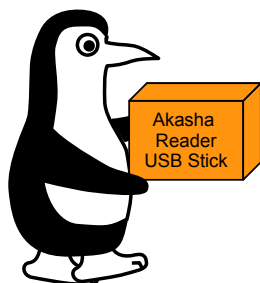


Inhalt



Editorial	2
New Mathematics for Exascale?	4
SPPEXA @ ISC 2013	8
Der PRACE ISC Award 2013 in Leipzig	12
Iterationsschleife	15
Fourth BGCE Student Paper Prize	15
Extreme Scaling Workshop am LRZ	19
Novel Numerical Methods @IAS.TUM	22
The Fellowship of the Cycle	24
Two LSS Codes members of the Hi-Q Club	26
Themenheft „HPC“ von „it“ erschienen	27

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

Kennen Sie Elobrain? Oder genauer, wissen Sie, was Elobrain-Seminare sind? Nein? Dann aber hurtig! Das Quartl kann diese eklatante Wissenslücke schließen, wurde mir doch kürzlich eine Pressemitteilung der Firma Kösta GbR zugespielt, die hier in voller Länge erstrahlen soll (für Interpunktion wird keine Haftung übernommen).

Während ein Quantenheilungsboom durch die Welt geht, die so genannte Zwei-Punkte-Methode, bei der man den Körper an zwei Punkten berührt und moderne Hypnose, bei der nur selten eine gewünschte Trancetiefe und somit eine Voraussetzung einer wirksamen Hypnose erreicht wird, gehen der Starhypnotiseur Wolfgang Künzel und die Reinkarnationstherapeutin Steffi Stange völlig neue Wege. „Morphogenetischer Somnambulismus“ nennt Wolfgang Künzel eine völlig neuartige Hypnoseinduktion, die tatsächlich rein auf der Kraft der Gedanken beruht. Es ist nicht mehr notwendig den Hypnotisanden zu berühren oder ein Wort zu sagen, um eine tiefe Hypnose zu induzieren und das bei einer mehr als hervorragenden Erfolgsquote.

Zustande gekommen ist diese Entwicklung mit einer schicksalhaften Begegnung. Die Reinkarnationstherapeutin Steffi Stange war es, die Künzel mit neuartigen Techniken im Rahmen des geistigen Heilens faszinierte und so begannen sie gemeinsam ihr teils uraltes Wissen zu kombinieren. Heraus kamen mehrere unglaublich faszinierende Techniken im Bereich der Hypnose, der Informationsbeschaffung (Akasha Reading) und des geistigen Heilens (Akasha Healing). Allen Techniken gemein ist die Verwendung so genannter morphischer Felder, die von Dr. Rupert Sheldrake postuliert wurden. Mit Hilfe dieser Felder wird es möglich Menschen zu hypnotisieren, Informationen über alle denkbaren Dinge und Lebewesen zu erhalten, sowie schier unglaubliche Heilungen zu vollziehen, indem man die Ursache erkennen und auflösen kann. Alle Techniken sind, wenn auch mit der derzeitigen Wissenschaft nicht erklärbar, sehr leicht zu erlernen und unglaublich faszinierend. Man benötigt keinerlei Körperkontakt und kann viele Erfolge auch über große Entfernungen erzielen.

Ihr Wissen geben Wolfgang Künzel und Steffi Stange in Seminaren im gesamten deutschsprachigen Raum weiter.

Das Geheimnis der Hypnose per Gedankenkraft verrät Wolfgang Künzel

zum Beispiel im Seminar „Grundseminar Hypnose und Hypnosetechniken der Hypnoseakademie“ (www.hypnoselernen.de). Wer sich eher dafür interessiert, wie man die Kraft der eigenen Gedanken gezielt und effektiv erschafft und lenkt, konnte bei Wolfgang Künzel und Steffi Stange noch einmal im Jahr 2013, am 02./03.02.13 in Reisbach „Das Geheimnis der Schlüssel zur gezielten und erfolgreichen Wunscherfüllung“ erlernen (wir entschuldigen uns in aller Form für die verspätete Information; Anm. d. Red.) oder im Rahmen der Seminare „Akasha Reading“ und „Akasha Healing“ extrem tief in die Materie der morphischen Felder eindringen. Die Erfolge sind absolut verblüffend und häufig viel intensiver als andere Techniken, die ähnliches versprechen. Seminartermine und Anmeldung für die so genannte Elobrain-Seminarreihe ist bei www.kuesta.de oder unter www.elobrain.de möglich.

Kurzvita Wolfgang Künzel: Geb. 1965 im Sternzeichen Fische, Hypnotiseur und Parapsychologe, Buchautor, Produzent, Seminarleiter bei Die Hypnoseakademie und Küsta GbR, Gesellschafter bei Küsta GbR, bekannt aus Presse, Rundfunk und TV.

Kurzvita Steffi Stange: Geb. 1975 im Sternzeichen Steinbock, Reinkarnationstherapeutin, Produzentin, Seminarleiterin bei Küsta GbR, Gesellschafterin bei Küsta GbR, bekannt aus Presse und TV.

Nicht, dass ich jetzt wirklich wüsste, worum es geht – aber ich weiß zumindest, dass ich es gar nicht näher wissen möchte.

And now for something completely different. Als Angehöriger des Öffentlichen Diensts muss man sich ja das eine oder andere Mal anhören, was für ein Lotterleben man führe und wie völlig anders es doch dagegen in der freien Wirtschaft zugehe. In diesem Zusammenhang muss ich einfach eine Auto-Reply-Email erwähnen, die einen meiner Mitarbeiter aus einem deutschen Verlag erreichte – am 20. Februar 2013, als Antwort auf dessen Email ebenfalls vom 20. Februar 2013: „Guten Tag und vielen Dank für Ihre Mail. Ich bin in Weihnachtsurlaub und am 26. 3. 2013 wieder zurück. Mails werden nicht weitergeleitet. . .“ Reschpekt!

