

Quartl

3 / 2014
72. Ausgabe

dungssoftware zusammenbringen kann. Außerdem war er Keynote Speaker auf dem von Miriam Mehl und Dirk Pflüger im Rahmen der ICS (International Conference on Supercomputing) organisierten Workshops *Exploiting Different Levels of Parallelism for Exascale Computing*, wo er über schnelle Algorithmen für die Auswertung von Volumenintegralgleichungen auf hybridnen Architekturen gesprochen hat.

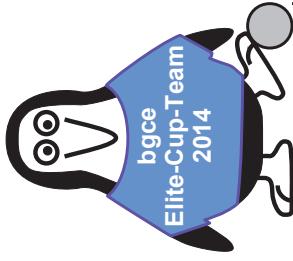
Aber George konnte natürlich nicht nur uns etwas näher bringen, sondern wir haben natürlich auch versucht, ihm etwas in und um München zu zeigen. Neben kulturellen Ausflügen wie dem Besuch des Bayerischen Staatsballetts, konnten wir auch einen angenehmen Tag in den bayerischen Vorälpen verbringen. Unsere Wanderung führte uns vom Schliersee über die Gindelalm zum Tegernsee. Dabei konnten wir nicht nur die Sicht in die Alpen vom Berggasthof Neureuth aus genießen, sondern haben am Ende auch noch festgestellt, dass der Tegernsee selbst Anfang Juni recht kalt zum Baden ist. Beinahe wäre einer der wichtigsten Punkte des Programms ausgefallen, aber glücklicherweise ließ sich im Tegernsee doch noch ein Restaurant finden, welches Kaiserschmarrn anbietet, sodass George diesen auch noch probieren konnte.

Wir freuen uns darauf, George nächstes Jahr wieder in München zu begrüßen, und werden dann nicht nur dichtere Oktalbäume durchforsten sondern auch höhere Berge besteigen.

A. Bakhtiari, C. Kowitz

Inhalt

Editorial	2
5. BGCE Student Paper Preis	4
10 Jahre BGCE - Ein Jubiläum steht an	5
Iterationsschleife	6
ENB Elite Cup 2014	8
SeisSol und die Milchstraße	12
Extreme Scaling und Strömungscode	13
2nd prize for BGCE Students	19
Zwei runde Geburtstage an der TUM	20
SPPEXA und internationale Tagungen	21
Stefano Serra Capizzano in Garching	22
Workshop on Sparse Grids and Applications	23
IAS Fellow George Biros in München	26



Quartl* - Impressum

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde

Redaktion:

J. Daniel, C. Hafner, C. Kowitz, Dr. S. Zimmer
Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München
Tel./Fax: ++49-89-289 18630 / 18607
e-mail: hafner@in.tum.de, www: http://www5.in.tum.de/quartl

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **15.11.2014**

* Quartl : früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,
→ das Quartl: 1/4 Kanne = 0.27 l
(Brockhaus Enzyklopädie 1972)



Das Quartl erhalten Sie online unter <http://www5.in.tum.de/quartl/>



Das Quartl ist das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR) und der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE)

Editorial

Kennen Sie, liebe Quartl-Leserinnen und Leser, die UIA? Wer jetzt zur Ge- genfrage „Welche?“ greift, liegt so falsch nicht, liefert doch Google eine stattliche Zahl von UIA’s: Ukraine International Airlines, Union of Interna- tional Associations, Unemployment Insurance Agency, Union Internationale des Avocats, etc. etc. Wie Sie sich jedoch sicher denken können, habe ich natürlich die UIA mit dem diffusesten Namen im Blick – die Union of Interna- tional Associations. Einen Kollegen aus dem Hessischen (Dank für’s Zu- flüster!) erreichte von besagter Meta-Association kürzlich folgende Email:

,The 2nd UIA Associations Round Table Asia on Wednesday 22 and Thurs- day 23 October in Seoul is an opportunity to learn through networking and through practice. Meet decision-makers from other international associations and share experience and knowledge to help you run your organization better.

Das klingt doch viel versprechend – also rasch ein Blick auf's Programm gewagt, siehe <http://www.uia.org/roundtable/asia-2014>. Die Vortragenden repräsentieren fraglos die allerallerste Sähne internationaler Organisa- tionen, wobei der umstrittene Höhepunkt der Vortrag „Mobilizing Global Movements for Good“ von Jack Sim, dem Gründer und Vorsitzenden der „World Toilet Organization“, sein wird. Leider kann ich's mir nicht ein- richten, im Oktober in Seoul vorbeizuschauen – auch wenn ich zu gerne wüsste, welche Semantik die World Toilet Organization den Begriffen „Mo- bilization“, „Movement“ und „Good“ zuordnet. Wer sich weiter hängelt zu <http://www.worldtoilet.org>, wird belohnt mit diversen Nachrichten von ex- orbitanter Bedeutung: So wurde irgendwo eine „Poo Pee Happy“ Skulptur enthüllt, und wir lernen, dass ein „Mr. Toilet“ nach Cannes geht (was auch immer er dort treiben mag).

Bei allem Spott sei allerdings nicht vergessen, dass in weiten Teilen der Welt dieses Thema brennender ist als bei uns und dass die WTO (also mit T für Toilet, nicht T für Trade) durchaus auch vernünftige Aspekte in ih- rer Agenda hat. Vor diesem Hintergrund ist dann auch die Botschaft „World Toilet Organization is one of the few organizations whose sole focus is on toilets and sanitation. Breaking the silence on the sanitation crisis is at the

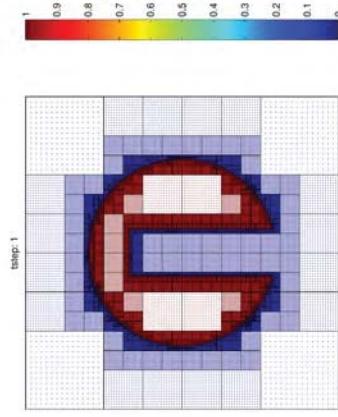


Abbildung 7: Ein Oktalbaum, welcher zur räumlichen Auflösung einer Zalesak-Scheibe erzeugt wurde

tel, in diesem Fluss verteilen. Daran forscht seit Ende letzten Jahres Arash Bakhtiari als IAS-Doktorand von George in München.

Während George's Besuch im Mai und Juni konnten beide zusammen daran arbeiten, den advektiven Anteil der Reaktions-Diffusionsgleichung mittels der Semi-Lagrange Methode zu implementieren. Dabei sollen später nicht nur die Semi-Lagrange Methode auf OktaBäumen (Abb. 7) parallelisiert werden, sondern auch eine effektive Kopplung mit dem bereits existierenden FMM Löser geschaffen werden. Da der dafür nötige intensive Austausch an Ideen schwer über (Video)telefonie zu realisieren ist, wird Arash im Oktober und November zur *University of Texas at Austin* reisen und dort intensiv mit George und dessen Gruppe zusammenarbeiten.

Neben der Arbeit mit Arash stellte George auch seine aktuellen Forschungen bei einigen Veranstaltungen vor. Beim Kolloquium der Fakultät für Informatik sprach er über effektive Algorithmen auf hochdimensionalen Baumstrukturen. Auf dem IAS Fellows-Lunch gab er später einen breiten Überblick über seine aktuellen Forschungsgebiete.

