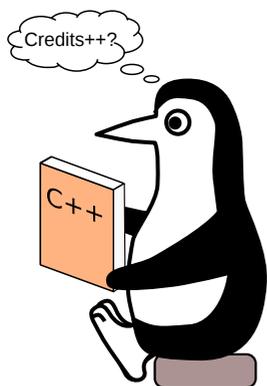


Inhalt



Editorial	2
Genetic Basis of Gene Expression	4
Iterationsschleife	11
Ferienakademie – a slightly scientific approach	12
C++ für Fortgeschrittene	18
Parallel Tree-Code Algorithms at SIAM-PP	19
Die Welt der UQ Software	20
Student Cluster Competition 2016 bei SC16	22
BGCE Opening Weekend	24
BGCE Elitecup 2016	28
SPPEXA News	31

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

Zur Abwechslung mal wieder eine Episode aus der Kategorie „Post an den Dekan“ – nachfolgende Email erreichte mich jüngst:

„Hi, I'm a Phd student at Helmholtz Zentrum München and I'd like to learn to programm (sic!) in C++, but it had to be in a course which would provide a final certificate so it can be compulsory for credits for the Phd program. I know just the basics and most of it I had it from when I learned Pascal (coding basics). Can you recommend me, any academy, online based course, or certificated way that you think would be the best way to learn C++ here in Munich. I'd like to learn it to make applications: Build and control setups, build robotics, design GUIs for different purposes. Thanks in advance, F.O.“

Jetzt kann man so etwas natürlich in die mit „Schräge Vögel“ beschriftete Schublade stecken, oder aber man schaut sich das Ganze etwas genauer an. Und in letzterem Falle kommt dann allerdings schon eine ganze Reihe von Merkwürdigkeiten zum Vorschein. Also legen wir los.

Erstens gibt es bei uns keine „Phd students“ – es gibt Doktoranden bzw. Doktorandinnen, Promovierende, doctoral researchers, doctoral candidates, alles möglich; aber keine Promotionsstudierenden. Denn mit der leidigen Bologna-Lesart der Promotion als dritter Studienphase hat sich der deutsche Bildungsraum ja aus gutem Grund nie angefreundet. Nein, die Promotion ist der Einstieg in eigenständiges Arbeiten, in die Berufswelt.

Zweitens ist das Helmholtz Zentrum München zwar fraglos eine prima Großforschungseinrichtung, aber eben keine Uni. Folglich kann man auch dort nicht promovieren. Es scheint sich vielmehr um eine externe Promotion an der TUM zu handeln, wobei ich Letzteres vor allem daraus schließe, dass ein LMU-Doktorand sein Anliegen wohl eher irgendwo dort vortragen würde (gewagt, gewagt, ich weiß – aber ich sag das jetzt einfach mal). Also wahrscheinlich Vertrag und Arbeitsplatz bei Helmholtz, Promotion bei uns, inklusive Mitgliedschaft in der TUM Graduate School mit allem, was damit so verbunden ist; und somit ein „PhD candidate at TUM“, oder so ähnlich.

Drittens bringt dann das „a course which would provide a final certificate“ die etwas merkwürdige Vorstellung zum Ausdruck, dass der Kurs das Zertifi-

kat und die damit verbundenen ECTS-Credit-Pünktchen quasi automatisch ausspucken möge. Genau dies ist übrigens ja der Hauptgrund, dass wir hierzulande so sehr am Primat der Forschungsarbeit festhalten und ein zu hohes Maß an Studienähnlichkeit für gefährlich halten – eben weil dadurch auch die Erwartungshaltung bei den Kandidatinnen und Kandidaten genährt werden kann, nach Absolvieren einer Liste von Kursen den ersehnten Dokortitel automatisch zu bekommen, per Rechtsanspruch quasi. Was nun wirklich nicht gut wäre, weder für die Promotion noch für den Wissenschaftsbetrieb allgemein.

Andererseits scheint der Herr ja durchaus Programmiererfahrung zu haben. Pascal mag zwar etwas in die Jahre gekommen sein (schließlich habe ich mich seinerzeit damit in meinem Studium befassen dürfen), aber es ist nun wirklich so schlecht nicht, taugt sowohl als Erstkontakt als auch zur Erlangung weiterreichender Fertigkeiten. Und um die scheint es jetzt ja zu gehen – wobei das angesprochene Anwendungsportfolio schon breit gefasst ist, und es manchmal auch Alternativen zu C++ gäbe. Aber kommen wir zu viertens: Warum schlägt er damit bei mir auf? Das System Promotion an der TUM sieht neben Betreuer oder Betreuerin ja noch einen Mentor oder eine Mentorin vor; außerdem findet die Promotion in einem von derzeit fünfundzwanzig Graduiertenzentren statt, die ebenfalls jeweils über eigene Organisations- und Beratungsstrukturen verfügen. Wollen oder können die alle ihm nichts sagen? Das wäre dann schon a bisserl erbärmlich und eigentlich fast schon ein Fall für den Graduate Dean in mir, und ich müsste den Betreffenden bei Gelegenheit mal ordentlich den Kopf waschen. Oder unser Doktorand F.O. nutzt die genannten Strukturen einfach nicht, aus welchem Grund auch immer. In diesem Fall bleibt nur zu hoffen, dass er in seinem Promotionsprojekt etwas schlauer unterwegs ist als bei seiner Anfrage an mich jetzt.

Wie eingangs gesagt, man kann solche Emails auch einfach ignorieren. Aber wahrscheinlich schlägt der über die Jahre sehr verfeinerte Quartl-Sensor in mir bei solchen Dingen einfach zu laut an. Schließlich bin ich ja auf regelmäßige Zulieferung von Sottisen-tauglichem Material quasi angewiesen. Und insofern muss ich besagtem F.O. geradezu dankbar sein (und bin es tatsächlich auch ... irgendwie zumindest). Also Ignorieren war somit nicht, das versteht sich von selbst.

Doch genug der einleitenden Worte – die Quartl-Redaktion wünscht allen eine gute Sommerzeit (vielleicht kommt ja eine solche noch), verbunden mit zumindest etwas Zeit zum Ausspannen. Und vor allem wünschen wir natürlich anhaltenden Spaß mit dieser neuen Ausgabe Ihres Quartls!

