Bayerischen Staatsbibliothek zur Verfügung.

Insgesamt werden heute im MWN 643 Standorte miteinander verbunden. 2021 befanden sich mehr als 300.000 Computer, Tablets und Smartphones im WLAN des MWN. Auch im zweiten Jahr der Corona-Pandemie lief das MWN gewohnt zuverlässig und ermöglichte Forscher:innen virtuelle Vorlesungen und einen sicheren Remote-Zugriff für die Arbeit von Zuhause. Rund 2.500 Switches, nahezu 6.000 Access Points und knapp 9000 Netzkomponenten sorgen dafür.

Das MWN ist dabei nicht auf Bayern begrenzt, sondern reicht bis in benachbarte Bundesländer, beispielsweise ins baden-württembergische Heilbronn, wo die Technische Universität München einen Außencampus unterhält. Auch dort ist es möglich, mit einer LRZ-Kennung über das MWN das Eduroam-Netz zu nutzen.



DATENMENGE PRO MONAT

4,5 PB Eingehend
3,1 PB Ausgehend

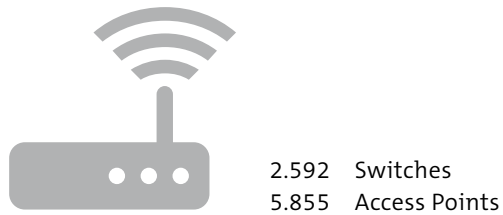


WLAN

300.000 verschiedene Geräte
35.500 Geräte in 5 Minuten



NETZKOMPONENTEN IM MANAGEMENT



STANDORTE



BANDBREITE



VPN

194 TB Datenvolumen pro Monat
5.900 TB gleichzeitige Verbindungen



DNS

360.000 eingetragene IPv4 Adressen
3.528 verwaltete Domains

SICHERER ZUGANG ZU DEN LRZ-DIENSTEN

Virtual Private Networks sichern den Remote-Zugriff auf die IT-Dienste des Leibniz-Rechenzentrums. Sie wurden gerade im laufenden Betrieb erfolgreich rundum erneuert

Sicher mobil studieren und arbeiten: Um Mails, das Internet oder IT-Dienste des Leibniz-Rechenzentrums wie LRZ Sync+Share, Datenspeicher oder die LRZ Cloud abzurufen, nutzen rund 130.000 Studierende oder Mitarbeitende von Hochschulen und Forschungsinstituten in München und Bayern das Münchner Wissenschaftsnetz (MWN). Der Bedarf ist groß: Steigen gewöhnlich pro Tag etwa 1500 bis 2000 Menschen mit Hilfe der VPN des LRZ ins Wissenschaftsnetz ein, waren es während der Pandemie oft mehr als 6500 gleichzeitig.

Der Zugriff aus der Ferne ist seit Jahren durch Virtual Private Networks (VPN) gesichert. Dafür wird über das Internet ein geschlossenes Kommunikationsnetz zwischen dem Rechner der Anwender:in und dem Rechenzentrum aufgebaut, das gegen Angriffe aus dem Internet geschützt ist. Doch die bestehende Technik ist in die Jahre gekommen und musste rundum erneuert werden: „Die Hardware ist am Ende ihres Lebenszyklus angekommen, nicht zuletzt hat sich diese Lösung von einem reinen VPN wegentwickelt“, erläutert Markus Meschederu, in der Gruppe Netzbetrieb des LRZ für VPN und Router verantwortlich. „Außerdem laufen die Lizenzen 2022 aus.“ Auf der Suche nach Alternativen evaluierte das Team die Open-Source-Lösung OpenVPN, die am LRZ ebenfalls im Einsatz ist. Dabei taten sich Grenzen im Client-Betrieb auf: „Bei OpenVPN müssen die Anwender:innen vieles selbst machen, zum Beispiel Updates installieren oder die Konfiguration aktualisieren“, so Meschederu. Aus Sicherheits- und Komfort-Aspekten sollten möglichst viele Aufgaben am Client automatisiert ablaufen. Die bessere VPN-Lösung fand sich beim EU-Projekt GÉANT.





GUT BEDIENBARES OPEN-SOURCE-TOOL

GÉANT hat bereits das internationale Wireless Local Area Network (WLAN) für Forschung und Lehre „eduroam“ etabliert – die Basis für den WLAN-Zugang über das MWN. Eine weitere Entwicklung des pan-europäischen Netzes ist eduVPN, ein für den akademischen Bedarf angepasster OpenVPN-Client für fast alle Betriebssysteme. Meschederu pointiert: „eduVPN ist eine schöne Verpackung für OpenVPN.“ Und ist nun die neue Lösung für LRZ-Nutzer:innen. eduVPN steht inzwischen über die Self-Service-Portale des LRZ bereit. Die Konfiguration ist einfach: Benutzer:innen wählen ihr Institut aus einer Liste aus. Zur Authentifizierung werden sie auf eine Website geleitet, alle weiteren Einstellungen folgen automatisch. Im Gegensatz zu anderen VPN-Lösungen speichert eduVPN die Authentifizierung für einen Zeitraum. Wird die Verbindung getrennt, etwa durch den Stand-by-Modus des Notebooks oder Rechners oder durch Schwankungen der Internet-Verbindung, müssen sich die Benutzer:innen nicht immer neu anmelden. eduVPN ist komfortabler als das alte System und bietet dieselben Sicherheitsvorteile.

„Im ersten Schritt betreiben wir eduVPN und das alte System parallel“, erläutert Meschederu. Probleme gibt es dabei wenige, die Anzahl der Anfragen am Servicedesk ist überschaubar. Für neue User ist eduVPN die erste Wahl: Inzwischen arbeiten schon mehr als 5500 Benutzer:innen mit eduVPN, in Spitzenzeiten greifen rund 600 gleichzeitig darauf zu. Meschederu ist mit dem Umstieg zufrieden: „Bei einigen Fragen wie etwa der Anbindung unserer Radius-Server zur Benutzer-Authentifizierung benötigten wir Unterstützung durch die Entwickler“, sagt er. „Das lief sehr gut, eduVPN wurde dafür erweitert. Funktional bietet es alles, was wir brauchen.“



MEHR INFORMATIONEN

Anwender:innen informieren sich in der LRZ-Doku online über eduVPN.



GUT GERECHNET, SUPERMUC-NG!

SuperMUC-NG leistet der Wissenschaft als einer der drei nationalen Höchstleistungsrechner weiterhin hervorragende Dienste. Knapp 300 Projekte verbrauchten zwischen der offiziellen Inbetriebnahme im August 2019 und Ende 2021 etwa 5,2 Milliarden Rechenstunden. Dabei ist SuperMUC-NG ein wahrer Allrounder: Neben Astrophysik und Strömungsmechanik, die seit Jahrzehnten Supercomputing gewinnbringend für ihre Forschung nutzen, stammen die rund 700.000 von SuperMUC-NG abgearbeiteten Jobs aus insgesamt mehr als 10 verschiedenen Wissenschaftsbereichen – u.a. Geo- und Umweltwissenschaften, Medizin oder Materialwissenschaften.

#23

TOP 500
(NOV 2021)

SUPERMUC-
NG



26,9 PetaFlop/s Peak Performance
= 2.690.000.000.000.000
Gleitkommaoperationen pro Sekunde

AUGUST 2019 – BIS ENDE 2021



5,2 Milliarden
Rechenstunden



1,5 Mio
Jobs



400
Projekte



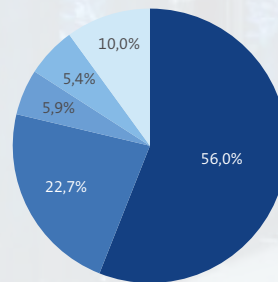
1100
Wissenschaftler:innen

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
■ Chemie
■ Geowissenschaften
■ Andere



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



DR.
HERBERT HUBER

**VIELSEITIGE FOR-
SCHUNGSAUFGABEN
UNTERSTÜTZEN**



Die Methoden Künstlicher Intelligenz (KI) sind gefragt: Forschende wollen sie am SuperMUC-NG einsetzen. Beim Systemkonzept für SuperMUC-NG Phase 2 stand daher die Eignung für KI-Anwendungen im Vordergrund. Herbert Huber, Leiter Hochleistungs-Systeme (HLS) erklärt die Neuerungen.

Sie organisieren die Beschaffung der Computer – rechnen Sie auch damit?

Dr. Herbert Huber: Nein, als Experimental-Physiker interessiert mich vor allem die technische Seite der Systeme. Im Jahr 2000 wurde der erste Höchstleistungsrechner, der HLRB I, am LRZ installiert, seither gehöre ich zum Planungsteam der LRZ-Supercomputer.

Inwieweit fließen die Wünsche von Nutzer:innen in die Planung ein?

Huber: Im Verbund der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren des Gauss Centre for Supercomputing wird der LRZ-Supercomputer so konzipiert, dass er Aufgaben unterschiedlichster Forschungsrichtungen unterstützt. Aktuell beobachten wir jedoch einen relativ starken Trend vieler Wissenschaften zur Verwendung von Methoden aus der KI. Phase 2 wird daher Intel Ponte Vecchio-Beschleuniger enthalten, die für die schnelle Bearbeitung dieser Anwendungsklasse besonders gut geeignet sind. Der Einsatz von Beschleunigerhardware erhöht zudem deutlich die Recheneffizienz für diesen Anwendungsbereich und verringert somit den elektrischen Energiebedarf von Phase 2. Für den schnellen Zugriff auf Daten wird ein Distributed Asynchronous Object Storage (DAOS) geliefert und in Betrieb genommen.

Kooperieren Prozessoren und Beschleuniger gut miteinander?

Huber: Natürlich – es wird in Zukunft meines Erachtens keinen Supercomputer ohne Beschleuniger mehr geben. Viele unserer Phase 2-Nutzer:innen werden ihre Codes vermutlich für die performante Verwendung der Beschleuniger etwas anpassen müssen.

Wird Phase 2 in den SuperMUC-NG integriert?

Huber: Phase 2 ist ein zweites System, das parallel zu SuperMUC-NG Phase 1 arbeiten wird. Aus wirtschaft-

lichen Gründen werden Installation und Betrieb der LRZ-Höchstleistungsrechner meist in zwei Phasen geplant, weil sich Computertechnik, Rechenleistung und damit die Energiebilanz in wenigen Jahren stark verbessern. Phase 2 wird an den Phase 1 Hintergrundspeicher angeschlossen, jedoch wird bei Phase 2 Infiniband und nicht Omnipath als Hochgeschwindigkeitsverbindungsnetz verwendet werden. Zudem wird die Rechenleistung der Phase 2-Knoten um ein vielfaches höher sein. LRZ-Nutzer:innen haben so den Vorteil, dass sie für die Ausführung ihrer Anwendungen zwischen zwei unterschiedlichen Supercomputing-Systemen wählen können.

Vermittelt Phase 2 Erfahrungen, die für den nächsten Computer wichtig sind?

Huber: Der nächste Supercomputer wird ebenfalls ein beschleunigtes System sein. Dafür können wir jetzt Erfahrungen im Umgang mit Acceleratoren und neuen Prozessorentypen sammeln. Im LRZ-Testbed BEAST testen und optimieren wir, auch mit Herstellerfirmen und neuester Hardware.

Was passiert eigentlich mit den Racks, wenn SuperMUC-NG abgebaut wird?

Huber: Phase 1 wird in 2025 außer Betrieb genommen und abgebaut, Phase 2 etwa dreieinhalb Jahre später. Die Entsorgung wurde schon bei der Beschaffung vertraglich geregelt. Die Technik wird bei der Außerbetriebnahme veraltet sein. Angesichts der Tatsache, dass das System veraltet und direkt-warmwassergekühlt ist, wird der Auftragnehmer die Hardware vermutlich nur relativ schwer einer weiteren Nutzung zuführen können. Aber lassen Sie uns nicht vom Abbau sprechen, jetzt wollen wir mit den Systemen rechnen und sie fordern.



MODELLFALL – LUNGE

Am SuperMUC-NG erarbeitete das Institut für numerische Mechanik der TUM ein digitales Lungenmodell, das inzwischen die künstliche Beatmung verbessert und Lungenschäden vermeiden hilft.

Schon mal versucht, einen Figurenballon aufzublasen? Mal füllt sich nur ein Ohr, mal platzt das Ding. Ganz ähnlich stellt sich die künstliche Beatmung dar. Nur stehen Intensivmediziner:innen vor der heiklen Aufgabe, Abermillionen von Ohren oder besser: Bläschen mit Luft zu füllen. Manche davon sind voller Wasser oder Schleim, nehmen nur wenig Luft auf, bei anderen ist das Gewebe steif, sie dürfen nur mit Vorsicht gefüllt werden. Ärzt:innen sehen dabei nicht, wie sich was füllt und wo Überlastung droht. So führen bis zu 50 Prozent der Beatmungen zum Tod. Eine Lösung dieses unerträglichen Dilemmas liefern die Mechanik und die numerische Mechanik. Diese Disziplinen widmen sich zunehmend auch Lebewesen: „Alle physikalischen, biologischen, chemischen Phänomene können durch mathematische Gleichungen beschrieben werden“, erklärt Professor Dr. Wolfgang Wall, Leiter des Lehrstuhls Numerische Mechanik (LNM) an der Technischen Universität München (TUM). An seinem Lehrstuhl entstand ein mehrfach ausgezeichnetes, digitales Modell der Lunge, das der Medizin hilft, die Bläschen des wohl komplexesten Figurenballons schonend zu füllen.

High Performance Computing (HPC) ist dabei Handwerkszeug. Der LNM arbeitet an den Supercomputern des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ): „Wir betreiben anwendungsmotivierte Grundlagenforschung“, so Wall. „Am LRZ können wir Rechenleistung nutzen und finden die Spezialist:innen, die uns beim Optimieren von Algorithmen und bei der Implementierung von Programmen helfen.“ Dazu entwickeln rund 30 Mitarbeitende mit Biolog:innen, Ärzt:innen, Physiotherapeut:innen Hypothesen und Modelle. Eine Rolle spielt die Mathematik: „Unsere zentrale Aufgabe ist“, spezifiziert der Mathematiker und Informatiker Dr. Martin Kronbichler, „die numerischen Werkzeuge und Algorithmen zu entwickeln, mit denen sich Probleme modellieren lassen.“ Die Simulation der Lunge wurde um immer mehr Details erweitert. Das Team erkannte, dass die rund 500 Millionen Lungenbläschen nicht wie oft dargestellt traubenförmig an den Bronchien hängen, sondern eher ein schwammiges Gewebe bilden. „In der Medizin gibt es wenige Möglichkeiten, Prozesse im Körper zu messen oder davon Bilder zu machen“, sagt Wall. Digitale Modelle veranschaulichen Funktionen und verbessern so Therapien.

DATEN + MATHEMATIK + MODELLE + INFORMATIK = SIMULATION

Die Arbeitsgruppe um Wall entwickelte eine Reihe von Lungenmodellen. Sie basieren auf Bildern von Computertomografen, Röntgengeräten, Mikroskopen. Auch anonymisierte Patient:innendaten wurden herangezogen. Schrittweise wurden damit das Luftröhren- und Bronchiensystem modelliert, die Lungenbläschen und das -gewebe. Dabei kamen unterschiedlichste mathematische Gleichungen und numerische Methoden zum Einsatz. „Man kann Hypothesen und Theorien nicht beweisen, man kann nur versuchen, sie zu widerlegen“, sagt Wall und Kronbichler ergänzt: „Das Tolle an Simulationen ist, dass die Resultate genau angeschaut und in Details immer wieder neu berechnet werden können.“

Das jedoch fordert Rechenkapazitäten, besonders, wenn mehrere Modelle zusammengeführt werden und damit die Datenmengen wachsen. Zusammen mit den LRZ-Spezialist:innen wurde der dafür empfohlene Simulationscode optimiert. Eingriffe ins Computersystem ließen SuperMUC-NG schneller rechnen. Schon arbeiten sie am LNM an weiteren mechanischen Gesundheitsfragen: etwa an der Modellierung der Schulter oder am Wachstum von Tumoren. In Corona-Zeiten hat die digitale Lunge ihren Zweck bewiesen: Ärzt:innen personalisierten das Modell mit Daten ihrer Patient:innen und probierten daran aus, wie sich die Beatmung auswirkte. Das rettete Leben, verhinderte Lungenschäden; auch Frühchen, die beatmet werden müssen, starten jetzt sicherer ins Leben. ■

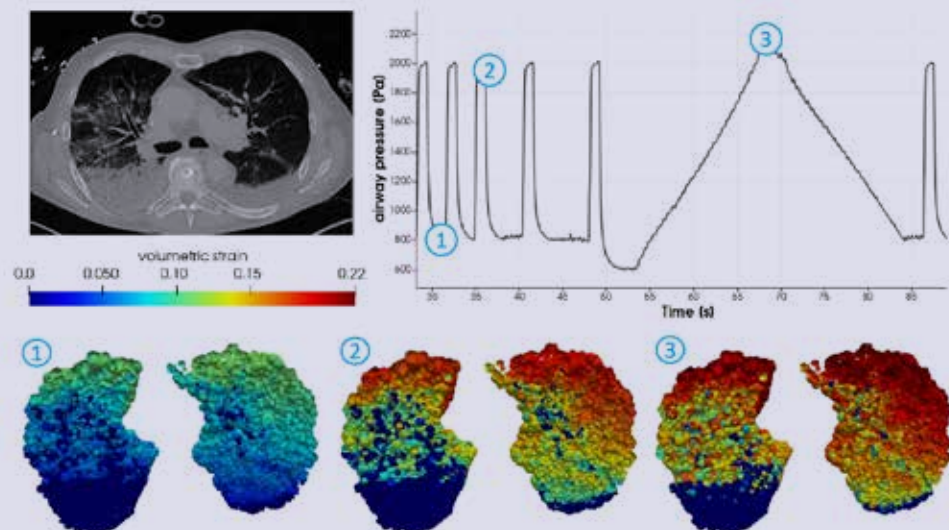


Figure 1: Axial views of a thoracic CT scan of a patient suffering from ARDS, captured at positive end-expiratory pressure (PEEP) (top left), and volumetric strains of the corresponding computational model along the application of the airway pressure (top right): at PEEP (1), at end-inspiration (2) and at peak airway pressure during a certain ventilation maneuver (3).



DR.
MOMME ALLEN

**CODES MÜSSEN
MODERNISIERT
WERDEN**



Das Institut für numerische Mechanik liegt keine 500 Meter vom Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) entfernt: Diese Nachbarschaft fördert die Suche nach gemeinsamen Lösungen. Für das Lungenmodell entstand eine Software zur Berechnung turbulenter Strömungen, die auch in Natur und Technik vorkommen. Momme Allalen wurde in theoretischer Physik promoviert und unterstützt mit seinen Kolleg:innen Forschende am Supercomputer

Seit wann arbeitet das HPC-Team des LRZ am Lungenprojekt von Prof. Wolfgang Wall?

Dr. Momme Allalen: Der erste, engere Kontakt kam 2015 durch ein KONWIHR-Projekt zustande. Professor Wall und sein Team wollten für ihr Lungenmodell neue Algorithmen für Finite-Elemente-Diskretisierungen entwickeln, außerdem die Skalierung eigener Codes und Software erhöhen, um am SuperMUC mit möglichst allen Rechenknoten ein größeres Modell zu simulieren. Mit Unterstützung des Computational Fluid Dynamics-Lab des LRZ konnte die Gruppe Portierungs- und Leistungsprobleme lösen.

Was macht ihr konkret, was sind die Aufgaben des CFD-Teams?

Allalen: Wir helfen LRZ-Nutzer:innen, Codes anzupassen, so dass sie schneller und effizienter auf HPC-Hardware laufen. Dabei setzen wir eine Vielzahl von Techniken ein, der Ablauf geht so: Wir analysieren und identifizieren zunächst Muster in den Algorithmen, die eine bessere Leistung auf Knotenebene bieten. Dann optimieren und modifizieren wir mit Forschenden die Codes so, dass erstens Rechenzeit und Ressourcen des SuperMUC-NG besser ausgelastet und dabei zweitens möglichst alle Rechenknoten angesprochen werden. Hintergrund ist, dass viele Forscher:innen immer noch mit älteren Codes arbeiten, doch HPC-Systeme werden schnell weiterentwickelt. Zwischen dem Bau von SuperMUC Phase 2 und SuperMUC-NG liegen etwa drei Jahre, die Architektur beider Systeme unterscheidet sich stark. Folglich müssen Codes modernisiert und auf höhere HPC-Komplexität angepasst werden.

Welche Codes waren für das Lungen-Modell wichtig?

Allalen: Um die Geometrie des Lungensystems zu simulieren, suchten wir nach einem Vernetzungsalgorithmus, um eine geometrische Darstellung in eine mathematische Formel umzuwandeln, mit der Algorithmen zur Berechnung turbulenter Strömungen arbeiten können. Das Team von Professor Wall arbeitet hauptsächlich mit dem BACI-Code des Lehrstuhls sowie mit Codes, die auf der Deal.II-Bibliothek basieren. Wir untersuchten deren Verhalten auf dem SuperMUC, und zwar durch Single-Instruction-Multiple-Data- oder SIMD-Vektorisierung und Shared-Memory-Parallelisierung. Diese beiden Komponenten sind Single-Node-Optimierungen, die die Grundlage für hybride Codes bilden, die auf dem Programmierschema MPI basieren und sich über mehrere Knoten erstrecken. Für die Shared-Memory-Parallelisierung setzen wir auf die Threading Building Blocks- oder TBB-Bibliothek von Intel.

EIN DATENSCHATZ FÜR UMWELTFORSCHENDE



Extremwetter, die Erosion von Küsten, die Entwicklung von Städten: Zurzeit senden acht Copernicus Sentinel-, zudem US-amerikanische Landsat- und Radar-Satelliten des Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) pro Tag rund 19 Terabyte an Daten über die Erde zu uns. Die Menge entspricht in etwa 4750 Spielfilmen. Forschende finden darin Daten zum aktuellen Zustand der Erde. DLR und das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) machen diesen Datenschatz mit Hilfe von terrabyte zugänglich. Die Hochleistungs-Analyseplattform verbindet über eine 10 Gigabit/s-Leitung das Satellitendaten-Archiv des DLR in Oberpfaffenhofen mit neuem, intelligent verwaltetem Online-Speicherplatz von rund zwei Mal 50 Petabyte sowie den Supercomputern des LRZ in Garching. So können größte Datensätze aus dem DLR-Archiv schnell zu terrabyte übertragen und auf der High Performance Data Analytics- oder HPDA-Plattform erforscht werden.

ERDBEOBACHTUNGSDATEN SCHNELL ANALYSIEREN

„Daten, die Satelliten liefern, können sofort verarbeitet werden“, sagt Stefan Dech, Direktor des Deutschen Fernerkundungsdatenzentrums (DFD) am DLR. „Das ist ein Meilenstein für die Umweltforschung und die Fernerkundung der Erde. Wir rechnen mit einem enormen Wissenssprung.“ Davon sollen Umweltschutz, Gesellschaft und Wirtschaft profitieren. Den Kern von terrabyte bilden leistungsstarke Server, Datei-Management- und Speichersysteme, die zusammen zwei Mal 50 Petabyte Speicherplatz ergeben und die mit äußerst schnellen Infiniband-Schnittstellen verbunden sind. „Wir übertragen intern die Daten mit 300 Gigabyte pro Sekunde, das eröffnet neue Möglichkeiten für ihre Prozessierung und Verarbeitung“, erklärt Dieter Kranzmlüller, Leiter des LRZ. „Bei terrabyte geht es nicht nur um sehr große Rechenkapazitäten, sondern um die Verarbeitung von Massendaten. Die Plattform zeigt die wachsende Bedeutung von Speichervolumen für die Forschung.“ In vielen Wissenschaftsdisziplinen sollen Daten heute gut erreichbar sein und idealerweise vor Ort verarbeitet werden können, möglichst durch komfortablen Open Source-Zugang. 2020 investierte das DLR acht Millionen Euro in den Aufbau von terrabyte, das LRZ wiederum wartet und betreut die HPDA-Plattform. Diese wird mit weiteren Geldern des DLR um Rechenkapazitäten und Tools erweitert, die Datenverarbeitung und Analysen mit Methoden der Künstlichen Intelligenz ermöglichen.

Neben dem DLR sollen auch die Münchner und bayerischen Universitäten auf terrabyte zugreifen können. Xiaoxang Zhu, Lehrstuhlinhaberin an der Technischen Universität München und Abteilungsleiterin am Earth Observation Center (EOC) des DLR, arbeitet schon seit Jahren mit Satellitendaten. Die Ingenieurin entwickelte Algorithmen, um Mega-Städte dreidimensional und mit höchster Genauigkeit darzustellen. Ihre Modelle verbessern die Raum- und Stadtplanung oder den Katastrophenschutz. Erdbeobachtungsdaten bringen die Umwelt- und Klimaforschung weiter, vereinfachen zudem den Aufbau von Mobilfunk- und IT-Netzen oder belegen die Berechnung von Subventionen.