Weiterhin hielt George auch einen Vortrag bei einem BGCE-Research-Day, sodass auch Studenten einen Einblick bekommen, wie man den mas- siven Parallelismus der modernen Rechnerarchitekturen mit einer Anwen-

Mit den eingeladenen Vorträgen von Ralf Hiptmair (ETH Zürich), Max Gunzburger (Florida State University), Sharif Rahman (The University of Iowa) und Fabio Nobile (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne) wurden weitere Glanzlichter gesetzt.

Auch das Rahmenprogramm wurde mit Begeisterung wahrgenommen. Am Mittwoch Nachmittag ging es als Highlight in das Mercedes-Benz Museum. Die Führungen begeisterten nicht nur Auto-Fans von nah und fern. Und im anschließenden Abendessen im Weinkeller gab es typisch schwäbisches Essen. Die Begeisterung der Teilnehmer weckt Freude auf die nächsten zwei Jahre dünne Gitter – eben bis zur nächsten Sparse Grids and Applications, die in den USA stattfinden wird. Und um die Zeit zu überbrücken wird es wieder Proceedings geben, in denen einige der Themen der SGA dann ausführlicher nachzulesen sein werden.

D. Pflüger

IAS Fellow George Biros in München

Nach kurzen Besuchen im letzten Jahr kam IAS Fellow George Biros (The University of Texas at Austin) für einen Monat nach München und hat intensiv mit seinem Doktoranden Arash Bakhtiari arbeiten können. Aber neben wissenschaftlicher Arbeit standen auch die landschaftlichen schönen Seiten Bayerns auf dem Programm.

Seit 2012 ist George Biros nun Hans Fischer Fellow am IAS in der Focus Group *HPC – Tackling the Multi-Challenge*. Neben den nunmehr Alumni-Fellows Miriam Mehl und Markus Hegland, welche sich um die *Multi-physics-* und die *Multi-dimensional-challenge* gekümmert haben, widmet sich George der *Multi-core-challenge*. George war 2010 Gewinner des Gordon-Bell Preises, den er für eine massiv-parallele Simulation des Blutflusses auf 200.000 Rechenkernen erhielt. Dafür wurde die Fast-Multipole-Method (FMM) angewendet, mit welcher man langreichweite Potentiale parallel und effizient berechnen kann. Aufbauend auf dieser Arbeit forscht er jetzt mit der Focus-Group zusammen weiter. Zwar kann die genaue Beschreibung des Blutflusses samt Blutkörperchen schon Aufschluss über das Verhalten an beispielsweise Blutgefäßverengungen geben, allerdings wäre es auch sehr interessant zu sehen, wie sich Chemikalien, wie zum Beispiel Arzneimittel

heart of what we do.“ eine durchaus ernst zu nehmende.

Eben vom Global Summit des Council of Graduate Schools zurückgekehrt, muss ich natürlich auch auf folgende Webseite hinweisen:
<http://www.doktortitel24.de>.

Unter dem Schlagwort „Doktortitel legal kaufen“ liest man dort: „Durch uns werden Sie völlig legal zum Doktor oder Professor ernannt. Eine Spende an unser Institut macht es so einfach, sicher und fair! In wenigen Tagen erhalten Sie Ihre persönliche Urkunde, die Ihre Ernennung bestätigt. Ab diesem Tag dürfen Sie Ihren Titel führen. Ideal auch zum Verschenken: Machen Sie eine andere Person zum Doktor!“. Das Produkt-Portfolio ist (noch) etwas eingeschränkt, aber es gibt immerhin einen Doktortitel für 49 Euro (Ernennung in wenigen Tagen, keine weiteren Kosten), einen Professoren-Titel für 79 Euro (hier dauert's nicht wenige, sondern 4 bis 6 Tage ...) und – das absolute Hammer-Angebot – der attraktive Doppelpack „Prof.Dr.“ für sarge und schreibe 99 Euro. Wer hinter der Sache steckt? Sie können ja gerne detektivisch tätig werden; ein erster Hinweis: Im Impressum wird als verantwortliche Institution ein „RV Church & Institute Inc.“ in Miami geführt...

Und dann noch zwei Richtigstellungen zu Zurufen, die uns von Kollegen aus dem TUM-Maschinenwesen erreichten. Zum einen wies Wolfgang Wall völlig zurecht darauf hin, dass er auf der diesjährigen GAMM-Tagung in Erlangen die Ludwig-Prandtl-Vorlesung nicht hielt (siehe Quartl # 71, S. 9), sondern nur die entsprechende Sitzung leitete. Sorry für den Lapsus, und danke für die Korrektur! Zum anderen schrieb Nikolaus Adams „Lieber Herr Bungartz, was ich jetzt echt klasse gefunden hätte, wäre gewesen, wenn Sie in einem der Quartls kurz über unseren gewonnenen Gordon Bell Preis berichtet hätten. Wäre ein schönes interdisziplinäres outreach gewesen, oder aber doch im großen Ganzen zu unwichtig.“ Hierzu nun eine seriöse und sonst wäre es nicht das Quartl – eine sottisige Erwiderung.

Nein, ein Gordon Bell Preis ist nicht unwichtig; ja, die Beteiligung eines TUM-Teams ist eine tolle Sache – leider spät, aber deswegen nicht weniger herzlich die Glückwünsche des Quartls; der interdisziplinäre Aspekt ist natürlich prima, und gefällt wohl kaum jemandem mehr als mir; und ja, ich hätte dran denken können, sorry. Aber: Offenbar hat sich noch nicht überall herumgesprochen, dass ich neben der Redaktion des Quartls auch noch ein

paar andere Jobs und deswegen ab und zu auch etwas zu tun habe. Daher funktioniert das Quartl (und kann auch nur so funktionieren) anders als andere Organe – wir leben davon, dass uns passende Beiträge erreichen; die Ablehnungsquote liegt übrigens in der Größenordnung des berühmten Episoden... Insofern ist, für zukünftige, ähnlich gelagerte Fälle, „schreiben und schicken“ auch eine denkbare Vorgehensstrategie. Der nächste Gordon Bell Preis steht schließlich schon vor der Tür... .

Doch genug der einleitenden Worte – einen guten Start ins neue Studienjahr und viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

H.-J. Bungartz

5. BGCE Student Paper Preis

Auf der SIAM CS&E Konferenz 2015, die vom 14. bis 18. März in Salt Lake City, Utah, stattfinden wird, wird der 5. BGCE Student Paper Preis¹ für hervorragende studentische Arbeiten im Bereich des Computational Science and Engineering vergeben werden.

Stifter des Preises ist die Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE), die als Elitestudiengang im Elitenetzwerk Bayern ein gemeinsames Aufsatzmodul für die besten und motiviertesten Studierenden der internationalen Masterprogramme Computational Engineering (CE) der Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) sowie Computational Mechanics (COME) und Computational Science and Engineering (CSE) an der TU München (TUM) darstellt. Der Gewinner des Preises wird im kommenden Sommer eine Woche lang kostenlos Bayern, die FAU und die TUM besuchen und intensiven Kontakt zu Vertretern der BGCE pflegen. Das Hauptanliegen des Preises ist es, exzellente Studierende im Bereich CS&E zu fördern und internationalem Austausch in einer frühen Karrierephase zu unterstützen.

Für den BGCE Student Paper Preis können sich MasterstudentInnen und DoktorandInnen bewerben, indem sie ein kurzes Paper von maximal vier Seiten einreichen. Die Preis-Finalisten werden ihre Arbeit in einem speziell

(siehe Abb. 6) aus 8 Ländern und zahlreichen Fachdisziplinen sorgten eine Woche lang für ein volles, vielfältiges und spannendes Programm und lockten über 55 Zuhörer in die Vorträge.

