



Helmholtz-Cloud – vernetzte IT-Dienste für die Spitzenforschung
Helmholtz Cloud – interconnected IT services for cutting-edge research

Kohlenstofffreie Verbrennung: Ein Blick in die Zukunft
Carbon-free combustion: A look into the future

Mentoring-Programm für MINT-Studentinnen – Warp4IT
Mentoring program for female STEM students – Warp4IT

Liebe Leserin, lieber Leser,

der Cloud-Trend setzt sich weiter fort. Zunehmend mehr Dienste, die bisher lokal betrieben wurden, werden in die Cloud verlagert oder sie werden bereits von Anfang an in der Cloud geplant. Nicht nur in Unternehmen und Industrie, auch in Wissenschaftseinrichtungen, steigt die Zahl von Cloud-Anwendungen stetig. Es verwundert also nicht, dass auch die Helmholtz-Zentren eine gemeinsame Cloud aufbauen (S. 8). Jedes Zentrum trägt Dienste und Anwendungen bei, die über ein nutzerfreundliches Portal angeboten werden. Neben den dabei anfallenden technischen Herausforderungen, ist es zudem aufwändig, ein gemeinschaftliches Service- und Qualitätskonzept abzustimmen. Dem kontinuierlichen Austausch untereinander kommt dabei eine besondere Bedeutung zu, ist doch unabdingbar, sich auf gemeinsame Vorgehensweisen und Standards zu verständigen. Daher spielten, neben anderen, gerade Dienste für die digitale Kommunikation eine wichtige Rolle beim Aufbau der Helmholtz-Cloud.

Oft reicht eine digitale Kommunikation aber nicht aus, um im Forschungsalltag effizient zusammenzuarbeiten. Menschen aus dem SCC reisen inzwischen wieder zu Projektmeetings in Präsenz, reisen zu internationalen Konferenzen (S. 15) oder zu längeren Forschungsaufenthalten auf der ganzen Welt. Die Forschungsarbeit, zu der wir auf Seite 16 berichten, ist an der renommierten Stanford University entstanden, wo Thorsten Zirwes während eines DAAD-Stipendiums untersucht hat, ob eine CO₂-freie Verbrennung von Ammoniak in porösen Materialien möglich ist.

Das Spektrum der wissenschaftlichen Zusammenarbeit und Kommunikation am KIT ist immens groß. Ganz unterschiedliche Menschen bringt man beispielsweise mit Nachwuchsforschungsgruppen oder Mentoring-Programmen zusammen. Charlotte Debus und Sebastian Krumscheid (Titelfoto) starteten jeweils ihre neuen Forschungsgruppen im SCC (S. 22) und für MINT-Studentinnen des KIT haben Wissenschaftlerinnen des SCC ein Mentoring-Programm ins Leben gerufen. Darin betreuen sie Studentinnen bei Informatik-Projekten und geben ihnen einen Einblick in den Wissenschaftsalltag (S. 18 und 23).

Viel Freude beim Lesen

Martin Frank, Martin Nußbaumer, Bernhard Neumair, Achim Streit

Dear reader,

the cloud remains trending. Increasingly services that were operated locally are moved to the cloud or they operate in the cloud from the very beginning. Not only in industry, also in scientific institutions the number of cloud applications continues to increase. Following suit, the Helmholtz Centres have started to build a common cloud (p. 8). Each centre contributes services and applications which are offered via a user-friendly portal. For the joint service and quality concept the centres intensively exchanged information to reach agreement on common procedures and standards. This is why, among other things, services for digital communication played an important role while developing the Helmholtz Cloud.

However, remote communication may not always be sufficient for collaborating effectively. People from SCC have started travelling and meeting again at international conferences (p. 15) or went to longer research stays all over the world. On page 16, we discuss research that was conducted by Thorsten Zirwes during a DAAD scholarship at the prestigious Stanford University, on the feasibility of achieving CO₂-free combustion of ammonia in porous materials.

The spectrum of scientific cooperation and communication at KIT is immense. Junior research groups or mentoring programs bring together individuals from diverse backgrounds and experiences. Charlotte Debus and Sebastian Krumscheid (cover photo) started their new research groups at SCC (p. 22) and female scientists at SCC have set up a mentoring programme for female MINT students at KIT. The program involves overseeing computer science projects for female students and providing them with an understanding of what everyday scientific life entails (p. 18 and 23).

Enjoy reading

Martin Frank, Bernhard Neumair, Martin Nußbaumer, Achim Streit



DIENSTE UND INNOVATION

- 04 Mehr Hochleistungsrechnerkapazitäten für Lehre und Forschung im Land
- 06 HAICORE – Vereinfachter Zugang zu mehr KI-Ressourcen
- 07 RegApp-Community Management steuert Zugang zu HPC-Ressourcen
- 08 Helmholtz-Cloud – vernetzte IT-Dienste für die Spitzenforschung
- 10 Matrix – ein neuer Kommunikationsdienst am KIT

FORSCHUNG UND PROJEKTE

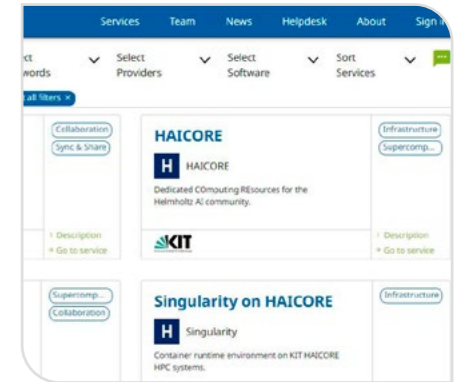
- 13 Research Software Engineering – erster RSE-Workshop am KIT
- 14 Helmholtz AI Rechnerinfrastruktur auf die Probe gestellt
- 15 Beiträge zur Konferenz SIAM CSE
- 16 Kohlenstofffreie Verbrennung: Ein Blick in die Zukunft

STUDIUM UND WISSENSVERMITTLUNG

- 18 Mentoring-Programm für MINT-Studentinnen – Warp4IT
- 20 Schülerinnen und Schüler erleben Mathematik in Alltag, Technik und Forschung

VERSCHIEDENES

- 22 Neues aus den SCC-Abteilungen
- 23 Inside Warp4IT – Ein Erfahrungsbericht
- 23 Impressum



Mehr Hochleistungsrechnerkapazitäten für Lehre und Forschung im Land

Bereits seit 2014 betreibt das SCC mit großem Erfolg den Hochleistungsrechner „bwUniCluster“ als Grundversorgungssystem für die Forschung und Lehre an den baden-württembergischen Hochschulen. Mit einer neuen Hardware-Erweiterung, der bwUniCluster 2.0 Stufe 2, wird die Leistung erneut gesteigert.

Simon Raffener, Robert Barthel, Pascal Schuhmacher

Vor mehr als neun Jahren wurde das wissenschaftliche Hochleistungsrechnen in Baden-Württemberg auf eine neue Basis gestellt. Diese auf den Namen „bwHPC“ getaufte Strategie sieht eine dreistufige Hierarchie (Tier-1 bis Tier-3) mit insgesamt sieben Hochleistungsrechnern an unterschiedlichen Hochschulen vor, die eine Versorgung mit HPC-Rechenleistung für alle Leistungsebenen beinhaltet. Ergänzend kommen vielfältige, von den beteiligten Hochschulen gemeinsam zu erbringende Unterstützungsleistungen hinzu. Ein besonderes Augenmerk soll dabei auf die „Durchlässigkeit“ zwischen den Leistungsebenen gelegt werden, also die Nutzenden so zu qualifizieren, dass sie später bei Bedarf dazu in der Lage sind, auf eine höhere Leistungsebene wechseln zu können.

Grundversorgung für Lehre und Forschung

Dem KIT kommen innerhalb von bwHPC gleich zwei Sonderrollen zu. Mit dem Hochleistungsrechner Karlsruhe (HoreKa) und dem bwUniCluster betreibt es nicht nur als einziger Standort in Baden-Württemberg gleich zwei Hochleistungsrechner auf zwei Leistungsebenen (Tier-2 und Tier-3). Der bwUniCluster ist auch das zentrale Einstiegssystem für Angehörige aller finanziell am System beteiligten Hochschulen in Baden-Württemberg und das einzige, das auch in Vorlesungen und für Praktika eingesetzt werden kann. Alle anderen Systeme – Hawk am HLRS, HoreKa am KIT, bwForCluster NEMO, Helix, BinAC und JUSTUS2 in Freiburg, Heidelberg, Tübingen und Ulm – stehen ausschließlich Forschenden auf Antrag zur Verfügung.

Der bwUniCluster stellt daher für viele Nutzende den Einstiegspunkt in die Welt des Hochleistungsrechnens dar. Auf diesem System erlernen sie den Umgang mit den gängigen Anwendungen sowie Programmier- und Simulationstechniken und führen in kleinerem Rahmen Simulationen und andere wissenschaftliche Berechnungen durch. Zudem deckt das System auch den Bedarf aus der Großforschungsaufgabe des KIT durch eine separate Beteiligung bzw. Erweiterung. Entsprechend hoch sind die Nutzerzahlen: Mehr als 5.000 Nutzende sind aktuell auf dem System registriert, im Mittel mehr als 500 davon regelmäßig aktiv.

„Stufenkonzept“ von Anfang an eingeplant

Hochleistungsrechner werden in der Regel nach der Installation mehrere Jahre lang fast unverändert betrieben und dann komplett durch ein neues, leistungsfähigeres und energieeffizienteres System ersetzt. Um die zur Verfügung stehenden Mittel möglichst effektiv einzusetzen, die Attraktivität des Systems zu gewährleisten und die Komplexität für die Nutzenden zu reduzieren, war für den bwUniCluster hingegen bereits von Anfang an ein sogenanntes „Stufen-Konzept“ vorgesehen. Das System besteht aus zwei Teilen, die um zweieinhalb Jahre versetzt voneinander beschafft und jeweils nach ca. fünf Jahren ersetzt werden. Mittlerweile befindet sich das Gesamtsystem in seiner „vierten Inkarnation“ und fast jede Schraube wurde bei der Aufrüstung mindestens einmal ausgetauscht. Die Zugriffsberechtigungen und die Daten bleiben bei jedem Wechsel erhalten, eine Neuregistrierung ist nicht nötig.

Es gibt heute noch eine ganze Reihe von Nutzenden, die sich 2014 erstmals für den Zugriff registriert haben und das System bis heute durchgängig mit denselben Anwendungen benutzen – nun allerdings auf deutlich leistungsfähigerer Hardware. Dieses sehr erfolgreiche und langfristig angelegte Grundkonzept soll auch über 2025 hinaus weiter verlängert werden; die Beantragung der nächsten Stufen (bwUniCluster 3) läuft derzeit.

Stufe 2 bringt neue CPUs und GPUs

Die aktuelle Hardware besteht aus einem in 2020 in Betrieb genommenen Hauptsystem, dem bwUniCluster 2.0 Stufe 1, sowie einer im November 2022 neu in Betrieb gegangenen Erweiterungspartition, der Stufe 2.

Durch die unterschiedlichen Beschaffungszeitpunkte ergibt sich eine vergleichsweise große Bandbreite an unterschiedlichen Hardwaregenerationen. Derzeit sind neben Systemen mit Prozessoren der „Cascade Lake“-Generation von Intel auch solche mit neueren Intel-CPU-Generierungen der „Ice Lake“-Generation vorhanden. Während es die erste Stufe des bw-UniCluster 1 im Jahr 2014 auf insgesamt 512 Systeme mit 8.192 CPU-Cores (16 pro System) brachte, sind aktuell mehr als 830 davon mit über 45.200 Cores installiert.

Die nun insgesamt 196 NVIDIA-GPUs verteilen sich ebenfalls auf mehrere Generationen (V100, A100 und H100), wobei die GPUs vom Typ H100 derzeit zu den energieeffizientesten Recheneinheiten der Welt gehören.



Abbildung 1: Die Hardware der im November 2022 neu in Betrieb gegangenen bwUniCluster 2.0 Stufe 2 in den Rechnerräumen des SCC

Auf diese GPUs kann unter anderem grafisch und web-basiert mittels Jupyter interaktiv zugegriffen werden (s. SCC-News 2/2020), wodurch der bwUniCluster 2.0 auch ideal für die Lehre im Bereich der Künstlichen Intelligenz (KI) und des Maschinellen Lernens (ML) eingesetzt werden kann.

Aber auch hinter den Kulissen gibt es mit der neuen Stufe 2 Fortschritte: Wie beim „großen Bruder“ HoreKa kommt erstmals

in einem Tier-3-System in Baden-Württemberg eine Direktwasserkühlung zum Einsatz. Diese ermöglicht zukünftig eine energieeffizientere Kühlung und erhöht die Leistung und Stabilität.

Gemeinsame Pflege und Unterstützung

Die beteiligten Hochschulen bzw. Anteilseigner teilen sich nicht nur die Finanzierung

und die Betriebskosten, auch die Unterstützung der Nutzenden bei Problemen oder der effizienten Nutzung des Systems sowie die Pflege der vorinstallierten Software-Anwendungen erfolgen gemeinsam.

Weitere Informationen zu bwHPC und dem bwUniCluster 2.0 sind auf der Webseite unter www.bwhpc.de/ oder in der Nutzerdokumentation unter wiki.bwhpc.de/bwunicluster2.php zu finden.