Terrabyte ist eine innovative Hochleistungsdaten-Plattform, sie bietet Tools für die Auswertung von Erdbeobachtungsdaten und macht diese für die Forschung zugänglich



TECHNIK FÜR DIE HOCHLEISTUNGSDATENANALYSE

terrabyte ist ein Beispiel für die schnelle Auswertung von Big Data, am LRZ dient die Plattform als Modell für weitere Speicher- und Compute-Angebote für Forschende.

- Den Kern von terrabyte bilden 10 Racks mit ThinkSystem SR630-Servern und unterschiedlich großen DSS-G-Speichersystemen von Lenovo.
- 61 Intel Xeon Platinum-Prozessoren; 15 Intel Xeon Gold-GPU (Graphics processing Units)
- Die Organisation der Daten übernimmt das File-System Spectrum Scale von IBM.
- Die Bauteile sind mit Infiniband-Schnittstellen vernetzt, sie transportieren 300 Gigabit Daten pro Sekunde zwischen Rechen- und Speicherkapazitäten.



AUTORENNEN MIT KÜNSTLICHER INTELLIGENZ

Künstliche Intelligenz und Cloud: Damit testete Team TUM Autonomous Motorsport die Funktionstüchtigkeit seines siegreichen Rennwagens und trainierte sein Fahrverhalten.

Mit 218 oder gar 270 Sachen über die Rennstrecke. Was für Formel 1-Fahrer wie Lewis Hamilton oder Sebastian Vettel Routine ist, ist für einen Rennwagen, der autonom fährt, eine Sensation: Der Wagen wird vom Computer auf Kurs gehalten und reagiert dank Künstlicher Intelligenz (KI) eigenständig auf Kurven und Hindernisse: „Die kritische Größe ist die Latenz vom Auftreten eines Ereignisses auf der Strecke bis zur Reaktion des Autos“, erklärt Phillip Karle, wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl Fahrzeugtechnik der Technischen Universität München (TUM) und Leiter des Teams TUM Autonomous Motorsport. „Im Straßenverkehr rettet eine kurze Reaktionszeit unter Umständen Leben.“

Fahrfunktionen gelten als komplexe Anwendungen von KI und maschinellem Lernen – und sind daher auch in Universitäten willkommene Studienobjekte. Der Motorsport bietet Chancen, Software zu entwickeln und sich mit Entwicklungsteams zu messen. Seit fünf Jahren entwickeln die TUM-Lehrstühle für Fahrzeug- und Regelungstechnik Systeme fürs autonome Fahren. Bei Team TUM Autonomous Motorsport tüfteln rund 60 Studierende, Doktoranden sowie die Professoren Boris Lohmann und Markus Lienkamp an Aufgaben wie Pfadplanung, Umgebungswahrnehmung und der Auswertung von Fahrdaten. So entstand eine Software, mit der Rennwagen ausgerüstet wurden. In der Compute Cloud des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) wurden die Software getestet und Fahrverhalten simuliert.

FAHRBEFEHLE AUS DATEN

Ende Oktober 2021 gewann das Team den ersten Platz bei der Indy Autonomous Challenge in Indianapolis, Anfang Januar 2022 den zweiten Platz bei der Autonomous Challenge@CES in Las Vegas: „Bei den Rennen haben wir viel darüber erfahren, wie Teile der Software zusammenspielen“, sagt Teammanager Alexander Wischniewski. „Forschungsprojekte konzentrieren sich oft auf wenige konkrete Fragen, wir haben hier die Chance, die Probleme eines kompletten Fahrsystems zu betrachten.“ Kameras sowie Light Detection and Ranging- oder LIDAR-Sensoren, das elektronische Global Positioning System (GPS) und Radarsensoren liefern stetig Informationen von der Strecke und aus dem Wagen. Ein Computer rechnet mit Hilfe smarterer Systeme daraus Befehle für Bremsen, Lenkung, Motor. Hardware-Komponenten wurden an den Lehrstühlen geprüft, zur Ausarbeitung von Algorithmen sowie zur Simulation von Fahrsituationen waren Rechenkraft und Speichervolumen gefragt. Dafür stellte das LRZ vier Computerknoten (CPU) mit jeweils 40 Cores und 400 Gigabyte Datenspeicher: „Nachts ließen wir darauf automatisierte Tests laufen, um Fehlerquellen in der Software aufzuspüren“, berichtet Teamleiter Karle. Kollege Wischniewski ergänzt: „Wir haben sehr viel Zeit in die Simulation des Rennwagens und der Strecken gesteckt und konnten dadurch viele Fehler beheben.“ Das erleichterte die Implementierung der Software, außerdem simulierte das Team Rennen mit bis zu acht Fahrzeugen und trainierte die Software so auf schnelle Reaktionen.



OPEN SOURCE SOFTWARE UND EIN STARTUP

Drehten in Indianapolis die Boliden allein ihre Runden, traten in Las Vegas zwei Wagen gegeneinander an. Das System musste Fahrfehler des Konkurrenten oder Überholmanöver mitberechnen. Trotzdem konnte das Tempo von 218 im ersten Rennen auf 270 Stundenkilometer erhöht werden. Das motiviert: Die Technik soll sich in realen Verkehrssituationen bewähren, daher stehen Forschungsarbeiten und Programme als Open Source-Angebote online. Mit Team-Kolleg:innen gründete Wischnewski das Startup Driveblocks. Ziel: die Erfahrungen aus den Rennen in nutzbare Software umzusetzen.

XR

XR-TECHNIK FÜR DIE FORSCHUNG

**Das Zentrum für Virtuelle
Realität und Visualisierung
am LRZ**

Visualisierung, Virtuelle Realität und Erweiterte Realität: XR-Technologien bieten verschiedenste Möglichkeiten, wissenschaftliche Datensätze zum Leben zu erwecken.

Unser V2C-Team betreibt dafür XR-Forschung auf internationalem Spitzenniveau. Die Erforschung zukunftsweisender Technologie im Team, die Beratung von externen Wissenschaftler:innen und die Umsetzung von anspruchsvollen Projekten gehen dabei Hand in Hand und stimulieren sich gegenseitig.

AUSSTATTUNG

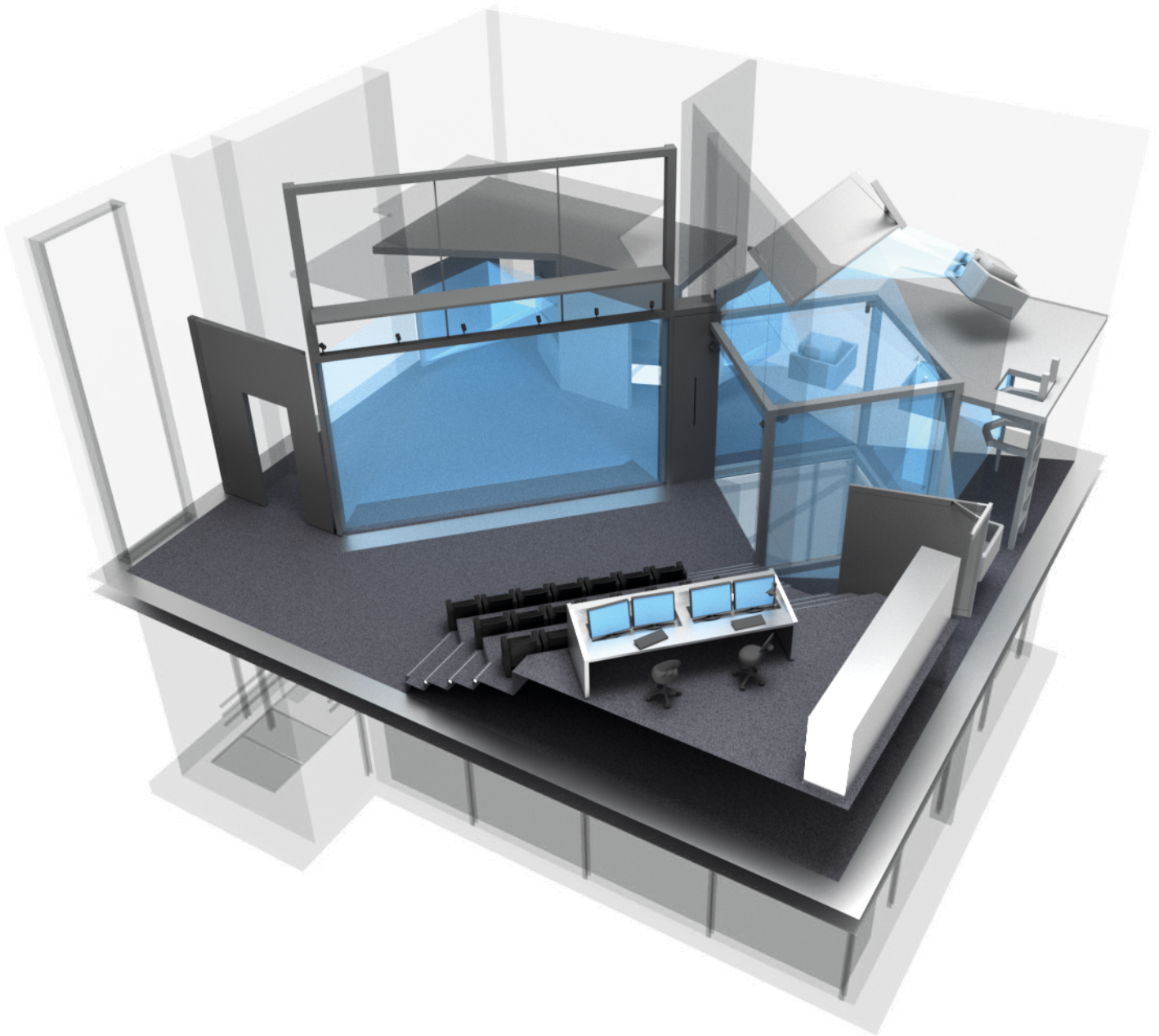
- Powerwall (2012)
- LED-Powerwall (2018)
- 5-seitige Projektionsanlage (CAVE)
- Leistungsfähige Rechnerinfrastruktur
- 2 Labs für Head-Mounted Displays

DIENSTLEISTUNG

- Bereitstellung der Installationen
- Aufbereitung von Datensätzen
- Standard-Softwarelösungen
- Maßgeschneiderte Softwarelösungen

ANWENDUNGSGEBIETE

- Artenschutz
- Geophysik
- Klimaforschung
- Kunstgeschichte
- Zeitzeugen



2011
Bau



2012
Eröffnung



2018
Erneuerung





03

NEUE TECHNOLOGIEN

Quantum – aus dem Rechenzentrum in den Alltag	40
Vielfalt ins System bringen	44
Wetterprognosen und Modelle	46
Forschungsdaten speichern und wiederfinden	48
Kräfte bündeln für mehr Effizienz	50

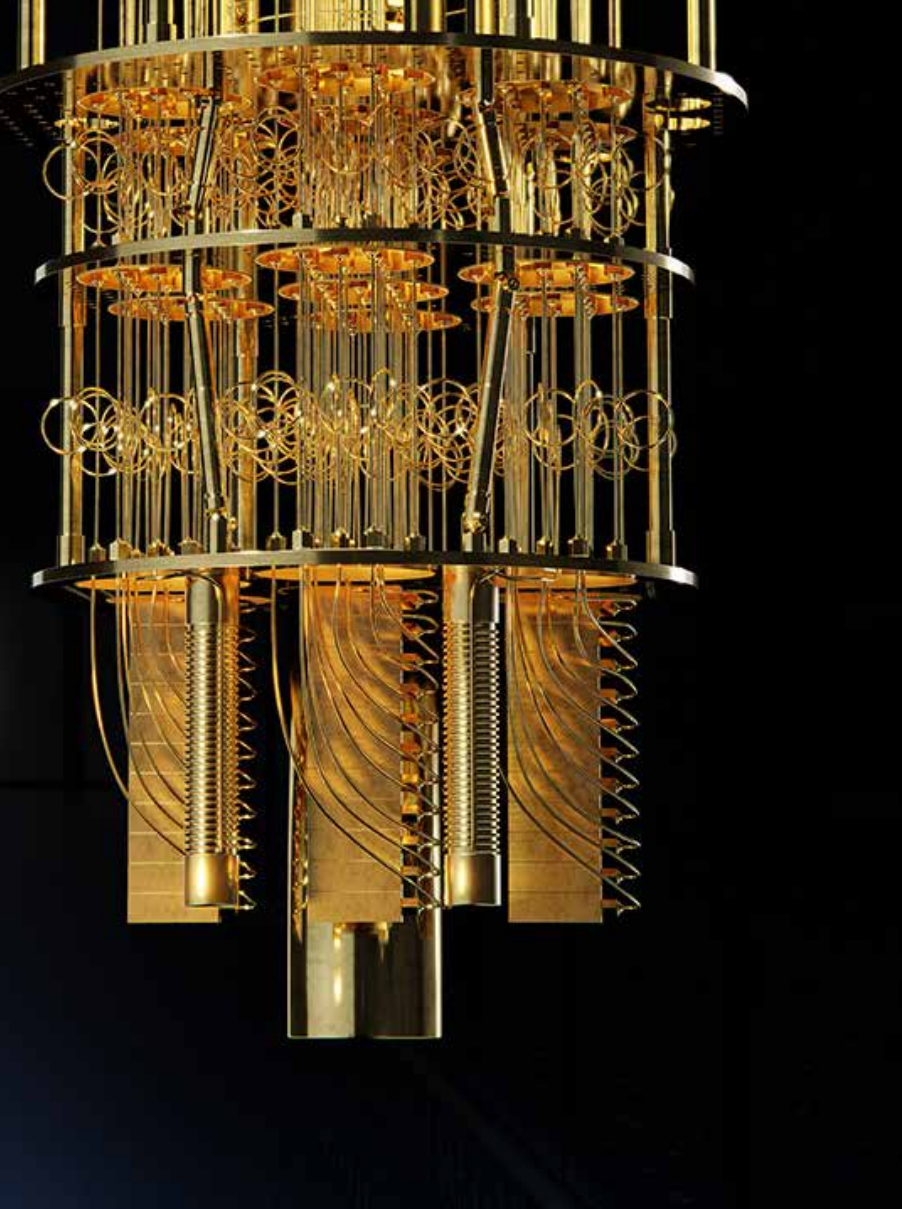


QUANTUM – AUS DEM RECHENZENTRUM IN DEN ALLTAG

Das Leibniz-Rechenzentrum installiert Quantencomputer und bietet erste Quanten-Services: Ministerpräsident Dr. Markus Söder und Wissenschaftsminister Bernd Sibler eröffneten mit dem LRZ QIC einen Dreh- und Angelpunkt für die IT-Technologien der Zukunft.

Zutaten für Medikamente entdecken, Transportwege berechnen, Versicherungsrisiken durchkalkulieren, Naturphänomene modellieren: Quantencomputer sollen Aufgaben lösen, die Supercomputer noch überfordern oder an denen sie scheitern. Diese Aussichten wurden 2021 am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) konkret: „Wir starten mit den ersten Services rund ums Quantencomputing“, berichtet Prof. Dieter Kranzlmüller, Leiter des Rechenzentrums bei der Eröffnung des Quantum Integration Centres (kurz QIC). „Als IT-Dienstleister stellen wir Forschenden diese Technologie so zu Verfügung, dass sie damit ihre Projekte vorantreiben können.“

Noch steckt Quantencomputing in den Kinderschuhen, Rechenzentren wie das LRZ ermöglichen die Nutzung – und treiben die Zukunftstechnologie voran: „Wir wissen nicht, welche Entwicklungspfade das Quantencomputing zur Marktreife bringen“, erklärt Laura Schulz, Leiterin Strategie und Partnerschaften.



QUANTENPROZESSOREN MIT SUPERCOMPUTERN STEUERN

Im QIC bündelt das LRZ seine Quanten-Aktivitäten. Forschende sowie Ministerpräsident Dr. Markus Söder und Wissenschaftsminister Bernd Sibler waren dabei, als mit dem QIC eine neue Ära startete: „Wir haben bereits erste Quanten-Hardware aufgebaut und beschäftigen uns außerdem mit der Frage, ob und wie sich Quanten- mit Supercomputing kombinieren lässt“, so Kranzlmüller. Via Cloud können Forschende seit 2019 an einem Quantensimulator mit 42 Qubits von Intel sowie seit diesem Jahr mit einer Quantum Learning Machine (QLM) von Atos arbeiten.

Mit Partner:innen aus Forschung und Industrie wird das LRZ zudem Komponenten optimieren und in seine High-Performance Computer (HPC) integrieren. Programmierbare Quantencomputer werden erst um 2030 erwartet. Quanten-Bits oder Qubits herzustellen und Prozessoren zu bauen, ist aufwändig. Dafür wird mit Photonen, Ionenfallen, Supraleitern experimentiert. Kleinste Erschütterungen oder Staub bringen sie aus dem Takt. Damit sie Rechenleistung aufbauen, werden sie vor Außenwirkungen geschützt und oft auf minus 273 Grad Celsius gekühlt. „Die ersten Quantenprozessoren benötigen eine bewährte Rechnerinfrastruktur mit Steuerung, um Software und Daten aufzuspielen oder Ergebnisse zu kontrollieren“, sagt Professor Martin Schulz, Mitglied des Direktoriums des LRZ.



FORSCHUNGSPROJEKTE ZUM QUANTENCOMPUTING

Ausgewählte Projekte, an denen sich das LRZ beteiligt hat:

- **Digital-analoge Quantencomputer, DAQC:**
Aufbau eines digital-analogen Prozessors mit Steuerungsmechanismus als Beschleuniger für HPC. Fördergeber: BMBF
- **Quantencomputer-Erweiterung durch Exascale-HPC, Q-EXA:**
Forschungskauf eines Quantenprozessors mit mindestens 20 Qubits von IQM. Fördergeber: BMBF
- **Quantum-enabling Services und Tools für industrielle Anwendungen, QuaST:**
Software und Plattformen für Quantentechnologien, außerdem Qualifizierungsservices. Fördergeber: HTA, MQV
- **Bayerisches Kompetenzzentrum für Quantensecurity und Data Science, BayQS:**
Quanten-Software, Weiterbildung. Fördergeber: HTA, MQV



**Wir ermöglichen Forschung
in neuen Dimensionen
mit einem Quanten-District
in Bayern.**

Dr. Markus Söder,
Ministerpräsident Bayern



Das LRZ plant zunächst den Kauf eines Kryostaten, eines Kühlgerätes für tiefste Temperaturen, um mit dem Startup IQM, Chiphersteller Infineon und weiteren Forschungspartnern Quantenprozessoren zu optimieren.

Die Bewegungen der Qubits machen Probleme. Kälte stellt sie ruhig, doch sie bleiben nur kurz stabil und kontrollierbar. Für zuverlässige Rechenkraft müsste die Anzahl der Qubits erhöht werden. Die Gruppe um IQM und LRZ will die Technik von Quanten-Annealern – einfache Rechner für spezielle Aufgaben – mit denen von universellen Quantencomputern kombinieren. „Der Ansatz des Digital-Analogen Quantencomputings ergänzt die Flexibilität von digitalen Schaltkreisen mit der Robustheit analoger Rechenblöcke“, so Schulz. „So können die Anzahl der Qubits reduziert und die Fehlerkorrektur verbessert werden.“ Bis 2025 werden schrittweise Prozessoren mit 5, 20 und 54 Qubits samt Steuerelektronik entstehen.

München soll mit Mitteln aus der Hightech Agenda Bayern einer der führenden Standorte im Bereich Quantentechnologien werden. Das Quantum Integration Centre ist der neuartige Prototyp eines zukunftsweisenden Experimentierlabors zur Verbindung von Quanten- und Supercomputing.

Bernd Sibler, Staatsminister für
Wissenschaft und Kunst in Bayern (2021)



NEUES DENKEN, NEUES PROGRAMMIEREN

Werden Quanten- durch Supercomputer nutzbar, könnten diese umgekehrt das HPC beschleunigen. Aktuell sorgen Grafikprozessoren (GPU) und andere Beschleuniger für Exascale-Leistungen. „Quantencomputing könnte ein nächster Entwicklungsschritt für das Hochleistungsrechnen werden“, sagt Informatik-Professor Schulz. „Wahrscheinlich wird es in Zukunft nicht mehr nur eine Computertechnologie für alle Bedürfnisse geben, sondern das Zusammenspiel von HPC, Künstlicher Intelligenz und Quantum wird für höhere Leistungen sorgen.“ Aber welche Schnittstellen verbinden binäre Rechner mit Quanten-Systemen? Und lassen sich Algorithmen aus dem Super- fürs Quantencomputing anpassen? Auf der Suche nach Antworten kooperieren Unternehmen mit Startups, Universitäten, Forschungseinrichtungen. „Alle tauschen sich aus, das ist ein faszinierender Spirit“, beobachtet LRZ-Strategin Schulz. „Das QIC erfährt in dieser Community, wie Technologie und Dienstleistungen verbessert werden können.“ Im Co-Design wird das Computing der Zukunft entwickelt. Das LRZ hat damit gute Erfahrungen gesammelt: Mit Partnern wie Intel, Lenovo, Megware, NVIDIA oder Fujitsu entwickelte es energie-effiziente Technik, optimierte GPU und smarte Systeme.

Quantum verändert das Denken, das gewohnt binäre Wenn-Dann entwickelt sich zum Sowohl-als-Auch. Die Quantum Learning Machine von Atos ist dafür gedacht, sich in die neue Technik einzudenken. Das LRZ setzt zudem auf Qualifizierung und Netzwerke: Seit 2019 bringt das Bavarian Quantumcomputing eXchange (BQCX.de) Quanten-Enthusiasten zusammen. Studierende und Forscher:innen aus aller Welt arbeiten gemeinsam an technischen Fragen. LRZ-Strategin Schulz fühlt sich an die Anfangszeiten des HPC erinnert: „HPC hat in den letzten 30, 40 Jahren die Möglichkeiten für Forschung erweitert, jetzt verspricht Quantencomputing Möglichkeiten, die wir noch nicht alle kennen. Sicher ist – wir werden voraussichtlich bald wieder einen vergleichbaren Wissenssprung erleben.“



VIELFALT INS SYSTEM BRINGEN

DIE AUTOREN

Das Positionspapier zur Zukunft des HPC findet sich online. Es wurde im Team erarbeitet von:

- Prof. Dr. Martin Schulz: Inhaber des Lehrstuhls Rechnerarchitekturen und parallele Systeme der Technischen Universität München (TUM) sowie Mitglied des LRZ-Direktoriums.
- Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller: Leiter des LRZ und Professor am Lehrstuhl für Kommunikationssysteme und Systemprogrammierung der LMU.
- Laura Brandon Schulz: Leiterin Quantencomputing und -Technologien am LRZ, außerdem für strategische Ausrichtung und Kooperationen zuständig.
- Dr. Josef Weidendorfer: Leiter Future Computing am LRZ sowie Privatdozent für Informatik der TUM.
- Prof. Dr.-Ing. Carsten Trinitis: Inhaber der Professur für Computerarchitektur und Betriebssysteme am TUM Campus Heilbronn, Leiter der Forschungsgruppe parallele und verteilte Rechnerarchitekturen der TUM.



