

Inhalt



Editorial	2
LRZ nimmt Phase 2 des SuperMUC in Betrieb	4
Neue Rekorde auf dem SuperMUC Phase 2	9
Fifth BGCE Prize: Visit of David Emerson	10
Tales from Down Under	14
SPPEXA Review	17
Iterationsschleife	18
SPPEXA Workshop in Greifswald	19
SPPEXA Minisymposium auf der PASC	21
Germany's Path to Exascale Computing	21
ENB Elitecup 2015	22
CSE / COME Summer Trip 2015	24

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

Nach langer diesbezüglicher Zurückhaltung macht sich das Quartl jetzt doch noch auf in Richtung Südosten, Destination „Wiege der Demokratie“. Aber eben auch Wiege der Tragödie. Wie immer in derartig komplizierten Situationen ist es fast unmöglich zu durchschauen, wer wann wo was in welchem Umfang verbockt hat und wer vielleicht nicht. Und auch die Meinungslage hierzulande ist so eindeutig nicht: Europa ist spitze – Mehrheit dafür; Griechenland gehört dazu – Mehrheit dafür; Europa bedeutet Solidarität – Mehrheit dafür; wer Solidarität beansprucht, muss auch entsprechend mitmachen – Mehrheit dafür. Nur wie man das alles irgendwie unter einen Hut kriegen soll? Und dann ist da ja noch der Euro. . . Wie immer der Königsweg aussehen mag, ein paar Dinge haben uns die letzten Wochen und Monate m.E. schon gelehrt.

Erstens: Volksabstimmung nein danke. Man stelle sich bei uns einen allgemeinen Urnengang zu „Soll Griechenland noch ein weiteres Hilfspaket bekommen?“ vor. Unsere Ökonomen kennen die Auswirkungen nicht, unsere Politiker verstehen die ökonomischen Zusammenhänge nicht, und da erwartet man von Ingrid Mustermann, oder mir, sich eine profunde Meinung bilden zu können? Völliger Humbug. Es würde mal wieder Wahlkampf geben, und das überforderte Wahlvolk würde sich hinter tumben Parolen sammeln. Von „Der Grieche hat genug genervt!“ (was nun wirklich offenkundig boshaft ist) bis „Es darf nicht auf den Schultern des kleinen Mannes ausge tragen werden!“ (was auch nicht so ganz den Kern trifft – hohe Staatsquote, miese Steuermoral, frühes Rentenalter, hohe Eigenheimquote, stets fröhliche Streikkultur – es lebte sich ja schon ganz gut als kleiner Mann im Staate Griechenland).

Also bitte keine Volksbefragungen zu so heißen Eisen. Vielleicht erschließt sich ja Spieltheoretikern oder Machtpragmatikern, was die griechische gebracht haben mag. Jedoch geht es hier um eine politische Aufgabe. Dafür haben wir Politiker gewählt, mit Entscheidungsgewalt, Macht, ausgestattet, und dafür bezahlt der berühmte Steuerzahler sie. Also mögen sie bitte ihren Job tun, wie auch wir erledigen den unsrigen. Und nach allem, was man so sieht, kann man unserer Gilde zumindest eines nicht absprechen: Einsatz, Fleiß, Leidenschaft und guten Willen bis weit jenseits die Grenze der Be-

lastbarkeit. Und sie streiken übrigens auch nicht; sie müssen sich allerdings, auch von Piloten und Lokführern, bei der nächsten Erhöhung der Diäten sicher wieder übelst beschimpfen lassen.

Zweitens: Fast schon lustig, wer sich aktuell zu Wort meldet, und was man so zu sagen hat. Angefangen mit Nobelpreis- geadelten Ökonomen aus dem Zentrum des Kapitalismus. Und dann kommen auch noch unsere Salon-Linken aus den Löchern gekrochen und wittern ihre n+1-te Chance, doch noch „das System“ zu ändern (bzw. ein „anderes Europa“ zu bauen, wie das in deren Jargon heißt). Einziger Trost: Sie werden auch diese Chance mit Pauken und Trompeten vergeigen (musikalisch nicht ganz einfach. . .). Der Sozialismus ist an die Wand gefahren, der Sozialismus mit menschlichem Antlitz ist an die Wand gefahren, wir wollten kein anderes Deutschland dieser Geisteshaltung, und ein anderes Europa dieser Couleur braucht's schon gleich gar nicht.

Drittens: Regeln, die aus einem demokratischen Prozess der Meinungsbildung entstanden sind, haben für die Schaffung, Fortentwicklung und Bewahrung eines Gemeinwesens, egal welcher Größe, eine ungemein stabilisierende Kraft, sie bringen Verlässlichkeit und ermöglichen Vertrauen. Sehr oft in der Geschichte, wenn einer des Wegs kam und den bestehenden Regelkonsens einfach fortblies, endete dies in einer Katastrophe – übrigens für Blasende wie Beblaste. Natürlich dürfen Regeln nie Selbstzweck werden, sie müssen fortlaufend hinterfragt, flexibel ausgelegt und bei Bedarf entschlossen angepasst werden. Aber auch das geordnet, aus einem Meinungsbildungsprozess heraus. Man ändert nicht die Abseitsregel während eines Fußballspiels, nur weil eine Mannschaft in der 80. Minute schnallt, dass sie diese nicht beherrscht und das Spiel zu verlieren droht; man führt keine Debatte über die Todesstrafe am Tag, an dem ein besonders grausamer Fall von Kindesmissbrauch publik wird; und man wirft nicht die gesamten EU-Stabilitätsregeln, die – bei aller Unzulänglichkeit – sich in toto ja schon bewährt haben, nicht eben mal schnell über den Haufen, nur weil einer im Club das seinem lokalen Wahlvolk jüngst versprochen hat. Ob er dies tat, weil er es nicht besser weiß, weil er sich auf Revolutions-Mission wähnt, oder weil er einfach nur besagte nächste Wahl gewinnen wollte, tut dabei wenig zur Sache.