Um die Attraktivität hierarchischer Verfahren zur Lösung höherdimensionaler Probleme zu verstehen, genügt ein Blick in die Anwendungen. Überall, wo zu Simulationsaufgaben Parameter oder Unsicherheiten hinzukommen, werden die Aufgaben höherdimensional – und für klassische numerische Ansätze viel zu aufwändig. Und so finden Düne Gitter ihren Einsatz in der Quantifizierung von Unsicherheiten (Uncertainty Quantification), der Lösung inverser Probleme, der Finanzmathematik, der Quantenchemie oder bei dem Abspeichern hochdimensionaler Kennfelder. Wenn beispielsweise CO₂ im Untergrund gespeichert werden soll oder atomare Endlager ausgelotet werden, dann ist die Quantifizierung von Risiken unheimlich relevant. Doch um zu bestimmen, wie groß die Risiken sind, hängt von vielen Parametern ab. Wie lange ein Szenario mit 99 prozentiger Wahrscheinlichkeit sicher ist und keine strahlenden Teilchen oder CO₂ austreten, hängt von der Priorität des Untergrunds und vielen weiteren Parametern ab. Und ein einfaches Durchprobieren aller möglichen Kombinationen scheitert schnell am Rechenaufwand, der schon für moderat komplexe Probleme in die Jahrhunderte geht.

Die Themen auf der SGA deckten die verschiedensten Bereiche des aktuellen Stand der Forschung ab, von der Theorie bis zu Anwendungen. Während zum einen neue Abschätzungen bewiesen und vorgestellt wurden (was kann man überhaupt noch tun, wenn die Probleme so richtig hochdimensional werden oder mathematisch nicht so nett sind?), wurden zum anderen Probleme aus den Anwendungen diskutiert (von Simulationen in Fusionsspektoren in der Plasmaphysik, über die genannte Speicherung von CO₂ im Untergrund, Simulationen in der Volkswirtschaft, online learning und Big Data bis hin zu dynamischen Simulationen in der Chemie). Auch bei dieser SGA spielte die effiziente numerische Umsetzung von Dünngitteralgorithmen eine wichtige Rolle. Neu war, dass Aspekte des Höchstleistungsrechnens einen Halbtag füllten, denn hierarchische Ansätze lassen sich nicht nur nutzen, um höherdimensionale Probleme erst überhaupt zu lösen, sondern auch um mit Fehlern zukünftiger Höchstleistungsrechner umgehen zu können.

¹ http://www.bgce.de/news/bgce_prize.html

Workshop on Sparse Grids and Applications in Stuttgart

Alle zwei Jahre ist es wieder so weit und wird mit Spannung erwartet. Genau, Fußball. Oder korrekter: Herrenfußball. Und während es vor zwei Jahren noch nicht für das Finale gereicht hatte, wurden dieses Jahr gleich mehrere Rekorde eingestellt. Gut zu merken, dass es immer im gleichen Jahr auch wissenschaftlich richtig spannend wird (Gesetz der Serie, das bekanntlich spätestens bei zwei anfängt). Auch dieses Jahr fand wieder die SGA statt, die Konferenz „Sparse Grids and Applications“.



Abbildung 6: Teilnehmer der SGA 2014

Nach dem erfolgreichen Auftritt der zweiten SGA im Jahre 2012 am IAS in München (das Quartl berichtete) zog es die dritte ihrer Art nach Stuttgart, ins Exzellenzcluster Simulation Technology mit Unterstützung des Informatik Forums Stuttgart. Und auch bei der dritten SGA konnten wieder einige Rekorde eingestellt werden. 38 Vorträge von internationalen Teilnehmern

len CS&E Student Prize Minisymposium auf der SIAM CS&E 2015 vorgestellt. Die Paper und Vorträge werden von einer internationalen Jury bewertet. Ausgeschlossen von der Teilnahme sind lediglich Studierende der FAU und der TUM.

Einreichungsschluss für den BGCE Student Paper Prize ist der 14. Dezember 2014. Beiträge werden bitte in pdf-Format an neckel@in.tum.de geschickt. Wir freuen uns neben den traditionell zahlreichen internationalen Einreichungen natürlich auch über viele Beiträge aus dem Quart-Land! Wer es genauer wissen will: Die Preisträger der vergangenen vier BGCE-Preise sind:

- 2013: Tobin Isaac (ICES, UT Austin)
- 2011: Andrea Manzoni (EPFL Lausanne)
- 2009: Gisela Widmer (ETH Zürich) und Chad Lieberman (MIT)
- 2007: Alfonso Bueno Orovio (Universidad de Castilla-La Mancha, Spain)

T. Neckel

10 Jahre BGCE - Ein Jubiläum steht an

Kinder, wie die Zeit vergeht! Im Herbst dieses Jahres wird die BGCE zweitligig: Das zehnjährige Jubiläum wird am 30.10.2014 ab 17:00 im IAS-Gebäude der TUM am Campus Garching mit einem kleinen Festakt im Rahmen der gemeinsamen Absolventenfeier von BGCE, CCME, CSE und diesmal auch CE begangen werden.

Alle die, als Studierende, Alumni, im Team der Dozenten, Organisatoren oder des ENB, im Beirat oder sonstwie mit BGCE verbunden sind, sind herzlich eingeladen und können sich diesen Termin bereits notieren. Wir freuen uns schon auf Sie/Euch.

T. Neckel

Iterations schleife N=13

18. August 2014

Am 18. August 1830 wurde der spätere Kaiser von Österreich Franz Joseph I. geboren. 68 Jahre lang regierte er über ein Gebiet, das schon zu seinen Lebzeiten als Großmacht auf Abruf galt. Wenn er formal angeprochen wurde, hieß er^a Seine Kaiserliche und Königliche Apostolische Majestät Franz Joseph I.

von Gottes Gnaden Kaiser von Österreich, König von Ungarn und Böhmen, von Dalmatien, Kroatien, Slawonien, Galizien, Lodomerien und Illyrien, König von Jerusalem etc., Erzherzog von Österreich, Großherzog von Toskana und Krakau, Herzog von Lothringen, von Salzburg, Steyer, Kärnten, Krain und der Bukowina, Großfürst von Siebenbürgen, Markgraf von Mähren, Herzog von Ober- und Niederschlesien, von Modena, Parma, Piacenza und Guastalla, von Auschwitz und Zator, von Teschen, Friaul, Ragusa und Zara, Gefürsteter Graf von Habsburg und Tirol, von Kyburg, Görz und Gradisca, Fürst von Trient und Brixen, Markgraf von Ober- und Niederlausitz und in Istrien, Graf von Hohenems, Feldkirch, Bregenz, Sonnenberg etc., Herr von Triest, von Cattaro und auf der Windischen Mark, Großwojwode der Wojwodschaft Serbien etc., etc.

Aus den Ländern und Gegenden, die er vermeintlich beherrschte, ergibt sich das Bild eines Mitteleuropas, das eine einheitliche Amtssprache – die nicht von allen gleichermaßen geschätzt wurde – und eine einheitliche Währung hatte. Es war ein Land, in dem man vom heutigen Lviv (Ukraine) bis nach Ljubljana (Slowenien) ebenso ohne Reisepass kommen konnte wie von Krakow (Polen) bis Dubrovnik (Kroatien), von Brasov (Rumänien) bis Milano (Italien) oder von Bratislava (Slowakei) bis nach Sarajevo (Bosnien-Herzegowina). Neun Länder der heutigen EU waren ganz oder teilweise Bestandteil dieses geeinten Mitteleuropas (Italien, Kroatien, Österreich, Polen, Rumänien, Slowakei, Slowenien, Tschechien, Ungarn). Drei weitere Länder die heute als westlich orientiert gelten und deren Beitritt zur – oder zumindest enge Anbindung an die – EU gewünscht wird, waren teilweise involviert (Bosnien-Herzegowina, Serbien, Ukraine).

