

- Dheevatsa Mudigere, one of our 2009 graduates of the BGCE elite programme, received the „Best student paper award“ at the International Conference on High Performance Computing (HiPC 2009) in Kochi, India, for his paper „Fast GPU data rearrangement kernels using CUDA“. The paper is related to his master's thesis, a joint project of the GE labs in Bangalore and the Chair of Scientific Computing of TUM's Computer Science department.

Bitte notieren

- Die Ferienakademie im Sarnital findet dieses Jahr vom 19. September bis 1. Oktober statt. Interessierte Studierende können sich bis zum 23. Mai bewerben, nähere Informationen unter

<http://www.ferienakademie.de>



Inhalt

Editorial	2
Software Engineering meets Scientific Computing	7
Forschungsprojekt ISAR	10
Skalierbarkeit eines Strömungs-Codes	15
WaLBerta auf Jugene	19
Supercomputing 2009 in Portland	21
Winterakademie in Indien	24
KAUST: Winter Enrichment Program	26
Episode IX: Return of the SimLab	19
BGCE Research Day in München	29
A SIMulations-Workshop in Jülich	31
HPC-Gipfel in Tirol	33
Mathematik-Informatik-Neubau Erlangen	34
Kurz berichtet	35
Bitte notieren	36

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

J. Daniel, C. Halfar, Dr. S. Zimmer

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

Tel./Fax: +49-89-289 18630 / 18607

e-mail: halfar@in.tum.de, [www: http://www5.in.tum.de/quartl](http://www5.in.tum.de/quartl)

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **30.06.2010**

* Quartel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0,27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

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



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

Editorial

Über den zunehmend befremdlichen Stil so mancher E-Mails durften wir uns alle schon des öfteren wundern. Während jedoch in denjenigen Disziplinen, die im Allgemeinen einen eher zwangloseren Umgang zwischen Lehrenden und Lernenden pflegen, inzwischen eine gewisse Assimilation eingesetzt hat (ich beantworte studentische E-Mails, die auf „Hi,“ beginnen, nun eben einfach auch mit „Hi,“), erleben nun Fächer mit traditionell eher seriöserem Umgang etwas verzögert ihr diesbezügliches Frühlingserwachen. Ein besonders inspirierendes Gruselkabinett skurriler studentischer E-Mails stellte jüngst ein Münsteraner Jura-Professor (nennen wir ihn Prof. Schnarrenberger) in Spiegel Online vor. Zumindest Auszüge daraus sollen Ihnen, liebe Quartl-Leser nicht vorenthalten bleiben. Für die Authentizität aller Zitate steht Kollege Schnarrenberger gerade!

Da gibt es zunächst den Typ des Sprachverhunzners: „*Sehr geehrter schnarrenberger, ich bin student des faxches zivilrecht im nebenfach und ich benoeltige noch ein juristisches seminar zum abschluss des faches. ledter habe ich erst heute erfahren dass die vorbereitung schon gestern stattgefunden hat. Auch aufgrund meiner unerfahrenheit im belegen von seminaren im bereich juura und schlechter information über die vorgehensweise, bin ich von der anmeldefrist bis zum 23.01.06 ausgegangen. Meine frage ist, ob es noch möglich ist an diesem seminar teilzunehmen?*“ Und so jemand soll mich irgendwann mal vor Gericht veerdrehen? Dann finden wir den Typ des Anbieterers (oder natürlich der Anbieterin): „*Hallöchen, Herr Schnarrenberger, ich studiere im sechsten Semester Diplom-Pädagogik hier an der Uni Münster und ich würde sooo gerne ein Auslandssemester in Oslo absolvieren. Da an meinem Fachbereich keine Plätze mehr frei sind, möchte ich nun bei anderen Fachbereichen anfragen. Ich fänds so süß und echt super, wenn sie mir helfen. Vielen Dank schon im Voraus. With kisses.*“ Tja, da meldet man sich doch gleich als Mentor und reist mit nach Norwegen ...

Doch weiter zum Babelfisch: „*Sehr Geehrter Herr Professor, Wir schreiben um einfach zu sagen das wir sind ins klausur gegangen. Obwohl die*



F. Deserno

Kurz berichtet

- Am Lehrstuhl für Systemsimulation (Prof. Rüdiger) an der FAU Erlangen-Nürnberg wurde ein BaCaTeC-Antrag (BaCaTeC = Bavaria California Technology Center) zum Thema „Multi-Core Architectures for Large Scale Computational Science“ bewilligt. Damit stehen in 2010 Mittel für die Zusammenarbeit mit dem Georgia Institute of Technology zur Verfügung. Ein erster Besuch von Prof. David Bader vom GeorgiaTech in Erlangen ist für Mai anvisiert, der Gegenbesuch im Sommer. Das Projekt wird sich auf die Nutzung von Mehrkernarchitekturen für herausfordernde Anwendungen in den computerergänzten Wissenschaften konzentrieren, wie etwa die Simulation des Blutflusses in Aneurysmen oder die Analyse von biologischen Proteom-Netzwerken sowie Modellen für die Ausbreitung von Infektionskrankheiten. Die beiden Projektpartner wollen ihr Fachwissen in diesen Anwendungen austauschen und bei der Entwicklung von Algorithmen, Programmierwerkzeugen und Benchmarkergebnissen zusammenarbeiten.

wie HPC-Anwendungen, HPC-Software, Green IT oder I/O-Benchmarking. Und natürlich kam auch der Hauptzweck des Treffens – endlich einmal die Zeit zu haben, über gewisse Dinge ausgiebig zu reden, zu denen man im Alltagsgeschäft nie kommt – nicht zu kurz.

Die Organisation lag in den bewährten Händen unserer beiden Österreicher, Michael Resch und Dieter Kranzlmüller, die sich auf dem Tiroler Parkett natürlich mit autochthoner Souveränität bewegten (und ich will jetzt nichts von wegen „nicht aus Tirol“ hören!), deren Einfluss aber spätestens beim desaströsen Abschneiden der österreichischen Herren in den olympischen alpinen Ski-Disziplinen dann aber doch endete. Wie gut, dass ich mit Thomas Auckenthaler einen südtiroler Doktoranden dabei hatte, der den et-was betretenen Blicken der versammelten österreichischen und deutschen Hotelgäste nach dem Stalom der Herren eine triumphierende Mimik entgensetzen konnte!

H.-J. Bungartz

Status Mathematik-Informatik-Neubau in Erlangen

Nach dem Spatenstich vom 8. Juli 2009, der mit viel Prominenz aus Universität und Politik erfolgreich vonstatten ging (siehe Quartl 1/2010, S. 22), sind die Aktivitäten auf der Baustelle wie im Bild erkennbar im wahrsten Sinne des Wortes eingefroren.

Das seit Wochen vorherrschende winterliche Wetter macht die Erstellung des Rohbaus unmöglich. Inwieweit dies Einfluss auf den geplanten Umzugstermin im Juli 2011 hat, lässt sich zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht abschätzen. Nichtsdestotrotz schreiten die Planungen zur Ersteinrichtung des Gebäudes stetig voran. Insbesondere die Planungen für „spezielle“ EDV-Hardware wie Cluster und Visualisierungskomponenten treten nun in die nächste Phase.

Thema war sehr interessant, wir hatten einfach nicht genug Zeit um die Materie gut kennenzulernen. Weil Prüfung war ganz schwierig und seriös wollten wir nicht irgendwas schreiben. Wir waren also sehr dankbar wenn Sie uns mit neue Prüfung helfen können, wir können zB Beispiel solche Fälle zu Hause lösen, ist fuer uns besser. Wir werden sehr dankbar fur ihre Verständniss und Hilfe, und wir warten fuer die Antwort.“ Wer hier an „na gut, mein Finnisch wäre auch nicht besser“, liegt übrigens völlig falsch: Die einbestellten Studierenden erwiesen sich als reddegewandt und der deutschen Sprache als in einer Weise mächtig, die viele Einheimische (damit meint er wohl Münsteraner ...) blass werden lässt.

Dann der Feldweibel: *„Sehr geehrter Herr Prof. Dr. Scharrenberger, in der vorbezeichneten Angelegenheit möchte ich kurz darauf hinweisen, dass die Lösungen zum Arbeitspapier Nr. 4 nicht online sind. Können Sie sich bitte darum kümmern, dass das geändert wird? Ich gehe von einer Erledigung bis zum 30. April aus und danke Ihnen im Voraus recht herzlich. MfG.“* Immerhin wird aus dem oder der wohl mal ein passabler Jurist resp. eine ganz passable Juristin ... was bei folgendem Nerd alles andere als sicher ist: *„Hallo Herr Scharrenberger, Ihr Skriptum Internetrecht ist cool. Aber warum ist es nicht auf LaTeX geskriptet; auch wenn's nicht WYSIWYG ist, wärs DTPtauglich. Ausgabe geht auch einfach, bei Vorinstallation TeX direkt als DVIFile oder sonst mittels PostscriptPreviewer als dvipsPostscript-datei.“* Noch Fragen?

