



Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	4
MaMiCo: Software zur	
Molekular-Kontinuums-Strömungssimulation	6
SPPEXA: Final Symposium in Dresden	11
ECCOMAS Coupled Problems 2019	14
Drachenbootrennen:	
Mens sana in corpore sano	17
ENB: Applied Fault Tolerance beim Fußball	20
ISC 2019 STEM Student day	22
Elternzeit reloaded	25
Notiz*Notiz*Notiz	27

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

S. Herrmann, S. Seckler, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

Tel./Fax: ++49-89-289 18611/18607

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

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.12.2019**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartl: 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 Engineer-
ing (BGCE)

Editorial

Für die Technische Universität München und für alle, die mit ihr auf die eine oder andere Art verbandelt sind oder auch nur etwas näher zu tun haben, war dieser 30.9.2019 ein mehr als bemerkenswerter Tag: Nach 24 (in Worten vierundzwanzig) Jahren ununterbrochener Amtszeit endete die Präsidentschaft von Wolfgang A. Herrmann, und sein Nachfolger und bisheriger Vizepräsident für Forschung und Innovation, Thomas Hofmann, übernahm die Amtsgeschäfte auf der Brücke. Was andernorts als ganz normaler akademischer Vorgang angesehen werden mag, ist für München und seine TU schon etwas ganz und gar Außergewöhnliches – auch, aber keinesfalls nur wegen der 24 Jahre. Und so musste es natürlich schon ein veritabler Festakt sein, zu dem die TUM mit einem entsprechend breiten Spektrum an Begriffen eingeladen hatte: Amtsübergabe, Stabwechsel, Ende einer Ära, etc. etc. Kein Wunder also, dass auch das Quartl kurz innehält, um sich mit diesem Einschnitt zu befassen. Und ebenso klar, dass man aus dem Sarntal von einer – einmal mehr – begeisterten und begeistertsten Ferienakademie (auch schon die 36. übrigens) gen München eilt, um dabei zu sein.

Geradezu erfrischend zu beobachten war die doch erkennbare Nervosität, bei nahezu allen Beteiligten. Denn trotz aller Erfahrung mit großen Bühnen ist unsere Expertise in Sachen Führungswechsel ja ziemlich überschaubar. Viele an der TUM haben so etwas schließlich noch nie erlebt, manche mögen vielleicht sogar überrascht gewesen sein ob der Tatsache, dass ein Wechsel an der Spitze überhaupt vorgesehen war. Selten war das Auditorium Maximum so gut gefüllt, mit internen wie externen Gästen. Und so nahm allein die protokollarisch korrekte (davon gehe ich jetzt einfach mal aus) Begrüßung aller angereisten Honoratioren eine ganze Weile in Anspruch: der aktuelle und ein ehemaliger bayerischer Ministerpräsident, aktuelle und ehemalige bayerische Minister, diverse Bürgermeister der immer mehr werdenden TUM-Standorte (gut, das Stadtoberhaupt von Singapur habe ich zumindest nicht erspät), geistliche Würdenträger, Royals, Vertreter von Hochschulleitungen, und natürlich zahlreiche Wegbegleiterinnen und Wegbegleiter.

* Notiz * Notiz * Notiz *

Termine 2019/20

- **Supercomputing 2019:**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC19) – SC 19 in Colorado, Denver, USA: 17.11.-22.11.2019 <https://sc19.supercomputing.org/>
- **Society for Industrial and Applied Mathematics:**
SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ20) – SIAM UQ20 in Garching, Germany: 24.03.-27.03.2020 <https://www.siam.org/Conferences/CM/Conference/uq20>

Wir waren bereits 2017 mit unserer Tochter zwei Monate gemeinsam in Elternzeit im Ausland, damals verbunden mit einem Forschungsaufenthalt von weiteren zwei Monaten an der ANU in Australien (siehe Quartl Nr. 82). Und wenn wir dort vor Ort von den Möglichkeiten und Randbedingungen der Elternzeit und des Elterngelds in Deutschland erzählt haben, gab es nicht nur bei den NeuseeländerInnen oder AustralierInnen sondern auch bei vielen anderen dort Reisenden oder Lebenden immer sehr positiv überraschte Äußerungen („Was, sowas gibt's?“, „In Deutschland?“), „Sowas hätten wir auch mal gerne“, ...). Es wurde deutlich, dass – auch wenn natürlich alles verbesserungsfähig ist – es, wenn überhaupt, nur sehr wenige Länder mit noch besseren Rahmenbedingungen diesbezüglich gibt.