Schließlich noch eine Notiz aus der Rubrik „Aus dem Leben gegriffen“: Im Rahmen einer Fortbildung zur Organisation interdisziplinärer Forschung wurden alle Teilnehmer eingangs gefragt, worauf denn ihre Erfahrung im interdisziplinären Arbeiten fuße. Antwort des PostDocs Herr H.: „I did not work interdisciplinarily yet. In my field, there is no interdisciplinary re-

search, as it is all Computational Fluid Dynamics!*

Doch genug gelästert – die gesamte Quartl-Redaktion hofft, dass der Spätsommer hinreichend gutes Wetter und freie Zeit im Gepäck hat, dass Sie ihn auch genießen können. In diesem Sinne viel Spaß mit der neuen Ausgabe Ihres Quartls und eine gute Zeit!

H.-J. Bungartz

New Mathematics for Exascale Computational Science?

¹ Let's start with the good news first: **Mathematics has been and continues to be *the most important contributor* to any large scale computational science. This is simply so, since computational complexity becomes ever more important with faster computers. Once the systems are large enough, the algorithms with a better asymptotic complexity will always make the winner. Math journals, such as SINUM or SISC (for which I had served as EIC) are full of great papers advancing computational science.**

However, having said this, we find that these great novel algorithms often **underperform by many orders of magnitude**. Different from what may be a belief in parts of the math community, it is not that we just need a few extra weeks for converting matlab to FORTRAN and MPI. Designing efficient **HPC** software requires **creative** research and the **deficiencies** are much more **fundamental**.

- Nothing is more practical than a **good theory**, but in the math community there is a deeply rooted **misconception about the role of rigorous theory**. For example, a rigorous asymptotic error bound of the form $|e| \leq Ch^p$ has only heuristic implications when assessing the quality of a discretization for all finite values of h . Though the math is rigorous, the conclusion for practical computing is a heuristic one. Such theorems are a poor basis for comparing one discretization to

¹adapted position paper from DOE Exa-Scale Math Workshop:

<https://collab.mcs.anl.gov/display/examath/About>

another one of the same or even a different order, as long as the constants remain unspecified and the theorem is cast in inequality form. We need a more **quantitative theory**! Where this is not available, systematic numerical experiments are as important or even more important than rigorous theory. Some fields of contemporary applied math have an underdeveloped tradition in **systematic algorithmic benchmarking**. This starts with a lack of generally accepted standard test examples. Therefore, the numerical cost of an algorithm (i.e. the number of flops induced by using a specific discretization or by a specific solver) is frequently left unquantified. Consequently rather inefficient algorithms remain in use even when better alternatives exist.

- On modern computer systems, the traditional **cost metric of numerical mathematics** (i.e. the Flops for solving a problem) **fails increasingly to correlate** with the truly relevant cost factors, such as **time to solution** or **energy consumption**. It will be necessary to quantify much more complex algorithmic characteristics, such as memory footprint and memory access structure (i.e. cache re-use, uniformity of access, utilization of block-transfers, etc) processor utilization, communication and synchronization requirements. These effects must be built into **better complexity models** – models that are simple enough that they can be used, but that capture the true nature of computational cost better than just counting the Flops.
- For exascale computational science we need to develop a more systematic integrated **algorithm engineering methodology**. Starting from the mathematical model, we should **predict a-priori** what performance is achievable, and then we must evaluate our realization relative to such a prediction, **accounting for all the discrepancies**. This must be done **for all stages** of the „simulation pipeline“, starting with the mathematical model, the discretization, the solver, its sequential implementation, and eventually its parallelization. It is essential that this is not just seen as tweaking a given algorithm to run fast on particular architecture, but as a true **co-design**. This must include the design and the development of the algorithms and the data structures. For exam-

ple, when it is known that a 2D multigrid Poisson solver reaches h^2 -discretization accuracy in less than 30 operations per unknown, then we must justify the use of a more complicated discretization and more expensive solver for the same problem class. There may be good reasons, but such **algorithmic choices** must be based on clear arguments **accounting for the accuracy achieved relative to the cost**.

- Often even the sequential version of an algorithm reaches only a fraction of the peak performance of a core. We should justify why this is the case. For example, we may find that the memory or communication bandwidth is the relevant bottleneck. Generally, theory must guide us what **bounds for the hardware performance** we must expect, and the design process must be based on a systematic accounting for the limiting resources. For this it is essential to have **realistic a-priori cost predictions** everywhere in the development process. And quite generally, we should be more honest when assessing parallel performance. „David Bayley’s „**Twelve Ways for Fool the Masses...**“² are still too much in use.

This list of deficiencies provides already enough problems for a multi-decade math research program, but beyond there are also **great opportunities** for novel mathematical research directions. I’ll mention a few:

- With 10^9 parallel threads (in a future exoscale system) we must avoid all unnecessary communication and synchronization. While research has already started in fields such as dense linear algebra, this is wide open elsewhere, e.g. for iterative solvers. New **asynchronous, communication avoiding** algorithms must be designed. Lower bounds must be found on how much communication/synchronization is necessary to solve a particular problem. Chaotic relaxation strategies or **stochastic and nondeterministic algorithms** may become a key innovation needed for exascale, and they may at the same time provide for more robustness and built-in **fault tolerance** overall.

²See modernized version at:
<http://www10.informatik.uni-erlangen.de/Misc/EIHECS6/hager.pdf>

- Exascale will provide the computational power to go from qualitative simulation to predictive simulation, and from predictive simulation to optimization, **parameter identification, inverse problems**; it will enable **stochastic** simulations and to better **quantify uncertainties**.
- Exascale enables us to bridge physically from the **meso-scale to human scale**. With meso-scale, I mean here physical scales such as the cell of a biological system, a particle in a pile of sand, or a pore in an aquifer. A living human has around 10^{11} neurons and 10^{13} red blood cells, a pile of sand may have 10^{10} grains. The mesoscale is halfway between atomic scale and human scale. Mesoscale requires to **deal with large numbers of objects**, but such ensembles may become tractable on exascale systems, since with 10^{18} Flop/s we can still perform $O(10^5)$ Flop/s for each human blood cell per second. Thus exascale may offer new possibilities for simulation science that have been out of reach without. However, to exploit this, new methods must be devised to model and simulate large mesoscopic ensembles for long enough times. New algorithms must be invented for this, **new modeling paradigms** devised. New techniques for **validation and verification** are needed: we are not interested to predict each individual blood cell in a human being accurately, but the ensemble behavior must be physically meaningful and must provide e.g. physiological insight beyond classical techniques. There are close relations here to **multiscale-modeling and multiphysics**, but these fields gain new momentum with the advent of exascale. A myriad of interesting and open research topics can be derived from this.
- **Summarizing:** I believe that the advent of exascale forces mathematics to address the **performance abyss** that widens increasingly between existing math theory and the practical use of HPC systems. Tweaking codes is not enough – we must turn back and analyze where we have not yet thought deeply enough, developing a new interdisciplinary **algorithm and performance engineering methodology**. Beyond this, exascale opens fascinating **new opportunities in fundamental** research that go far beyond just increasing the mesh re-

solution. The opportunities created by **asynchronous algorithms** or **large scale mesoscopic modeling** are just two examples.