Ganz harmlos beginnen die E-Mails des Typs Muli: *„Sehr geehrter Professor Scharrenberger, ich moechte mich bei Ihnen auf eine Stelle als studentische Hilfskraft bewerben. Bitte prüfen Sie meine Bewerbung, ich würde mich freuen, von Ihnen zu hören.“* So weit, so gut. Dann aber meine heiß und innig geliebten Attachments – in diesem Fall ein 5.3 MB großer Scan des Abizeugnisses, ein 3.7 MB großes Konterfei des Bewerbers, 20 (!) Scheine im PDF-Format mit je gut einem MB. Da kommt Freude auf.

Schließlich führt der geplagte Kollege zwei Zitate an, die Studierenden des Typs Chatter zugewiesen werden: *„Hey! Am Do ist YAM des Unirep. Kommst Du? YW/EM.“* sowie *„Hey Prof, völlig abgefückte Vorlesung heute.“*

Weiter so – Respect. n“

Doch now for something completely different – das vergangene Quartal war nämlich mal wieder überaus ergiebig. Da wäre zum Beispiel das TUM-Merkblatt, das uns darüber aufklärt, in welchen Fällen Drittmittel umsatzsteuerpflichtig sind und wann nicht. Entscheidend ist dabei nicht die Herkunft der Mittel, sondern der Charakter der Tätigkeit. Aber wann genau handelt es sich bei einer Tätigkeit an einer Hochschule um Forschung? Hierzu lernen wir: *„Forschungstätigkeit liegt vor, wenn die Arbeiten zu neuen wissenschaftlichen Erkenntnissen, d. h. einer Ausweitung des vorhandenen Wissensbestandes, führen sollen. Dazu gehören auch Forschungen, die die Validität neuer wissenschaftlicher Erkenntnisse absichern sollen. Darauf, ob die Arbeiten im Ergebnis tatsächlich zu neuen wissenschaftlichen Erkenntnissen geführt haben, kommt es nicht an, da „Forschung“ durch das Streben nach neuer wissenschaftlicher Erkenntnis gekennzeichnet ist und ihr Irrwege und Fehlschläge wesensimmanent sind.“* Noch nicht geklärt werden konnte, ob der „vorhandene Wissensbestand“ lokal oder global zu interpretieren ist. Im ersten Fall hieße das nämlich, dass vollständige Ignoranten stets umsatzsteuerbefreite Drittmittelforschung betreiben dürfen, da ihr Tun, ausgehend von einem Wissensbestand Null, ja eine Erweiterung des selbigen geradezu anstreben muss!

Eine weitere kleine Anekdote steuert das LRZ bei. Das Nachfragen eines rechnenden Forschers (genau, jemand, der nach Erkenntnis strebt) führte zu folgender E-Mail: *„Sehr geehrter Herr Alt (Name von der Redaktion geändert), Zu dem von Ihnen gemeldeten Problem (Große Jobs (>= 1024) starten nicht richtig) teilen wir Ihnen folgendes mit: we are already working on this problem. Mit freundlichen Grüessen Gottfried Kundenfreund (Name ebenfalls geändert). ... Ihre Problemmeldung hat die Trouble-Ticket Nummer TT01234567.“* Tja, auch wenn sie stark in Mode gekommen sind – von selbst lösen Trouble-Tickets das Problem eben auch nicht.

Schließlich noch meine speziellen Freunde, die Biber – deren Umtriebe sorgen am Campus Garching seit geraumer Zeit für Unruhe. Ein Mitarbeiter eines großen ortsansässigen Rechenzentrums sah sich gar bemüßigt, folgen-

HPC-Gipfel in Tirol

Beim zweiten Mal ist es noch keine richtige Tradition, aber es hat fraglos das Zeug dazu – das Treffen einiger deutscher (oder, um es korrekter zu sagen, in Deutschland tätiger) HPC-Vertreter im österreichischen Leogang, das Ende Februar bzw. Anfang März zum zweiten Mal stattfand.



„Jeder Häuptling einen Indianer“ – so lautete die klare Direktive im Vorfeld auf die Frage, was denn alles mitzubringen sei, und so bewaffnete sich jeder Professor bzw. jede Professorin mit einem Doktoranden bzw. einer Doktorandin. Dem Vorbild prominenter Veranstaltungen folgend (die jährliche Tagung in Copper Mountain in Colorado etwa, oder das schon seit einigen Jahren etablierte jährliche Treffen der deutschen Grafik- und Visualisierungs-Community, beides ebenfalls im Winter im Gebirge), gab es vormittags Gelegenheit, sich auf verschiedene Arten der Pfunde wieder zu entledigen, die da so im Laufe der Mahlzeiten angesammelt wurden. Ab dem Mittag erwartete die Teilnehmer dann ein dicht gepacktes, intensives und abwechslungsreiches Vortrags- und Diskussionsprogramm zu Themen

Strömungen mit Freien Oberflächen innerhalb des Peano-Frameworks auf drei Postern vorstellten.



Die ASIM-Teilnehmer aus Erlangen und München vor dem Jülicher Supercomputer JUGENE (von links nach rechts): Cherif Mihoubi, Christoph Kowitz, Sarpkan Selcuk, Atanas Atanasov, Björn Gmeiner, Narek Melik-Barkhudarov, Simon Bogner, Kristina Pickl und Philipp Neumann.

Besondere Anerkennung gebührt Simon Bogner aus Erlangen, der für sein in Zusammenarbeit mit Stefan Donath und Christian Feichtinger entstandenes Poster zu „Moving Obstacles in Free Surface Flows with Lattice Boltzmann“ den von allen Workshop-Teilnehmern gemeinsam vergebenen „Audience Poster Award“ erhielt. Wir gratulieren den Gewinnern recht herzlich an dieser Stelle und freuen uns auf weitere spannende Beiträge aus Bayern und Franken auf den folgenden ASIM-Workshops.

Ph. Neumann

de Anfrage an das Staatliche Bauamt zu richten: „Liebe Kollegen, meine Kollegen machen sich nach Auftauchen mehrerer Schilder der anhängenden Art in unserer Umgebung Sorgen, ob die Stärke der Fundament-Armierungen und weitere noch folgende Stabilisierungs- und Härtingsmaßnahmen dieselben biologischen Gefahr überhaupt ausreichend Rechnung tragen ... Einige schlagen bereits vor, eine abgewandelte Version dieses Schildes auch am Übergang zum Rechnergebäude in der Leitwarte unübersehbar anzubringen. Frage: würde das Bauamt die Kosten dafür übernehmen?“ Die Antwort ließ nicht lange auf sich warten: „Sehr geehrter Herr XYZ, da die Tiere nicht klettern können, wie mir nach Rücksprache mit der unteren Naturschutzbehörde versichert wurde, sind Ihre Bedenken unbegründet, dass die Übergangsbrücke angeknabbert werden könnte. Ein Schild ist deshalb nicht notwendig. An den neuen Fundamenten, die gerade gegossen werden, wird er sich die Zähne ausbeißen, wie mir unser Statiker versicherte. Somit bestehen keine Gefahr für die Gebäude des LRZ. Lediglich auf dem Weg zum Parkplatz sollten Sie vor dem Überqueren der Fußgängerbrücke immer einen Blick auf die Träger werfen, ob diese unversehrt sind. Denn ich befürchte, dass dieses Bauwerk, das wir Ihnen direkt vor die Nase gesetzt haben, ein gewaltiges Ärgernis für Sie darstellt, da es die Sicht auf das schöne Alpenpanorama erheblich einschränkt.“ Die genannten Schilder – in der originalen sowie in der augmentierten Form – finden Sie hier abgedruckt, ebenso wie ein Foto, das den derzeitigen Stand der Biberabwehrmaßnahmen am LRZ dokumentiert.

Doch nun viel Spaß mit dem neuen Quartl, ein frohes Osterfest, viel Erfolg bei der Eiersuche – und achten Sie auf Biber!

H.-J. Bungartz



gebnis eines zweijährigen kompletten Redesigns des seit 1987 entwickelten Fortran77-Codes Carat des Lehrstuhls für Statik an der TU München.