Für diejenigen, die sich fragen, warum Männer oft nur zwei Monate Elternzeit nehmen: In unserem Fall will und muss meine Frau einerseits die restlichen 12 Monate Elterngeld verwenden, damit unser Sohn gestillt werden kann, und andererseits sind damit dann die finanziell unterstützten Monate aufgebraucht. Vermutlich ist das meinen Kollegen auch nicht unrecht ;-), denn die müssen in den Absenzphasen natürlich schon das ein oder andere auffangen (Danke auch an dieser Stelle dafür). Das wird im Gegenzug wieder ein wenig durch die internationalen Forschungsaufenthalte ausgeglichen, die im Rahmen einer Promotion mittlerweile Standard sind.

Im Herbst 2019 folgt dann der zweite Monat in heimischen Gefilden – da freuen wir uns und ich mich im Besonderen schon sehr darauf!

Tobias Neckel

Vier sehr persönliche Redebeiträge gab's – vom bayerischen Ministerpräsidenten Markus Söder, vom President Emeritus der Stanford University Gerhard Casper, und dann natürlich vom scheidenden sowie vom neuen TUM-Präsidenten; dazu zwei Film-Portraits, Musik von Händel und Hummel sowie natürlich diverse Geschenke.

Was nimmt man mit von einem solchen Tag: Erstens natürlich die dankbare Verneigung vor einem wissenschaftlichen und wissenschaftspolitischen Lebenswerk, das fraglos seinesgleichen sucht und das die TUM unglaublich vorangebracht und geprägt hat. Zweitens die Erkenntnis, dass es nicht nur weitergehen wird, sondern dass dies mit mindestens derselben Schlagzahl erfolgen wird. Denn mit dem erneuten Erfolg in Exzellenzinitiative bzw. Exzellenzstrategie ist die Aufgabe ja keineswegs getan – wer erfolgreich war, muss nun liefern. Und da ist schon der eine oder andere Aspekt dabei, der ans Eingemachte geht. Drittens die Erwartung, dass sich so manches Detail, so manche Ausrichtung oder stilistische Nuance sehr wohl ändern werden, dass bezüglich des großen Wegs sich das Disruptive jedoch in engen Grenzen halten wird. Viertens eine gehörige Portion Spannung, wie sich alles so entwickeln wird in diesen dynamischen Zeiten.

Der 30.9. war im Sarnal dieses Jahr übrigens der schönste Wandertag, an dem es endlich die erhofften traumhaften Ausblicke auf die Dolomiten gab. Aber das war schon immer so: Große Dinge erfordern auch gewisse Opfer.

A propos 24 Jahre: Das Quartl erfüllt es natürlich mit einem gewissen Stolz, noch länger „im Geschäft“ zu sein als Präsident Herrmann, können wir dieses Jahr doch auf bereits 25 Jahre Quartl zurückblicken...

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen, liebe Leserinnen und Leser, einen guten Start ins Wintersemester, zunächst aber natürlich viel Spaß bei der Lektüre der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=32

