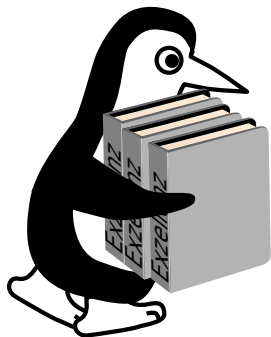


Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	5
Auf dem Weg zu einem virtuellen Fusionsplasma	7
Wechsel im LRZ-Direktorium	12
Machine Learning trying to make friends with Scientific High-performance Computing	14
SPPEXA 2019 - Annual Plenary Meeting & more	19
Neuerscheinung: <i>Bits & Bugs</i>	23
SIAM CSE 2019	26
7. BGCE Student Paper Prize at the SIAM CSE 2019	28
Ankündigung: Ferienakademie 2019	32
Notiz*Notiz*Notiz	34

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

Die letzten Anwärtinnen und Anwärter auf Exzellenz kämpfen wohl noch, aber so langsam kehrt doch etwas Ruhe ein in diesen unseren exzellenten Landen, schwingt das gestresste universitäre Deutschland wieder in den Normalzustand ein. Und das ist auch bitter nötig nach diesen inzwischen fast drei Jahren des kollektiven Sich-Ausrichtens.

Erinnern wir uns: Am 11. Juli 2016 hatte die DFG ihre „Allgemeine Information Nr. 43“ veröffentlicht, unter dem Titel „Programmankündigung: Exzellenzstrategie des Bundes und der Länder – Förderlinie Exzellenzcluster“. Damit lief offiziell an, was Bund und Länder in einer Verwaltungsvereinbarung kurz zuvor beschlossen hatten. Spätestens seit Vorliegen des Berichts der so genannten Imboden-Kommission im Januar 2016, der zum einen die bisherige Exzellenz-Initiative bewertet und zum anderen einen Vorschlag für eine Neuauflage gemacht hatte, war über eben diese Neuauflage diskutiert und spekuliert worden. Doch erst im Juli kam der Startschuss, und gleich ging's landauf landab ans Werkeln, bzw. das natürlich schon vorher begonnene Werkeln wurde intensiviert und konkretisiert – große Dinge werfen ja bekanntlich ihre Schatten voraus. Im Dezember 2016 wurden dann Absichtserklärungen eingesammelt, im Frühjahr 2017 folgten Skizzen. Im September 2017 wurden schließlich die knapp 90 (vorerst) Glücklichen bekannt gegeben, die zur Einreichung eines Vollantrags aufgefordert wurden. Nachdem Frust und Jubel verarbeitet waren und der erste Akt Geschichte war, ging's umgehend erneut ans Werkeln – nicht mehr ganz landauf landab, aber doch noch an vielen Hochschulen im Land.

Parallel zum nun beginnenden zweiten Akt zeichnete sich am Horizont, insbesondere dem der Hochschulleitungen, bereits der dritte Akt ab. Wer keine zwei Cluster-Pferdchen mehr im Rennen hatte, war aus dem dritten Akt, der Förderlinie „Zukunftskonzepte“, bereits raus, bevor dieser überhaupt begonnen hatte. Doch zunächst galt die volle Konzentration dem zweiten Akt: Einreichung der Cluster-Vollanträge früh in 2018, Begutachtung im Frühjahr und Frühsommer, Verkündung der Ergebnisse im September 2018. Viele TUM'lerinnen und TUM'ler erreichte die entsprechende Pressemitteilung im Münchner Nationaltheater, unmittelbar vor Beginn der Aufführung von

Richard Wagners „Meistersingern“ aus Anlass des 150. Geburtstags der TU München. Richtig, da war noch was, Jubeljahr war neben aller Exzellenz auch noch. Wie im September zuvor führte die Liste der Gewinner zu Frust hier und Jubel da, und wieder war auch der dritte Akt schon fest im Blick, war nun doch final klar, welche rund 20 Unis oder Konsortien ihr Zukunftskonzept einreichen und sich damit Hoffnungen auf das Label einer „Elite-Uni“ oder „Exzellenz-Uni“ oder was auch immer machen durften. Auch die Zuständigkeit wechselte: Fand der Cluster-Wettbewerb unter der Ägide der DFG statt, so lag bzw. liegt die Suche nach den besten Zukunftskonzepten beim Wissenschaftsrat.

An allen Standorten, die immer noch im Rennen waren, brach er nun also vehement los, der dritte Akt. Beziehungsweise kam er auf die Zielgerade – denn bis zur Abgabe der Zukunftskonzepte Anfang Dezember waren schließlich nur noch ein paar Wochen. Das meiste war in diversen Arbeitsgruppen längst erdacht und in Vorversionen zu Papier gebracht sowie von den Leitungen und ihren Stäben in präsentable Form gegossen worden. Die verbleibenden Wochen dienten also vor allem dem finalen Feinschliff vor dem großen Showdown – den Begehungen vor Ort. Diese waren bzw. sind also das Vergnügen der deutschen Wissenschaft im ersten Quartal 2019. Und es ging bei deren Vorbereitung noch eine Stufe generalstabsmäßiger zu (ja, ja, es kann immer noch eins draufgesattelt werden, auch wenn man dies nicht für möglich hält ...). Schließlich sollte nichts, aber auch gar nichts dem Zufall überlassen werden. Unzählige Briefings und Probeläufe jagten einander – war zuvor schon viel liegen geblieben, so blieb jetzt fast alles liegen, das nicht unmittelbar mit dem Exzellenzspektakel zu tun hatte.

Jetzt also erst mal durchatmen, bevor im Juli dann die Entscheidungen gefällt und verkündet werden. Und wieder wird Frustbewältigung an den einen Orten anstehen, während anderswo gejubelt wird. Wobei sich in den Jubel dann auch das eine oder andere beklemmende Gefühl mischen dürfte, dass den Siegern nun die nicht ganz triviale Aufgabe bevorstehen wird, die Dinge alle umzusetzen, die man auf dem Weg ins Ziel so einfach versprochen hat. Da mag dem einen oder der anderen schon der Gedanke an Pyrrhus-Sieg oder Danaer-Geschenk kommen. Wie dem auch sei: Drei Jahre wird die Exzellenz im Hochsommer die deutsche Uni-Landschaft im Griff gehabt

haben – netto, ohne die ja schon länger laufenden Planungen. Für zunächst sieben Jahre Laufzeit, plus mögliche Verlängerungen.