Das High Performance Computing (HPC) befindet sich an einem Wendepunkt. Allzweck-Architekturen stoßen in Bezug auf Geschwindigkeit und Energiebedarf an ihre Grenzen. Außerdem drängen andere Nutzungskreise mit neuen Wünschen an die Supercomputer. Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) planen sie daher ein integriertes System, das in jedem Rechenkern Vielfalt beinhaltet. Vier Thesen zur Zukunft des Supercomputings:

THESE 1:

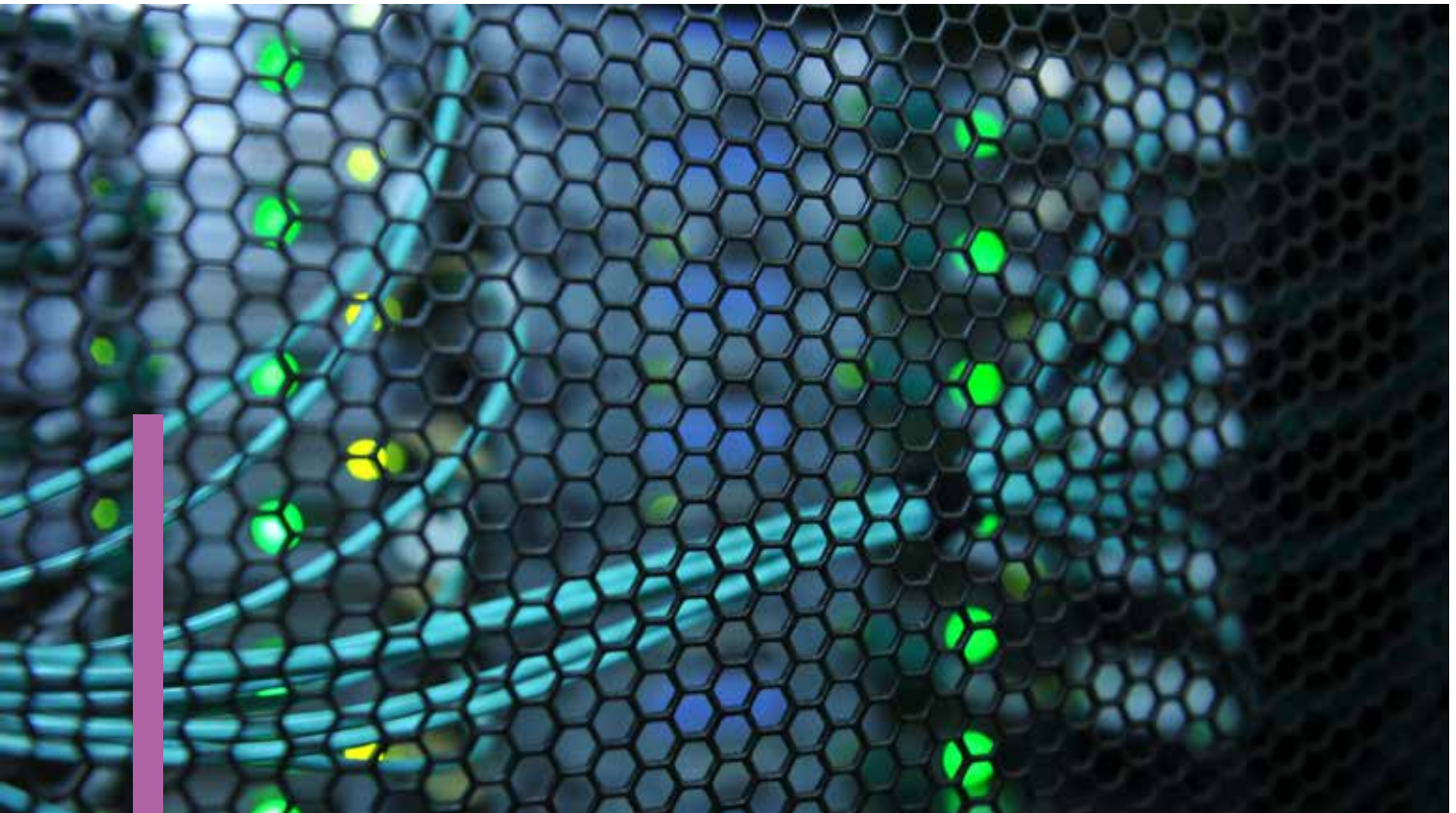
MEHR LEISTUNG PRO WATT IST NUR DURCH ÄNDERUNGEN IN DER SYSTEMARCHITEKTUR ZU ERREICHEN.

Immer mehr Transistoren auf immer kleineren Prozessoren: Diese Erfolgsformel zur Leistungssteigerung von Computern funktioniert nicht mehr. Der Energiebedarf reglementiert das HPC, er ist Kostenfaktor, zudem beeinflussen Energieschwankungen und Transformatorenkapazität den Aufbau parallelisierter Systeme. Spezialisierte Komponenten zeigen Auswege: Mit ihnen kann das verfügbare Silizium bei stagnierenden Frequenzen und innerhalb begrenzter Energiebänder mehr Leistung erbringen. Rücken Speicher- und Rechenkapazitäten zudem näher zusammen, kann auch der Energiebedarf der Datenbewegung sinken. Außerdem lassen sich so Arbeitslasten diversifizieren, können etwa Data-Analytics-Workflows für Künstliche Intelligenz aufgebaut oder Quantenprozessoren eingefügt werden.

THESE 2:

ALLZWECK-RECHENKERNE WERDEN DURCH SPEZIALISIERTE KOMPONENTEN ERGÄNZT.

Die Forderung nach Energieeffizienz sowie neue Aufgaben für Supercomputer fordern die Ergänzung von Allzweck-Rechenkernen durch spezialisiertere Prozessoren und Beschleuniger. Wir werden mehr Kerne sehen, die diverse Komponenten wie Field Programmable Gate Arrays (FPGA), Graphics Processing Units (GPU), Tensor Cores, Inference Engines bis hin zu Quantenprozessoren in sich vereinen. So entstehen Möglichkeiten, spezielle Aufgaben mit passender Technik zu lösen und Berechnungen schnell und energie-



effizient zu erledigen. Im Gegensatz zu modular aufgebauten Höchstleistungsrechnern vereinen integrierte, heterogene Systeme mehrere spezialisierte Technologien auf einem einzigen Knoten, während das Gesamtsystem eine homogene Ansammlung von weitgehend identischen Knoten bietet.

THESE 3:

INTEGRIERTE SYSTEME FORDERN EIN DYNAMISCHES MANAGEMENT UND SYSTEMATISCHES MONITORING.

Integrierte Systeme werden aus denselben Typen heterogener Rechenknoten aufgebaut. Das vereinfacht zwar die Ausführung einer einzelnen Anwendung, wird aber gleichzeitig zu leerlaufenden Recheneinheiten führen. Das macht eine dynamische Organisation von Auslastung und Rechenressourcen notwendig und diese wiederum die stete Kontrolle des Systems und seines Umgangs mit Anwendungen. Damit Rechen- und Energie-Ressourcen dynamisch eingeteilt werden können und Energie zu den am meisten benötigten Komponenten fließt, sammelt ein Monitoringsystem Daten, analysiert diese mit Methoden der KI und steuert danach den Energiebedarf und die Auslastung des Supercomputers.

THESE 4:

INTEGRIERTE SYSTEME BENÖTIGEN INNOVATIVE, FLEXIBLE PROGRAMMIERUMGEBUNGEN.

Rechenkerne, die Vielfalt in sich vereinen, brauchen eine Systemsoftware und Programmierumgebung, mit der einerseits das System und seine Komponenten auslastet, andererseits spezifische Anwendungen entwickelt werden können. Ein solcher Software-Stack bricht mit Dogmen im HPC: Bislang führte ein Knoten einen einzigen Job aus. Mit Hilfe von Virtualisierung und Containern können die unterschiedlichen Rechenressourcen eines Knotens verteilt und verschiedenen Aufträgen zugewiesen werden. Das dynamische Hinzufügen und Entfernen von Verarbeitungselementen oder Knoten beim Verarbeiten von Anwendungen führt zu einer effizienteren Nutzung des Gesamtsystems und zu weniger ungenutzten Ressourcen. Um zudem Leistung und Energie in einem solchen System zu verwalten, wird eine kombinierte Hardware-, Firmware-, Softwarelösung benötigt, die auch den Strom dorthin lenkt, wo er benötigt wird, und die die Gesamtleistung begrenzen kann.



Dr.
Antonio Parodi

ES GEHT AUCH UM GLAUBWÜRDIGKEIT & TRANSPARENZ



Extreme Wetterlagen vorhersagen und Schutzmaßnahmen treffen: An den Supercomputern des Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) simuliert ein Forschungsteam um den Umweltingenieur Dr. Antonio Parodi Wetterszenarien für Italien und Europa. Diese Datensätze sowie die Informationen, auf denen sie beruhen, finden sich im Data Storage Archive (DSA) und sind dort öffentlich zugänglich: „Wir hoffen“, so Parodi, „dass sie äußerst wertvoll für die Rekonstruktion und das Verständnis von Katastrophenereignissen sind, aber auch im Alltag nutzen.“

Welche Daten archivieren Sie über das DSA des LRZ?

Dr. Antonio Parodi: Wir archivieren Daten von meteorologischen Szenarien. Mit diesen Simulationen in hoher Auflösung, die bei europäischen und italienischen Projekten entstanden, untersuchen wir extreme Wettersituationen im aktuellen und künftigen Klima. Zuletzt simulierten wir am SuperMUC-NG historische Extremwetterereignisse mit neuen Konzepten, indem wir für die Modellierung Messdaten aus Radar- und In-situ-Situationen kombinierten. Damit versuchen wir nun Sturzfluten und ähnliche Phänomene so genau wie möglich vorherzusagen, was wiederum einen wichtigen Beitrag für Katastrophenschutzanwendungen darstellt. In unserem aktuellen Projekt berechnen wir eine sehr hoch aufgelöste Rekonstruktion des europäischen Klimas der letzten 40 Jahre mit vielen meteorologischen Variablen. Sie basiert auf modernen Modellen des Europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersage, hat eine Auflösung von etwa 30 Kilometern und ermöglicht damit die Berücksichtigung regionaler Ereignisse. Ein Hochwasser in Bad Tölz könnte damit von einem in Wolfratshausen unterschieden werden, was bisher nicht funktionierte. Wir hoffen, dass diese Daten äußerst wertvoll für die Rekonstruktion und das Verständnis von Katastrophenereignissen sind, aber auch im Alltag nutzen, etwa in der Landwirtschaft oder bei der Planung von Anlagen zur Produktion erneuerbarer Energien.

Wollen Sie diese Daten öffentlich zugänglich machen?

Parodi: Sicher, insbesondere die neuen Daten aus dem aktuellen Projekt. Für diesen interessanten und hochwertigen Datensatz, der ein größeres Publikum anspricht, haben wir 10 Millionen CPU-Stunden gerechnet.

Wer könnte und sollte diese Daten nutzen, für welche Forschungsfragen könnten sie interessant sein?

Parodi: Diese Informationen werden hoffentlich auf großes Interesse in der meteorologischen Modellierungsgemeinschaft stoßen. Die Rekonstruktion einer historischen Wetterperiode mit feiner räumlicher und zeitlicher Auflösung ermöglicht viele weitere Studien über Extremwetterlagen wie etwa Hitzewellen, Dürren, Überschwemmungen, Stürme. Andere Wissenschaftler können mit unseren Daten Wetterkatastrophen vor Ort analysieren und Strategien entwickeln, wie sie verhindert werden können. Techniker wiederum können mit Hilfe der Windstatistiken der letzten Jahrzehnte verstehen, wo eine Windkraftanlage am besten platziert werden sollte.

Wie wichtig ist es in der Wissenschaft, dass Forschungsdaten öffentlich zugänglich sind?

Parodi: Wow, das ist wirklich eine philosophische Frage. Bei der Veröffentlichung von Daten geht es nicht nur darum, sie anderen Forscher:innen und Wissenschaftler:innen zur Verfügung zu stellen. Es geht auch um Glaubwürdigkeit und Transparenz, also um eine reproduzierbare, nachvollziehbare Forschung, die heutzutage sehr wichtig ist.



WETTERMODELLE UND PROGNOSEN

Supercomputing of Extreme Natural Events oder kurz: SCENE ist ein Forschungsprojekt, für das die CIMA Research Foundation mit dem LRZ zusammenarbeitet. Aus Satelliten- und anderen Klimadaten wurden verschiedene Modelle berechnet, mit denen sich Extremwetter-Lagen vorhersagen und deren Folgen bewerten lassen. Im Report ab S. 194.



FORSCHUNGSDATEN SPEICHERN UND WIEDER- FINDEN

Supercomputing bringt große Datensätze hervor: Das Leibniz-Rechenzentrum hat dafür flexible Speichersysteme aufgebaut, die das Datenmanagement und vor allem die Kooperationsmöglichkeiten verbessern

Sturzfluten, Hagelschlag, Hitzewellen, Dürre: Um die Auswirkungen der Erderwärmung auf das Wetter aufzuzeigen, simulierten Wissenschaftler:innen der CIMA Research Foundation – ein internationales Zentrum für das Monitoring von Umweltphänomenen in Savona/Italien – aus europäischen Unwetter-Daten der letzten 40 Jahre am SuperMUC-NG diverse Szenarien. Die Datensätze, Messwerte und Simulationen mit einem Umfang von mehreren Petabyte, lagern jetzt im neuen Data Science Storage (DSS), bald im Data Science Archive (DSA) am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) – und werden daraus für Forschende aus aller Welt zugänglich gemacht: „Die Rekonstruktion einer historischen Wetterperiode mit feiner räumlicher und zeitlicher Auflösung ermöglicht viele weitere Studien über Extremwetterlagen wie etwa Hitzewellen, Dürren, Überschwemmungen, Stürme“, sagt der CIMA-Ingenieur Dr. Antonio Parodi dazu. Die Simulationen könnten Forschende aus der Meteorologie interessieren, auch Forst- und Agrar- sowie Ingenieurwissenschaften könnten daraus Erkenntnisse ziehen, wenn es um die Planung von Wind- und Solaranlagen oder den Wandel in der Landwirtschaft geht.

GRÖSSEN- VERHÄLTNISSE

1 Petabyte sind rund eine Million Gigabyte. Etwa 500 Textseiten ergeben ein Gigabyte, ein hochauflösender Film (HD-Format) in Spielfilmlänge benötigt Speicherplatz von etwa 2 bis 4 Gigabyte.



TECHNIK DES DSS/DSA

Verschiedene Speicherbausteine werden mit Hilfe der IBM-Software Spectrum Scale zu einer virtuellen Ablage zusammengeschlossen. Ein Highspeed-Netz sorgt für Verbindungen zwischen Speicher und Computer, zwei Bandbibliotheken ergänzen das DSS um das Archiv. Dienste wie Globus Online der University of Chicago (Data Transfer, Sharing) sowie der eigens entwickelte DSS Web Service statten die LRZ-Speichersysteme mit praktischen Werkzeugen fürs Management von Daten aus.



MEHR WISSEN ZIEHEN AUS FORSCHUNGSDATEN

In einmal erhobenen Daten steckt deutlich mehr Wissen als für ein geplantes Forschungsprojekt gebraucht wird. Der beste Grund, Forschungsergebnisse und Simulationen zu archivieren – und eine weitere Nutzung zugänglich zu machen. So können sie neu ergründet oder angereichert werden, das erspart außerdem Wiederholungen von komplexen Experimenten oder aufwändigen Messungen. Die Archivierung sorgt für Transparenz und ermöglicht die Überprüfung von Ergebnissen. Voraussetzung dafür sind flexible Speicher und geschickte Archivierungsmethoden: „Das DSS wurde für sehr große Datenmengen von vielen Petabytes entwickelt und speichert diese so, dass sie an allen Computer-Ressourcen des LRZ zugänglich sind“, erläutert Stephan Peinkofer, verantwortlich für die Speicherinfrastrukturen am LRZ. „Über ein hochperformantes, auf Wide Area Networks oder WAN optimiertes Übertragungsprotokoll können Wissenschaftler:innen rund um den Globus online darauf zugreifen.“ So vereinfacht das DSS das Management von Daten, deren Austausch zwischen CoolMUC, SuperMUC-NG und den LRZ-Systemen für Künstliche Intelligenz, und es verbessert die Kooperation von Forschenden.

Dient das DSS als kurzfristige virtuelle Ablage mit schnellen Zugriffsmöglichkeiten, werden Datensätze im DSA langfristig und mindestens zehn Jahre gesichert. Die Sponsoren von öffentlich finanzierten Aufgaben verlangen inzwischen solche Haltefristen – und außerdem die Veröffentlichung: Parodi und sein Team sind die ersten Anwender:innen, die diese neue Funktion des DSA, die gerade ausgebaut wird (s. Interview vorhergehende Seite). „Das DSA ist für Wissenschaftler:innen gemacht, die Daten von unseren Computern nicht in ein

übliches Forschungsdaten-Repository wie die von Universitätsbibliotheken bewegen können, weil die Datenmengen dafür zu groß sind“, sagt Dr. Stephan Hachinger, Leiter des Forschungsteams am LRZ.

WISSEN ARCHIVIEREN UND VERÖFFENTLICHEN

Zur langfristigen Archivierung werden die Datensätze aus dem DSS sicherheitshalber gleichzeitig in die Bandarchive von zwei Rechenzentren kopiert. Das DSA fasst derzeit bis zu 260 Petabyte, ist für etwa eine Milliarde Dateien ausgelegt und bei Bedarf ausbaubar. Das eigens entwickelte Webportal enthält die Beschreibung der Datensätze mit Schlagwörtern, was wiederum die Onlinerecherche und auch den Zugriff über einen Link vereinfacht: alles in allem ein praktischer Prozess zur Veröffentlichung.

Im Gegensatz zu den Datensätzen, die im DSS lagern, lassen sich die im DSA weder verändern, umbenennen noch löschen. Sie sind für mindestens zehn Jahre eingefroren, wie Spezialist:innen das ausdrücken. Das Auftauen indes dauert je nach Datenmenge ein paar Minuten oder sogar Stunden: Auf Klickbefehl wird die Datei aus dem Bandarchiv auf Festplatten zurückkopiert, kann dort wie gewohnt bearbeitet werden und nach dem Speichern als neue Version ins DSA zurück transferiert werden. „Das neue DSA ist deutlich flexibler“, erklärt Peinkofer. „Zuvor konnten Daten nur auf den Supercomputer zurückgeholt werden, jetzt auch auf andere Ressourcen.“ Die Möglichkeiten des DSA werden wachsen, weil das LRZ bereits an weiteren Werkzeugen für das Management von Forschungsdaten arbeitet, etwa einen Digital Object Identifier (DOI) zur besseren, standardisierten Kennzeichnung von Forschungsergebnissen.

KRÄFTE BÜNDELN FÜR MEHR EFFIZIENZ

**Aus einem Housing-Antrag wächst eine fruchtbare Partnerschaft:
Das Munich Center for Machine Learning und das Leibniz-Rechenzentrum
bauen die Technik rund um Künstliche Intelligenz gemeinsam auf und aus.**



IM PROFIL: DAS MCML

- Das Munich Center for Machine Learning (<https://mcml.ai>) wird im August 2018 von beiden Münchner Universitäten gegründet.
- Ziel ist die Grundlagenforschung rund um die Methoden der KI, die Nutzung von Daten sowie das Training von smarten Systemen. Außerdem werden Anwendungen für gesellschaftlich relevante Aufgaben entwickelt, etwa für Medizin, Recht, Verwaltung.
- Inzwischen arbeiten hier rund 50 Arbeitsgruppen aus der Informatik, Statistik sowie den Daten- und Geisteswissenschaften
- Das MCML ist außerdem eines von sechs Kompetenzzentren für KI des Bundes.
- Neben Förderungen des Bundes, finanzieren der Freistaat Bayern und die Stadt München das MCML.

Im Verein schneller, innovativer, flexibler: 2018, am Ende seines Gründungsjahres, konnte das Munich Center for Machine Learning, MCML, mehrere Millionen Euro in Hardware für Anwendungen Künstlicher Intelligenz (KI) investieren. Diese flossen letztlich in 64 professionelle Graphics Processing Units (GPU). Gruppirt in acht DGX-A100-Knoten von Technologieanbieter NVIDIA entstand ein hochleistungsfähiges Cluster für das Kompetenzzentrum für Künstliche Intelligenz (KI), das bis zu 40 Milliarden algebraischer AI-Operationen gleichzeitig ausführen kann und so eigene Standards in der Wissenschaft setzt. „Die acht DGX-Knoten haben eine maximale Leistungsaufnahme von 55 Kilowatt – das ist vergleichbar mit dem Bedarf mehrerer Einfamilienhäuser“, erklärt Dr. Nicolay Hammer, Leiter der Arbeitsgruppe Big Data und Artificial Intelligence (BDAI) am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). „So ein Cluster kann nicht über das Stromnetz einer Universität versorgt werden, dazu ist die professionelle Infrastruktur eines größeren Rechenzentrums nötig.“

ÄHNLICHE TECHNIK, MEHR MÖGLICHKEITEN

Aus den technischen Herausforderungen der Investition wuchs erst ein Housing-Antrag und daraus sofort eine Partnerschaft, von der alle Beteiligten profitierten und die der Forschung in München und Bayern viel Gewinn bringt. Gemeinsam mit dem MCML plante das LRZ das neue KI-Cluster. Die Gerätschaften sollten zwar im Garching Rechnerwürfel untergebracht, aber exklusiv von den MCML-Forschungsgruppen genutzt werden. Im Blick hatten die Partner dabei, dass auch die Klientel des LRZ immer öfter nach smarterer Technologie zur Verarbeitung von Forschungsdaten verlangt und zudem KI-Methoden allein schon wegen des explosiven Wachstums von Daten bald mehr Leistungsfähigkeit erfordern würden. Warum also das Cluster für das MCML nicht so aufbauen, dass es durch ebenfalls vorge-sehene Anschaffungen des LRZ erweitert werden kann?

Heute befindet sich im LRZ ein Cluster, das aus der Technischeinheit MUNICH.ai des MCML sowie dem fast identischen LRZ-eigenen BDAI-System besteht. Beide sind mit denselben schnellen Leitungen, Netzen und Workflows an die Speicherkapazitäten des LRZ verbunden und vereinfachen so die Nutzung und den Transfer dort lagernder Datensätze.



Wissenschaftler:innen speichern und veröffentlichen über das Data Storage System (DSS) und das Data Storage Archive (DSA) des LRZ nicht nur Forschungsergebnisse, sie haben hier Zugriff auf Daten weiterer Projekte und damit auf mehr Trainingsmaterial für maschinelles Lernen.

EINHEITLICHER ZUGANG, EFFIZIENTE RESSOURCEN-NUTZUNG

Beide KI-Cluster sind zudem durch ein einheitliches grafisches Webinterface und Management zugänglich. Forschende am MCML können dadurch die Leistung von MUNICH.ai mit Hilfe der LRZ-Systeme erweitern. Umgekehrt könnten auch LRZ-Nutzer:innen bei Bedarf beim MCML mehr KI-Power beantragen. „KI-Anwender:innen unterscheiden sich von klassischen High-Performance-Computing-Usern“, beobachtet das BDAI-Team des LRZ. „Sie wollen mit unterschiedlichen Versionen von grafischen Programmen, GPU-Software oder den

Bibliotheken der Technologie-Anbieter arbeiten. Statt selbst Algorithmen zu entwickeln, klicken sie sich öfter Funktionalitäten und Datenservices zusammen.“ Das einheitliche Webinterface öffnet daher auch die Container mit den Softwares und Tools beider Cluster.

„Die Zusammenarbeit mit dem MCML besteht nicht nur aus gemeinsamen Speichermöglichkeiten und einem schnellen Netz, wir arbeiten zusammen an der Entwicklung integrierter System- und Servicelösungen für den wachsenden Bedarf an KI-Technologien und deren Anwendungen in verschiedenen Forschungsdisziplinen“, beschreibt Hammer eine so fruchtbare wie effiziente Partnerschaft. Die könnte durchaus stilbildend auch für andere Computer-Ressourcen und weitere Hosting-Vereinbarungen werden: Gemeinsam kann eben mehr erreicht werden.



04

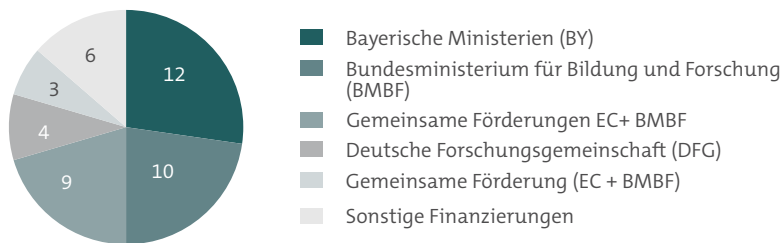
FORSCHUNG

Forschungsprojekte am LRZ	54
Big Data europaweit austauschen	56
Bilder aus dem Organismus	58
Ein sicherer Tresor für Gesundheitsdaten	60

ZURÜCK IN DIE ZUKUNFT DER IT

Um die IT-Dienste von morgen zu erforschen und bereits heute Lösungen für die künftigen Anforderungen aus der Wissenschaft zu entwickeln, arbeitet der Bereich Forschung des LRZ kontinuierlich mit Partnern in Europa und weltweit. Insgesamt 44 laufende Forschungsprojekte aus den Bereichen Umweltwissenschaften, Future Computing & Energieeffizienz, IT-Management und IT-Sicherheit, Forschungsdatenmanagement, Virtual Reality & Visualisierung, Big Data und KI sowie Quantencomputing brachten neue Ergebnisse.

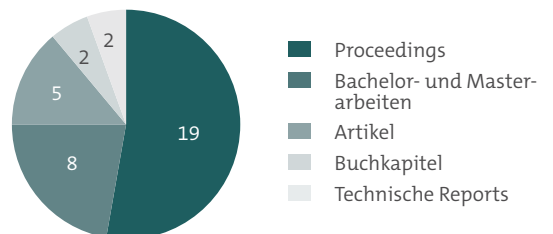
FÖRDERGEBER



PUBLIKATIONEN



36
Publikationen
gesamt

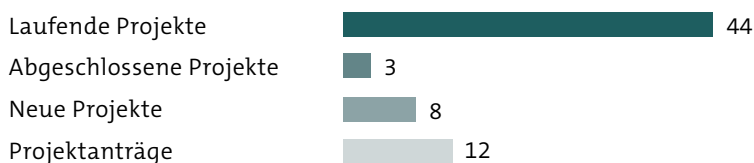


LAUFENDE PROJEKTE



44
Projekte
gesamt

FORSCHUNGSMANAGEMENT



Die Gesamtübersicht der Publikationen finden Sie in Kapitel 08.

