

# Gray–Scott Revolutions

## poletna šola HPC 2025

Ljubljana, 23. junij – 4. julij 2025

Organizatorji: NCC SLING, UL FMF, UL FS, IZUM  
V sodelovanju s CTA-LAPP (CNRS/IN2P3, Annecy)

Avtor: doc. dr. Luka Leskovec

### Abstract

The *Gray–Scott School 2025 – Revolutions* offered an intensive introduction to modern high-performance computing, with a focus on optimization, profiling, and software engineering across CPE and GPE architectures. The Slovenian satellite school, hosted at the Faculty of Engineering and on the VEGA supercomputer, provided hands-on exercises and discussions based on the Gray–Scott reaction–diffusion model — a pedagogical system well suited for parallelization. Participants explored advanced programming in C++, Rust, Fortran, and Python, applying concepts such as vectorization, cache blocking, GPE offloading, and numerical precision. The event exemplified the active role of Slovenian HPC infrastructure and SLING in European HPC education and open science.

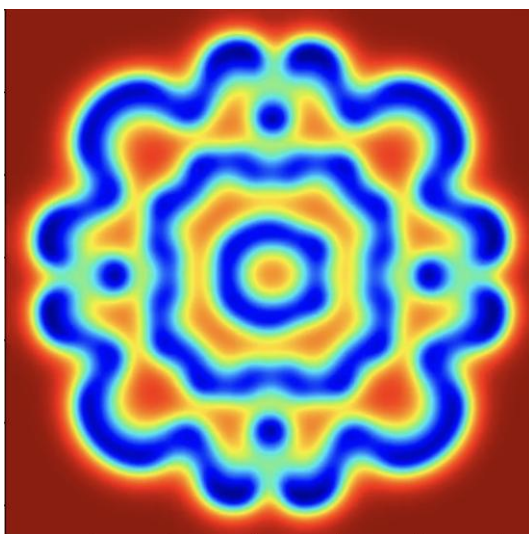
### 1. Uvod

*Gray–Scott School 2025 - Revolutions* je mednarodna poletna šola, posvečena programiranju za visokozmogljivo računanje (HPC - High Performance Computing) ter optimizaciji, profiliranju dotičnih programov, ki je potekala med 23. junijem 2025 in 4. julijem 2025 v prostorih Fakultete za strojništvo, Univerze v Ljubljani. Udeleženci so se učili principov paralelizacije, pomnilniške optimizacije in numerične natančnosti na podlagi sistema reakcijsko-difuzijskih diferencialnih enačb, poznan kot Gray–Scott model. Opisuje reakcijsko-difuzijski sistem dveh kemijskih vrst  $U$  in  $V$ , ki reagirata in difundirata po prostoru:

$$\partial U / \partial t = D_u \nabla^2 U - UV^2 + F(1-U),$$

$$\partial V / \partial t = D_v \nabla^2 V + UV^2 - (F+k)V.$$

Gre za nelinearni sistem parcialnih diferencialnih enačb, ki daje bogato dinamiko – od stabilnih vzorcev do kaotičnih oscilacij. Zaradi lokalne odvisnosti med točkami je ta sistem idealen pedagoški primer za demonstracijo in učenje paralelizacijskih in optimizacijskih tehnik v HPC. Model je še posebej uporaben, ker omogoča vizualno preverjanje rezultatov - koncentracij  $U$  in  $V$ , je numerično stabilen a hkrati dovolj zahteven, da vključuje elemente, kot so prostorska diskretizacija, izračun z večnitnim dostopom do podatkov in analiza učinkovitosti. V poletni šoli smo ga uporabili kot učni primer za optimizacijo kode tudi v C++, Fortranu, Pythonu in Rustu.



[Slika 1: Primer vzorcev Gray–Scott sistema – stabilne strukture in oscilacije. Vir: <https://github.com/wigging/gray-scott>]

## 2. Izvedba satelitske šole tudi v Sloveniji

Slovenija je bila ena izmed uradnih satelitskih lokacij poletne šole Gray Scott School 2025 - Revolutions. V Sloveniji so dogodki potekali na UL Fakulteto za strojništvo (FS) z organizacijo pa je pomagala UL Fakulteto za matematiko in fiziko (FMF) ter SLING. Udeleženci so računali na slovenskem superračunalniku Vega, ki se nahaja na IZUMu v Mariboru (IZUM). Udeleženci so v realnem času spremljali predavanja iz Annecyja (LAPP-IN2P3-CNRS) ter lokalno izvajali praktične naloge in razpravljali o različnih pristopih k problemu z predavatelji v Sloveniji. Poudarek je bil na optimizaciji in paralelizaciji kode na Centralnih Procesnih Enotah (CPE) ter na programiranju GPE aplikacij z uporabo različnih knjižnic. Šola je združila teoretični vpogled v arhitekturo procesorjev in praktične vaje na VEGI, ki je omogočila izvajanje programov na grafičnih karticah A100.