Und wie immer werden nachdenkliche Fragen gestellt. Zum Beispiel, ob dieses Fokussieren auf Großvorhaben wirklich einen Mehrwert an Ergebnissen im Vergleich etwa zu einer entsprechenden Summe an Projekten im DFG-Normalverfahren gibt. Oder ob das Junktim „Ein gutes Zukunftskonzept kann nur haben, wer mindestens zwei Exzellenzcluster einwirbt“ wirklich so sinnvoll ist. Man stelle sich vor, aus irgendwelchen Gründen (es soll ja auch Tage geben, an denen die Sportfreunde Lotte Borussia Dortmund schlagen ...) bringen die (fiktiven) Unis in Castrop-Rauxel, Zwiesel und Bitterfeld je zwei Cluster durch, wohingegen Heidelberg, München und Berlin abschmieren. Dann präsentiert Deutschland der internationalen Wissenschaft also die Erstgenannten als seine Aushängeschilder für das kommende Jahrzehnt?? Die Imboden-Kommission hatte demgegenüber ja vielmehr vorgeschlagen, um die Cluster zwar einen Wettbewerb auszuloben, die Prämien und Labels an die Unis als Ganzes aber einfach an die zehn besten zu vergeben – man müsse ja nicht so tun, als sei nicht irgendwie klar, wer diese seien ... Aber das ist alles Makulatur. Wir haben das Ergebnis für die Cluster, und in Bälde werden wir auch das Ergebnis für die Zukunftskonzepte haben. Und jetzt machen wir, vielleicht, zur Abwechslung mal wieder etwas Wissenschaft ...

Ach ja, einen hab ich noch. Da waren ein paar Stuttgarter, die ein paar Texaner per Email zu erreichen versuchten, was aber nicht wirklich gelingen wollte. Quintessenz der Erklärung der texanischen Admins für die diversen Rejects nach einem längeren Texas-internen Email-Verkehr: „The German server was not set up correctly, but finally Germany got in the process of fixing it.“ Danke, Deutschland!

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen, liebe Leserinnen und Leser, Frohe Ostern und einen guten Frühsummer, zunächst aber natürlich viel Spaß bei der Lektüre der neusten Ausgabe Ihres Quartls ...

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=30

28. Januar 2019

Vor 30 Jahren fiel der Eiserne Vorhang endgültig. In Polen und Ungarn hatten Reformen begonnen. In der Tschechoslowakei kam das Ende der Regierung mit offenen Diskussionen über die Zukunft und einem neuen Präsidenten Vaclav Havel^a. In Rumänien wurde Ministerpräsident Nicolae Ceausescu^b standrechtlich erschossen^c. In Bulgarien trat Todor Zhivkov^d nach Androhung seiner Exekution zurück. Für eine kurze Zeitspanne schien es, als gäbe es die Möglichkeit einer friedlichen demokratischen Entwicklung in Europa jenseits der davor herrschenden Angst vor einem Atomkrieg und der systematischen Antagonie zwischen dem Westen geführt von den USA und dem Ostblock geführt von der Sowjetunion. Francis Fukuyama sprach vom Ende der Geschichte^e und brachte die Hoffnung zumindest seiner amerikanischen Landsleute zum Ausdruck, nun sei aller Streit vorbei.

Schon ab Sommer 1990 wurden die Hoffnungen getrübt. Ein Sezessionskrieg in Jugoslawien zeichnete sich ab, der Europa bis etwa 1999 beschäftigen sollte und der das Selbstverständnis Europas als eines friedlichen Kontinents schwer erschütterte. Es war Teil dieses kriegerischen Zerfalls, dass Deutschland erstmals seit 1945 seine Armee einsetzte. Auch die Wahlen in den Nachfolgestaaten des Ostblocks warfen Fragen auf, denn ehemalige Kommunisten und Sozialisten waren immer wieder erfolgreich.

^aVaclav Havel, tschechoslowakischer Schriftsteller und Politiker, 1936 – 2011. Unter seiner Präsidentschaft wurde die Tschechoslowakei friedlich geteilt in die heutige tschechische Republik und die Slowakei.

^bNicolae Ceausescu, rumänischer Politiker, 1918 – 1989, Ceausescu galt im Westen als Freigeist innerhalb des Ostblock und als beliebter Handelspartner.

^cMehrere rumänische Politiker bezeichneten 2009 diese Hinrichtung als Schande aber notwendig

^dTodor Zhivkov, bulgarischer Politiker, 1911 – 1998, Zhivkov hatte 1984 versucht, eine völlige Assimilation der türkischsprachigen Minderheit in Bulgarien zu erreichen

^eFrancis Fukuyama, *The End of History and the Last Man*, Free Press, 1992

30 Jahre nach dem was man als Ende der Geschichte bezeichnet hat stehen wir vor einer neuen alten Welt. Das alte Europa ist für die USA weniger wichtig geworden. Die USA zweifeln an der Notwendigkeit der Kooperation mit einem Europa, das seinerseits an seiner eigenen Einigkeit zweifelt und in dem eine Reihe von Staaten an der liberalen Demokratie zweifeln. Die neuen Frontlinien sind teilweise wieder die alten, wenn Europa sich einem selbstbewussten Russland gegenüber sieht und keine gemeinsame Linie mehr finden kann. Neue Frontlinien tun sich auf in dem Maß wie China sich als Weltmacht zurückmeldet und sein wirtschaftliches Gewicht in politisches Gewicht ummünzen will.

Der ewige Friede – das Ende der Geschichte – war eine kurze Illusion. Ein Aufatmen das schon nach wenigen Monaten verflogen war weil die Geschichte sich mit all ihren Ansprüchen zurückmeldete. Geblieben ist die Sehnsucht nach der einfachen und endgültigen Lösung und damit die Sehnsucht nach den einfachen politischen Mitteln und den vertrauten alten Methoden. Die Generation des kalten Krieges stirbt und mit ihr das Wissen über die Fallen und Tücken einer am einzig Wahren und Guten orientierten Politik der Kooperationsverweigerung.