H.-J. Bungartz

Unraveling the Genetic Basis of Gene Expression

Since 2016, Julien Gagneur is Associate Professor for Computational Biology at TUM. The primary focus of the research group is to advance our understanding of gene regulation through quantitative modeling and develop methods to study the mechanisms by which genetic variants condition phenotypes (systems genetics). For further information see <http://www.gagneurlab.in.tum.de/>

Background

The control of gene expression, i.e. how much of a gene product is available in the right amount at the right place in the cell, is essential to cell biology. However, despite decades of research on gene regulation, *we do not know how far we are from a comprehensive list of genetic regulatory elements. No model is able to predict gene expression levels in a given cell type from genomic sequence.* Consequently, most of the variants associated with genetic diseases, which are non-coding, cannot be interpreted.

The generation of omic data is exploding, doubling every 7 months. There is to date the equivalent of one million human genome sequences produced worldwide and it is predicted that in ten years, the amount of genomic data will surpass YouTube and astronomy [2]. Large omic datasets are shared for research purposes (ENCODE, Roadmap epigenomics, GTEx) and further efforts aim at extending data sharing policies and providing cloud services

DNA and RNA regulatory elements, quantified the contributions of individual bases to RNA synthesis, splicing, and degradation, and uncovered novel motifs that regulate RNA life time (Fig. 1).

Methods

To globally estimate rates of RNA synthesis, splicing, and degradation (Fig. 2, step 1), we used a first-order kinetic model with constant rates that describes the amount of labeled RNA as a function of time (Fig. 3). We modeled splicing of individual introns, where splicing refers to the overall process of removing the intron and joining the two flanking exons. The model was fit to every splice junction using the counts of spliced and unspliced junction reads (Fig. 3). We included in the model scaling factors that account for variations in sequencing depth, an overall increase of the labeled RNA fraction, cross-contamination of unlabeled RNA, and 4tU label incorporation efficiency. The model was fitted using maximum likelihood and assuming negative binomial distribution to cope with overdispersion of read counts.

Part of the gene-to-gene variation in these rates is encoded in the gene sequence itself. To identify such motifs we investigated the association of the presence of 6-mers in the gene sequence with each rate (larger and shorter motifs are obtained in post-processing steps). Of course, the total number of 6-mers is too large to fit an unconstrained model globally. On the other hand, co-occurrence of 6-mers in RNA sequence may lead to confounding association if each 6-mer is tested without controlling for the presence of the other ones. We approached the problem using a mixed effect models, namely, we fitted:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{W}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{x}_j\beta_j + \mathbf{u} + \boldsymbol{\epsilon} \\ p(\mathbf{u}) &= N(\mathbf{u}|0, \lambda\tau^{-1}\mathbf{K}) \\ p(\boldsymbol{\epsilon}) &= N(\boldsymbol{\epsilon}|0, \tau^{-1}\mathbf{I}), \end{aligned}$$

where \mathbf{y} is a vector of rates over all genes, \mathbf{W} is a matrix of covariates, $\boldsymbol{\alpha}$ is the corresponding vector of coefficients, \mathbf{x}_j is the vector of the number of instances of the j -th 6-mer in the gene, β_j is its coefficient, \mathbf{u} is a n -vector

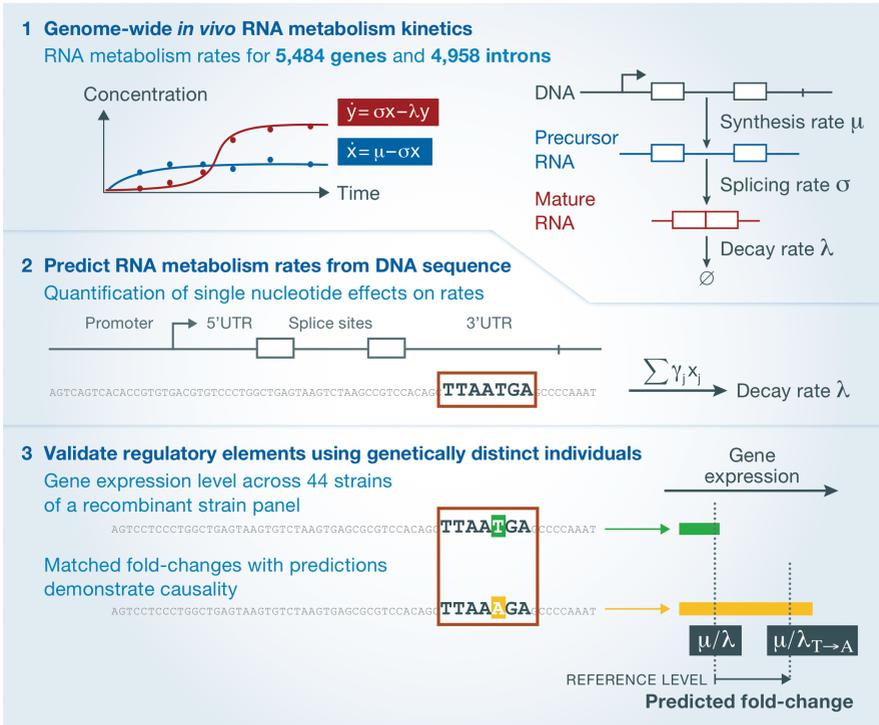
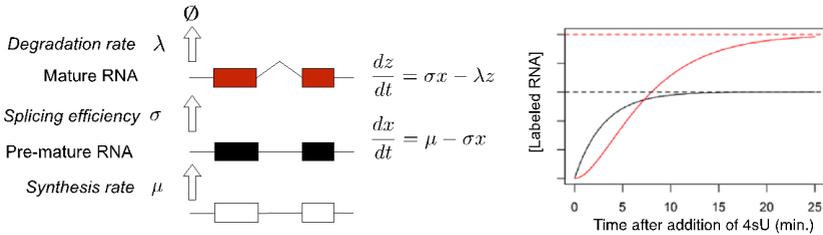


Figure 2: Determinants of RNA metabolism in fission yeast [1] (1) Genome-wide RNA synthesis, degradation, and splicing rates were determined by combining *in vivo* RNA labeling and mathematical modeling. (2) A robust regression approach identified novel sequence elements predictive of RNA metabolism rates and quantified contribution of single bases. Steps 1 and 2 were performed using the reference genome strain only. (3) Regulatory elements were validated by prediction of effects of single nucleotide variants on gene expression level in genetically distinct strains

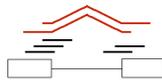
of random effects, and ϵ is the n -vector of errors. The covariance matrix \mathbf{K} was set to $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ where \mathbf{X} , whose columns are the x_j , is the matrix of

Estimating splicing kinetics from junction reads

Species kinetics



Read count probabilities



$$P(\text{spliced reads}) = NB(z(t; \mu, \sigma, \lambda)F_j, \phi)$$

$$P(\text{unspliced reads}) = NB(x(t; \mu, \sigma, \lambda)F_j, \phi)$$

NB: Negative binomial (larger variance than Poisson)

F_j : Total labeled RNA concentration in sample $j \times$ Sequencing depth \times Read length

Parameter estimation

Maximum likelihood + bootstrap

Figure 3: Estimating splicing kinetics from labeled RNA sequencing (4sU-seq)

6-mers counts. The covariance on the random effects allows controlling for the effects of all other 6-mers.