More high-performance computing resources for research and teaching in Baden-Württemberg

Since 2014, SCC has been operating the high-performance computer "bwUniCluster" with great success as the general purpose HPC system of Baden-Württemberg's universities for research and teaching, making it the primary entry point to the world of high-performance computing for many users. The recent hardware extension (stage 2) has provided an increase of computing capabilities and performance in shorter than usual upgrade cycles. While the first stage of bwUniCluster 1 in 2014 had 512 nodes with a total of 8,192 cores (16 per server), the current installation has more than 830 servers exceeding 45,200 cores. The currently installed 196 NVIDIA GPUs comprise several hardware generations (V100, A100 and H100) and make the system particularly suited for teaching AI and ML. Furthermore, direct water cooling is being used for the first time in a tier-3 system in Baden-Württemberg, enabling a more energy efficient cooling. SCC is currently also working on the proposal for bwUniCluster 3, which is supposed to extend the overall concept well beyond 2025.

HAICORE – Vereinfachter Zugang zu mehr KI-Ressourcen

Seit mehr als zwei Jahren betreibt das SCC dedizierte KI-Ressourcen für die KI-Forschung innerhalb der Helmholtz-Gemeinschaft, kurz HAICORE@KIT. Ein neues Betriebsmodell vereinfacht nun den Zugang noch weiter und erhöht die Kapazitäten.

Simon Raffener, Markus Götz

Künstliche Intelligenz (KI) und Maschinelles Lernen (ML) umfassen Technologien, die Industrie, Wissenschaft und Gesellschaft in einer noch nie dagewesenen Art und Weise beeinflusst haben und weiter beeinflussen werden. Sprach- und Bilderkennung sind nur zwei der greifbaren Beispiele für Anwendungen, die sich in den letzten Jahren als zuverlässig einsetzbar erwiesen haben.

Helmholtz AI: Eine Plattform für KI/ML

Die Helmholtz-Gemeinschaft hat bereits 2019 die Plattform Helmholtz AI¹ gestartet, um eine Führungsposition mit internationaler Sichtbarkeit in angewandter KI/ML zu erreichen. Einzigartige Forschungsfragen, Datensätze und Expertise sollen mit neu entwickelten, KI/ML-basierten Werkzeugen kombiniert werden. So entsteht eine umfassendere Sicht auf die Forschung, die im Sinne einer Demokratisierung von Wissenschaft allen in einer offenen und dynamischen Gesellschaft zugänglich gemacht wird. Helmholtz AI dient dabei als forschungsorientierte Plattform, die gemeinsame Forschungsprojekte fördert, Ähnlichkeiten zwischen Anwendungen identifiziert und nutzt, die Entwicklung allgemeiner KI/ML-Methoden vorantreibt, themenspezifische Exzellenz und KI/ML-Kompetenz integriert, Werkzeuge verbessert und die aktuelle und nächste Generation von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern ausbildet.

HAICORE: Ressourcen für KI/ML

Für die Forschung und Ausbildung in den Bereichen KI und ML werden vor allem große Mengen von Rechenleistung

HELMHOLTZ AI | ARTIFICIAL INTELLIGENCE COOPERATION UNIT

benötigt, die meist mittels GPUs bereitgestellt werden. Um den kurzfristigen Bedarf an Hardware in diesem Bereich zu befriedigen, wurden mit den „Helmholtz AI Computing Resources“ (HAICORE) sowohl am SCC (HAICORE@KIT) als auch am Forschungszentrum Jülich (HAICORE@FZJ) dedizierte Hardware-Plattformen für alle KI-Forschenden der Helmholtz-Gemeinschaft geschaffen.

HAICORE@KIT ist dabei mit seinen 72 GPUs vom Typ NVIDIA A100-40 vor allem auf einen prototypischen Nutzungsmodus der Ressourcen, z.B. für die interaktive Verwendung mit Jupyter, und einen möglichst einfachen Zugang ausgerichtet. HAICORE@FZJ bietet größeren Projekten mehr Ressourcen (bis zu 5.000 GPU-Stunden), der Zugang ist dafür aber auch mit höheren Hürden verbunden. Projekten mit einem noch höheren Leistungsbedarf stehen auch die großen GPU-Systeme wie z.B. HoreKa am SCC zur Verfügung.

Selbstregistrierung und mehr Kapazitäten

Der Zugang zu den HAICORE@KIT Ressourcen war zwar bereits sehr niederschwellig ausgelegt, erforderte aber einige manuelle Schritte wie das Ausfüllen eines kurzen Antragsformulars oder die Pflege von Gäste- und Partner-Accounts für alle Nutzenden, die nicht dem KIT angehören.

Zum 22.09.2022 wurde das bisherige Betriebsmodell geändert. Mitarbeitende aller 18 Helmholtz-Zentren können

sich nun über die Helmholtz AAI² mit ihren gewohnten Konten beim „Federated Login Service“ (FeLS³) des SCC anmelden und sich dort selbst für den neuen Dienst HAICORE@KIT registrieren. Der Zugriff auf bis zu vier GPUs gleichzeitig pro Job ist damit sofort freigeschaltet. Eine Erhöhung dieses Limits ist auf Anfrage möglich.

Zur weiteren Erhöhung der Kapazität kommt nun zusätzlich auch das Feature „Multi Instance GPU“ (MIG) zum Einsatz. Dieses erlaubt mehreren Nutzenden den gleichzeitigen Zugriff auf die gleiche GPU, ohne dass sich Prozesse gegenseitig beeinflussen.

Weitere Informationen sind auch in der Nutzerdokumentation zu finden: nhr.kit.edu/userdocs/haicore

HAICORE – Simplified Access to More AI Resources

For more than two years, SCC has been operating the so-called “Helmholtz AI Computing Resources” (HAICORE@KIT). This dedicated hardware platform offers access to 72 NVIDIA A100-40 GPUs for Artificial Intelligence (AI) and Machine Learning (ML) researchers in the Helmholtz association. Since September 2022, HAICORE@KIT has switched to an improved operating model.

² hifis.net/aai

³ fels.scc.kit.edu

RegApp-Community Management steuert Zugang zu HPC-Ressourcen

Im Rahmen des Verbundprojektes bwIDM2 wird das föderative Identitätsmanagementsystem RegApp um eine Projekt- und Community-Verwaltung ergänzt. Damit werden die gestiegenen IT-Sicherheitsanforderungen erfüllt und der Bedarf an Funktionen für ein zentrales Zugangsmanagement umgesetzt. Insbesondere die HPC-Community im Land und der Helmholtz-Gemeinschaft profitiert von diesen neuen Features.

René Caspart, Simon Raffener, Ulrich Weiß

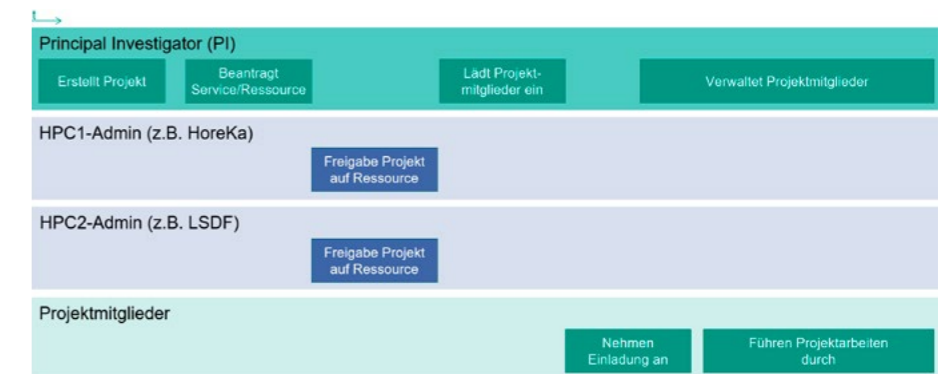


Abbildung 1: Ablauf für Zugang und Bereitstellung projektbasierter Ressourcen mit RegApp

Einerseits existieren zwar Plattformen wie z.B. die „Zentrale Antragsseite für bwHPC“ (ZAS)¹, wo an bwHPC teilnehmende Personen zu diversen Projekten zugeordnet werden, andererseits werden Projekte und deren Mitglieder aber auch lokal in den Standorten gepflegt. Um diese Verwaltungsprozesse zu vereinfachen und zu vereinheitlichen, implementiert die neueste Version der Identitätsmanagementsoftware RegApp² eine zentrale Projekt- und Community-Verwaltung als übergreifende Basis.

Neben den Anforderungen aus dem bwIDM2-Projekt³ stehen dabei auch die Anforderungen aus den Verbundprojekten bwHPC⁴, NHR⁵ und NFDI⁶ im Fokus der Entwicklung. Die zentralen Fragestellungen dabei drehen sich um die Definition von Prozessen zur Beantragung von Projektressourcen, Zugangsfreigabe zu HPC-Ressourcen für die Projektmitglieder, Verwaltung der berechtigten Personengruppen bis hin zur eigentlichen Durchführung im Rahmen eines föderierten, sicheren Logins und der Nutzung von entsprechenden Rechenressourcen. Abbildung 1 zeigt die beteiligten Personengruppen und die prinzipiellen Abläufe.

Für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die das NHR-System HoreKa nutzen wollen, wird der Ablauf durch das Community Management deutlich vereinfacht werden.

Bisher muss, wenn einem Rechenzeitprojekt neue Projektmitglieder hinzugefügt oder ausgeschiedene Projektmitglieder entfernt werden sollen, ein Antrag zur Aufnahme oder Austragung dieser gestellt werden. Nach Eingang wird dieser durch die HPC-Administratoren bearbeitet. Mit dem Community Management wird es den PIs der Rechenzeitprojekte zukünftig selbst möglich sein, die Projektmitglieder zu verwalten, neue Projektmitglieder aufzunehmen und ausgeschiedene zu entfernen. Diese Änderungen können somit direkt und ohne zeitliche Verzögerung durch die zentrale Bearbeitung durchgeführt werden und

neue Projektmitglieder die HPC Ressourcen direkt nutzen. Die beschriebenen Features sind nicht nur für Nutzende von HPC-Systemen, sondern ganz allgemein für Communities in Föderationen mit verschiedenen Diensten interessant.

Fazit

Die neue Community-Verwaltung ermöglicht es, die Verwaltung von Projekten zu dezentralisieren und an die PIs zu delegieren. Diese können Zugänge zu Projekten zügiger umsetzen und verantworten die ihnen übertragenen Ressourcen.

RegApp community management controls access to HPC resources

As part of the joint project bwIDM2, the federated identity management system RegApp is extended to include project and community management. This fulfills the increased IT security requirements and implements the need for functions for central access management. In particular, the HPC community in the state and the Helmholtz community will benefit from these new features.

¹ helmholtz.ai

Helmholtz-Cloud – vernetzte IT-Dienste für die Spitzenforschung

Mit der Beteiligung an der Helmholtz-Cloud unterstreicht das KIT sein Engagement, die Spitzenforschung in der Helmholtz-Gemeinschaft mit exzellenten Lösungen zu unterstützen. Die cloud-fähigen und föderierten IT-Services des KIT fördern ein kollaboratives und interdisziplinäres Forschungsumfeld und somit einen effizienteren Austausch von Ideen und Wissen zwischen den Forschenden.

Matthias Leander-Knoll, Janne Schulz, Klaus Scheibenberger

Die herausragende Stellung der Helmholtz-Gemeinschaft in der deutschen Forschungslandschaft basiert zunehmend auf zentrenübergreifender und internationaler Zusammenarbeit sowie der kollektiven Nutzung von Datensammlungen und -diensten. Um den Chancen und Herausforderungen zu begegnen, die sich aus den Entwicklungen in den Informations- und Datenwissenschaften für alle Forschungsprogramme der Helmholtz-Gemeinschaft ergeben, hat der Präsident der Gemeinschaft deshalb den Helmholtz-Inkubator gegründet – ein hochrangiges Expertengremium, das die Informations- und Datenwissenschaften aller Helmholtz-Zentren repräsentiert. Gemeinsam entwickeln sie Ideen und Strategien, die der Helmholtz-Gemeinschaft zu Gute kommen sollen. Das SCC ist von Anfang an im Helmholtz-Inkubator aktiv beteiligt.

Die Plattform HIFIS

Die Entwicklung einer Plattform für Helmholtz Federated IT Services, kurz HIFIS, ist eine der Initiativen des Helmholtz-Inkubators. Eines der Ziele von HIFIS ist es, die **Helmholtz-Cloud** aufzubauen, um darin IT-Dienste von Zentren zu integrieren und für alle Helmholtz-Zentren bereitzustellen¹. Die Forschungsgemeinschaft so untereinander zu vernetzen und verschiedene Informations- und Datendienste anzubieten, fördert die Zusammenarbeit über alle Helmholtz-Forschungsbereiche hinweg. Aus Diensten, die bislang nur in den einzelnen Einrichtungen angeboten wurden, werden mithilfe von HIFIS übergreifende Kollaborationsdienste, die für alle Forschenden in der Helmholtz-Cloud zur Verfügung gestellt werden.

¹ [helmholtz.cloud](https://www.helmholtz.cloud)

Die Helmholtz-Cloud Architektur

Das Gesamtsystem umfasst dabei mehrere Kernkomponenten, die den Zugriff auf die Dienste und damit auch ihren Nutzen in der Helmholtz-Cloud möglichst einfach gestalten. Ebenso sind so Dienstinformationen für die Betreiber einfach zu pflegen.

Das Cloud-Portal

Der wichtigste Anlaufpunkt für Nutzende der Helmholtz-Cloud ist das zentrale Cloud-Portal, über das die HIFIS-Services angeboten und zugänglich gemacht werden. Es bietet eine kompakte Übersicht über alle verfügbaren Services genauso wie Filter- und Suchmöglichkeiten an, damit der passende Service von den Nutzenden schnell und einfach gefunden werden kann. Zu jedem Service gibt es eine Beschreibung mit den wichtigsten Eigenschaften und gegebenenfalls Nutzungsbedingungen.