M. Resch

Auf dem Weg zu einem virtuellen Fusionsplasma

Die Fusionsforschung strebt an, die Verschmelzung von Wasserstoff zu Helium – wie sie z.B. in der Sonne ständig stattfindet – für die CO₂-freie Stromerzeugung nutzbar zu machen. Ihr zentrales Ziel ist es dabei, die physikalischen Grundlagen für ein zukünftiges Fusionskraftwerk bereit zu stellen. Dazu werden am IPP große Experimente wie ASDEX Upgrade in Garching und Wendelstein 7-X in Greifswald betrieben. Zunehmend spielen jedoch auch Computersimulationen auf Höchstleistungsrechnern eine entscheidende Rolle. Maßgeschneiderten physikalischen Modellen in Kombination mit modernsten numerischen Methoden gelingt es, die komplexen Grundgleichungen der Plasmaphysik auf einigen der weltweit leistungstärksten Computer zu lösen. Damit können heute viele wichtige Einzelaspekte der Plasmadynamik bereits quantitativ beschrieben werden.

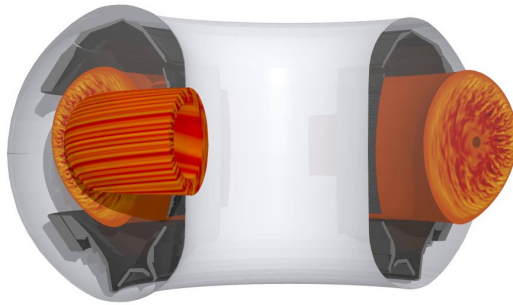


Abbildung 1: GENE-Simulation von Turbulenz im Garchinger Fusionsexperiment ASDEX Upgrade. Dieses Phänomen führt dazu, dass der ringförmige Magnetfeldkäfig das 100 Millionen Grad heiße Wasserstoff-Plasma nicht perfekt einschließen kann.

In jüngster Vergangenheit wurden zahlreiche Beispiele für erfolgreiche Vergleiche zwischen Simulationen und experimentellen Messungen veröffentlicht

^{1 2}. Sie zeigen, dass die theoretische Plasmaphysik einen Entwicklungsstand erreicht hat, mit dem sie in absehbarer Zukunft zur Planung neuer Experimente und sogar zur Optimierung von Kraftwerksentwürfen nutzbar werden sollte ^{3 4}. Um dieses ehrgeizige Ziel zu erreichen, ist allerdings eine enge Zusammenarbeit von Experten aus den Bereichen theoretische Plasmaphysik, angewandte Mathematik und Informatik erforderlich. (Zwei erfolgreiche Beispiele sind die Arbeiten von Denis Jarema zu „block-structured grids“ ⁵ und Arbeiten zu „sparse grids“ im Rahmen des EXAHD-Projekts <http://ipvs.informatik.uni-stuttgart.de/SGS/EXAHD>).

Nur im Rahmen interdisziplinärer Forschung kann es gelingen, eine fortschreitende Integration bereits vorhandener Einzelelemente zu realisieren, die dann in der Summe eine Art „virtuelles Fusionsplasma“ darstellt.

Ermöglicht wird dies nicht zuletzt durch die atemberaubenden Fortschritte auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens. In wenigen Jahren wird eine neue Generation von Supercomputern der Exascale-Klasse bereitstehen, mit denen mehr als eine Trillion (10^{18}) Rechenoperationen pro Sekunde ausgeführt werden können. Sie werden zudem klassisches High Performance Computing mit den Themen Big Data und Künstliche Intelligenz verbinden – eine Thematik, die auch bei einem „Long Program“ an der UCLA im Herbst 2018 im Mittelpunkt stand (siehe Beitrag von I. Farcas). In diesem Zusammenhang wird am IPP die entsprechende Software entwickelt, die auf solchen Maschinen konkrete Vorhersagen und Optimierungen im Hinblick auf zukünftige Fusionskraftwerke erlauben soll.

Ein wichtiges Element dabei ist das Projekt “High-Fidelity Whole Device

¹A Flux-Matched Gyrokinetic Analysis of DIII-D L-Mode Turbulence, T. Görler et al., *Physics of Plasmas* 21, 122307 (2014)

²Turbulence in High-Beta ASDEX Upgrade Advanced Scenarios. H. Doerk et al., *Nuclear Fusion* 58, 016044 (2018)

³Global and Local Gyrokinetic Simulations of High-Performance Discharges in View of ITER, F. Jenko et al., *Nuclear Fusion* 53, 073003 (2013)

⁴Controlling Turbulence in Present and Future Stellarators, P. Xanthopoulos et al., *Physical Review Letters* 113, 155001 (2014)

⁵Block-Structured Grids in Full Velocity Space for Eulerian Gyrokinetic Simulations, D. Jarema et al., *Computer Physics Communications* 215, 49 (2017)

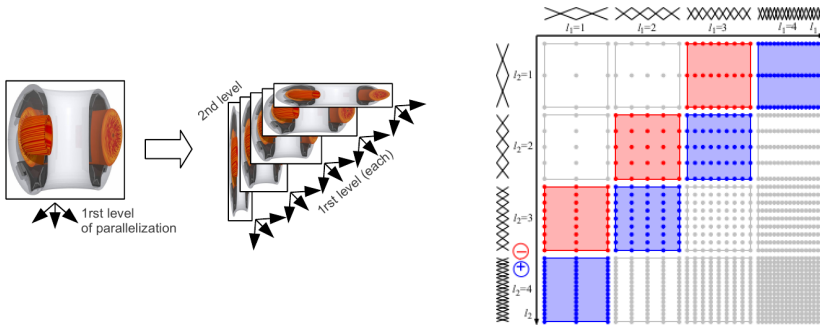


Abbildung 2: GENE-Simulationen sind z.T. äußerst aufwändig. Daher wird im Rahmen des EXAHD-Projekts angestrebt, neben Gebietszerlegung ein zweites Parallelisierungsniveau einzuführen, nämlich durch die Verwendung eines Dünngitter-Kombinationsverfahrens.

Modeling of Magnetically Confined Fusion Plasmas”, das seit Oktober 2016 in enger Zusammenarbeit mit Kollegen aus den USA läuft. Zwei grundlegende Simulationsprogramme – GENE <http://genecode.org> aus Garching und XGC aus Princeton, die zur Beschreibung des Plasmazentrums bzw. des Plasmarandes optimiert sind – sollen mit Hilfe neuartiger Algorithmen eng gekoppelt werden und gemeinsam als „Rückgrat“ eines virtuellen Fusionsplasmas dienen.

