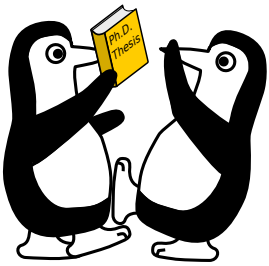
Quartl

1/2017
81. Ausgabe

Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	5
Tensors for Dummies	7
Neue Systeme am LRZ	12
Meggie: Ausbau der HPC-Kapazitäten am RRZE	14
The SIAM CSE Conference	15
6th BGCE Student Paper Prize	17
TUM's IGSSE Hosts "I^4"Workshop	20
SPPEXA News: Konferenzen zum Sommerbeginn 2017	22
Notiz*Notiz*Notiz	23

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

KONWIHR

bgce

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

Liebe Leserinnen und Leser, wissen Sie, was Paranymphen oder Paranimfen sind? Ich will Ihre klasssische Bildung nicht infrage stellen, aber da dürfte das Eis doch vereinzelt dünner werden. Daher schnell bei Wikipedia nachgeschaut (den nachfolgend zitierten Text muss man sich natürlich korrekt genderisiert vorstellen ...):

Paranimfen sind (in den Niederlanden) die Begleiter eines Doktoranden (Promovenden) während der Verteidigung seiner Doktorarbeit. Der Doktorand wird meist durch zwei Paranimfen (griechisch: Zeugen) begleitet. Sie haben vor allem eine zeremonielle Aufgabe, obwohl sie ursprünglich dazu da waren, die Doktorarbeit zu verteidigen, falls der Doktorand selbst nicht dazu in der Lage wäre (zum Beispiel wegen Krankheit oder aufgrund eines Unfalls), oder wenn der Promovend zur Beantwortung einer Frage Rücksprache halten will (Anm. der Redaktion: also gewissermaßen der Vorläufer des Telefon-Jokers?). In der Antike, als es bei akademischen Streitgesprächen bei einer Promotion zum Teil heiß her ging und die Gemüter sich erhitzten, dienten die Paranimfen als Leibwächter. Es war daher sehr vernünftig, sich als Promovend durch zwei stämmige Kerle begleiten zu lassen. In der heutigen akademischen Praxis, bei der es selten zu Handgemengen kommt, ist die Paranimf oft ein Familienmitglied, Freund(in) oder ein Studienkollege des Promovenden und muss nicht notwendigerweise über das Fachgebiet der Doktorarbeit Bescheid wissen. Es handelt sich daher um eine ehrenvolle Aufgabe, ebenso wie bei Trauzeugen. Es wird erwartet, dass sich die Paranimfen ebenso formell kleiden wie der Promovend. In modernen Zeiten haben die Paranimfen eine zusätzliche Aufgabe bekommen. In den Niederlanden ist es Tradition, die Promotionsfeier am gleichen Tag (Abend) zu feiern wie die Zeremonie (Nachmittag). Um den Doktoranden von der Organisation der Party zu entlasten, übernehmen die Paranimfen diese Aufgabe, inklusive des Versands der Einladungen. (Ende des Zitats)

Wer jetzt glaubt, das werde ja doch heute vielleicht nicht mehr so praktiziert, der irrt gewaltig. Die TU Delft z.B. kann ein fein herausgeputztes Dokument vorweisen namens "The Doctoral Defence Ceremony - Guidelines for members of the Doctoral Committee."

Und da steht dann eingangs Folgendes:
"Dear member of the Doctoral Committee, ... Crucial procedural requirements for your particpation in the Committee are (1) your written statement indicating your assessment ..., (2) your timely presence ..., (3) the dress code laid down in the protocol ...", und, last but not least: *(4) During the ceremony the committee members are required to address the chairman and PhD candidate in Dutch. The chairman: Mijnheer/mevrouw de Rector; the PhD candidate: Waarde promovendus/promovenda.* Also (1) und (2) sind ja nicht wirklich überraschend, aber (3) weckt doch die Neugier auf besagtes Protokoll, und (4) hat dann schon Slapstick-Züge.

Also auf zum Protokoll – in Artikel 17 (Awarding of the degree of Doctor) ist nach Absatz 17.5 eine längere Passage zum Thema Dresscode zu finden, die man sich einfach in voller Länge auf der Zunge zergehen lassen muss. Also machen wir das doch einfach:
1. During the doctoral defence ceremony, the chairperson, the promotor, the other members of the committee as well as the candidate and any paranymphs, are to dress as follows, as prescribed by protocol.

a) *Male professors are to wear the ceremonial dress associated with the academic traditions relating to doctoral defence ceremonies at the institution that they belong to (cap and gown), or wear a gown and other paraphernalia leant by TU Delft. In such cases, they are also to wear a dark-coloured suit, a white shirt, a grey tie, and black shoes.*

b) *Female professors are to wear a cap and gown, a white blouse, a black, dark blue or dark grey suit and black shoes.*

c) *Delft professors are to wear a sash over their gowns and the chairperson of the doctoral committee is to wear the chain of office of the Rector Magnificus.*

d) *Other members of the committee are to wear a black morning coat with a white shirt, a greywaistcoat and a grey tie; for women, a whiteblouse, a black, dark blue or dark grey suit and black shoes.*

e) The doctoral candidate and male paranymphs are to wear a white tie suit with a white waistcoat and white bow tie; female doctoral candidates and paranymphs are to wear matching suitable attire consisting of a white blouse, a black, dark blue or dark grey suit, and black shoes.

f) The beadle: dark-coloured suit, white shirt, grey tie, black shoes, cap and gown with sash, the beadle's staff. Ladies: appropriate matching suit.