Viertens: Wir brauchen dringend eine Debatte über Streitkultur. Was sich

unsere Politiker in den letzten Wochen so alles anhören mussten, geht in einem alarmierenden Maße zu weit. Und ich rede nicht von den schrägen Nazi-Vergleichen aus Griechenland – das muss man in diesem komischen „Spiel“ ja sozusagen als „gegnerische Propaganda“ einstufen; außerdem ist man von der „Sun“ ja durchaus Einiges gewöhnt.

Vielmehr lassen Blicke in die sozialen Medien einem sämtliche Haare zu Berge stehen. Meinungsfreiheit heißt bitte nicht, dass jeder und jede Stuss in beliebig heftiger und beleidigender Ausprägung nach außen tragen dürfen. Rechte bergen Pflichten, Freiheit birgt Verantwortung, und Meinungsfreiheit erfordert eben auch eine Verantwortung der Meinungsäußerung. Wenn das, was wir momentan sehen, ungebremst weiter geht, dürfen wir uns fürwahr nicht wundern über eine weitere drastische Abnahme der Bereitschaft, sich in der Politik zu engagieren. Und wer jetzt denkt „Ja mei, das ist halt heute so“, dem sei ein entschlossenes „Es darf und sollte aber nicht so sein“ erwidert.

Bleibt zu hoffen, dass diesmal wirklich etwas voran geht, dass es Griechenland rasch besser geht, und dass Europa nicht innehält – denn 70 Jahre ohne große Keilerei auf EU-Territorium sind eine gigantische Erfolgsgeschichte. Und die darf ruhig so weiter gehen.

Doch genug der einleitenden Worte – die Quartl-Redaktion wünscht allen, die den Sommer noch vor sich haben, einen erholsamen und erlebnisreichen solchen, vielleicht ja in Griechenland. Und vor allem wünschen wir natürlich anhaltenden Spaß mit dieser neuen Ausgabe Ihres Quartls!

H.-J. Bungartz

LRZ nimmt Phase 2 des SuperMUC in Betrieb

Oder: Arndt Bode (AB) und der Asiatische Laubholzbockkäfer (ALB)

Mit einer Feier nahm das LRZ am 29. Juni 2015 die Erweiterung des SuperMUC in Betrieb. Hausherr Prof. Arndt Bode und Akademiepräsident Prof. Karl-Heinz Hoffmann konnten dazu die Geldgeber aus dem Bayerischen Staatsministerium und dem Bundesministerium begrüßen und den Rechner offiziell von den Herstellerfirmen IBM und Lenovo übernehmen.



Abbildung 1: Von links nach rechts: Stefan Müller, Parlamentarischer Staatssekretär bei der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Prof. Dr. Arndt Bode, Vorsitzender des Direktoriums des LRZ der BAfW, Martina Koederitz, Vorsitzende der Geschäftsführung der IBM Deutschland GmbH, Christian Teismann, Vice President and General Manager, Global Account Business Lenovo, Dr. Ludwig Spaenle, Bayerischer Staatsminister für Bildung und Kultus, Wissenschaft und Kunst und Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann, Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (v.l.n.r.) nehmen SuperMUC Phase 2 offiziell in Betrieb.

KONWIHR als Fundament der Pyramide

Für KONWIHR ist dieses Ereignis besonders wichtig, wird doch „immerhin die Hälfte der Rechenzeit von Projekten aus Bayern genutzt, und das, obwohl es beim Auswahlverfahren keinen Bayern-Bonus gibt“, wie Prof. Bode bei seiner Festrede betonte.

Mit einer durchgängigen Rechnerarchitektur vom Einzelprozessor über große Shared Memory-Systeme bis zum gemischten „hybrid programming“ mit MPI und OpenMP bietet das Linux-Cluster am LRZ seit vielen Jahren alles, was die Wissenschaftler brauchen, um in die „Champions League“ des Supercomputings vorzustoßen. Einheitliche Programmierumgebungen ohne Akzeleratoren erlauben es, mit wenigen Anpassungen vom Linux-Cluster auf den SuperMUC aufzusteigen. Diese „Rechnerpyramide“ und KONWIHR, das Bayerische Kompetenznetzwerk für wissenschaftlich-technisches Höchstleistungsrechnen als Förderrahmen für die Entwicklung und Optimierung paralleler Anwendungen, sind die Basis, auf denen auch zwei Projekte immer größer wurden, die im Rahmen der Feier im Vordergrund standen.

Prof. Alexandros Stamatakis, der lange Zeit an der Fakultät für Informatik der TU München lernte, forschte und lehrte, stellte im Festvortrag seine Forschungen an Insekten- und Singvogelgenomen vor, für die er umfangreiche Simulationen auf dem SuperMUC durchführte. Das Ergebnis seiner Bemühungen und der Hunderter weiterer Forscherinnen und Forscher aus der ganzen Welt waren zwei Publikationen, die im November und Dezember 2014 die Titelseiten von „Science“ zierte. Die Ergebnisse führten zu manchen Überraschungen, die an einigen Stellen eine Neuordnung der Stammbäume notwendig machten und vielleicht auch ganz praktische Konsequenzen haben werden. „Vielleicht haben wir Glück, und die Bäume in unserem Garten müssen nicht gefällt werden.“, hofft Frau Bode, denn der „Asiatische Laubholzbockkäfer“ ist inzwischen im Osten Münchens eingefallen, und die Forschungen von Prof. Stamatakis könnten dabei helfen, ihn auf die richtige Art zu bekämpfen, ohne im Garten von Prof. Bode die Motorsäge anzuwerfen. Dann konnte er die Frage ganz persönlich beantworten, wozu die jahrzehntelange Forschung an Supercomputern gut ist.

Über ein anderes Beispiel, das ebenfalls über viele Jahre von KONWIHR gefördert wurde, berichtete der Bayerische Rundfunk in seiner Rundschau anlässlich der Feier. Prof. Bunge und seine Kollegen und Mitarbeiter simulieren mit ihrem Programm SeisSol auf dem SuperMUC die Erde. Kurz vor der Feier wurde eine dreidimensionale Visualisierung ihrer Rechenergebnisse im V2C, dem Zentrum für Virtuelle Realität und Visualisierung am

LRZ¹, fertiggestellt, mit der sie sichtbar machen können, wie die feste Erdkruste auf dem zähflüssigen Untergrund geschoben wird und kriecht, bis es hakt und kracht und Vulkanausbrüche und Erdbeben die Dramatik sichtbar machen. Auch wenn eine Vorhersage von Erdbeben auf absehbare Zeit nicht möglich scheint, so wird es doch wenigstens besser möglich sein, ihre Auswirkungen abzuschätzen und vorzusorgen.