Erste erfolgreiche Rechnungen dieser Art konnten vor kurzem vorgestellt werden. Ziel ist es hierbei, den turbulenten Plasmatransport im gesamten Plasmavolumen – im heißen Zentrum und am kalten Rand – quantitativ zu beschreiben und auf diese Weise die Güte des magnetischen Einschlusses vorherzusagen. Sie wird charakterisiert durch die so genannte Energieeinschlusszeit, die in einem Kraftwerk einen gewissen Schwellwert überschreiten muss. Für die kommenden Jahre ist ein stufenweiser Ausbau dieses Modells geplant, unter Hinzunahme weiterer physikalischer Effekte, wie der Heizung durch hochfrequente Wellen oder der Dynamik hochenergetischer Teilchen in “brennenden”, d.h. sich selbst durch Fusionsreaktionen heizenden Plasmen.

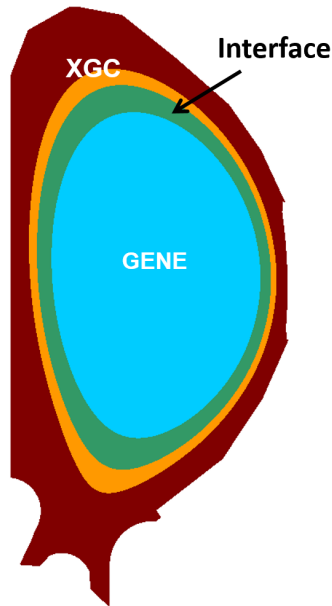


Abbildung 3: Durch die Kopplung von zwei Simulationsprogrammen, GENE und XGC, im Rahmen des Exascale Computing Project (ECP) soll das „Rückgrat“ eines virtuellen Fusionsplasmas entstehen.

Gleichzeitig wird aber auch an der Entwicklung stark reduzierter Modelle gearbeitet, zum Beispiel durch die Anwendung maschinellen Lernens. Dadurch wird die erforderliche Rechenzeit zum Teil um viele Größenordnungen verringert. Damit wird es möglich, auch größere Parameterstudien in deutlich kürzerer Zeit fertigzustellen. GENE und XGC dienen dabei zum einen als parameterfreie Ausgangsbasis für reduzierte Modelle. Zum anderen können sie Vorhersagen, die auf gekoppelten reduzierten Modellen beruhen, qualitativ und quantitativ überprüfen, insbesondere wenn dabei unerwartete Effekte auftreten. Mit einem solchen hierarchischen Ansatz können Effizienz und Genauigkeit der Berechnung je nach Bedarf austariert werden.

Diese Nutzung von Exascale-Supercomputern sollte die weitere Entwicklung der Fusionsforschung deutlich beschleunigen. Neuartige Einschlusskonzepte und physikalische Schlüsselaspekte von Kraftwerken können zunächst virtuell untersucht werden, um die experimentellen Bemühungen dann auf die vielversprechendsten Ansätze zu konzentrieren. Dies ist ein wichtiger Beitrag zur Antwort der anwendungsorientierten Grundlagenforschung auf eine der großen gesellschaftlichen Herausforderungen unserer Zeit.

Frank Jenko

Wechsel im LRZ-Direktorium



Das Direktorium des Leibniz-Rechenzentrums, eines Instituts der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, wird vom Instituts-Beirat gewählt und von den Gremien der BAdW bestätigt. Die langjährigen Mitglieder des Direktoriums und früheren Leiter des LRZ, Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering (1989-2008) und Prof. Dr. Arndt Bode (2008-2017), traten nach langjähriger Tätigkeit von ihren Ämtern zurück. Der Beirat dankte ihnen für ihre langjährige Tätigkeit für das LRZ und wählte Prof. Dr. Martin Schulz, Inhaber des Lehrstuhls für Rechnerarchitektur und Parallele Systeme der TU München, und Prof. Dr. Thomas Seidl, Inhaber des Lehrstuhls für Datenbanksysteme und Data Mining der LMU München, zu ihren Nachfolgern im Direktorium des LRZ. Dem Direktorium gehören außerdem wie bisher Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, Institut für Informatik der TU München, sowie Prof. Dr. Dieter Kranzlmüller, Institut für Informatik der LMU München, an. Den Vorsitz des Direktoriums hat Prof. Dr. Kranzlmüller inne.

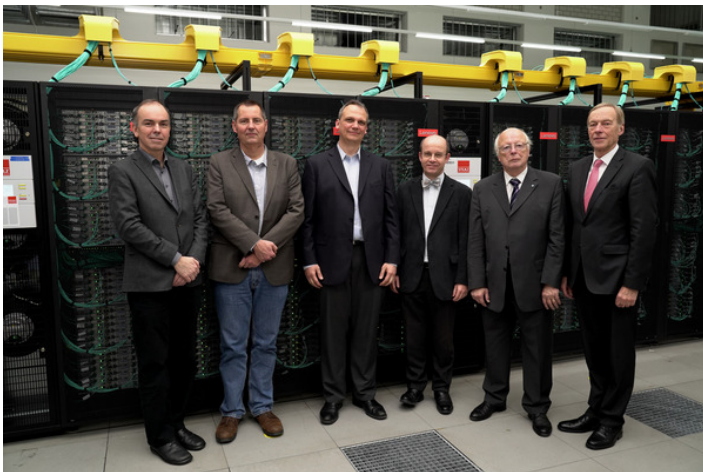


Abbildung 1: Profs Drs D. Kranzlmüller, H.-J. Bungartz, M. Schulz, T. Seidl, H.-G. Hegering und A. Bode (v.l.n.r.)

Im Rahmen einer Feier im LRZ überreichte der heutige Leiter des LRZ, Prof. Dr. Kranzlmüller, seinen Vorgängern Erinnerungen an SuperMUC und dankte ihnen für Ihren langjährigen Einsatz für das LRZ und für die IT-Versorgung der Wissenschaft in München, Bayern und Deutschland.



Abbildung 2: https://www.lrz.de/presse/ereignisse/2019-02-06_lrz-direktorium/(Fotos: Alessandro Podo, LRZ)

Ludger Palm

Machine Learning trying to make friends with Scientific High-performance Computing



The Institute for Pure and Applied Mathematics (IPAM) is a National Science Foundation-funded Mathematics Institute at University of California, Los Angeles (UCLA) in the United States. IPAM is host of many events including two long-term programs and several short-term workshops (2-5 days) each year. The featured themes are broad and include subjects of pressing interest not only for the pure and applied mathematics community, but also for technology, society and science in general.