Den krönenden Abschluss bildete der Vortrag „Structural Optimization of Aircrafts“ des Gastredners Dr.-Ing. Alexander Hörmann von EADS. Er präsentierte einen spannenden Einblick in die Anwendung von Simulation und Strukturoptimierung im Kontext aktueller Projekte der zivilen und militärischen Luftfahrt. Am Abend gab es dann anstelle der gewohnten Pizze einen kulinarischen Ausklang der bayerischen Art, mit Leberkas, Brezn und Bier (gemäß bayerischer Orthographie).

So kann für diesen BGCE Research Day ein fachlich wie zwischenmenschlich durchweg positives Resümee gezogen werden, und gespannt erwarten wir den 30. Research Day im nächsten Semester, den dann bereits ein weiterer neuer Jahrgang von BGCE-Studenten mitgestalten wird.

M. Fischer

A Simulations-Workshop in Jülich

Vom 3.- 5. März fand der ASIM-Workshop „Trends in Computational Science and Engineering: Foundations of Modeling and Simulation“ am Forschungszentrum Jülich statt.

Neben den fachlich breit gefächerten Vorträgen aus verschiedensten Zweigen der Modellbildung und Simulation stand der Poster-Brunch am Mittwoch Morgen im Mittelpunkt der dreitägigen Veranstaltung, der Studenten und Doktoranden die Möglichkeit bot, ihre Forschungsergebnisse auf einem Poster zu präsentieren und sich mit Teilnehmern anderer Universitäten und Fachrichtungen auszutauschen. Unter den 39 Postervorstellungen fanden sich auch acht Beiträge aus Bayern: Der Lehrstuhl für Systemsimulation der Universität Erlangen-Nürnberg präsentierte auf fünf Postern Forschungsschwerpunkte aus den Gebieten Starrkörperdynamik, Lattice Boltzmann-Verfahren und hierarchischen hybriden Gittern, während Teilnehmer des Lehrstuhls für Wissenschaftliches Rechnen der TU München ihre Ergebnisse zu Computational Steering, Multiskalen-Strömungssimulationen und



gemeinsamen Austausch einlädt. Die Veranstaltung fand im frisch renovierten Fakultätsraum der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen statt, wo die Gäste mit Kaffee, Gebäck und Süßigkeiten empfangen wurden.

Nach herzlichen Begrüßungsworten durch Herrn Prof. Bletzinger startete COME-Student Hagen Wille den Kanon der studentischen Vorträge mit seiner Präsentation „Continuous Pedestrian Simulation“. Dieser Vortrag wurde von allen mit Spannung erwartet, da Herr Wille bereits zuvor auf dem Research Day in Garching über sein Softwareprojekt referiert hatte, jedoch die Simulationsergebnisse und Videoanimationen bis zu diesem Research Day in München zurückgehalten hatte. Hagen Wille analysierte in seinem Vortrag das Fußgängerverhalten, zeigte wichtige Modellierungsaspekte auf und präsentierte zahlreiche Simulationsergebnisse.

Im folgenden Vortrag lenkte der Erlanger CE-Student Stefan Geißelsöder den Fokus weg vom Wissenschaftlichen hin zu den Softskills: In seinem lebhaften Beitrag mit dem Titel „Supervised Teaching“ berichtete er über interessante Aspekte zur Verbesserung der Lehre. Es folgte das mittlerweile am Research-Day etablierte Rodeo, bei dem die Studenten eines Studienganges sich und ihr aktuell bearbeitetes Themengebiet im Schnelldurchgang vorstellten. Die thematisch breit gestreuten Kurzpräsentationen umfassten die FE-Modellierung eines Schiffsrumpfes, die Simulation des Brennkammerschwingungsverhaltens von Raketentriebwerken, die Simulation einer Supernova, die Ortungsfehlereliminierung mittels mathematischer Methoden im Rahmen des DOLL3-Projekts, die Anwendung von Monte Carlo Methoden im Bereich Computational Finance, sowie die Problemstellung von Design und Anordnung von Hornantennen. Den Abschluss des Rodeos bildete ein sozialkritischer Vortrag über die Gründe der Abwanderung von hochqualifizierten Arbeitskräften aus dem Iran.

In der Zwischenzeit war das Buffet wieder mit Kaffee, Kaltgetränken und Gebäck ausgestattet worden und war somit für den erneuten Ansturm gerüstet. Im ersten Vortrag nach der Kaffeepause stellte Michael Fischer das Softwarepaket Carat++ vor, ein objektorientiertes und paralleles Programm für Finite Elemente Simulation und Strukturoptimierung. Carat++ ist das Er-

Software Engineering meets Scientific Computing

Half a year ago the first Ph.D. students have started to work on the Project B2 of the Munich Centre of Advanced Computing (MAC). The goal and title of the project is „Applying and Adapting Software Engineering Methods and Tools to CSE Research Projects“. This includes two areas, first software engineering methods shall improve the performance and quality of the software, second they shall improve the efficiency of the development process.

In this context the Ph.D. students with a focus on software engineering investigate three application projects for possible improvements – SeisSol, ATLAS and Computational Steering.

SeisSol is a scientific software for the numerical simulation of seismic wave phenomena. Synthetic data sets and seismograms can be computed to support seismological research to understand observed data from the field and to determine the characteristics of sources and material structures. The development of SeisSol started from 2006 and was staffed with a maximum number of five developers until today.

ATLAS is a large particle accelerator experiment at the Large Hadron Collider (LHC) located at CERN, Geneva, Switzerland. ATLAS is a high-precision particle detector used for detecting and classifying collisions of particles. The ATLAS team has developed a set of software and middleware tools which aim to provide three functions: (1) consolidation and filtering of raw data, (2) distribution of data on the Worldwide LHC Computing Grid (WLCG) and (3) conducting scientific investigations on the collected data such as simulation, reconstruction and analysis. There is a continuous growth in the number of ATLAS users and developers, which are about 2000 physicists and engineers from 204 institutions and 35 different countries.

Finally the third application is the project B8 „Computational Steering“, also part of MAC. The goal of the greenfield engineering project is to develop a framework for the processing pipeline ranging from scalable data

processing workflows to interactive visualization and human-computer interaction in virtual and augmented reality environments. To facilitate a real-time simulation the project also investigates on methods to pre-calculate or cache relevant values.

While the third project („Computational Steering“) starts from scratch, SeisSol and ATLAS have been developing their software for several years. Therefore the first task was to find out, how they currently solve software engineering related issues and where improvements could be achieved. After the initial investigation it is interesting to take a look back at the initial project motivation. In this motivation it was claimed that „The horizon in these communities“ (Scientific high performance computing) „was usually limited to the development of algorithms and libraries to solve scientific problems. As a result, the field suffers from an obvious lack of support for software development as well as from a severe lack of software quality (2005 PITAC report)“. This statement has to be revised, at least concerning the two on-going application projects in B2. In fact, there are a lot of comprehensive solutions in different software engineering disciplines. A good example is the area of testing; the on-going projects SeisSol and ATLAS run comprehensive tests on their systems to ensure the correctness of the developed software. Another example is the technical management of dependencies and releases, where ATLAS provides a partly proprietary, but mature solution.

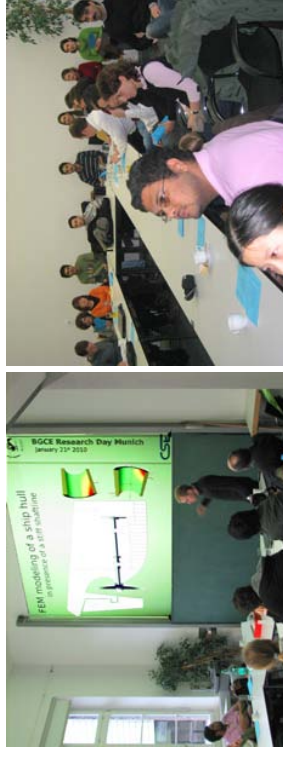
Although a lot of well-known methods from the area of software engineering are already applied, there is a lot of space for improvements. What makes these projects very challenging and interesting for research is not the absence of applied software engineering, but the extreme environmental factors of High Performance Computing research projects, such as high fluctuation in staff, extreme performance and portability requirements. This requires methods of software engineering to be adapted or even newly invented.

A very obvious example is the issue of documentation. Participants from both existing projects stated that it takes months for new project members to

BGCE Research Day in München

Computational Science meets Engineering

Am 21. Januar 2010 fand am Stammgelände der TU München der 29. Research Day der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) statt. Geboten wurde ein interessanter Mix aus studentischen Vorträgen zu Themen aus dem weiten Feld des Computational Engineering: Die Beiträge reichten von der Fußgängersimulation, über die computerbasierte Untersuchung von Raketentriebwerken, bis hin zur Simulation einer Supernova. Ergänzt wurde das Programm durch zwei Beiträge aus der Lehrstuhlforschung und der Industrie. Als Gastredner konnte erfreulicherweise Herr Dr.-Ing. Alexander Hörmann von EADS gewonnen werden, der einen Überblicksvortrag zum Thema „Strukturoptimierung in der Luftfahrt“ präsentierte.