This approach led to the identification of 12 controlling motifs, 7 of them being novel. Moreover, their causal role could be validated by successfully predicting gene expression levels in strains harboring mutations on these motifs.

Conclusions and Future Work

We have approached the problem by

1. breaking down gene expression into elementary steps: synthesis, processing, degradation
2. searching for DNA sequence elements that are a) small (k-mers) and b) encoded close to the genes and in a simple genome (fission yeast)

These simplifications allowed us to make significant novel findings. We still cannot predict gene expression from DNA alone but we find causal elements and we can predict effect of some genetic variation between individuals.

At the TUM since January 2016, we are continuing with this research program. We have now established our *first human applications*. These include the development of RNA kinetics measurement and modeling in human in collaboration with P. Cramer [4]. We work with Bernhard Kuster (TUM – Weihenstephan) to study the genetic control of protein expression level. In collaboration with Holger Prokisch (TUM-Med) we are working on cell lines from patients affected with genetic diseases so that we can link the genetic information to gene expression and understand their molecular basis. Methodology-wise, we are using *deep learning approaches* to develop much larger model that can exploit very large omics compendia. We are in contact with *bioinformatics* labs (Burkhard Rost, Fabian Theis). We are also looking forward interactions with *high performance computing* (Hans-Joachim Bungartz, Thomas Huckle) and *Machine learning* and *Imaging* groups (Daniel Cremers, Björn Menze) as these technologies will shape the future of bioinformatics.

Talented students or postdocs, on any of these topics, with or without experience in biology, are welcome!

Julien Gagneur

References

- [1] Eser, P. et al. Determinants of RNA metabolism in the Schizosaccharomyces pombe genome. *Mol Syst Biol* (2016)
- [2] Stephens, Z. D. et al. Big Data: Astronomical or Genomical? *PLOS Biol.* 13, e1002195 (2015).



Figure 4: Gagneur lab - July 2015
from left to right: Fengchong Wang, Daniel Bader, Leo Wachutka,
Ziga Avsec, Chris Mertes, Maria Litovchenko, Vicente Yopez,
Julien Gagneur, Mariana Boroni, Benedikt Zacher (naked), Basak
Eraslan, Juri Stricker

- [3] Wilhelm, M. et al. Mass-spectrometry-based draft of the human proteome. *Nature* 509, 582–7 (2014).
- [4] Schwalb, B., et al. TT-Seq captures the human transient transcriptome. *Science* (2016).

Iterationsschleife

N=19

13. Juni 2016

Keiner war's. Niemand hat es so gemeint. Alle wurden missverstanden. Aber, man wird es wohl noch sagen dürfen. Man muss doch auch einmal ein Tabu brechen dürfen – weil es doch wahr ist. Und wer will Jerome Boateng als Nachbarn haben?^a

Donald Trump wird von 79% aller Deutschen^b gefürchtet^c. Was denken die restlichen 21%?

65% der Deutschen seien besorgt, 36% sogar wütend – über Donald Trump. Das macht in Summe 101% sodass wohl viele wütend und besorgt sind, und da 43% auch noch Bauchschmerzen haben ist es wohl so, dass eine ganze Menge Deutscher mit Bauchschmerzen, wütend und besorgt nach USA blickt. So hoffen wir also, dass die US-Wähler „richtig“ wählen – obwohl uns Hillary Clinton einige Rätsel aufgibt und sich nicht an die Ratschläge der heimischen Presse halten will.^d

Es ist amerikanischer Wahlkampf und da gehen die Diskussionen über deutsche Innenpolitik gerne unter. So lange sich die Debatte um Hillary, Donald und Jerome dreht, bleiben andere Probleme aussen vor. Im Land sind weiterhin Flüchtlinge die integriert werden sollen, die Kinderarmut nimmt weiter zu, wer sich mit Baustellen beschäftigt, weiss dass der Mindestlohn nur auf dem Papier existiert, unsere Infrastruktur verrottet und in Dresden und anderswo stehen tausende auf der Strasse und glauben zwar der „Politik“ oder der „Lügenpresse“ nichts mehr aber dafür jedem und jeder der oder die ein Mikrofon halten kann.

Aber halt: es gibt doch etwas was uns noch wirklich mitreisst und in Wallung bringt: Fussballeuropameisterschaft!

Na dann, machen wir eben nächstes Jahr erst weiter. Bis dahin ... Keiner war's und niemand hat es so gemeint.

PS: Siegmund Gabriel hat etwas zum Bundestagswahlkampf gesagt^e. Aber wer hat es gehört? – schliesslich hat Deutschland die Ukraine mit 2:0 besiegt.

M. Resch

^aEine Frage die sich leicht stellen lässt, weil die Befragten ohnehin in ihrer überwiegenden Mehrheit nicht über die finanziellen Mittel verfügen um sich in der Nachbarschaft von Jerome Boateng anzusiedeln.

^bMüsste hier eigentlich Deutsch*innen stehen

^c<http://www.faz.net/aktuell/politik/wahl-in-amerika/internationale-umfrage-die-welt-hat-angst-vor-donald-trump-14255205.html#/elections>

^d<http://www.spiegel.de/politik/ausland/hillary-clinton-wahlkampf-laeuft-verheerend-kommentar-a-1094201.html>

^e<https://www.tagesschau.de/inland/spd-233.html>

Ferienakademie – A slightly scientific approach

This paper analyses the monotonically increasing popularity of Ferienakademie and validates the interest it garners from multitudes of students each year. By looking at the key aspects of Ferienakademie, the authors show that the success of this programme results from an optimum combination of courses, excursions into stunning landscapes, sport, and a multitude of cultural and social activities. By the conclusion of this paper, the authors hope that the reader is convinced of the significance of Ferienakademie, and chooses to take up this great opportunity.

Introduction

Every year since 1984, motivated students from Munich, Erlangen and Stuttgart gather in a hidden valley far away at the Ferienakademie in Sarntal. While in the beginning it started with only three courses, the academy this year is providing a total of twelve. The program and activities themselves have evolved over the years.

In this paper, we want to look at the reason why talented students are willing to give up their well-earned holidays to lock themselves up in South Tyrol. What are the reasons for the great success of Ferienakademie and why should you definitely go there? Of course, as it should be in a research paper, answers to these questions are based on objective studies, observations and research.