Dass dieses vermeintlich geeinte Mitteleuropa alles andere als einig und friedlich war, zeigten schon die Umstände des Amtsantritts von Kaiser Franz Joseph. Völlig ungeplant kam da ein 18-jähriger an die Macht, weil eine Revolution 1848 drohte, das Reich in den Orkus der Geschichte zu spülen.

tion der teilnehmenden Studenten und Doktoranden war überaus positiv. Im Rahmen des Kompaktkurses fand auch eine hands-on-Sitzung statt, bei der die Teilnehmer die theoretischen Ergebnisse der Vorlesung in Matlab selbst nachvollziehen und an Beispielen überprüfen konnten. Dieses Lab fand in dem BGCE-Computerpool am Lehrstuhl Bungartz statt.

Weiterhin hielt Herr Serra Capizzano im Rahmen der Vorlesung auch einen Kolloquiumsvortrag „On the asymptotic spectrum of stiffness matrices arising from Isogeometric Analysis“ . Darin gab er einen Überblick über das aktuelle Thema Isogeometric Analysis (IgA), bei dem PDE nicht mit klassischen Finite Element-Ansätzen diskretisiert werden, sondern mit Ansatzfunktionen aus der Computergraphik (Splines, Nurbs). Dies erleichtert die Importierung von graphischen Gebietsdaten in den numerischen Löser und spart dadurch viel Rechenzeit. Dies ist ein besonders im Ingenieursbereich hochaktuelles Thema. Hier stellte Herr Serra seine Spektralanalyse vor, die ebenso auf strukturierten Matrizen beruht.

Neben dem wissenschaftlichen Programm fanden wir auch Zeit, die Attraktivität Münchens zu erforschen, mit Besuchen auf Herrenchiemsee (Vorort von München), Konzertbesuch in der Philharmonie, Museumsbesuch, und Biergärtzen. Insgesamt war der Aufenthalt für beide Seiten höchst fruchtbar und erfolgreich, und schuf eine gute Grundlage für weitere Zusammenarbeit in allen Bereichen.

T. Huckle



^a http://de.wikipedia.org/wiki/Großer_Titel_des_Kaisers_von_Österreich

Und auch auf der diesjährigen Supercomputing im November in New Orleans wird SPPEXA auch institutionell vertreten sein. Unter Federführung von Sabine Roller (Siegen) konnte eine international besetzte Panel-Diskussion zu Fragen der Förderung von HPC-Projekten platziert werden: „Funding Strategies for HPC Software Beyond Borders“.
Für nähere Informationen sei auf die Webseite der SC 2014 verwiesen: sc14.supercomputing.org .

Gastaufenthalt von Prof. Dr. Stefano Serra Capizzano in Garching

Prof. Stefano Serra Capizzano verbrachte die Zeit von 18.6. bis 28.6. als Guest an der Informatik-Fakultät der TU. Herr Serra Capizzano ist Direktor der naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Insubria, Sitz in Como, Italien. Diese Fakultät ist eine der aktivsten und erfolgreichsten Fakultäten in Italien, was Industrie- und staatliche Projekte betrifft; dies findet seinen Niederschlag z.B. in der Unterstützung von innovativen Firmengründungen, Schulprojekten für ganz Italien, und Erhöhung der Attraktivität für Studierende. Daher ist die Ausrichtung sehr ähnlich zum Leitbild der TU, was auch eine weitere Zusammenarbeit nahelegt.

Schwerpunkt des Besuchs war der Kompaktkurs „Structured Matrices, Multigrid, and Image Processing“. Der Kurs richtete sich an Mathematik-Studenten, Informatik-Studenten, und CSE-Studenten aus dem Bereich Ingenieurwesen/ Naturwissenschaften. Insbesondere handelte es sich bei den Hörern um Elitestudenten aus TopMath und CSE/BGCE. Unter den Teilnehmern befand sich aber auch ein Informatikstudent, der die Vorlesung im Rahmen seines interdisziplinären Projektes einbringen konnte. Inhaltlich ging es dabei um eine neue Sichtweise auf die Fast Fourier Transform und auf Löser für allgemeine Partielle Differentialgleichungen, basierend auf der Verwendung strukturierter Matrizen (Vandermonde, Toeplitz, Zirkulant). Dabei wurden klassische Algorithmen neu beleuchtet, aber auch eine Spektralanalyse linearer Gleichungssysteme für PDE mit nichtkonstanten Koeffizienten vorgestellt. Die Präsentation war so gehalten, dass der Inhalt für alle potentiellen Hörer verständlich und interessant war. Die Reaktionen

Sein Onkel Ferdinand (Kaiser von Österreich bis 1848) zeigte sich den Herausforderungen der Zeit wenig gewachsen. Als eine aufgebrachte Menge den Kriegsminister Graf Theodor Latour am 6. Oktober 1848 an einem Laternenpfahl aufknüpfte, soll der Kaiser – den man davon unterrichtet hatte – gefragt haben „Ja dürfen's denn das?“.

Sein Neffe – eben jener Kaiser Franz Joseph – konnte das geeinte Mitteleuropa nicht wirklich zusammenhalten. Das italienische Risorgimento spaltete weite Teile Norditaliens ab. Die Kriege mit Italien und Preußen führten 1866 bzw. 1867 zur de facto Abspaltung des ungarischen Reichsteils. Die dadurch entstandenen nationalistischen Zentrifugalkräfte waren damit nicht mehr aufzuhalten. Dass der Thronfolger Franz Ferdinand eine Art Autonomie auch für die slawischen Völker innerhalb der Doppelmonarchie anstrebe, war letztlich nicht mehr relevant. Schon die Krisen in den 15-Jahren vor Ausbruch des ersten Weltkriegs zeigten, dass das Konzept eines unter einer undemokratischen Führung geeinten Mitteleuropas gescheitert war.

In seiner Rede vom 16. April 2014 vor dem europäischen Parlament in Strasbourg über die Lehren, die aus dem ersten Weltkrieg zu ziehen sind, sagte EU-Kommissionspräsident Barroso:

„Now that some of our old demons are reawakening, we should not forget that those who defend ultra-nationalism and xenophobia are also attacking the European Union and the values which we hold dear. There are many shades of nationalism. Some of them are more protectionist, some of them more chauvinist, some of them focused on foreigners or migrants, some have a ‘discours against globalisation’.“^a. Ob die europäische Union so enden wird wie die K. u. K. Monarchie, bleibt abzuwarten. Zu fragen ist, ob und wie dem Nationalismus mit einer integrativen demokratischen Kultur entgegengetreten werden kann. Zu fragen ist, ob und wie die äußeren Reibungsflächen dieser Union so rational und ohne nationalistische Auswüchse gestaltet werden können, dass aus den inneren Widersprüchen keine äußeren Konflikte bis hin zu Kriegen entstehen. Zu fragen ist, ob die EU eines Tages, weil sie diese Fragen nicht beantworten möchte – sei es aus Bequemlichkeit, sei es aus Feigheit – eines Tages mit demselben Fazit aus dem Leben scheidet, mit dem Erzherzog Franz Ferdinand am 28.6.1914 sein Leben beendet haben soll: „Es ist gar nichts...“

^a http://www.europa.eu/articles/en/article_14915_en.htm

ENB Elite Cup 2014

Eine goldene Generation

In der öffentlichen Wahrnehmung fallen oftmals viele beachtenswerte Ereignisse dem Schatten eines großen Fußballturniers zum Opfer. So wie 2012 zum UEFA Europeameisterschaftshalbfinale Deutschland gegen Italien, als der Deutsche Bundestag im Elverfahren das umstrittene neue Meldegesetz verabschiedete. Aber auch bei höchst erfreulichen Nachrichten entspricht das Maß der Berichterstattung nicht immer deren tatsächlicher Bedeutung. Dieser Exklusivartikel der Redaktion des Quartalsbericht vom sensationellen Erfolg des Underdog BGCE bei der zweitägigen Auflage des ENB Elite Cup, der am 12. Juli 2014, einen Tag vor dem FIFA Weltmeisterschaftsfinale in Rio de Janeiro, auf dem Sportgelände der Universität Augsburg stattfand.