Der Research Day ist eine dreimal im Semester stattfindende Veranstaltung, auf der sich die Mitglieder der drei teilnehmenden Programme – Computational Engineering (CE) in Erlangen, Computational Science and Engineering (CSE) in Garching und Computational Mechanics (COME) in München – zu Vorträgen und Diskussionen treffen. Seit Jahren ist der Research Day ein zentraler Bestandteil im Angebot der BGCE und gerade auf Grund seines integrativen Charakters von großer Bedeutung, da er die BGCE-Mitglieder in einem regelmäßigen Turnus zusammenführt und zum

nicht nur als arabischer Säbeltänzer geoutet, sondern hielt ganz nebenbei zusammen mit seiner Mitarbeiterin Gabriele Witterstein einen Blockkurs zu *The Mathematics of Phase Transitions*. Und eingangs genannte Herren präsentierten mit Jens Schneider, der zum Jahreswechsel von der TUM an die KAUST gewechselt ist, die beiden erwähnten Projekte im Rahmen dreier Vorlesungen. Dass all das auf reges Interesse gestoßen ist, manifestiert sich in meinen Augen auch darin, dass eine ganze Traube von Studenten Interesse gezeigt hat, die TUM im Sommer zu besuchen und hier einen mehrmonatigen Forschungsaufenthalt zu verbringen. Darunter auch solche, bei denen Dimdl, Bier und Blasmusik offensichtlich keine Triebfeder sind.

Neben den Vorträgen blieb viel Zeit, wissenschaftlichen Diskussionen zu frönen, die beeindruckende KAUST-Ausstattung ausgiebig zu begutachten—von der Campus-Feuerwehr über die größte CAVE der Welt bis hin zum Superrechner Shaheen—und neue gemeinsame Projekte in die Welt zu setzen. Abgesehen von den fachlichen Aspekten konnte im Rahmen des WEP-Besuchs auch die lokale Kultur etwas studiert beziehungsweise beobachtet werden: interessant, wie sich aus einem Schmelztiegel verschiedener Nationen ein Campus-Mikrokosmos herauschält. Während das Leben auf dem KAUST-Campus für saudische Verhältnisse stark nach westlichem Vorbild geprägt ist, tragen doch viele saudische Studentinnen die einheimische Tracht, und der Schleier gehört zum alltäglichen Bild. Neben Fachlichkeit und Kultur durfte man sich die Gelegenheit, Sport draußen zu machen, nicht entgehen lassen, war doch im Winter die Wüstenhitze mit etwas unter 30 Grad noch gut erträglich, wenn auch schon jetzt eine schweißtreibende Angelegenheit. Und schlussendlich gab es eben auch ein Violinkonzert mit eloquenter Unterstützung weiterer WEP-Gäste. Da es in Saudi-Arabien unüblich wäre, wenn Männer und Frauen gemeinsam musizieren würden, hatte man kurzerhand beschlossen, dass die Männer zur Abendgestaltung für die Frauen aufgehen sollten. Es war also zu keiner Zeit nichts moralisch Verwerfliches mit im Spiele, und wir freuen uns weiterhin auf eine produktive und freundschaftlich geprägte Zusammenarbeit mit KAUST.

T. Weinzierl

understand the existing system, due to a lack of documentation. This issue is even more severe as in general the personnel fluctuation is high in research projects. But traditional methods for documentation systems from the field of software engineering are not directly suitable, mainly because they are too heavy weight and have no focus in capturing research requirements. Due to the lack of documentation, reverse engineering is applied to explore the system and to learn about the system architecture. We started the reverse engineering with the requirements elicitation by applying techniques such as interviewing developers, literature research and studying code to discover the system requirements and to record them into the documentation. System analysis and design processes can be run based on these requirements. Also a source code documentation generator tool, Doxygen, was employed to generate an on-line documentation of SeisSol. Source code documentation helps the developers to extend the implementation and to cooperate with other team members. Finally we have started to develop techniques to automatically identify information from informal artifacts such as E-Mails or discussions relevant for documentation.

A second example for a software engineering related issue is the bug report lifecycle in the ATLAS project. The organization of this huge project is well structured, but in contrast to industrial projects, there is no strict hierarchy to assign bug reports to respective developers for fixing them. For this reason and due to the large size of the project it is very difficult to assign a bug report to the right person. Even reporting a bug in ATLAS is quite difficult, as a lot of information has to be added like version numbers of different system components, but also very detailed information about the underlying hardware. With a required accuracy of calculation, where different processor vendors can cause different results, this information is essential for the developer who is fixing a bug. Therefore our goal is to enhance the current bug reporting system available at ATLAS so it can automatically gather bug related details (such as defective features, number of bugs with the same issue, different bug generation scenarios, and version number). Furthermore we are developing a solution to automatically recommend an assignee for a

newly created bug report. We apply machine-learning methods, which have been successfully used in open-source projects to automate the bug report assignment. This recommendation is based on the existing expertise of developers, which can be automatically gathered from the bug reports he has been working on in the past.

As a third example focusing on the improvement of performance we have examined failure tolerant techniques for workflow scheduling. Proactive techniques based on statistical data evaluation of MTBFs for server clusters were found to be inappropriate to predict failures for long and short running scientific workflows, such as HEP workflows. We envision a profit-maximizing approach for data-center owners to foster the switch of Scientific Computing to a Cloud Computing based infrastructure. In addition to that, we examined the service-lifecycle management of distributed applications in a Cloud environment. We plan to extend this work to support management of scientific applications in the Cloud.

J. Helming

ISAR: Integrierte System- und Anwendungsanalyse für massivparallele Rechner

Im Rahmen des Förderprogramms „IKT 2020 – Forschung für Innovationen“ wird seit Januar 2009 das Forschungsprojekt ISAR vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. Ziel des Projektes ist es, ein System zu realisieren, das die effiziente Nutzung der in der Gauß-Allianz verfügbaren Hochleistungsrechner unterstützt. Das Projekt ist ein Verbundprojekt, in dem die Technische Universität München (TUM), das Leibniz Rechenzentrum (LRZ), das Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft (RZG), IBM Deutschland (IBM) und die ParTec GmbH (ParTec) zusammenarbeiten.

Aktuelle Überwachungssysteme, wie sie am LRZ und RZG zur Erken-

folgend versuchen wollen, sich in der Schweiz eine gewisse Existenzsicherung aufzubauen.

Solche Dinge hätten im renommierten Quartl aber nichts zu suchen, sind sie doch weit hergeholt. Wobei weit hergeholt genau genommen schon wieder stimmt: von der arabischen Halbinsel nämlich. Mit der dort 2009 eingeweihten King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) hat die TUM seit einem guten Jahr zwei Kooperationsprojekte installiert. Diese hören auf die Namen *Virtual Arabia* und *Simulating CO₂ Sequestration* und wurden in der TUMCampus-Ausgabe 01/2010 schon thematisiert. Der geneigte Leser sei daher an dieses objektive Blatt verwiesen. Fairerweise sei an dieser Stelle auch gesagt, dass KAUST noch ein drittes Projekt an der TUM hat, das jedoch in der Chemie angesiedelt ist und (leider) keine Quartl-Affinität aufweist.



Impressionen vom KAUST-Campus

KAUST ist, wie vielerorts ausgebreitet, eine reine Postgraduate-Universität, die sich auf die Fahnen geschrieben hat, bereits in wenigen Jahren in der internationalen Forschungslandschaft ganz oben mitzumischen. Dementsprechend ambitioniert liest sich das Ensemble der unter Vertrag genommenen Wissenschaftler, und ambitioniert ist auch das Programm, das KAUST Anfang 2010 für die vier Wochen zwischen den dortigen Semestern auf die Beine gestellt hat: Dort wurde Mitarbeitern, Studenten und Gästen ein buntes Poppourri aus Vorlesungsreihen, künstlerischen und wissenschaftlichen Kursen, Workshops und Fortbildungen offeriert. Das ganze firmierte unter dem Begriff *Winter Enrichment Program*. Und zu diesem reichhaltigen Angebot trugen auch einige TUMler bei: Prof. Karl-Heinz Hoffmann hat sich

wurden. Auch der gesellschaftliche Ausflug am Donnerstag gab ausreichend Gelegenheit, um sich mit Professoren und Teilnehmern auszutauschen. Die Fahrt ging nach Rishikesh, einer bekannten Pilgerstadt am Fuße des Himalaya. Durch sie verlässt der heilige Fluss Ganges das Gebirge und schlängelt sich in Richtung Haridwar. Haridwar ist eine weitere Pilgerstadt, welche wir ebenfalls auf dem Rückweg besuchten.