10. September 2019

Watt mußt dat mutt. Was also sein muss, das muss wohl sein. Logisch ist daran kaum etwas auszusetzen. Denn es ist ja wohl unbestreitbar, dass das was sein muss, genau das ist was sein muss. Doch logisch kommt man dem Spruch nicht bei, denn er ist eine leere Aussage. Eigentlich stellt er nur fest, dass etwas was ist eben ist. Warum wird der Spruch dann verwendet? In Wirklichkeit ist er nicht wörtlich zu übersetzen, sondern im Grunde nur im Kontext zu verstehen. Er drückt eine Situation aus, in der etwas einerseits abgelehnt wird aber andererseits unabdingbar notwendig erscheint. Wörtlich müsste es also eher heißen: Ich/Wir will/wollen es zwar nicht, aber es muss eben so sein. Jetzt versteckt sich in diesem Satz eine ganze Welt von Interpretationen und Geschichten. Die Operation bei einem diagnostizierten Prostatakrebs etwa. Sie ist notwendig, aber kein Mensch lässt sie gerne über sich ergehen. Aber: wir kommen schon bei diesem einfachen Fall ins Nachdenken. Der Begriff „notwendig“ suggeriert eine Alternativlosigkeit die jede andere Option ausschließt. Man wird argumentieren: die Alternative ist der sinnlose Tod! Man wird weiter argumentieren: der Tod ist keine sinnvolle Alternative, also auch keine echte Alternative, sondern nur eine scheinbare verfügbare/wählbare Option, die so schrecklich ist, dass man sie nicht denken möchte. Eine erstaunliche Betrachtungsweise für ein christliches Land. Folgt man konsequent christlicher Denkweise so ist das Leben eine Durchgangsstation. Diese ist zeitlich begrenzt und mündet in eine aus unserem Leben ergibt⁶. Das Mittelalter kennt daher den guten Tod als einen Tod auf den man sich vorbereiten kann, sodass man – streng im christlichen Glauben – vorbereitet auf die Konfrontation mit seinem Schöpfer in Frieden ruhen kann. Das setzt die letzte Ölung ebenso voraus wie die Beichte - heute nur noch im katholischen Teil der Welt.

⁶Siehe dazu Dante Alighieris (ca. 1265 – 1321) göttliche Komödie

Elternzeit reloaded

Im Juni und Juli diesen Jahres durfte ich wieder einen Monat Elternzeit mit der Familie im Ausland, diesmal in Schweden, verbringen. Elternzeit und Elterngeld bieten eine tolle Möglichkeit, auch und gerade für Väter, intensiven Kontakt zu dem „neuen“ Kind aufzubauen. Und auch als Familie insgesamt tut es gut, diese Zeit zu haben, damit sich jede(r) in ihrer/seiner neuen Rolle finden kann.



Abbildung 1: Tipp für einen wirklich schönen Familienausflug: die Astrid Lindgren Welt in Südschweden. Auf dem Bild ist mit Katthult (der Heimat von Michel aus Lönneberga) eine mehrerer Freilichtbühnen zu sehen. Quelle: Albin Olsson via Wikipedia unter der Lizenz <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.en>.

P.S. Die Verpflegung während der ISC 2019 war ausgezeichnet. Es gab genügend Stationen, um sich bei sommerlichen Temperaturen mit kalten und warmen Erfrischungsgetränken zu versorgen. Zu den Kaffeepausen wurden neben Obst und Joghurt, vormittags belegte Bagel und nachmittags Kuchen und Muffins gereicht. In der Mittagspause und bei der Gala gab es ein Buffet mit Salat und verschiedenen warmen Speisen, darunter Fleisch-, Fisch- und vegetarische Gerichte.