FORSCHUNGSBEREICHE



1 Umweltwissenschaften



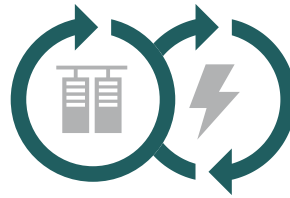
2 Infrastruktur



3 Big Data & KI



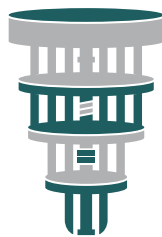
4 Forschungsdaten-Management



5 Future Computing & Energieeffizienz



6 Medizin



7 Quantum Computing



8 Visualisierung



9 IT-Management & IT-Sicherheit

1| AlpEnDAC II, BaysICS, CoCoRECS, ePIN, GEO.KW, Hydro-BITS, HiOS, K2I, Nutzwasser, VECMA, terrabyte, HyBBEX, LandKlif
 2| PRACE-6IP, SiVeGCS, InHPC-DE, DoSV, HLST, Bavarian Genome, terrabyte, Cluster Origins 3| K2I, EuroCC, DeToL, InHPC-DE, DigiMed Bayern, MCML, IGNITE ITN, Cluster Origins 4| AlpEnDAC II, Hydro-BITS, ePIN, LEXIS, NFDI4Ing, GHGA 5| ArKtik, DEEP-EST, DEEP-SEA, PRACE-6IP, REGALE, SiVeGCS 6| BayQS, DAQC, Q-Exa, Q-DESSI, QACI, Intel-QS 7| BayQS, DAQC, Q-Exa, Q-DESSI, QACI, Intel-QS 8| LediZ, Bridge of Knowledge, InHPC-DE 9| GEANT4-3, CONCORDIA

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

BIG DATA EUROPaweit AUSTAUSCHEN

Forschende sollen an Supercomputern rechnen, die schnell verfügbar sind und zu ihren Anforderungen passen. Für das LEXIS-Projekt und den Datenaustausch entwickelte das LRZ Technik.

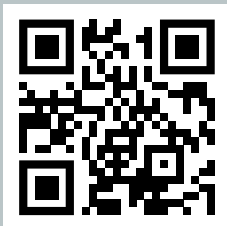


BESSER VERNETZT

Informationen zu LEXIS finden sich online hier.



Tools und Workflows zur grenzenlosen Datenverarbeitung stehen hier zur Verfügung.



Messwerte, Bilder, Statistiken, Analysen: Die Daten einer Studie beantworten meist viel mehr Fragen als die gestellten, und aufwändige Experimente sind zum Wiederholen zu teuer. Daher wird der Datenaustausch in Europa und damit die Analyse von Forschungsdaten an diversen Supercomputern wichtiger. „Forschende wollen ihre Daten auf unterschiedlichen Supercomputern auswerten und modellieren, möglichst automatisiert, einfach und unabhängig vom Standort“, beobachtet Stephan Hachinger, promovierter Physiker und Leiter des Teams Forschungsdaten-Management am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). Der Austausch von Daten ist im High Performance Computing (HPC) aber eine komplexe Aufgabe. Hier werden oft Tera- bis Petabyte an Daten verarbeitet, die sich „trotz schneller Netze nicht so einfach zwischen stark gesicherten, heterogenen Computersystemen hin- und herschieben lassen“, so Hachinger. Gefragt sind daher nutzerfreundliche Workflows zur Verarbeitung, Analyse und zum Austausch von Daten zwischen Standorten.

HPC- UND CLOUD-COMPUTING-PORTAL MIT NÜTZLICHEN TOOLS

Die Auswertung von Big Data, Workflows am Supercomputer sowie der Datenaustausch zwischen europäischen HPC-Zentren standen im Mittelpunkt des EU-Projekts „Large-Scale Execution for Industry and Society“, kurz LEXIS (Fördernummer: H2020 GA Nr. 825532). Koordiniert vom tschechischen nationalen Supercomputing-Zentrum IT4Innovations arbeiteten 17 Institute, Unternehmen und Rechenzentren, darunter das LRZ, an HPC- und Cloudtechnologie. Entstanden ist daraus eine Plattform, die Supercomputer in Europa vernetzt und den Datenfluss organisiert. LEXIS-Nutzer finden darauf Werkzeuge, die Analyse- und Simulationsprozesse vereinfachen und starten. Daten werden im Hintergrund für den jeweils nächsten Schritt vorbereitet und zur Verfügung gestellt. Damit können Unternehmen und Forschende in Tschechien Big Data verarbeiten, obwohl diese in Deutschland oder Italien gespeichert sind



und umgekehrt, über Europa verteilt können Gruppen zusammen an Datenprojekten arbeiten.

Beim Datenmanagement im LEXIS-System spielen FAIR-Prinzipien eine große Rolle. Danach sollen Forschungsdaten auffindbar (findable), erreichbar (accessible), interoperabel und wiederverwertbar (reusable) sein. Standardisierte Metadaten weisen deshalb darauf hin, was einzelne Datensätze enthalten, wie sie und mit welchen Programmen sie entstanden: „Innerhalb von LEXIS sind Daten gut recherchierbar, und es wird sofort ersichtlich, wie und wofür man sie weiter benutzen kann“, erläutert Hachinger. Zwar endete mit dem Jahr 2021 das Projekt, doch Portal und Plattform bleiben bestehen: Mit Partnerorganisationen aus den Bereichen Meteorologie, Geophysik, Polar- und Meeresforschung sowie Flugzeugtechnik entwickelt, testeten Unternehmen und Forschungsgruppen die Plattform und ihre Funktionen.

NEUE SERVICES FÜRS LRZ?

Das LRZ zieht positive Bilanz aus der Arbeit an LEXIS. Neben vereinfachten Prozessen und Tools entstanden mehrere Publikationen. Die Technik von LEXIS soll weiterentwickelt, Erfahrungen sollen in neue Forschungsprojekte einfließen. Im LRZ hoffen sie auf weitere Kooperationen mit LEXIS-Partner:innen. Und längerfristig soll auch das LRZ profitieren und mit Techniken seine Dienstleistungen ausweiten. „Dieses Projekt hat uns als Team weitergebracht“, sagt Hachinger. „Wir konnten viel über Cloud- und HPC-Technologien und Projektarbeit lernen, haben gesehen, wie weit wir kommen, wenn das Ziel klar ist und der Teamgeist stimmt.“

BILDER AUS DEM ORGANISMUS

Das Forschungsprojekt CompBioMed kombiniert Codes und Software und entwickelt so gemeinsam mit dem Leibniz-Rechenzentrum neue Werkzeuge zur Simulation und Visualisierung von Organen.



Wie die Visualisierung entstand und welche Tools dabei entwickelt wurden, sehen Sie in diesem Video:



Das ist eine Crux in der Medizin: Ärzt:innen können nicht nachschauen, wie und ob Organe funktionieren. Ihr Wissen beruht auf Erfahrung und meist auf Kurzaufnahmen aus Diagnosegeräten. Das soll sich ändern: Supercomputer simulieren und visualisieren Menschen, bauen an einem digitalen Zwilling: „Das Konzept kann als digitale Darstellung aller biophysikalischen Prozesse eines Menschen beschrieben werden und entsteht auf Basis konventioneller Bildgebungsverfahren“, heißt es beim europäischen Forschungsprojekt und Exzellenzzentrum CompBioMed. Seit 2016 arbeiten an diesem Ziel etwa 20 Institute und Supercomputing-Zentren. Sie entwickeln Techniken und Programme für die Digitalisierung von Medizin und Pharmakologie; mit Hilfe des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) wurden dabei Meilensteine erreicht: Mit dem LRZ-Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) gelang es, den Blutfluss im Unterarm zu visualisieren. „Die Herausforderung dabei ist, Daten zu modellieren und diese dann zu visualisieren“, sagt Multimedia-Spezialistin Elisabeth Mayer. „Dabei entstanden Datenmengen, die nur ein Supercomputer verarbeiten kann.“

DEN BLUTFLUSS BEOBACHTEN UND VERSTEHEN

Die Grundlage für die Innenansicht eines Unterarms liefert ein Lattice-Boltzmann-Algorithmus namens HemelB, den CompBioMed entwickelt hat. Er verarbeitete mehr als 230 Millionen Datenpunkte und 64 Zeiteinheiten, um darzustellen, mit welchem Druck Blut während eines Herzschlags durch die Arterien und Venen des Unterarms fließt. Pro Rechenschritt entstanden 7 Gigabyte Informationen, insgesamt 470 Gigabyte. Die berechneten Werte wurden mit dem Grafikprogramm OSPRay von Intel verarbeitet, dabei entstanden Tools und Workflows, mit denen sich der Blutfluss nun auch in anderen Körperteilen veranschaulichen lässt. Das zog Interesse an: Die Arbeit wurde für den „SC Scientific Visualization & Data Analytics Showcase“ nominiert, einem Wettbewerb der HPC-Konferenz Supercomputing 2021, und landete unter den besten sechs Visualisierungen der Welt. „Aus unserem Workflow können beliebige Bilder und Medien exportiert werden“, sagt Mayer. „Alles ist möglich – Grafik, Videoclip, Kinofilm oder eine dreidimensionale Ansicht für Virtuelle Realitäten.“ Ärzt:innen könnten in den Körper eintauchen, Funktionen besser verstehen, Behandlungen planen oder sogar ausprobieren.

DIE SUCHE NACH WIRKSTOFFEN BESCHLEUNIGEN

Große Datenmengen werden auch bei der Suche nach neuen Wirkstoffen für Medikamente von Supercomputern bewältigt. In diversen Forschungsarbeiten zu COVID-19 weist CompBioMed nach, wo das Virus angreifbar ist. Dieses Wissen half Substanzen aufspüren, die mit dem Virus reagieren – und vielleicht sogar Entwicklungszeiten für marktfähige Medikamente zu verkürzen: Zur Beschleunigung der Suche koppelte CompBioMed in einem mehrstufigen Prozess maschinelles Lernen mit Simulationstechniken der Molekulardynamik. SuperMUC-NG berechnete zunächst die Wirksamkeit von organischen und anorganischen Substanzen auf die Spikeproteine des Virus. Mit diesen Ergebnissen trainierten danach künstliche, neuronale Netze das Screening von Wirkstoffen. Und mit jedem kombinierten Analyseschritt wurden die Ergebnisse präziser und lagen schneller vor. In kürzester Zeit prüften SuperMUC-NG und sein Kollege Summit vom Oak Ridge National Laboratory in den USA Milliarden von Wirkstoffen: „Dieser hybride Ansatz aus Machine Learning und Simulation“, so eine Studie von ComBioMed, „hat das Potenzial, neue Pandemie-Medikamente in Pandemie-Geschwindigkeit bereitzustellen.“



ARCHITEKTIN VIRTUELLER WELTEN

„Wir machen Forschungsdaten leichter verständlich fürs Auge und Betrachtende“, beschreibt Elisabeth Mayer ihre Arbeit und die des V2C-Teams. Die Multimediasspezialistin konzentriert sich dabei auf die 3D-Modellierung, fotorealistische Abbildungen sowie die Programmierung von Interaktionsmöglichkeiten. Sie hat – nicht nur fürs LRZ – bereits fantastische Forschungspräsentationen im virtuellen Raum aufgebaut, kunsthistorisch bedeutsame Räume nachgebaut, Apps illustriert und mitentwickelt. Elisabeth will Brücken bauen zwischen Kunst und Technik, von Forschung zu Öffentlichkeit, ja, auch zwischen Frauen und Technik. „Ich habe meinen Platz am LRZ gefunden“, sagt sie. „Ich mache hier genau das, was ich immer wollte – VR, 3D-Visualisierungen, Wissenschaft unterstützen und Forschungsergebnisse einem breiten Publikum näherbringen.“

Ein Portrait von Elisabeth und ihrer Arbeit finden Sie hier:



EIN SICHERER TRESOR FÜR GESUNDHEITS- DATEN

**Digitalisierung hilft, das
Gesundheitswesen und
Therapien zu verbessern:
Das Leibniz-Rechenzentrum
entwickelt für diverse
Projekte Portale und
sichere Übertragungswege
für biomedizinische Daten.**

Die Medizin der Zukunft setzt auf diese vier P: Prädiktion (Prognose), Prävention, Personalisierung und Partizipation (Beteiligung). Und außerdem auf Daten. Denn aus menschlichem Erbgut lassen sich zwischenzeitlich Wahrscheinlichkeiten für Krankheiten herauslesen. Ärzte können zudem Therapien individuell auf Patient:innen anpassen, wenn sie Zugriff auf solche und mehr biomedizinische Daten bekommen. Wer schließlich weiß, dass Symptome wie Bluthochdruck oder Kreislaufprobleme auf erbliche Belastungen zurückzuführen sind, kann vorbeugen – etwa durch regelmäßige Kontrolle von Organen und Körperfunktionen, durch eine gesunde Lebensweise oder andere Vorsorgemaßnahmen. „Die P4-Medizin zielt auf eine ganzheitliche Gesundheitsversorgung“, sagt Peter Zinterhof, promovierter Informatiker und Koordinator von mehreren biomedizinischen (Forschungs-) Projekten am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ). „Sie baut auf Big Data und auf die Auswertung von Daten.“

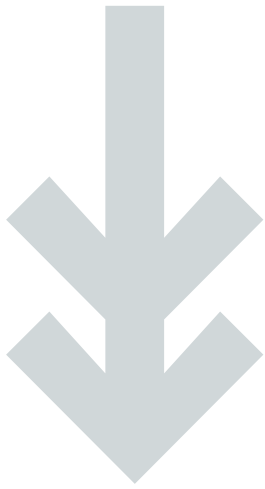
DIGITAL, VERNETZT UND EFFIZIENT

Die P4-Medizin steht im Mittelpunkt der Forschung. Bayern wertet sie gar als „Medizin der Zukunft“ und investiert knapp 25 Millionen Euro in sein „Leuchtturmprojekt DigiMed“: 2018 gestartet soll es die Anzahl von Herz- und Kreislauferkrankungen senken helfen, vor allem aber die Digitalisierung des Gesundheitssystems vorantreiben und für eine hochsichere, technische Infrastruktur zur Sammlung, Speicherung und Nutzung höchst sensibler, medizinischer Daten sorgen. Daher sind die Informatik-Institute der Münchner Universitäten und das LRZ an DigiMed beteiligt: „Wir sind für das Arbeitspaket 6 zuständig“, erklärt Zinterhof. „Dabei geht es um die Entwicklung eines zukunfts-

fähigen Pilotsystems zur sicheren Verarbeitung biomedizinischer Daten. Konkret konzeptionieren wir die Beschaffung, den Aufbau und den späteren Betrieb einer sicheren Daten-Cloud auf Basis von Open Source-Software.“ Der Tresor für Gesundheitsdaten soll zudem Software zur Verarbeitung und Verwaltung von Daten bereitstellen. Forschende erhalten zudem Zugang zu den Supercomputern des LRZ, um Daten mit Methoden Künstlicher Intelligenz auszuwerten und Analysewerkzeuge zu erarbeiten.

DigiMed bringt Spezialist:innen aus vielen gesellschaftlichen Bereichen zusammen: Neben den Fachdisziplinen Medizin, Pharmazie und Informatik sind außerdem die Theologie, Philosophie und Jura beteiligt, um Grundlagen für skalierbare Computertechnik und zukunftsfähige Regeln zur Erhebung, Nutzung und Auswertung der Daten zu erarbeiten. „Wir mussten erst eine gemeinsame Sprache finden, um den Bedarf der Kliniker zu verstehen und ihnen umgekehrt die Möglichkeiten der IT verständlich zu machen“, erzählt Zinterhof. In zahlreichen Workshops und Meetings wurden Begrifflichkeiten geklärt und notwendige technische Anforderungen oder juristisch-ethische Fragen. Mit Hilfe von Studien entstanden zeitgleich erste Datensätze für die





DigiMed-Cloud. Ähnlich breit wie das Projekt selbst sind auch die Aufgaben im LRZ ausgelegt: „Intern war es Priorität, das Computing-Konzept von DigiMed im ganzen LRZ zu verankern“, so Zinterhof. So arbeiten der Bereich Forschung, das Team Big Data und AI-Systeme sowie das Forschungsdaten-Management an DigiMed, zudem die Fachleute von den Datei- und Speichersystemen (DAT), vom IT-Infrastrukturbetrieb und Server (ITS) sowie von den Hoch- und Höchstleistungssystemen (HLS).

GRUNDLAGENWISSEN FÜR WEITERE DIENSTE

Die Hoffnungen, die auf DigiMed ruhen, sind hoch. Bei allen Beteiligten: Will Bayern damit das Fundament für ein vernetztes, digitales Gesundheitswesen legen, so rechnet das LRZ mit Erfahrungen und neuen Technologien für weitere Dienstleistungen und Projekte: „Das bei DigiMed entstehende Wissen kann als Blaupause für weitere Gesundheits- und Datenprojekte in Bayern dienen und wird die geplante Secure Cloud sicher erweitern“, meint Zinterhof. „Für das LRZ öffnen sich Möglichkeiten, Services zu entwickeln und vergleichbare Cloud-Instanzen in seinen Dienstleistungskatalog aufzunehmen.“ Auch die Daten von Bayern Genom und vom German Human Genom Archive (GHGA) benötigen besondere technische Fürsorge, und in Forschungsbereichen wie Chemie oder in den Umweltwissenschaften wächst ebenfalls der Bedarf an praktischen Datenwolken mit Analysetools.



Bavarian Genome

1000 Genome von Menschen mit seltenen Krankheiten entschlüsseln, um Diagnosen und Therapien zu ermöglichen: Das ist ein Ziel des Projektes Bavarian Genomes, ein weiteres der Aufbau von Online-Werkzeugen zur Sequenzierung und Analyse von DNA- und RNA-Daten, einer zentralen Datenbank für diese Informationen und die Vernetzung von 21 bayerischen Zentren für Seltene Erkrankungen (ZESE). Patient:innen sollen so schneller zu spezialisierten Ärzt:innen finden und sich über Behandlungen informieren können. Das LRZ baut dafür notwendige Datenspeicher auf und sorgt für kontrollierten, gesicherten Zugriff auf diese Daten.

Laufzeit: 2018 bis 2022

Mehr Information: www.bavarian-genomes.de/

Förderung: Bayerisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst

CompBioMed

Universitäten, Forschungsinstitute, Rechenzentren und Unternehmen erarbeiten bei CompBioMed computer-gestützte Untersuchungs-, Analyse- und Therapiemethoden für Pharmaforschung und Medizin. Der Fokus dieses internationalen Exzellenzclusters liegt auf einem „Virtual Human“: Ein digitales Modell des Menschen soll helfen, Körperfunktionen besser zu verstehen und die Medizin zu personalisieren. Das LRZ gehört zu den 16 Kern-Partnern von CompBioMed, sein Supercomputer unterstützte bislang die Erforschung von Corona und Impfstoffen, im Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung (V2C) entstanden Workflows und Software für die Visualisierung des Blutkreislaufs.

Laufzeit Phase 2: 2019 bis 2023

Mehr Information: www.compbiomed.eu

Förderung: EU Horizon 2020

DigiMed Bayern

DigiMed baut auf eine ethisch vertretbare, rechtskonforme, hochsichere und nachhaltige IT-Infrastruktur für eine zukunftsfähige Medizin. Ärzt:innen und Patient:innen sollen Zugriff auf Gesundheitsdaten und Informationen bekommen, damit sie Krankheiten prognostizieren und vermeiden, Behandlungen personalisieren und aktiv unterstützen können. Geplant sind Analyse-Tools für Gesundheitsdaten auf Basis von Künstlicher Intelligenz, Apps und Plattformen. Das LRZ konstruiert dafür ein Pilotsystem zur Verarbeitung von biomedizinischen Daten und außerdem eine eigens gesicherte Datencloud. Die Infrastruktur soll Beispiel geben für andere Projekte.

Laufzeit: 2018 bis 2024

Mehr Information: <https://www.digimed-bayern.de/>

Förderung: Bayerisches Staatsministerium für Gesundheit und Pflege

ePIN Bayern

Das Elektronische Pollen-Informationen-Netzwerk (ePIN) sammelt an acht Messstellen in Bayern Luftdaten, wertet mit Hilfe von Bilderkennung automatisiert aus, wie hoch darin die Konzentration an Blütenstaub ist. Erfasst werden acht Pflanzen, die Allergien verursachen. Das LRZ speichert diese Daten und macht sie für Öffentlichkeit und Wirtschaft zugänglich. Das ePIN ist das erste elektronische Pollen-Warnsystem seiner Art. Es wurde mit dem Zentrum für Allergie und Umwelt (ZAUM), Technische Universität München (TUM), dem Helmholtz-Zentrum sowie dem Landesamt für Gesundheit, Gebauer IT Consulting und Hund GmbH entwickelt und ist seit 2019 in Betrieb.

Mehr Information: <https://epin.lgl.bayern.de>

Förderung: Bayerisches Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit

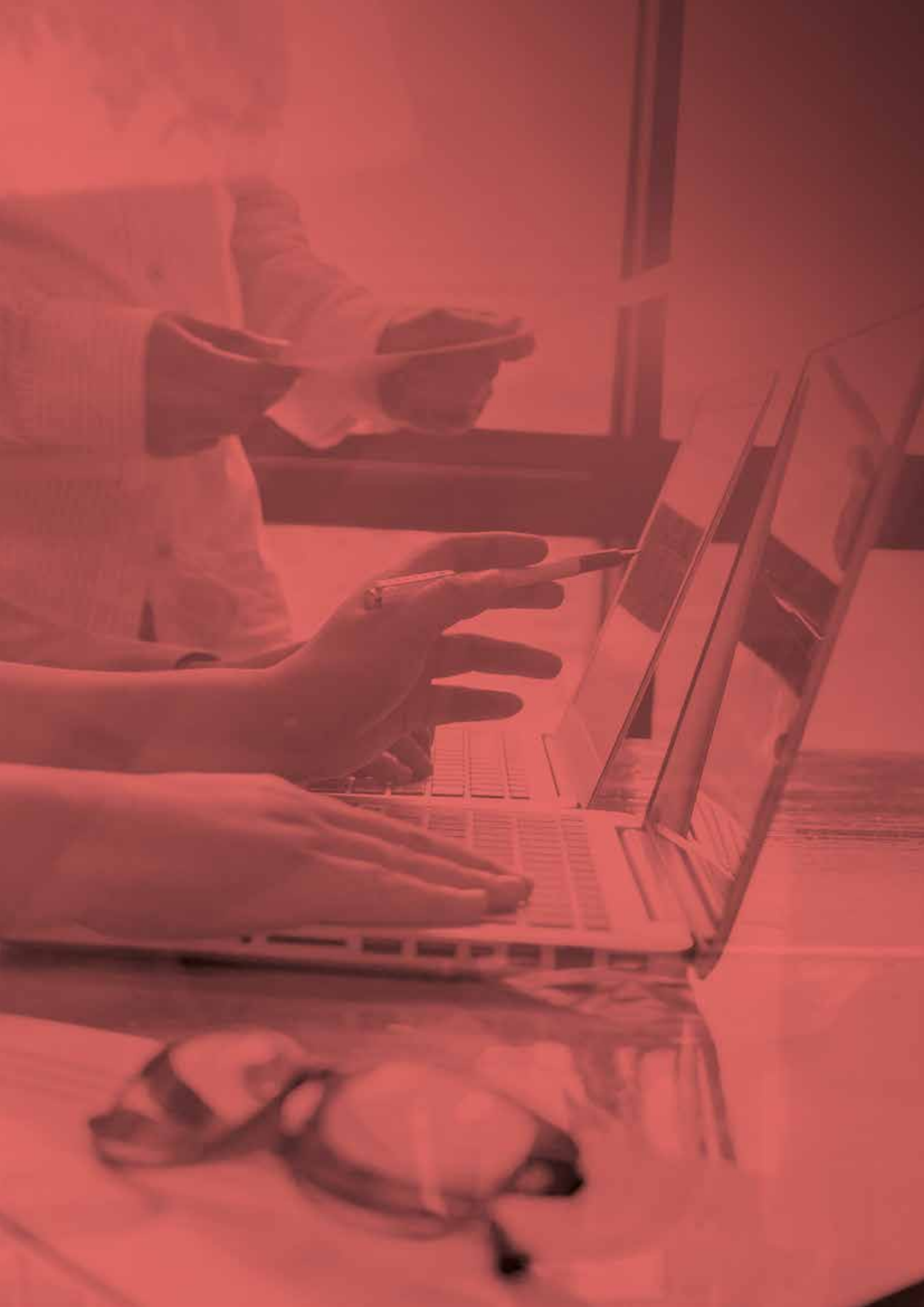
German Human Genome Phenome Archive

Im Erbgut stecken Hinweise auf viele Krankheiten. Das GHGA bringt Forschung und Gesundheitsversorgung zusammen. 21 Institutionen arbeiten an Werkzeugen und Datenbanken, mit denen Genom-Daten analysiert und für Forschung, Medizin oder Pharmazie aufbereitet werden. Das LRZ entwickelt mit Partner:innen Workflows und Technologien für den gesicherten Transfer und Austausch von anonymisierten, biomedizinischen Daten sowie für deren Management: Sie sollen leicht auffindbar und auswertbar werden. Das GHGA ist Teil der Nationalen Forschungsdaten-Infrastruktur e.V. (NFDI)

Laufzeit: 2020 bis 2025

Mehr Information: <https://www.ghga.de>

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft, NFDI-Programm



05

AUS- UND WEITERBILDUNG

Kurse im Überblick	66
Gut gemacht, SuperMUC-NG	68
Schulsausflug ans LRZ	70
Quantencomputing praktisch ausprobieren	72

LAND DER LERNER:INNEN

Zuverlässige, skalierbare und sichere IT-Dienste erfordern exzellentes und erfahrenes IT-Personal. Dafür stellen wir nicht nur hervorragend ausgebildete und erfahrene Fachkräfte ein, sondern sorgen für Fortbildungen und bilden im eigenen Haus aus. Über Initiativen wie Girls'Day oder mit der engagierten Teilnahme am Programm TUMjunior möchten wir frühzeitig das Interesse für IT-Technologie beim Nachwuchs wecken.