Am Ende dieser sehr arbeitsreichen Woche haben wir Teilnehmer eine durchweg positive Bilanz gezogen: Die Winterakademie war sowohl wissenschaftlich als auch kulturell eine Bereicherung. Interessierte deutsche Studenten sind herzlich eingeladen, sich vorab zu informieren und für das nächste Jahr zu bewerben. Mehr Informationen und weitere Eindrücke befinden sich auf folgender Webseite:

<http://www.leb.eei.uni-erlangen.de/winterakademie/>



T. Precilik

Winter Enrichment Program an der KAUST

Wenn HJB am Abendprogramm *Männer treten für Frauen auf* teilnimmt, denkt man vielleicht an die Chippendales. Wenn TW sich im Februar über die drückende Hitze beschwert, denkt man vielleicht an ausschweifende Bierzelt- und Kneipenbesuche. Und wenn sich die Gespräche der beiden um Verschleierung drehen, denkt man vielleicht, dass sie dem Vorbild einiger deutscher Nahezu-Hartz-IV-Empfänger

nung von kritischen Systemeigenschaften eingesetzt werden, basieren auf der Erfassung von Systemdaten mit grober Auflösung. Beispiele für kritische Systemeigenschaften sind IO-Bottlenecks, Hot Spots im Kommunikationsnetzwerk und ungenutzte CPUs durch ineffizientes Batch-Scheduling oder ungenaue Ressourcenspezifikation in Batch-Jobs.

Für die Erkennung vieler Ineffizienzen reicht diese grobe Information aber nicht aus. Insbesondere die Erkennung ineffizienter Anwendungen erfordert die Erfassung und Auswertung detaillierter Informationen, wie z.B. die Megaflop-Rate auf jedem verwendeten Prozessor mittels der Hardware Performance Counter zur Erkennung von Lastungleichgewichten oder die Cache-Miss-Rate zur Erkennung von mangelnder Datenlokalität. Aufgrund der entstehenden großen Datenmengen ist die Archivierung und anschließende Analyse sehr aufwändig.

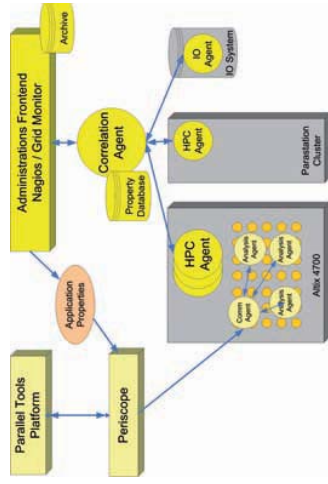
Auf der Basis der über Anwendungen gefundenen Information muss dann zusammen mit den Anwendern an der Optimierung der Programme gearbeitet werden. Der erste Schritt hier ist eine detaillierte Leistungsanalyse zur Identifikation von Programmteilen mit einem ineffizienten Verhalten und der Gründe für dieses Verhalten. Klassische Werkzeuge zur Anwendungsanalyse stoßen hier bei Anwendungen mit einer großen Zahl von Prozessoren schnell an ihre Grenzen. Dies gilt nicht für Periscope, das im Rahmen eines dreijährigen DFG-Projektes am Lehrstuhl für Rechnertechnik und Rechnerorganisation der Technischen Universität München realisiert wurde und nun im Rahmen von ISAR weiterentwickelt wird. Ausgehend von einer formalen Spezifikation von Leistungseigenschaften, suchen Analyseagenten automatisch während der Programmausführung nach ineffizienten Programmteilen. Die Agenten werden auf zusätzlichen bzw. dafür dedizierten Prozessoren/Cores ausgeführt.

Die Entwicklung der integrierten System- und Anwendungsanalyse wird getrieben von den Anforderungen der großen Rechenzentren RZG und LRZ sowie von den beteiligten Industriepartnern. RZG, LRZ und IBM verfolgen gemeinsam neben der Werkzeugentwicklung das Ziel, Anwendungen am RZG und LRZ zu identifizieren, die das Potential für die Nutzung zukünftiger

tiger europäischer Petaflops-Rechner haben. Die Systemüberwachung soll zur Identifikation der Anwendungen und Periscope zur Anwendungsanalyse verwendet werden. Die Anwendungen sollen zusammen mit den Anwendungsexperten analysiert und optimiert werden. Die Systemüberwachung soll in die Produkte von ParTec einfließen sowie allen Gauß-Zentren zur Verfügung stehen. Periscope wird in die hauptsächlich von IBM entwickelte Parallel Tools Plattform (PTP) eingebracht. Der Einsatz der PTP mit dem integrierten Periscope kann die Produktivität der Anwendungsentwicklung u.a. an den Gauß-Zentren deutlich erhöhen.

Die ISAR-Architektur

Die Umgebung zur integrierten System- und Anwendungsanalyse wird auf der Basis von Periscope realisiert (siehe Abbildung). Hierbei wird Periscope zur Leistungsanalyse paralleler Anwendungen eingesetzt. Zusätzlich wird basierend auf den Analyseagenten von Periscope die Systemüberwachung realisiert.



Architektur der ISAR-Umgebung

Periscope ist ein Werkzeug zur Leistungsanalyse, das automatisch während der Programmausführung in einer verteilten Weise nach Leistungseigen-

ausfiel. Trotzdem rafften wir uns kurz nach der Ankunft im Hotel auf und erkundeten die Stadt. Ein großer Dank an dieser Stelle noch einmal an unseren indischen Begleiter Aabhas, welcher uns unter anderem den „Qutb Minar“ Komplex mit dem beeindruckenden roten Sandsteinturm und den Triumphbogen „India Gate“ zeigte.

Nach einem erholsamen Schlaf brach unsere Gruppe nach Roorkee auf. Roorkee ist eine im Vergleich zu Delhi geradezu winzige Stadt mit 140000 Einwohnern. Sie beherrscht eine der sieben ingenieurwissenschaftlich-technologisch ausgerichteten Eliteuniversitäten in Indien, das „Indian Institute of Technology Roorkee“. Die Fahrt war, wie vermutlich sämtliche motorisierte Fahrten in Indien, ein Erlebnis. Halsbrecherische Überholmanöver, begleitet von andauerndem Hupen sowie tiefen Schlaglöchern in den Straßen gehören hier eindeutig zur Tagesordnung. Trotzdem erreichten wir unser Ziel unversehrt. Wie alle Teilnehmer wurden auch wir auf dem Campus der IIT untergebracht.

Der Sonntag begann dann mit dem ersten vorsichtigen Abtasten beiderseits, was jedoch, nicht zuletzt durch die Aufgeschlossenheit der indischen Studenten, bald in angeregte Gespräche umschlug. Lediglich das typischerweise ausgeprägt schnelle Sprachtempo bremste die Gespräche ironischerweise hin und wieder. Der lockere Terminplan vom Wochenende verdichtete sich jedoch abrupt am Montag. Jeder der Studenten und einige eingeladene Dozenten berichteten über zahlreiche ein- und weiterführende Themen aus dem weitreichenden Gebiet des jeweiligen Kurses. Der von Professor Durst betreute Kurs behandelte Themen aus der Strömungsmechanik und der Wärmeübertragung, wohingegen sich der zweite Kurs unter der Obhut von Professor Rüde mit dem Lösen von Ingenieursproblemen auf Hochleistungsrechnern beschäftigte. Der dritte Kurs wurde von Professor Ryssel moderiert, dessen Vortragende Themen aus der Halbleitertechnik behandelten. Die Vorträge wurden immer wieder durch interessante Fragestellungen und aufschlussreiche Erklärungen und Ergänzungen der betreuenden Professoren bereichert. Im Anschluss entstanden fruchtbare Diskussionen, welche oft noch in den Kaffeepausen oder beim gemeinsamen Essen fortgesetzt

Winterakademie in Indien

Am Freitag, den 11.12.2009 um etwa 4 Uhr nachmittags hob die Maschine ab, welche uns nach Indien bringen sollte. Eine kleine Gruppe Erlanger Studenten befand sich auf dem Weg zur „Indo-German Winter Academy 2009“. Ziel dieser Winterakademie ist es, herausragende deutsche und indische Studenten zusammenzubringen und den wissenschaftlichen und kulturellen Austausch zu fördern. Dies geschieht im Rahmen von mehreren Kursen, welche jeweils von Professoren betreut werden. Jeder Teilnehmer ist einem Kurs zugewiesen und muss im Voraus einen Vortrag ausarbeiten. Ein Tutor steht ihm mit Rat zur Seite, wenn auch oft nur per elektronischer Post.