2. Professors are to wear their cap while examining and after the resumption of the doctoral defence ceremony; the chairperson is to wear his cap for the duration of the ceremony. 3. The beadle will ensure that the clothing is worn appropriately and in a manner that befits the dignity of an academic ceremony.

Also ehrlich: Tradition ist ja etwas Schönes, und akademische Tradition ist fraglos etwas Ehr- und Erhaltenswürdiges. Aber das ist doch schon hart an den Wahnsinn gebaut. Fehlt nur noch, dass sie sich zur Unterwäsche auslassen. Es juckt mich von den Haar- bis in die Zehenspitzen, dort mal in kurzer Hose aufzuschlagen und den guten Mijnheer de Rector samt seiner waarde promovenda, seinem Büttel und der ganzen verkleideten Bagage etwas aufzumischen.

Ich könnte noch mehr aus diesem Prachtstück zitieren – ich kann mich an kaum eine ergiebigere Sottisenquelle als dieses Büchlein erinnern. Aber schließlich sollen ja auch noch andere Dinge im Quartl zur Sprache kommen...

Damit also genug der einleitenden Worte – die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen Frohe Ostern! Und zunächst wünschen wir vor allem viel Spaß mit dieser neuen Ausgabe Ihres Quartls!

Und – seien Sie allzeit würdig gekleidet!

Hans-Joachim Bungartz

Iterationsschleife

N=22
7. März 2017

„Die Unklarheit erst erlaubt es dem Wähler, seine eigenen Hoffnungen, Ängste oder auch Vorurteile, auf die Blase zu projizieren und sich damit in dieser zu spiegeln und mit dieser zu identifizieren. Und je schillernder und unfassbarer das Personal der Blase bleibt, umso höher die Chance, dass diese Projektionsfähigkeit der Blase nicht durch die Realität zerstört wird.“ [a]

Auf die Gefahr hin, selbstreferentiell zu werden greifen wir auf N=21 zurück: Nicht um Konvergenz vorzutäuschen – der Zweck der Iterationsschleife ist natürlich das Erreichen einer Konvergenz, wobei die Frage nach dem perfekten Statement im Vordergrund steht; oder wie es Faust formulieren würde die Antwort auf die Frage was die Welt im innersten zusammenhält [b] – sondern weil die Realität die Iterationsschleife nebenläufig begleitet, und manchmal die Realität der Iterationsschleife hinterherzuhinken scheint, während sie mitunter dieser vorauszueilen scheint. So hechelt also der Autor der Realität mitunter hinterher und freut sich dann wie ein Igel, wenn die Realität keuchend wie der Hase um die Ecke kommt.

Unfassbar war jener Kandidat, der mit dem Slogan „ja wir schaffen das“[c] die Präsidentschaft eroberte, und was an Hoffnungen auf ihn projiziert wurde, war nicht übertragbar auf seine Außenministerin, die auch nicht mehr zu sagen hatte als „gemeinsam stärker“[d] und auf die nichts mehr zu projizieren war - weil sie schon zu lange die Bühne der Politik beherrschte und alle wussten, wofür sie steht.

---

[a] Iterationsschleife N=21 25.11.2016 erschienen in Quartl 4/2016, 80

[b] An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Frage falsch gestellt ist – was dem historisch-philosophisch-theologischen Hintergrund des deutschen Autors (Johann Wolfgang von Goethe) geschuldet zu sein scheint.

[c] Wahlkampfslogan von Barack Obama `https://de.wikipedia.org/wiki/Yes_We_Can`

[d] Wahlkampfslogan von Hillary Clinton `https://en.wikipedia.org/wiki/Hillary_Clinton_presidential_campaign,_2016`

Ähnlich scheint es einer anderen Frau zu gehen, die mit dem Satz „wir schaffen das“[a] deutsche Politik macht. Auch Sie ist keine Unbekannte mehr und Projektionen und Hoffnungen auf sie daher von Wählerinnen und Wählern nicht mehr zu bekommen.
Ihr Gegenkandidat kann dagegen mit dem Slogan „wir schaffen das gemeinsam“[b] Punkte sammeln und gilt schon beinahe als sicherer nächster deutscher Kanzler.