SuperMUC ermöglicht herausragende Forschungen

Neben diesen gibt es noch über hundert weitere Projekte, die auf dem SuperMUC seit der Inbetriebnahme der Phase 1 am 20. Juli 2012 bearbeitet wurden. Ein Berichtsband des LRZ gibt darüber Auskunft:

<https://www.lrz.de/services/compute/supermuc/magazinesbooks/>

Und die nächsten Rekorde wurden bereits aufgestellt. Ferdinand Jamitzky berichtet in dieser Ausgabe über die ersten Ergebnisse, die bei einem Workshop am LRZ während der mehrwöchigen Zuverlässigkeitsprüfung in einer „friendly user phase“ bei der Optimierung ausgewählter Programme erzielt wurden.

Gleiche Leistung auf einem Viertel der Fläche

Auch für diejenigen, die SuperMUC schon besichtigt haben, lohnt sich wieder einmal ein Besuch im Höchstleistungsrechnerraum (HRR) des LRZ. SuperMUC Phase 2 erreicht mit seinen 86.016 Rechenkernen in 6.144 Prozessoren weitere 3,6 Petaflops auf einem Viertel der Fläche, die die bisherigen 155.000 Rechenkerne für ihre 3,2 Petaflops brauchten. Wir sind drei Jahre später zwei Hardwaregenerationen weiter, die Rechenleistung pro Fläche hat also nach der „Moore'schen Regel“ um 2×2^2 zugenommen. Das kann man am LRZ wirklich mit den Händen greifen, auch wenn man dazu etliche hundert Meter Serverreihen ablaufen muss. Alle weiteren technischen Details finden Sie auf der Webseite des LRZ zu SuperMUC³.

¹ v2c.lrz.de

² The observation made in 1965 by Gordon Moore, co-founder of Intel, that the number of transistors per square inch on integrated circuits had doubled every year since the integrated circuit was invented. Moore predicted that this trend would continue for the foreseeable future. (wikipedia)

³ <https://www.lrz.de/services/compute/supermuc/systemdescription/>

Energieeffizienz bleibt entscheidender Vorteil

Auch die Erweiterung des SuperMUC wird mit der bereits in Phase 1 bewährten und vom menschlichen Blutkreislauf inspirierten Warmwasserkühlung betrieben. Die Prozessoren, der Hauptspeicher und weitere Komponenten werden dabei über ein Netzwerk aus Mikrokanälen direkt mit bis zu 45 Grad Celsius warmem Wasser gekühlt. Es sind deshalb keine Kompressionskühlwerke notwendig. Dadurch wird der Gesamtenergieverbrauch des Rechners um 40% reduziert und die entstehende Abwärme kann direkt für die Gebäudeheizung verwendet werden. SuperMUC wird so im Vergleich zu einem Computer mit konventioneller Kühlung mehrere Millionen Euro an Betriebskosten pro Jahr einsparen. Darüber hinaus bieten die neuen Prozessoren weitere Möglichkeiten, die Taktung an die Erfordernisse der Rechnung anzupassen.

Bei allen Rechnungen kann die Arbeitsfrequenz des Prozessors herabgesetzt werden, um bei nur geringer Verlängerung der Rechenzeit viel Energie einzusparen. Dabei wird ein automatisches Optimierungswerkzeug eingesetzt, so dass der Anwender keine eigenen Optimierungsschritte vornehmen muss. Diese Automatisierung der Mechanismen zum Energie-bewussten Betrieb von Rechenzentren ist Voraussetzung für eine breite Akzeptanz bei den Nutzern, nicht nur in der Wissenschaft. „Die neuesten Möglichkeiten auszunutzen, Höchstleistungsrechnen mit minimalem Energieaufwand zu betreiben, sind für uns unverzichtbar, um auch für die Zukunft diese Technologie in Deutschland betreiben zu können. Im praktischen Alltag für die besten Forscher die vielseitigste Rechnertechnologie bei vertretbarem Kosten-, und das heißt vor allem Energieaufwand, anbieten zu können, ist und bleibt unser gemeinsames Ziel. Mit SuperMUC haben wir weltweit neue Maßstäbe gesetzt. Diesen erfolgreichen Weg setzen wir mit der Erweiterung fort.“, erklärte Arndt Bode, Leiter des LRZ.

Weitere Bilder der Feier und des SuperMUC finden Sie auf der Webseite des LRZ zur Inbetriebnahme der Phase 2:

www.lrz.de/supermuc-phase2

L. Palm

Workshop bringt neue Rekorde auf dem SuperMUC Phase 2

Bevor das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) die Erweiterung des Höchstleistungsrechners „SuperMUC“ in seiner Phase 2 am 29. Juni 2015 offiziell in Betrieb nahm (s. Artikel in dieser Ausgabe), fand im Rahmen der Abnahme von der Herstellerfirma eine mehrwöchige Zuverlässigkeitsprüfung statt, während der den Benutzern noch nicht garantiert wird, dass alles rund läuft, während der der Rechner aber unter möglichst hoher Last laufen soll.