Das Team der BGCE bestand dieses mal aus elf Spielern, teilweise bereits erfahren durch die Turniere der Vorjahre, teilweise verstärkt durch (auch internationale) Neuzugänge. So wie 2014 im FIFA Weltmeisterschaftsvorrundenspiel USA gegen Deutschland erwartete das BGCE Team aber vor Ort erst mal heftiger Regen, was auch den bisherigen fußballerischen Leistungen des wissenschaftlich hervorragend aufgestellten Teams entspricht: Bissher konnte noch nie eine einstellige Endplatzierung erreicht werden und das bei 14 bis 16 Teams pro Turnier. Assoziationen wie „Sieger der Herzen“ und „Ewiger Zweiter“ sorgen hier für genau so viel Euphorie wie beim Bundesligaclub aus Gelsenkirchen oder dem glücklosen ehemaligen Nationalspieler Michael Ballack. Jedoch war zu Beginn das (typisch deutsche) Losglück auf Seiten der BGCE: Da sich in der Gruppe nur drei Teams befanden, hätte ein Sieg zur Qualifikation für die K.O.-Runde gereicht. So wie 1998 bei der FIFA Weltmeisterschaft für Chile.

Dieses Glück wurde bald darauf durch Können und Souveränität abgelöst: Das erste Gruppenspiel gewann die BGCE souverän mit 2:0 gegen das leicht favorisierte Team „Software Engineering“. So wie 2010 bei der FIFA Weltmeisterschaft Südkorea gegen Griechenland. Wichtig hierbei war, dass die Null nicht nur im Tor sondern auch im Ergebnis stand. Eine souveräne Leistung, vor allem der Defensive. Somit war der Einzug ins Viertelfinale fast schon perfekt. Komplettiert wurde die gute Gruppenphasenleistung durch



Nachdem das zu späte Gratulieren im Gegensatz zum zu frühen ja nicht verboten ist, an dieser Stelle an beide Jubilare nachträglich herzliche Gratulation und die besten Wünsche für die kommenden Jahre!

SPPEXA Präsenz auf internationalen Tagungen

SPPEXA, das Schwerpunktprogramm „Software for Exascale Computing“ der DFG, zeigt weiterhin Flagge.

Auf der diesjährigen Euro-Par-Konferenz in Porto (übrigens die zwanzigste Euro-Par – Happy Birthday!) veranstaltete SPPEXA einen ganztägigen Workshop mit zwei eingeladenen Vorträgen (Rosa Badia, Barcelona, und Wolfgang Nagel, Dresden) und Berichten aus den sechs SPPEXA-Projekten Exa-DUNE, DASH, ExaStencils, EXAHD, ESSEX und Catwalk.

Dass im vorgesehenen Raum fast alle Plätze gefüllt waren und der Workshop damit auch weit über die SPPEXA-Community hinaus Attraktivität ausstrahlte, freut natürlich die Organisatoren der Euro-Par und des SPPEXA-Workshops ebenso wie die SPPEXA-Koordinatoren.



This allows to create a framework that gives the flexibility of Python as well as the efficiency of FORTRAN and that is easy-to-use. The work was realized within the Honours Project as part of the BGCE curriculum, in co-operation with the Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) as an external customer.

T. Neckel

Zwei runde Geburtstage an der TUM Gleich zwei runde Geburtstage mit Quartl-Bezug gab es im Sommer an der TUM zu feiern.

Zum einen konnte Friedrich L. Bauer, einer der Doyens der deutschen wie der internationalen Informatik, im Juni seinen 90. Geburtstag feiern. Bei fast subtropischem Wetter (ja, auch so etwas gab es 2014 in Bayern) konnte der Jubilar bei einer Feierstunde in der Bayerischen Akademie der Wissenschaften die zahlreichen Glückwünsche entgegennehmen. Als Geburtstagsgeschenk hatten sich Bauers beide Fakultäten Informatik und Mathematik etwas Besonderes einfallen lassen: Der Hörsaal 1 im gemeinsam genutzten FMI-Gebäude in Garching wurde in „Friedrich L. Bauer Hörsaal“ umbenannt, und fortan zieren ein entsprechender Schriftzug sowie eine Texttafel mit einer kurzen Würdigung den Hörsaal.

Einen Monat später dann eilte wiederum eine staatliche Feiergemeinde herbei, diesmal in besagten FLB-Hörsaal in Garching, um den 75. Geburtstag des Mathematikers und aktuellen Präsidenten der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Karl-Heinz Hoffmann, zu feiern. Als „alter FOR-TWIHR-Hase“ zählt Hoffmann zu den frühen Wegbegleitern das Quartls.

einen weiteren Erfolg, dieses mal gegen das Team „Osteuropastudien“, bei dem abermals das Runde zwei mal im Eckigen landete und zum Schluss ein 2:0 Sieg verbucht werden konnte. Eine überraschende Niederlage gegen eine osteuropäische Nation trat also nicht ein. Anders als 1994 beim FIFA Weltmeisterschaftsviertelfinale Bulgarien gegen Deutschland.

Erstmalig in seiner langjährigen Historie durfte das BGCE Team also ein ENB Elite Cup Viertelfinale bestreiten. Der Gegner hieß „Master in Advanced Optical Technologies“, dem bereits zwei Jahre zuvor in der Gruppenphase ein Unentschieden abgerungen werden konnte. Die Favoritenrolle lag dieses mal also bei BGCE, der das talentierte und ausgewogene Team gerecht wurde: 1:0 hieß es zum Schlusspfiff. Die Sensation war perfekt: So wie Südkorea 2002 ins FIFA Weltmeisterschaftsfinal hat es der krasse Außenseiter unter die letzten Vier geschafft. Der Jubel der Spieler war überwältigend, sehr emotionale Szenen spielten sich auf und neben dem Platz ab. Unter dieser Meldung brach sogar das lokale mobile Internet zusammen.

Im Halbfinale wartete als Gegner „Honours Wirtschaftswissenschaften“, einer der Top Vier der ewigen Bestenliste des ENB. Team BGCE zeigte in einem sehr physischen Spiel seine bis dahin beste Leistung, unterlag aber aufgrund eines kapitalen Torwartfehlers und eines, trotz Oliver-Kahn-Parade, unhaltbaren Pfostentreffers mit 2:0. So wie 2002 beim FIFA Weltmeisterschaftsfinale Deutschland gegen Brasilien. Da konnte selbst die deutsch-mexikanische Kreativabteilung des BGCE Teams nichts ausrichten.