Maik Haase

In einem vom Buddhismus geprägten Kulturkreis wäre der Tod noch weniger schrecklich, da er nur einen Übergang von einem alten Leben in ein neues – potentiell besseres – darstellt. Die Vorstellung der Welt als einer unendlichen Abfolge von Leben - die für Westler den Charme einer Art Allgemeinsicht auf die Schöpfung hat, denn alles Leben ist damit potentiell menschliches Vor- oder Nachleben – reduziert die Bedeutung des Todes. Das Leben ist kein abgegrenzter unwiederholbarer Vorgang sondern ähnlich einem Computerspiel kann es beliebig oft gestartet werden, und was in diesem Leben nicht geht, geht vielleicht im nächsten. Wird er dadurch zur Alternative? Zu einer akzeptablen Option? Dr. House würde an dieser Stelle entschieden widersprechen. Nach dem Tod, so stellt er mehrfach fest, ist alles vorbei. Es kommt nur das Nichts. Und selbst der christliche Johannes von Tepl^a lässt um 1400 seinen Ackermann klagen: „[G]rimmer tilger aller lütte Schedlicher echter welt fraissamer aller lütte ir tott üch sie verflüchet Gott euir irmer hasse üch vnsäden merunge wone üch by vnglück husse gewaltiklich zu vch zu male geschandet syt ymer Angst not vnd Jamer“ Watt mutt ist also die Anerkennung der Aussichtslosigkeit, die Akzeptanz des fehlenden Auswegs, die Resignation vor einer Situation, die nach menschlichem Maßstab nicht in Freiheit bewältigt werden kann. Der freie Wille des Menschen gerät an die Grenzen seiner Fähigkeiten, und es bleibt ihm doch nur die Akzeptanz des Irrationalen (Todes) oder des Rationalen (Operation). Dat mutt ist damit ein Aufruf an sich selbst, ein Anstoß, sich diesem Freiheitsverlust zu stellen und einzugestehen, dass man nicht mehr frei wählen, sondern – und das ist wohl die Quintessenz der Aussage – wenigstens stolz unfrei sein kann indem man wählt wozu man gezwungen ist. Watt mutt dat mutt. Eine Iterationschleife musste geschrieben werden. Oder Französisch formuliert: *coute que coute!*

M. Resch

^aJohannes von Tepl (ca. 1350 – ca. 1415) war ein böhmischer Schriftsteller der deutschen Sprache

MaMiCo: Software zur Molekular-Kontinuums-Strömungssimulation

Molekulare Simulation in der Verfahrenstechnik - Möglichkeiten und Grenzen

Die molekulare Simulation ist zu einem festen Bestandteil in verschiedenen Forschungsweigen geworden. Einer hiervon ist die Verfahrenstechnik. Typische Problemstellungen lassen sich hierbei bspw. auf die Untersuchung von Gas-Flüssig-Equilibriumssystemen¹ oder von verdampfenden Filmen² zurückführen. All diese Anwendungen zeichnen sich durch hochgradig nicht-triviales, teils lokales Verhalten der zu Grunde liegenden Fluide auf der molekularen Skala aus. Zudem werden extrem große molekulare Systeme benötigt, um deren (Langzeit-)Verhalten akkurat numerisch erfassen zu können.

Jedoch sind den virtuellen Untersuchungen dieser Szenarien mit Hilfe der numerischen Simulation durch die verfügbaren Supercomputer natürliche Grenzen gesetzt. Dies wurde kürzlich mit Hilfe der Software *ls1 mardyn* demonstriert³: effiziente Vektorisierung, optimierte hybride MPI-OpenMP-Parallelisierung zusammen mit verbessertem HPC-gewahrem Software Design ermöglichten eine 21-Billionen-Teilchen-Simulation unter Nutzung des gesamten Supercomputers Hazel Hen/HLRS, bei einer Performance von 1.33 PFLOPS und einer parallelen Weak Scaling Effizienz von 88%. Das simulierte Volumen entsprach, im Falle der Übertragung auf das Edelgas Xenon, einem simulierten Kubus der Seitenlänge 11.8 μm —einer Größe, die dem Sichtbarkeitsbereich des menschlichen Auges (ca. 55-75 μm) nahe kommt.

Nichtsdestotrotz bleibt dieser Weltrekordlauf in gewisser Hinsicht eher eine HPC-Demo als ein unmittelbarer Ausblick auf die Zukunft: allein die Zeitskalen, welche für viele verwandte Verfahrenstechnikanwendungen dieser Größe bewältigt werden müssten, lägen Größenordnungen jenseits allem Berechenbaren auf heutigen Petascale- und den nahenden Exascale-

teilnehmenden Studierenden die Möglichkeit, die Stände genauer anzusehen, sowie an den Talks teilzunehmen. Im Ausstellungsbereich wurde einiges an neuer Hardware präsentiert, darunter neue Systeme, tragbare HPC-Geräte oder die neuesten Errungenschaften im Bereich Quantencomputing, Interconnects, Datenmanagementsysteme und vieles mehr. Die Aussteller nahmen sich aber auch für uns Studierende Zeit, um Rede und Antwort zu stehen. Ich verbrachte den Nachmittag am Stand des Gauß Center for Supercomputing, mit guten Gesprächen über die unterschiedlichen beruflichen Werdegänge, als auch über die Entwicklung von HPC und Supercomputern, vor allem am Standort Deutschland. Hilfreiche Tipps für den eigenen Studienverlauf und einen eventuellen Start in die HPC-Community gab es dort auch.