Figure 1: left: <https://www.mplusrstudio.com/commercial/>
right: <https://patch.com/california/centurycity/ucla-campus-goes-tobacco-free/>

Between September and December 2018, I participated in the IPAM’s long-term programme called “Science at Extreme Scales: Where Big Data Meets Large-Scale Computing” (BDC18). This event brought together PhD students and candidates, postdocs and other researchers from prestigious universities, including the Technical University of Munich, UCLA and University of Illinois at Urbana-Champaign or from well known research institutes, such



Figure 2: BDC2018: Science at Extreme Scales: Where Big Data Meets Large-Scale Computing. Culminating Workshop at Lake Arrowhead, Dec 9-14, 2018

as IBM research, Max Planck Institutes and the Jet Propulsion Lab.

This long-term program was mainly motivated by the need of a new computational science in the age of Machine Learning, Data Analytics and Large Scale Numerical Applications. To this end, the discussed themes included Physics-informed Machine Learning, High-performance Computing for Data Analytics, Data-driven and Nonlinear model reduction in complex applications, Multifidelity methods for outerloop scenarios and the Visualization of Large Datasets.

The scientific repertoire featured a series of four workshops at IPAM and a culminating workshop at UCLA's Conference Center at Lake Arrowhead. Moreover, each long-term program includes talks in the series of "Green Family Public Lecture Series" in which a prominent scientist active in an area connected to the programme is invited to give two public lectures. For

BDC18, the invited speaker was Emmanuel Candès, a prominent mathematician and statistician from Stanford University, a recent receipt of the MacArthur fellowship⁶, also called the Genius grant.

Each workshop took place from Monday to Friday and it included up to five one-hour talks each day. Moreover, in between presentations, the participants had time to engage in conversations and discuss the presented topics more in-depth.

- **Workshop I: Big Data Meets Large-Scale Computing.**

The first workshop mainly focused on algorithms and methods for dealing with large data sets in scientific computing problems. The discussed themes include data-driven modeling, physics-based “regularization” of data analytics, detecting and exploiting data sparsity and multifidelity methods.

- **Workshop II: HPC and Data Science for Scientific Discovery.**

The second workshop was again more focused on algorithms and methods and it featured themes such as high-dimensional outerloop problems, efficient analysis and visualization of large data sets, and integration of experimental/observation and simulation data using methods from modern data science.

- **Workshop III: HPC for Computationally and Data-Intensive Problems.**

The third workshop was complementary to the first two and featured applications in which there is need for high-performance computing and data analytics, including computational genomics and fluid mechanics. Moreover, other themes were discussed, such as robust algorithmics and theory- and physics-guided data science.

- **Workshop IV: New Architectures and Algorithms.**

Since most of what was presented in the first three workshops – and most of Computational Science in general – cannot be realized without

⁶<https://www.macfound.org/fellows/985/>

suitable hardware and algorithms, the last workshop discussed emerging hardware and software ideas such as exascale computing, quantum and neuromorphing computing, novel algorithmic ideas suitable for large scale computing, and alternative representations of numbers.

- **Culminating Workshop at Lake Arrowhead.**

Finally, the last event was the culminating workshop at UCLA's Conference Center from Lake Arrowhead, which took place in December, 2018. In this workshop, the overall programme was summarized and assessed which resulted in a white paper⁷.

Besides the scientific dimension, another characteristic of this workshop was the location itself: Lake Arrowhead. California in general and Los Angeles in particular are known for the sunny weather, beaches and Hollywood. However, there are lakes, mountains and even snow in California! Lake Arrowhead is a beautiful place and going there in December was a perfect preparation for returning to Europe and celebrating Christmas in places with four seasons. Luckily, all long term programs at IPAM include two reunions after one and a half and two and a half years, so I am looking forward to experience Lake Arrowhead in summer time.

In between workshops, there were other activities happening at the IPAM. The participants who did not have the chance to speak during the workshops could present their research to the rest of the group in a seminar series which took place twice a week in the weeks in between workshops. Therein, I also had a presentation titled "Adaptive multilevel stochastic collocations for uncertainty propagation and Bayesian inversion". Moreover, a number of activity groups focusing on a specific topic were formed, in which a group leader led discussions about papers and other materials relevant for the theme of the group. The discussed themes included Symmetry in Invariance in Computational Science, Model Development and Sparsity. In addition, I also led a group focusing on Uncertainty Quantification in which we discussed themes such as Multifidelity methods and Uncertainty in Deep Learning.

⁷<http://www.ipam.ucla.edu/reports/white-paper-science-at-extreme-scales-where-big-data-meets-large-scale-computing/>

To conclude, participating in the long-term program “Science at Extreme Scales: Where Big Data Meets Large-Scale Computing” was a great scientific and personal experience. In addition, living in Los Angeles for three months and experiencing sunny weather in late autumn, but also heavy traffic, noise and high prices was an interesting and unique experience as well.

Ionut-Gabriel Farcas

SPPEXA 2019 - Annual Plenary Meeting & more



On January 22nd–23rd 2019, SPPEXA gathered once again for its annual plenary meeting (APM). Just like last year, the APM took place at the *Institute for Advanced Study* (IAS) in Garching .

The majority of the conference time was dedicated to the projects: *On the one hand*, each project presented its recent progress to the plenary assembly. Despite limiting those talks to 20 minutes each, with the sheer amount of 17 funded projects a major focus of the conference lied on these talks. *On the other hand* time slots were allocated to project team meetings for individual progress updates and more technical discussions.



Figure 1: Almost 100 researchers participated in this year’s SPPEXA APM.

To get new input the annual plenary meeting had invited guest speakers. Looking inside, SPPEXA is craved out of classical *high performance computing* disciplines. Looking outside, we have to recognize that many scientists

are working on *artificial intelligence* (AI).

Hence, we had invited two experts on AI, *Marina Meila* and *Gaël Varoquaux*, both also presenting at the IPAM “Science at Extreme Scale: Where Big Data meets Large Scale Computing”. Marina talked about “Manifold Learning in the age of big data”, and Gaël about “Detecting psychiatric disorders with statistical learning tailored to brain activity”. Recent advances in AI were enabled by the abundance of computing power; to build bridges, SPPEXA has a lot to offer when it comes to smart usage of compute resources in *high performance computing*.



Figure 2: Marina Meila and Hans Bunz at the discussion after Marina's talk.