For doing so, we look at the different methods used to attract gifted students, at their application and finally at the conclusion.

Methods

The Ferienakademie has many methods in its arsenal to garner the curiosity of students. In this section we want to present some of them. Furthermore, we want to take a look at how they are applied.

Courses

Without doubt, the main method are the courses themselves. The Ferienakademie lets the students choose from a wide variety of courses from a plethora of disciplines – informatics, mathematics, medical engineering, psychology, philosophy, etc. The group size usually varies between 10-20 students.

The typical structure of the course is the following: Depending on the core focus of a course, participants prepare a talk for a specific topic before the start of the academy. Quite a few courses consist of a group project. While students still might prepare a talk, they work on specific tasks in groups during their time in Sarntal. In 2015, for example, course 2 developed apps for iOS to enhance the quality of life, while course 5 created a game based on multiphysics simulation using the Xbox Kinect.

In both cases, the small size of the group, the close interaction with the corresponding professors and the motivation of each participating student (and also the non-existent pressure of grading) creates a special atmosphere which leads to exciting discussions that extend beyond the workspace. (Rumours exist that whole game ideas were developed, discarded and reinvented during hikes.)

Examples of both types of courses are shown in Fig. 5 and Fig. 6.

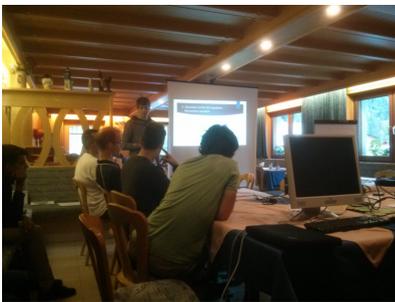


Figure 5: Presentation in a course.



Figure 6: Students working on their project.



Figure 7: Impressions from hikes.

Hiking

Right after the courses, arguably the second most important part of Ferienakademie is hiking. (Some people might even claim the hikes to be more important than the courses themselves.) Sarntal and South Tyrol offer a beautiful landscape in the Alps which one can explore through a number of hiking routes. Words, however, can hardly describe the beauty of these trips, hence we refer to Fig. 7.

While there are official hiking days (to ensure that professors do not overwhelm their students), most of the courses also plan hiking trips on their own. A healthy competitiveness evolves between the courses which culminates on the final day with the course with the most hikes being crowned Überhikers (unofficially, admittedly, but there is nevertheless a lot of pride involved).

Culture

The cultural aspects of Sarntal play an important role at Ferienakademie. On one of the first days, all participants meet up in a local town hall and get introduced to the history and culture of Sarntal. This cultural evening includes a presentation about the uniqueness of the valley followed by an enthralling experience of the traditional songs and clothing, see Fig. 8. The show concludes with a treat of the local wine (but be careful, it is not water!). The academy also organizes a trip to Bolzano, one of the prominent cities of South Tyrol, see Fig. 9. A highlight here is for example the South Tyrol

Museum of Archaeology which features the Neolithic mummy "Ötzi".

Sport

Each year, three different competitions are organized for the students:

- Table-tennis
- Chess
- The Run

The table-tennis and chess competitions are held as tournaments where each house puts together a team. The houses then compete against each other in



Figure 8: Cultural evening.



Figure 9: Bolzano

semifinals and finals. For the tournament, each team is supported in full vigor by its fans, ensuring a great atmosphere during the games (chess being the exception)– see Fig. 10.

The run is located at a beautiful spot, going around Lake Durnholz twice for about a total length of 4 km where the participants (and fans) can afterwards enjoy a refreshing swim in the lake.

To show the importance of these activities, it is said, that some professors value the result of the tournaments higher than the results in the actual courses.

Food

Last, but not the least, the food. Despite the physical demands of the hikes (some courses hike more than fifty kilometers[reference needed]) and intellectual toll of the courses, no one returns from Ferienakademie with a loss in weight. Culinary delights at Ferienakademie are a-plenty! The choice ranges from a sumptuous noodle buffet to an array of dumplings; from schnitzel to Jause.

And then there is Kaiserschmarrn. If you have never been in the gourmet heaven called Kaiserschmarrn, wait for Ferienakademie. Not only is it mandatory to eat at every hut you take a break during hikes; there is also a special Kaiserschmarrn-evening where the students try to eat the kitchen empty– literally. Prof. Bungartz likes to tell the story of Feldrand having to buy eggs from a neighbouring farm to provide more Kaiserschmarrn for the hungry students. The beauty and instant-appetizing nature of a plate of Kaiserschmarrn is illustrated in Fig. 11.



Figure 10: Preparing for the tabletennis tournament.



Figure 11: Kaiserschmarrn [Jägerhof et al.]

During our stay at Ferienakademie, we ended up developing a love for Kaiserschmarrn which we would like to express by the following poem– Ode an den Kaiserschmarrn (with the rhythm of Friedrich Schiller’s ”Ode an die Freude”).



Figure 12: Lake Durnholz where the run takes place.



Figure 13: It can get quite snowy during hikes.

An den Kaiserschmarrn

Freude, leck'rer Kaiserschmarren,
Mehlspeis mit Rosinen,
Wir verspeisen wie Barbaren
hunderte Portionen.

Jede Wand' rung endet wieder
mit nem Blech voll Kaiserschmarrn.
Studenten, die am meisten essen,
die sieht Bungartz voll stolz an.

Conclusion

By applying all these methods and combining them in a most profitable way, the Ferienakademie produces impressive results year after year. These are usually presented on the final evening where the courses come together to share their works with their peers. But the courses notwithstanding, this summer school is a complete success. Students with a motivation for holistic learning from a lot of different fields come together for twelve days to work, study and – most importantly– have fun together. Ferienakademie succeeds

at connecting those aspects which sometimes get lost in regular studies and is a great opportunity for students to reap their benefits. If you are not yet convinced, hopefully these final impressions in Fig. 12 and Fig. 13 can tip the scale.

S. Joshi, F. Menhorn, B. Rüth

C++ für Fortgeschrittene

Vom 17. bis 19. Februar 2016 fand am RRZE der von KONWIHR unterstützte Programmierkurs „Advanced C++ with Focus on Software Engineering“ statt. Dr. Klaus Iglberger führte die vierzig Teilnehmer in die Tiefen und Untiefen des objektorientierten Programmdesigns ein.