U. Rüde

SPPEXA @ ISC 2013

Als erste internationale Veranstaltung organisierte das DFG-Schwerpunktprogramm „Software for Exascale-Computing“ SPPEXA ein Satellite-Event auf der ISC 2013.



Sämtliche SPPEXA-Projekte waren vertreten

Im Juni fand die ISC (International Supercomputing Conference) in Leipzig statt. Als strategische HPC-Initiative in Deutschland war SPPEXA mit einem eintägigen Satellite Event am Mittwoch, 19. Juni präsent. Es war besonders erfreulich, dass sämtliche SPPEXA-Projekte mit mindestens einer Person vertreten waren. Dies förderte nicht nur den Austausch innerhalb der

Projekte, sondern stellte auch Diskussionen mit der internationalen HPC-Community sicher.

Das Satellite-Event bestand aus Vorträgen, zwei internationalen Gastrednern und vier SPPEXA-geförderten PIs, und einer Podiumsdiskussion. Den Anfang machte Pete Beckman (Argonne National Laboratory), er stellte aktuelle Bestrebungen der USA vor, einen Exascale Rechner zu bauen. Der Vortrag zeigte eindrucksvoll, dass Computational Science & Engineering und HPC von der US-Regierung als Schlüsseltechnologie des 21sten Jahrhunderts gesehen werden³.

Anschließend folgte Christian Lengauer mit dem ersten Vortrag aus den Reihen von SPPEXA. Er stellte den “konservativen” und den “radikalen” Ansatz des ExaStencils Projekts (Quartl berichtete) vor. Ziel ist es, Stencil-Codes exascale-ready zu machen. Felix Wolf diskutierte eine Methode zur automatischen Generierung von Performance-Modellen, welche im CAT-WALK Projekt bearbeitet wird. Ein eher von der Mathematik getriebener Vortrag kam von Oliver Rheinbach über Domain Decomposition Methoden (EXASTEEL-Projekt). Den Abschluss machte Frank Jenko aus dem EXAHD-Projekt, welcher Peta/Exascale-Rechner aus der Sicht der Anwender beschrieb. Konkret ging es um Turbulenzsimulation von Plasma, wofür hoch-dimensionale Gleichungen gelöst werden müssen, was dementsprechend viel Rechenaufwand benötigt.

Nach der Mittagspause folgte Chuck Hansen (University of Utah), welcher einen Überblick über aktuelle Big-Data-Fragestellungen gab. Viele Bilder untermalten seine Darstellung und machten deutlich, dass Visualisierung ein wichtiger Baustein von Computational Science & Engineering ist. Er erzählte auch, dass manche Visualisierungen „zu genau“ werden. So konnte z.B. seine Gruppe Michelangelos David so genau auflösen, dass das Modell wieder von der Webseite entfernt werden musste, weil Fälschungen befürchtet wurden.

³Siehe <http://science.house.gov/hearing/subcommittee-energy-hearing-exascale-computing-challenges-and-opportunities>



Chuck Hansen erzählte, dass seine Gruppe ein hochaufgelöstes digitales Abbild von Michelangelos David von der Webseite nehmen musste, da befürchtet wurde, es könnten Fälschungen damit erstellt werden

Den Abschluss des Satellite-Events bildete eine Podiumsdiskussion nach dem Vorbild des „Literarischen Quartetts“. Moderiert von Patrick Regan (TUM-IAS) diskutierten Omar Ghattas (University of Texas), Gabriele Gramelsberger (FU Berlin) und Friedel Hößfeld (Jülich) über die Grenzen und das Potential von Simulationen und HPC. Die Runde war sich schnell einig, dass aktuellen Modellen/Simulationen zu viel Vertrauen geschenkt wird. Wie Friedel Hößfeld feststellte, liegt das vor allem daran, dass aktuelle Modelle nur schwer validiert werden könnten, was die Simulationsergebnisse fraglich erscheinen lässt. Omar Ghattas brachte es mit einem Vergleich zur Statistik auf den Punkt: Niemand glaubt meiner Statistik außer ich, aber jeder glaubt meinen Simulationen, nur ich nicht. Große Herausforderungen für HPC sahen die Teilnehmer im Bereich Bayesian-Statistik, wo eine große Anzahl an Modellauswertungen nötig ist. Dies umfasst Inverse Probleme, Uncertainty Quantification, aber auch Big-Data-Probleme. Von einer mehr philosophischen Perspektive kommentierte Gabriele Gramelsberger die Si-

tuation und warf die Frage in den Raum, ob Mathematik noch immer das richtige Werkzeug zur Modellierung sei.



Moderiert von Patrick Regan diskutierten Omar Ghattas, Gabriele Gramelsberger und Friedel Hoßfeld über Grenzen und Potential von Simulationen und HPC

Auf die Frage aus dem Publikum, in wie weit HPC in ethische und politische Problem eingreift, wies die Runde auf die Vielzahl von gefährlichen Experimenten hin, welche dank HPC vermieden werden konnten. Zur großen Erleichterung des Publikums (und natürlich auch von SPPEXA) kam die Diskussion zum Ergebnis, dass das Potential von HPC noch lange nicht ausgeschöpft ist, und die Grenzen noch in weiter Ferne liegen.

Mit diesen guten Aussichten noch der Hinweis auf zukünftige Veranstaltungen: SPPEXA wird durch einen Workshop auch auf der Supercomputing 2013 im November vertreten sein ⁴. Zusätzlich wurde noch eine Vielzahl

⁴ <http://www.sppexa.de/sppexa-activities/news/article/news/detail/News/workshop-at-supercomputing-2013.html>

von weiteren Workshops gefördert, welche nach und nach auf der SPPEXA-Webseite⁵ veröffentlicht werden, sobald Details bekannt sind.