So blieb für das BGCE Team nur der Kampf um Platz Drei, bei dem es jedoch nicht den Sand in den Kopf steckte. Abermals ging es gegen das Team „Software Engineering“. Dieses mal war der Gegner mental deutlich besser eingestellt, weshalb es nach der regulären Spielzeit von 15 Minuten immer noch 1:1 hieß. Wieder zeigte sich: Nicht immer muss ein Spiel exakt 90 Minuten dauern. Ein Elfmeterschießen musste somit die Entscheidung bringen. So wie schon zahlreiche Male bei einem generischen UEFA oder FIFA Turnier in einem Spiel Deutschland gegen England. Die Spannung war so groß, dass selbst der Schiedsrichter gefesselt war und das Elfmeterschießen vorzeitig abpfiff. Eine anschließende Rudelbildung korrigierte diesen Fehler jedoch. So entschied erst die sechste Elfmetersrunde das Spiel mit 3:4 zu Ungunsten der BGCE.



Die goldene Fußballgeneration der BGCE

Hinter v.l.: Benjamin, Martin, Nikolai, Christoph, Jürgen, Atanas
Vorne v.l.: Alfredo, Petar, Kilian, Tobias, Christian

Während der Fußballzweig BGCE den größten sportlichen Erfolg seiner langen Fußballhistorie feiern konnte und damit für die Sensation des diesjährigen Turniers sorgte, gab es an der Spitzewenig Neues: Mit einem 1:0 sicherte sich der Rekordgewinner CDTM seinen insgesamt vierten Titelgewinn und holte damit den Pott zurück nach München. Aber egal ob Augsburg oder München: Hauptsache Italien. Die BGCE feiert jedoch ihre goldene Generation, die nun endlich die Früchte jahrelanger Arbeit ernten konnte. Auf Nachfrage einer nicht näher genannten Reporterin, ob der verpasste dritte Platz nicht schade sei, antwortete der Führungsspieler: Den dridd'n Blotz konnst da hinda de Oan schmia'n, unta de letz't'n Via sammna, ois ondane is ma wuascht (frei übersetzt: You are pretty nice).

C. Riesinger

det sich hierbei um einen speziellen Operationsraum, bei dem vor allem auf Keimfreiheit geachtet wurde. Hierzu wird Luft über die gesamte Vorderwand eingestromt und entweicht anschließend wieder durch einen offenen Türspalt. Die großen, an der Decke montierten Operationslampen üben allerdings durch die entwickelte Wärme einen starken Einfluss auf das Fluid aus und lassen es aufsteigen. Solche thermischen Effekte mit komplizierten geometrischen Randbedingungen und Hindernissen können dank der Simulationssanwendung und eines Hochleistungsrechners hervorragend untersucht werden.

Weiterhin können anschließende Untersuchungen auf komplexen Simulationsebenen nun als Grundlage für eine thermische Komfortanalyse dienen, um die Konvektions- und Wärmeigenschaften in Großraumbüros oder anderweitig genutzten Großraumflächen (z.B. Operationsräumen) zu analysieren und zu verbessern. Wer möchte schon gerne unter Kaltluft-Zugescheinungen leiden und/oder arbeiten?

An dieser Stelle möchten wir noch einmal ausdrücklich dem Team des LRZ danken, das diesen „Extreme Scaling Workshop“ mit viel Eifer und Engagement ermöglicht hat.

J. Frisch, R.-P. Mundani

2nd prize at IEEE Student Conference for BGCE Students

Once a year, the IEEE Germany Student Branch organizes the IEEE Germany Student conference. This year, the 5th IEEE Germany Student Conference - 2014 was held in Passau.

This year, 11 papers were accepted for the conference out of 25 submissions from 4 different countries. The shortlisted candidates were invited to Passau to present their work. Based on the submitted papers and the presentation, Ravikishore Kommajosyula and Xiao Xue were awarded the 2nd prize.

Ravikishore Kommajosyula and Xiao Xue are students of the BGCE within the Elite Network of Bavaria. In their work, Ravikishore Kommajosyula and Xiao Xue developed a way of integrating a scripting language such as Python into an existing legacy FORTRAN simulation code.

SuperMUC vernünftig skaliert, vorausgesetzt die Gebietsgröße ist für den Rechenlauf sinnvoll gewählt.

Da nun die Poissons-Gleichung effizient gelöst werden kann, werden nun zwei Anwendungsbeispiele betrachtet.

Abbildung 4 zeigt eine Beispieldurchrechnung eines Menschmodells in einem Testraum. Die Raumströmung wird von natürlicher Konvektion, entstehend durch kalte Wände und ein „warmes“ Menschmodell, getrieben. Es ist deutlich zu erkennen, dass warme Luft über dem Menschen nach oben aufsteigt und an der Decke und den Wänden anschließend wieder abkühlt und nach unten absinkt.

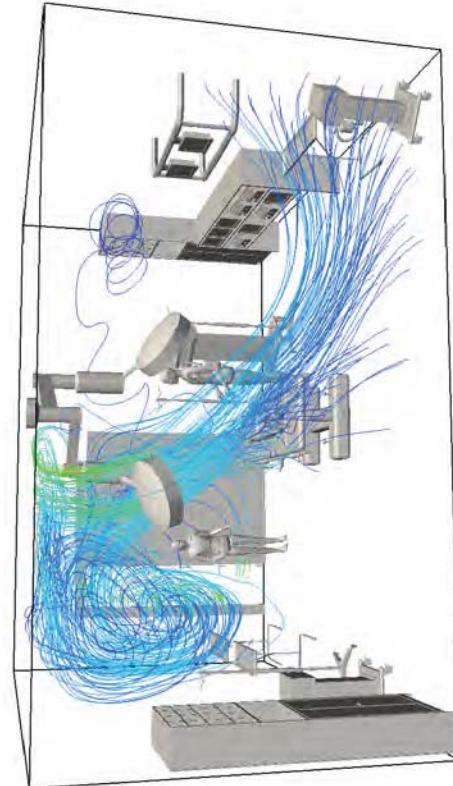


Abbildung 5: Modell eines Operationsraumes mit simuliertem Strömungsfeld, das von den Deckenlampen wesentlich beeinflusst wird. Die Stromlinien werden ausgehend von einer Reihe kreisförmig angeordneter Saatpunkte über dem Patienten erzeugt.

Abbildung 5 zeigt ein weiteres, komplexes Anwendungsbeispiel. Es han-

SeisSol und die Milchstraße

Nachdem SeisSol die magische Marke von 1 PetaFlop/s auf dem Super-MUC durchbrochen hatte², bekamen wir die Möglichkeit, den Code auf dem aktuellen Nummer-1-Rechner der TOP500 Liste auszuführen, dem Tianhe-2. Um mit den Experten vor Ort zusammen zu arbeiten, reisten Alexander Heinecke und Sebastian Rettenberger im April nach Guangzhou, China, dem Standort des Supercomputers.



Da Tianhe-2 erst seit kurzem von der National University of Defense Technology (in Chenshen) an seinem endgültigen Standort an die Sun Yat-Sen University in Guangzhou umgezogen ist, war im April noch nicht die komplette Infrastruktur vorhanden. So fehlte z. B. noch eine schnelle Internetverbindung, die besonders für uns wichtig gewesen wäre, um Ein- und Ausgabedaten für SeisSol von bzw. nach Deutschland zu transferieren. Das

²Quartl 70: „SeisSol: Erdbeben-Simulationen auf Petascale“

Problem wurde aber einfach gelöst: Zwei USB-Festplatten im Gepäck ersetzten die Internetverbindung.