Deshalb führte das LRZ im Mai und Juni 2015 eine „friendly user phase“ im 30-tägigen Blockbetrieb durch, während der ausgewählte Benutzergruppen die Möglichkeit hatten, ihre Programm auf allen 86.016 Rechenkernen laufen zu lassen. Insgesamt nutzten 41 Wissenschaftler aus 14 Instituten diese Möglichkeit mit ihren Programmen:

BQCD – Quantenphysik

SeisSol – Geophysik, Seismologie

GPI/GASPI – HPC-Toolkit

Seven-League – Plasmaphysik

ILBDC – Lattice Boltzmann CFD

Iphigenie – Molecular Modelling

FLASH – Plasmaphysik

GADGET – Kosmologie

PSC – Plasmaphysik

waLBerla – Lattice Boltzmann CFD

Musubi – Lattice Boltzmann CF

Die Wissenschaftler dieser Projekte hatten die Möglichkeit, das neue System rund um die Uhr uneingeschränkt zu nutzen. Dazu wurden zwei Warteschlangen eingerichtet, eine „general“-Queue, bei der maximal drei Inseln, also das halbe System, nutzbar war und eine „special“-Queue, die das ganze System mit allen sechs Inseln nutzen konnte. Insgesamt standen 63,4 Millionen CPU-Stunden zur Verfügung, von denen 43,8 Millionen auch tatsächlich für erfolgreiche Programmläufe genutzt wurden. Die drei intensivsten Benutzer verwendeten 15,2, 6,4 und 4,7 Millionen CPU-Stunden.

Eine Woche nach Abschluss des Block-Betriebs trafen sich die Wissen-

schaftler erneut zu einem Ergebnis-Workshop, auf dem sie die Ergebnisse ihrer Simulationen vorstellten. Dabei wurden folgende Rekorde hervorgehoben:

Die größte Fast Fourier Transformation der Welt mit mehr als 10.000³ Gitterpunkten wurde mit der Software FLASH, einem astrophysikalischen CFD-Code, berechnet. Die Ergebnisse sind wichtig für das Verständnis von Turbulenzen im interstellaren Medium.

- Mit der Simulationssoftware GADGET konnten 10% des sichtbaren Universums simuliert werden. Dies ist die derzeit größte Simulation der Entwicklung des Universums.
- Molekülspektren konnten mit der Simulationssoftware IPHIGENIE um einen Faktor 100 genauer berechnet werden als bisher.
- Ein seismisches Rekonstruktionsproblem wurde durch „strong scaling“ von 16 Stunden Rechenzeit auf 55 Sekunden beschleunigt!

Die Ergebnisse wurden auf der International Supercomputing Conference ISC'15 im Rahmen einer Präsentation auf dem „aXXLs 2015 Workshop“ (Application Extreme-scaling Experience of Leading Supercomputing Centres, ISC-HPC, Frankfurt, 16. Juli 2015) vorgestellt und werden veröffentlicht.

F. Jamitzky

Fifth BGCE Student Paper Prize: David Emerson visits Bavaria

After 2007, 2009, 2011, and 2013, the Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) of the Elite Network of Bavaria (ENB) awarded the fifth BGCE Student Paper Prize in 2015, this time to David Emerson from Tufts University (USA)⁴. The prize consists of a one-week visit to the universities involved in BGCE: FAU Erlangen-Nürnberg and TU München.

⁴„Tufts is recognized as a premier university dedicated to educating new leaders for a changing world. Superb teaching and world-class research equip graduates, located in Med-

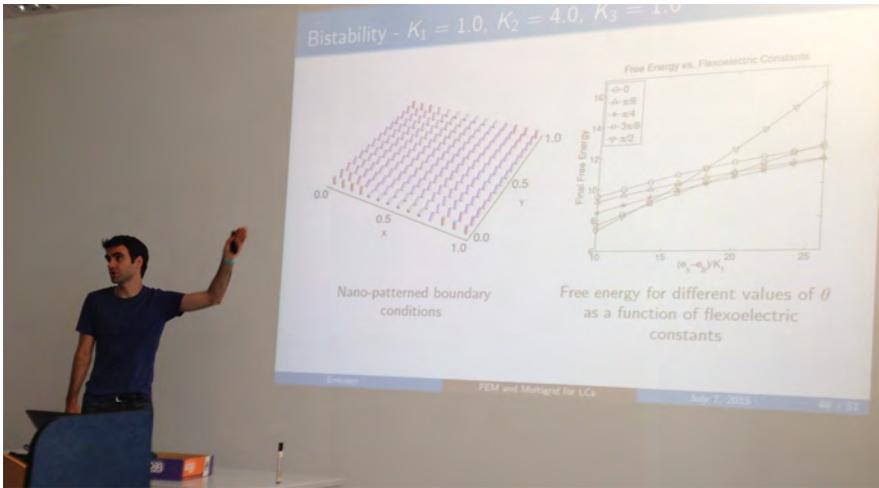


Abbildung 2: David Emerson at his presentation on "Finite-Element and Multigrid Methods for Liquid Crystal Configurations under the Frank-Oseen Free-Energy Model".

Out of 24 high-quality contributions from 23 universities and research institutions of eight countries, David Emerson was selected as the prize winner by an international jury at the SIAM CS&E Conference 2015.

David Emerson received his Ph.D. in Applied Mathematics from Tufts University in 2015 under Prof. Scott P. MacLachlan and Prof. James H. Adler. He holds an M.A. in Mathematics and an M.B.A. from Boston College. His research interests are in the areas of computational mathematics and physics, specifically concerning finite-element methods and least squares approaches. Currently, David's research focuses on the development of theoretically-supported nonlinear constrained optimization methods coupled with finite elements for static and dynamic liquid crystal simulations.

FAU and TUM finally hosted David and his wife Caitlin in Munich and Erlangen from July 5 to 11. The focus of this visit was two-fold: First,

ford/Somerville, near Boston, in the U.S. state of Massachusetts"

David got in close contact with the hosting universities and involved persons. Second, he presented his (and his group's) fascinating research work in the context of simulating liquid crystals. His talk on "Finite-Element and Multigrid Methods for Liquid Crystal Configurations under the Frank-Oseen Free-Energy Model" led to interesting and fruitful discussions with the corresponding research groups. We even managed to organise one of BGCE's traditional Research Days (i.e. the meeting of all persons involved in BGCE once per semester at every of the three locations) in Erlangen such that David Emerson was able to join in, contribute with an add-on talk, and participate in detailed discussions with the BGCE students.