In der Abschlussveranstaltung am Abend wurden die diesjährigen Gewinner der Student Cluster Competition gekürt und die Messe mit einem Highlight abgeschlossen, der Keynote von Prof. Thomas Sterling, der zum wiederholten Male einen amüsanten Rückblick auf das vergangene HPC-Jahr gab. Abends wurde dann zur STEM Student Gala mit Career Fair geladen. Begonnen hat die Gala mit einem Vortrag von Arno Kolster, der über seinen persönlichen und beruflichen Werdegang sprach. Im Anschluss waren gut zwei Stunden Zeit, um sich mit Vertretern der anwesenden Unternehmen und Institutionen zu unterhalten. Dabei sprach man über die Projekte des Unternehmens/der Institution, über seine persönlichen Projekte, Kenntnisse und Interessen und bei Überschneidung auch über mögliche Praktika oder offene Stellen.

Alles in Allem war die Gala für mich eine ausgezeichnete Möglichkeit, um andere junge Wissenschaftler und Studierende mit Interessen im Bereich HPC und Anwendung kennenzulernen und natürlich auch zum Netzwerken mit den anwesenden Vertretern aus Industrie und Forschung. Vielen Dank an das ISC-Team und die HPC-Community, die auf ihrer größten europäischen Konferenz und Messe dieses Angebot an Studierende richten, sowie an KONWIHR, das mir die Teilnahme und Anreise ermöglichte. Ich kann für die kommenden Jahre interessierten Studierenden nur empfehlen, am ISC STEM Student Day teilzunehmen.

¹S. Eckelsbach, J. Vrabec, Phys. Chem. Chem. Phys. 17:27195-27203, 2015

²M. Heinen, J. Vrabec, J. Fischer, J. Chem Phys. 145, 081101, 2016

³N. Tchipev et al. Int. J. High Perform. Comput. Appl. 33(5):838-854, 2019

ISC 2019 STEM Student Day



Nachdem ich von der Möglichkeit einer Teilnahme an der International Supercomputing Conference 2019 im Rahmen des ISC STEM Student Day erfuhr, stand für mich schnell fest, dass ich diese wahrnehmen möchte. Also stand ich am Mittwoch, den 19.06.2019 um 5:00 Uhr morgens am Bahnhof und wartete auf den Zug, der mich nach Frankfurt bringen sollte. Vier Stunden (inklusive einiger Verzögerungen) später kam ich in Frankfurt an und erreichte das Messegelände gerade noch rechtzeitig um 9:20.

Der Check-In verlief reibungslos, ich erhielt einen kleinen schwarzen Rucksack mit mehr und weniger nützlichen Prospekten, den ich an der Garderobe direkt neben dem Check-In Counter abgeben konnte. Praktisch! Um 9:30 ging es dann weiter mit dem ersten Programmpunkt des Tages: der Einführung in High Performance Computing. In den ersten 90 Minuten gab Dr. Bernd Mohr vom Jülich Supercomputing Centre eine gut verständliche Übersicht über High Performance Computing, von den Anfängen der Supercomputer über deren Entwicklung bis hin zu den Schwierigkeiten und Anwendungsmöglichkeiten von HPC auf modernen Supercomputern.