Als Wissenschaftler ist man versucht zu analysieren. Liegt es am Wort „gemeinsam“? Aber wieso hätte dann der Slogan „gemeinsam stärker“ nicht gewirkt? Liegt es am „schaffen“? Aber wieso liegt dann der Slogan „wir schaffen das“ wie Blei in den politischen Verkaufsregalen – oder wirkt er nur auf Englisch oder in Verbindung mit „gemeinsam“? Am Inhalt (der ja kein wirklich großartiger ist, wenn wir überhaupt von Inhalt in diesem Zusammenhang sprechen können) liegt es offenbar nicht. Die Blase muss schillern, die Projektion muss funktionieren und damit die Hoffnung ermöglichen. Gute Zeiten für Blasen und schlechte Zeiten für die Realität.

Und damit „Basta“ – oder wie es einmal Eddie Grant sagte „gimmi hope joanna ...“ [c]

M. Resch

[a] Schlüsselaussage von Angela Merkel in der Flüchtlingskrise `http://www.zeit.de/2015/38/angela-merkel-fluechtlinge-krisenkanzlerin/seite-4`

[b] Wahlkampfaussage von Martin Schulz `http://www.sueddeutsche.de/politik/kanzlerkandidat-schulz-und-die-spd-wir-schaffen-das-1.3348832`

[c] Eddie Grant, „gimmi hope joanna“, 1978

Tensors for Dummies

Unter einem Tensor versteht man in Verallgemeinerung von Vektoren und Matrizen ein Objekt, das von mehreren Indizes abhängt, also $T = t_{i_1 \ldots i_k}$. Die einzelnen Indizes $i_j, j = 1, ..., k$ laufen dabei jeweils von 1 bis n_j für $j = 1, ..., k$. Für $k = 1$ ergeben sich so Vektoren, und für $k = 2$ Matrizen.

Tensormethoden haben in letzter Zeit stark an Bedeutung gewonnen, da es gerade für große hochdimensionale Probleme nicht viele Alternativen zur kompakten Darstellung und effizienten Berechnung gibt. Betrachtet man z.B. eine PDE mit variablen Parametern, für die auch Lösungen gesucht werden, so ergeben sich automatisch hochdimensionale Objekte, bzw. Tensoren. Auch in der Quantensimulation spielen Tensoren eine große Rolle; dabei entspricht dann jeder Index einer physikalischen Größe, z.B. dem Spin eines Teilchens; bei entsprechend vielen Größen entstehen so auch automatisch hochdimensionale Tensoren. Auch Bilder einer Videosequenz lassen sich unmittelbar als 3D-Tensor auffassen.

Oft werden als erste Verallgemeinerung von Matrizen daher drei-füßige Tensoren betrachtet, die einem Quader entsprechen. Dabei sind dann die Dimensionen in jedem Index n_j oft sehr groß. Auf der anderen Seite werden z.B. in der Physik, auch Tensoren benutzt, die sehr viele Füße (Indizes) haben, aber in jedem Index nur 2 oder 3 Stellen, $n_j = 2$ oder 3 - entsprechend z.B. dem Spin. Tensortechniken können aber auch dazu verwendet werden, Vektoren oder Matrizen kompakt darzustellen oder zu approximieren. Dazu schreibt man den ursprünglichen Index i in Binärdarstellung $i = i_1 ... i_q$ und verwandelt dadurch den Vektor in einen hochdimensionalen Tensor, der in jedem Index aber nur 2 Stellen hat, $i_j = 0$ oder 1.

Die wichtigste elementare Tensoroperation ist die Kontraktion, bzw. das über einen Index Aufsummieren. Wie bei der Matrix-Vektor-Multiplikation $(A_{i,j}) \cdot (x_j) = (y_i)$ summiert man in A und x über den gemeinsamen Index j auf, und übrig bleibt ein Vektor in i.

Genauso erhält man für ein Tensor-mal-Vektor Produkt

$$(T_{i_1 \ldots i_r \ldots i_k}) \cdot (x_{i_r}) = (B_{i_1 \ldots i_{r-1} i_{r+1} \ldots i_k})$$

einen neuen verkürzten Tensor B. So kontrahiert man bei einem Tensor-Matrix-Produkt über den gemeinsamen Index, und erhält als Ergebnis einen neuen Tensor, bei dem der gemeinsame Index ersetzt ist durch den zweiten Index der Matrix. Schreibweise dafür ist

$$T(i_1, \ldots i_r, \ldots, i_k) \times^r A(i_r, i'_r) = B(i_1, \ldots i'_r, \ldots, i_k) \ .$$

Typische Fragestellungen sind nun die Möglichkeiten der Kompression: Wie kann man hochdimensionale Objekte kompakt approximieren. Dabei muss die Kompression weit über das hinausgehen, was z.B. Dünnbesetztheit oder Sparse Grid-Methoden erlauben. Aus dem Matrixfall kennt man solche Verfahren (QR, SVD, Diagonalisierung, low-rank-approximation). Leider stellt sich dabei heraus, dass die schönen Eigenschaften, die bei Matrizen gelten, für Tensoren nicht erhalten bleiben. Schon die Definition des Rangs eines Tensors ist nicht befriedigend oder eindeutig. So ist ein Tensor $T_{i,j,k} = b_i c_j d_k$ oder $T = b \circ c \circ d$ ein Rang-1 Tensor. Der Rang eines Tensors ist dann die minimale Anzahl an Rang-1 Termen, die nötig ist, um einen Tensor als Summe darzustellen. Unglücklicherweise ist dieser Rang numerisch instabil, so kann z.B. eine Folge von Rang-3 Tensoren gegen einen Tensor höheren Ranges konvergieren. Diese Rang-Darstellung eines Tensors entspricht der CP-Normalform (PARAFAC, Candecomp, Canonical Decomposition), und damit einer nicht-orthogonalen Transformation des Tensors auf Diagonalform - mit möglicher Weise sehr großem Rang R.