Aus- und Weiterbildung richtet sich bei uns aber nie nur nach intern. Mit unserem umfassenden Kursangebot bieten wir Forscher:innen ein breites Spektrum an

Weiterbildungsmöglichkeiten. Neben Kursen zu Programmiersprachen oder Anwendungssoftware waren 2021 Data Analytics, Deep Learning und KI äußerst nachgefragt. Rund 900 Teilnehmer:innen besuchten die 26 Online-Kurse. Eine Premiere in 2021: der erste Workshop im Bereich Quantencomputing, eine Einführung in die Quantum Learning Machine (QLM) von Atos.

Ohne unsere vielen Kooperationspartner lokal, regional und europaweit wäre das Programm in der Form nicht möglich. Ein herzliches Dankeschön an dieser Stelle. ■



TRAINING IN HPC UND FUTURE COMPUTING

QUICK FACTS



26 Kurse

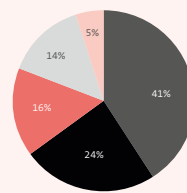


72 Kurstage



888 Teilnehmer:innen

THEMENGEBIETE HPC + FUTURE COMPUTING



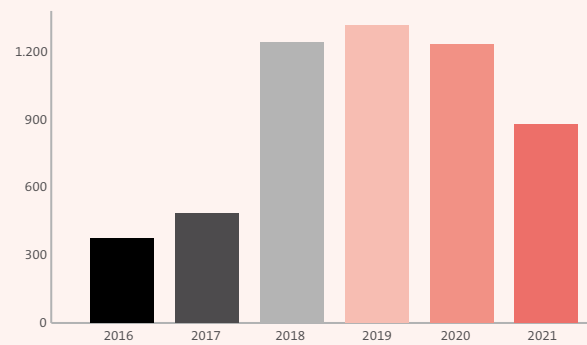
- Code Optimisation, GPU Programming, Parallel Programming, Programming Languages
- CFD Computational Fluid Dynamics
- LRZ-Systeme
- Deep Learning, Machine Learning, AI
- Data Analytics

TRAININGSPARTNER



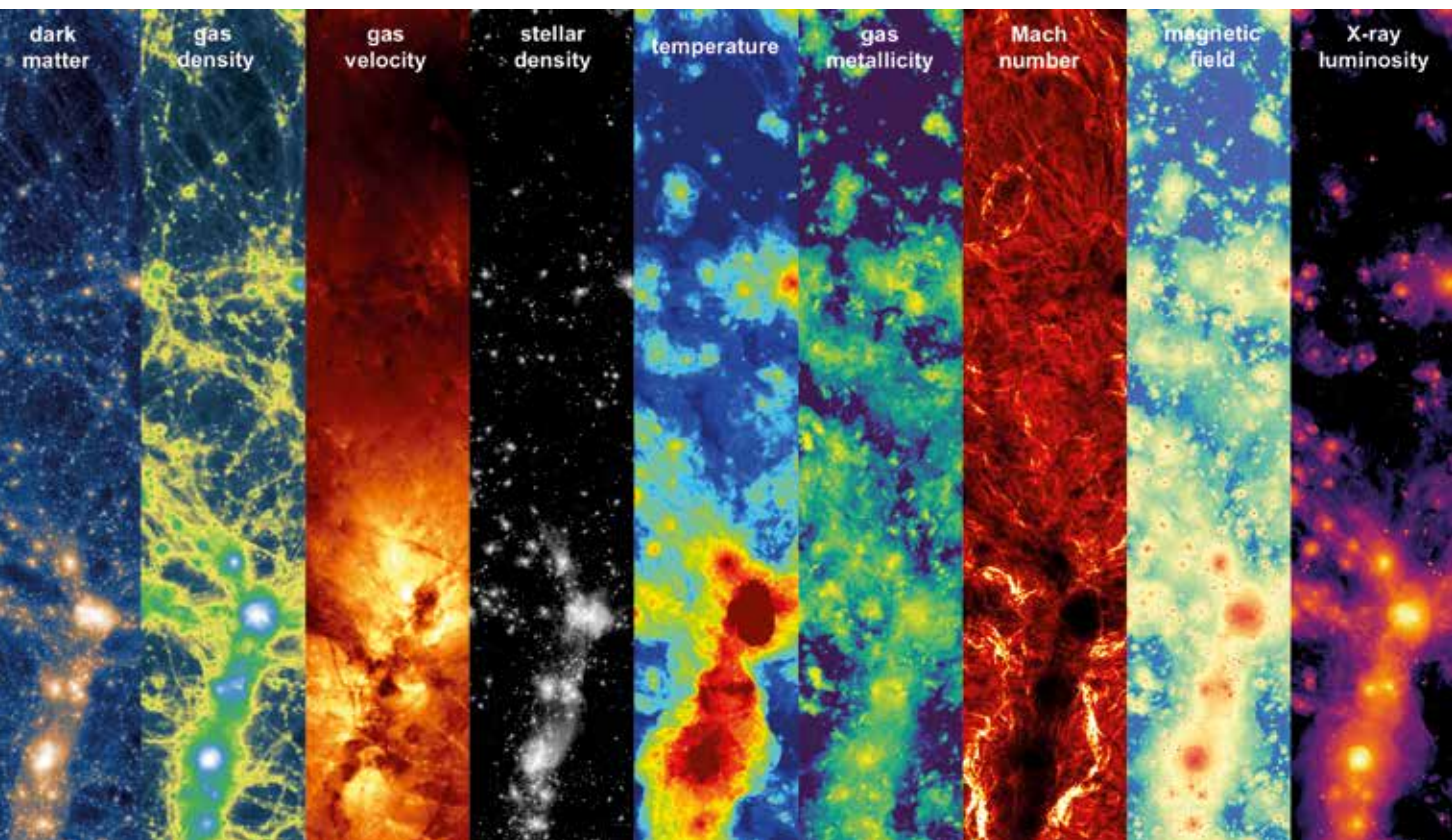
- CADFEM** CADFEM GmbH
- CSC** IT Center for Science Ltd., Finnland
- DU** NVIDIA Deep Learning Institute
Essential Data Science Training GmbH
- GCS** Gauss Centre for Supercomputing
- IT4I** IT4Innovations, Tschechien
- TUM** Technische Universität München
- PRACE** Partnership for Advanced Computing in Europe
- RRZE** Regionales Rechenzentrum Erlangen
- VI-HPS** Virtual Institute – High Productivity Supercomputing
- VSC** Vienna Scientific Cluster, TU Wien, Österreich

ENTWICKLUNG TEILNEHMER:INNEN HPC UND FUTURE COMPUTING-KURSE SEIT 2016



Eine Gesamtübersicht über alle Kurse 2021 finden Sie im Kapitel 8





GUT GEMACHT, SUPERMUC-NG

Alle zwei Jahre lädt das LRZ zum Status- und Ergebnis-Workshop: Forschende beschreiben dabei den Fortschritt ihrer Projekte, für die sie am Supercomputer rechnen. Eine Chance, die Leistungen von SuperMUC-NG kennenzulernen.

Meist im Sommer des zweiten Arbeitsjahres wird bilanziert: 2021 richtete das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) seinen Status- und Ergebnis-Workshop virtuell aus, und 160 Forschende aus aller Welt wollten wissen, wie sich der Supercomputer SuperMUC-NG bewährt hat. Seine Leistungen und vor allem die Forschungsergebnisse können sich sehen lassen: 2019 ging der Supercomputer mit seinen 311.040 Rechenkernen in Betrieb, bis Mitte 2021 arbeiteten sie fast 30 Milliarden Rechenstunden und rund 195.000 Jobs für insgesamt 840 Projekte ab. 17 der 26 Vorträge des Workshops sind als "LRZ Lectures on Demand" über den LRZ YouTube-Kanal verfügbar, im Sammelband „HPC in Science and Engineering“ finden sich noch mehr spannende Forschungsprojekte und Arbeitsproben von SuperMUC-NG.

Prof. Volker Springel vom Max-Planck-Institut für Astrophysik beschrieb anschaulich, wie sein Team mit ausgefeilten Modellierungstechniken eine Billion Teilchen und die Verteilung der Materie im Universum in einem Würfel mit einer Kantenlänge von mehreren Milliarden Lichtjahren nachzeichnete. Die Simulationen der mehrfach preisgekrönten Millennium Illustris TNG-Läufe erzeugten etwa ein Petabyte an Daten, sie rekonstruieren die Entwicklung von Milliarden von Galaxien und schwarzen Löchern seit dem Urknall und erklären nebenbei physikalische Prozesse, die auch auf der Erde zu beobachten sind: nur eine von vielen Präsentationen während des Workshops, die den SuperMUC-NG als leistungsfähige Maschine für die Wissenschaft zeigen.

SIMULIEREN UND VISUALISIEREN

Die Vielfalt der Präsentationen zeigt außerdem, dass der Bedarf an High Performanc Computing (HPC) nicht nur in der Astrophysik, sondern auch in vielen anderen Forschungsdisziplinen wächst. Vor allem Natur-, Ingenieur-, Bio- und Umweltwissenschaften, zunehmend auch Pharmazie und Medizin entdecken die Vorteile von Simulationen. So modellierten Forschende die Auswirkungen von Erdbeben, auch den Effekt von Emissionen des Straßen- und Luftverkehrs auf den Klimawandel und zeichneten zudem den Blutfluss in Venen nach: Zu diesem Projekt, das vom Forschungskonsortium CompBioMed geleitet wird, erarbeiteten die LRZ-Expert:innen auf dem Super-

MUC-NG noch faszinierende Bilder. Sie zeigen, wie das Blut während eines Herzschlags durch die Venen im Unterarm pulsiert. Mit dieser Visualisierung können Mediziner:innen besser lernen und verstehen.

Während des Status- und Ergebnisworkshops geht es nicht nur um Forschungsergebnisse, er ist auch eine Demonstration von Möglichkeiten, die das LRZ Forschenden und Studierenden bietet. Und natürlich wurde auch die Zukunft des Supercomputers und seiner Nachfolger diskutiert. Nach etwas mehr als zwei Jahren Betriebszeit wird SuperMUC-NG 2022 mit der Phase 2 erweitert. Das neue System wird 240 Knoten beinhalten, die Methoden der Künstlichen Intelligenz ermöglichen. Ein Infiniband-Netz sorgt dabei für den schnellen Datentransfer. Damit nicht genug: Neben Supercomputern finden Wissenschaftler:innen am LRZ auch diverse Cloud-Dienste, Werkzeuge für das nachhaltige Management von Forschungsdaten, weitere Ressourcen für smarte Anwendungen und neuerdings Technologien für das Quantencomputing. „Wir schätzen den persönlichen Austausch mit unseren Nutzer:innen beim Status- und Ergebnisworkshop sehr“, bilanziert Dr. Gerald Mathias, Leiter des Computational X Support Teams. „Dieses Jahr haben wir uns sehr über das hohe internationale Interesse an der digitalen Version gefreut. Definitiv ein Punkt, den wir bei der Organisation der nächsten Veranstaltung berücksichtigen werden.“

SIE WOLLEN WISSEN,...

wer den SuperMUC-NG nutzt und wozu? Hier findet sich die digitale Version von HPC in Science and Engineering:



Auf dem Youtube-Kanal des LRZ wiederum sind Vorträge aus dem Workshop und viel mehr zu sehen:



SCHULHAUSFLUG ANS LRZ

**Sehen, anfassen – und verstehen:
17 Schulklassen besuchen
SuperMUC-NG und hantieren mit
Computern. So wecken TUMjunior
und das Leibniz-Rechenzentrum
Neugier auf Technik.**

Nebensächlichkeiten sind spannend: Dass die Klebematten im Rechenwürfel am Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) schmatzen, wenn man darauf tritt, verleitet zum Hüpfen. Dann aber ist der SuperMUC-NG noch interessanter. „Haben Computer Gefühle“, fragt ein Junge und seine Freundin meint: „Hier gibt’s ja keine Tastatur, wie gibt man denn dem Supercomputer Befehle?“ Rainer Oesmann, Mitarbeiter am LRZ, hat allerdhand zu erklären. Der Mitarbeiter des LRZ führt Sechstklässler:innen durch den Rechnerwürfel. SuperMUC-NG, erzählt er, habe zwar einen Namen, zeige wenig Gefühle, manchmal aber ein paar Macken. Die Anweisungen kämen von Laptops in Universitäten über Datenleitungen an den Großrechner. Und schon stehen die Kinder mitten in der Hitze der Computergassen: „Wenn 311.040 Rechenknoten arbeiten, produzieren sie viel Wärme.“

MINT-FÄCHER PRAKTISCH ERLEBEN

Das LRZ macht Schule: Das Rechenzentrum beteiligt sich am Programm TUMjunior, das Interesse für mathematisch-naturwissenschaftliche Themen weckt. „TUMjunior wird vom bayerischen Kultusministerium unterstützt und richtet sich an Schüler:innen der Jahrgangsstufe 5 bis 10. Für jede Klasse stehen pro Schuljahr drei Exkursionen zu diversen Lernorten auf dem Plan“, erklärt Dr. Magdalena Kaden von der School of Social Science and Technology der Technischen Universität München (TUM). Mit Kolleg:innen koordiniert die Pädagogin unter der Leitung von Privatdozentin Dr. Jutta Möhringer TUMjunior: „Wenn Lernende Technik sehen, erleben und damit selbst umgehen, wächst die Motivation, sich intensiver damit zu beschäftigen.“

Neben dem LRZ stehen Orte wie das Experimentierlabor TUM-Lab im Deutschen Museum, die Mathematik-Ausstellung ix-quadrat und mehr zur Auswahl. Weil der Lehrplan für Natur & Technik in Klasse 6 erstmals Informatik nennt, besuchten 17 Klassen von Gymnasien aus Garching, Kirchheim und Unterföhring 2021 das LRZ. Unter Anleitung der Auszubildenden bauten sie Personal Computer auseinander, schauten sich Festplatten und Prozessoren näher an, lernten erste Linux-Befehle kennen. „Viel besser als in der Schule“, kommentiert ein Junge und wendet sich den Kabeln an der Festplatte zu. „Heute sind doch alle Geräte verschweiß, ein Gewinn, dass wir hier die Einzelteile eines PC kennenlernen“, sagt Philipp Augat, Lehrer für Deutsch, Geschichte und Informatik und Teil des Administrationsteams am Gymnasium Kirchheim.

TUMJunior

Mehr Informationen zu TUMjunior





Am LRZ haben die Ausbildungsverantwortlichen Petra Gärtner und Alessandro Podo den Besuch der Klassen mit Lehrkräften und TUMjunior vorbereitet, ein Manual über PC-Komponenten und Linux-Befehle erstellt. Die Kinder schauen sich außerdem den Supercomputer an und erfahren, wofür Forschende ihn einsetzen. „An den Lernorten werden Schüler:innen aktiv, erleben Technik und Naturwissenschaften praktisch“, sagt Kaden. „Die Exkursionen sind in den Unterricht eingebunden und werden anhand der TUMjunior-Materialien vor- und nachbereitet.“

FORSCHUNG BEGREIFBAR MACHEN

Noch ist TUMjunior ein Versuch. Lehrende und Lernende werden befragt, bestätigt sich dabei die Annahme, dass durch die Besuche Naturwissenschaften und Technik besser verstanden werden, wird das Programm bayernweit geöffnet. Lehrer:innen finden dann Materialien zu den Lernorten online. „TUMjunior will Lehrende weiter professionalisieren, damit sie Methoden wie Exkursionen in ihren Unterricht einbetten“, erläutert Kaden. „Kinder finden sich übrigens besser zurecht, wenn sie einen Lernort mehrmals besuchen.“ Das LRZ arbeitet bereits daran, Zehntklässler:innen einzuladen, um ihnen die Welt der Simulation zu eröffnen.

VIRTUELLE WELTEN AUFBAUEN

Junge Frauen für Technik begeistern: Dafür beteiligt sich das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) regelmäßig am Girls'Day. In einem Online-Workshop bauten 10 Mädchen aus ganz Deutschland unter Anleitung von Multimedia-Spezialistin Elisabeth Mayer virtuelle Welten für den SuperMUC-NG auf. LRZ-Mitarbeiterinnen erzählten ihnen außerdem von spannenden Aufgaben mit Supercomputern und mit IT-Diensten für die Forschung: 72 % der Teilnehmer:innen hilft der Girls'Day, Vorstellungen für die Berufswahl aufzubauen, 49 % wollen später sogar in den vorgestellten Berufen arbeiten.





Technik simuliert: Die QLM simuliert 38 Qubits, bietet eine einfache Programmierumgebung und arbeitet mit den ersten Quanten-Programmiersprachen auf Basis von Python.

QUANTENCOMPUTING PRAKTISCH AUSPROBIEREN

Alltagstaugliche Quantencomputer gibt es noch nicht. Trotzdem können Studierende und Forschende den Umgang mit Zukunftstechnologie schon lernen und erste Algorithmen dafür entwickeln: mit Hilfe von Simulatoren wie der Quantum Learning Machine von Atos.

Quantengatter und Schaltkreise aufbauen oder notwendige Rechenschemata entwickeln: Die ersten Quantenprozessoren haben zwar die Versuchslabore verlassen. Unternehmen, Wissenschaft und Forschungseinrichtungen wie das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) experimentieren bereits mit ersten Quantum Processing Units (QPU). Doch bevor die Technologie breit genutzt werden kann, stellt sie viele Fragen – etwa an Physik, Informatik, Ingenieurs- und andere Wissenschaften. Wie verschränken sich Quantenbits oder Qubits so, dass diese Recheneinheiten arbeiten können? Wie sehen Rechenschemata fürs Quantencomputing aus und wie genau sind die Resultate? „Wir sollten diese Fragen jetzt schon beantworten, um Technik rund um die QPU zu entwickeln“, sagt Stefan Huber, promovierter Quantenphysiker und Mitarbeiter des Quantum Integration Centres (QIC) des LRZ. „Simulatoren helfen dabei, mit ihnen lassen sich Qubit-Schaltkreise wirklichkeitsgetreu nachbilden.“

ERSTKONTAKT ZUM QUANTENCOMPUTING

Vor allem aber sollten Forschende und Studierende sich mit der Technologie vertraut machen können. Für den Erstkontakt bietet das LRZ QIC zwei Simulatoren: eine Software von Intel, die 42 Qubits nachbildet, sowie die Quantum Learning Machine (QLM) von Atos mit 38 Qubits. „Mit der QLM lassen sich viele Funktionen simulieren“, erklärt Huber, der die QLM

inzwischen gut kennt: „Sie simuliert Quantenschaltkreise ohne viel Firlefanz“ Im Herbst 2021 konnten sich davon auch 15 Anwender:innen in einem ersten Workshop überzeugen. Spezialist:innen von Technologiepartner Atos zeigten auf, welche Funktionen und Werkzeuge der unscheinbare weiße Kasten bietet, wie damit Rechenschemata konstruiert oder Daten importiert werden können; Mitarbeitende des LRZ beschrieben, wie Forschende auf das Gerät zugreifen.

Im Gegensatz zu klassischen Rechnern arbeiten Quantencomputer nicht nur mit den Zuständen 0 und 1, sondern mit unzähligen weiteren dazwischen. Dadurch können sie größere Datenmengen verarbeiten und einige Probleme effizienter lösen als das heute mit klassischen Computern und Supercomputern möglich ist. Quantencomputing setzt neue Algorithmen voraus und braucht andere Schaltungen. Die Informationen aus dem Workshop sind in eine Dokumentation auf der LRZ-Website geflossen: „Für den Remote-Zugriff auf die QLM gibt es eine grafische Umgebung, die das Arbeiten und den Import von Daten wie mit dem Webbrowser ermöglicht“, berichtet LRZ-Administrator Matthew Tovey. „Die Maschine steht Usern aus München sowie Universitäten und Forschungseinrichtungen in ganz Bayern zur Verfügung.“

SCHALTKREISE AUFBAUEN UND TESTEN

Ein Jahr nach dem Start wird die QLM regelmäßig von rund 50 Forschenden genutzt. Vor allem Studierende sammeln damit Erkenntnisse für Bachelor- und Masterarbeiten, außerdem testen Institutionen aus dem Munich Quantum Valley damit Schaltkreise und Rechenergebnisse. „Manche arbeiten über mehrere Monate hinweg mit der QLM, andere nur eine kurze Zeit“, beobachtet Tovey. „Wie im Supercomputing wollen wir auf der QLM Batch-Jobs zulassen, aber das müssen wir noch vorbereiten.“ Nicht alle User benötigen gleich 38 Qubits für ihr Projekt, mit Batch-Aufträgen könnte der mannshohe Schrank mehrere Aufträge parallel verarbeiten.

„Das Gute an der Atos QLM ist, dass mit ihrer Hilfe unterschiedliche Quantensysteme inklusive ihres individuellen Rauschens simuliert werden können“, ergänzt Huber. „So ermöglicht sie den Vergleich von Aufbaukonzepten.“ Qubits werden mit chemischen oder optischen Verfahren, mit Supraleitern, Ionenfallen, aus Atomen, Elektronen oder mit Hilfe von Diamanten gewonnen. Wie sich die Verfahren auf Anwendungen auswirken, wird ebenfalls mit Simulatoren und der QLM getestet. „Die QLM kann viel mehr als zum Zeitpunkt der Lieferung“, sagt Huber. Durch Software-Updates lassen sich heute Funktionsweisen des klassischen mit denen des Quantencomputings kombinieren. Das, so vermutet Huber, wird die Zahl der QLM-Nutzer:innen schnell erhöhen und sicher auch Kolleg:innen des QIC an die Maschine bringen, die an der Integration von QPU ins Suoercomputing arbeiten. Ganz sicher aber wird es noch einige weitere QLM-Workshops geben.