In der zweiten Hälfte des Tutorials von 11:30 bis 12:30 behandelte Dr. Mohr paralleles Programmieren mit einer Übersicht über die verschiedenen Problemklassen und den unterschiedlichen Möglichkeiten, Code zu parallelisieren. Diese wurden anhand vieler anschaulicher Codebeispiele demonstriert. Der Fokus lag hier auf OpenMP und MPI. Zum Ende des Tutorials gab es einen Ausblick auf Computing mit Beschleunigern, vor allem mit OpenACC, OpenCL, HIP und CUDA. Das Tutorial ermöglichte insbesondere frühen Semester- oder Studierenden aus anderen Fachbereichen einen spannenden ersten Einblick in die Welt des HPC und legte dabei die nötigen Grundlagen, um sich fachlich mit den verschiedenen Ausstellern zu beschäftigen. Für die vereinzelt verbliebenen Unklarheiten blieb Dr. Mohr etwas länger und beantwortete geduldig und freundlich alle noch offenen Fragen. Nach dem Tutorial wurden wir in die Ausstellungsbereiche entlassen. Dabei ergab sich für die

Supercomputern. Somit bleibt die Frage nach alternativen Verfahren, welche molekulare Informationen hinreichend genau abbilden und zugleich deutlich weniger Rechenintensität erfordern.

Molekular-Kontinuums-Verfahren

Mehrskalensimulationen hatten sich einst genau aus dieser Motivation heraus entwickelt und sind inzwischen weit verbreitet. *Molekular-Kontinuums-Verfahren* sind eine spezielle Klasse solcher Verfahren, welche Molekulardynamik (MD) und Kontinuumsmechanik—in unserem Falle Navier-Stokes-basierte oder mesoskopische Strömungsmechanik—verknüpfen. Sie erlauben u.a. eine räumliche Aufteilung des Simulationsgebiets in MD- bzw. Kontinuumsregionen, vgl. Abb. 1, welche folglich auf unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen—je nach Kopplungsmethodik mehr oder weniger eng—gekoppelt werden.

Software für Molekular-Kontinuums-Verfahren: MaMiCo

Seit 2012 wird das *Macro-Micro-Coupling Tool (MaMiCo)* entwickelt, welches die Entwicklung und Durchführung von Molekular-Kontinuums-Verfahren auf aktuellen Parallelrechnern erleichtern soll. *MaMiCo* stellt hierbei in einer Black-Box-Manier Kopplungsalgorithmen für stationäre und transiente Szenarien zur Verfügung, welche mit beliebigen MD- und Strömungslösern eingesetzt werden können. Derzeit existieren hierzu Schnittstellenimplementierungen für

- die MD-Pakete *LAMMPS*, *ESPReso*, *lsI mardyn* und für einen einfachen Test-Code *SimpleMD*, sowie für
- die Strömungs-Löser *waLBerla*, *PeanoLB* (die einstige Lattice Boltzmann-Komponente des Peano-Frameworks), *OpenLB* und *Palabos*—allesamt Lattice Boltzmann-basiert, was jedoch nicht potentieller Einschränkungen in der Schnittstellenformulierung sondern vielmehr der Affinität des Autors zu diesen Verfahren zu verdanken ist.

Molekular-Kontinuums-Simulationen können mit *MaMiCo* MPI-parallel ausgeführt werden; die Skalierbarkeit auf bis zu ca. 500 Rechenkernen folgt i.A.

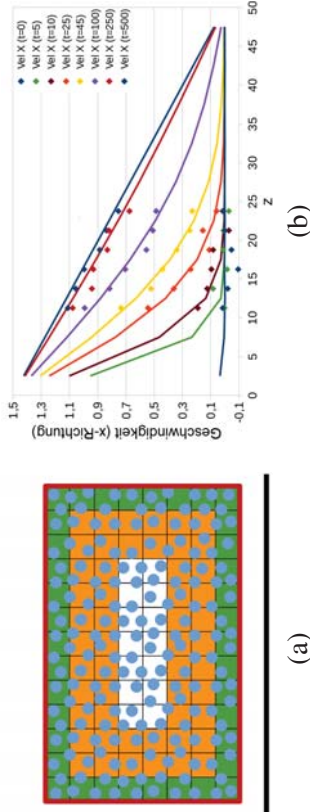


Abbildung 1: (a) Setup zur Molekular-Kontinuums-Simulation einer Couette-Kanalströmung. Der rot umrandete Teil im unteren Teil des Kanals wird mit Hilfe von Molekulardynamik simuliert, der Rest wird von einem kontinuumsbasierten Strömungslöser berechnet. Die grünen bzw. orangenen Regionen markieren in diesem Beispiel die Austauschbereiche für Masse und Impuls von Kontinuums- zu MD-Simulation. (b) Strömungsprofil zu verschiedenen Zeitpunkten über den Kanalquerschnitt. Linien: analytische Lösung. Symbole: MD-Lösung in einer Ein-Wege-Kopplung (Kontinuum \rightarrow MD)⁷.