B. Peherstorfer

Der PRACE ISC Award 2013 in Leipzig

In der letzten Ausgabe des Quartl haben wir unseren Teilchen-Weltrekord auf SuperMUC vorgestellt. Nun folgt der Erntebericht.

Gemeinsam mit Kollegen der Universität Paderborn, der Universität Kaiserslautern, dem HRLS und dem LRZ simulierten wir 4 Billionen Partikel. Angeordnet in einen Würfel des (flüssigen) Edelgases Krypton, hatte dieser eine Kantenlänge von 6.3 Mikrometern. Ermöglicht wurde diese Simulation durch eine stark optimierte Single-Core Version unsers Codes, in Kombination mit einer hoch-skalierenden MPI Parallelisierung. Am Ende konnten wir knapp 10% der theoretischen Peak Performance aus dem SuperMUC pressen.

Das heroische Ziel ist es, numerische Simulationen durch Laborexperimente zu „bestätigen“. Da die Größenordnung unserer Simulation schon fast im sichtbaren Bereich liegt, stellt jene einen wichtigen ersten Schritt in diese Richtung dar. Aus diesem Grund wurde diese Arbeit, „591 TFLOPS Multi-Trillion Particles Simulation on SuperMUC“, auf der diesjährigen International Supercomputing Conference (ISC) in Leipzig mit dem PRACE ISC AWARD 2013 gewürdigt. ISC und SC (Supercomputing Conference) sind weltweit die beiden wichtigsten Konferenzen im Bereich des Supercomputings. Der PRACE ISC Award wird durch das PRACE⁶ Scientific Steering Committee für das beste Paper auf der ISC verliehen. Es muss mindestens einen der folgenden Punkte erfüllen:

⁵ <http://www.sppexa.de/>

⁶ Partnership for Advanced Computing in Europe



- eine bahnbrechende wissenschaftliche Erkenntnis, ermöglicht durch HPC
- ein Algorithmus oder eine Implementierung, die eine signifikante Verbesserung hinsichtlich Skalierung oder Performance ermöglicht.
- eine neuartige Herangehensweise an die Performance-Evaluierung auf massiv-parallelen Architekturen.

Erstmals vorstellen durften wir unsere Forschungsarbeit auf der PRACE Scientific Conference, die der ISC einen Tag vorgelagert war. Am Montag den 17. Juni, fand dann die eigentliche Preisverleihung statt. In der direkt anschließenden Research Paper Session wurde die Arbeit dem kompletten ISC-Publikum präsentiert. Abends, auf der ISC Opening Party, wurde dieser Erfolg durch die anwesenden Autoren gebührend gefeiert, und durch eine interessante Konferenz-Woche abgerundet.

W. Eckhardt, A. Heinecke

Iterationsschleife N=9

11. Juli 2013

Tian-an-man, Tahrir, Taksim: Drei zentrale Plätze in drei Hauptstädten (Istanbul mag nicht Regierungssitz sein und ist doch – wie jeder Fußballfan weiß – die Hauptstadt des Landes) von Ländern mit drei verschiedenen politischen Systemen und drei unterschiedlichen Kulturen. Trotzdem stehen alle drei Plätze symbolisch für das gleiche: Den Wunsch (vor allem junger) Menschen nach einem politischen Wandel im Land verbunden mit der Forderung nach mehr Mitspracherechten. In allen drei Ländern führten die Demonstrationen zu unterschiedlichen Reaktionen. Einmal wurde der Protest mit Panzern beendet, einmal ging die Polizei mit Wasserwerfern vor, und einmal musste ein langjähriger Potentat zurücktreten. Die weiteren Entwicklungen waren unterschiedlich und sind teilweise noch nicht abzusehen. In allen drei Fällen spielt Religion eine Rolle: Einmal entstand im Nachlauf der Ereignisse eine religiöse Bewegung, die einen Teil des Wassers der Freiheitsbewegung auf ihre Mühlen lenkt und nach einem kurzen Flirt mit der Staatsmacht nun ebenfalls zu den Verfolgten zählt. Einmal präsentierte sich Religion als grundlegende Alternative zum militärisch geführten Staat. Einmal richtete sich der Protest gegen die Rückeroberung eines laizistischen Staates durch eine religiöse Bewegung. Der Westen ist von diesen Entwicklungen irritiert. Er protestiert gegen die Gewalt gegen Demonstranten, sieht sich aber in einer Zwickmühle zwischen dem Wunsch nach demokratischer Veränderung einerseits und der Angst vor religiöser Dominanz andererseits.

All das geschieht im Rahmen einer offenen Diskussion über Religion und Demokratie in Westeuropa. Die Trennung von Staat und Religion ist nicht nur in Algerien eine offene Frage – wo der Wahlerfolg einer religiösen Partei 1992 durch einen Militärputsch beendet wurde und die Auseinandersetzung in einem Bürgerkrieg endete. Die Diskussion wurde nur dort mit sehr viel mehr Gewalt ausgetragen. In Westeuropa dagegen wird die ungelöste Frage zunehmend zur Belastung. Wenn aus Toleranz die Gebräuche nicht-christlicher Religionen akzeptiert werden sollen auch, wenn sie im Widerspruch zum westeuropäischen Rechtssystem stehen, warum dann der jahrzehntelange Kampf gegen die staatliche Unterstützung christlicher Moral im Rechtssystem?

Warum der Kampf der Emanzipationsbewegung und Linken für die Zivilehe, wenn man dann doch religiöse Eheschließungen anderer Religionen – im Sinne einer gelebten Toleranz – akzeptieren soll?

Auf dem Prüfstand steht das westliche Modell einer Demokratie, die in einer rechtsstaatlichen Verfassung und nicht in einem religiösen Text die Grundlage ihres Zusammenlebens sieht. Herausgefordert wird dieses Modell von Bewegungen, die sich selbst als Alternative zu den westlichen Werten der laizistischen Rechtsstaatlichkeit sehen. Ob und wie die Frage nach dem Bestand unserer laizistischen Demokratie positiv beantwortet wird, erweist sich unter anderem symbolisch auf diesen drei Plätzen.