$$T_{i_1 \ldots i_k} = \sum_{j=1}^{R} a_{1,j} \circ \ldots \circ a_{k,j} \ .$$

Dabei sind die physikalischen Indizes gegeben durch $i_1, \ldots, i_k$, und j ist ein zusätzlicher Hilfsindex, mit dem über die einzelnen Rang-1 Terme summiert wird.

Da man natürlich daran interessiert ist, die bekannten und erprobten Matrixtechniken auch auf höher dimensionale Objekte anzuwenden, schreibt man einen Tensor gern als Matrix um. Dies nennt man Matrifizierung. Dazu gruppiert man die ursprünglichen Indizes in zwei Gruppen, z.B.

$$T_{(i_1 \ldots i_s);(i_{s+1} \ldots i_k)} = a_{i,j}$$

mit Superindizes i für die Zeilen und j für die Spalten. Auf die durch diese Umformung entstandene Matrix kann man dann jeweils Standardtechniken (LU, QR, SVD) anwenden. Insbesondere kann man jeweils einen Index i_j als Zeilenindex i einer Matrix auffassen, und alle anderen in einen Super-Spalten-Index j packen. Diese spezielle Matrix hat dann einen bestimmten Rang $r_j \leq n_j$ und induziert eine orthogonale Basistransformation U_j z.B. aus der SVD, durch deren Anwendung die Matrix reduziert werden kann auf die Größe des Ranges. Dies kann man nun für alle Indizes i_j machen, und damit ergibt sich insgesamt ein Vektor dieser Ränge $r_j, j = 1, \ldots k$ und entsprechend eine orthogonale Gesamt-Basistransformation des Ursprungstensors

$$B = T \times^1 U_1 \times^2 U_2 \times \ldots \times^k U_k$$

auf einen reduzierten Tensor B, wobei die jeweiligen Indizes aber nun nur bis r_j anstatt n_j laufen. Diese Transformation reduziert also die Größe des Tensors, relativ zu den Rängen der einzelnen Matrifizierungen, von n_j auf r_j, lässt aber die Anzahl k der Indizes unverändert. Je nach Art der orthogonalen Basistransformation bezeichnet man diese Umformung des Tensors als Tucker Decomposition oder Higher Order SVD (HOSVD). Hierdurch gewinnt man eine orthogonale, numerisch stabile Transformation, die aber nicht diagonalisiert und die die Gesamtzahl von ”Füßen”nicht verringert. Dadurch wächst die Anzahl der Elemente eines solchen Tensors immer noch exponentiell in k in der Form $r_1 r_2 \ldots r_k \geq 2^k$.

So sind diese beiden Transformationen CP und Tucker nicht befriedigend, insbesondere nicht für großes k. Daher haben sich weitere Matrifizierungen, orthogonale Basistransformationen und Rang-Definitionen entwickelt, die versuchen, diesen Mangel zu beheben. Dabei versucht man, den gegebenen

Tensor zu faktorisieren als Produkt von Tensoren mit nur 2-3 Indizes; dadurch läßt sich z.B. der Speicheraufwand auf polynomiellen Aufwand verringern.

Im Tensor Train oder Matrix Product State Verfahren benutzt man die Matrifizierungen der Sequenz

$$T_{i_1;(i_2...i_k)}\ ,\ T_{(i_1,i_2);(i_3...i_k)},\cdots,T_{(i_1...i_j);(i_{j+1}...i_k)},\cdots,T_{(i_1...i_{k-1});i_k}\ .$$

Dies erlaubt dann eine Darstellung der Einträge des Tensors als Matrixprodukt in der Form

$$T_{i_1...i_k} = a^T_{1,i_1} A_{2,i_2}...A_{k-1,i_{k-1}} a_{k,i_k}$$

mit Vektoren a_{1,i_1} und a_{k,i_k}, und $D_j \times D_{j+1}$ Matrizen A_{j,i_j}, $j = 2, ..., k-1$, $i_j = 1, ..., n_j$. Die Ränge dieser Matrizen entsprechen dann wieder den Rängen in der Sequenz der Matrifizierungen. Damit reduziert sich der Speicheraufwand zu D^2kn, wenn man unter D und n die entsprechenden Maxima der D_j und n_j versteht. Das heißt aber auch, dass man kleine D_j nur erwarten kann, wenn die Ränge der Matrifizierungen klein bleiben können. Es lässt sich zeigen, dass viele hochdimensionale Tensoren sich auf diese Art und Weise effizient komprimieren lassen. Diese Methode wurde zunächst von den Quantenphysikern entwickelt, wurde aber inzwischen auch von den Mathematikern „neu“ erfunden und weiter analysiert.