Dr. Iglberger, vormals Geschäftsführer des Zentralinstituts für Scientific Computing (ZISC) an der FAU, ist ein ausgewiesener Experte auf dem Gebiet der effizienten objektorientierten Programmierung. Die von ihm entwickelte hochperformante Blaze-Bibliothek [1] erfreut sich stetig wachsender Beliebtheit. Im Rahmen seines dreitägigen Kurses stand allerdings weniger die Performance als vielmehr die Robustheit und Wartbarkeit des entwickelten Codes im Vordergrund. Beginnend mit grundlegenden Designprinzipien objektorientierter Programmierung schlug die höchst interaktive Veranstaltung einen Bogen über die Standard Template Library (STL), vernünftiges Klassen-Design, Fehlerbehandlung und dynamische Vererbung bis hin zu Neuheiten in den aktuellen C++11 bzw. C++14 Standards. Die Teilnehmer konnten das Erlernete sogleich mit Hilfe von Übungen vertiefen.

Obwohl sich der Kurs ausdrücklich an Programmierer wandte, die bereits die Grundlagen der Sprache C++ beherrschten, waren die Organisatoren von der sehr großen Nachfrage überrascht. Das durchweg positive Feedback der Teilnehmer hat das RRZE zum Anlass genommen, eine Neuauflage für 2017 zu planen.

[1] <https://bitbucket.org/blaze-lib/blaze>
G. Hager

Parallel Tree-Code Algorithms for Large Scale and Multiphysics Simulations at SIAM PP

The SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing 2016 (SIAM PP) took place from April 12 to 15, in Paris, France. Arash Bakhtiari, a PhD student from the chair of scientific computing, together with Prof. Hans-Joachim Bungartz and Prof. George Biros from the University of Texas at Austin, organized "Parallel Tree-Code Algorithms for Large Scale and Multiphysics Simulations" minisymposium at the conference.

The aim of the minisymposium was to bring together computational scientists that work on large-scale tree-codes and their applications. Tree-codes are hierarchical data structures that are used for nonuniform discretization of partial differential equations. Tree-codes are also used for integral-equation formulations and N-body methods. Designing efficient parallel tree-code algorithms that scale to thousands of processors is challenging. It is even harder to account for multiple scales and multiple physics due to the different resolution requirements of the underlying spatiotemporal fields.

The invited speakers in minisymposium addressed these challenges. At the first panel of minisymposium, Arash Bakhtiari, presented a numerical method to solve the advection-diffusion problem on top of a dynamic spatially-adaptive distributed-memory parallelized Chebyshev octree as the data structure. He also introduced a novel and robust partitioning scheme to address the load-balance problem for distributed-memory Lagrangian schemes. Dhairya Malhotra, a PhD student at the University of Texas at Austin, presented a new framework for solving volume integral equation (VIE) formulations of Poisson, Stokes and Helmholtz equations in complex geometries based on a high-order discretization of the data on adaptive octrees. Prof. Miriam Mehl from the university of the Stuttgart, presented several application cases for the efficient use of octree-like adaptive computational grids in large existing simulation environments. Communication-reducing and communication-avoiding techniques for the particle-in-dual-tree storage schemes were discussed by Dr. Tobias Weinzierl from Durham University, United Kingdom.

The second panel of the minisymposium, started by the talk of Prof. Carsten Burstedde from the University of Bonn. He discussed the recent developments on forests of linear trees. Prof. Sabine P. Roller from University of Siegen, addressed the application of octree meshes with a high order discontinuous Galerkin Method. Finally, Dr. Maxime Theillard, from the University of California, San Diego, presented a numerical method for modeling incompressible non-miscible fluids on adaptive octree/quadtree grids.

By gathering experts from all over the world, the minisymposium addressed various aspects of the tree-based hierarchical data structures ranging from mathematical aspects to its applications in scientific computing.

A. Bakhtiari

Die Welt der UQ Software

Trends oder Hypes gibt es nicht nur in Kunst, Musik oder Sport sondern natürlich auch in der Wissenschaft. Manche dieser Entwicklungen gestalten sich langfristiger und erzeugen echten Mehrwert und bleibende Ergebnisse, während einige ähnlich schnell verpuffen, wie sie entstanden sind. Uncertainty Quantification (UQ) scheint von ersterer Sorte zu sein.

Seit ca. fünf Jahren boomt das Thema UQ in verschiedenen Bereichen. Worum es geht? UQ beschreibt eine Variante des mathematischen Einbaus von zufälligen Effekten in deterministische, zumeist physikalische Systeme. Ein Beispiel: Die Quantifizierung des Einflusses von Unsicherheiten in Eingabegrößen wie Materialkonstanten, Anfangs- und Randwerten oder Geometrien auf bestimmte quantities of interest ist von enormer praktischer Bedeutung bei der Entscheidungsfindung oder auch der Untersuchung von worst case Szenarien. UQ vereint dabei verschiedene Disziplinen im klassischen CSE Sinne: von großen und/oder realistischen Anwendungsszenarien über algorithmische und mathematische Fragestellungen bis hin zu Aspekten des HPC. Treibend ist dabei aktuell die angewandte Mathematik in Bezug auf die Methodik.

Zum dritten Mal nach 2012 (Raleigh, North Carolina, USA) und 2014

(Savannah, Georgia, USA) fand Anfang April diesen Jahres die SIAM UQ Konferenz statt, diesmal—ungewöhnlich für eine SIAM-Veranstaltung—in Europa in Lausanne in prächtiger Umgebung mit See und Bergen. Etwa 800 Teilnehmer nutzten die 5 Tage zu einem intensiven Austausch. Dirk Pflüger und Tobias Neckel organisierten im Rahmen der Konferenz ein Minisymposium zu “Software for UQ”. In drei Blöcken (MS 41, 56, 72) fanden viele wesentliche Akteure der Softwareentwicklung für UQ eine Plattform zur Diskussion von Trends und Ausrichtungen der Werkzeuge und konnten den aktuellen Status der Implementierungen vorstellen¹:

Vortragende/r	Zugehörigkeit	Software
D. Pflüger	Universität Stuttgart	SG++
B. Debusschere	Sandia National Laboratories	UQTK
E. Patelli	University of Liverpool	Opencossan
A. Davis	Massachusetts Institute of Technology	MUQ
D. McDougall	University of Texas at Austin	Qeso
S. Tennoe	Simula Research Laboratory	Chaospy
P. Hough	Sandia National Laboratories	Dakota
P. Qian	University of Wisconsin & SmartUQ	SmartUQ
S. Marelli	ETH Zürich	Uqlab
C. Tong	Lawrence Livermore National Laboratory	PSUADE
Q. Duan	Beijing Normal University	UQ-PyL

Für einen besseren Überblick haben wir das Ganze in Abb. 14 in eine Landkarte gegossen. Wir sind gespannt, wohin die Reise mit UQ und zugehöriger Software in nächster Zeit geht, und planen aufgrund verschiedener Anfragen auch schon ein Folge-Minisymposium auf der nächsten SIAM-UQ-Konferenz in zwei Jahren.