Nach einem zehnständigen Flug mit Zwischenstopp in Peking und einer abenteuerlichen Taxifahrt stellte sich die Kommunikation mit dem Hotelpersonal als nächste Herausforderung heraus. Doch auch diese wurde mit „Händen und Füßen“ professionell gemeistert.

Im Rechenzentrum der Sun Yat-Sen University angekommen, erwartete uns eine weitere Überraschung. Wir wurden nicht in normale Büros geführt, sondern bekamen stattdessen einen Tisch mit direktem Blick auf den schnellsten Rechner der Welt. Die blinkenden Lichter auf den Racks verliehen dem Supercomputer dabei ein futuristisches Aussehen. Allerdings konnten wir bis zum Ende nicht eindeutigen klären, ob die Lichter tatsächlich eine Bedeutung haben oder nur zur Show montiert wurden.

Unsere guten Vorbereitungen im Vorfeld zahlten sich dort sofort aus: SeisSol lief bereits am ersten Tag auf einer kleinen Anzahl an Knoten auf dem Tianhe-2. In den nächsten zehn Tagen (und teilweise Nächten) gelang es uns, SeisSol auf bis zu 8192 Knoten (= 24576 Xeon Phis) zu skalieren. (Aufgrund des Umzuges stand uns leider nur etwa die Hälfte der 16000 Knoten des Tianhe-2 zur Verfügung.) SeisSol erreichte dabei als Spitzenwert 8,6 PettaFlop/s. Die herausragenden Ergebnisse überzeugten auch das Gordon Bell Preis Komitee: Das Paper „Petascale High Order Dynamic Rupture Earthquake Simulations on Heterogeneous Supercomputers“ wurde als Gordon Bell Finalist auf der diesjährigen Supercomputing Conference in New Orleans ausgewählt.

Auch wenn die Bilder in den chinesischen Speisekarten sehr hilfreich sind, waren wir dann doch froh, nach einigen ungewöhnlichen Mahlzeiten (man kann Hühnersuppe wirklich mit ganzen Hühnerfüßen kochen) und mit den Resultaten in der Tasche (man erinnere sich an die USB Festplatten...) wieder die Heimreise antreten zu können. Diesmal mit Zwischenstopp in Shanghai, wo wir in noch den Genuss kamen, die einzige kommerziell genutzte Transrapid-Strecke zehn Minuten testen zu dürfen.

A. Heinecke, S. Rettenberger

nicht gelöscht wird, sondern erhalten bleibt. Dies erhöht zwar den Speicherbedarf des Programms, bietet jedoch entscheidende Vorteile bei dem benutzten mehrgitterähnlichen Lösungsansatz.

Zum Testen des mehrgitterähnlichen Lösenrs wurde die Druck-Poisson-Gleichung auf einem kubischen Gebiet von $1 \times 1 \times 1$ Meter mit Dirichlet-Druckrandbedingungen gelöst und die Zeit gemessen, die benötigt wurde, die Lösung bis zu einer vordefinierten Genauigkeit zu berechnen. Die kleinstmögliche Anzahl an Prozessen, die aus Hauptspeicherbeschränkungen auf den jeweiligen Systemen möglich wären, wurde ermittelt und diente anschließend als Referenzwert für die „serielle“ Laufzeit.

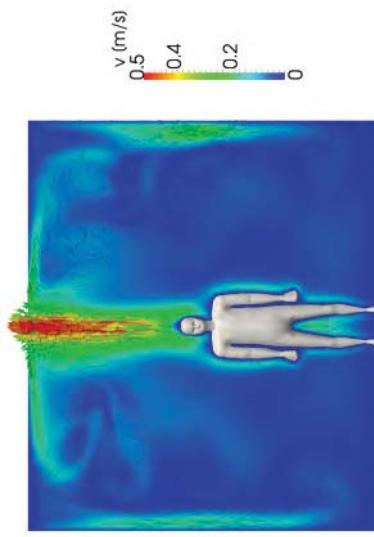


Abbildung 4: Menschmodell in einem Raum unter natürlichen Konvektionsbedingungen.

Der gemessene „strong“ Speedup, bei dem die Gebietsgröße und die Verfeinerung nicht verändert wurden, ist in Abbildung 3 dargestellt. Das Gebiet auf Tiefe 8, das insgesamt 78 Milliarden Zellen enthält, weist demnach die gleiche Charakteristik bei höheren Prozessoranzahlen auf wie das Gebiet auf Tiefe 7 mit insgesamt 9,8 Milliarden Zellen. Ein Abflachen der Kurven ist bei der gewählten strong Speedup-Messung zu erwarten, da die Kommunikation bei steigender Prozessorzahl stärker zunimmt, die Rechenlast aber konstant bleibt. Alles in allem kann man sagen, dass die Anwendung auf

rekte Nachbarn ihre Randwerte aus und in einer dritten „top-down“ Phase werden alle Ghost-Zellen, die noch nicht in den vorherigen beiden Phasen Daten erhalten haben, mit Werten von einer höheren Ebene gefüllt. Durch das Aufteilen in diese drei Phasen kann eine korrekte Synchronisierung über alle Prozesse gewährleistet werden.

Dieser zweischichtige Aufbau ermöglicht – unter Anwendung einer räumlich füllenden Kurve – eine feingranulare Verteilung der Last auf verschiedene Prozesse.

Die vorherige Beschreibung der benötigten Austauschfunktionen suggeriert einen hohen Kommunikationsaufwand und Zeitbedarf für den Austausch der Daten. Abbildung 2 zeigt gemessene Zeiten für SuperMUC und für Shaheen, eine IBM Blue Gene/P, die an der King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) in Saudi-Arabien installiert ist. Die Zeiten sind für eine steigende Anzahl an Prozessen stets streng monoton fallend. Dementsprechend nimmt die benötigte Kommunikationszeit mit steigender Anzahl an Prozessen ab und verhält sich sehr „gutmütig“. Da die Daten vorgehalten und ausgetauscht werden können, sollte etwas Aufmerksamkeit der Anwendung an sich gewidmet werden. Ziel der Simulation ist es, Luftströmungen in Innenräumen zu simulieren. Hierbei können einzelne Regionen speziell ausgewählt und verfeinert werden, um geometrische Feinheiten aufzulösen oder interessante Bereiche detaillierter zu betrachten.

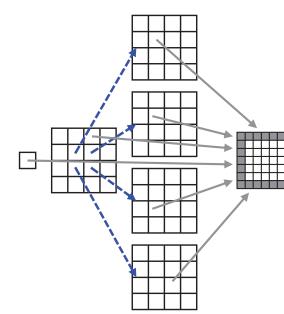
Abbildung 1 zeigt die Datenstruktur. Links ist ein adaptiver Gitter dargestellt, das aus mehreren ineinander verschachtelten Gittern besteht. Rechts ist ein standardisiertes Gitter dargestellt, das die gleiche Auflösung wie das adaptive Gitter aufweist. Die Verknüpfung zwischen den entsprechenden Zellen ist durch Pfeile gekennzeichnet. Einzelne Zellen sind als „Ghost-Zellen“ bezeichnet, die von den „Standard-Zellen“ umgeben sind. Die Größe der Ghost-Zellen ist mit $b_x \times b_y$ angegeben.