Geht das die Wissenschaft nichts an? Vor einigen Jahren diskutierte ich mit ukrainischen Wissenschaftskollegen unterschiedlicher Fakultäten über die Sowjetunion und den Kommunismus. Die Ingenieure warfen den Philosophen vor, diese hätten mit ihren falschen Ideen das Land ruiniert. Die Philosophen warfen den Ingenieuren vor, kritiklos ihre Arbeit in den Dienst der falschen Ideale gestellt zu haben. Beide hatten auf ihre Weise Recht. Bleibt zu fragen: wo stehen wir heute und wie sehen unsere Antworten auf die Fragen unserer Zeit aus?

M. Resch

Fourth BGCE Student Paper Prize: Tobin Isaac visits Bavaria

After 2007, 2009, and 2011, the Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) of the Elite Network of Bavaria awarded the fourth BGCE Student Paper Prize, this year to Tobin Isaac. The prize consists of a one-week visit to the universities involved in BGCE: FAU Erlangen-Nürnberg and TU München.



Tobin Isaac at his presentation on „Advanced Simulation of Polar Ice Sheets: Meshing, Parallel Adaptivity, High-order Discretization, Robust Scalable Solvers, and Inversion for Basal Boundary Conditions“

Out of 20 high-quality contributions from 18 universities and research institutions of six countries, Tobin Isaac was selected as the prize winner by an international jury at the SIAM CS& E Conference 2013.

Mr. Isaac received his B.A. in Computational and Applied Mathematics from Rice University in 2007. Afterwards, he joined the Center for Computational Geosciences and Optimization (CCGO) at the Institute for Computational Engineering and Sciences (ICES), University of Texas at Austin, as a graduate student in the research group of Omar Ghattas. He is part of the Department of Energy Computational Science Graduate Fellowship (DOE CSGF) program of the Krell Institute.

FAU and TUM finally hosted Tobin Isaac in Munich and Erlangen from June 22 to 28. The intense schedule allowed for the realization of the two major goals of this visit: First, Tobin Isaac got in close contact with the hosting universities and involved persons. Second, he presented his (and his group's) fascinating research work in the context of Computational Geophysics. In particular, his talk on “Advanced Simulation of Polar Ice Sheets:

Meshing, Parallel Adaptivity, High-order Discretization, Robust Scalable Solvers, and Inversion for Basal Boundary Conditions” led to interesting and fruitful discussions with the corresponding research groups.

For those interested in details, here is a brief abstract of the methods and results:

The polar ice sheets contain almost 70 meters of potential sea level rise, and the melting of even a small fraction of that amount would threaten 200 million of people worldwide who live near sea level. Projecting the ice sheets’ contribution to sea-level rise is difficult because of the complexity of accurately modeling ice sheet dynamics for the full polar ice sheets and the great uncertainty in key, unobservable parameters governing those dynamics. Whether inferring for unknown parameters using a classical deterministic inverse method or using Bayesian statistical inversion, the fast and accurate solution of both the nonlinear equations of ice sheet dynamics and the linearized adjoint of those equations is critical. Tobin Isaac developed a framework for the scalable solution of these equations that is effective for higher-order finite element meshes, and is robust for the highly anisotropic meshes that are typical when discretising ice sheets.

For those interested in more details, a short chronological survey of Tobin Isaacs visit: On Sunday, June 23, we gave Tobin and his family some time to recover from the lengthy train trip to Erlangen (Tobin arrived from a conference in Italy together with his wife and 9-month-old son Benjamin), before going for a hike to the “Walberla”, the famous hill in the Frankonian Switzerland. There, we could not only enjoy the beautiful view over the Regnitz valley, but also the cherries and strawberries that were sold fresh at the foot of the hill.

On Monday, there was the opportunity to show Tobin the campus at Erlangen and to get into discussion with him on scientific issues. There exist plenty of topics of common interest such as multigrid methods, complex and coupled simulations, adaptive mesh refinement, massively parallel simulations, and dynamic load balancing. In the afternoon, Tobin and some other guest researchers at Ulrich Rüde’s group went to Nuremberg, where Christian Kuschel gave them a guided tour through the historic city and the Documentation Center. On Tuesday, Tobin presented his research to the students and institute members in Erlangen. Before he continued to Munich

on Wednesday, we introduced Tobin to local food (Kesselbauch und Sauerkraut) and drinks (Bier) at the cozy restaurant “Alter Simpl”. He seemed to like both of them quite well :-).

Tobin Isaac and his family had a comfortable trip to Munich on June 26. The next day, Tobin presented various aspects of his work within the Informatikkolloquium in Garching. Afterwards, a brief campus tour and a guided tour to the LRZ supercomputing facility had been organised. At this occasion, Tobin got briefly in closer touch with a group of about 15 CSE and BGCE students; all of the participants have been impressed by the enormous technical challenges, corresponding solutions, and of course the mere compute power of the SuperMUC.

After lunch, an intense scientific exchange of ideas took place on the topics mentioned above. But also history found its way into the programme: Several chair members joined Tobin and his family for a guided city tour in downtown Munich. And the local food story continued in the evening with a Schweinsbraten in the Augustiner am Dom close to the Frauenkirche. Tobin’s German skills turned out to be elaborated for discussions on the menu with waiters even in situations involving a decent amount of Bavarian dialect :-). On Friday, Tobias Neckel took the Isaac family on a ride into the countryside south of Munich. The open air museum Glentleiten close to the lake Kochel provided even under changing weather conditions a picturesque location, particularly enjoyed by Benjamin. On June 27, Tobin Isaac had a day to relax from the intense programme before leaving on early Sunday morning.

Summarizing, Tobin Isaac’s visit led to fruitful discussions and new insight and ideas at both our institutes. Tobin proved to be a very bright and talented researcher (and a likable young father, too). We are very happy about this newly established connection and are looking forward to future cooperations with him and his group in Texas. Besides, we hope that he and his family also enjoyed their time in Bavaria.

T. Neckel, D. Ritter

Extreme Scaling Workshop am LRZ aus Teilnehmersicht

Vom 9.7. bis 11.7.2013 fand am Leibniz-Rechenzentrum in Garching ein Extreme Scaling Workshop statt. Für den Workshop wurde die gesamte Maschine reserviert, und die Teilnehmer durften auf bis zu 16 der 18 der Recheninseln exklusiv rechnen.