Aktuell umfasst das Helmholtz-Cloud-Portfolio mit 25 Services ein breites Spektrum an Diensten. Darunter sind Services wie „HIFIS Events“ zur Verwaltung von Veranstaltungen oder „Notes“ für kollaboratives Schreiben ebenso wie den

Dateiaustauschdienst und Onlinespeicher „bwSync&Share“ des KIT, der u.a. das gemeinsame Bearbeiten von Office-Dokumenten ermöglicht. Zudem stellt die Helmholtz-Cloud Dienste zur einfachen Nutzung von Hochleistungsrechnerressourcen bereit.

Wie nachfolgend beschrieben, gibt es neben dem Cloud-Portal noch weitere, ebenso wichtige Kernkomponenten in der Helmholtz-Cloud.

Die Helmholtz-AAI

Die weltweit zugängliche Authentifizierungs- und Autorisierungs-Infrastruktur (Helmholtz-AAI) ermöglicht einen Login

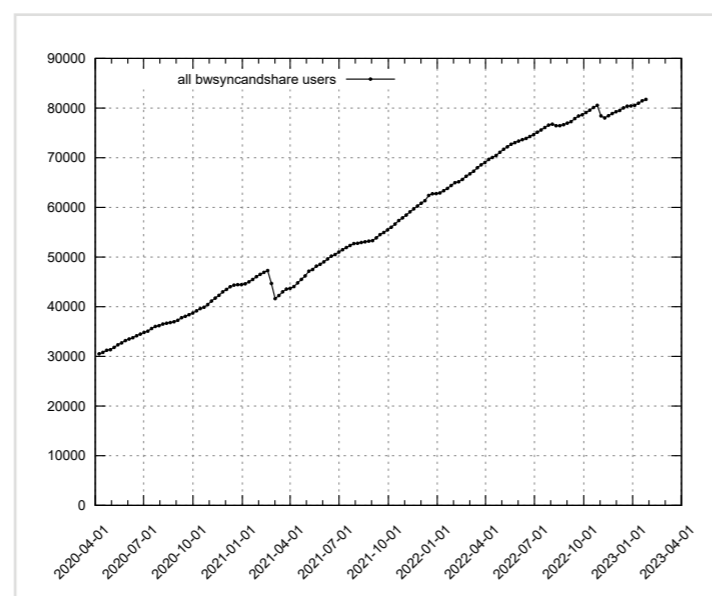


Abbildung 1: Entwicklung der Nutzerzahlen im Dienst bwSync&Share seit April 2020

zu allen HIFIS-Services mit den bekannten Zugangsdaten der jeweiligen Helmholtz-Zentren. Damit müssen sich die Nutzerinnen und Nutzer nicht für jeden Service individuelle Passwörter und Zugänge ein-

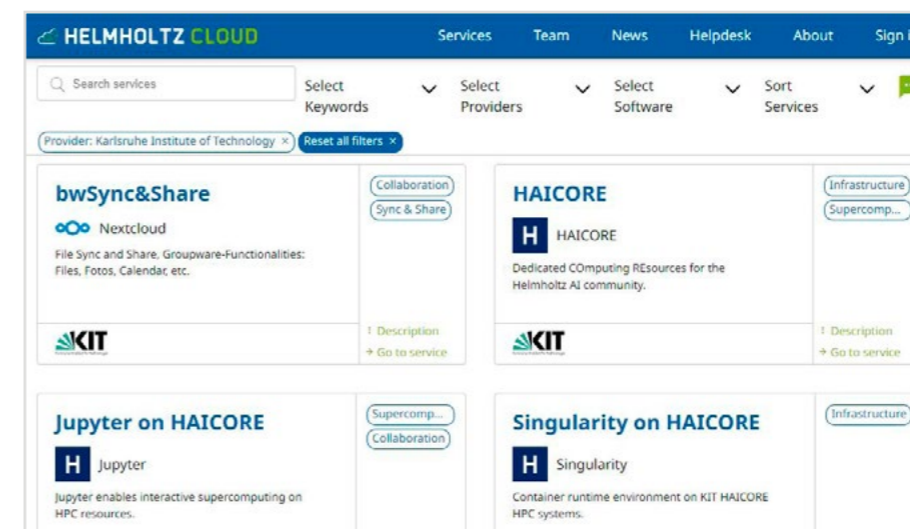


Abbildung 2: Bereitgestellte KIT-Dienste im Portal der Helmholtz-Cloud (helmholtz.cloud/services?provider=Karlsruhe%20Institute%20of%20Technology)

richten, sondern können den gewohnten Zugang ihres Zentrums nutzen. In einem weiteren Schritt wird das Zugangsverfahren so konfiguriert, dass ein einmaliges Anmelden am Portal den Zugriff auf mehrere Dienste ermöglicht.

Das Service-Management

Für die Pflege der Informationen zu den Diensten durch die Betreiber wurde „Plony“ eingeführt: ein umfangreich angepasstes Content-Management-System, das auch mit dem Cloud-Portal verknüpft ist. Somit können z.B. Informationen dort automatisch aktualisiert werden.

KIT-Dienste in der Helmholtz-Cloud

Das KIT ist mit Mitarbeitenden aus dem SCC von Anfang an der Konzeption und am Aufbau der Helmholtz-Cloud maßgeblich beteiligt. Das umfasst Arbeitsgruppen im Backbone Cluster genauso wie die Mitarbeit in den Arbeitsgruppen im Cloud Services Cluster. Als Service-Provider bringt das KIT technische Ressourcen und fachliche Expertise beim Betrieb von hochskalierenden Services mit mehreren zehntausend Nutzenden ein. Die IT-Dienste des KIT HAICORE (siehe S. 6) und Jupyter Notebooks sowie die Containerumgebung Singularity stellen Hochleistungsrechnerressourcen und Speicherlösungen bereit. Diese Ressour-

cen unterstützen die Forschenden der Helmholtz-Gemeinschaft bei der Durchführung komplexer Simulationen und Datenanalysen und ermöglichen es ihnen, effizienter und effektiver zu arbeiten. Ergänzend dazu bietet bwSync&Share sichere und zuverlässige Lösungen für das Management, die Speicherung und das kollaborative Arbeiten an schützenswerten Dokumenten autorisierter Nutzer, deren Zahl sich in den vergangenen beiden Jahren auf etwa 80.000 mehr als verdoppelt hat (Abbildung 1).

Integration neuer Services

Um einen neuen Service in die Helmholtz-Cloud aufzunehmen, müssen organisatorische und betriebliche Aspekte geklärt und gegebenenfalls umgesetzt werden. Zunächst füllt der Service-Provider einen Online-Fragebogen aus. Auf Grundlage der darin erfassten Daten wird dann die Bereitstellung im Portal konfiguriert. Anschließend werden im Rahmen der Service-Integration technische und organisatorische Aspekte betrachtet. Hierbei interessiert vor allem der Reifegrad jedes Dienstes in den Themenfeldern: Anbindung an die Helmholtz-AAI, Provisionierung von neuen Konten, Deprovisionierung von inaktiven Konten, Management von Supportanfragen sowie verfügbare Kapazität und Ressourcen für die Nutzenden. Die so erfassten Reifegrade aller

Dienste ergeben eine Gesamtansicht auf die Helmholtz-Cloud.

Dieser Prozess der Service Integration stellt die geforderte Qualität für die Bereitstellung der Services in der Helmholtz-Cloud sicher (Abbildung 2). Durch die langjährige Erfahrung des KIT im Betrieb von bwSync&Share und HAICORE war diese dort von Beginn an gegeben.

Fazit und Ausblick

Die in der Plattform HIFIS zusammengeschlossenen elf Zentren haben den Aufbau der Helmholtz-Cloud in den vergangenen drei Jahren massiv vorangetrieben. In dieser Startphase wurden die notwendigen Prozesse und Grundstrukturen entwickelt und aufgebaut. Mit dem aktuellen Servicepektrum hat sich die Helmholtz-Cloud gut etabliert, was auch in der sehr erfolgreichen HIFIS-Begutachtung² im September 2022 bestätigt wurde. Nun erfolgt der Übergang in die Betriebsphase. Hier werden insbesondere die Sicherstellung der Qualität, das Management der angebotenen Services, aber auch die IT-Sicherheit sehr wichtige Themenfelder für die Weiterentwicklung der Helmholtz-Cloud sein. Das SCC wird auch diese Phase und diese Themen mit seiner Expertise aktiv mitgestalten, denn eine hochwertige und in die Helmholtz-Gemeinschaft integrierte Cloud-Lösung trägt dazu bei, die Spitzenforschung zukunftsfähig und nachhaltig zu unterstützen.

Helmholtz Cloud – interconnected IT services for cutting-edge research

With its participation in the Helmholtz Cloud, KIT underlines its commitment to support top-level research in the Helmholtz Association with excellent solutions. KIT's cloud-enabled and federated IT services promote a collaborative and interdisciplinary research environment and thus a more efficient exchange of ideas and knowledge between researchers.

² www.hifis.net/news/2022/12/12/evaluation-update.html

Matrix – ein neuer Kommunikationsdienst am KIT

Mitte Oktober 2022 ging der neue Matrix-Dienst am KIT in den Produktivbetrieb und ergänzt so die bestehenden Kommunikationsplattformen. Mit Matrix erhält das KIT einen auf offenen Standards und freier Software basierenden Echtzeitkommunikationsdienst. Dieser bietet sichere Ende-zu-Ende-Verschlüsselung und kann sowohl KIT-intern als auch zur Kommunikation mit anderen Universitäten und Forschungseinrichtungen eingesetzt werden. Matrix-Clients sind browserbasiert oder nativ auf vielen verschiedenen Endgeräten lauffähig.

Dominik Rimpf, Jannik Emmerich, Philip Höbler, Peter Oettig, Klara Mall

Der neue Matrix-Dienst ergänzt das bisherige Angebot an Kommunikationsdiensten des SCC. Die Herausstellungsmerkmale von Matrix sind der föderierte Aufbau und die integrierte Ende-zu-Ende (E2E)-Verschlüsselung.

Nach der Abkündigung des Instant Messaging Service auf Basis von Jabber im Januar 2022 wurde sowohl innerhalb des SCC, von den Nutzenden des Jabber-Dienstes in den Instituten und Dienstleistungseinheiten sowie aus der Studierendenschaft eine offene Alternative zu den etablierten Kommunikationsplattformen gewünscht. Im Rahmen einer SCC-internen Arbeitsgruppe wurden daraufhin mehrere Kommunikationsdienste evaluiert. Aus der Auswahl von Mattermost, RocketChat und weiteren fiel die Entscheidung unter anderem wegen der Fähigkeit der Föderation und der damit verbundenen Verbreitung an anderen Hochschulen, sowie der integrierten E2E-Verschlüsselung auf Matrix.

Der neue Matrix-Kommunikationsdienst startete im Juli 2022 im Testbetrieb. Nach erfolgreicher Testphase ging der Dienst am 15.10.2022 in den Produktivbetrieb. Im Oktober 2022 wurden die Funktionalitäten von Matrix im IT-Expertenkreis, einem KIT-weiten Gremium von IT-Beauftragten und -Admins, ausführlich vorgestellt.

Was ist Matrix?

Matrix ist ein offener Standard für interoperable, dezentrale Echtzeitkommunikation via HTTPS¹. Diese Eigenschaften bringen viele interessante Vorteile gegen-

über anderen Kommunikationsstandards mit sich.

Da Matrix *open* ist, ist es jedem möglich, den Standard zu lesen und Änderungen einzubringen. Er wird von verschiedenen Client- und Server-Applikationen implementiert.

Durch die *Interoperabilität* ist eine Kommunikation via Matrix zwischen verschiedenen Servern und Clients möglich, unabhängig davon welche Server- und/oder Client-Implementierung² die Kommunikationspartner nutzen. Das *dezentrale* Design sieht keinen zentralen Server vor, wie das beispielsweise bei den bekannten Messenger-Diensten WhatsApp, Telegram oder MS Teams der Fall ist. Teilnehmende am Matrix-Netzwerk können ihr eigenes System betreiben und die Kontrolle über die Daten behalten.

Matrix wurde als Protokoll für **Echtzeitkommunikation** entworfen. Die Anwendung des Protokolls als *Chat-Protokoll* ist dabei eine der ersten weit verbreiteten Anwendungen, es gibt aber viele weitere. So bestehen beispielsweise Bestrebungen, die Kommunikation zwischen IoT-Geräten mithilfe von Matrix zu realisieren. Dies würde eine einfachere Integration und Interoperabilität von IoT-Geräten verschiedener Hersteller ermöglichen, da mit einem einheitlichen Protokoll zusätzliche Adaptierungen nicht mehr notwendig wären.

Vorteile von Matrix gegenüber anderen Kommunikationsdiensten

Die Alleinstellungsmerkmale von Matrix gegenüber anderen Kommunikationsplattformen sind die zuverlässige E2E-Verschlüsselung und das dezentrale Design.

Die E2E-Verschlüsselung ist dabei nicht an ein einzelnes Endgerät eines Nutzenden gebunden. Dies wird realisiert, indem die kryptografischen Schlüssel zwischen den Endgeräten verschlüsselt synchronisiert werden. Um sicherzustellen, dass die Person, mit der man kommuniziert, auch die ist, als die sie sich ausgibt, ist in Matrix eine Verifikation von Nutzenden möglich. Die Verifikation muss zwischen zwei Personen einmalig durchgeführt werden. Zusammen mit der E2E-Verschlüsselung ist dann eine sichere, verifizierte Kommunikation möglich.