## 3. Nekaj bolj tehničnih aspektov

V CPE tednu so udeleženci spoznali arhitekturo sodobnih procesorjev, razliko med vektorizacijo in paralelizacijo, uporabo profilnih orodij, kot so perf, gprof in valgrind, ter optimizacijo pomnilniške hierarhije in cache blocking. Učenje je vključevalo praktične analize in vizualizacije učinkovitosti kode z Intel Advisorjem. V GPE tednu so sledile teme o masovno vzporednem računanju, standardih SYCL in Vulkan, uporabi C++20 za GPE programiranje, ter razvoju aplikacij v Pythonu (CuPy, CuNumeric, JAX, PyTorch). Kljub temu, da je Fortran en najstarejših še uporabljenih jezikov ne zamira - omogoča aktivno razvijanje tudi na GPE; na primer z orodji nvfortran in knjižnicami OpenACC in CUDA, kot so bile predstavljene na šoli. Udeleženci so razpravljali tudi o numerični natančnosti (IEEE 754, machine epsilon, zaokrožitvene napake) in algoritmih za stabilne vsote (Kahan–Babuška summation).

## 4. Odprtost - to je prava stvar

Vsa predavanja, kode in containerji poletne šole Gray Scott School 2025 - Revolutions so javno dostopni prek repozitorijev CTA-LAPP in spletnega portala šole ([https://cta-lapp.pages.in2p3.fr/cours/gray\\_scott\\_revolutions/](https://cta-lapp.pages.in2p3.fr/cours/gray_scott_revolutions/)) in Discorda poletne šole (<https://discord.gg/SChUmEjxJ>). Videoposnetki so objavljeni na YouTube kanalu ([https://www.youtube.com/watch?v=DwDa5m0EiFU&list=PLj\\_PwIXO9FR2PgrH9\\_HCHhtN8xtZYqRIk](https://www.youtube.com/watch?v=DwDa5m0EiFU&list=PLj_PwIXO9FR2PgrH9_HCHhtN8xtZYqRIk)).

Cilj šole je bil prikazati, kako se lahko en sam znanstveni problem – Gray–Scott sistem – uporabi za poučevanje paralelizacije v več programskih jezikih in s tem spodbujati odprto znanost in sodelovanje v okviru evropskega HPC izobraževalnega prostora. Šole se je po Evropi udeležilo več kot 500 ljudi iz različnih držav, z raznolikimi ozadji in izkušnjami. Povezala mlade znanstvenike, inženirje in razvijalce programske opreme iz različnih držav. Poudarek je bil na interdisciplinarnosti – med fiziko, kemijo, računalništvom in inženirstvom – ter, predvsem - na praktičnem pristopu. Dogodek je spodbudil nadaljnje sodelovanje med SLING, UL in tujimi partnerji, z idejo, da bi se satelitska izvedba v prihodnjih letih razširila tudi na dodatne teme, kot so umetna inteligenca v HPC in numerična analiza za kvantne sisteme.

## 5. Zaključek

Glavni dogodek je potekal v Annecy-ju, kjer so predavatelji izvajali predavanja. Na satelitskih lokacijah pa so prostovoljci iz SLING-a dopolnjevali vlogo z diskusijami, primeri in pomočjo pri realizaciji nalog na superračunalniku VEGA. Dogodek je pokazal, da so satelitske šole učinkovit model prenosa znanja in vzpostavljanja mreže strokovnjakov na področju HPC. Slovenska izvedba je hkrati pokazala, da je Slovenija odlično okolje za izobraževanje na področju HPC, saj ponuja dostop do najnoveše strojne opreme in podpornega osebja. SLING (skupaj s pripadajočimi projekti) bo tudi v prihodnje spodbujala podobne pobude, ki krepijo kompetence uporabnikov in odpirajo vrata evropskim izobraževalnim in raziskovalnim sodelovanjem. Poletna šola Gray–Scott Revolutions ni bila zgolj računska vaja, temveč živ primer odprte znanosti in uspešnega sodelovanja med raziskovalnimi institucijami.

Zahvale: Organizatorjem CTA-LAPP (Annecy), Nacionalnemu kompetenčnemu centru HPC SLING, ekipi superračunalnika Vega (IZUM), UL FMF, UL FS ter projektu EUROCC2.

*Projekt EuroCC 2 financira Evropsko Skupno podjetje za evropsko visokozmogljivo računalništvo (JU) v okviru sporazuma o dodelitvi sredstev št. 101101903. JU podpirajo EU program Digitalna Evropa, Nemčija, Bolgarija, Avstrija, Hrvaška, Ciper, Češka republika, Danska, Estonija, Finska, Grčija, Madžarska, Irska, Italija, Litva, Latvija, Poljska, Portugalska, Romunija, Slovenija, Španija, Švedska, Francija, Nizozemska, Belgija, Luksemburg, Slovaška, Norveška, Turčija, Republika Severna Makedonija, Islandija, Črna gora in Srbija. Delovanje Nacionalnega kompetenčnega centra SLING sofinancira Ministrstvo za visoko šolstvo, znanost in inovacije.*