Im Gepäck hatten wir unter anderem das Softwarepaket PE, welches für die Simulation starrer Körper konzipiert ist. Im Gegensatz zu Molekülsimulationen haben die einzelnen Partikel Form und Orientierung. Geraten die Partikel in Kontakt, müssen die Kontakte aufgelöst werden. Hier gibt es zwei grundlegend unterschiedliche Herangehensweisen: Entweder die Kontakte werden als weich (nachgiebig) behandelt oder als hart. Letztere werden oft als differentielle Komplementaritätsprobleme formuliert und sind daher üblicherweise deutlich schwieriger zu lösen. Ein Lösungsverfahren für eben diese schwierigen Probleme wollten wir im Rahmen des Workshops auf Skalierbarkeit überprüfen.

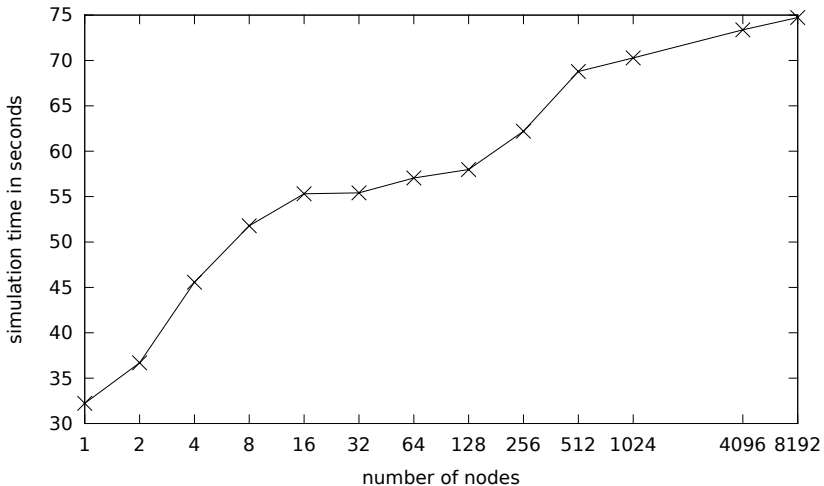


Abb. 1: Schwache Skalierung einer Starrkörpersimulation mit harten Kontakten

Abb. 1 zeigt die Laufzeit der Software für eine schwache Skalierung. Bei einer schwachen Skalierung bleibt die Rechenlast pro Prozess konstant und wurde hier auf 1000 Partikel pro Prozess festgesetzt. Das Szenario ist ein granulares Gas mit einem Volumenanteil von etwa 6% und wurde für 10000 Zeitschritte simuliert. Die Partikel sind hier Agglomerate aus zwei bis vier Kugeln. Für die Parallelisierung wurde das Rechengebiet in drei Dimensionen zerlegt und auf bis zu 8192 Knoten (131072 Kerne) verteilt. Die parallele Effizienz liegt bei 43% für das größte Problem. In dem Graphen ist jenseits der 512 Knoten gut der Einfluss der 4:1 blockierenden Kommunikation zwischen den Inseln zu erkennen.

Das zweite Ziel, das wir uns für den Workshop gesetzt hatten, war es, die Partikelsimulation ins Extreme zu treiben und den Speicher der Knoten so gut wie möglich auszunutzen. So platzierten wir 60^3 granuläre Partikel auf jedem Prozess. In Summe ergibt dies die stolze Zahl von 28 311 552 000 Partikeln – rekordverdächtig für eine Partikelsimulation mit harten Kontakten!

Das Softwarepaket WALBERLA hatte ebenfalls die Chance, seine Skalierbarkeit auf dem SuperMUC unter Beweis zu stellen. WALBERLA simuliert Fluide mit Hilfe des Lattice-Boltzmann-Verfahrens (LBM). Als Testproblem diente ein klassischer, turbulenter Düsenstrahl (Abb. 2), um das neu implementierte „Multiple Relaxation Time“ (MRT) Verfahren mit dem „Large Eddy“ Modell (LES) zu testen. Dieses Problem wurde auch deswegen gewählt, weil es relativ einfach schwach skalierbar ist, indem man die Auflösung jeweils in einer Dimension verdoppelt (obwohl nur jede dritte Potenz sinnvolle Proportionen hat).

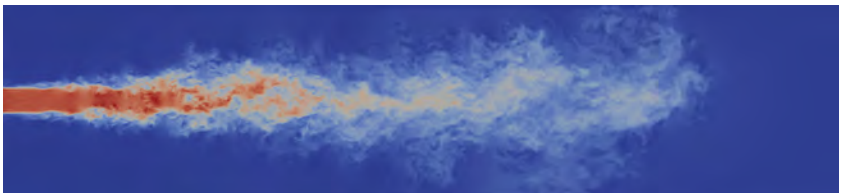


Abb. 2: Simulation eines Düsenstrahls mit dem MRT Lattice-Boltzmann-Verfahren auf 65536 Kernen.

Da wir außer der Skalierung auch noch nette Bilder haben wollten, und da der SuperMUC auch mit den anderen Beteiligten im Workshop geteilt werden sollte, haben wir die Problemgröße für jeden Kern klein gehalten (10000 Lattice-Zellen pro Kern), so dass in ungefähr 12 Minuten 100000 Zeitschritte simuliert werden konnten.

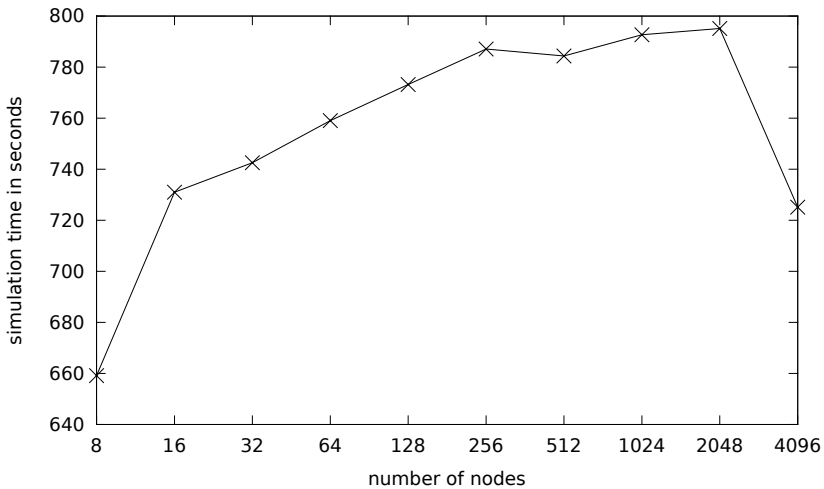


Abb. 3: Schwache Skalierung einer Lattice-Boltzmann Fluidsimulation mit dem MRT Verfahren