Das Matrix-Protokoll sieht außerdem die Föderation zwischen den einzelnen Server-Instanzen vor. Die Server-Instanzen werden auch als Homeserver bezeichnet. Man kann also, ähnlich wie bei E-Mail, mit Nutzenden anderer Server kommunizieren, sofern diese von der eigenen Server-Instanz aus erreichbar sind. Daher gibt es bei Matrix, die sogenannten Matrix-IDs, die eine ähnliche Struktur wie E-Mail-Adressen haben. Matrix-IDs (MXID) für User haben die Form `@username:example.com`. Der lokale Username wird vom Namen des Homeservers mit einem Doppelpunkt separiert. Das @-Zeichen signalisiert, dass es sich bei der MXID um eine User-MXID handelt. Analog funktionieren MXIDs für Gruppen, diese haben statt dem @- ein #-Zeichen vorangestellt.

In der „Matrix-Welt“ existiert mittlerweile außerdem eine Vielzahl an Software³, um sogenannte Bots zu betreiben. Diese Bots ermöglichen diverse Integrationen und Interaktionen mit verschiedenen Diensten. Zum Beispiel können mit Hilfe der Bots Monitoring-Meldungen in Chats gepostet oder Benachrichtigungen für Änderungen an einem Git-Repository gesendet werden. Gerade solche technischen Features unterstützen ausgefeilte und effiziente Lösungen für ein komplexes Forschungs- und Entwicklungsumfeld.

Da es sich bei der eingesetzten Software gänzlich um Free and Open Source Software (FOSS)⁴ handelt, lässt sich die gesamte Infrastruktur für den Matrix-Dienst am KIT auf der eigenen Server-Infrastruktur am SCC betreiben. Die stetig wachsende Community für Matrix, die sich aktiv an der Weiterentwicklung beteiligt, trägt außerdem zur immer weiter steigenden Verbreitung von Matrix bei. So betreiben zum Beispiel immer mehr Universitäten in Deutschland eigene Matrix-Instanzen⁵, wodurch die Vernetzung der Universitäten untereinander erleichtert wird.

So konnte das SCC auch auf bereits existierende Dokumentation der Universität Dresden aufbauen und diese mit Anpassungen für das KIT im Wesentlichen übernehmen. Die Dokumentation ist unter docs.matrix.kit.edu verfügbar. Auch abseits der Universitäten verbreitet sich Matrix zunehmend. Die Regierung Frankreichs setzt seit 2018 auf Matrix⁶. Auch in Deutschland wird Matrix von der Bundeswehr (bwMessenger)⁷, dem daraus entstandenen Bundesmessenger⁸ und von der Gesellschaft für Telematikanwendungen der Gesundheitskarte gema-

³ matrix.org/bots/

⁴ fsfe.org/freesoftware/freesoftware.de.html

⁵ docs.matrix.kit.edu/images/federation_map.svg

⁶ matrix.org/blog/2018/04/26/matrix-and-riot-confirmed-as-the-basis-for-francesecure-instant-ant-messenger-app

⁷ www.golem.de/news/bwmessenger-das-sichere-whatsapp-fuer-die-bundeswehr-2111-160732.html

⁸ www.golem.de/news/bwmessenger-vom-messenger-der-bundeswehr-zumbundesmessenger-2211-169472.html

tik (TI-Messenger)⁹ aktiv für große Nutzerzahlen eingesetzt.

Matrix am KIT

Wie oben erwähnt, unterstützt das Matrix-Protokoll viele verschiedene Anwendungen und Features. Für den Matrix-Dienst des KIT lag der Fokus jedoch zunächst auf dem Kern-Feature einer Kommunikationsplattform: dem Chat.

Chats mit einer einzelnen Person sowie Gruppen-Chats sind in Matrix problemlos möglich. Grundsätzlich werden diese in Matrix auch nicht unterschiedlich behandelt, denn Chats mit einer einzelnen Person sind lediglich Gruppen-Chats mit nur zwei Mitgliedern.

Es ist möglich, mehrere Gruppen in sogenannten Spaces zusammenzufassen. Hierdurch können beispielsweise alle relevanten Chats für ein Institut oder eine Abteilung übersichtlich dargestellt werden. Die Zugangsrechte für Chats in einem Space können dann auch an die Mitgliedschaft im Space geknüpft werden, statt den Chat für jeden (öffentlich) oder nur mit Einladung (privat) zugänglich zu machen.

Features wie Gruppen-Calls (Audio/Video), wie sie zum Beispiel die am KIT genutzte Cloud-Plattform MS Teams bietet, wurden erst einmal bewusst nicht aktiviert beziehungsweise implementiert, um die Konzentration auf die relevanten Features zu ermöglichen. Es ist aber nicht ausgeschlossen, dass dem Dienst in Zukunft weitere Features hinzugefügt werden. Feature Requests können dem Matrix-Team des SCC im Matrix-Raum `#helpdesk:kit.edu`

⁹ matrix.org/blog/2021/07/21/germanys-national-healthcare-system-adopts-matrix

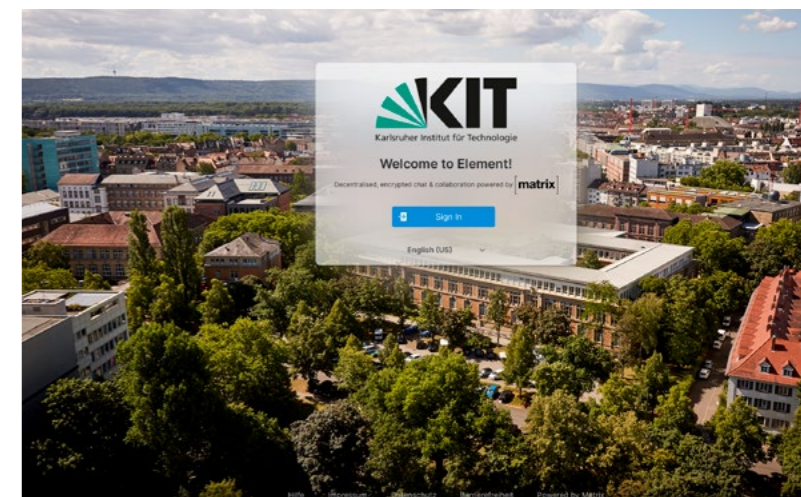


Abbildung 1: Der Matrix Web-Client Element, gehostet am KIT. Im Hintergrund ist Karlsruhe mit dem KIT Campus Süd zu sehen.

oder per Mail an die Adresse matrix@scs.kit.edu zugesendet werden.

Mit Matrix kann man mit sogenannten Bridges auch mit anderen Kommunikationsplattformen kommunizieren. Hierdurch ist es zum Beispiel möglich, Gruppen-Chats zwischen Slack, IRC, um nur ein paar Mögliche zu nennen, und Matrix zu verbinden. Dies würde es ermöglichen, auch mit Personen, die nicht am Matrix-Dienst teilnehmen, zu kommunizieren. Das KIT hat sich allerdings gegen den Betrieb von Bridges entschieden, da für diese immer die E2E-Verschlüsselung an der Bridge terminiert werden muss. Dies würde zu geringerem Datenschutz führen und die Kontrolle über die eigenen Daten erschweren, da diese im Zweifel nicht mehr auf Servern, die das SCC administriert, gespeichert werden. Neben diesen Datenschutz-relevanten Aspekten ist die Nutzung von Bridges außerdem nicht immer trivial und bringt Kompatibilitätsprobleme mit sich, weil die verschiedenen Kommunikationsplattformen unterschiedliche Features bieten.

Die am KIT betriebene Konfiguration des Matrix-Dienstes hat der Beauftragte für Informationssicherheit für Inhalte mit hohem Risiko bzw. Schutzbedarf freigegeben. Nach Rücksprache mit den Datenschutz- und Informationssicherheitsbeauftragten des KIT ist eventuell

sogar eine Nutzung für Inhalte mit sehr hohem Schutzbedarf möglich.¹⁰

Technische Umsetzung

Für den Betrieb des Matrix-Servers (Homeserver) fiel die Entscheidung auf die derzeitige Referenz-Implementierung *synapse*¹¹ der Stiftung Matrix.org. Diese hat durch ihre weite Verbreitung den Vorteil, dass Bugs schnell behoben und neue Funktionalitäten immer zeitnah von der Software unterstützt werden.

Da die Auslastung des Dienstes im Voraus nicht abgeschätzt werden konnte, hat sich das SCC für eine skalierbare Systemarchitektur aus mehreren virtuellen Maschinen (VM) entschieden. Dies bringt außerdem den Vorteil der Redundanz, da es für den Matrix-Dienst nach Möglichkeit keinen Single Point of Failure (SPoF) geben soll. Deswegen wurden die virtuellen Maschinen auf die Rechenzentren am Campus Süd und Campus Nord verteilt. Die Struktur des Matrix-Dienstes wird in Abbildung 2 dargestellt. Intern kommunizieren die einzelnen Services bzw. VMs ausschließlich über IPv6. Lediglich falls

eine Erreichbarkeit aus dem Internet oder die Kommunikation in das Internet benötigt wird, ist zusätzlich IPv4 eingerichtet. Alle Anfragen von Clients und anderen Matrix-Servern werden an die Proxy-Server gestellt. Diese leiten die Anfragen an den dafür zuständigen Worker-Knoten weiter. Die Worker-Knoten antworten direkt, ohne Umweg über die Proxy-Server, um dort die Last gering zu halten.

Zusätzlich zum Homeserver bietet das SCC auch einen im Browser nutzbaren Client an. Hier wird die weit verbreitete Client-Software *Element* genutzt (Abbildung 1).

Weitere Planungen

Da die Matrix-Spezifikation laufend weiterentwickelt und neue Funktionalitäten in Matrix implementiert werden, wird auch der Matrix-Dienst am KIT in Zukunft

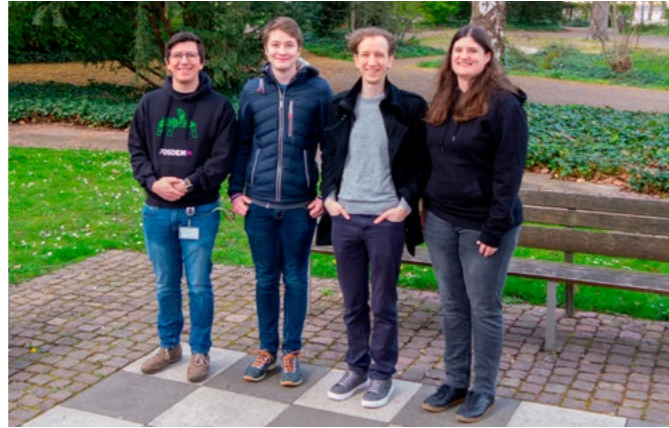


Abbildung 3: Das Matrix-Team des SCC (v.l. Dominik Rimpf, Jannik Emmerich, Peter Oettig, Klara Mall)

weitere Features erhalten (Abbildung 3 zeigt das Matrix-Team). So werden zum Beispiel in Zukunft native Videokonferenzen, auch mit mehreren Nutzenden, via Matrix möglich sein.¹²

Außerdem soll die Ausfallsicherheit des Dienstes weiter verbessert werden. Hierfür soll die Anbindung der Proxy-Server auf die Loadbalancer des SCC umgezogen werden. Des Weiteren sollen bestehende SPoF reduziert werden, zum Beispiel durch einen auf mehreren Servern basierenden Cluster der eingesetzten In-Memory-Datenbank Redis.

¹² element.io/blog/introducing-native-matrix-voip-with-element-call/

Matrix – a new communication service at KIT

In mid-October 2022, the new Matrix service went live at KIT, supplementing the existing communication platforms. Matrix provides KIT with a real-time communication service based on open standards and free software. It implements secure end-to-end encryption and can be used internally at KIT as well as for communication with other universities and research institutions. Matrix clients are browser-based or natively executable on many different end-user devices.

¹⁰ www.isb.kit.edu/136.php

¹¹ github.com/matrix-org/synapse/

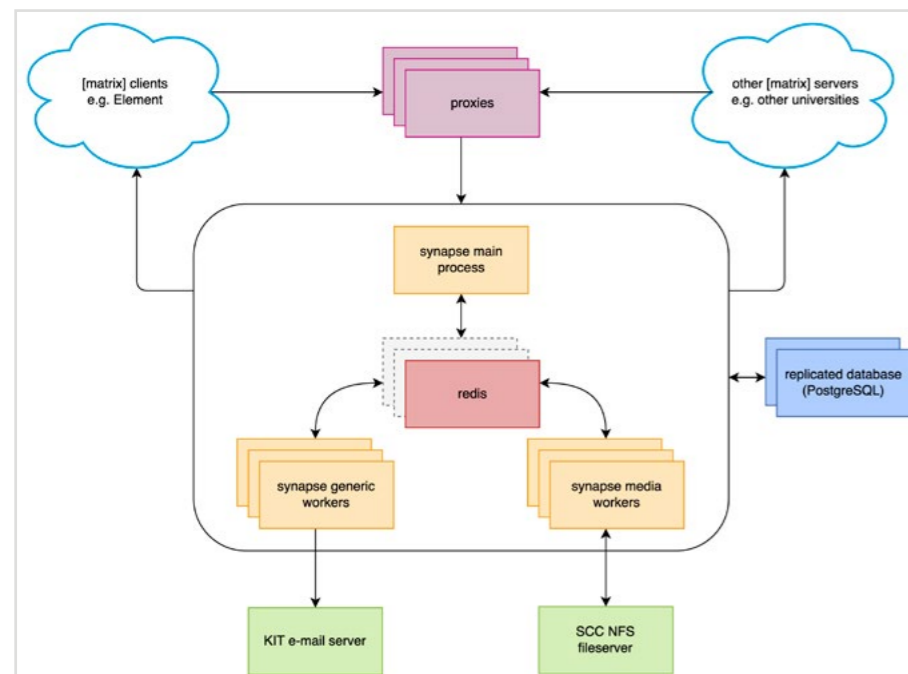


Abbildung 2: Schema der Infrastruktur des Matrix-Dienstes am KIT

Research Software Engineering – erster RSE-Workshop am KIT

Im Rahmen eines KIT-internen Projektes zur Etablierung von Research Software Engineering (RSE) am KIT trafen sich RSE-Interessierte zum ersten RSE-Workshop. Über 60 Personen nahmen am Nachmittag des 9. Mai 2023 teil.