der entsprechenden Performanz des MD-Lösers⁴, da die MD in Molekular-Kontinuums-Verfahren typischerweise 90-95 % (oder sogar noch mehr) der Gesamtrechenzeit einnimmt.

Und so kam es wie es kommen musste bei verteilten Systemen: Mit dem Münchner Auto blieb ein Drittel der Fahrzeuge und exakt zwei Neuntel der Spieler auf der Strecke (der Rest der Mitfahrer wurde noch ins Garchingergeladen). Somit erreichten, leicht verspätet, immerhin noch sieben Spieler Regensburg.

Der verstierte Kleinfeldfußballfan hat das Problem sicher schon bemerkt: Ohne Auswechselspieler in ein Turnier zu starten kann zu signifikanten Performaneeinbußen, insbesondere in späteren Spielen führen. Doch schon der Auftakt ging in die Hose. Mit einer durchaus verdienten Niederlage startete das BGCE-Team ins Turnier und sortierte sich für die folgenden Spiele taktisch neu. Und so konnten in den verbleibenden zwei Gruppenspielen jeweils Siege gegen starke Max-Weber-Stipendiaten und nicht ganz so starke Quantitative Economics erzielt werden. Im Viertelfinale allerdings machte sich die hohe Belastung durch die fehlenden Auswechselspieler bemerkbar und man musste sich gegen das Team von CDTM mit 0:2 geschlagen geben.

Das Finale trugen FIM (Finance and Information Management) aus Augsburg und die Mannschaft von CDTM (Center for Digital Technology and Management) aus München aus. Nachdem die Augsburger das bessere Ende für sich behielten steht dem BGCE-Team für nächstes Jahr wieder eine Reise in eine Welterbestadt bevor.

Nichtsdestotrotz kann man von Seiten der BGCE Verantwortlichen sehr zufrieden sein: Durch die Viertelfinalteilnahme und Platz 6 wurden die Ergebnisse der Vorjahre obschon der schwierigen Personalsituation gehalten und zusätzlich erwies sich das System als vollständig Fault-Tolerant. Selbst bei Ausfall eines Drittels der Ressourcen gab es keine Einbußen bei der Performance. Kritische Geister mögen auf die nicht optimale Baseline verweisen. Leider können weitere Untersuchungen diesbezüglich erst im Jahre 2020 in Augsburg gemacht werden.

<https://www.elitenetzwerk.bayern.de/elitenetzwerk-home/aktuelles/artikel/elitecup-2019-363/>

Michael Rippl

⁴P. Neumann et al. Comput. Phys. Commun. 200:324-335, 2016

Applied Fault Tolerance beim Fußball



Der Elitecup, das nach der Frauen-Fußballweltmeisterschaft zweitwichtigste Ereignis Fußball-Deutschlands 2019, beehrte im Juni Regensburg mit seiner pittoresken Universität. Traditionell lädt das Elitenetzwerk Bayern seine Elitestudiengänge, Doktorandenkollegs und Max-Weber-Stipendiaten im Sommer zum Kampf um Ruhm und Ehre im Fußball ein. Im historischen Stadion am Sportgelände der Universität wurden die Matches der 16 angetretenen Teams ausgetragen, wohlorganisiert vom Vorjahressieger von Honors Wirtschaftswissenschaften aus der Domstadt.



Abbildung 1: Die Spieler nach dem Turnier, nachdem sich an der ein oder anderen Bratwurst gestärkt wurde.