Insbesondere wurde dabei von Mathematikern auch eine hierarchische Art der Matrifizierung und Basistransformation formuliert. Dabei betrachtet man in einem ersten Schritt die Matrix $T_{(i_1...i_{k/2});(i_{k/2+1}...i_k)}$, also halbiert die Indizes in Zeile, bzw. Spalte. Entsprechend betrachtet man Matrifizierungen zu

$$T_{(i_1...i_{k/4});(i_{k/4+1}...i_k)},\cdots,T_{(i_1...i_{3k/4});(i_{3k/4+1+1}...i_k)}\ ,$$

und entsprechend mit achtel, sechzehntel usw.. Dies ergibt einen binären Baum der Matrifizierungen, und alle Matrifizierungen liefern Matrizen eines bestimmtem Rangs. Man repräsentiert dann den gegebenen Tensor durch die zwei-füßigen Tensoren in den Blättern des Baumes und durch drei-füßige Transfer-Tensoren in den inneren Knoten - von (hoffentlich) kleinem Rang.

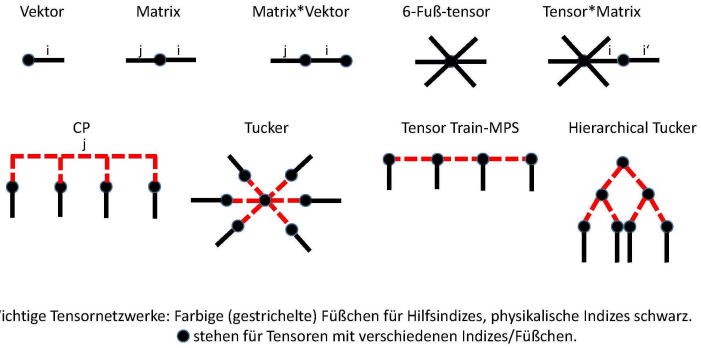


Abbildung 1: Tensornetzwerke benutzen eine graphische Veranschaulichung von Tensoren. Ziel ist es, durch eine passende Verknüpfung von nieder-dimensionalen Tensoren mit Hilfsindizes durch Produkte und Kontraktionen den ursprünglichen hochdimensionalen Tensor kompakt und effizient darzustellen oder zu approximieren.

Hierbei spricht man von hierarchischer Tucker Dekomposition (HT). Die Tensoren an den Blättern entsprechen einer Basis der Matrifizierung zu dem physiklaischen Index i_j des Blattes, und mittels der Transfer-Tensoren lassen sich Basen zu allen Matrifizierungen des Baumes effizient berechnen, so dass sich im Endeffekt auch der Ursprungstensor T an der Wurzel des binären Baumes kompakt darstellen läßt. Wichtig dabei ist natürlich wieder, dass man alle Ränge klein halten kann, ohne zu sehr an Genauigkeit einzubüßen. Welches Verfahren nun die bessere Kompression liefert, hängt davon ab, welche Matrifizierungen schon durch kleinen Rang approximierbar sind. Inzwischen gibt es auch schon viele Softwarepakete, die es erlauben, mit den verschiedenen Tensordarstellungen zu arbeiten. Die Tensor-Toolbox von MATLAB erlaubt CP und Tucker-Zerlegungen, die Tensor-Train-Toolbox von Oseledets implementiert MPS-Tensoren, und die Tensor-Toolbox von Kressner/Tobler implementiert hierarchische Tensorkompression.

Thomas Huckle

Neue Systeme am LRZ

Das Leibniz-Rechenzentrum hat zwei neue Systeme für Big Data und Machine Learning in Betrieb genommen: Teramem1 und DGX-1.

Abbildung 1: Teramem1 (oben) und DGX-1 (unten)

Teramem1 ist ein HP DL 580 Gen9 System mit vier Broadwell-Prozessoren mit insgesamt 96 Rechenkernen, das 6 Terabyte Cache-kohärenten Speicher zur Verfügung stellt. Teramem1 ist besonders für Big Data-Anwendungen interessant, die wenige Rechenkerne aber riesigen Hauptspeicher brauchen wie Genom-Analysen, die Durchforstung großer Datenbanken oder die Auswertung riesiger Datenbestände, wie sie zum Beispiel auf den großen Supercomputern am LRZ anfallen. Da Teramem1 in das Linux-Cluster des LRZ integriert ist, steht das gesamte dortige Software-Angebot zur Verfügung.

Das Machine Learning System DGX-1 ist ein „Supercomputer in a box“ mit acht hochwertigen NVIDIA-Tesla-P100-Grafikprozessoren, in denen 28.672 NVIDIA-CUDA-Recheneinheiten, verbunden über einen NVLink

Interconnect, 170 Teraflops (FP16, Half Precision) erbringen können. DGX-1 verfügt über 16 Gigabyte Speicher und besitzt einen „Host-Prozessor“ auf Intel X86-Basis mit 40 Kernen. DGX-1 kann flexibel mit Docker-Images für die jeweiligen Anwendungen bestückt werden. Besonders oft nachgefragte Softwarepakete wie TensorFlow, Theano, CNTK, Torch, Digits und Caffe sind bereits vorinstalliert.