René Caspart, Jörg Meyer

Software ist zu einer Schlüsselkomponente der wissenschaftlichen Arbeit geworden, und es gibt heute kaum noch eine Forschungsdisziplin, in der Software keine wichtige Rolle hat. Daher muss Forschungssoftware die gleichen strengen Anforderungen erfüllen, die Forschende an ihre Daten, Proben, Geräte und Infrastrukturen stellen. Software muss – wie jede andere Forschungsinfrastruktur auch – kontinuierlich weiterentwickelt, gewartet und unterstützt werden, manchmal über Jahrzehnte hinweg. Erfolgreiche und nachhaltige Softwareprojekte beruhen oft auf starken, florierenden Gemeinschaften und erfordern stets eine langfristige Finanzierung.

Andere Länder in Europa sind hier dem deutschen Wissenschaftssystem bereits einen Schritt voraus. Das Netherlands eScience Centre forderte bereits 2019 in seinem Strategiepapier: „Forschungssoftware muss auf politischer Ebene und in der Praxis gleichberechtigt mit Forschungsdaten und Publikationen behandelt werden“¹. Das britische Software Sustainability Institute stellt schlicht fest: „Better Software, Better Research“².

Im Rahmen der KIT-Dachstrategie „KIT 2025“ wurde daher ein KIT-internes Projekt zu Forschungssoftware und Research Software Engineering initiiert, das Ende 2022 begann. Unter der Leitung des SCC und mit Beteiligung weiterer Institute und Dienstleistungseinheiten wurden verschiedene Arbeitspakete definiert. Eines davon adressiert die Bedarfe der Forschungssoftware-Community sowie den Aufbau einer Forschungssoftware-Gemeinschaft am KIT. Um den Aufbau einer solchen Community

¹ zenodo.org/record/3378572

² www.software.ac.uk/resources/publications/better-software-better-research



Die Teilnehmenden des ersten Workshops Research Software Engineering am KIT (Foto: Heidi Seibold)

zu fördern, nahmen am 9. Mai 2023 über 60 Personen aus dem KIT – quer über viele Wissenschaftsdisziplinen – am ersten Workshop zum Thema Research Software Engineering im Senatsaal des KIT teil und tauschten sich intensiv aus.

Der Workshop wurde professionell von Heidi Seibold³ organisiert und moderiert. Nach kurzen einleitenden Vorträgen diskutierten und bearbeiteten die Teilnehmenden verschiedene Fragestellungen wie „Welche IT-Dienste für RSE würdest du gerne benutzen?“ oder „Was erwartest du, von einer RSE@KIT-Community zu bekommen?“ bis hin zu „Was kannst du zu einer RSE@KIT-Community beisteuern?“. Die Antworten zu diesen Fragen wurden kollaborativ in einem Gruppen-Brainstorming an Pinnwänden zusammengetragen, gemeinsam von allen Teilnehmenden gewichtet und schlussendlich vorgestellt. Den Abschluss des Programms bildeten acht sogenannte Lightning-Talks aus den Reihen der Teilnehmenden, die interessan-

³ heidiseibold.com

te und spannende Einblicke in die Entwicklung des Research Software Engineerings am KIT und darüber hinaus gaben. Über diese und weitere Themen des Workshops konnte sich die Community bei einem gemütlichen Ausklang der Veranstaltung eingehend austauschen.

Die im Workshop diskutierten Themen und Ergebnisse dienen als Input für das genannte KIT-interne Projekt und werden dort evaluiert.

Research Software Engineering – first Workshop at KIT

As part of an internal KIT project to establish Research Software Engineering (RSE) at KIT, people interested in RSE met for the first RSE workshop. More than 60 people participated in the afternoon of May 9, 2023.

Helmholtz AI Rechnerinfrastruktur auf die Probe gestellt

Forschende der Plattform Helmholtz AI aus dem SCC und dem JSC haben erneut ihre Ergebnisse gemeinsam in die MLPerf™ HPC Benchmarking Suite eingebracht und konnten so zeigen, dass ihre HPC-Systeme mit den leistungsfähigsten KI-Chips arbeiten.

Markus Götz

Die rasante Entwicklung von KI-Methoden und -Tools kann es schwierig machen, mit den real verfügbaren Möglichkeiten der Computertechnologie Schritt zu halten und noch schwieriger ist es, die beste Wahl für eine bestimmte KI-Aufgabe zu treffen. Aus diesem Grund sind Benchmarking-Werte der Schlüssel zum Vergleich und damit zur Auswahl der besten verfügbaren Option für KI-Probleme. Benchmarking-Plattformen geben unter anderem einen Gesamtüberblick über relevante Aspekte wie Leistung, ökologischer Fußabdruck, Effizienz und Trainingsgeschwindigkeit.

Aus diesem Grund haben Forschende der Plattform Helmholtz AI aus dem SCC und dem Jülich Supercomputing Centre (JSC) am Forschungszentrum Jülich wie im vergangenen Jahr ihre Ergebnisse gemeinsam in die MLPerf™ HPC Benchmarking Suite eingebracht. Die Gruppe ist stolz zu verkünden, dass die HPC-Infrastrukturen an deren Helmholtz-Zentren mit den leistungsfähigsten KI-Chips ausgestattet sind.

Die Ergebnisse beziehen sich auf beide Einheiten in diesen Zentren: den Supercomputer HoreKa am SCC und den JUWELS Booster am JSC. Beide sind mit Beschleunigern vom Typ NVIDIA A100 ausgestattet, die laut Benchmark die beste Leistung erbringen. Der JUWELS Booster verwendete für diese Messungen sogar bis zu 3.072 NVIDIA A100 GPUs.

Die MLPerf™ HPC Benchmarking Suite bietet den Forschenden eine großartige Gelegenheit, code- als auch systembasierte Optimierungsmethoden und -werkzeuge aufs Feinste abzustimmen. So konnten sie die Performance beispielsweise mit

dem CosmoFlow Benchmark (Physical Quantity Estimation From Cosmological Image Data) im Vergleich zum letzten Jahr um über 300 % verbessern. Bei der Feinabstimmung der I/O-Operationen fanden sie beispielsweise Möglichkeiten, wie die Dateisysteme eine schnellere und zuverlässigere Lese- und Schreibleistung erbringen können. Dank dieser Ergebnisse erreichte der Supercomputer HoreKa in den jüngsten CosmoFlow-Benchmark-Ergebnissen, die unter anderem in IEEE¹ Spectrum und HPCWire² gezeigt wurden, den zweiten Platz hinter NVIDIAs eigenem Selene-System und den ersten Platz für Forschungs- und Lehreinrichtungen weltweit in Bezug auf die schnellste Trainingszeit. Dabei konnten sogar größere Systeme wie RIKENS Fugaku in Japan übertroffen werden.

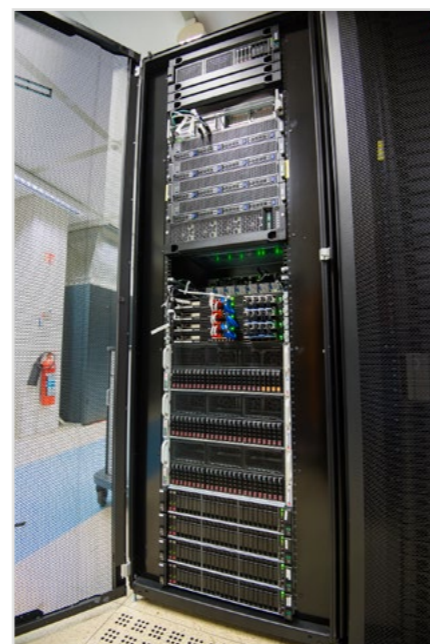
Da die Auswirkungen des Klimawandels immer offensichtlicher werden, ist es auch unerlässlich, dass man den ökologischen Fußabdruck bewusster gestaltet, insbesondere im Hinblick auf den Energieverbrauch. Zu diesem Zweck haben die Systemadministratoren von HoreKa den Einsatz des Lenovo XClarity Controllers zur Messung des Energieverbrauchs der Rechenknoten³ aktiviert. Für die Einreichungsläufe auf dem HoreKa wurden 1.127,8 kWh verbraucht.

Die MLPerf™ HPC Benchmarking Suite ist dabei essentiell, um den Nutzen der HPC-Maschinen für moderne KI-Arbeitsabläufe zu ermitteln.

¹ spectrum.ieee.org/mlperf-training

² www.hpcwire.com/2022/11/14/mlcommons-issues-mlperf-hpc-training-results-for-larger-systems/

³ Diese Messung umfasst nicht alle Teile des Systems und ist keine offizielle MLCommons-Methode, bietet jedoch einen Mindestmesswert für den Energieverbrauch auf dem System.



Supercomputer mit NVIDIA-Beschleunigern (hier in der Future Technologies Partition des HoreKa am KIT) sind auch leistungsfähige KI-Rechner.

Helmholtz AI computing infrastructure under test

In determining the utility of HPC systems for modern AI workflows, the MLPerf™ HPC benchmarking suite is essential for identifying the best available option for AI tasks from different computing platforms and configurations. Members of the Helmholtz AI platform from SCC and JSC have again contributed their results to the MLPerf consortium this year, demonstrating that the HPC infrastructures of their Helmholtz centers are equipped with the most powerful AI chips. The HoreKa and JUWELS booster systems used are both equipped with NVIDIA A100 accelerators.

Beiträge zur Konferenz SIAM CSE

14 Mitglieder unterschiedlicher Forschungsgruppen des SCC nahmen vom 26.02. – 03.03. an der SIAM Computational Science and Engineering-Konferenz CSE23 in Amsterdam teil. Die Beiträge erstreckten sich über vier aktuelle Themenfelder im Wissenschaftlichen Rechnen und Research Software Engineering und waren ein großer Erfolg für alle Teilnehmenden, mit vielen interessanten Gesprächen und interdisziplinärem Austausch.

Gayatri Caklovic, Terry Cojean, Jasmin Hörter, Steffen Schotthöfer

Die Konferenz SIAM CSE¹ fokussiert auf angewandte Mathematik im Zusammenspiel mit der Informatik. Die Entwicklung von angewandten mathematischen und rechnergestützten Methoden ist für die Lösung vieler Probleme der realen Welt unerlässlich. Die Forschungsgruppe Fixed-Point Methods for Numerics at Exascale (FINE) war mit acht Gruppenmitgliedern vertreten (Foto rechts). Insgesamt hielt die Gruppe acht Vorträge in sieben Symposien. Hartwig Anzt nahm an einer Podiumsdiskussion für wissenschaftlichen Nachwuchs zum Thema "Wow, I have a job! What now?" teil, bei der Fragen zu Konfliktmanagement, Work-Life-Balance, wissenschaftliche vs. industrielle Karriere und mehr diskutiert wurden.

Die Vorträge konzentrierten sich auf verschiedene Aspekte des portablen Ginkgo-Frameworks für Sparse Linear Algebra und spiegelten das große Interesse der Community an der Software wider. Das Team bot zwei Übersichtsvorträge an: einen von Terry Cojean über Best Practices bei der Entwicklung von Forschungssoftware und einen von Hartwig Anzt, der einen historischen Überblick über die Entwicklung der Ginkgo-Bibliothek gab. In weiteren Vorträgen wurden neue Funktionalitäten von Ginkgo vorgestellt, die für spezifische wissenschaftliche Anwendungen entwickelt wurden.

Ein anderer Schwerpunkt waren iterative Sparse-Solver und Preconditioner. In einer extra für dieses neue Forschungsgebiet eingerichteten Sitzung stellte Pratik Nayak deren allgemeines Schema vor. Darauf aufbauend präsentierte Yen-Chen Chen den speziellen Fall tridiagonaler und

bandförmiger Matrizen mit einer Implementierung, die alle aktuell bestehenden Anbieterlösungen übertrifft.

Eine weitere wichtige Funktionalität ist die mixed-precision functionality. Yu-Hsiang (Mike) Tsai stellte Ginkgos leistungsfähiges portables algebraisches Mehrgitter (AMG)

vor, das mehrere Präzisionsformate für verschiedene Ebenen bietet. Auch die neuen GPU-residenten Sparse-Direct-Methoden, die Tobias Ribizel vorstellte, fanden großes Interesse bei der Community. Diese Methoden sind für Stromnetzsimulationen im Rahmen des US Exascale Computing Projekts ExaSGD entwickelt worden. Ebenfalls auf die Beschleunigung von Anwendungen zielten zwei Vorträge aus den neuen BMBF-Projekten ExaSim² und PDE³ von Gregor Olenik bzw. Marcel Koch. ExaSim konzentriert sich auf die Beschleunigung der CFD-Software OpenFOAM durch die Verwendung von Ginkgo als portables und effizientes Backend mit vielversprechenden ersten Ergebnissen. PDE³ zielt darauf ab, die Funktionen von Ginkgo für gemischte Präzision und Batching zu nutzen, um das implizite oder semi-implizite Time-Stepping von hyperbolisch-parabolischen partiellen Differentialgleichungen (PDEs) zu beschleunigen, die mit diskontinuierlichen Galerkin-Methoden (DG) diskretisiert wurden.