Figure 3: Gaël Varoquaux enthusiastically catching the attention audience.

On an internal SPPEXA related note, we had a recent shift in the coordination. Since two years, Benjamin Uekermann has handled the every-day business for SPPEXA. As usual in academia he had to change his research group, and is now a post-doctoral researcher (EuroTech) at TU Eindhoven with Harald van Brummelen. He continues his work on the SPPEXA project ExaFSA and in particular, also his work on preCICE.



Figure 4: Former program manager Benjamin Uekermann giving SPPEXA infos.

In the evening of the first day, the participants came together for a traditional Bavarian meal at the Augustiner Restaurant in Garching – not extraordinary to us, but always highly appreciated by our international guests. The Annual Plenary Meeting ended with a gender workshop from Karin Bodewits, where we dicussed the *path to professorship*. As last year, we received very positive feedback from the participants.

Other SPPEXA news: The final year of SPPEXA has begun. As a result, the projects are finishing their work, and we plan a long edition in the Lecture Notes in Computational Science and Engineering by Springer. It will be published in early 2020 with review-type contributions from all 17 projects, a few central SPPEXA articles on the collaboration, and (hopefully) a few guest articles.

But SPPEXA does not only consist of technical work. Behind the research progress, there are many PhD candidates, and many of them are approaching the end of their PhD studies due to the funding structure. Interested Quartl readers might also have recognized that last APM we also awarded Best {Bachelor's, Master's, Doctoral} Theses, but did not do so this year. This year, we extended SPPEXA's Best Thesis award 2018 deadlines to June 2019, and winners will be announced at the last SPPEXA Event in October.

Speaking of which, we are organizing the SPPEXA final symposium on October 21st-23rd in Dresden. Each project will organize a small mini-symposium with four talks in parallel sessions. Additionally, a focus of the SPPEXA central committee is follow-up funding for the unique tri-lateral German, French and Japanese program. Hence, we are planning a third trilateral workshop possibly in the French Embassy in Tokyo on November 6-8th.

Severin Reiz

Neuerscheinung:

Bits & Bugs – A Historical and Scientific Review of Software Failures



Abbildung 1: QR code der website des Verlags SIAM mit begleitendem Material.

Bei SIAM⁸ erschien im Februar diesen Jahres das Buch *Bits & Bugs – A Historical and Scientific Review of Software Failures*. Die Autoren Thomas Huckle und Tobias Neckel vom TUM-Informatik-Lehrstuhl für Scientific Computing haben in den vergangenen drei Jahren viele relevante Softwareprobleme aus dem Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens zusammengetragen, dokumentiert und analysiert. Problemfälle reichen von Klassikern wie dem Absturz der Ariane 5, den Fehlschüssen der Patriot Abwehrraketen, dem Sinken der Sleipner Gas-Plattform oder dem Pentium-Divisionsfehler über weniger bekannte Fälle wie das Schwanken der London Millenium Bridge, der Verzögerung des ersten Starts des Space Shuttle, der tödlichen Bestrahlung durch Therac-25 oder den Problemen bei automatischen Gepäcksystemen neuer Flughäfen bis zu aktuellen Ereignissen wie Flugzeug- und Hubschrauberabstürzen, Gefahren des High Frequency Trading oder Fehler bei Finanztransaktionen.

Insbesondere Unfälle mit selbstfahrenden Autos haben in den letzten Jahren die Verlässlichkeit von sogenannten Autopiloten in Frage gestellt. Wie kann ein intelligentes System sicher und zuverlässig Hindernisse erkennen wie z.B. andere Kraftfahrzeuge, Menschen, oder Betonabsperungen. Kamera- und Radarsysteme werden hierzu eingesetzt, die aber in einigen Fällen aufgrund

⁸Die *Society for Industrial and Applied Mathematics* (SIAM) ist die international führende Vereinigung zur Unterstützung wissenschaftlichen Arbeitens im Bereich der angewandten Mathematik. SIAM richtet unter anderem internationale Konferenzen aus und der veröffentlicht wissenschaftlicher Zeitschriften und Bücher.

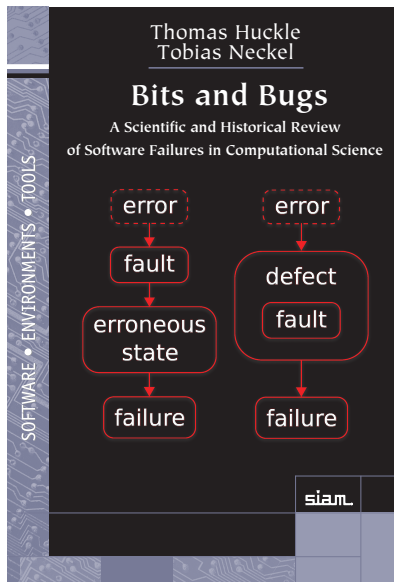


Abbildung 2: *Bits & Bugs*: Cover des Buches.

komplexer und dennoch unzureichender Software Hindernisse ignorierten und so einige tödliche Unfälle verursacht haben. Gewürzt wird das Ganze mit Anekdoten über fehlerhafte Torpedos, Eisenbahngleise, Brücken, abstürzende Raumsonden, chaotische Finanztransaktionen, usw.

Besonders interessant und hilfreich ist das vorliegende Buch zur Ergänzung einschlägiger Vorlesungen zur numerischen Mathematik, bzw. Wissenschaftlichem Rechnen. Mit den behandelten Beispielen können in vielen Fällen Probleme mit numerischen Verfahren oder Programmiertechniken drastisch veranschaulicht werden. Das Material eignet sich auch zu Vorträgen im Rahmen von Seminaren oder Werbeveranstaltungen (Tag der offenen Tür, Schülertag, ...). Insgesamt bietet das Buch eine Mischung von unterhaltsamem Lesestoff und genauer und tiefer Analyse. Auch für Laien mit minimalem technischen Hintergrund ist das Buch interessant, da zahlreiche kurze

Exkursionen die notwendigen numerischen und informatischen Grundlagen in leicht verdaulichen Häppchen anschaulich aufbereiten.

Um ein wenig Appetit zu machen, sei der Fall der wundersamen Bitcoinvermehrung erwähnt, bei dem es im Jahr 2010 gelang, durch einen bewusst eingesetzten Integer-Overflow Milliarden von Bitcoins aus dem Nichts zu erzeugen—zumindest für fünf Stunden, bis die Verantwortlichen das Problem erkannten und entsprechende Gegenmaßnahmen einleiteten.