For those interested in details, here is a brief abstract of the methods and results: An energy-minimization finite-element approach to the computational modeling of equilibrium configurations for nematic liquid crystals has been discussed in the presence of free-elastic, electric, and flexoelectric effects. The method targets minimization of free system energy based on the Frank-Oseen free-energy model. This model involves a challenging nonlinear pointwise unit-length constraint on the desired vector field solution. David discussed the well-posedness of the associated intermediate, discrete, linearization systems. In addition, he examined two novel, optimally scaling, multigrid approaches for the arising linear systems based on Vanka and Braess-Sarazin-type relaxation. Both approaches outperform direct methods and represent highly efficient, robust, and scalable iterative solvers. Finally, numerical simulations involving heterogeneous constant coefficients for both classical and complicated boundary conditions, relevant in ongoing research, have been discussed that support the established theory.

To explain what the BGCE prize looks like, here comes a short overview of David Emerson's visit:

On Sunday, July 05, David and Caitlin were picked up by Hans Bungartz and Alfredo Parra for a ride into the Bavarian countryside to visit the famous castles Neuschwanstein and Linderhof as well as the Wieskirche. The next day, we took him on a brief tour around the campus Garching and he got in touch with various colleagues of the research group of Scientific Computing in Computer Science (SCCS). In the afternoon, we organised a guided city tour in Munich (not without encountering a major subway problem on the way :-)) where historical facts together with funny stories and urban legends

made Bavaria's capital even more animated. Since David is—as his wife—not only a talented researcher but also a very sportive person, this walking experience in the inner city did not represent any challenge at all.

On Tuesday, July 07, David and several Ph.D. students of the SCCS chair joined a 2 hours tour in the LRZ facility in Garching, hosting SuperMUC, one of the three largest supercomputing facilities in Germany. After lunch, David presented various aspects of his work in the Informatikkolloquium (for details, see above) before an intense discussion took place in the afternoon. To summarise the "Munich part" of his visit, we were able to give David and his wife an intense impression of the typical beergarden feeling in the evening with perfect weather conditions.



Abbildung 3: Group photo of the tour through Bamberg in front of the Domberg where Caitlin and David are on the right side.

After travelling to Erlangen on Wednesday, David arrived at the LSS chair

and used the afternoon for discussions with the PhD students there. In the evening, the LSS went with Caitlin and David to a typical Franconian beer-garden with view onto Franconian Switzerland and savored a classical potato Kloß. On Thursday David presented his work at the BGCE Research Day and a lot of researchers of various departments of the FAU took the chance of attending his talk and the following discussion. On Friday morning, Benjamin Winter of the institute of Micro- and Nanostructure Research opened the doors for the transmission electron microscope Titan Themis 300 which is one of the most modern state-of-the-art microscopes at the world. Together with Dr. Wu, he gave David and Caitlin (who studied biology) an extraordinary tour and explained how the microscopy works.

After lunch, Caitlin, David, and some Ph.D. students of LSS started to a guided tour to Bamberg with focus on the world heritage. Impressed by the charm of the Little Venice, the group closed the day by visiting a beer-garden at the Stephansberg with view onto the Bamberg where one of the two smoke beer breweries in the world is located.

On Saturday Caitlin and David visited also Rothenburg ob der Tauber, before they started their private trip towards Austria visiting Vienna and Salzburg to enjoy the beautiful scenery of the Alps and to go on hiking trips.

Summarising, David Emerson's visit led to fruitful discussions and new insight and ideas at both our institutes in Erlangen and Munich. We are looking forward to meeting him again soon, either in the US or here in Germany.

R. Ammer, T. Neckel

Tales from Down Under

Canberra: What A Lovely Place! (Despite What Everyone Says)

In 2014 the OECD named the Australian Capital Territory (ACT) the most livable city in the world. Equally distant from white sand beaches, snowy mountains, and Australia's finest attractions, ACT offers a long-wished-for retreat from the buzz and distractions of Sydney and Melbourne. So it is no coincidence that Canberra is the heart of Australia's sparse grids community, led by the Professor of the Mathematical Sciences Institute at the Australian National University and the former

TUM IAS Hans-Fischer Fellow Prof. Markus Hegland. And it is also no coincidence that at the beginning of February Alfredo Parra Hinojosa and Valeriy Khakhutskyy – two PhD candidates from TUM – found themselves on a long flight to the fifth continent for a research stay with Markus and his group. Here is a portrayal of their experience.

“It will surely fail”, said Prof. Hegland during our first meeting in Canberra. These words came to me as a breath of fresh air. “The supercomputer has faults, our code will crash.”, he continued with slight excitement, transmitting a wave of relief to everyone present in the small conference room. “Or even worse: we will have no indication of failure whatsoever”, he said cheerfully with his distinctive smile. I looked at my colleague Mario with complicity, knowing that the meeting was going in the right direction. It was all we needed to hear on that warm February afternoon, and it marked the beginning of a three month period when the words “crash”, “fault”, “error”, and “unreliable” would become music to my ears.

To illustrate what we did for the following three months, it is useful to imagine a group of students taking a final exam. You are their teacher and thus are in charge of making sure that everything goes smoothly: no accidents, no cheating, no misunderstandings. If you teach the course “Calculations in Theoretical Chemistry”, your job will probably be easy: all six students - brilliant, by the way - will show up, finish the exam in 10 minutes, and get a 1,0. A happy ending for everyone. However, if you have the misfortune of teaching “Discrete Structures”, things might look a bit different. You will have to ask your cooperative colleagues to help you out with the surveillance tasks, and they will constantly have to check for ill-intentioned students⁵ or other abnormal circumstances. If a student faints after reading the first exercise, the organizers can notice it quickly and react accordingly (although it might be hard to distinguish a true fainting fit from the usual paleness and chronic fatigue characteristic of Computer Science students). But as soon as they look away, a different student might be tempted to copy from her neighbor, surely an infrequent yet conceivable event. The resources needed to ensure that this doesn't happen can be huge: one cannot recruit

⁵Experience has shown that not all first semester students of Computer Science are straight A students.

934 PhDs to watch over each student. Yet the organizers somehow manage to carry out this herculean task without a single altercation and nor the need for an army of doctoral students. They might distribute the students in different rooms, sit them strategically apart from each other, design different versions of the exam, and communicate any incidents via phone among rooms.