06

MENSCHEN

#WeAreLRZ: Unser Team	76
Der LRZ-Lenkungsausschuss	78
Tolle Köpfe für's LRZ finden	80

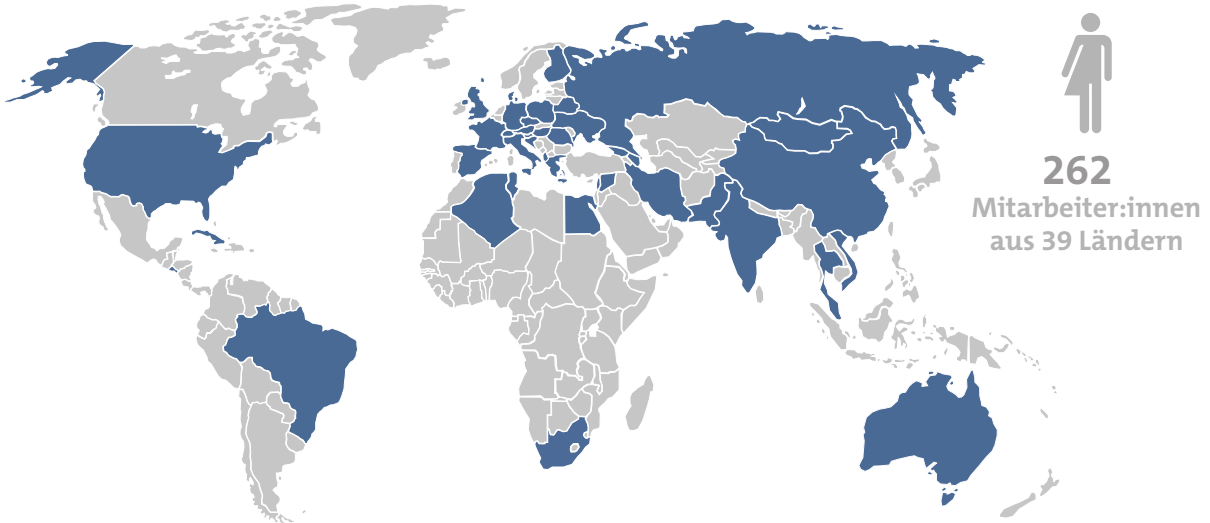


#WeAreLRZ

ZUSAMMEN EIN FANTASTISCHES TEAM

2021 hieß es am LRZ: Volle Kraft voraus. Das Jahr war geprägt von vielen neuen Projekten, beispielsweise im Bereich Quanten- und Future Computing und entsprechend vielen neuen Kolleg:innen: Die neuen Beschäftigten sind ein Beweis dafür, dass das LRZ national wie international einen hervorragenden Ruf genießt. Mit diesem fantastischen Team zählt das Zentrum auch in Zukunft zu den führenden wissenschaftlichen IT-Dienstleistungs- und Forschungseinrichtungen in Europa und der Welt – #WeAreLRZ.

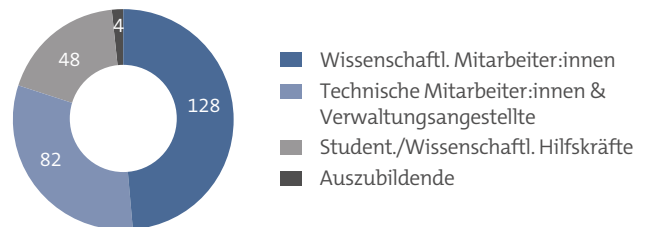
HIER KOMMEN UNSERE MITARBEITER:INNEN HER



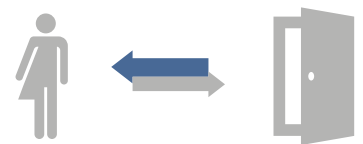
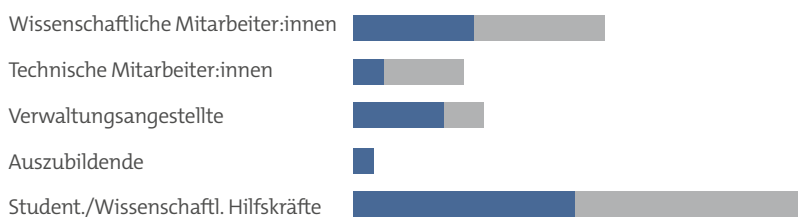
Mein Herzenthema ist, das LRZ zu einem guten Arbeitsplatz für Alle zu machen.

Sabine Osorio,
Leiterin Personal LRZ

MITARBEITER:INNEN IN ZAHLEN



ZU- UND ABGÄNGE



Zugänge 48
Abgänge 48

RECHENZEIT SOLLTE FÜR SINNVOLLE WISSENSCHAFT VERWENDET WERDEN „

Alle zwei Jahre wird der Lenkungsausschuss des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) gewählt: Er bestimmt, welche Forschungsprojekte den Supercomputer nutzen können. Im Interview erklärt sein Vorsitzender, Prof. Dr. Peter Bastian, die Aufgaben.



DER LRZ-LENKUNGSAUSSCHUSS

Der Lenkungsausschuss wird alle zwei Jahre gewählt. Die 15 Wissenschaftler:innen vertreten das LRZ, die Bayerische Akademie der Wissenschaften sowie die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG). Das Gremium komplettieren zwei beratende Mitglieder. Zwar werden die Großprojekte, ab 45 Millionen Core-Stunden im Jahr, für den SuperMUC-NG über das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) vergeben. Doch der LRZ-Lenkungsausschuss verlängert Rechenzeiten und bewertet den Nutzen von Arbeiten, die unter dieser Grenze liegen. 2021 waren das rund 70 Anträge.

Der Lenkungsausschuss begutachtet, welche wissenschaftlichen Arbeiten auf dem SuperMUC-NG gerechnet werden: Gibt's darüber oft Diskussionen im Gremium?

Prof. Dr. Peter Bastian: In der Regel nicht. Jedes Mitglied im Lenkungsausschuss verantwortet einen Bereich. Sie beauftragen Gutachten von Externen und erstellen daraus einen Fördervorschlag. Der Vorsitzende des Lenkungsausschusses und sein Stellvertreter sind außerdem Mitglieder der Rechenzeitkommission des Gauss Centre for Supercomputing (GCS), in der die Large-Scale Anträge begutachtet werden. Dort gibt es Diskussionen, und das ist auch gut so.

Wieviele Arbeiten pro Jahr bewertet der LRZ-Lenkungsausschuss?

Bastian: 2020 waren es gut 70 Anträge, davon 20 Großprojekte, die über das GCS liefen. Hinzu kommen noch gut 30 kostenneutrale Rechenzeit-Verlängerungen, die von den Obmännern ohne Gutachten entschieden werden können.



Erfahrung zählt: Zum dritten Mal wurde Prof. Dr. Peter Bastian von der Ruprecht-Karls-Universität in Heidelberg zum Vorsitzenden des Lenkungsausschusses am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) gewählt. Bastian leitet am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) in Heidelberg die Arbeitsgruppe „Paralleles Rechnen“ und beschäftigt sich mit Software zur Lösung von Gleichungssystemen.



HPC-Wissen: Prof. Dr. Gerhard Wellein ist Bastians Stellvertreter im Lenkungsausschuss. Der Informatiker leitet an der Friedrich-Alexander-Universität in Erlangen die Professur für High Performance Computing, außerdem das Nationale Hochleistungsrechenzentrum (NHR@FAU). Wellein ist außerdem Sprecher des Kompetenznetzwerkes Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR).

Momentan wird der Umgang mit Leerzeiten am SuperMUC-NG diskutiert. Wie will der Lenkungsausschuss die Lücken füllen?

Bastian: Das LRZ muss pro Jahr eine bestimmte Menge Strom, bessere Energie von seinem Versorger abnehmen, um einen günstigen Preis zu erhalten. Leerzeiten zu füllen, spart also Geld. Sie entstehen am SuperMUC-NG, wenn Platz für große Jobs geschaffen wird. Diese Lücken können nur von bestimmten Arbeitsaufträgen beansprucht werden, die bisher auf dem SuperMUC-NG nicht verfügbar sind. Die Idee ist, die technische Seite zunächst mit einem Abnehmer zu testen. Funktioniert das, könnte hier ein – begrenztes – Angebot entstehen, trotzdem sollte die Rechenzeit natürlich für sinnvolle Wissenschaft verwendet werden.

Rechnen Sie eigentlich auch selbst an unseren Maschinen?

Bastian: Nein, meine Arbeitsgruppe entwickelt vor allem effiziente und robuste Methoden zur Lösung bestimmter Gleichungssysteme. Derzeit ist da weniger die Nutzung sehr vieler Prozessoren eine Herausforderung

als das Erreichen hoher Rechenleistung auf einer CPU oder GPU. Daher genügen uns die Rechner vor Ort.

Als Professor beurteilen Sie sowieso Forschungsarbeiten an Ihrem Lehrstuhl – warum auch noch die des LRZ-Lenkungsausschusses?

Bastian: Die Arbeit als Obmann ist sehr spannend, weil man tolle Forschungsarbeiten zu sehen bekommt.

Angesichts neuer Quantencomputer-Technik gilt HPC schon fast als altmodisch. Werden Quantencomputer das Supercomputing ersetzen?

Bastian: Quantencomputer sind sicher eine spannende Entwicklung, allerdings wird dieser Ansatz erstmal für bestimmte Anwendungen von Vorteil sein, etwa Aufgaben der diskreten Optimierung, Quantenchemie oder Kryptographie. Es wird ganz schön lange dauern, bis man damit die Umströmung eines Flugzeugs oder den Grundwasserhaushalt in Südbayern simulieren kann. Der SuperMUC-NG wird also nicht so schnell überflüssig werden.



Sabine Osorio

**TOLLE KÖPFE FÜR
FORSCHUNGSPROJEKTE,
VERWALTUNG UND
TECHNIK FINDEN** ”

Was hat Sie beide 2021 am meisten überrascht?

Sabine Osorio: Uns kann nix mehr überraschen... (lacht). Nein, im Ernst – Projekte wie Future- und Quantencomputing hatten sich bereits 2020 angekündigt. Wir wussten also, dass 2021 viel Arbeit auf uns zukommen wird, und wir sind daher 2021 eher realistisch gestartet.

Dr. Jürgen Seidl: Wir wussten zwar, dass das LRZ viele neue Projekte an Land gezogen hatte, aber ehrlich – die Ausmaße, die manche im Bereich Quanten- und Future Computing angenommen haben, haben uns dann doch überrascht. Wir freuen uns sehr über diese Erfolge, sie zeigen, dass das LRZ international einen guten Ruf genießt, auch in Politik und Öffentlichkeit, die uns finanzieren. Zum Erfolg gehören aber auch Probleme wie die Raumnot sowie Personalmangel, auch in der Verwaltung.

Wie wirken sich die neuen Forschungsprojekte auf die Organisation und ihre Strukturen aus?

Seidl: Die Verwaltung wächst leider erstmal nicht mit, das ist sicher ein Wermutstropfen beim Wachstum. Dazu haben wir in der Verwaltung ein paar sehr gute Mitarbeitende verloren, das schmerzt mich sehr. Dadurch wächst die Arbeitsbelastung in der Organisation. Es wird enger am LRZ. Allein im Bereich Quantencomputing werden wir in den nächsten Monaten rund 30 neue Kolleg:innen einstellen, auch für Future Computing, die Planung des Exascale-Systems, Sicherheitsfragen und für Projektmanagement brauchen wir neue Leute. Wo wir die unterbringen, ist offen. Wir hoffen auf die Digitalisierung, auf Home Office, Ideen, vor allem aber auf die gute Zusammenarbeit mit dem Personalrat und der Leitung.

Osorio: Persönlich macht es mich stolz, in so einem fortschrittlichen Umfeld zu arbeiten. Ich ziehe daraus sehr viel Sinn für meine Arbeit. Wenn ich mir aber die Dimensionen mancher Projekte verdeutliche, muss ich schlucken. Für all diese Projekte müssen wir neue Kolleg:innen suchen. Wie organisieren wir schnelles Wachstum, ohne dass dabei die Qualität und der gute Zusammenhalt im LRZ auf der Strecke bleiben? Retention Management wird wichtiger, also Maßnahmen, damit Mitarbeitende gerne am LRZ arbeiten und bleiben. Wir wollen ja nicht nur neue Kolleg:innen anwerben, sondern vor allem Perspektiven bieten.

Future- und Quanten-Computing, der Start des Quantum Integration Centre (QIC), neue Forschungspläne: Das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) muss mehr Platz für neue Mitarbeitende schaffen. Ein Gespräch mit Sabine Osorio, Leiterin Personal am LRZ, und Dr. Jürgen Seidl, Leiter Verwaltung, über das Wachstum des LRZ.





Und wo finden sich heute die Quanten- oder Computerspezialist:innen?

Osorio: Neben den bewährten loten wir jetzt viele neue Möglichkeiten für die Personalsuche aus: Anzeigen, Dienstleister, auch netzwerken und Social Media. Mit der Bavarian Quantum Computing eXchange- oder BQCX-Community haben wir einen nützlichen, über-regionalen Kanal, um Quantenexpert:innen direkt anzusprechen. Mit dem PR-Team arbeiten wir gerade an einer bunten Social-Media-Kampagne. Wir hoffen auch, dass Kolleg:innen Kandidaten und Kandidatinnen anziehen. Teamgeist, diverse, internationale Unternehmenskultur, persönliche Freiräume, das sind Gründe, warum das LRZ als Arbeitsplatz empfohlen wird, und das freut mich sehr.

Wie lautet das persönliche Fazit für 2021?

Osorio: Uns war wirklich an keinem einzigen Tag langweilig. Das zeigen auch Zahlen: Das Personal-Team hat 65 Stellen ausgeschrieben, 400 Bewerbungen bearbeitet, 130 Vorstellungsgespräche geführt und 48 Verträge mit Angestellten und Studierenden abgeschlossen. Mit meinen beiden Kolleg:innen hab ich mehr als 10.500 Anfragen zur Arbeit am LRZ per Mail, am Telefon, in Rocket Chat bearbeitet.

Seidl: In diesem Jahr war ich besonders stark durch das Thema Finanzen gefordert. Was mich dabei aber immer bei der Stange hält, ist, wie lösungsorientiert die Kolleg:innen hier sind.

Welchen Erfolg 2021 werden Sie besonders feiern?

Seidl: Also mir hat 2021 gezeigt, dass der Wechsel ans LRZ die richtige Wahl war. Das erste Jahr hier war die Bestätigung meiner Entscheidung – bei allen Herausforderungen und offenen Fragen: Ich bin gerne hier, hier werde ich gebraucht.

Osorio: Ich feire, dass wir in der Verwaltung trotz zusätzlicher Arbeit nie vergessen haben, dass wir ein fantastisches Team sind.

Welche Pläne stehen 2022 auf der Agenda?

Seidl: Große Herausforderungen stellen sicher die Finanzen. Im März startet die neue Teamleiterin, Michaela Drexler, im Mai die Verantwortliche für Drittmittel, und diese Kolleg:innen sollen gut eingearbeitet werden. In Zusammenarbeit mit der Bayerischen Akademie der Wissenschaft bleiben die Steuern ein heißes Thema. Die Vorbereitungen auf das Exascale-Projekt und vor allem die Raumnot am LRZ werden außerdem viele Kapazitäten des Gebäudemanagements binden. Angesichts von aktuellen Liefer-schwierigkeiten bei Technik und konfrontiert mit Personalmangel wird es schwierig werden, Zeitpläne einzuhalten. Und wir müssen bei allem darauf achten, dass sich keine:r zurückgesetzt fühlt im LRZ, hier geht es ja nicht nur um neue Forschung und Technik, sondern vor allem um zuverlässige IT-Dienste.



Dr. Jürgen Seidl

Welches Anliegen ist Ihnen am wichtigsten oder was wünschen Sie sich für 2022?

Osorio: Tolle Köpfe nicht nur für Forschungsprojekte, sondern auch für die Verwaltung und Benutzerdienste des LRZ zu finden. Mein Herzenthema ist, das LRZ zu einem guten Arbeitsplatz für Alle zu machen. Wir freuen uns über Bewerbungen talentierter Menschen, unabhängig von deren kulturellem Hintergrund, Nationalität, ethnischer Zugehörigkeit, geschlechtlicher und sexueller Identität, körperlicher Fähigkeiten, Religion und Alter. Diese Aussage darf keine Floskel sein.

Seidl: Ich wünsche mir mehr feste Planstellen für das LRZ. Es ist sicher ein großer Erfolg, neue Technologien mitentwickeln und innovative IT-Services gestalten zu können, aber was bedeutet das für den Betrieb des Rechenzentrums? Die steigende Zahl der Projekte und Zukunftstechnologien am LRZ muss Widerhall auch in der Verwaltung sowie in der technischen Betreuung finden, hier fehlt es noch an Unterstützung. Das ist nicht aus Dritt- und Forschungsmitteln zu finanzieren. Ich hoffe, dass die Politik das erkennt, und ich würde mir wünschen, dass Kund:innen wie die TUM, LMU und andere Forschungspartner:innen diese Forderungen an Politik und Gesellschaft unterstützen und darauf aufmerksam machen.



07

KOOPERATIONEN

Unsere Partner weltweit	86
Nationales Hochleistungsrechnen	88
Forschungsdaten nutzbar machen	90
Technische Zugänge harmonisieren	92
IT-Technik macht Kunst	94
Ein ganz besonderer Job	96
Das Supercomputing mitgestalten	98

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 School of Data Science (MUDS)
- Technische Universität München (TUM)
- Universität der Bundeswehr München (UniBW)



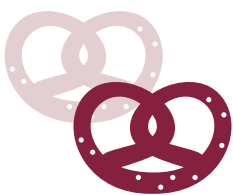
INTERNATIONAL

- 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



BAYERN

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



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)



Prof. Dr.
Gerhard Wellein

NEUE QUALITÄT IM HPC FÜR WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG



Der Verbund Nationales Hochleistungsrechnen stärkt das High Performance Computing in Deutschland: ein wertvoller Kooperationspartner auch für das Leibniz-Rechenzentrum. Ein Gespräch mit NHR-Vorstand Prof. Dr. Gerhard Wellein über Aufgaben und Ziele.



NATIONALES HOCHLEISTUNGS-RECHNEN E.V.

- 2015: Der Wissenschaftsrat, ein Beratungsgremium für Bundesregierung und Länder, regt das „Nationale Hochleistungsrechnen“ (NHR) an.
- 2021 wird der Verein gegründet, der die Finanzierung der NHR-Zentren, die Aufgaben sowie die Verteilung der Rechenkapazitäten koordiniert.
- Neun universitäre Rechenzentren werden NHR-Zentren
- NHR e.V. wird bis 2031 mit jährlich knapp 63 Millionen Euro durch Bund und Länder finanziert.
- Info: <https://www.nhr-verein.de/>

NHR-Zentrum	Standort(e)
NHR4CES@RWTH	Aachen
NHR4CES@TUDa	Darmstadt
NHR@Göttingen	Göttingen
NHR@Zuse	Berlin
NHR@FAU	Erlangen
NHR@KIT	Karlsruhe
NHR@TUD	Dresden
PC2	Paderborn
Konsortium Süd-West	Frankfurt, Kaiserslautern, Mainz, Saarland

Wie wurden die NHR-Zentren ausgewählt?

Prof. Dr. Gerhard Wellein: Durch eine Ausschreibung der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) wurden potenzielle Rechenzentren vorsortiert. Dabei spielten Rechenkapazitäten und Betriebsinfrastrukturen ebenso eine Rolle wie Fachkompetenzen im HPC und Ausbildungsangebote. Die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) benannte einen Strategieausschuss mit Vertreter:innen aus Politik und Wissenschaft, der die neun NHR-Zentren empfahl. Er wird weiterhin das NHR Programm begleiten. Aus Bayern gehört ihm übrigens Professor Dr. Dieter Kranzlmüller vom Leibniz-Rechenzentrum an.

Für das NHR haben sich die Universitäten Frankfurt, Mainz, Kaiserslautern und des Saarlands zum Konsortium Süd-West zusammengeschlossen.

Erwarten Sie mehr solcher Vereinigungen?

Wellein: Solche Konzentrationsbewegungen von Rechenzentren sind zurzeit vor allem auf Länderebene zu beobachten und aus meiner Sicht sehr sinnvoll. Die Wissenschaft braucht Rechenkapazität heute nicht nur für datenintensive Simulationen, auch Künstliche Intelligenz und das maschinelle Lernen fordern hohe Leistungen. Gleiches gilt für Fachberatung und Training. Landesweit verteilte Ressourcen und Kompetenzen sollten daher koordiniert und gezielt weiterentwickelt werden.

Pro Jahr stehen dem NHR-Verbund 62,5 Millionen Euro zur Verfügung – reicht das aus?

Wellein: Finanzplanungen sind in Zeiten starker Strompreisanstiege und zerbrechlicher Lieferketten herausfordernd. Höhere Energiekosten und teurere Hardware bedingen jetzt eine Neugewichtung von verfügbaren Kapazitäten, Services und Ausbildungsangeboten. Ein wesentliches Ziel des NHR-Vereins ist der Austausch zwischen den Zentren, um ihre Planungen so anzupassen, dass wir deutschlandweit mit dem Budget eine optimale Versorgung mit Hardware und Methodenkompetenz bieten können. Hier zeigt sich die Stärke solcher Verbünde. Daher bin ich zuversichtlich, dass die Politik weiterhin an diesen Zielen festhält und die HPC-Kompetenzen in Deutschland stärkt.

Die NHR-Zentren sollen der Wissenschaft Hochleistungsrechen-Kapazitäten zur Verfügung stellen: Können Forschende diese schon beantragen? Wo?

Wellein: Ähnlich wie beim GCS haben Forschende aller deutschen Hochschulen die Möglichkeit, das NHR zu nutzen. Aktuell baut das NHR eine Online-Plattform auf, über die Rechenzeitanträge gestellt und verwaltet werden. Bis sie zur Verfügung steht, nehmen die neun NHR-Zentren Anträge aus ganz Deutschland an.

Was ist Ihr größter Wunsch für den NHR in den nächsten 5 Jahren?

Wellein: Wenn der NHR bis dahin deutlich mehr als die Summe seiner Teile ist, haben wir viel geschafft. Aus dem Verein soll ein lebendiger Verbund wachsen, der im HPC, bei Hard- und Software sowie Aus- und Weiterbildung eine neue Qualität für Wissenschaft und Forschung bringt. Das verlangt von den Partner:innen im NHR-Verbund, sich auf Kernkompetenzen zu konzentrieren, gelegentlich über ihren Schatten zu springen und geschätzte Aufgaben an andere Zentren zu delegieren, weil sie dort besser vorangetrieben werden.

FORSCHUNGS- DATEN NUTZBAR MACHEN

**Die Nationale Forschungsdaten-
Infrastruktur hat das Ziel,
Forschungsdaten international
zugänglich zu machen. Das ist
eine technische Herausforderung,
an der das Leibniz-Rechenzentrum
mitarbeitet.**

Messwerte, Interviews, Bilder, Social Media-Daten, Statistiken, Simulationeberechnungen: Forschungsdaten beantworten nicht nur Fragen zu einem Thema und sollten daher möglichst vielen Nutzer:innen zur Verfügung gestellt werden. Das ist das zentrale Ziel mehrerer Projekte der Nationalen Forschungsdaten-Infrastruktur (NFDI), die IT-Dienstleister wie das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) mit Forschungseinrichtungen, Hochschulen und Universitäten aus ganz Deutschland zusammenführt. Seit 2018 und zunächst bis zu 10 Jahren fördern Bund und Länder mit jährlich 90 Millionen Euro den Aufbau offener Datenplattformen und Portale für verschiedene Wissenschaftsdisziplinen, die oft noch mit neuen, smarten Analysewerkzeugen auf Basis von Künstlicher Intelligenz und statistischen Methoden ausgestattet werden.



NFDI-PROJEKTE MIT BETEILIGUNG DES LRZ

Für die Nationale Forschungsdaten-Infrastruktur (NFDI – <https://www.nfdi.de/>) hat sich ein Verein gefunden, der die einzelnen Projekte koordiniert.

Das LRZ beteiligt sich an diesen Programmen:

- **BERD@NFDI:** Dieses Projekt macht Daten rund um die Wirtschaft und Arbeit zugänglich und stellt smarte Verfahren zur Auswertung bereit. BERD@NFDI entsteht unter der Federführung der Universität Mannheim. <https://www.berd-nfdi.de/>
- **FAIRmat** kümmert sich um die Forschungsergebnisse aus den Materialwissenschaften, der Physik und der chemischen Physik. Die Leitung liegt bei der Humboldt-Universität Berlin. https://tiny.badw.de/_documents/Raaf-Über_Kurz_URLs.pdf
- **Bei NFDI4Earth** stehen die Erdsystem-Wissenschaften im Fokus. Das LRZ bringt seine Erfahrungen beim Aufbau der Hochleistungs-Datenplattform terrabyte ein und vereinfacht den Zugang zu Simulationsdaten. Die Technische Universität Dresden leitet dieses Projekt. <https://www.nfdi4earth.de/>
- **PUNCH4NFDI** entwickelt eine Plattform für Massendaten der Teilchen- und Astroteilchenphysik, außerdem Werkzeuge zur Auswertung und Dateiformate. Dieses Projekt wird vom Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg und Zeutern organisiert. <https://www.punch4nfdi.de/>
- **Text+** nimmt sich der text- und sprachbasierten Daten aus den Geisteswissenschaften an, also Bücher, Interviews, Vorträge und macht diese zugänglich. Das LRZ unterstützt das Projekt mit technischem Know-how. <https://www.text-plus.org/>
- **Bereits seit 2019 engagiert sich das LRZ außerdem für das German Human Genome-Phenome Archive (GHGA)**, das unter der Führung des Deutschen Krebsforschungszentrums in Heidelberg die technische Infrastruktur zur Datenhaltung und Analyse von Informationen zu Humangenetik und Medizin bereitstellen wird <https://www.ghga.de/de/>
- **NFDI4Ing** kümmert sich insbesondere um die Metadaten im High Performance Computing – ein Thema, das für viele andere NFDI-Projekte stark an Bedeutung gewinnen wird. <https://nfdi4ing.de/>

Das LRZ war bereits an zwei Konsortien direkt beteiligt und ist seit 2021 in fünf weiteren dabei. Vor allem die Expertise aus dem Forschungsdaten-Management, der Datei- und Speichersysteme sowie rund um Big Data und Künstlicher Intelligenz sind bei den NFDI-Projekten gefragt. Denn Forschungsdatensätze sollen international besser recherchierbar und nutzbar werden. Das LRZ hat sich dabei den FAIR-Regeln verpflichtet. Diese werden unter anderem durch standardisierte Metadaten umgesetzt, die Inhalte von Datensätzen beschreiben und die außerdem von Suchmaschinen indiziert werden können. Neben Autor, Inhalt und Gebrauchsanleitung stellt eine Prüfsumme in den Metadaten zudem sicher, dass ein Datensatz bei der Verwendung weder manipuliert noch verändert wurde.