Das Betriebsmodell ist so dynamisch wie das gesamte Forschungsgebiet. Einzelne Nutzer können das gesamte DGX-1-System exklusiv für sich im Voraus reservieren und interaktiv ihre komplexen Machine Learning-Aufgaben darauf bearbeiten, zum Beispiel riesige Neuronale Netze trainieren, die anschließend auf wesentlich weniger leistungsfähiger Hardware zur Mustererkennung eingesetzt werden können. Beide Systeme stehen allen Wissenschaftlern an bayerischen Universitäten kostenlos zur Verfügung.

Ludger Palm

Meggie: Ausbau der HPC-Kapazitäten am RRZE

Am 6. April 2017 wird das RRZE sein neuestes HPC-System ”Meggie”dem regulären Benutzerbetrieb übergeben.

Der HPC-Cluster wurde im Herbst 2016 von der Firma Megware geliefert und konnte sich in der TOP500 Liste im November 2016 mit gut 470 TF/s auf Platz 346 einreihen. Seine Rechenleistung bezieht Meggie aus mehr als 14400 Kernen, die in 720 Rechenknoten mit jeweils zwei Intel Xeon E5-2630v4 (Broadwell) Prozessoren stecken. Als Verbindungsnetzwerk kommt die Intel Omni-Path Technologie zum Einsatz, wobei auf eine blockierungsfreie ”Fat-Tree”Topologie verzichtet wurde. Mit dem gewählten Blockierungsfaktor von 1:2 steht jedoch für jede Knotenverbindung eine Bruttokapazität von mindestens 50 GBit/s zur Verfügung. Das neue System übertrifft das bisher leistungsfähigste RRZE-Cluster „Emmy“ um mehr als einen Faktor zwei bei der Spitzenleistung sowie um ca. 30% bei Kern- und Knotenzahl.
Mit Meggie kann das RRZE den Wissenschaftlern an der Friedrich-Alexander-Universität (FAU) Erlangen-Nürnberg ein qualitativ und quantitativ hochwertiges Tier-3 System für ihre Forschungsarbeiten zur Verfügung stellen. Gleichzeitig stellt es eine unverzichtbare Ausgangsbasis für die weitere Nutzung der GCS und PRACE-Systeme durch die Wissenschaftler der FAU dar.

Genutzt wurde und wird das System quer durch alle Disziplinen, wobei Schwerpunkte in den Life Sciences, Materialwissenschaften sowie Chemie und Physik aber auch in der Klimaforschung oder Methodenentwicklung liegen werden.

Gerhard Wellein

The SIAM Computational Science and Engineering Conference in Atlanta, GA

In the interval ***27.02-04.03***, the city of Atlanta, GA hosted the **CSE17**, the SIAM Conference on Computational Science and Engineering. Organized biennially, and with a committee formed by professors from universities of the USA, Germany, France, Switzerland and Sweden, this year's edition gathered almost 3000 attendees from more than 28 countries. The conference centered around the approx. 40 daily concurrent minisymposia (grouped talks of 20 min. each) spanning over 3 sessions, split by well-placed coffee and (mostly burger&Coke-based) lunch breaks. The topics covered both novel and well established solutions of important problems in science and engineering that are currently tackled by PhD students from the worldwide participating universities.

As per usual, the conference also contained minitutorials (on topics such as the Julia language, IPython and Git), invited speakers, as well as a poster category, where contributors could present their research in person in one of the two evening sessions. And, of course, the minisymposterium category (groups of different posters centered around a main theme) introduced at the 2015 edition was also well represented.

Our chair was present in Atlanta with a group of 7 contributors (minisymposium talks and posters), headed by Prof. Hans-Joachim Bungartz and Prof. Michael Bader. The group was informally extended by the attendance of 3 of our PhD alumni currently doing research in the US: Dr. Alexander Breuer (Univ. of California, San Diego), Dr. Benjamin Peherstorfer (Univ. of Wisconsin-Madison), and Dr. Alexander Heinecke (Intel Parallel Computing Lab, Santa Clara). Our group did not return on the (long) flight back empty-handed: Paul Cristian Sârbu was awarded one of the four "Best Poster" prizes for "Adaptive Sparse Grids Interpolation Techniques for Multilevel Stochastic Collocation in Fluid-Structure Interaction Problems", based on work co-authored with fellow PhD candidate Ionut-Gabriel Farcas, Dr. Benjamin Uekermann, Dr. Tobias Neckel, and Prof. Hans-Joachim Bungartz. This is the second consecutive award following the one of alumnus Dr. Christoph Kowitz at **CSE15** in Salt Lake City, UT, marking what could very well become a tradition in our participation at this event.