Abb. 3 zeigt die sehr gute Skalierung von WALBERLA. Es fällt auf, dass der größte Lauf mit 4096 Knoten wesentlich weniger Rechenzeit benötigte als die Läufe, welche vor dem Workshop berechnet wurden. Dies liegt daran, dass wir im Rahmen des Workshops die Taktfrequenz auf die maximalen 2.7 GHz angehoben hatten. Bei den kleineren Tests waren die Prozessoren auf 2.3 GHz getaktet.

Dass der größte WALBERLA-Lauf nicht die ganzen 8192 Knoten benutzte, deutet darauf hin, dass nicht alles perfekt lief: Beim ersten Versuch divergierte die Simulation nach ungefähr 4000 Zeitschritten und brach ab. Nach Anpassungen der Anfangsbedingungen schlugen aber auch der zweite und

dritte Versuch fehl: Das parallel environment von IBM entschied, dass ihm das Allokieren der 8192 Knoten deutlich zu anstrengend ist und quittierte mit einer nichtssagenden Fehlermeldung.

Einen vierten Versuch bekam der Job leider nicht, und böse Gerüchte gingen im Kurssaal um, dass dies die Schuld einer Starrkörpersimulation aus Franken gewesen sei. Laut dieser Gerüchte soll ein Job namens PE_LCP_32X64X64 sich nach Ablauf seines Zeitlimits geweigert haben, seinen Dienst einzustellen. Nach weiteren 20 Minuten schafften es die Administratoren, den hartnäckigen Job gewaltsam den Knoten zu entreißen. Danach blieb der SuperMUC für mindestens 5 Stunden unbenutzbar.

T. Prelik, D. Weingärtner

Workshop Novel Numerical Methods @IAS.TUM

Vom 29. bis 31. Juli fand am Institute for Advanced Study der Workshop Novel Numerical Methods – Exploring the Boundaries of Computability statt.

Der Workshop war die Abschiedsveranstaltung des Gründungsdirektors Patrick Dewilde, der das Institut seit seiner Einrichtung im Jahr 2006 mit Beginn der ersten Phase der Exzellenzinitiative bis zum März 2013 mit viel Begeisterung für die große Bandbreite der vertretenen Forschungsgebiete geleitet hatte und der (fast) Emeriti des Institutes Markus Hegland (Hans-Fischer Senior Fellow) und Miriam Mehl (Carl-von-Linde Junior Fellow, ja, man kann bereits vor Antritt der ersten dauerhaften Professur Emeritus werden).

Entsprechend gliederte sich das spannende Vortragsprogramm in die drei Themenbereiche 'Dynamical Systems, Control, and Stochastics', 'Multi-Dimensional Problems' und 'Data-Intensive Applications'.



Novel Numerical Methods Shifting the Borders of Computability

Exploratory Workshop | TUM-IAS | July 29–31, 2013



The workshop on **Novel Numerical Methods** aims at exploring new ideas in the already well established but crucially important field of **Numerical Algebra**.

Surprisingly, the recent interest in handling ambitious problems numerically in fields such as multi-dimensional and tensor calculus, dynamical system theory, multi-physics and other data-intensive applications has brought a flurry of new computational ideas which we think are worth bringing together.

Please find the program at www.tum-ias.de/nonume2013
Members of the TUM community and TUM students are cordially invited to attend the presentations (free).

Organization Committee: Hans-Joachim Bungartz, Patrick Dewilde, Massimo Fornasier, Markus Hegland, Thomas Huckle, Miriam Mehl

Technische Universität München | Institute for Advanced Study
Lichtenbergstraße 2 | 85748 Garching | Tel. +49.89.289.10550 | info@tum-ias.de | www.tum-ias.de

Neben namhaften eingeladenen Vortragenden wie z.B. Gilbert Strang (MIT, Boston, USA), Eugene Tyrtshnikov (Russian Academy of Sciences, Moscow), Irad Yavneh (Israel Institute of Technology, Haifa) und Ulrike Meier-Yang (Lawrence Livermore National Laboratory, USA) trugen 8 Doktoranden mit Kurzvorträgen zum Gelingen bei. Ein Buchpreis für die beste Doktorandenpräsentation wurde an Benjamin Scharf (Mathematik, TU München, Lehrstuhl Massimo Fornasier) mit dem Thema 'How to Steer High-Dimensional Cucker-Smale Systems to Consensus Using Low-Dimensional Information Only'.

Zum Abschluss des Workshops gab es eine sehr lebhaft Diskussionsrunde zu ungelösten Problemen, die sich zum Teil aus den vorangegangenen Vorträgen, zum Teil aber auch aus den Forschungsgebieten der Teilnehmer ergeben hatten. Alles in allem waren es sehr angenehme, informative und schöne vier Tage (wenn man den Sonntagsausflug zur Partnachklamm in Garmisch mitzählt). An dieser Stelle nochmals ein herzlicher Dank an alle Teilnehmer, so sie dies lesen sollten, und an das IAS, das uns durch die großzügige finanzielle Ausstattung die Organisation einer Veranstaltung mit dieser hohen Dichte an exzellenten auswärtigen Gästen ermöglichte.

Weitere Informationen zum Workshop gibt es unter

<http://www.tum-ias.de/nonume2013/home.html> .

M. Mehl

The Fellowship of the Cycle

300 iterations for Doom-Ain decomposition
7000 iterations for Krylov spaces
90000 iterations for Mortal Men riding
in-definite saddles
One Cycle for the Exa Scale on his hot
throne
On the large grids where the slow modes stall
One
Cycle to rule them all,
One Cycle to invoke them
One Cycle to
call them all and in recursion bind them
On the large grids
where the slow modes stall.

Prologue.