Mitglieder der Forschungsgruppe CSMM in Amsterdam auf der SIAM CSE23 Konferenz: Steffen Schotthöfer, Gayatri Caklovic und Pia Stammer (v.l.n.r.) sowie Jonas Kusch (ehemals KIT/CSMM)

Die Forschungsgruppe Computational Science and Mathematical Methods (CSMM) war mit vier Mitgliedern vertreten, darunter Gayatri Caklovic, Pia Stammer, Steffen Schotthöfer und Jasmin Hörter. Gayatri Caklovic organisierte ein Minisymposium über Parallel In Time Methods (PlnT) und präsentierte ihre Arbeit über PlnT für hyperbolische nichtlineare Gleichungen. Pia Stammer führte in ihre Forschung über Protonentransport für die Krebstherapie, mit einem Schwerpunkt auf dynamischen Low-Rank-Approximationen ein, und Steffen Schotthöfer gab einen Einblick in seine Arbeit über Modellordnungsreduktion mit Momenten-Methoden. Der Schwerpunkt liegt hier auf neuronalen Netzwerken basierenden Minimalentropie-Abschlüssen.

Charlotte Debus von der Forschungsgruppe Robust and Efficient AI (siehe S. 22) hielt einen Vortrag zum Einsatz von Machine Learning-Methoden im Zusammenhang mit Matrixzerlegungen, und René Caspart vom Team Software Sustainability and Performance Engineering sprach über nachhaltige Softwareentwicklung für HPC-Systeme.

¹ www.siam.org/conferences/cm/conference/cse23

² gauss-allianz.de/de/project/title/EXASIM

³ gauss-allianz.de/de/project/title/PDEa

Kohlenstofffreie Verbrennung: Ein Blick in die Zukunft

Ammoniak stellt einen möglichen Brennstoff zur kohlenstofffreien Energieversorgung dar. Allerdings ist er chemisch sehr stabil und lässt sich deshalb nur schwer verbrennen. Eine Lösung ist, die Verbrennung innerhalb von porösen Feststoffen stattfinden zu lassen. Dabei wird die bei der Verbrennung freigesetzte Wärme durch den Feststoff stromauf geleitet und stabilisiert so den Verbrennungsprozess. Solche Verbrennungsprozesse wurden im Rahmen des PRIME Fellowship Programms des Deutschen Akademischen Austauschdienstes zwischen der Stanford University in Kalifornien und dem KIT untersucht.

Thorsten Zirwes

Die Entwicklung neuer Energieversorgungssysteme, die kein CO₂ mehr ausstoßen, ist eines der wichtigsten Ziele auf dem Weg in eine klimafreundliche Zukunft. Während der Anteil von Solar- und Windenergie in Deutschland und Europa stetig steigt, wird weltweit die Primärenergie noch immer zu großen Teilen über Verbrennungsprozesse bereitgestellt. Viele Forschende beschäftigen sich daher damit, wie Verbrennungsprozesse so gestaltet werden können, dass sie kein CO₂ mehr freisetzen. Eine Möglichkeit ist, anstelle fossiler Energieträger Wasserstoff als Brennstoff zu verwenden. Der Wasserstoff kann mit Hilfe überschüssiger erneuerbar gewonnener Energie produziert werden und dient so als „chemischer Speicher“. Wenn gerade wenig Energie durch Wind- oder Solaranlagen generiert wird, kann der gespeicherte Wasserstoff

kohlenstofffrei für die Stromerzeugung genutzt werden. Während Wasserstoff gute Eigenschaften für die Verbrennung aufweist, gibt es auch große Nachteile: Seine Lagerung und sein Transport sind teuer, da Wasserstoff hoch entzündlich ist und er bei hohen Drücken oder tiefen Temperaturen gelagert werden muss. Eine Alternative besteht darin, den nur schwer lagerbaren Wasserstoff in Ammoniak umzuwandeln. Auch Ammoniak verbrennt kohlenstofffrei und kann wie konventionelle Brennstoffe leicht gelagert werden. Für den Transport von Ammoniak kann sogar die bestehende Infrastruktur mitbenutzt werden. Allerdings gibt es auch hierbei Nachteile. Ammoniak ist giftig, führt zu hohen Stickoxidemissionen und ist chemisch sehr stabil, wodurch es sich schlecht verbrennen lässt. Die Entwicklung und Simulation von Verbrennungs-

prozessen, die in porösen Feststoffen stattfinden, soll aufzeigen, wie einige Nachteile der Ammoniakverbrennung umgangen werden können. Diese Arbeit fand im Rahmen eines DAAD PRIME Projektes in Stanford, sowie in Kollaboration mit dem Engler-Bunte-Institut am KIT statt.

Idee der Verbrennung in porösen Medien

Die Idee, Verbrennungsprozesse in porösen Medien stattfinden zu lassen, ist schon einige Jahrzehnte alt. Dabei werden metallische oder keramische Materialien verwendet, aus denen durch verschiedene Fertigungsprozesse eine poröse Matrix erstellt werden kann. Diese Strukturen bestehen zu 80 % aus verbundenen Hohlräumen, sodass ein Gas durchfließen kann. Abbildung 1 zeigt einen Prototypbrenner, der an der Stanford University für die Untersuchung der Verbrennung von Ammoniak in porösen Medien verwendet wird. Der untere Teil des Brenners besteht aus einer Aluminiumoxid-Calciumoxid-Zirkoniumoxid-Keramik und der obere Teil aus Siliziumcarbid. Das Ammoniak-Luft-Gemisch fließt durch den porösen Feststoff und wird dann gezündet. Die Verbrennung findet damit innerhalb der Feststoffmatrix statt, und Flammen entwickeln sich in den kleinen Hohlräumen des Feststoffes. Dadurch gibt es eine große Austauschfläche zwischen der Flamme und dem Feststoff und damit eine sehr gute Wärmeübertragung. Die Struktur des Feststoffs zeigt Abbildung 1 anhand einer

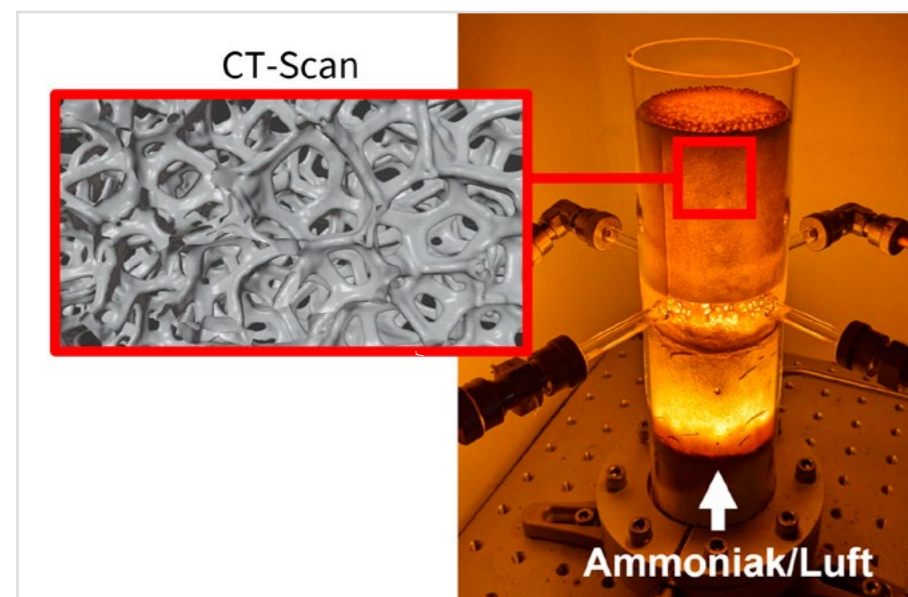


Abbildung 1: Verbrennung von Ammoniak-Luft-Gemischen in porösen Feststoffen eines Prototypbrenners, der an der Stanford University untersucht wird.

Tomographieaufnahme (CT-Scan). Wenn die Flamme den Feststoff aufheizt, wird die Wärme über die dünnen Stege durch den Feststoff geleitet. Da insbesondere Siliziumcarbid eine hundertfach höhere Wärmeleitfähigkeit als die Gasphase hat, wird ein großer Teil der freigesetzten Wärme vom Feststoff stromauf transportiert und heizt so das noch unverbrannte Gas vor. Aus diesem Grund ist es möglich, Ammoniakflammen in porösen Medien zu stabilisieren: Die Wärmerückführung innerhalb des Brenners stabilisiert die Reaktionsfront, erhöht die Verbrennungsgeschwindigkeit um eine Größenordnung und gleicht so die chemische Trägheit des Ammoniaks aus, die ihn ansonsten nur schwer verbrennen lässt.

Detaillierte Simulationen helfen bei der Prozessoptimierung

Die Verbrennung in porösen Medien stellt eine vielversprechende Technologie dar, um Ammoniak für die Energieversorgung in der Zukunft nutzbar zu machen. Die physikalischen Vorgänge in solchen Verbrennungssystemen sind allerdings sehr komplex und auch heute noch fehlen wissenschaftliche Modelle, die diese Verbrennung zuverlässig beschreiben können. Die Schwierigkeit besteht darin, dass viele verschiedene physikalische Vorgänge gleichzeitig und miteinander gekoppelt ablaufen. Neben den chemischen Reaktionen der Verbrennung muss auch der Wärmeübergang zwischen der Gas- und Feststoffphase sowie der Wärmetransport

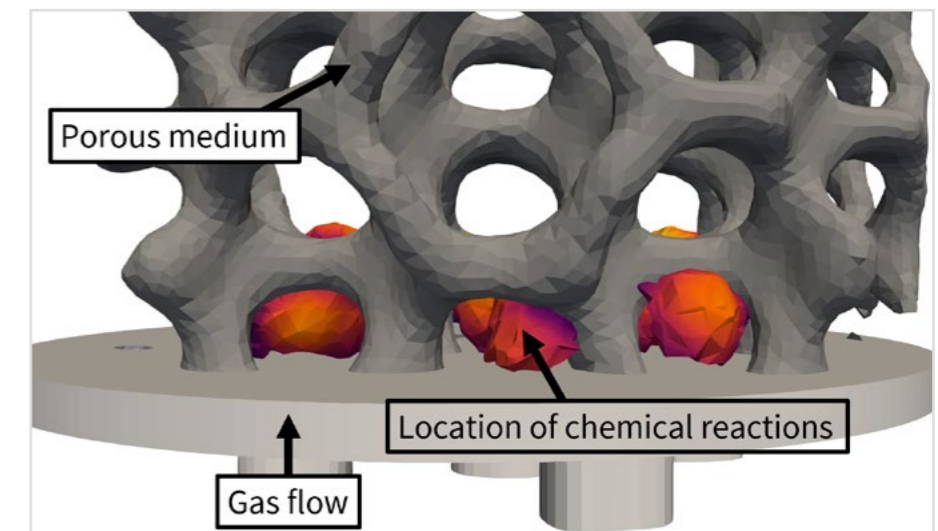


Abbildung 2: Simulation von Flammen innerhalb des porösen Feststoffs

durch Wärmeleitfähigkeit im Feststoff und Strahlung beschrieben werden. Um die physikalischen Vorgänge zu untersuchen und besser zu verstehen, wurden detaillierte Simulationen der Modellbrenner aus Stanford durchgeführt. Diese Art von Simulation kann nur auf sehr leistungsfähigen Supercomputern durchgeführt werden, da die vielen kleinen Poren des Feststoffs in der Simulation räumlich aufgelöst und alle physikalischen Prozesse genau berechnet werden müssen. Dazu wurden die porösen Strukturen des Brenners in Stanford mit einer mikrometergenauen Auflösung gescannt und bilden so die Grundlage für die Simulationen. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel einer solchen Simulation. Das Brennstoff-Luft-Gemisch fließt von unten nach oben in die poröse Struktur, und Flammen

bilden sich in den Poren. Die Wärme, die durch die Verbrennung freigesetzt wird, heizt dann den Feststoff auf. Abbildung 3 zeigt, welche Analysen durch die detaillierten Simulationen ermöglicht werden. Dargestellt ist das Temperaturfeld der Gasphase auf einem 2D-Schnitt durch den Brenner. Die Pfeile zeigen die Richtung des Wärmeflusses innerhalb der Gasphase hin zur Feststoffmatrix. Diese Informationen ermöglichen es, zukünftige Systeme basierend auf Porenbrennern besser zu verstehen und damit weiter zu optimieren.