Dr.
Stephan Hachinger

TECHNISCHE ZUGÄNGE HARMONISIEREN UND METADATEN SPEICHERN

Aus der Arbeit in Forschungsprojekten entstehen oft neue Dienstleistungen: Die Aufgaben für die Nationale Forschungsdaten-Infrastruktur gibt dafür ein gutes Beispiel. Das Leibniz-Rechenzentrum kann dabei aus Erfahrungen schöpfen und nebenbei neue IT-Services aufbauen.

Die NFDI fördert den Aufbau unterschiedlichster Datenplattformen für diverse Wissenschaftsbereiche. Was haben diese Projekte gemeinsam?

Dr. Stephan Hachinger: Alle NFDI-Konsortien bauen offene Datenplattformen und Portale auf. Dabei wenden sie die FAIR-Prinzipien zum Forschungsdaten-Management an, denn das vereinfacht die Überprüfbarkeit sowie das Teilen von Forschungsergebnissen. Eine Voraussetzung für die FAIRe Datenhaltung ist die Ausstattung mit Zusatzinformationen. Diese Metadaten bieten einerseits Hinweise zu Inhalten, etwa Autor:innen, Erstellungsdatum, Thema, andererseits auch Instruktionen zu ihrer Nutzung, also Dateiformat, Qualität, Speicherort. Der Verein NFDI bringt alle Konsortien und Projekte zusammen, um Mindeststandards zur Datennutzung und -Speicherung zu erarbeiten sowie praktische Lösungen zu fachübergreifenden, technischen Anforderungen.

Welche Herausforderungen stellen sich dabei?

Hachinger: Generelle Probleme sind zum Beispiel die Speicherung von Metadaten, die Vollständigkeit der Angaben, deren Export oder die Verbreitung in Suchmaschinen. Auch nicht ganz einfach ist die Harmonisierung der technischen Zugänge und Zugriffsmöglichkeiten, Forschende einer Einrichtung A sollten auf die Datensätze von Institut B zugreifen und diese möglichst schon via Cloud-Dienste mit ersten Analyseverfahren bewerten können. Nicht zuletzt wachsen die Datenmengen, große Datensätze lassen sich nur schwer oder gar nicht aus den Originalspeichern bewegen, sollten aber ebenfalls zugänglich, interoperabel und weiter zu verwenden sein.

Welche Erfahrungen bringt das Leibniz-Rechenzentrum in diese Projekte ein?

Hachinger: Das LRZ hat erstens viel Erfahrung im Umgang mit Big Data gesammelt. Wir haben zweitens eigene, flexible Speicher für größte Datensätze aufgebaut, bieten und optimieren drittens mit Forschenden Methoden der Künstlichen Intelligenz und des Maschinellen Lernens. Zusammen mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt baute das LRZ außerdem die hoch-performante Datenplattform terrabyte weiter und stattet diese mit Analysetools aus. Und wir beschäftigen uns seit einigen Jahren damit, wie man sehr große Datensätze interdisziplinär mit

nützlichen Metadaten ausstatten kann. Diese sollten integriert mit den Daten gespeichert werden, etwa in so genannten Seitenwagen-Dateien oder aber speziellen Datenbanken, die wir aufbauen. So lassen sich Big Data publizieren, ohne sie aus dem Speicher bewegen zu müssen. Das wiederum ist für Datensätze von mehreren Hundert Terabyte oder sogar einigen Petabyte, wie sie beim Supercomputing entstehen, wichtig. Wir arbeiten außerdem an Verfahren, um Informationen aus der Wissenschaft in Suchmaschinen oder Indices wie EUDAT-B2FIND zu registrieren, sie recherchierbar zu machen. Wichtig ist uns, diese Methoden nach den Vorstellungen von Forschenden zu optimieren, so dass am Ende eine praktikable, technische Lösung entsteht, die allen Beteiligten in der NFDI nützt.

Und was bringt das umgekehrt dem LRZ?

Hachinger: Wir möchten daraus einen Standardservice für das Forschungsdaten-Management entwickeln und mehr Dienstleistungen für spezifische Fachbereiche ergänzen, die auch in den NFDI-Konsortien repräsentiert sind.



FAIR DATA

Klingt eigentlich selbstverständlich, ist es aber nicht: weil Forschende auf unterschiedlichen Computersystemen und mit Medienbrüchen arbeiten. Aber Forschungsdaten sollten FAIR sein, also auffindbar/findable, offen zugänglich/accessible, interoperabel und wieder verwertbar/resusable sein.





IT-TECHNIK MACHT KUNST

Kunst braucht IT: Das LRZ unterstützt die Bayerischen Staatlichen Museen und Sammlungen bei ihrer Digitalisierung, vernetzt und berät Museen.

Wie lange doch eine Minute dauern kann: Auf seiner Grandfather Clock zeichnet Maarten Baas die Zeiger, wischt sie weg, zeichnet sie neu. Minuten stehen still. Mit seinem Werk „Realtime“ hinterfragt der niederländische Designer und Künstler das Zeitgefühl. Bis Herbst 2021 war daher seine Grandfather Clock in der Pinakothek der Moderne zu sehen. Dass im Film die Zeit synchron verläuft, dass also Wischen und Neuzeichnen genau eine Minute dauert, dafür sorgte das IT-Servicezentrum der Bayerischen Staatsgemäldesammlungen: „Mit Hilfe von Network-Time-Protokoll-Diensten haben wir das hinbekommen,“ verrät dessen Leiter Lars Raffelt: „Die Lösungen für solche Details gehören zu den reizvollen Herausforderungen unserer Arbeit.“



GEMEINSAME IT-STRATEGIE VON 34 MUSEEN

Der Ingenieur für Elektro- und Nachrichtentechnik führt das IT-Servicezentrum der staatlichen Museen an der Bayerischen Staatlichen Gemäldesammlung. Dieses versorgt die Pinakotheken, die Sammlung Brandhorst sowie weitere 34 Museen in Bayern mit IT-Diensten und arbeitet dabei eng mit dem Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) zusammen: „Museen zeigen ja nicht mehr nur Dinge an der Wand, immer mehr neue Medien ziehen in die Säle ein, die Präsentationen und die Didaktik verändern sich“, berichtet Raffelt. „Jemand muss sich darum kümmern, dass Glasfaser oder Kabel verlegt oder Datenbanken aufgebaut werden. Das realisieren wir mit dem LRZ.“

Die IT-Strategie, die das Bayerische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst um 2012 für alle Häuser der Staatlichen Museen und Sammlungen initiierte, brachte die Organisationen zusammen. Es rief einen IT-Beirat ins Leben, in dem das LRZ durch seinen stellvertretenden Leiter Prof. Dr. Helmut Reiser vertreten ist: „Das ist ein Job von vielen, aber ein besonderer“, meint der dazu. „Die IT-Versorgung unterschied sich von Museum zu Museum, die Anschaffung eines Servers konkurrierte oft mit einem Gemälde.“ Nun tagt zweimal im Jahr der IT-Beirat und treibt die Digitalisierung der Museen voran.

KUNST UND GESCHICHTE ERFORSCHEN

Seit 2015 setzt das siebenköpfige Team um Lars Raffelt die IT- und Digital-Strategien um – immer öfter mit Unterstützung des LRZ. Das vernetzt die 34 Museen. Inzwischen verwaltet es den Mail-Verkehr einiger Häuser, ihre Nutzer- und Serververzeichnisse, organisiert die Archivierung, bündelt Software-Lizenzen, berät die Museen bei Anschaffungen und Services: „Es ist ineffizient, wenn jedes Museum einen Server bereitstellt“, berichtet Raffelt. Deshalb hat das LRZ virtuelle Maschinen für das IT-Servicezentrum der Museen eingerichtet, über die Programme für die Verwaltung sowie Online-Präsentationen laufen. Besucher:innen und Forschende können in den Datenbanken der Museen Digitalisate von Kunst und Sammelstücken recherchieren, ihre Geschichte und Herkunft erforschen.

„Die großen Sammlungen machen schon wegen der Provenienzforschung ihre Daten öffentlich zugänglich. Doch es geht bei uns nicht nur um Online-Zugang, sondern oft noch um Urheberschutz und Copyright“, erzählt Raffelt. Um die Werke lebender Künstler online zu schützen, sind heute ebenfalls technische Lösungen des IT-Servicezentrums gefragt. Und manchmal stellt die Präsentation von Kunst so wie die Grandfather Clock von Marten Baas die IT-Spezialist:innen vor Herausforderungen: „Mitarbeitende in Museen haben andere Kompetenzen, ihnen fällt es schwer zu formulieren, welche IT-Technik sie brauchen“, erklärt Raffelt. „Gemeinsam mit dem LRZ stellen wir Basisservices und suchen für spezielle Bedürfnisse Dienstleister.“



Prof. Dr.
Helmut Reiser

EIN GANZ BESONDERER JOB



Seit knapp zehn Jahren gehört Prof. Dr. Helmut Reiser, stellvertretender Leiter des Leibniz-Rechenzentrums, dem Beirat des IT-Servicezentrums der Staatlichen Gemäldesammlung Bayerns an. Ein Interview mit dem Informatiker und Dozenten über einen ganz besonderen Auftrag.

Wie wurden Sie zum Berater für das IT-Service-Zentrum der Staatlichen Museen?

Prof. Dr. Helmut Reiser: Es begann mit einer Strategiekommission, die 2012 die IT der Museen evaluierte und Empfehlungen zur Digitalisierung und Zentralisierung sowie Lösungen zur Umsetzung vorschlug. In diesem Zusammenhang wurde auch ein IT-Beirat gefordert, sowohl das Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst wie auch die Museen wollten das LRZ dabei haben. So wurde ich Mitglied des IT-Beirats.

Was waren die wichtigsten Aufgaben zum Start?

Reiser: In den ersten Jahren ging es vor allem um zentrale Dienstleistungen und Vernetzung. Es gab ja kaum einheitliche Strukturen, noch keine dedizierten Budgets für die Anschaffung von IT-Technik. So entstand das IT-Servicezentrum als zentrale Abteilung aller Museen, außerdem wurden die notwendige Soft- und Hardwarelandschaft zentralisiert sowie Aufgaben und Etats projektiert. Das LRZ unterstützt das IT-Servicezentrum als Dienstleister.

Und was sind heute die Anforderungen?

Reiser: Aufgaben wie Vernetzung, Internetversorgung oder WLAN sind immer noch sehr wichtig, weil sich die Museen heute umfassender online präsentieren und auf Websites meistens noch viel mehr Inhalte und Services bieten als nur ihr Programm, Öffnungszeiten oder Reservierungsdienste. Das IT-Servicezentrum erarbeitet gerade einen Dienstleistungskatalog für die Museen, einen Teil der Services und die dazu notwendige technische Infrastruktur liefert das LRZ. So hosten wir beispielsweise das Managementsystem Museum

Plus. Außerdem werden in den Museen Fragen der IT-Sicherheit immer wichtiger, für die ich auch am LRZ verantwortlich bin, außerdem ist Datenschutz relevant und vor allem wird über die Verlagerung von Daten in die Cloud diskutiert.

Was bedeutet Ihnen dieser Auftrag?

Reiser: Das ist zwar ein Job von vielen, aber ein ganz besonderer. Aus dem Beirat heraus konnte ich viel bewegen, den Museen strukturell und inhaltlich helfen und interessante IT-Konzepte anstoßen, das motiviert. Außerdem sind Museen etwas Besonderes, ihre Mitarbeitenden gehören nicht zur Klientel, die ich vom LRZ her gewöhnt bin. Sie betreiben zwar auch Forschung, sind aber meist nicht so IT-affin wie unsere anderen Nutzer. Folglich werde ich mit neuen, anderen Themen, Perspektiven sowie Wünschen und Forderungen konfrontiert, umgekehrt kann ich Ideen und Lösungen einbringen. Das inspiriert mich sehr.

Gehen Sie deswegen öfter ins Museum?

Reiser: Öfter als andere sicher nicht (lacht). Aber ab und zu schaue ich mir die Ausstellungen an, über die wir im Beirat diskutiert haben oder die mich interessieren. Das Museum Ägyptischer Kunst fasziniert mich sehr, vor allem die Ausgrabungen der alten Königsstadt Naga im heutigen Sudan sind beeindruckend. Kunst und Archäologie sind wirklich eine Bereicherung im Alltag, allerdings schaue ich heute neben Gemälden und Skulpturen oft noch darauf, wie IT den Besuch von Museen oder die Präsentationen von Ausstellungen verbessern könnte.

BAYERISCHE STAATLICHEN MUSEEN UND SAMMLUNGEN

34 Museen in Bayern kümmern sich um den Kunstbesitz des bayerischen Freistaates. Darunter sind nicht mehr nur Gemälde, sondern auch Skulpturen, Handschriften, neuerdings auch digitale Werke zu finden. Zur Bayerischen Staatlichen Gemäldesammlung gehören neben den Pinakotheken und der Sammlung Brandhorst in München auch das Porzellanikon in Selb, das Museum in Franken, das Textilmuseum in Augsburg sowie die Archäologischen Sammlungen. Unter diesem Dach ist neben dem IT-Servicezentrum auch das Dörner Institut zu finden, das sich auf die Restaurierung von Kunst konzentriert und dabei ebenfalls auf IT und Digitalisierung setzt. <https://www.bavarikon.de>

DAS SUPERCOMPUTING MITGESTALTEN

Die wichtigsten Programmiermodelle fürs Supercomputing sind MPI und OpenMP. LRZ-Mitarbeitende engagieren sich bei der Weiterentwicklung und Standardisierung dieser Open-Source-Programme.

Wer für Supercomputer programmiert, braucht Open Multi Processing oder OpenMP sowie das Message Passing Interface (MPI). Beides sind frei verfügbare Programmiersprachen oder -Schemata, sie wurden in den 1990er Jahren für parallele Rechnerarchitekturen entwickelt und werden von der weltweiten Nutzungs-Community stetig vorangebracht und an neue Technologien angepasst. Seit einigen Jahren engagieren sich das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) und einige seiner Mitarbeitenden in den Zirkeln und Komitees zur Standardisierung, die über Verbesserungen oder Vereinfachungen wachen und zusätzliche Features für alle vereinheitlichen. „Mit der Standardisierung ist die Hoffnung verbunden, dass keine neuen Programmiermodelle und -Sprachen entstehen müssen, auch wenn sich Computertechnik verändert“, sagt Dr. Volker Weinberg, der die Treffen des Architecture Review Boards von OpenMP verfolgt. „Das LRZ nimmt für sich in Anspruch, eines der führenden wissenschaftlichen Rechenzentren in Europa zu sein. Wenn wir bei OpenMP aktiv mitarbeiten, können wir die Zukunft des High Performance Computings mitbestimmen und die Anforderungen an den nächsten Supercomputer besser spezifizieren.“

Das LRZ bietet sich daher gerne auch als Treffpunkt an: 2020 war das Standardisierungskomitee von OpenMP in Garching zu Gast, 2021 die EuroMPI zur umfassenden Präsentation des vierten Master-Releases. „MPI-4 vereinfacht einige Funktionen des Supercomputings, man kann Arbeitspakete einfacher nutzen und in eigene Codes integrieren“, erklärt Dr. Martin Rufenacht. Er arbeitete an dieser Rundumerneuerung mit und organisierte die virtuelle EuroMPI vor Ort mit. „Die Zahl der Teilnehmenden war überraschend hoch, vermutlich konnten online mehr Leute und nicht nur die Zuhörer, die Standardisierungen diskutieren.“

OPENMP UND MPI LERNEN

Regelmäßig erfahren die Nutzer:innen des LRZ sowie Interessierte, wie sie noch besser mit OpenMP und MPI arbeiten können. Die Kurse, die das LRZ mit internationalen Partnerorganisationen anbietet, findet sich hier: <https://app1.edoobox.com/en/LRZ/>

DISKUTIEREN, VEREINHEITLICHEN, STANDARDISIEREN

Standardisierung ist bei Open-Source-Software ein zäher, aber effizienter Prozess: Übers Jahr gesehen programmieren Nutzer:innen oder auch Technologie-Unternehmen neue Features und Funktionen, die sie benötigen. Die Plattform GitHub speichert diese Neuentwicklungen samt aller Ableitungen und Versionen. Einmal im Jahr tagen die Standardisierungsausschüsse von OpenMP und MPI, nehmen alle Neuerungen sorgfältig unter die Lupe und besprechen, wie diese vereinheitlicht werden können: „Fünf Tage lang jeweils sieben Stunden dauernde Sessions, in denen über



einzelne Konstrukte der Programmiersprache diskutiert wurden“, erzählt Weinberg, der das Procedere selbst miterlebte. „Das war langatmig, intensiv, aber lehrreich. Faszinierend, wie engagiert alle bei der Sache waren.“

OpenMP basiert auf den Programmiersprachen Fortran, C und C++ und sorgt dafür, dass Algorithmen Rechenkerne ansprechen. „Mit der wachsenden Verbreitung von Multicore-Rechnern wurde das Programm komplexer, die Handbücher dicker“, so Weinberg. „Für meine Doktorarbeit reichte noch ein kleines Heftchen, heute umfasst das Handbuch mehr als 600 Seiten.“ MPI zielt indes auf die Kommunikation zwischen Rechenkernen und -Knoten. Applikationen können damit verteilt und von parallel geschalteten Computern abgearbeitet werden. Das 4. Major Release enthielt 150 Änderungen und Verbesserungen, aber bei Open Source geht's immer weiter: „Schon gibt es Ideen MPI-4 weiter zu entwickeln“, beobachtet Rufenacht. „Bis zum nächsten Major Release dauert es noch Jahre, aber das MPI-Forum konzentriert sich bereits auf MPI 4.1, das so etwas wie eine Aufräumaktion darstellt und Unklares verdeutlichen wird.“



08

ZAHLEN UND FAKTEN

Benutzernahe Dienste	102
Stromverbrauch	102
Datenspeicher	103
Hoch-und Höchstleistungsrechnen	104
Münchner Wissenschaftsnetz	105
Gesamtübersicht	
Kurse Supercomputing	108
Publikationen	110

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	1.003.207	78,673 %
• als Spammails erkannt	20.290	1,591 %
• als Virenmails erkannt	51	0,004 %
Von den Post- & Mailrelays angenommene Mails		
• „gute“ E-Mails	242.773	19,038 %
• als mögliche Spammails markiert	8.829	0,692 %
Gesamt	1.275.152	100%

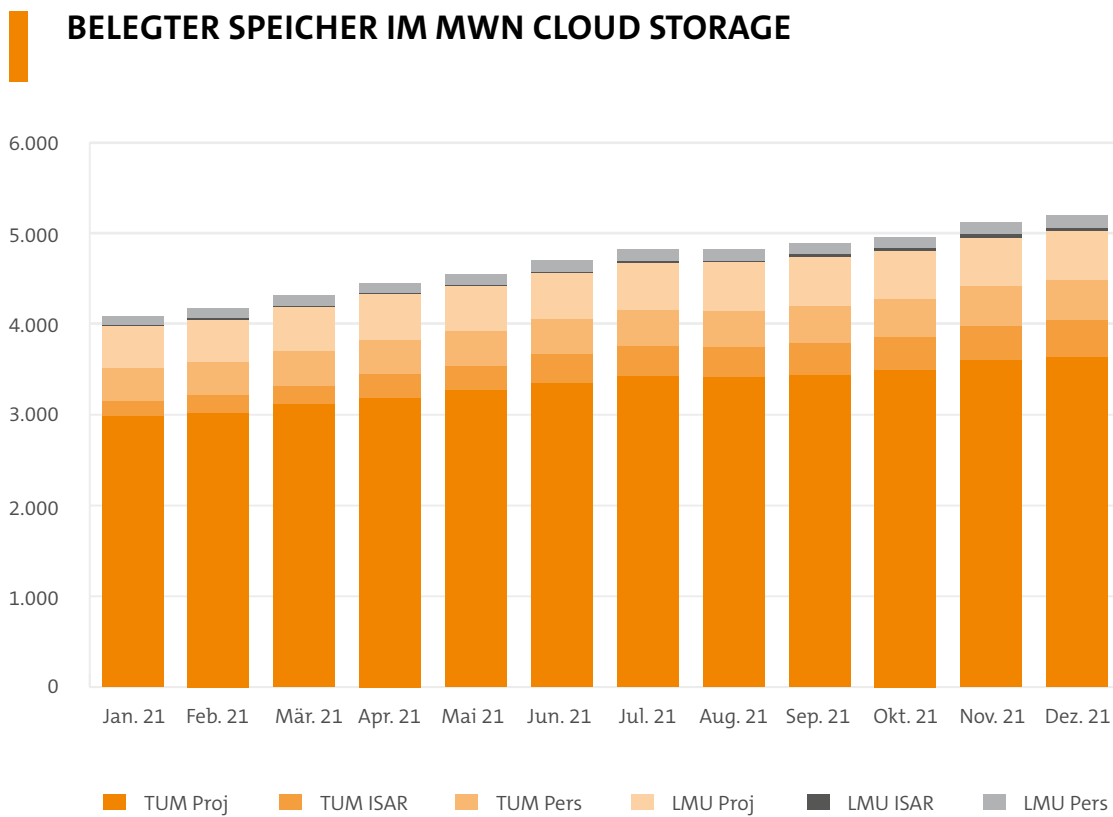
STROMVERBRAUCH

STROMVERBRAUCH 2021

2021

Lastspitze (15 min Intervall)	4.613,2 kW
Verbrauch insgesamt	32.632,95 MWh

DATENSPEICHER



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, PRACE (Tier-0 System)
	144 nodes, 8,192 cores Skylake 111 TByte, Omni-Path 100G	600	Capability Computing	
SuperMUC-NG Compute Cloud	64 nodes, 3,072 cores, Intel Xeon ("Skylake"), 64 Nvidia V100	458 (CPUs + GPUs) 7,680 AI Performance*	Cloud Computing	German Universities and Research Institutes, PRACE (Tier-0 System)
CoolMUC-2 Lenovo Nextscale	384 nodes, 10,752 cores Haswell EP 24.6 TByte, FDR 14 IB	447	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	DGX Systems (A100, V100 & P100 Architecture) 7 Nodes, per Node: 40-64 CPUs, 8 NVIDIA GPUs; 128-640 GB GPU HBMemory; 512- 2048 GB DDR4 Memory	885 26,000 AI Performance*	Machine Learning, AI applications	Bavarian Universities
	Nvidia GPU Nodes (V100 & P100 Architecture) 5 Nodes, per Node: 40-64 CPUs, ; 32-64 GB GPU HBMemory; 256-368 GB DDR4Me- mory; 12 Nvidia Tesla GPUs in total	77 980 AI Performance*		
	"MankA" I (AMD MI50 Architecture) 6 Nodes, per Node: 64 CPUs; 8 AMD MI50 GPUs, 128 GB GPU HBMemory; 512 GB DDR4Memory;	317 1,280 AI Performance*	COVID-19 research and/or research with high societal impact	select users
	Cerebras CS-2 (and HPE SuperDome Flex host system) 1 node with 850,000 compute cores, 40GB SRAM, 20 PB/s memory bandwidth and 220Pb/s interconnect	3,570,000 AI Performance* (estimate based on arXiv:2204.03775)	Purpose-built Deep Learning System	select users, not part of the public-facing AI Systems (yet)
LRZ Quantum Computing Ressources	Atos QLM		Quantum simulation	Bavarian Universities

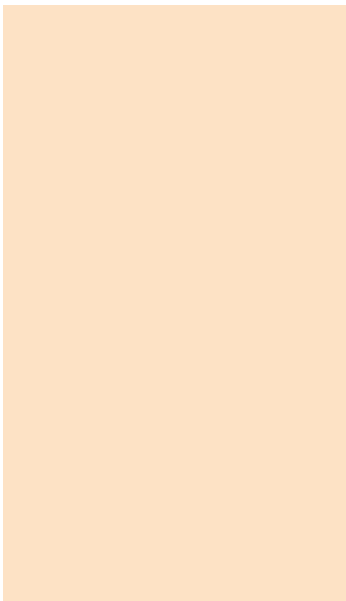
*AI Performance refers to GPU peak performance for FP16 operations. For Nvidia GPUs, it is specific to different architectures. P100 architecture: CUDA core performance. V100 architecture: Mixed precision Tensor Core performance. A100: Structured sparsity Tensor Core performance.