Ausgerüstet mit eben diesem Vortrag landeten wir morgens um kurz vor 8 Uhr in Delhi. Unnötig zu erwähnen, dass die Nacht unbequem und kurz

schaften sucht. Es besteht aus einem Frontend, das die parallele Anwendung und eine Hierarchie von Analyseagenten startet. Hierbei wird die Platzierung der Anwendungsprozesse und der Agentenprozesse auf die vorhandenen Prozessoren vom Frontend entsprechend der Netzwerktopologie optimiert. Indem der Anwender zusätzlich zu den Prozessoren der Anwendung weitere Ressourcen für die Analyse allokiert, kann die Analyse beliebig skaliert werden.

Nachdem die Anwendung gestartet ist, verbinden sich die Analyseagenten mit den ihnen zugeteilten Anwendungsprozessen. Danach starten die Agenten unabhängig voneinander die Analyse. Hierbei verfolgen sie eine vorgegebene Analysestrategie, die bestimmt, nach welchen Leistungseigenschaften zuerst gesucht wird und wie aus gefundenen Eigenschaften neue Hypothesen erstellt werden. Die Suche basiert auf der typischen Eigenschaft, dass Phasen der Anwendung wiederholt ausgeführt werden. Somit können nach der Ausführung einer Phase die aktuellen Hypothesen ausgewertet und neue aufgestellt werden. Entsprechend der Hypothesen wird dann das Monitoringssystem konfiguriert, und bei der nächsten Ausführung der Phase werden die entsprechenden Messdaten erfasst.

Als Ergebnis der Analyse präsentiert Periscope dem Nutzer eine Liste von Eigenschaften wie z.B. Lastungleichgewicht der Threads von Prozess 5 in der parallelen Schleife in Zeile 10 von Funktion foo mit einem Rechenzeitverlust von 10%. Periscope fasst hierbei ähnliche Eigenschaften in unterschiedlichen Prozessen zusammen.

Periscope wird im Rahmen des Projektes in die Parallel Tools Plattform integriert. Die Integration wird zu einer deutlichen Produktivitätssteigerung bei der Leistungsanalyse und somit insgesamt bei der Programmentwicklung für Petascale-Rechner führen. Darüber hinaus wird Periscope so erweitert, dass es auch mit den spezifischen Restriktionen solcher Rechner, zum Beispiel die Verwendung eines Mikrokernel-Betriebssystems, erfolgreich genutzt werden kann. Zur Unterstützung von großen Produktionsanwendungen ist es auch erforderlich, die in Periscope vorhandene Unterstützung für Fortran-Programme auf C/C++-Programme zu erweitern.

Der zweite Teil der ISAR-Umgebung, die System- und Anwendungsüberwachung, wird basierend auf den Periscope-Agenten realisiert. Die unabhängigen Agenten suchen nach vorgegebenen System- und Anwendungseigenschaften, die in einer Datenbank enthalten sind. Die Liste potentieller Eigenschaften, die im Rahmen des Projektes für die Zielsysteme definiert werden, kann dabei dynamisch erweitert werden. Die Ergebnisse der automatischen Systemanalyse werden über ein Administrations-Frontend auf der Basis von Nagios am LRZ beziehungsweise dem Grid Monitor von ParTec dem Systemadministrator präsentiert und archiviert. Auf verschiedenen Ressourcen der Infrastruktur werden Periscope Analyseagenten platziert, die automatisch nach kritischen Eigenschaften der jeweiligen Ressource suchen. Basierend auf der Agentenhierarchie von Periscope werden die gefundenen Eigenschaften an höhere Agenten weitergegeben, die dann die gefundenen Eigenschaften verschiedener Agenten in Bezug zueinander setzen.

Für die System- und Anwendungsüberwachung auf sehr großen Parallelrechnern ist es erforderlich, mehrere Analyseagenten zu starten, die jeweils für bestimmte Systemaspekte, bestimmte Knotenuntermengen oder bestimmte Anwendungen zuständig sind. Durch die Nutzung mehrerer Agenten auf einem System, eine der wesentlichen Eigenschaften von Periscope, kann eine beliebige und gute Skalierung erreicht werden.

Auf manche der gefundenen Systemeigenschaften kann der Administrator direkt reagieren, andere Eigenschaften müssen mit dem Rechnerhersteller diskutiert werden. Leistungseigenschaften, die eine Optimierung von Anwendungen erfordern, werden an Anwendungsbetreuer im Rechenzentrum gemeldet und von diesen in Zusammenarbeit mit den Anwendungsgruppen unter Verwendung der skalierbaren verteilten Leistungsanalyse von Periscope weiter analysiert. Hierbei wird wie in Abbildung 1 angedeutet eine direkte Weitergabe der mit der Systemüberwachung gefundenen Leistungseigenschaften an die Analyse mit Periscope unterstützt.

Status

Im ersten Jahr des Projektes wurde ein Prototyp der Systemüberwachung auf dem HLRB2 realisiert sowie Produktionsanwendungen mit Hilfe von

Nach jetzigem Stand wird vor allem der massiv ansteigenden Energieverbrauch zu einem Riesenproblem werden. Das Grundproblem dabei ist nicht schwer zu verstehen: Wenn man sich etwa zum Ziel setzt, dass auch ein Exa-Scale-System weniger als 10 Megawatt Leistungsaufnahme haben sollte, dann kann man leicht errechnen, dass pro Operation nur 10^{-11} Watt-sekunden Energie verfügbar sind. Das mag unter Ausnutzung aller technologischen und architekturellen Tricks reichen, um eine Gleitpunktoperation durchzuführen, aber es ist mit den heute verfügbaren Technologien ausichtslos, damit einen (globalen) Zugriff auf einen Exa-Scale-Speicher zu realisieren. Adieu zum flachen Speichermodell mit Random-Access! Derartige Überlegungen werden sich nicht nur auf die Rechnerarchitektur auswirken, sondern wohl auch direkt auf die Entwicklung von Algorithmen, die dieses Leistungspotential dann noch ausschöpfen können.

Ein weiterer bislang unterschätzter Gesichtspunkt ist die Ausfallsicherheit des Systems und seiner Komponenten. Auch hier zwingt die schiere Größe und Komplexität der kommenden Systeme zur Konzeption völlig neuer Ansätze, und auch hier kann das Problem vielleicht nur im Zusammenwirken von Architektur und Algorithmen gelöst werden.

Im Vortragsprogramm der SC09 waren die Erlanger HPC-Gruppe und der Lehrstuhl für Systemsimulation gut vertreten, Prof. Wellein als Mitglied des Programmkomitees, Dr. Hager als Mitorganisator eines Tutorials über „Hybrid MPI and OpenMP Parallel Programming“ und M. Wittman als Student Volunteer und als Autor eines Posters gemeinsam mit Dr. Hager. Prof. Rüdiger war in die Masterworks-Session eingeladen worden und trug stellvertretend für das walBerla-Team des LSS zum Thema „Simulation and Animation of Complex Flows on 10,000 Processor Cores“ Ergebnisse vor, die mit Förderung von KONWIHR und unter Nutzung der Rechner am RRZE und am HLRB-II am LRZ in Garching erzielt werden konnten.

U. Rüdiger

mischen Lage, die auch im Straßenbild einer US-Stadt wie Portland in recht deprimierender Form sichtbar wird, brach die SC dieses Jahr alle Rekorde. Mit 11000 Teilnehmern und 24000 qm Ausstellungsfläche war die Konferenz riesig, so dass man große Schwierigkeiten hatte, jemanden gezielt zu treffen. Andererseits liefen einem mitunter unverhofft Bekannte über den Weg. Der Erfolg der SC09 zeigt, dass die wirtschaftliche Bedeutung des Hochleistungsrechnens sogar gegen den allgemeinen Trend weiter wächst.