Analogous situations will be common in future exascale supercomputers. These systems might be even more unreliable than first year bachelor students. Supercomputers with hundreds of millions of cores are destined to suffer from different types of faults such as processes failing (like our fainting student) or successfully computing wrong results (like our cheating student). Together with Prof. Hegland and his PhD student Brendan Harding we tried to come up with numerical algorithms that react efficiently to faults in large, increasingly unreliable computers. Herein lies the importance of thinking positive: faults, errors, and crashes can give rise to exciting research topics and fruitful international collaborations.

Alfredo

Finding an apartment for a short period in Canberra is not an easy task, so I was very happy when Matthias Wong – one of Markus's PhD students – offered me to stay at his place. And although he had already submitted his thesis and was awaiting the verdict of international examiners, we would usually discuss our research at the breakfast table, illustrating our arguments with whatever was lying around: milk boxes, juice glasses, coffee mugs, fruits, and bowls of oatmeal.

Mathematicians are a different species. As a die-hard computer scientist I always suspected so, but spending three months under the same roof with one of them, I am now absolutely convinced. We look alike, sound alike, and work on similar problems. But don't be misled by appearances, since even looking at the same problem, we see quite different things!

So it happened that this time I was looking at the problem of non-parametric density estimation with sparse grids – a method Matthias had worked on before. While simple and elegant in theory, the method bears expensive computation to work properly. Confronted with the same problem, however, we saw different ways out: my roommate proved theoretical results and

avoided the computational bottleneck reducing the problem size. And I did what a computer scientist does in such a case: if the problem on hand cannot be solved, solve a different one! In our case, this meant substituting the expensive integrals of the full density function by cheap integrals of a proxy and seeing if the method converges. If it does, one then thinks about why and how fast.

After three years of friendship and three months of apartment sharing, Matthias and I came out smarter: he has become a more responsible software developer who thinks about object oriented design, memory efficiency, and parallelism, and I started to appreciate the insights from numerical analysis.

Valeriy

Although our relationship with Canberra cannot be described as love at first sight, after three months we came to appreciate the subtle delights of the provincial capital and its laid-back mates. So when the time came to say goodbye, we instead opted for „Hooroo and see you soon!“

A. Parra Hinojosa, V. Khakhutsky

SPPEXA Phase-2: Review

Am 5. Mai 2015 fand die Begutachtung der Projektproposals für die zweite Phase (2016-2018) des DFG-Schwerpunktprogramms “Software for Exascale Computing” (SPPEXA) in Bonn statt.

Nach einem einführenden Übersichtsvortrag der SPP-Koordination durch Hans-Joachim Bungartz wurden die 21 eingereichten Projekte in Kurzvorträgen vorgestellt. Anschließend konnte sich das elfköpfige Gutachterteam in einer Postersession mit allen Antragsstellern über ihre Forschung und geplante Projektarbeiten informieren. Eine endgültige Entscheidung der künftig geförderten Projekte in Phase 2 wird im Herbst erwartet.

Die SPPEXA-Koordination bedankt sich bei der DFG für den reibungslosen Ablauf und die Organisation der Begutachtung und freut sich auf spannende Forschungsprojekte in Phase 2.

P. Neumann

Iterationsschleife

N=16

13. Juli 2015

Und sonst? Der erste Tag der ISC 2015 liegt hinter uns und alles lief normal – wie immer. Die Söhne von Hans Meuer haben übernommen, die Vorträge laufen gut, die Community trifft sich zum Stehempfang und alle rüsten schon für Dienstag, wenn die Herstellerpartys zum Staffellauf für alle Angestellten der weltweiten HPC Zentren werden. Die Awards sind vergeben – für den besten Artikel einen „Hans Meuer Award“, für einen anderen besten Artikel einen „PRACE Award“, für noch einen besten Artikel einen „Gauss Award“, für den schnellsten Rechner aus Europa einen „TOP500 Award“, für den schnellsten Rechner aus dem mittleren Osten einen neuen Award. Auch Saudi-Arabien hat jetzt einen Supercomputer in den TOP 10 der Welt. Nur böse Ironiker verweisen an dieser Stelle auf den internationalen Fahnenmastenwettbewerb, der im Nahen Osten seit Jahren in Gange ist^{ab}.

Die Liste der schnellsten Rechner der Welt ähnelt im Juli 2015 stark der Liste der schnellsten Rechner der Welt, die vor sieben Monaten – also im November 2014 – präsentiert wurde^c. Die schnellsten fünf Systeme waren auch schon vor sieben Monaten auf den ersten fünf Plätzen – und dort stehen sie jetzt schon seit zwei Jahren. Auf Platz sechs kam das neue saudi-arabische System und störte die Ordnung ein wenig – dahinter aber wieder keine Änderungen. Gegen die Liste der zehn schnellsten Systeme der Welt liest sich die Bundesligatabelle wie ein Krimi. Während Bayern München noch immer rund 25 Spiele bis zur Meisterschaft braucht, ist der Weltmeister aller Supercomputerklassen ein Stamplatz, der – je nach Budget und Nationalstolz – für ein, zwei, oder drei Jahre reserviert werden kann. Wenn Jack Dongarra anmerkt, dass die derzeitige Nummer 1 der Welt nicht wirklich produktiv ist, stört das kaum^d. Die HPC-Karawane zieht weiter.

^aLaut Wikipedia hat Saudi-Arabien derzeit den höchsten Fahnenmast der Welt:

^b https://de.wikipedia.org/wiki/Fahnenmast#Rekordh.C3.B6hen_ab_100_m.H.C3.B6he

^c www.top500.org

^d <http://www.vrworld.com/2015/03/22/jack-dongarra-china-isnt-the-emerging-hpc-power-you-think-it-is>

Irritierend ist aber, dass der neue Trend zur flachen Steigung im Supercomputing nun auch in allen Statistiken der TOP500 durchschlägt. Das angestrebte Ziel – ein Exaflop im Jahr 2020 – wird wohl erreicht: allerdings nur, wenn man die Leistung aller 500 Systeme addiert. Das untere Ende der Liste macht seit mehreren Jahren den Trend schon nicht mehr mit und hat sich auf eine flache Steigung eingestellt. Skeptiker sprechen vom Ende der Party und drängen auf eine Stärkung der Software. Optimisten dagegen hoffen auf weitere Technologiesprünge und höhere Budgets und sehen die aktuellen Trends ebenso entspannt wie Franz Kafka^a. Mit Kafka könnte man also sagen: Das Gesetz von Moore gilt nicht mehr, also lasst uns mit HPC baden gehen.