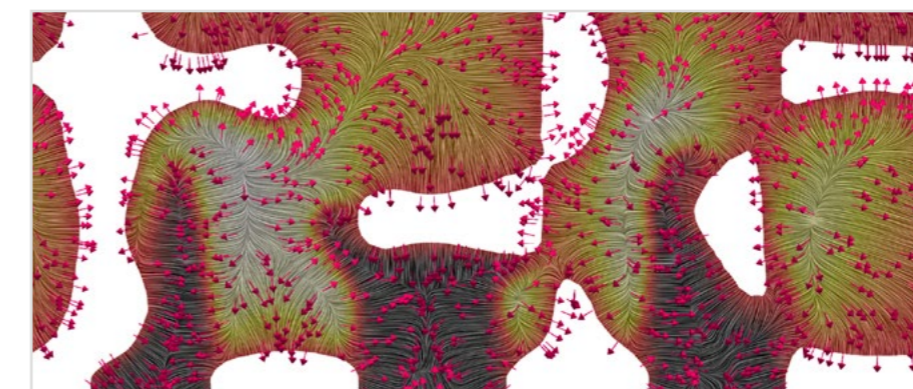


Abbildung 3: Analyse des Wärmeflusses auf einem 2D-Schnitt durch den Brenner. Schwarze Regionen zeigen das kalte, unverbrannte Gas und gelbe Regionen das heiße, verbrannte Gas. Die weißen Flächen im Hintergrund stellen den Feststoff dar.

Carbon-free combustion: A look into the future

Ammonia is a promising fuel for carbon-free energy supply. However, ammonia is chemically stable and therefore difficult to burn. One solution is combustion in porous solids. The heat generated by the combustion process is conducted upstream through the solid and pre-heats the unburnt gas. In this way, the burning process can be stabilized. Such combustion processes were investigated within the context of the PRIME Fellowship Program of the German Academic Exchange Service between Stanford University in California and KIT.

Mentoring-Programm für MINT-Studentinnen – Warp4IT



Um den Frauenanteil in der Informatikforschung am SCC langfristig zu erhöhen, starteten Forscherinnen des SCC im Sommersemester 2022 das wissenschaftliche Mentoring-Programm für MINT-Studentinnen des KIT. Unter dem Namen Warp4IT – Women as Research Peers for Information Technology – bietet die Initiative den Studentinnen ein Netzwerk für den Austausch von Erfahrungen sowie über Karrierewege, Chancen und Herausforderungen.

Charlotte Debus, Marie Weiel

Wie können wir den Frauenanteil am SCC langfristig erhöhen? Mit dieser Frage im Hinterkopf startete das SCC im letzten Sommersemester das wissenschaftliche Mentoring-Programm für MINT¹-Studentinnen Warp4IT: Women as Research Peers for Information Technology. Die Initiative wurde von mehreren Mitarbeiterinnen des SCC mit dem Ziel ins Leben gerufen, ein Netzwerk für den Austausch von Erfahrungen, Karrierewegen, Chancen und Herausforderungen aufzubauen.

Dass Frauen in IT-Berufen und der Informatikforschung deutlich unterrepräsentiert sind, betrifft nicht nur das SCC, sondern ist ein generelles Problem. Obwohl die Informatik, insbesondere das Programmieren, ursprünglich eine Frauendomäne war, ist sie heutzutage von Männern dominiert. „Das muss sich ändern“, finden auch die Initiatorinnen des Mentoring-Programms. „Die Grundlagen der Informatik sind für interessierte Frauen wie Männer gleichermaßen erlernbar, sie unterscheiden nicht zwischen Geschlechtern. Und wie bei so Vielem im Leben könnte hier ein bisschen mehr Ausgeglichenheit nur guttun.“

Aber wie kann man mehr Frauen für den Beruf als Wissenschaftlerin in der Informatik begeistern, wenn schon in der Schule und im Grundstudium ein deutliches Ungleichgewicht bei den Geschlechtern herrscht? Gerade einmal ein knappes Viertel der Erstsemester-Informatikstudierenden sind weiblich². Im Bereich der Künstlichen Intelligenz ist der Anteil mit nur 13% Expertinnen sogar noch deutlich geringer.

Am Anfang kam das Warp4IT-Team, bestehend aus vier Wissenschaftlerinnen des SCC, mehrfach zusammen und überlegte, was es für sie bedeutet, eine Frau in der Informatik(-forschung) zu sein. „Einige von uns sind gar nicht von Haus aus Informatikerinnen, sondern sind da irgendwie so reingerutscht“, sagt Charlotte Debus. „Über Projekte haben wir mit Informatikerinnen und Informatikern zusammengearbeitet oder selbst programmieren müssen und dann irgendwann festgestellt, dass uns das ungeheuer Spaß macht.“ Und so stand am Ende die Idee, Studentinnen der MINT-Fächer einen Einblick in das alltägliche Arbeitsleben von Wissenschaftlerinnen am SCC zu vermitteln und sie so für diesen Berufsweg zu begeistern. In der ersten Ausschreibungsrunde nahmen drei Studentinnen an dem Projekt teil: Mona und Marion studieren beide Elektrotechnik im Bachelor am KIT, Ceren kommt aus der Türkei und möchte am KIT den Master in Informatik machen.

In den sechs Monaten Laufzeit bearbeiteten die drei Frauen als wissenschaftliche Hilfskräfte kleine Forschungsprojekte, die ihnen einen Eindruck von der aktuellen Informatikforschung und der Arbeitsweise am SCC verschaffen sollten. Mit Erfolg, wie es scheint: „Das Mentoring-Programm Warp4IT hat es mir ermöglicht, Einblicke in die Informatik, insbesondere im Bereich der Künstlichen Intelligenz, zu erhalten. Ohne dieses Projekt hätte ich meine Begeisterung für die Informatik noch nicht entdeckt“, so Marion. Und Mona findet: „Für mich war es toll, dass ich ohne jegliche Vorerfahrung Stück für Stück in meinen Themenbereich eingeführt wurde. Das Arbeiten in der Forschung ist ein Traum meiner Kindheit. Das Mentoring-Programm habe ich als Chance gesehen, um einen ersten Einblick zu bekommen und ein spannendes Projekt anzugehen.“

Jede der drei jungen Forscherinnen wurde von einer der „Warp4ITlerinnen“ begleitet, die sowohl als fachliche Betreuerinnen als auch als Mentorinnen für die Studentinnen fungierten. Zudem traf sich die gesamte Gruppe aus Betreuerinnen und Studentinnen regelmäßig, um Erfahrungen auszutauschen und auch innerhalb des SCC ein Netzwerk aufzubauen. Mal ging es an die frische Luft fürs gemeinsame Geo-Caching, dann wurde wiederum der Hochleistungsrechner HoreKa besichtigt. Und regelmäßig stellten die Betreuerinnen in kleinen Seminarbeiträgen ihre Lebens- und Karrierewege vor. Dies sollte den Studentinnen die vielfältigen Möglichkeiten in der Informatik und der Forschung im Allgemeinen näherbringen. Für die jungen Frauen waren auch diese Kurzvorträge abseits der Forschungsarbeiten sehr wertvoll. „Die regelmäßigen Meetings, in denen ich erfuhr, wie der



Abbildung 2: Warp4IT beim gemeinsamen Geo-Caching in Linkenheim (v.l.n.r. Katharina Flügel, Marie Weiel, Mona Heinkelein, Charlotte Debus und Marion Mayr; als Fotografinnen nicht im Bild: Danah Tonne, Germaine Götzelmann).

Berufsweg unserer Betreuerinnen aussah und wo sie heute stehen, haben mich sehr inspiriert und für meine Zukunft motiviert“, sagt Marion. Und Mona fügt hinzu: „Ich habe bei unseren gemeinsamen Meetings viel über das Leben von Frauen in der Wissenschaft erfahren und habe nun ein Bild über eine mögliche Zukunft.“

Nicht nur die Teilnehmerinnen des Mentoring-Programms profitierten vom Austausch im „Warp4IT-Netzwerk“, sondern auch die Mentorinnen selbst. Betreuerin Marie Weiel resümiert: „Die Kombination aus sachlich-wissenschaftlicher Betreuung und persönlichem Mentoring war eine sehr interessante Erfahrung, aber anders und schwieriger als erwartet. Dafür konnten wir an anderen Stellen, wo ich es nicht erwartet hätte, selbst Inspiration und Motivation sammeln, insbesondere durch die Vorstellung der ganz unterschiedlichen Werdegänge unserer Kolleginnen.“

Und das Netzwerk wächst stetig weiter, denn mittlerweile nehmen auch Doktorandinnen an den regelmäßigen Treffen teil. Zudem besteht ein reger Austausch mit anderen Frauengruppen wie beispielsweise den „Women@IAI“ des Nachbarinstituts.

Mit den neu gewonnenen Erfahrungen werden die Warp4ITlerinnen bald in die nächste Runde starten. „Wir suchen momentan noch nach geeigneten Themen und auch Betreuerinnen“, so Charlotte Debus. „Aber wir wollen auf jeden Fall weitermachen und sind gespannt, was die Zukunft für das Förderprogramm Warp4IT bereithält.“



Abbildung 1: Warp4IT besichtigt den Hochleistungsrechner HoreKa. René Caspart (Mitte) erklärte den jungen Frauen (v.l.n.r. Mona Heinkelein, Ceren Simsek, Katharina Flügel und Marion Mayr) die verschiedenen Hardwarekomponenten sowie das innovative, energieeffiziente Kühlsystem (als Fotografin nicht im Bild: Charlotte Debus).

Mentoring program for female STEM students – Warp4IT

In order to increase the share of women in computer science at SCC, female researchers of SCC started the scientific mentoring program for female STEM students of KIT in the summer semester. Under the name Warp4IT – Women as Research Peers for Information Technology – the initiative offers female students a network for the exchange of experiences, career paths, opportunities, and problems.

¹ Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften, Technik

² www.bitkom.org/Presse/Presseinformation/Informatik-Frauenanteil

Schülerinnen und Schüler erleben Mathematik in Alltag, Technik und Forschung

Im Rahmen der Schülerprojekte Simulierte Welten und Computational and Mathematical Modeling Program, kurz CAMMP, steigen Schülerinnen und Schüler in verschiedenen Veranstaltungen aktiv in das Lösen von Problemen mithilfe von Mathematik und Computereinsatz ein. Dabei handelt es sich um reale Probleme aus Alltag, Technik und Forschung.

Sarah Schönbrodt, Stephanie Hofmann, Sarah Diehle

Nachdem die Schüleraktivitäten von Simulierte Welten und CAMMP in den vergangenen 1,5 Jahren ausschließlich online stattfanden, konnte die Projektgruppe 2022 endlich wieder Schülerinnen und Schüler vor Ort am KIT begrüßen – sowohl bei Veranstaltungen mit längerer Tradition wie dem Förderstipendium oder den CAMMP weeks, als auch bei neuen Formaten.

Projektkurs Mädels machen MI(N)T – mit Mathe und KI reale Probleme lösen!

Im Herbst 2022 hat CAMMP ein neues Angebot gestartet: einen Projektkurs, der sich explizit an Schülerinnen richtet. Ziel ist es, das Interesse von Schülerinnen an MINT-Fächern¹, insbesondere an Mathematik und Informatik, zu fördern. Der Kurs findet an zehn Nachmittagen im Wintersemester statt und richtet sich an Schülerinnen ab Klasse 10. Im Rahmen des Kurses arbeiten die Teilnehmerinnen an aktuellen, alltagsbezogenen Problemen aus den Bereichen Data Science und Künstliche Intelligenz (KI).

Der Projektkurs bietet den Schülerinnen ...

... einen Einblick in die angewandte Mathematik!

Unterstützt durch ihre Kursleiterinnen, entwickeln sie mathematische Modelle für verschiedene reale Probleme, u. a. Film-Empfehlungssysteme und Sprachverarbeitungsanwendungen.



Abbildung 1: Teilnehmerinnen der MINT-EC CAMMP week 2022

... einen Einblick in KI und Data Science

Die Schülerinnen erhalten eine Einführung in die Grundlagen und Anwendungsbereiche von KI und Data Science und erkunden die Bedeutung, die die Mathematik in diesen Bereichen hat. Zudem werden wichtige ethische Fragen rund um KI-Anwendungen diskutiert.

... Studien- und Berufsorientierung

Bei einem Netzwerkdinner kommen die Schülerinnen mit jungen Frauen ins Gespräch, die in Wirtschaft oder Forschung in MINT- bzw. Data Science-Berufen tätig sind. Zudem erhalten sie Infos rund ums Studieren am KIT aus erster Hand.

... die Möglichkeit, erste Erfahrungen im Programmieren zu sammeln oder ihre Kenntnisse zu vertiefen

Die Schülerinnen erhalten einen Crash-Kurs in Programmieren mit Python und arbeiten zum Abschluss des Kurses eigenständig an einer Data-Science-Problemmstellung.

An diesem ersten Durchlauf des neuen Kursformates nehmen neun Schülerinnen teil. Bei positiver Evaluation des Kurses, ist geplant, diesen regelmäßig anzubieten, und so noch mehr Schülerinnen davon zu überzeugen, dass Mathematik und Informatik in unserer vernetzten Welt eine große Bedeutung haben und nebenbei viel Spaß machen!

CAMMP weeks 2022 – mathematische Modellierungswochen wieder in Präsenz

Im Juni 2022 nahmen 21 Oberstufenschülerinnen und -schüler aus dem Raum Karlsruhe an der CAMMP week, einer computergestützten mathematischen Modellierungswoche, teil. Diese fand in Zusammenarbeit mit dem Schülerlabor CAMMP der RWTH Aachen in einer Jugendherberge in Belgien statt.

Während einer CAMMP week forschen die Schülerinnen und Schüler in kleinen Teams mit Hilfe von mathematischen Methoden und Computereinsatz an Fragestellungen, die aus der Praxis von

Unternehmen und Forschungseinrichtungen stammen. Dabei werden sie von wissenschaftlichen Mitarbeiter:innen des KIT und der RWTH Aachen unterstützt. Bei den Abschlussveranstaltungen an der RWTH und am KIT, können die Teilnehmenden den Firmen und Instituten ihre bemerkenswerten Ergebnisse präsentieren und mit ihnen ins Gespräch kommen.