Paul Cristian Sârbu

6th BGCE Student Paper Prize

Nach 2007, 2009, 2011, 2013 und 2015 hat der ENB Elitestudiengang Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) zum sechsten Mal den BGCE Student Paper Prize auf der SIAM Conference on Computational Science and Engineering verliehen. Aus diversen Einreichungen in Form von vierseitigen extended abstracts wurden die besten acht internationalen Doktoranden und Studierenden als Finalisten des Preises ausgewählt, um ihre Beiträge auf der SIAM CSE 2017 in Atlanta, Georgia, zu präsentieren.

Mit 17 Beiträgen von 14 Universitäten und Forschungseinrichtungen aus acht Ländern stellt der BGCE-Preis nach wie vor ein überaus erfolgreiches Konzept mit hervorragender Außenwirkung für die BGCE und das ENB dar. Zahlreiche anerkannte Adressen und Arbeitsgruppen (natürlich unter Ausschluss der auslobenden Universitäten FAU und TUM) finden sich unter den Beiträgen. Neben der reinen Menge war auch diesmal wieder die Qualität sehr hoch, so dass die Auswahl der folgenden acht Finalbeiträge nicht einfach war:

- Xuping Xie (Virginia Tech): Large Eddy Simulation Reduced Order Models
- Peiyao Luo (Delft University of Technology): Monolithic Multigrid Method for the Coupled Stokes Flow and Deformable Porous Medium System
- Niccolo Dal Santo (EPFL): Multi space reduced basis preconditioners for large-scale parametrized PDEs
- Elizabeth Qian (MIT): Multifidelity Global Sensitivity Analysis
- Shuo Wang (Washington University): An iterative Method for Optimal Control of Bilinear Ensemble Systems
- Robert Gantner (ETH): Quasi-Monte Carlo Uncertainty Quantification for Partial Differential Equations with Random Input

- Gaurav Saxena (University of Leeds): A Quasi-Cache-Aware Model for Optimal Domain Partitioning in Parallel Geometric Multigrid

- Kenneth Sockwell (Florida State University): A Novel Normal Inclusion Modeling Strategy For Vortex Pinning in Two-Band, High-Temperature Superconductors

Die internationale Jury bestehend aus Hans-Joachim Bungartz (TU München), Omar Ghattas (University of Texas at Austin), Esmond Ng (Lawrence Berkeley National Laboratory), Michael Bader (TU München), Barbara Wohlmuth (TU München) und Carol Woodward (Lawrence Livermore National Laboratory) bewerteten die Beiträge - herzlichen Dank auch an dieser Stelle nochmals. Nach langer und intensiver Beratung wurde die diesmal überaus schwierige Entscheidung gefällt und der Gewinner ausgewählt:
Wir gratulieren Robert Gantner herzlich zum BGCE-Preis 2017!

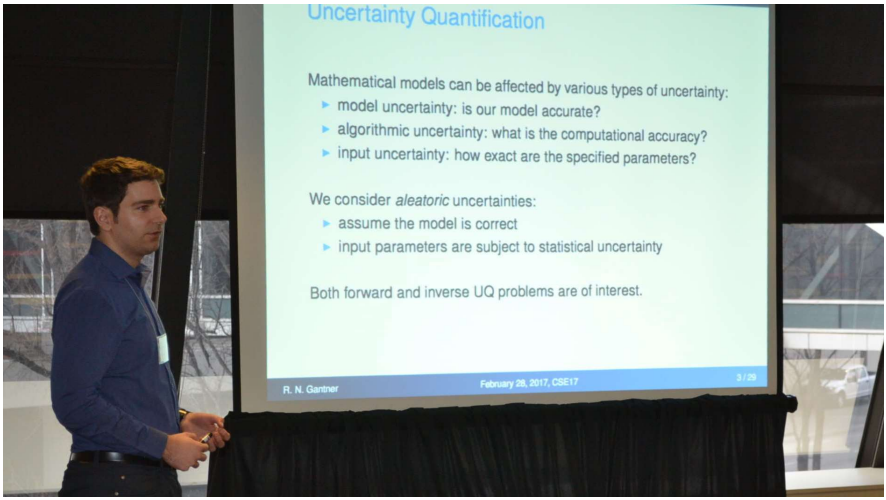


Abbildung 1: Preisträger Robert Gantner beim Vortrag

Der Preis besteht aus einem einwöchigen Besuch an der TUM und der FAU Erlangen, im Rahmen dessen der Preisträger sowohl Gelegenheit haben wird, die beiden Universitäten kennenzulernen, als auch seine eigene Forschungsarbeit in jeweils einem Vortrag en détail vorzustellen.
Wir freuen uns sehr auf den anstehenden Besuch von Robert Gantner mit interessanten Diskussionen im Sommer.

Michael Rippl

IGSSE Hosts "I^4" Workshop

IGSSE, TUM's International Graduate School in Science and Engineering, was host of a two-day workshop during January 21 and 22, 2017, titled "I^4: ICES, IGGSE, International and Interdisciplinary Workshop".