Tobias Neckel, Thomas Huckle



(a) 1996: Explosion der Ariane 5



(b) 1993: Beinaheabsturz in Hamburg



(c) 2016: Tesla rammt LKW



(d) 1994: Gepäckchaos in Denver



(e) 2008: Gepäckchaos in Heathrow



(f) 2000: London Millennium Bridge

Abbildung 3: QRcodes zu YouTube-Videos für weitere ausgewählte Fälle.

SIAM CSE 2019



Alle Jahre wieder: Unser halber Lehrstuhl (gefühl) versammelt sich am Flughafen München, um an der SIAM Conference on Computational Science and Engineering teilzunehmen. Dieses Mal in Spokane. Spo...was? Ja genau.

Die Stadt Spokane im Staat Washington an der Grenze zu Idaho ist – gemessen an der Einwohnerzahl – etwa so groß wie unser Nachbardorf Augsburg. Hier fand im Jahre 1974 die Weltausstellung Expo statt, im Spokane Convention Center, welches heutzutage für Großveranstaltungen dient.

Als wichtigste Reisevorbereitung galt es, erst einmal die korrekte Aussprache des Ortsnamens zu erlernen. Mit einem Spokaine wird man sofort als ignoranter Europäer enttarnt. Korrekt ist entweder das (sehr deutsch ausgesprochene) Spokane oder ein amerikanisiertes Spokän. Apropos deutsch, in der Stadt gibt es ein Deutsches Haus, deutschsprechende Supermarktangestellte, und natürlich auch ein Oktoberfest im September.



Abbildung 1: Winterliches Spokane und Umgebung.

Dort angekommen, bei winterlichen -5 Grad Celsius, startet die Konferenz in gewohnter Manier: bis auf ein paar wenige Plenarvorträge hat man durchgehend die Wahl zwischen mindestens 30 parallel stattfindenden Minisymposia. Das Ganze gleicht einem Zufallsexperiment (im bayesianischen

Sinne) mit einer gut (?) informierten a-priori Verteilung. Thematisch ist bunt gemischt alles dabei: folienfüllenden PDEs, vollautomatische Generierung von Finite-Elemente-Codes, Möchtegern-Exascale,⁹ der Diskussion welche Konvergenzordnung denn eigentlich als “hohe Ordnung” gilt, ob AVX512 eine gute Idee war, und natürlich all die Sachen die in den 29 anderen Minisymposia präsentiert wurden. Abgerundet wurde die Konferenz durch zwei Postersessions. Ionut Farcas, aus unserem Lehrstuhl, wurde ein Best-Poster-Award verliehen. Herzlichen Glückwunsch!

Der Rückflug sollte dann eigentlich am Samstag Mittag stattfinden. Daran haben wir solange geglaubt, bis der Pilot verkündete: “We’re seeing a red light, and red lights are never a good thing.” Kurz gesagt, der Flieger war kaputt, die Techniker wurden im höchsten Tempo herangeholt (mit dem Auto aus Seattle), und der halbe Lehrstuhl (gefühlte), inklusive Chef, wurde umgebucht. Und zwar auf den nächsten Tag mit einer Gesamtverspätung von ca. 20 Stunden. So blieb aber wenigstens noch Zeit für einen kleinen Imbiss beim Texas Longhorn Barbecue.

Carsten Uphoff



⁹Das ist jetzt nicht negativ gemeint. Es gibt einfach nur noch keine Exascale-Maschine. Zumindest nicht offiziell.

7. BGCE Student Paper Prize at the SIAM CSE 2019



For the seventh time, the ENB Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) awarded the “BGCE Student Prize” for the best paper at the SIAM Conference on Computational Science and Engineering. From the various paper submissions, in the form of four-page extended abstracts, received by prior-to-Ph.D. international students, eight outstanding candidates have been selected and invited to present their work in the finals during this year’s SIAM CSE conference in Spokane, Washington, USA.

The main objective of the BGCE Award is to promote excellent students in CSE and to foster international exchange at early career stage. With the submissions received by young researchers from 12 universities or research institutes in eight countries, the BGCE Award continues to be a highly successful concept with outstanding visibility for the BGCE and the ENB. Numerous recognized addresses and research groups (of course excluding the acclaiming universities FAU and TUM) can be found under the contributions. As it is the case each year, the quality of the submitted papers was very high. Therefore, the selection of the following eight finalists was not easy:

- Joseph Hart (North Carolina State University): Computationally Efficient Parameter Sensitivity Analysis for PDE-Constrained Optimization
- Kenneth Sockwell (Florida State University): Mass conserving Hamiltonian Structure Preserving Reduced Order Model for Mimetic Ocean Models
- Elizabeth Qian (MIT): Transform & Learn: From Nonlinear Partial Differential Equations to Low-dimensional Polynomial Approximations



Figure 1: BGCE Award Finalists with Hans-Joachim Bungartz

- Zakia Zainib (SISSA, Trieste, Italy): Reduced Order Methods for Parametrized Optimal Flow Control: applications to coronary artery bypass grafts assimilated with patient-specific data
- Sean Hon (University of Oxford): Band-Toeplitz Preconditioners for Nonsymmetric Toeplitz Systems
- Kjetil Olsen Lye (ETH): ALSVINN: A Fast Multi-GPGPU Finite Volume Solver with a Strong Emphasis on Reproducibility
- Lin Bo (National University of Singapore): An Efficient and Accurate Parallel Simulator for Streamer Discharges in Three Dimensions
- Álvaro Pé de la Riva (University of Zaragoza): A Robust Solver Based on Multiplicative Schwarz Methods for Isogeometric Discretizations

The international prize committee consisting of Hans-Joachim Bungartz (TU Munich), Esmond Ng (Lawrence Berkeley National Laboratory), Carol Woodward (Lawrence Livermore National Laboratory), Jan Hesthaven (EPFL), George Biros (University of Texas at Austin) and Scott MacLachlan (Memorial University of Newfoundland), evaluated the submissions - at this point we would like to thank them all again for the participation and commitment. After splendid presentation sessions and the most and longest decision process we have had so far, the very difficult decision about the winner was made. For the second time only since 2007, two prizes were given - the Olympics would say "two gold medals", to Elizabeth Qian and Zakia Zainib. Congratulations to all the finalists, and in particular to Zakia and Elizabeth on the BGCE Award 2019!