In den Sommerferien fand zudem die MINT-EC CAMMP week in Kooperation mit dem MINT-EC-Verein² statt. Insgesamt 20 mathematikbegeisterte Schülerinnen und Schüler aus ganz Deutschland kamen ans KIT, um sich ebenfalls eine Woche lang mit realen Problemen aus Alltag, Forschung und Technik zu beschäftigen.

Dieses Jahr haben folgende Firmen und Institute die CAMMP weeks mit einer Problemstellung unterstützt: AICES (RWTH Aachen), AINT, BASF, Cambio, DKFZ, Inform, Magma, SCC und Wahoo. Wir bedanken uns herzlich bei den Problemsteller:innen für die gute Zusammenarbeit.

Beide CAMMP weeks waren ein voller Erfolg, was sowohl die großartigen Schülerlösungen als auch das positive Feedback der Teilnehmenden unterstreichen.

Noch ein Hinweis in eigener Sache: Sie arbeiten ebenfalls an interessanten Fragestellungen und können sich vorstellen, die Projektwochen und damit die Schülerinnen und Schüler mit einer Problemstellung zu unterstützen? Dann schreiben Sie eine Mail an cammp@scc.kit.edu. Das Projektteam ist jedes Jahr auf der Suche nach neuen, spannenden Problemen!

CAMMP book – ein Lehrbuch für computergestützte mathematische Modellierung im Schulunterricht

Erprobte Materialien mit authentischen und realen Modellierungsproblemen für den eigenen Mathematikunterricht? Das im Oktober 2022 in der ISTRON-Schriftenreihe „Realitätsbezüge im Mathe-

matikunterricht“ erschienene Buch³ liefert genau das. Lehrkräfte erhalten damit digitale und direkt einsetzbare Lehr- und Lernmaterialien für die Umsetzung von schüler-nahen Projekten zur mathematischen Modellierung. Im Buch werden fünf Workshops zu realen Problemstellungen inklusive der zugehörigen digitalen Lernmaterialien detailliert beschrieben. In den fünf Workshops können die Schülerinnen und Schüler

- die Bedeutung mathematischer Modellierung im Bereich Solarenergie erkunden,
- diskutieren und statistisch begründen, inwieweit der Klimawandel existiert,
- die Funktionsweise von Computertomographen erarbeiten,
- am Beispiel von Liedern ein Modell zur Datenkomprimierung entwickeln,
- und der Funktionsweise der Musikkennungs-App Shazam auf den Grund gehen.

Das Buch liefert Hintergrundwissen zu allen Workshops sowie Tipps für deren didaktische Umsetzung im Mathematikunterricht oder in fächerübergreifenden Projekten. Zugleich erhalten die Lehrkräfte Zugang zum digitalen Lernmaterial der Workshops. Dieses liegt auf einer Workshop-Plattform (Jupyter Hub) zum direkten Unterrichtseinsatz bereit. Lehrkräfte sowie Lernende können das Material im Webbrowser bearbeiten.

Förderstipendium Simulierte Welten

Im Rahmen des Förderstipendiums von Simulierte Welten haben neun Schülerinnen und Schüler ein Jahr lang an spannenden Forschungsfragen aus dem



Abbildung 2: Teilnehmende der CAMMP week 2022 in Belgien

SCC gearbeitet und ihre Ergebnisse im Sommer 2022 bei einem Abschluss-event präsentiert. Die Problemstellungen stammten aus den Bereichen Klimachemie, Solarenergie, Molekulardynamik und Strömungssimulationen und wurden von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern des SCC betreut.

Weitere Informationen unter: www.scc.kit.edu/forschung/CAMMP

High-school students experience maths in research, technology, and everyday life

As part of the student projects Simulierte Welten and CAMMP (Computational and Mathematical Modeling Program) high-school students are actively involved in solving real-world problems from everyday life, research or industry using mathematics and computers.

In the past 1.5 years, the events of Simulierte Welten and CAMMP took place exclusively online. In 2022, we were finally able to welcome students on site at KIT again – both at events with a longer tradition (scholarship, CAMMP weeks) and at new formats (Girls do STEM!).

¹ Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften, Technik

² www.mint-ec.de/

³ link.springer.com/book/10.1007/978-3-662-63647-3

Neues aus den SCC-Abteilungen

Neue Forschungsgruppen am SCC: Uncertainty Quantification und Robust and Efficient Artificial Intelligence

Gleich zwei neue Forschungsgruppen nehmen ihre Arbeit am SCC auf: Robust and Efficient AI, geleitet von Charlotte Debus, und Uncertainty Quantification unter der Leitung von Sebastian Krumscheid.

Die Nachwuchsforschungsgruppe Uncertainty Quantification (UQ), die am 1.8.2022 am SCC startete, entwickelt moderne mathematische und numerische Techniken zur Behandlung und Quantifizierung von Unsicherheiten in komplexen Rechenmodellen. Die Forschung konzentriert sich auf theoretische und methodische Aspekte sowie auf interdisziplinäre Projekte, bei denen theoretisch fundierte Methoden auf Anwendungen zugeschnitten werden.

Mathematische Modelle werden in vielfältigen Bereichen der Wissenschaft und Technik angewandt, um komplexe Prozesse zu beschreiben. Um für die Anwendung relevante Phänomene mithilfe von Simulationen dieser Modelle untersuchen und letztlich vorhersagen zu können, bedarf es genauer, zuverlässiger und effizienter Berechnungsmethoden.

„Viele komplexe, praxisrelevante Modelle sind jedoch oftmals mit Unsicherheiten behaftet“, bestätigt Sebastian Krumscheid. „Diese entstehen etwa aufgrund mangelnder Kenntnis von Materialeigenschaften, natürlicher Schwankungen oder durch die Einbeziehung verrauschter Daten - und damit müssen wir bestmöglich umgehen“. Solche Unsicherheiten wirken sich zwangsläufig auf das betrachtete mathematische Modell und folglich auf die Quantifizierung der Zuverlässigkeit von Simulationsergebnissen aus.

Im August ist Sebastian Krumscheid gemeinsam vom Institut für Angewandte und Numerische Mathematik (IANM) der KIT-Fakultät für Mathematik und dem Steinbuch Centre for Computing (SCC)

am KIT auf die Tenure-Track-Professur Uncertainty Quantification berufen worden. Zuvor war Sebastian Krumscheid als Juniorprofessor für Mathematics for Uncertainty Quantification an der RWTH Aachen tätig.



Foto: Uli Weiß

Am 1.9.2022 startet am SCC die neue Nachwuchsforschungsgruppe Robust and Efficient Artificial Intelligence unter der Leitung von Charlotte Debus. Die Gruppe entsteht aus dem BMBF-Projekt EQUIPE, welches Charlotte Debus in einer Ausschreibung zu KI-Nachwuchsgruppen im Rahmen der BMBF-Richtlinie zur Förderung von Ideennachwuchs erfolgreich eingeworben hat. Das Projekt EQUIPE hat zum Ziel, skalierbare und effiziente Methoden zur Quantifizierung von Unsicherheiten in der KI-basierten Zeitreihenvorhersage zu entwickeln, und wird über drei Jahre die Gruppenleitung sowie zwei weitere Doktoranden fördern.

Charlotte Debus, die bereits seit Oktober 2020 als Mitglied des Helmholtz AI Consultant Teams am SCC an KI-Themen im Bereich Energie forscht, freut sich über die Möglichkeit, die KI-Forschung am SCC weiter voranzutreiben und den

dringend benötigten wissenschaftlichen Nachwuchs zu fördern.

Charlotte Debus hat an der Universität Heidelberg Physik studiert und dort am Deutschen Krebsforschungszentrum zur KI-basierten Verbesserung der Strahlentherapie bei Hirntumoren promoviert. Nach zwei Jahren als PostDoc wechselte sie 2019 ans Deutsche Zentrum für Luft und Raumfahrt in Köln, wo sie über das Projekt Helmholtz Analytics Framework den Kontakt zu Markus Götz und dem SCC aufbaute.

Die Bewerbung auf eine eigenständige Nachwuchsforschungsgruppe bedeutet für sie einen weiteren Schritt in Richtung hin zu mehr Gestaltungsfreiheit und Eigenverantwortung in der Forschung am KIT. Gleichzeitig möchte sie die guten Beziehungen zu ihrer ursprünglichen Abteilung und insbesondere zum Helmholtz AI Team weiterhin pflegen und ausbauen. „Es gibt viele Synergien zwischen den unterschiedlichen Gruppen, und wir werden auch weiterhin gemeinsam Projekte beantragen und durchführen, um die KI-Expertise am SCC zu stärken“, so Charlotte Debus.



Foto: Uli Weiß

Inside Warp4IT – Ein Erfahrungsbericht

Marion Mayr ist eine der MINT-Studentinnen, die im Mentoring-Programm Warp4IT teilgenommen hat (s. Seite 18). Hier berichtet sie über ihre Erfahrungen, an welchen Projekten sie gearbeitet hat und was sie für eine mögliche zukünftige Arbeit als Wissenschaftlerin in der Informatik aus dem Programm für sich mitnimmt.



Foto: Privat

Seit Mai 2021 bin ich nun am SCC im Projekt Warp4IT, ein Mentoring-Programm, um Frauen für die Informatik zu begeistern und ihnen schon früh Einblicke in das wissenschaftliche Arbeiten und das Forschungsumfeld zu ermöglichen. Ich studiere Elektro- und Informationstechnik im 4. Bachelorsemester, und bisher hatte ich keine besonderen Vorkenntnisse in der Programmiersprache Python oder zu neuronalen Netzen.

Im Rahmen von Warp4IT konnte ich viele spannende Vorträge von verschiedenen Frauen des SCC hören, die zu ihrem eigenen Weg in die Wissenschaft berichteten und an aufschlussreichen Unterhaltungen über Karrierechancen und die Arbeit in der Forschung am KIT teilnehmen. Darüber hinaus konnte ich im direkten Gespräch mit meinen Betreuerinnen mehr über ihren persönlichen Werdegang und ihre Forschung erfahren und dadurch wertvolle Einblicke in die Wissenschaft gewinnen.

Ich habe gelernt, dass es nicht nur den „einen Weg“ in die Wissenschaft gibt und der jeweilige Lebensweg sehr unterschiedlich sein kann. Außerdem haben wir den Supercomputer HoreKa besichtigt, was sehr eindrucksvoll war. Im Projekt Warp4IT habe ich Python gelernt und auch, was ein neuronales Netz ist. Konkret habe ich mich zuerst mit den Grundlagen von Python beschäftigt und wie ich das Terminal-Programm am Laptop benutze. Schließlich habe ich anhand verschiedener Projekte mit den Datensätzen MNIST und Cifar10 die AlexNet-Architektur programmiert und damit meine ersten beiden neuronalen Netze geschrieben. In meinem Zwischen- und Abschlussvortrag konnte ich meine Ergebnisse vor einem Fachpublikum präsentieren. Bei den Projektarbeiten habe ich gelernt, Fehler durch eine systematische Vorgehensweise schrittweise zu finden und zu beheben.

Warp4IT hat es mir ermöglicht, unter Anleitung Programmieren zu lernen, was für mich schon lange ein Ziel war. Zu Beginn wusste ich nicht, was mich erwarten wird, und war gespannt auf viele neue Erfahrungen. Rückblickend bin ich sehr froh, dass ich ein Teil von Warp4IT sein konnte, und dankbar für all die Erfahrungen, die ich sammeln konnte. Ich habe unglaublich viel gelernt, was mich in Zukunft weiterbringen wird und woran ich gut anknüpfen kann.

Danke an Fr. Debus und Fr. Weiel, für ihren Einsatz, ihre Erklärungen und die Unterstützung bei der Fehlersuche. Durch den gut strukturierten Lernplan bin ich nun in der Lage, selbstständig an neue Projekte heranzugehen.

IMPRESSUM

SCC news
Magazin des Steinbuch Centre
for Computing

Herausgeber
Präsident Professor Dr.-Ing.
Holger Hanselka
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Kaiserstraße 12
76131 Karlsruhe

Anschrift
Steinbuch Centre for Computing (SCC)
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Redaktion SCC-News
Zirkel 2
76131 Karlsruhe
oder:
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Fax: +49 721 608-24972

Redaktion
Achim Grindler (verantwortlich),
Karin Rische, Andreas Ley
E-Mail: redaktion@scs.kit.edu

Gestaltung, Satz und Layout
Heike Gerstner, Nicole Gross,
Nina-Sophie Knappich, Elias Kobel

AServ – CrossMedia – Grafik (CroM)
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Titelfoto
Charlotte Debus und Sebastian Krumscheid im Atrium des Kollegiengebäudes Mathematik. (Foto: Uli Weiß, KIT, SCC)

Fotos
SCC, KIT

Online-Ausgabe
Stand 13.06.2023

Erscheinungstermin dieser Ausgabe
Juni 2023

www.scc.kit.edu/publikationen/scs-news

Der Nachdruck und die elektronische Weiterverwendung sowie die Weitergabe von Texten und Bildern, auch von Teilen, sind nur mit ausdrücklicher Genehmigung der Redaktion gestattet.



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Steinbuch Centre for Computing (SCC)

ISSN: 1866-4954

www.scc.kit.edu
www.scc.kit.edu/twitter
contact@scc.kit.edu