The meeting, held at the TUM-IAS Building and Villa Kunterbunt, was attended by faculty members of ICES, the Institute of Computational Engineering and Sciences of the University of Texas at Austin, three more UT-Austin departments, and TUM/IGSSE faculty, and was designed to bring together academics from TUM and UT-Austin to discuss and develop plans for collaborative research, student exchange, and graduate-level teaching between the two institutions. The workshop represented an initial face-to-face meeting launched in connection with an "MOU" — a "Memorandum of Understanding" – between TUM and UT-Austin that laid the groundwork for collaboration in the area of Computational Science and Engineering.
Prof. B. Wohlmuth, Director of the IGSSE, had initiated the MOU, which then Prof. H.-J. Bungartz, TUM Graduate Dean, put on track while he spent a couple of days last summer in Austin.

Prof. J. T. Oden, Director of ICES attended the workshop to present the wide spectrum of research areas at ICES and to show potential frameworks for an active collaborative scientific exchange. Prof. Ernst Rank, Director of TUM's Institute for Advanced Study, gave an overview of already existing collaborations between TUM and UT-Austin within the framework of the Hans Fisher fellowship programme. The meeting was attended by twenty ICES and TUM faculty members.

TUM President Prof. Wolfgang A. Herrmann spoke at the meeting on January 22, shared his vision for interdisciplinary academic research and graduate studies, and voiced his enthusiastic support for the joint IGSSE and ICES work under discussion at the workshop. A wide spectrum of topics including, in particular, expanding ongoing collaborations between TUM and UT-Austin faculty, visiting positions for faculty and students at both institutions, postdoctoral fellowships, organizations of scientific workshops and symposia, and the organization of larger, more comprehensive technical conferences between the partner on a periodic basis. The meeting closed

Figure 1: Participants of the I^4-Workshop

Figure 2: ICES, IGGSE, International and Interdisciplinary I^4Workshop

with plans for a second workshop to be held in Austin in 2018.

A highlight of the meeting was that workshop participants attended a concert performed by the Academic Orchestra Munich at the Ludwig-Maximilians-University at Munich (one workshop participant on the stage, the others in the audience ...).

Barbara Wohlmuth

SPPEXA News – Konferenzen zum Sommerbeginn 2017

Neben anderen Aktivitäten wird SPPEXA 2017 auf der ISC und der PASC vertreten sein.

SPPEXA@ISC – 18. bis 22. Juni 2017 in Frankfurt
Zahlreiche Projekte von SPPEXA sind von Montag bis Mittwoch in der *Project Poster Session* vertreten. Während der Kaffeepausen Dienstag und Mittwoch Nachmittag gibt es die Möglichkeit die Autoren vor deren Poster zu treffen. Zusätzlich wird der wissenschaftliche Nachwuchs im Rahmen des *PhD Forums* am Montag von SPPEXA finanziell unterstützt. Kurze aufeinanderfolgende Vorträge geben einen ersten Überblick über die Arbeit der Doktoranden, während Details in einer Posteraustellung präsentiert werden.

SPPEXA@PASC – 26. bis 28. Juni 2017 in Lugano
Zwei Minisymposia vertreten SPPEXA auf der diesjährigen PASC. *Computing bulks of inner Eigenpairs of large sparse matrices: from applications and algorithms to performance and software engineering* organisiert durch das Projekt ESSEX und *Exa-scale solver for application-driven science* organisiert durch die Projekte TERRA-NEO und EXA-Dune. Zusätzlich wird SPPEXA während der gesamten Konferenz durch einen Austellungsstand vertreten sein.

Wir bedanken uns bei allen Organisatoren und Helfern.

Benjamin Uekermann

* Notiz * Notiz * Notiz *

1967-2017: 50 Jahre Informatik München

Am 12. Mai 2017 begeht die TUM-Informatik mit ihren Partnereinrichtungen Universität der Bundeswehr München und der Ludwig-Maximilians Universität dieses Jubiläum gemeinsam im Rahmen einer Festveranstaltung in der Magistrale und in Hörsaal 1 mit geladenen Gästen aus Forschung, Politik und Wirtschaft. Am selben Tag gibt es eine Forschungsausstellung in der Magistrale mit diversen internen und externen Ausstellern sowie Führungen im LRZ und im Deutschen Museum.
Die Programmpunkte und weitere Details sind zu finden unter `http://www.in.tum.de/forschung/50-jahre-informatik-muenchen.html`.

2018 wird die TUM 150 Jahre

Im kommenden Jahr wird die TUM 150 Jahre alt. Der Reigen der Feierlichkeiten wird vom Advent 2017 bis zum Advent 2018 gehen und u.a. einen Festakt, eine Sonderaufführung von Wagners Meistersingern sowie ein Benefizspiel des FC Bayern umfassen.

Quartl* - Impressum

Herausgeber:
Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde
Redaktion:
S. Herrmann, Dr. S. Zimmer
Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München
Tel./Fax: ++49-89-289 18611 / 18607
e-mail: herrmasa@in.tum.de, **www:** http://www5.in.tum.de/quartl
Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.06.2017**

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