T. Neckel

¹Details finden sich unter http://www5.in.tum.de/wiki/index.php/SIAMUQ16_-_Slides_Minisym_Software4UQ

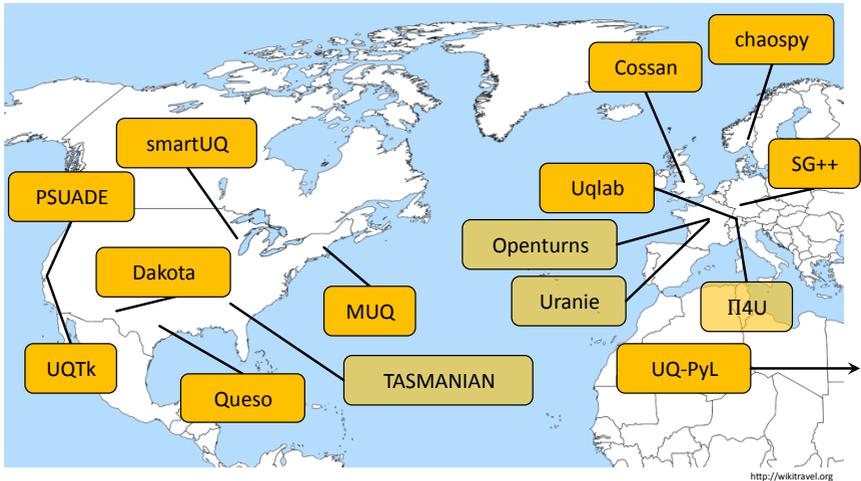


Abbildung 14: “The world of UQ software”: Aktuell entwickelte Werkzeuge (die Übersicht ist vermutlich nicht vollständig, enthält aber die wesentlichen Codes). Die Werkzeuge, deren Entwickler im Rahmen des Minisymposiums “Software for UQ” auf der SIAM UQ 2016 Vorträge gehalten haben, sind mit nicht-transparenten Boxen gekennzeichnet.

Student Cluster Competition (SCC) 2016 – Bayerischer Großangriff in Salt Lake City!

Ein Supercomputing Wettbewerb? Dieser unmöglich zu ignorierenden Herausforderung stellen sich dieses Jahr auf der SC16 gleich zwei bayerische Teams: das Team ”Kraut Computing” der FAU und der ”Phi Club” der TUM. Betreuer des Erlanger Teams ist Johannes Hofmann vom Lehrstuhl für Informatik 3 (Department für Informatik); das Münchener Team wird von Sebastian Rettenberger und Roland Wittmann (Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen, Informatik) betreut. Nachdem bereits auf SC13 und SC14 ein Erlanger Team

als erstes Team aus Europa auf der Student Cluster Competition angetreten ist und sich dort behauptet hat und bei der SC15 das TUM Team sehr erfolgreich war, streben nun erstmals zwei Teams aus Bayern nach einem Stückchen Supercomputing Ruhm und einem Platz auf der Bühne der Top500 Siegerehrung.

Mit einem neuen FAU-Team gehen die Erlanger auch neue Wege, und zielen mit einem Moonshot System von HP auf maximale CPU basierte Energieeffizienz. Viele einfache, hochgetaktete Einsockelknoten mit wenigen Kernen an Stelle der fast ausschließlich verwendeten Zweisockelknoten plus Beschleunigern das ist der neue Pfad den das FAU-Team einschlägt. Erlanger SCC Veteranen vergangener Jahre sparen natürlich nicht mit guten Ratschlägen für das neue Team, darunter als wichtigstes: "Nehmt den Cluster nicht im Handgepäck mit - sucht euch einen Sponsor, ansonsten habt ihr schon im Vorfeld schwer zu schleppen"

Die TUM versucht es nach ihrem erfolgreichem Auftritt von 2015 (Team "TUMuch Phun") mit einem Mix aus bewährtem Betreuersteam (siehe oben) und sehr jungen Studenten. Im Team "Phi Club" studieren Stefan Haas, Maximilian Hornung, David Schneller, Jan Schuchardt und Svilen Stefanov noch im ersten bzw. zweiten Studienjahr, bringen aber schon umfangreiche Erfahrung mit Informatik- und Mathematik-Wettbewerben ein. Nur Team-'Senior' Sharru Møller war bereits im Vorjahr dabei. Wie 2015 wird der russische Hersteller RSC einen Cluster basierend auf seiner PetaStream-Technologie zur Verfügung stellen. Waren letztes Jahr noch Xeon-Phi Coprozessorender Knights-Corner-Architektur im Einsatz, hofft der Phi Club im November bereits auf die Nachfolge-Generation, Knights Landing, bauen zu können – und spekuliert damit wieder auf die höchste (Linpack-)Performance im Bewerber-Feld.

Das Quartl freut sich über soviel bayerische Studentenpower im Supercomputing und drückt den beiden Teams die Daumen.

G. Wellein, M. Bader

BGCE Opening Weekend 2016: Teilchen und mehr

Vom 8. bis 10. April 2016 traf sich wieder die „ganze Familie“ des ENB-Studiengangs Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) zum Auftaktwochenende im Seminarzentrum Bernried am Starnberger See. Dabei konnten auch dieses Jahr mehrere Ziele simultan in Angriff genommen werden. Neben einer kurzen Vorstellung der BGCE für die neu ausgewählten Studierenden—14 an der Zahl—gab es als eine mittlerweile bewährte Einrichtung ein moderiertes „Contracting“, also eine Art Vertragsschluss, zwischen den Studierenden und den verantwortlichen Professoren bzw. Koordinatoren des Programms, das nach Aussage der Trainer einzigartig im Kontext universitärer Ausbildung ist und als sehr positiv und hilfreich für beide Seiten wahrgenommen wurde. Die BGCE-Verantwortlichen erhielten damit Informationen über die Bedürfnisse und Wahrnehmung der BGCE-Neulinge sowie neue Ideen zur Gestaltung des Studiengangs, während die Studierenden mehr über die Hintergründe von Anforderungen und Möglichkeiten der Ausgestaltung ihres Studiums erfuhren. Darüber hinaus kamen die beiden aktuellen BGCE-Jahrgänge zu einem moderierten Erfahrungsaustausch im sogenannten *Consulting Circle* zusammen. Aufgrund der interessanten Persönlichkeiten und diversen fachlichen sowie kulturellen Hintergründe der Teilnehmer ist dies stets spannend und insbesondere für die Junioren informativ. Ferner erfuhren und trainierten beide Generationen der BGCE-Studierenden am Eröffnungswochenende in den Softskillkursen *When Teamwork Works* und *Step Out* wesentliche Bausteine für gelungenes Teamwork und mehr, die sie direkt in kommenden Studienprojekten oder im zukünftigen Berufsleben einsetzen können.