Extreme Scaling am Beispiel eines Strömungs-Codes

Anfang Juni fand am LRZ der zweite „Extreme Scaling Workshop“ statt, bei dem die Teilnehmer ihre Forschungscodes auf dem gesamten SuperMUC, sprich auf über 150.000 Kernen laufen lassen konnten, was im Normalbetrieb so nicht möglich ist. Als „vorbildende Qualifizierung“ und Voraussetzung musste lediglich nachgewiesen werden, dass der Code, der später zum Einsatz kommen sollte, auf SuperMUC bis zu 32.000 Kernen skaliert.

Unsere Anwendung, die speziell im Hinblick auf eine parallele Ausführung auf Hoch- und Höchstleistungssrechnern entwickelt wurde, konnte bei diesem Workshop auf Herz- und Nieren geprüft werden, um das Verhalten bei Erhöhung der Anzahl der Rechenprozesse über eine sehr große Spannweite genau zu beobachten.

Das Rückgrat des Simulationsprogramms bildet die eingesetzte Datenstruktur, die auf adaptiven, hierarchischen, block-strukturierten, kartesischen, orthogonalen Gittern beruht. Hierbei können einzelne Regionen speziell ausgewählt und verfeinert werden, um geometrische Feinheiten aufzulösen oder interessante Bereiche detaillierter zu betrachten.



Verknüpfung zu Datenelementen der Größe $b_x \times b_y$, die von Ghost-Zellen umgeben sind

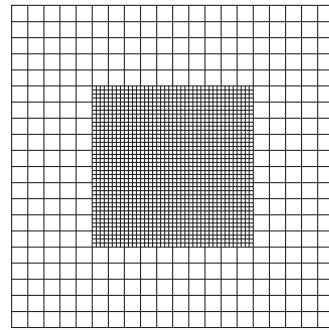


Abbildung 1: Datenstruktur: links: adaptiver Aufbau; rechts: hierarchische Darstellung

Abbildung 1 zeigt die adaptive Natur der Datenstruktur, bei der beispielsweise ein spezielles Interesse an der Mitte des Gebietes besteht. Hierzu wird ein Root-Gitter in 4×4 Untergitter verfeinert. Anschließend werden vier der Untergitter nochmals durch 4×4 Untergitter weiter verfeinert. Dieser hierarchische Aufbau, der rechts zu sehen ist, wird von der logischen Gitterverwaltung vorgehalten.

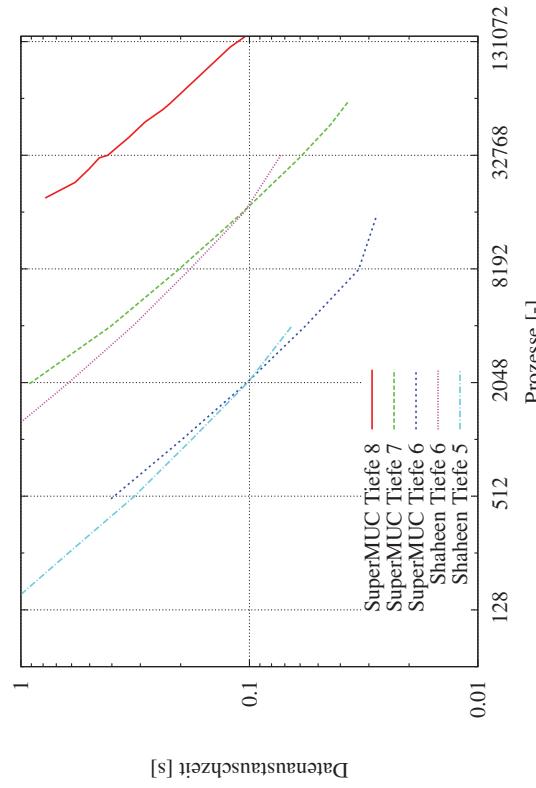


Abbildung 2: Zeit in Sekunden, die benötigt wird, um 9 unabhängige Variablen in einem 3D Domain mit einer Auflösung von bis zu $4096 \times 4096 \times 4096$ auf Tiefe 8 mit 78.5 Milliarden Zellen auszutauschen. Dargestellt sind hier zwei Systeme: SuperMUC am LRZ und „Shaheen“, eine Blue Gene/P an der KAUST.

Sämtliche logischen Gitter enthalten weiterhin einen Verweis auf ein entsprechendes Datengitter der Größe $b_x \times b_y \times b_z$, auf dem sämtliche physikalischen Variablen abgespeichert werden, die für die Simulation notwendig sind (bspw. Druck, Geschwindigkeit oder Temperatur). Die Datengitter sind in jeder Raumrichtung mit einer Reihe von Ghost-Zellen umgeben,

die eine Schwarzsche Gebietszer teilung ermöglichen, und in regelmäßigen Abständen Daten aus den unmittelbaren Nachbargebieten erhalten.

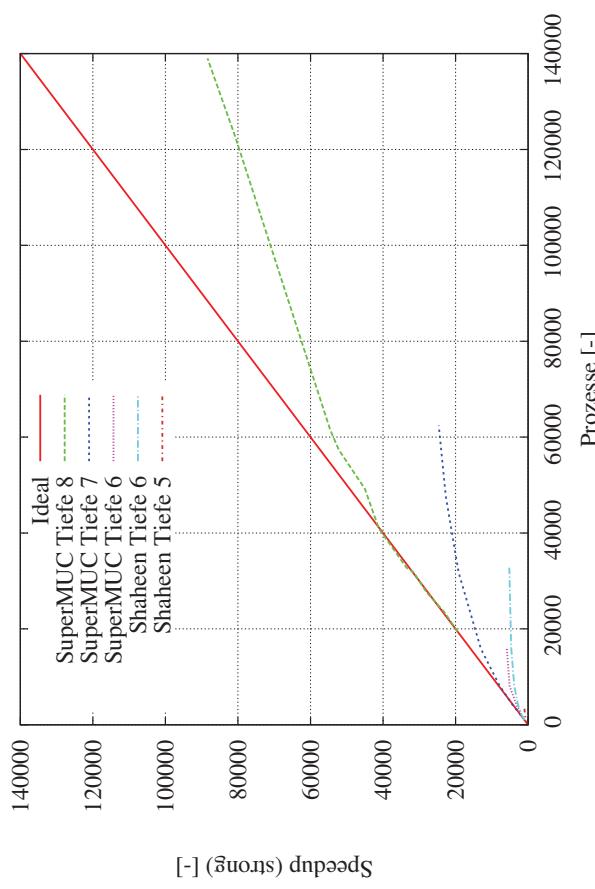


Abbildung 3: Speedup Ergebnisse für die Lösung der Druck-Poissongleichung in einem 3D Domäne mit einer Auflösung von bis zu $4096 \times 4096 \times 4096$ auf Tiefe 8 mit 78.5 Milliarden Zellen. Dargestellt sind hier wiederum zwei Systeme: SuperMUC am LRZ und „Shaheen“ an der KAUST.

Die Kommunikationsstruktur, die für den korrekten Datenaustausch verantwortlich ist, kann in drei verschiedene Phasen unterteilt werden: in einer ersten „bottom-up“ Phase werden Daten wie Druck und Geschwindigkeit von Kind-Gittern aggregiert und an ihre Eltern-Gitter gesendet. Sobald die Ergebnisse von allen Kindern empfangen wurden, aggregieren diese wiederum die Daten und senden sie an ihre Eltern, solange, bis das Root-Gitter erreicht ist. In einer zweiten „horizontalen“ Austauschphase tauschen di-