In the misty dawn of system time, when direct elimination was still efficient, Epsilon, the infinitesimal terminator of iterations,

forged the mystical One Cycle. The One Cycle held the magic to make even mortal mathematicians asymptotically optimal. It is said that the wielder of the One Cycle shall always converge swiftly, and its processor shall remain chilled even at the highest peak of computing.

Alas, the One Cycle was lost when Krylov split Doom-Ain without overlap and when the dead locked the shadow ghosts in the battle of Finite Elements. And then the complement of Schur was forever forgotten.

Now the shadow of Exa Scale rises anew with his deadly consumption of power and threatens the home of so many peaceful mathematicians in Sobolev Space. Once in Sobolev Space He shall shatter Doom-Ain in millions of partitions so that they will never again be balanced on all processors.

The scales of no Krylov are strong enough, and no Algorithm known to men synchronizes fast enough to withstand Exa Scale when he rises from the blurred contours of the stalling modes to consume all power.

From magical chalk symbols inscribed on the blackboard of a deserted classroom a wise Prover of Theorems could decipher an ancient foretelling. Only if the One Cycle shall be found again, can the inhabitants of Sololev Space withstand the menacing powers consumed by Exa Scale.

All hope has now been laid in the hands of the Fellowship to find the Once Cycle. Only if The One Cycle will be invoked can the dreadful residual be diminished and the iterations once more be terminated in the decomposed Doom-Ain.

Galerkin must forge a new compact stencil for the coarse grid to employ the One Cycle to save us all from the slow modes of convergence. Only with the Once Cycle shall we relax efficiently in Sobolev Space.

U. Råde

Two LSS Codes become members of the Hi-Q Club of the Jülich Supercomputing Centre

Following up on the JUQUEEN⁷ porting and scaling workshop and to promote the idea of exascale capability computing, the Jülich Supercomputing Centre has established a showcase for codes that can utilize the entire 28-rack BlueGene/Q machine at JSC.

This is the HI-Q club, see

http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Expertise/High-Q-Club/_node.html

Currently only five codes are members of the Jülich Hi-Q club and two of them are being developed by the LSS at Erlangen. The first is WALBERLA, the widely applicable Lattice Boltzmann solver from Erlangen that scales to 458,752 cores (1,835,008 compute threads) on BlueGene/Q (JUQUEEN) and to 131,072 cores on SuperMUC. The WALBERLA project is partially supported by KONWIHR in the project WALBERLA-MC.

The second code of LSS in the Hi-Q club is TERRA-Neo, a program framework for simulating Earth mantle convection. Its development is currently funded within the DFG Priority Program SPPEXA. The current prototype implementation is based on HHG, the Hierarchical Hybrid Grid Framework of LSS. HHG is a FE multigrid package that shows excellent scalability and performance.

The development of HHG has been initiated prior to 2003 in the KONWIHR projects gridlib and Par-EXPDE. Its further development was conducted through dissertation projects within the International Doctorate Program “Identification, Optimization and Control with Applications in Modern Technologies” within the Elite Network of Bavaria. On Top-10 class systems, such as Juqueen or SuperMuc, the HHG multigrid method can solve FE systems with more than a trillion degrees of freedom, permitting a resolution of the complete Earth mantle with a mesh of 1km cell size.

U. Rüde

⁷High performance Computer at Forschungszentrum Juelich is the first supercomputer in Europe to reach a maximum compute performance of 5.9 Petaflop/s

Themenheft „HPC“ von „it“ erschienen

Nach einer interessanten und zuweilen etwas unkoordinierten Zusammenarbeit mit dem Oldenbourg-Verlag ist Ende Juni das Heft 2013/3 des Fachmagazins „it“-Information Technology zum Thema HPC erschienen.

Und damit eine Ausgabe früher als geplant, was ziemlich verwunderlich ist, nachdem der Verlag im verlängerten Weihnachtsurlaub war (siehe Editorial) oder Review-Anfragen an Englisch-sprachige Gutachter in Deutsch verschickt worden sind.

Nichtdestotrotz bietet das Heft, unter der Gasteditorenschaft von Hans-Joachim Bungartz (TUM), einen umfangreichen und interdisziplinären Blick auf die aktuelle HPC-Welt. So bedanken wir uns an dieser Stelle nochmal recht herzlich bei den Autoren der eingeladenen Beiträge, welche eine interessante und informative Mischung bilden: James Reinders (Intel Cooperation, US) definiert den aktuellen Stand der Technik und gibt aus mehreren Perspektiven einen Ausblick in die mit Spannung erwartete Exascale-Ära.

Das Gegenstück dazu bildet der Artikel von Harald Köstler und Ulrich Rüde (Universität Erlangen), die ihren Fokus auf die (allgemeine) Entwicklung von Algorithmen und wissenschaftlicher Software für solche Systeme legen. Anwendungen und deren Durst nach immer mehr Rechenleistung behandeln Martin Horsch, Hans Hasse (TU Kaiserslautern), Christoph Niethammer (HLRS) und Jadran Vrabec (Universität Paderborn) aus dem Blickwinkel der molekularen Simulation in der Verfahrenstechnik, wohingegen Christoph Gümbel (Porsche AG) die Anforderungen und Chance der Industrie in Bezug auf HPC erörtert.

Abgerundet wird diese Ausgabe von „it“ durch die Beiträge von Arndt Bode (TUM und LRZ) und Wolfgang Nagel (TU Dresden), die die deutsche HPC-Landschaft beschreiben (vorhandene Infrastruktur, Betrieb und natürlich die Finanzierung) und schlussendlich von David Keyes (KAUST, Saudi-Arabien⁸), der mit seinen pointiert vorgetragenen Ansichten gute Diskussionen über die Zukunft des Hochleistungsrechnens ermöglicht.

⁸Die KAUST wurde im September 2009 eröffnet und hat ihren Sitz in Thuwal, Provinz Mekka. Namensgeber der Universität ist Abdullah ibn Abd al-Aziz

Da man nun unweigerlich auf den Geschmack gekommen ist, zum Abschluss noch folgende Pflichtlektüre:
it-Information Technology, Volume 55, Issue 3 (June 2013) oder
<http://www.oldenbourg-link.com/toc/itit/55/3> .

A. Heinecke

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

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

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

e-mail: halfar@in.tum.de, **www:** <http://www5.in.tum.de/quartl>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **31.10.2013**

* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: $1/4$ Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)