Den krönenden Abschluss des ersten Tages bildete der traditionelle Kaminabend, bei dem ein Gast mit Rang und Namen aus der universitären oder industriellen Forschung zu Vortrag und interaktiver Diskussion eingeladen wird. Nachdem es bei BGCE ja um computational engineering geht (im Wesentlichen also um Simulationen von Ingenieurproblemen), ist es nur konsequent, dass der Kaminabend ohne realen aber dafür mit simuliertem

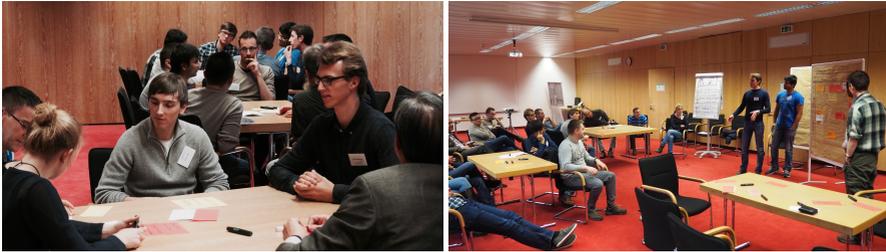


Abbildung 15: „Contracting“ zwischen neuen BGCE Studierenden und Verantwortlichen.

Kamin stattfindet. Nach Vorträgen von Dr. Andrey Semin (HPC Technologie Manager bei Intel), Prof. Hans-Peter Bunge (Department für Geo- und Umweltwissenschaften, Geophysik, LMU), Prof. Karl Schweizerhof (Institut für Mechanik, KIT), Prof. Christian Bischof (Hochschulrechenzentrum, TU Darmstadt), Dr. Florian Jurecka (Dassault Systèmes) und Prof. Nils Thuerey (Games Engineering, Informatik, TUM) in den letzten Jahren konnten wir diesmal Prof. Hans Hasse gewinnen, der den Lehrstuhl für Thermodynamik an der Universität Kaiserslautern leitet. Prof. Hasse arbeitet seit vielen Jahren erfolgreich im Bereich der Simulation von molekularen Systemen mit einer extrem hohen Anzahl an Teilchen. In seinem interaktiven Beitrag mit dem Titel “Molecular Modeling and Simulation in Engineering” ging er auf diverse Aspekte dieser Art von Simulation ein, die auf kleinster Skala das Verständnis für Prozesse und Effekte schafft, die auf großen Skalen für eine industrielle Nutzung wesentlich sind. Mithilfe einfacher Fragen gelang es Hans Hasse, die Diskussion auch auf allgemeine Themenbereiche der Wissenschaftstheorie und -Philosophie im Sinne Carl Poppers zu lenken. Daneben wurde im Plenum auch die Problematik der Verifikation und Validierung von HPC-Simulationen intensiv diskutiert. Und natürlich gab es auch diverse HPC-Berechnungen von Tröpfchen und Edelgasen mit beeindruckenden Mengen an Molekülen zu sehen. Eine deutlich spürbare Änderung gab es beim Eröffnungswochenende dieses Jahr: Das Wetter, mit dem wir traditionell immer sehr viel Glück hatten, war diesmal sehr frisch und nass. Davon

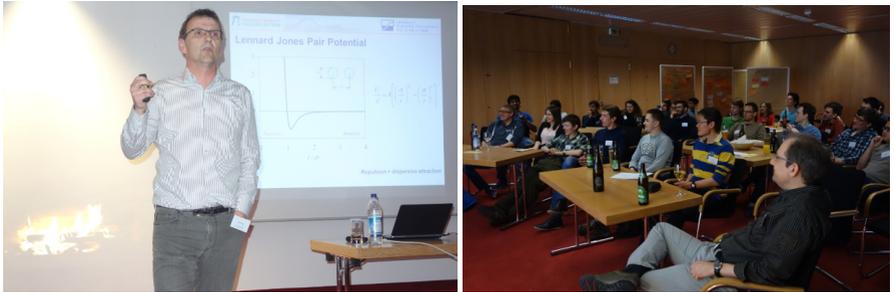


Abbildung 16: Kaminabend mit virtuellem Kamin und interaktivem Vortrag von Hans Hasse (Laboratory of Engineering Thermodynamics (LTD), University of Kaiserslautern).

ließen sich aber weder die Trainer noch die Seminarteilnehmer abschrecken, so dass diverse Übungen für die BGCE Junior- bzw. Senior-Studenten dennoch im Freien stattfinden konnten. Gemütliche Gespräche und intensive Diskussionen vor allem abends leiteten bereits in den Erfahrungsaustausch zwischen beiden Studentengenerationen am Sonntag über. Der Eindruck, der bereits bei der Vorauswahl der Kandidatinnen und Kandidaten standortweise entstand, dass es auch dieses Jahr sehr motivierte und engagierte BGCE-Studierende sind, hat sich bisher auch im Zusammenspiel voll bestätigt, und wir freuen uns auf ein ereignisreiches Jahr 2016 mit BGCE.

T. Neckel, C. Riesinger



Abbildung 17: Beim Softskill-Seminar *When Teamwork Works* der BGCE juniors.

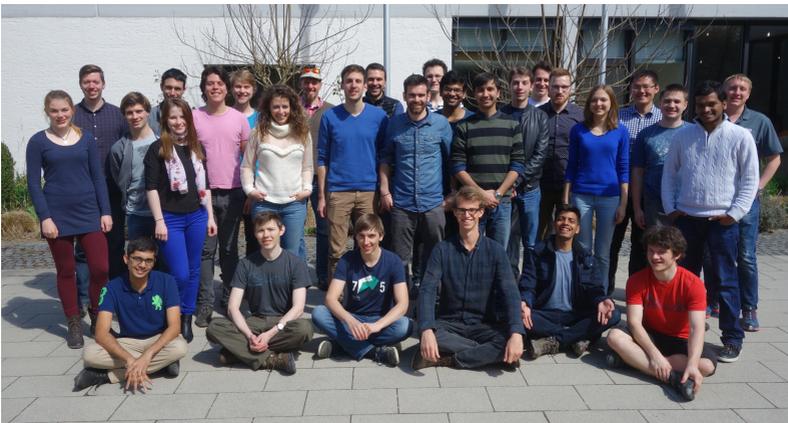


Abbildung 18: Gruppenbild der beiden BGCE-Jahrgänge 2015 und 2016.