Figure 2: BGCE-Winner Elizabeth Qian and Zakia Zainib with Hans-Joachim Bungartz

The prize consists of a one-week visit to TUM and FAU Erlangen, during which the award winners will have the opportunity to get to know the two universities, to get in contact with BGCE's educational and research program, as well as to present their own research work in more detail. We are looking forward to Elizabeth's and Zakia's upcoming visit and interesting discussions this summer.

Ivana Jovanovic

Ferienakademie 2019: Kursprogramm & Bewerbung

Im Herbst 2019 wird zum XX.ten Mal die Ferienakademie¹⁰ im Sarntal (Südtirol) stattfinden, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird. 2019 gibt es insgesamt elf Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen:

1. Moderne Algorithmik: Randomisiert, online, approximativ
2. Startup Lab: Wearable AI for Human Augmentation
3. Physik und Elektronik im Alltag
4. Dynamic Limit State Analysis—Modeling, Simulation and Validation
5. Let's play! Simulated Physics for Games
6. Autonomous Drones for Sustainability
7. Communication Acoustics
8. Wie funktioniert das? Physikalische Methoden in der Medizin
9. Leistungshalbleiterbauelemente: Schlüsselbausteine für E-Mobilität und "Smart Grid"
10. Die nachhaltige Stadt im Jahr 2050
11. Machine Learning in Signal Processing and Communications

Details sind unter <https://www.ferienakademie.de/kurse-2019/> zu finden. Die Bewerbung für die Studierenden wird ab nächster Woche im Onlineportal möglich sein und bis zum 8. Mai 2019 laufen.

Tobias Neckel

¹⁰www.ferienakademie.de



Ferienakademie

2019

22.9. – 04.10. 2019

Sarntal (Südtirol)

Programm

Kurs	Thema	Dozenten Gastdozenten (GD)	Fachrichtungen (und Fachsemester)
1	Moderne Algorithmen: Randomisiert, online, approximativ	R. Wanka, Erlangen H. Räcke, München	Informatik, Mathematik (Bachelor im 1. oder 2. Studienjahr)
2	Startup Lab: Wearable AI for Human Augmentation	B. Eskofier, Erlangen A. Bulling, Stuttgart A. Schmidt, LMU (GD)	Informatik, Medieninformatik, Medizintechnik, Computer Games, Ingenieurwissenschaften, Psychologie, Design (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)
3	Physik und Elektronik im Alltag	R. Gross, München G. Denninger, Stuttgart V. Krstic, Erlangen (GD) S. Loth, Stuttgart (GD)	Physik, Elektro- und Informationstechnik (Bachelor im 1. oder 2. Studienjahr)
4	Dynamic Limit State Analysis—Modeling, Simulation and Validation	F. Duddeck, München M. Bischoff, Stuttgart	Ingenieurwissenschaften, Simulationstechnologie (Master)
5	Let's play! Simulated Physics for Games	H.-J. Bungartz, München D. Pflüger, Stuttgart U. Rüde, Erlangen (GD)	Ingenieurwissenschaften, Mathematik, Informatik, Physik (alle Fachsemester)
6	Autonomous Drones for Sustainability	B. Brügge, München S. Wagner, Stuttgart	Informatik, Software Engineering, Elektrotechnik, Luft- und Raumfahrttechnik, Maschinenwesen, Industrial Design (Bachelor ab 2. Studienjahr oder Master)
7	Communication Acoustics	E. Habets, Erlangen B. Seaber, München A. Kaup, Erlangen (GD)	Informatik, Elektrotechnik, Informations- und Kommunikationstechnik, Bio- und Neuroengineering, Mathematik (Master)
8	Wie funktioniert das? Physikalische Methoden in der Medizin	T. Unruh, Erlangen W. Petry, München	Physik, Chemie, Maschinenwesen, Informatik, Elektrotechnik, Materialwiss., Chemie- und Bio-Ingenieurwiss. (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)
9	Leistungshalbleiterbauelemente: Schlüsselbausteine für E-Mobilität und „Smart Grid“	G. Wachutka, München J. Schulte, Stuttgart	Elektro- und Informationstechnik, Physik, Werkstoffwissenschaften, Chemie (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)
10	Die nachhaltige Stadt im Jahr 2050	W. Lang, München J. Werner, Stuttgart	Bau- und Umweltingenieurwesen, Architektur, Erneuerbare Energie, Nachhaltige Elektrische Energieversorgung, Physik, Elektro- und Informationstechnik, Informatik, Maschinenbau, Sozialwissenschaften (Master)
11	Machine Learning in Signal Processing and Communications	W. Kellermann, Erlangen G. Kramer, München S. ten Brink, Stuttgart (GD)	Elektrotechnik, Informations- und Kommunikationstechnik, Informatik, Mathematik, Physik (Bachelor ab 3. Studienjahr oder Master)

Organisation:
T. Neckel, München, neckel@in.tum.de
A. Spruck, Erlangen, andreas.spruck@fau.de
B. Berkmann, Stuttgart, ferienakademie@iht.uni-stuttgart.de

Universitätsbeauftragte:
E. Rank, München
A. Kaup, Erlangen
J. Schulze, Stuttgart

Direktor:
H.-J. Bungartz,
Institut für Informatik,
TU München

Bewerbungsschluss 8. Mai 2019

FAU
FRIEDRICH-ALEXANDER
UNIVERSITÄT
ERLANGEN-NÜRNBERG

Technische
Universität
München

TUM



Universität Stuttgart

www.ferienakademie.de

Abbildung 1: Das Poster der FA 2019.

*** Notiz * Notiz * Notiz ***

Termine 2019

- **International Conference on Computational Science:**
ICCS Computational Science in the Interconnected World –
ICCS Faro, Algarve, Portugal:
12.06.-14.06.2019 <https://www.iccs-meeting.org/iccs2019/>
- **Society for Industrial and Applied Mathematics:**
SIAM Conference on Applied Algebraic Geometry (AG19) –
SIAM AG19 in Bern, Switzerland:
09.07.-13.07.2019 <https://www.siam.org/Conferences/CM/Main/ag19>
- **Supercomputing 2019:**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC19) –
SC 19 in Colorado, Denver, USA:
17.11.-22.11.2019 <https://sc19.supercomputing.org/>

Quartl^{*} - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

S. Herrmann, S. Seckler, 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: **01.06.2019**

* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: $1/4$ Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)