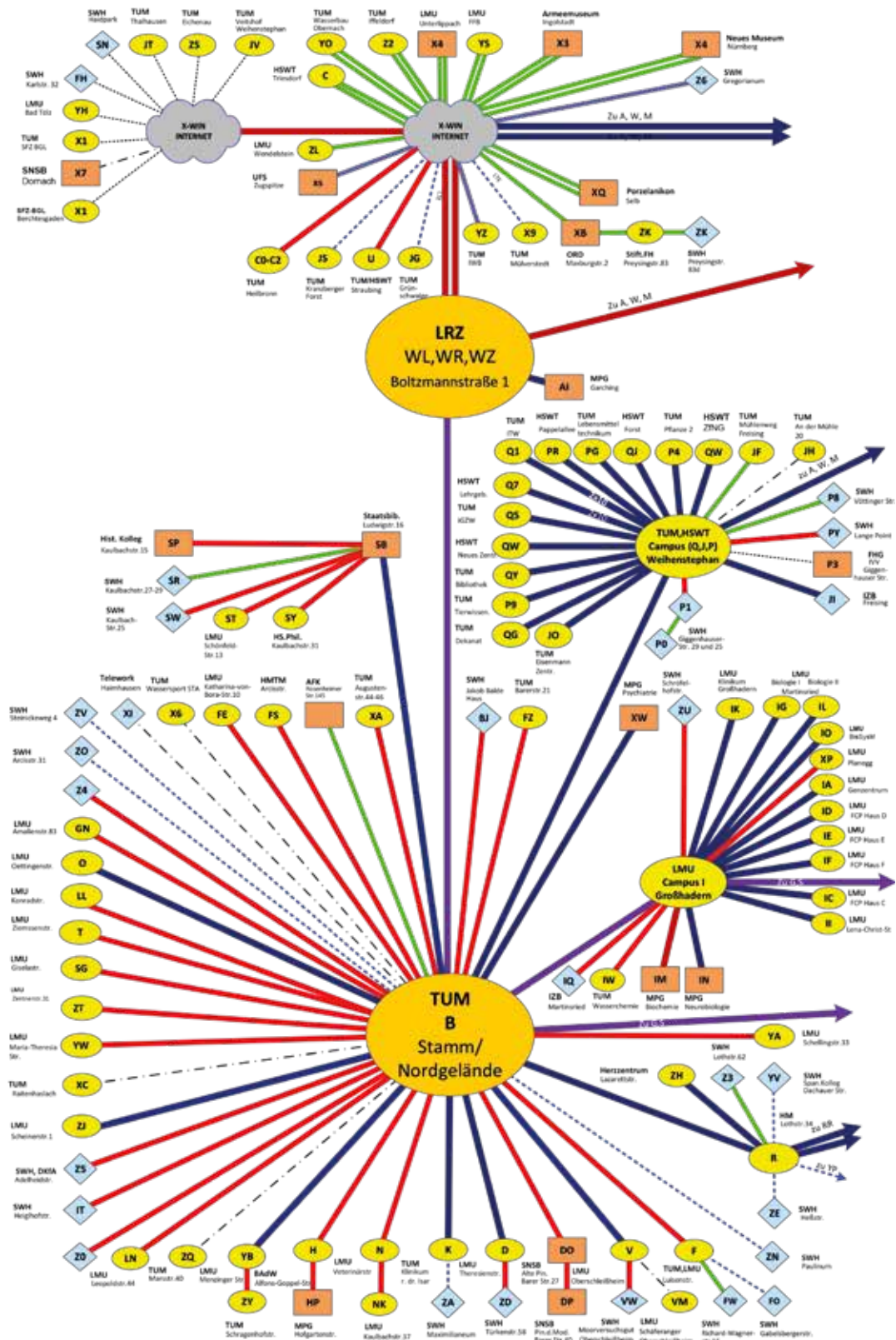
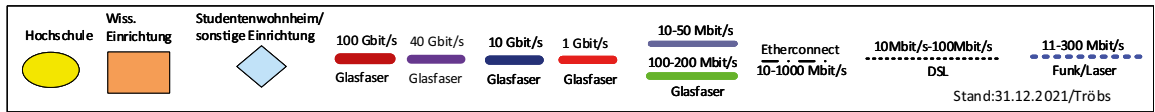
MÜNCHNER WISSENSCHAFTSNETZ

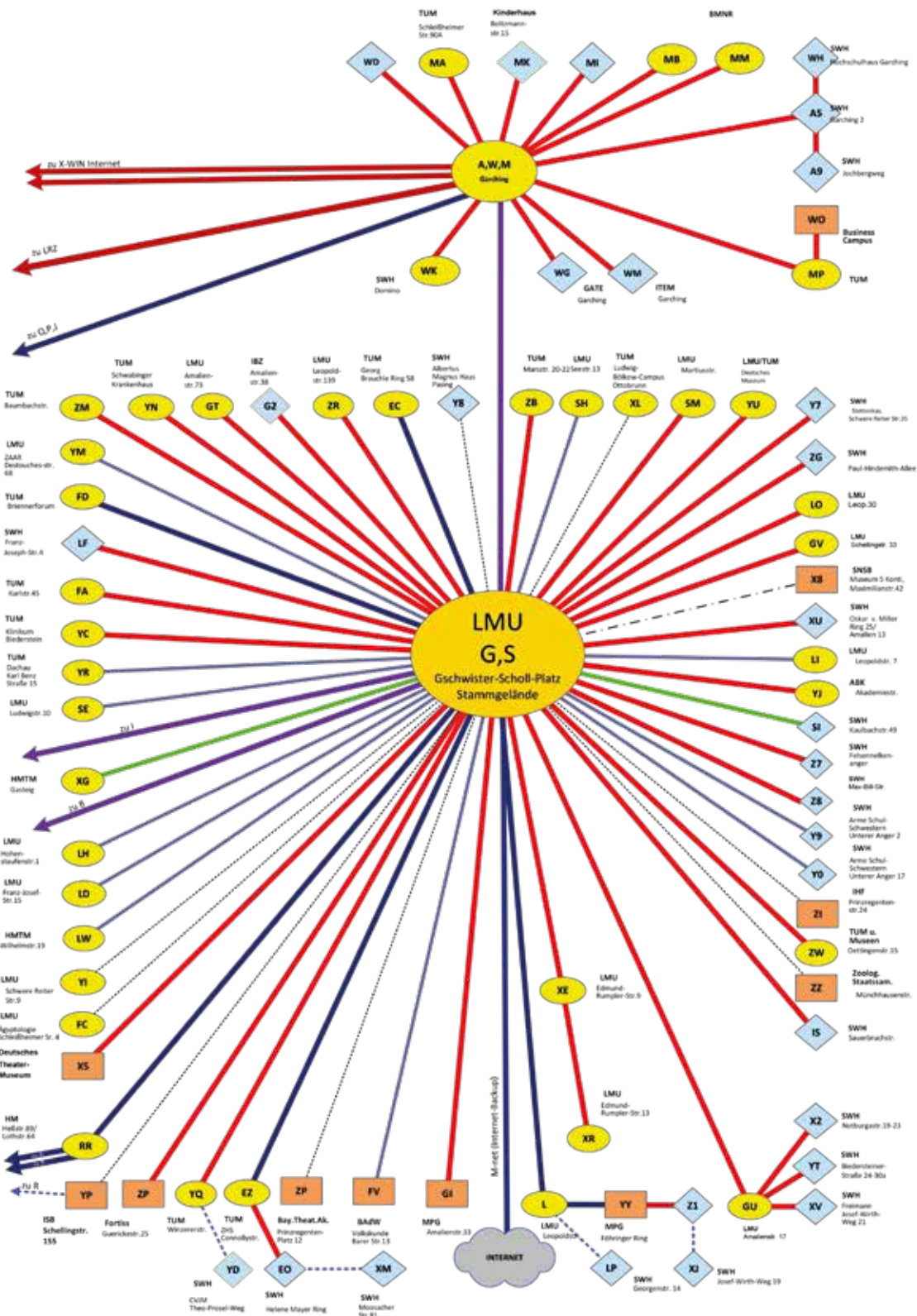
ANZAHL DER IM MWN EINGESETZTEN SWITCHES UND PORTS

Jahr	2021	2020	2019	2018	2017	2016	2015	2014	2013	2012	2011	2010
Switches	2.592	2.206	1.950	1.858	1.528	1.564	1.507	1.469	1.406	1.310	1.247	1.126
Ports	152.612	134.098	125.085	119.367	112.137	111.046	104.576	100.557	97.000	88.777	85.161	66.856



STANDORTE UND VERBINDUNGEN MWN





GESAMTÜBERSICHT KURSE SUPERCOMPUTING

SCHULUNGEN UND VERANSTALTUNGEN 2021

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Tage	Art	TN	TN-Tage
10.02.21	10.02.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	21	10,5
17.02.21	19.02.21	OpenMP Programming Workshop	LRZ/PRACE	ONLINE	2,5	PRACE-Kurs	55	137,5
22.02.21	24.02.21	Programming with Fortran	LRZ	ONLINE	3	GCS-Kurs	20	60
06.04.21	09.04.21	Data Analytics, Big Data & AI Training Week	LRZ	ONLINE	4	LRZ-Kurs	95	380
13.04.21	15.04.21	Parallel Programming of High Performance Systems	LRZ/ NHR@FAU	ONLINE	3	GCS-Kurs	31	93
14.04.21	14.04.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	35	17,5
21.04.21	23.04.21	Modern C++ Software Design	LRZ	ONLINE	3	GCS-Kurs	42	126
27.04.21	29.04.21	Accelerated Computing with OpenACC and Deep Learning	VSC/LRZ	ONLINE	3	VSC-Kurs	51	153
03.05.21	06.05.21	Introduction to C++	LRZ	ONLINE	4	GCS-Kurs	15	60
31.05.21	31.05.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	16	8
14.06.21	18.06.21	VI-HPS Tuning Workshop	LRZ/PRACE	ONLINE	5	PRACE-Kurs	20	100
12.07.21	15.07.21	Deep Learning and GPU Programming Workshop	LRZ/PRACE	ONLINE	4	PRACE-Kurs	34	136
21.07.21	21.07.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	15	7,5
08.09.21	10.09.21	Iterative Solvers for Linear Systems	LRZ	ONLINE	3	GCS-Kurs	39	117
08.09.21	08.09.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	18	9
11.10.21	15.10.21	Data Analytics, Big Data & AI Training Week	LRZ	ONLINE	5	LRZ-Kurs	52	260

SCHULUNGEN UND VERANSTALTUNGEN 2021

Start	Ende	Kurse, Workshops und Konferenzen	Veranstalter	Ort	Tage	Art	TN	TN-Tage
18.10.21	29.11.21	Introduction to ANSYS CFX	LRZ	ONLINE	6	GCS-Kurs	14	84
19.10.21	19.10.21	Building Transformer-Based Natural Language Processing Applications	LRZ	ONLINE	1	DLI-Kurs	25	25
28.10.21	09.12.21	Introduction to ANSYS Fluent	LRZ	ONLINE	6,5	GCS-Kurs	34	221
02.11.21	04.11.21	HPC Code Optimisation Workshop	LRZ/PRACE	ONLINE	3	PRACE-Kurs	46	138
17.11.21	19.11.21	Modern C++ Software Design	LRZ	ONLINE	3	GCS-Kurs	26	78
17.11.21	17.11.21	Introduction to LRZ HPC Systems with Focus on CFD Workflows	LRZ	ONLINE	0,5	LRZ-Kurs	11	5,5
23.11.21	26.11.21	Advanced Fortran Topics	LRZ/PRACE	ONLINE	4	PRACE-Kurs	40	160
30.11.21	30.11.21	Accelerating CUDA C++ Applications with Multiple GPUs	LRZ	ONLINE	1	DLI-Kurs	23	23
01.12.21	03.12.21	Node-Level Performance Engineering	LRZ/PRACE	ONLINE	3	PRACE-Kurs	49	147
06.12.21	07.12.21	Molecular Modeling with Schrödinger-Suite	LRZ	ONLINE	2	GCS-Kurs	61	122
Gesamt			26		72		888	2678,5

PUBLIKATIONEN

ARTIKEL IN WISSENSCHAFTLICHEN ZEITSCHRIFTEN

5

Cielo, S., Iapichino, L., Günther, J., Federrath, C., Mayer, E., & Wiedemann, M. (2021). Visualizing the world's largest turbulence simulation. *Parallel Computing*, 102, 102758. <https://doi.org/10.1016/j.parco.2021.102758>

Federrath, C., Klessen, R. S., Iapichino, L., & Beattie, J. R. (2021). The sonic scale of interstellar turbulence. *Nature Astronomy*, 5(4), 365–371. <https://doi.org/10.1038/s41550-020-01282-z>

Groen, D., Arabnejad, H., Jancauskas, V., Edeling, W. N., Jansson, F., Richardson, R. A., Convey, P. V. et al (2021). VECMAtk: A scalable verification, validation and uncertainty quantification toolkit for scientific simulations. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 379(2197), rsta.2020.0221, 20200221. <https://doi.org/10.1098/rsta.2020.0221>

Klöffel, T., Mathias, G., & Meyer, B. (2021). Integrating state of the art compute, communication, and autotuning strategies to multiply the performance of ab initio molecular dynamics on massively parallel multi-core supercomputers. *Computer Physics Communications*, 260, 107745. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107745>

O'Brien, J. T., Kerzendorf, W. E., Fullard, A., Williamson, M., Pakmor, R., Buchner, J., Hachinger, S., van der Smagt, P. et al (2021). Probabilistic reconstruction of type Ia supernova SN 2002bo. *The Astrophysical Journal Letters*, 916(2), L14. <https://doi.org/10.3847/2041-8213/ac1173>

BUCHKAPITEL

2

Kolb, D., Ballis, A., Gloe, M., Duda, F., Heindl, F., Hüttl, E., Schwendemann, L. et al (2021). Evaluation of the interaction with a digital 3d testimony (A. Ballis, M. Gloe, F. Duda, F. Heindl, E. Hüttl, D. Kolb, & L. Schwendemann, Eds.). Braunschweig: Ludwig-Maximilians-Universität München. <https://doi.org/10.5282/ubm/epub.75069>

Munke, J., Hayek, M., Golasowski, M., García-Hernández, R. J., Donnat, F., Koch-Hofer, C., Martinovič, J. et al (2022). Data system and data management in a federation of hpc/cloud centers. In O. Terzo & J. Martinovič, *HPC, Big Data, and AI Convergence Towards Exascale* (1st ed., pp. 59–80). New York: CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781003176664-4>

BEITRÄGE ZU TAGUNGSBÄNDEN

19

Batsaikhan, A., Divanis, A., & Kurtz, W. (2021). Insights from the German project BAYSICS on imagery and geographic information in citizen science. *Japan Society of Photogrammetry and Remote Sensing (JSPRS)*, 61–62.

Brayford, D., Allalen, M., Iapichino, L., Brennan, J., Moran, N., O’Riordan, L. J., & Hanley, K. (2021). Deploying containerized quanex quantum simulation software on hpc systems. 2021 3rd International Workshop on Containers and New Orchestration Paradigms for Isolated Environments in HPC (CANOPIE-HPC), 1–9. St. Louis, MO, USA: IEEE. <https://doi.org/10.1109/CANOPIEHPC54579.2021.00005>

Brennan, J., Allalen, M., Brayford, D., Hanley, K., Iapichino, L., O’Riordan, L. J., Moran, N. et.al (2021). Tensor network circuit simulation at exascale. 2021 IEEE/ACM Second International Workshop on Quantum Computing Software (QCS), 20–26. St. Louis, MO, USA: IEEE. <https://doi.org/10.1109/QCS54837.2021.00006>

Genz, F., Fuchs, N., Kolb, D., Müller, S., & Kranzlmüller, D. (2021). Evaluation of proprietary social vr platforms for use in distance learning. In L. T. De Paolis, P. Arpaia, & P. Bourdot (Eds.), *Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics* (Vol. 12980, pp. 462–480). Cham: Springer International Publishing. DOI:10.1007/978-3-030-87595-4_34

Genz, F., Hufeld, C., Müller, S., Kolb, D., Starck, J., & Kranzlmüller, D. (2021). Replacing eeg sensors by ai based emulation. In L. T. De Paolis, P. Arpaia, & P. Bourdot (Eds.), *Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics* (Vol. 12980, pp. 66–80). Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87595-4_6

Hachinger, S., Martinovič, J., Terzo, O., Levrier, M., Scionti, A., Magarielli, D., Dees, A. et.al (2021). HPC-Cloud-Big Data convergent architectures and research data management: The lexis approach. *Proceedings of International Symposium on Grids & Clouds 2021 — PoS(ISGC2021)*, 004. Academia Sinica Computing Centre (ASGC), Taipei, Taiwan Website: <https://pos.sissa.it/378/004/>; Sissa Medialab. <https://doi.org/10.22323/1.378.0004>

Kolb, D., & August Kranzlmüller, D. (2021). Preserving conversations with contemporary holocaust witnesses: Evaluation of interactions with a digital 3d testimony. *Extended Abstracts of the 2021 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*, 1–6. Yokohama Japan: ACM. <https://doi.org/10.1145/3411763.3451777>

Kronbichler, M., Fehn, N., Munch, P., Bergbauer, M., Wichmann, K.-R., Geitner, C., Wall, W. A. et.al (2021). A next-generation discontinuous galerkin fluid dynamics solver with application to high-resolution lung airflow simulations. *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, 1–15. St. Louis Missouri: ACM. <https://doi.org/10.1145/3458817.3476171>

Martone, M., & Lawall, J. (2021). Refactoring for Performance with Semantic Patching: Case Study with Recipes. In H. Jagode, H. Anzt, H. Ltaief, & P. Luszczek (Eds.), *High Performance Computing* (Vol. 12761, pp. 226–232). Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-90539-2_15

PUBLIKATIONEN

BEITRÄGE ZU TAGUNGSBÄNDEN

19

Martone, M. (2021). Portable and Efficient Sparse Matrices Computations: From Interactive Notebook to PRACE Tier-0 Systems. Poster presented at the EuroHPC Summit Week 2021 (PRACEdays21), virtual.

<https://events.prace-ri.eu/event/1018/page/116-pracedays21-poster-session-digital>

Martone, M., & Bacchio, S. (2021). Pyrsb: Portable performance on multithreaded sparse blas operations. 106–114. Austin, Texas. **<https://doi.org/10.25080/majora-1b6fd038-00e>**

Martone, Michele, Bacchio, Simone, Finkenrath, Jacob, Giraud, Luc, & Simonin, Matthieu. (2021). An Universal Shared-Memory Parallel Sparse BLAS for C++/Fortran/Octave/Python and a Use Case in LQCD. Poster presented at the Digital ISC 2021, virtual. **<https://www.isc-hpc.com/>**

Mayer, E., Kriszun, K., Merz, L., Radon, K., Garrido, M. A., & Kranzlmüller, D. A. (2021). Designing an educational virtual reality application to learn ergonomics in a work place. ACM International Conference on Interactive Media Experiences, 247–252. Virtual Event USA: ACM. **<https://doi.org/10.1145/3452918.3465504>**

Müller, S., & Kranzlmüller, D. (2021). Dynamic Sensor Matching for Parallel Point Cloud Data Acquisition. International Conference in Central Europe on Computer Graphics WSCG (pages 21–30. 29). DOI:10.24132/CSRN.2021.3101.3

Muraña, J., Navarrete, C., & Nesmachnow, S. (2021). Machine Learning for Generic Energy Models of High Performance Computing Resources. In H. Jagode, H. Anzt, H. Ltaief, & P. Luszczek (Eds.), High Performance Computing (Vol. 12761, pp. 314–330). Cham: Springer International Publishing. **https://doi.org/10.1007/978-3-030-90539-2_21**

Pöhn, D., Seeber, S., Hanauer, T., Ziegler, J. A., & Schmitz, D. (2021). Towards improving identity and access management with the idmsecman process framework. The 16th International Conference on Availability, Reliability and Security, 1–10. Vienna Austria: ACM. **<https://doi.org/10.1145/3465481.3470055>**

Schulz, M., Kranzlmüller, D., Schulz, L. B., Trinitis, C., & Weidendorfer, J. (2021). On the inevitability of integrated hpc systems and how they will change hpc system operations. Proceedings of the 11th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies, 1–6. **<https://doi.org/10.1145/3468044.3468046>**

Shoukourian, H., Weinberg, V., Januszewski, R., Stoffers, H., Johansson, A., Salminen, S., Nomine, J.-P. et.al (2021). European Workshops on HPC Infrastructures. Proceedings of the 11th European HPC Infrastructure Workshop. Retrieved from **<https://prace-ri.eu/infrastructure-support/european-workshops-on-hpc-infrastructures/hpc-infrastructures-workshop-2021/>**

Ziegler, J. A., Stevanovic, U., Groep, D., Neilson, I., Kelsey, D. P., & Kremers, M. (2021). Making identity assurance and authentication strength work for federated infrastructures. Proceedings of International Symposium on Grids & Clouds 2021 — PoS(ISGC2021), 029. Academia Sinica Computing Centre (ASGC), Taipei, Taiwan Website: **<https://publikationen.bibliothek.kit.edu/1000140364>**
DOI: 10.22323/1.378.0029

BACHELOR- UND MASTERARBEITEN

8

Tobias Appel (Betreuer), Brießmann, A., Passive OS-Fingerprinting with Netflow Data, Masterarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, März, 2021.

Tobias Appel, Daniel Weber (Betreuer), Silaci, M. C. (Autor), Conception and Implementation of a Realtime Asset Database based on Netflow Data, Masterarbeit, Technische Universität München, Juni, 2021.

Reinhard Gloger (Betreuer), Nicholas Reyes (Autor), Experimental Examination of Distributed Conflicts in Software Defined Networks, Masterarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, October 2021.

Tobias Appel, Daniel Weber (Betreuer), Werner, C. (Autor), Nutzerfreundliche Visualisierung von Netzwerkaktivitäten in Echtzeit, Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Mai, 2021.

Tobias Appel (Betreuer), Rinke, T., Angriffserkennung auf Layer2/3 in WLAN-Netzen des Münchner Wissenschaftsnetzes, Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Mai, 2021.

Michael Schmidt, Jule Ziegler (Betreuer), Franze, N. (Autor), Bedrohungsmodellierung im Kontext Informationssicherheit, Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Juni, 2021.

Tobias Appel, Daniel Weber (Betreuer), Pointner, M. E. (Autor), Integration eines automatisierten Malware Analyse-Systems in das Security Monitoring des Münchner Wissenschaftsnetzes, Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, Juli, 2021.

Stefan Metzger (Betreuer), Wiegand, M. (Autor), Vergleich zweier Frameworks für Informationssicherheitsmanagementsysteme in kommunalen Einrichtungen, Bachelorarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität München, März, 2021.

TECHNISCHE BERICHTE

2

Bispo, J., Barbosa, J. G., Silva, P. F., Morales, C., Myllykoski, M., Ojeda-May, P., Lührs, S. et.al (2021). Best Practice Guide Modern Accelerators (H. Shoukourian, Ed.). PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Retrieved from <https://prace-ri.eu/training-support/best-practice-guides/modern-accelerators/>

Iglezakis, D., Fuhrmans, M., Arndt, S., Demandt, É., Hachinger, S., Hausen, D., Terzijska, D. et.al (2021). Bausteine Forschungsdatenmanagement: 2021, 2 Interoperabilität von Metadaten innerhalb der NFDI. <https://doi.org/10.17192/bfdm.2021.2.8313>



IMPRESSUM

Herausgeber

Leibniz-Rechenzentrum der
Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Konzeption und Redaktion

PR-Team LRZ

Autoren

Susanne Vieser
Jan Schulze
Sabrina Schulte
Simon Schlechtweg

Grafik & Layout

Ivana Steinbeiß
Erika Krimmer
Veronika Hohenegger

Bildnachweise

Sofern nicht hier gelistet, sind die Bilder Eigentum des LRZ oder wurden über Stock-Lizenzen erworben.

Die Portraitbilder der Interviewpartner wurden von den jeweiligen Interviewpartner:innen bereit gestellt.

S. 10: Bayerische Staatskanzlei

S. 13: Kai Neunert für IQM

S. 29: Lehrstuhl Prof. Dr. Wolfgang Wall, Institut für Numerische Mechanik, Technische Universität München

S. 32: Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt

S. 35: Lehrstuhl für Maschinenbau, Technische Universität München

S. 42: Bayerische Staatskanzlei

S. 52: Prof. Dr. Volker Springel, Max-Planck-Institut für Astrophysik

S. 56: Atos

Kontakt

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

Stand: April 2023

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