Als besonderes Highlight der SC09 muss die Keynote von Al Gore gelten, der sich in routinierter Selbstironie mit dem Satz „I used to be the next president of the United States“ vorstellte, um dann einen engagierten und überzeugenden Vortrag zur Bedeutung des Supercomputings für die Lösung der Klima- und Energiekrise zu halten. Bei uns wäre es wohl nur schwer vorstellbar, dass ein ehemaliger Vizekanzler zum Vortrag auf einer Computerkonferenz käme und über die Bedeutung der Computational Sciences für die Zukunft der Menschheit referiert. Fachlich ist von der SC zu berichten, dass GPUs im Hochleistungsrechnen inzwischen omnipräsent sind und das Thema vieler Vorträge und Workshops bestimmten. Der Hype zum Thema ist für Supercomputing-Spezialisten wahrlich nicht mehr überraschend. Aber auch auf der SC gibt es bei GPUs viel Spreu, und manchmal sucht man darunter den Weizen vergeblich. Ansonsten ist bemerkenswert, dass sich der Fokus der Forschung inzwischen stark auf das Thema „Exa-Scale“ konzentriert, also zukünftige Supercomputer, die ein Leistungspotential von 10^{18} Operationen pro Sekunde erreichen sollen und damit um weitere drei Größenordnungen schneller sein werden als die heutigen Top-Supercomputer. Es sieht so aus, als sei der Schritt vom Tera- zum Peta-Scale, den wir im vergangenen Jahrzehnt erreichen konnten, noch ein relativ einfacher gewesen. In der Rückschau ergab sich der Fortschritt in den vergangenen 10 Jahren mehr oder weniger kanonisch aus der Skalierung der vorhandenen Technologien. Der nächste Schritt zum Exa-Scale scheint jedoch erheblich schwieriger zu werden, denn einige Grenzen der Skalierbarkeit sind doch recht nahe gerückt.

Periscope analysiert und optimiert. Periscope wurde um eine auf der Parallel Tools Plattform basierenden Benutzungsoberfläche erweitert, die es dem Anwendungsprogrammierer erlaubt, die gefunden Leistungseigenschaften direkt am Quelltext der Anwendung zu analysieren. Periscope ist auf dem HLRB2 (Altix 4700), auf Power6 und auf x86-basierten Clustern einsetzbar. Weitere Information: ISAR:<http://www.in.tum.de/index.php?id=isar>

Periscope:<http://www.lrr.in.tum.de/petkovve/psc/>

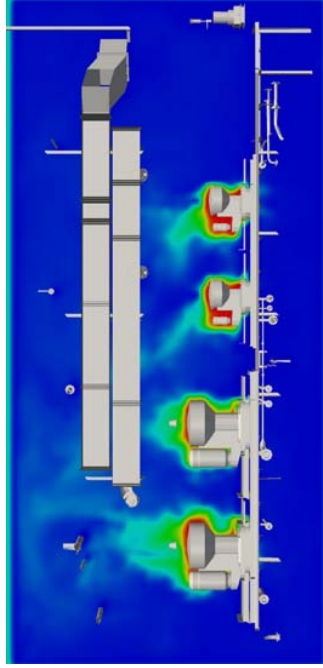
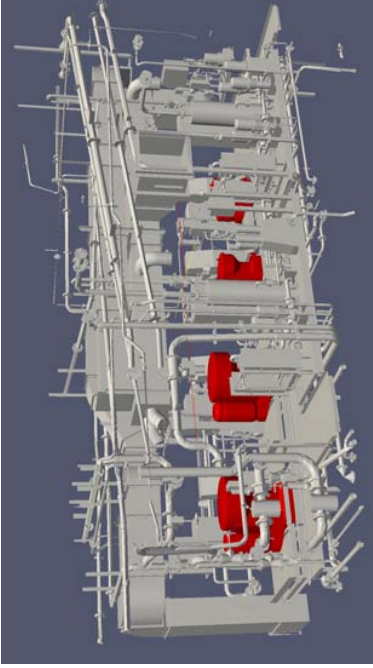
M. Gerndt

Auf den Spuren von Amdahl: Skalierbarkeitsstudie eines Strömungs-Codes

Die Simulation von Strömungen – ein klassisches Spannungsfeld des Höchstleistungsrechnens – bedingt durch die zu Grunde liegende Komplexität den Einsatz effizienter Parallelisierungsstrategien, insbesondere um auch bei sehr feinen Auflösungen Antworten in (noch) vertretbarer Zeit zu erhalten. Dies ist etwa bei Computational Steering-Anwendungen von großer Bedeutung, da transiente Strömungsprobleme hier interaktiv gesteuert werden sollen. Im Rahmen von KONWIHR wurde dazu ein vorhandener Strömungscode auf den Bundeshochleistungsrechner HLRB II portiert und eine Skalierbarkeitsstudie durchgeführt.

Zur Simulation von Raumluftströmungen basierend auf natürlicher Konvektion wurde ein Inhouse-Strömungs-Code entwickelt, der auf der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) beruht. Diese Methode diskretisiert nicht die hydrodynamischen Grundgleichungen (Navier-Stokes), sondern basiert auf der Theorie der statistischen Physik. Als Simulations- und Testzenario dient der Maschinenraum eines Schiffes, wo Separatoren (im oberen Bild hervorgehoben) das für den Betrieb eines Schiffes benötigte Motoröl von Schmutz- und Altrölparteilen trennen. Diese Bauteile werden im Allgemeinen sehr heiß und es stellt sich die Frage, ob natürliche Konvektion zur Kühlung ausreicht. Die Randbedingungen des Maschinenraumes werden demnach durch reine Temperaturrandbedingungen vorgegeben, wobei die Wände re-

lativ kalt sind und die Separatoren sehr heiß werden. Aus dieser Ausgangsgeometrie wird anschließend mittels eines baumbasierten Generators ein Voxelmmodell in verschiedenen, gewünschten Auflösungen erstellt.



Der ursprüngliche Code wurde unter Verwendung von MPI parallelisiert, wobei das Berechnungsgebiet vom Masterprozess in äquivalente Teilbereiche zerlegt wird, um anschließend an die Slaveprozesse verteilt zu werden. Diese wiederum kommunizieren untereinander und tauschen Daten an den Rändern selbstständig (d. h. ohne Mitwirkung des Masters) aus. Nachdem dieser Code bisher nur auf einem kleinen Cluster von acht Opteron-Knoten

das Projektkonto unter seinem Namen mit seiner E-Mail-Adresse an. Als Verantwortlichen trägt er A nebst dessen E-Mail-Adresse ein. Soweit kein Problem. Zu selbigem wird es nur, da A nämlich Eve oder E (nein, kein Man-in-the-Middle-Angriff) beauftragt hat, für A selbst ein Konto einzurichten, das B und E – so zu sagen als Teilmenge von A – mitbenutzen sollen. Verwirrt?

Es kommt noch besser. B hinterlegt nun im Namen von A die Projektunterlagen in seinem Konto, also Konto B. Die Zeit verstreicht, das Projekt wird begutachtet und zur Förderung ausgewählt. Daraufhin bekommt A eine E-Mail, es wären neue Nachrichten in seinem Konto vorhanden. A, gewissenshaft wie er nun einmal ist, schaut sofort nach und entdeckt – natürlich – nichts. An sich und seinen Fähigkeiten zweifelnd, schaltet A nun B und E ein. E bestätigt A (für Konto A) das Vorhandensein von nichts, während B im Konto B eine Nachricht für A vorfindet, selbst aber keine E-Mail ob deren Hinterlegung bekommen hat. Woran es wohl liegt? Dubletten sind des Informatikers größter Albtraum, insbesondere da (aus Sicht des Betreibers) die Kosten jene zu finden den damit verbundenen Nutzen oftmals dominieren und somit erst einmal im System verbleiben. Mag die Schuld auch eindeutig beim Benutzer liegen, so sind derartige *Pimp-up-my-IT*-Aktionen nur bedingt hilfreich, wenn sie letztendlich mehr Arbeit verursachen als einsparen helfen.

In unserem Fall nutzen B und E jetzt ausschließlich das Konto von A, der weiterhin als Einziger über neue Nachrichten per E-Mail informiert wird. Manche Dinge muss man halt so akzeptieren, wie sie sind. Insofern, frei nach Loddar, this is everything half so wild, come on let's pour one behind the Carefree!

R.-P. Mundani

Supercomputing 2009 in Portland

Vom 14.11.-20.11.2009 fand im Oregon Convention Center in Portland die 22. Supercomputing Conference statt. Trotz der schwierigen ökonomischen Lage...

Promotionsstudium erweitert werden soll. Die Zuwendung umfasst u. a. sechs Stipendien für junge Wissenschaftler aus der Balkanregion für einen 3-monatigen Aufenthalt an der TUM sowie einen einwöchigen Kompaktkurs „Parallel Numerical Simulation“ an einem der drei Partnerstandorte in Belgrad, Bitola oder Cluj.