^aFranz Kafka schrieb am 2. August 1914 in sein Tagebuch folgenden trockenen Kommentar „Heute hat Deutschland Russland den Krieg erklärt – Nachmittag Schwimmschule“

M. Resch

Workshop „Sparse Solvers for Exascale“ in Greifswald

Vom 23. bis 25. März 2015 fand am Alfred Krupp Kolleg in Greifswald der Workshop „Sparse Solvers for Exascale: From Building Blocks to Applications“ statt.

Löser für dünn besetzte Gleichungssysteme oder Eigenwertprobleme nehmen einen bedeutenden Anteil der Rechenzeit auf modernen Parallelrechnern in Anspruch, und die Forschungsaktivitäten auf diesem Gebiet sind seit Jahren ungebrochen. Das an der FAU Erlangen-Nürnberg geführte DFG-Projekt ESSEX⁶ (Equipping Sparse Solvers for Exascale) im Schwerpunktprogramm SPPEXA widmet sich mit seinen fünf Projektpartnern speziell den Eigenwertlösern.

Der von ESSEX, dem SPPEXA-Projekt EXAHD, dem Institut für Physik (IfP) der Ernst-Moritz-Arndt Universität Greifswald und dem Krupp-Kolleg

⁶ <http://blogs.fau.de/essex>



Abbildung 4: Teilnehmer des Workshops „Sparse Solvers for Exascale“

Greifswald organisierte Workshop hatte zum Ziel, einen Überblick über die aktuelle Forschung auf dem Gebiet dünn besetzter Löser zu geben. Experten referierten drei Tage lang zu Themen wie neue Algorithmen, effiziente Implementierungen, Performance Engineering, Bibliotheken, Fehlertoleranz, Programmier Techniken und Anwendungen. Für die eingeladenen Vorträge konnten hochkarätige Sprecher wie Yousef Saad, Satoshi Matsuoka, Marlies Hochbruck und Edmond Chow gewonnen werden. Ein klares Highlight war auch der öffentliche Abendvortrag von Horst Simon zum Thema „Supercomputer: was sie leisten, und was sie immer noch nicht leisten können“, in dem ein umfassender Überblick zu aktueller Technologie und ein Ausblick „über den Tellerrand“ gegeben wurde.

Die angenehme Atmosphäre bot Raum für intensiven wissenschaftlichen Austausch, wozu auch der Veranstaltungsort beitrug: Greifswald mag keine Weltmetropole sein, aber das hervorragend ausgestattete Krupp-Kolleg, die Stadt und die Umgebung bieten einen idealen Rahmen für Aktivitäten dieser Art. Ein klares Zeichen für Greifswald setzte auch die Tatsache, dass alle internationalen Sprecher trotz voller Terminpläne bis zum Ende des Workshops geblieben sind.

G. Hager, G. Wellein



Minisymposium auf der PASC

Die alljährliche PASC (Platform for Advanced Scientific Computing) Konferenz fand dieses Jahr vom 1. – 3. Juni an der ETH in Zürich statt. Dort wurde das DFG-Schwerpunktprogramm „Software for Exascale Computing“ (SPPEXA) 1648 neben einem Posterstand auch durch das von Dr. Harald Köstler (FAU Erlangen) und Prof. Matthias Bolten (Uni Wuppertal) organisierte Minisymposium „SPPEXA“ repräsentiert. Beide sind Teilprojektleiter beim SPPEXA Projekt ExaStencils – Advanced Stencil-Code Engineering.

Neben einem Vortrag zu ExaStencils bestand das Minisymposium aus 7 weiteren Vorträgen der insgesamt 13 SPPEXA-Projekte, u.a. waren EXA-DUNE (Jorrit Fahlke, Uni Münster), EXASTEEL (Holger Stengel, FAU Erlangen), EXAFSA (Prof. Miriam Mehl, Uni Stuttgart), EXAHD (Prof. Dirk Pflüger, Uni Stuttgart), ESSEX (Prof. Gerhard Wellein, FAU Erlangen), EXASOLVERS (Prof. Gabriel Wittum, Uni Frankfurt) und CATWALK (Christian Iwainsky, Uni Darmstadt) vertreten.

Das Minisymposium bot einen guten Überblick über die laufenden Forschungsarbeiten während der ersten Phase von SPPEXA. Neben einigen Vorträgen zu Softwareentwicklung und Performance Engineering kamen auch effiziente numerische Verfahren und verschiedene Anwendungen aus Physik, Naturwissenschaft und Technik nicht zu kurz.

H. Köstler

Germany's Path to Exascale Computing

Joint workshop at ISC 2015 in Frankfurt

Summarizing main components of the current German HPC agenda was the idea of a workshop at this year's International Supercomputing Conference (ISC) in Frankfurt, jointly organized by the Gauss Centre for Supercomputing (GCS) and the Gauss Alliance (GA).

A small, but very international and very interested audience gathered in a room named „Ampère“ to learn about current and future activities and

plans related to HPC infrastructure, methods, and applications in Germany. In the four presentations, different aspects were considered. Michael Resch (HLRS, Stuttgart) reported on the GCS, Thomas Ludwig (DKRZ, Hamburg) did the same for the GA.

In addition to these more infrastructure-related talks, Wolfgang Nagel presented the HPC Software Initiative of the Federal Ministry of Education and Research (BMBF), and Hans-Joachim Bungartz gave an overview of DFG's Priority Program „Software for Exascale Computing“ (SPPEXA), with a special focus on SPPEXA's internationalization in the second funding phase (joint projects with partners from Japan and France). The discussions after all talks were very active – also due to the fact that a contributor to a new DOE report on HPC was gathering information.