ENB Elitecup 2016 – The Story Continues

Am Samstag, den 04.06.16, fand das jährliche BGCE Highlight in Form des ENB Elitecups statt. Kenner des Quartl wissen natürlich, worum es da geht, nämlich vor allem um Ruhm und Ehre im direkten oder indirekten Fußballvergleich zu den anderen Programmen des Elitenetzwerks. Zur Erinnerung: Die Historie von BGCE beim Elitecup ist durchwachsen mit positivem Trend: nach dünnen Anfangsjahren konnten wir 2014—einen Tag vor dem WM Finale—den Einzug ins Halbfinale mit viertem Platz feiern, letztes Jahr errangen wir den geteilten fünften Platz. Organisiert wurde der Wettbewerb heuer von den Vorjahressiegern FIM in Augsburg. Und die machten ihren Job auch wirklich gut, sodass genug Getränke, Essen (die Ikeabox mit über 30 kg Nudelsalat wird mit Sicherheit in die Elitecup-Geschichte eingehen) und Sanitäter vorhanden waren. Da konnte sogar das Wetter nicht anders, als gute Miene zu machen, und im Gegensatz zur Vorhersage die unwetterartigen Regenfälle bis zum Finale abends herauszuzögern.

Insgesamt traten diesmal 14 Mannschaften in vier Gruppen an, wie immer in Spielen à 15 min mit relativ langen Pausen dazwischen. Und BGCE hatte im Gegensatz zu vergangenen Jahren diesmal nicht allzuviel Losglück, denn unsere Vierergruppe bestand neben den “Obstlern” (Osteuropastudien) aus CDTM 2 sowie der ersten Mannschaft von FIM (zur Erinnerung: DER VORJAHRESSIEGER). Also ein kniffliges Unterfangen, mindestens zwei andere Mannschaften auszuschalten.

Dementsprechend hochmotiviert ging unser recht stark aufgestelltes Team an den Start und schaffte die Sensation, ungeschlagen weiterzukommen mit einem 2:0 gegen die “Obstler”, 1:0 gegen CDTM 2 und 1:0 gegen FIM 1. Die einzige Mannschaft mit 3 Vorrundenspielen, die alle Spiele gewinnen konnte! Mit einem verdienten Sieg gegen den Vorjahresturniergewinner! Wenn nach der Vorrunde Schluss gewesen wäre, wäre BGCE somit als Sieger hervorgegangen. Leider war für uns nach der Vorrunde auch Schluss: nach fast zweistündiger Pause konnte im Spiel gegen die Software Engineering Alumni beim 0:2 nicht mehr viel entgegengesetzt werden, die Körner waren verbraucht. Aber immerhin, der fünfte Platz vom Vorjahr konnte bestätigt werden ☺. Und das alles nur um den Preis von Erschöpfung, Muskelkater



Abbildung 19: Das BGCE-Team von 2016 (v.l.n.r.u.v.h.n.v.): Jürgen Bräckle, Christoph Riesinger, Christian Robl, Michael Rippl, Teamchef Benjamin Uekermann, Anna Rehr, Alfredo Parra Hinojosa, Tobias Neckel, Georgios Pavlidis und Steffen Seckler.

und einem Fall von leichtem Nasenbluten. Weniger glimpflich lief es bei anderen Mannschaften, denn es gab insgesamt einige Verletzte. Das “Highlight” bildete ein ausgeschlagener Zahn des Koordinators von TMP (Theoretische und Mathematische Physik), der noch eine ganze Zeit bis zur zeitweisen Einlieferung ins Krankenhaus im Knie des Gegenspielers steckte.

Erwähnenswert sind noch die englische Aussprache des Stadionsprechers, der zwar Global Change Ecology (GCE) korrekt herausbekam (“dschi-sie-ieh”), bei BGCE aber als running gag stets scheiterte (“dschi-sie-aih”). Ach ja, und einen Sieger gab es natürlich auch noch: Bei unwetterartigen Regenfällen konnte TMP das Sieben-Meter-Schießen am Ende knapp für sich entscheiden. Wir gratulieren den Siegern und behalten im Kopf: Wenn das

die theoretischen Physiker schaffen können, dann können—ja müssen—wir das auch hinbekommen! Daher gilt es jetzt also, gleich die Vorbereitung fürs nächste Jahr in Angriff zu nehmen. Vielleicht können wir uns da ja bei der anstehenden Europameisterschaft ein paar Spielzüge und etwas körperliche Fitness anschauen. Wir freuen uns auf jeden Fall auf den Elitecup 2017 in München.



Abbildung 20: Die Spieler bei der unerläßlichen Regeneration.

T. Neckel, C. Riesinger

SPPEXA News

SPPEXA@SIAM PP

Auf der SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (12.-15. April, Paris) war auch SPPEXA stark vertreten. Für die Statistiker: ca. 5% der SIAM-PP Teilnehmer kamen aus dem Kreis der SPPEXA-Projekte. Beiträge umfassten unter anderem die Minisymposia *Extreme Scale Solvers for Coupled Problems*, *Parallel Programming Frameworks* und *Nonlinear Preconditioning* sowie einen Ausstellungsstand zum Schwerpunktprogramm.

SPPEXA Symposium Proceedings

Die zum Abschluss der ersten Projektphase und im Rahmen des SPPEXA Symposiums entstandenen Proceedings sind auf der Zielgeraden zur Publikation. Das Buch aus der Springer-Reihe *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* wird 25 Beiträge—23 Beiträge stammen aus SPPEXA-Projekten—umfassen und voraussichtlich im Sommer erscheinen.

Ankündigung: Doctoral Retreat

Von 5.-9. September 2016 findet das alljährliche SPPEXA Doctoral Retreat statt. Dieses Mal schlägt es die Teilnehmer ins in der zweiten SPPEXA-Phase neu dazu gewonnene Partnerland Frankreich nach Oberehnheim nahe Strasbourg. Im Mittelpunkt des Retreats steht *Accelerator Computing*. Tutorials zu Akzeleratorarchitekturen, insbesondere zu GPUs und Xeon Phi-Akzeleratoren, werden angeboten. Abgerundet wird das Programm durch Hands-On-Übungen auf entsprechenden Akzeleratoren.

P. Neumann

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

C. Kowitz, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

www: <http://www5.in.tum.de/quartl>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **15.09.2016**

* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: $1/4$ Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)