Allerdings darf nicht vergessen werden, dass der Weg vom Antrag bis zur finalen Bescheinigung mit einigen Stolpersteinen und Hindernissen gepflastert war. Etwa hat der DAAD im Jahr 2009 das so genannte Online-Portal eingeführt, mittels dessen die Antragsphase sowie das Projektmanagement aufgrund moderner IT und eBusiness erleichtert werden sollen. Wer erinnert sich da nicht gerne an das „papierfreie Büro“. Nun, die Nutzung des Portals ist nur wenigen Privilegierten gestattet, nämlich denen, die Software gemäß gängigen Industriestandards verwenden. Firefox, OpenOffice etc. haben da wenig Chancen. Nach Upgrade (oder Downgrade) auf den Internet Explorer und Ausschaltung so ziemlich aller Sicherheitseinstellungen kann man sich auf dem Portal einloggen und wird mit einer netten Meldung begrüßt: Die verwendete Software wäre nicht auf dem neuesten Stand und sollte – um mögliche Probleme zu vermeiden – doch bitte erst einmal aktualisiert werden. Gesagt, getan. Die Meldung kommt aber immer wieder. Der verzweifelte Griff zu Firefox und Co. birgt trotz der hartnäckigen Hinweise, dass man nicht-kompatible (gar *bösartige*) Software verwende und das Portal so auf keinen Fall nutzen könne, eine Überraschung: Es funktioniert!

Jetzt nur noch schnell Antrag und Kostenkalkulation als PDF- und Excel-Dokument einstellen – fertig. Die Absichtserklärungen der Partneruniversitäten werden auch ganz elegant als Scan hochgeladen, womit der lästige Papierkrieg der vergangenen Jahre entfällt. Wirklich? Nun, da die Einführung des Portals ja noch neu ist und die Sache mit den digitalen Unterschriften wohl noch ein Problem darstellt, sind *ausnahmsweise* alle Dokumente zusätzlich in Papierform (!) einzureichen. Aber auch die Rollenverteilung Projektverantwortlicher / Projektkoordinator ist so eine Sache. Der Einfachheit halber nennen wir den Projektverantwortlichen einmal Alice oder A und den Projektkoordinator Bob oder B. Also, B ist Ausführender und legt

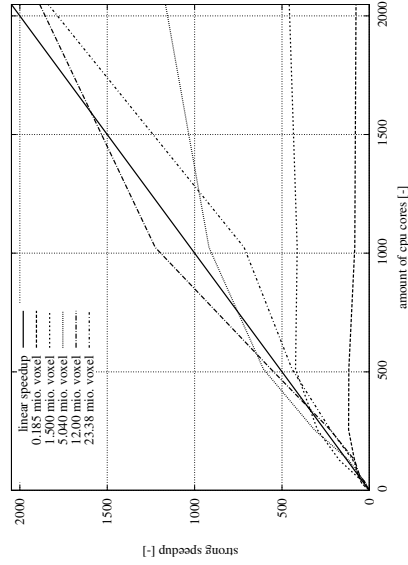
gelaufen ist, prinzipiell allerdings deutlich mehr liefern könnte, wurde er auf die große Altix portiert, um dort seine ersten Berechnungen durchzuführen.

Dabei wurde mit acht verschiedenen Gebietsgrößen gearbeitet, von klein (185.000 Voxel) bis riesig (95 Millionen Voxel), sowie mit unterschiedlicher Anzahl an Prozessen, angefangen bei einem Slaveprozess bis hin zu mehr als 3000 Prozessen (also gut einem Drittel des Möglichen auf der Altix), gerechnet. Die damit erzielten Ergebnisse (Strong Speedup, also die Geschwindigkeitszunahme bei Erhöhung der Prozessanzahl bei gleichbleibender Problemgröße) sind im nächsten Bild dargestellt. Normiert wurde die Berechnung des Speedups auf die Berechnung mit jeweils einem Slaveprozess, da dieser dann *quasi* seriell rechnet, da er keine Daten austauschen muss und der Master außer der Datenverteilung am Anfang nicht weiter an der Berechnung beteiligt ist. Bei einer Problemgröße von mehr als 23 Millionen Voxeln konnte allerdings aus Zeitgründen kein Wert für den seriellen Referenzwert eines Slaveprozesses ermittelt werden, da die notwendige Berechnung zu lange laufen würde. Extrapoliert man hier ausgehend von den bereits gemessenen Ergebnissen, so erhält man als Richtwert für das Berechnungsgebiet mit 96 Millionen Voxel eine Laufzeit von ca. 86 Tagen, was aber bei der gegenwärtigen – inzwischen sich fast täglich ändernden – mittleren „Uptime“ der Altix unwahrscheinlich zu erreichen ist.

Man erkennt unschwer, dass für kleine Gebietsgrößen die Leistung relativ schnell einbricht und ab ungefähr 1000 Prozessen sogar etwas rückläufig wird. Das liegt klar an der Communication-Computation-Ratio, also am Verhältnis von Kommunikation zu Berechnung, da ab einer bestimmten Problemgröße deutlich mehr mit den Nachbarprozessen kommuniziert wird als lokal berechnet werden muss. Im Gegensatz dazu ist bei allen Berechnungen im Anfangsstadium ein super-linearer Speedup zu beobachten, was darauf hindeutet, dass die Gebietsgröße je Slaveprozess so klein ist, dass das gesamte Problem in den Cache passt und dieser Vorteil den Aufwand der Kommunikation bei weitem überwiegt.

Ogleich mit der ursprünglichen Parallelisierung schon sehr gute Ergebnisse erzielt wurden, so ist das Ende der Fahnenstange noch lange nicht

erreicht. Als mögliche Optimierung wurde ein hybrider Ansatz getestet, bei dem innerhalb eines Slaveprozesses rechenintensive Anweisungsböcke mittels OpenMP auf mehrere Threads aufgeteilt und somit parallel (auf einer CPU) ausgeführt werden. Dieser Ansatz sollte auf der Shared Memory-Architektur der Altix eigentlich großes Potential haben, allerdings haben erste Tests gezeigt, dass keine merklichen Verbesserungen erreicht werden konnten. Im Gegenteil waren sogar teilweise drastische Verschlechterungen zu erkennen. Dies dürfte vor allem auf Engpässe beim Datentransfer zwischen Hauptspeicher und Cache zurückzuführen sein, was sich aber durch eine bessere Cachestrategie lösen lassen sollte.



Gelernt haben wir daraus aber trotzdem: Zum einen ist nun klar, dass unser Code auch im massiv-parallelen Einsatz gute Ergebnisse liefert, was gerade im Hinblick auf die nächste Generation eines Petaflop-Rechners von entscheidender Bedeutung ist. Zum anderen konnten Schwachstellen im Code identifiziert werden, die unter Einbezug einer neuen Optimierungsstrategie in Zukunft behoben, respektive bei einem Redesign des Codes von vornherein vermieden werden können.

J. Frisch

WalBerla-Code auf dem größten Rechner der Welt

Nach erfolgreichen Skalierungsmessungen und Produktivläufen auf unterschiedlichen Hochleistungsrechnern in Europa greift der Lehrstuhl für Systemsimulation (LSS) der Universität Erlangen mit seinem C++-Lattice Boltzmann Framework walBerla jetzt nach den Sternen. WalBerla, eine Abkürzung für widely applicable lattice Boltzmann from Erlangen, unterstützt eine Vielzahl von Anwendungen, wie zum Beispiel Mehrphasenströmungen, Strömungen mit freien Oberflächen und partikelbeladene Strömungen.

Als eines von 8 Teams ist der LSS zum „Extreme Scaling Workshop“ in Jülich eingeladen worden (siehe auch <http://www.fz-juelich.de/jsc/bg-ws10/>). Der Workshop bietet die Möglichkeit, Skalierungsmessungen und Programmodifikationen auf der gesamten Jugene durchzuführen. Dabei werden die Teilnehmer intensiv durch ein Team des Jülich Supercomputing Centre unterstützt. Die Jugene besteht aus 72 Blue Gene/P Racks mit insgesamt 144 TB Hauptspeicher und 294912 Cores. Dies ist weltweit die größte Anzahl von Rechenkernen in einem Hochleistungsrechner.

J. Götz

Episode IX: Return of the SimLab

Vielleicht das Wesentliche zuerst, auch im Jahr 2010 konnte das SimLab-Projekt (siehe letztes Quartl) nach inzwischen 8-jähriger Laufzeit erfolgreich verlängert werden. Nach positiver Zuwendungsbescheinigung seitens des DAAD geht es für das SimLab nunmehr in die nächste Runde, auf dem Balkan ein modernes, interdisziplinär geprägtes Computational Engineering zu etablieren. Mit maßgeblicher Beteiligung der TUM konnte etwa zum Wintersemester 2008/09 an der Universität Belgrad ein eigener Masterstudiengang Computational Engineering eingerichtet werden, der jetzt ganz nach dem Vorbild der IGSSSE um ein