Well, let's hope that this report won't be of the category „write-only memory“...

H.-J. Bungartz

ENB Elitecup 2015

Der Elitecup fand 2015 im Sportpark Nymphenburg des ESV (Eisenbahner Sportverein) in München statt. Für alle, denen „Elitecup“ tatsächlich noch nichts sagt: Das ist das Fußballturnier, das die im Elitenetzwerk Bayern verbundenen Elitestudiengänge und Doktorandenkollegs alljährlich austragen. Also sozusagen das Highlight eines jeden Unijahres.

Natürlich hat BGCE auch 2015 ein Team an den Start gebracht, das technisch ähnlich stark aufgestellt ist wie die Mannschaft letztes Jahr beim legendären 4. Platz – vielleicht sogar noch einen Tick stärker. Das Losglück bei der Wahl der Gegner war uns diesmal allerdings nicht ganz so hold.

Bei 14 Mannschaften insgesamt war unser Team in einer Dreier-Vorrundengruppe, und es gelang gegen die „Ethik der Textkulturen“ (und nicht der „Textilkulturen“, die der Stadionsprecher fälschlicherweise ankündigte) mit einem sauberen 5:0 ein Auftakt nach Maß. Im Anschluss mussten wir uns trotz guter Leistung mit einer 0:2-Niederlage gegen den späteren Turnier-



Abbildung 5: Das BGCE-Team von 2015.

sieger FIM geschlagen geben. Danach ein Novum beim Elitecup: Es gab eine mehr als einstündige Pause mit ruhendem Spielbetrieb und Penne Arabiata als Mittagessen anstelle des abendlichen Grillens. Es ist nicht ganz klar, ob das an Sparaufgaben lag oder – ganz pragmatisch – nur daran, dass das Vereinslokal klar italienisch geprägt ist. Unsere Spielpause betrug sogar geschlagene zweieinhalb Stunden; in dieser Situation hieß es dann, Energie-reserven auffüllen und versuchen, irgendwie die Spannung und Motivation aufrechtzuerhalten.

Danach ging es dann im Viertelfinale gegen CDTM 2 um alles: Um Ruhm, Ehre, die Vormachtstellung im Garchinger MI-Gebäude, um Anzüge gegen lässige T-Shirts, und nicht zuletzt um die Wurst. Das hatten alle Spieler verinnerlicht und spielten einige gute Chancen heraus. Just kurz nachdem

zweimal das Aluminium des gegnerischen Tores zitterte, erhielten wir allerdings äußerst unglücklich ein Gegentor. Da jedes Spiel nur 15 Minuten dauerte, war uns ein Ausgleich leider nicht mehr vergönnt. Und kurz danach gleich der nächste Schock: Es wurden auch keinerlei Platzierungsspiele vorgenommen. . . Da blieb der Mannschaft nur noch die Rolle des kritischen Beobachters beim erkämpften Finalsieg von FIM aus Augsburg gegen die Max-Weberianer.



Abbildung 6: Die Spieler bei der immens wichtigen Regeneration :-).

Das Fazit: ein minimalistischer Elitecup: Basisziel des Viertelfinales erfüllt, wenig Essen, wenige Spiele, und trotzdem ein gefühlter 5. Platz :-). Wir starten allerdings schon jetzt das Training fürs nächste Jahr und freuen uns auf den Elitecup 2016 in Augsburg!

T. Neckel

CSE / COME Summer Trip 2015

Every summer, students and staff of the two „Computational“ Master’s programs at TUM „Computational Science and Engineering“ (CSE)



Abbildung 7: Replenishing energy reserves.

and „Computational Mechanics“ (COME) escape the hectic Munich life to spend a day in the tranquility of the Bavarian countryside.

This year's destination was Schliersee and its surroundings, starting at the very typical Markus Wasmeier Museum, followed by a short hike to Schliersbergalm, sliding back down a sledge track (arguably the highlight of the day) to finish off with a swim in the Schliersee. The weather report announced a clear blue sky, but the temperature was expected to rise up to 37 degrees. It turned out to be one of the hottest days of the year, but the inclement weather did not stop the troop from making the most out of the trip.

We met at Munich Hauptbahnhof at 9:45 a.m. From the CSE side we had 25 registered participants, mainly students and their guests, plus the coor-



Abbildung 8: Overlooking the Schliersee from Schliersbergalm.

dinators. Axel Greim, the coordinator of COME and organizer of the trip couldn't make it this time, since he had to stay home with his wife and newborn girl (congratulations!). We arrived at our first destination, the Markus Wasmeier museum. The idea behind the museum is to show its visitors how life in Bavaria used to be some 300 years ago. It is an open area with antique houses, stores, local people performing typical dances, and even a brewery, and the tour is led by a friendly guide who describes the peculiarities of everyday life in the old Bavarian countryside. The tour was followed by lunch and locally brewed beer, which gave us enough energy to carry on with the trip.

We then headed north, walking first at the side of the Schliersee and then uphill to the Schliersbergalm. For the last several hundred meters we took a cable car, which allowed us to enjoy the view of the lake and its surround-



Abbildung 9: A well deserved dive into the Schliersee.

dings. Once on top we had some more refreshments as the temperature was reaching its highest point. After having recovered from the heat, each of us took a sledge and slid down a long track, a ride that takes approximately five minutes. The velocity of the sledge can be controlled by a handle in the sledge, and despite the intrepidity of a few Schumachers we all made it down safely.

The track left us off a couple hundred meters from the Schliersee. Jumping into the lake was not part of the official schedule, but after a whole day under the sun several students didn't think it twice and jumped right in, even if they didn't have their swimsuits with them.

At around 5 p.m. the time came to take the train back to Munich, and not surprisingly the air conditioning in the train was not working. The cheerfulness and good mood, however, remained unaffected until the very last minute. The resulting sunburns shall testify to yet another priceless summer trip.

A. Parra Hinojosa

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

J. Daniel, C. Halfar, 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: halfar@in.tum.de, **www:** <http://www5.in.tum.de/quartl>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **15.10.2015**

* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: $1/4$ Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)