Anders als in den beiden Vorjahren, wo jeweils zwei BGCE Teams an den Start gingen, war dieses Jahr die Personaldecke etwas dünner und so wurde nur eine Mannschaft angemeldet. Also starteten am 22. Juni im Morgenrauen in Erlangen, München und Garching die Fahrzeuge der BGCE-Athleten.

Erhöhung der Skalierbarkeit: Multi-Instance Sampling

Jedoch stoßen auch diese Verfahren an ihre Grenzen bzgl. der Simulationsfähigkeit auf aktuellen HPC-Systemen. Zum Einen impliziert die eine vorgehende Skalierbarkeitsanalyse der Molekular-Kontinuums-Verfahren dieselben Skalierbarkeitslimits wie Stand-Alone-MD-Simulationen (im Strong Scaling-Sinn). Zum Anderen müssen für die Kopplungsrichtung MD \rightarrow Kontinuum relevante Kontinuumsgrößen in der MD-Simulation gesammelt werden. Um auf Grund der thermischen Fluktuationen hinreichend akkurate Werte für bspw. die mittlere Strömungsgeschwindigkeit zu erhalten, sind große Samplingregionen oder lange Samplingintervalle notwendig. Große Samplingregionen implizieren eine starke Entkopplung der MD- und Kontinuums-skalen, was zwar von Theorieteile her akkurat, von Anwenderseite her jedoch nicht notwendigerweise gewünscht ist (in typischen transienten Anwendungsbeispielen werden 50-100 MD-Zeitschritte pro Kontinuumszeitschritt gerechnet^{5,6} und Samplingzellen verwendet, welche $O(10-100)$ Moleküle enthalten). Lange Samplingintervalle implizieren inhärente Sequentialität, welche in Hinblick auf die Zeitskalenproblematik in der MD und das angesprochene Strong Scaling-Limit abträglich ist.

Aus diesen Gründen wurde *MaMiCo* auf Multi-Instance Sampling erweitert⁷: anstelle einer MD-Simulation wird eine Vielzahl quasi-identischer, randomisierter MD-Systeme an eine Kontinuumsimulation gekoppelt. Sampling kann somit im Sinne des Ensemble-Averaging über die MD-Systeme erfolgen, die MD-Systeme können “embarrassingly parallel” abgearbeitet werden, und die Kopplungszeitintervalle könnten—aus Samplingsicht—durch Hinzunahme weiterer MD-Instanzen beliebig reduziert werden. Transiente Strömungssimulationen auf bis zu 65 536 Rechenkernen konnten mit Hilfe dieser Methodik unter Einsatz von *MaMiCo* bereits durchgeführt werden. Allerdings führt dieses Vorgehen bei Einsatz von N MD-Instanzen zu einem ca. N -fach gestiegenen Rechenaufwand—ein klassischer “Brute Force”-Ansatz im HPC.

⁵R. Delgado-Buscalioni, P. Coveney. Phys. Rev. E 67:046704, 2003

⁶X. Nie, S. Chen, W. E, M. Robbins. J. Fluid Mech. 500:55-64, 2004

⁷P. Neumann, X. Bian. Comput. Phys. Commun. 220:390-402, 2017

Quo Vadis MaMiCo?

Datenanalyse-Verfahren und Modellierungsaspekte

Daher wurde zuletzt eine weitere Schnittstelle in *MaMiCo* eingeführt, welche eine *Datenfilterung* auf den MD-Daten zulässt und somit auch auf einzelnen oder wenigen MD-Instanzen via Datenfilter glatte Kontinuumsströmungsgrößen extrahieren kann⁸. Derzeit findet hierzu ein zeitscheibenbasiertes Proper-Orthogonal-Decomposition-Verfahren Einsatz⁹.

Weitere Arbeiten in diese Richtung, u.a. die Integration eines Non-Local Means-basierter Filters, werden derzeit durchgeführt. Zudem bestehen nebst der eigentlichen Software- und HPC-Performance-Problematik noch eine Vielzahl anderer Herausforderungen, welche guter Lösungen bedürfen, um Molekular-Kontinuums-Verfahren einer noch breiteren Anwendungspalette zugänglich zu machen. Beispielsweise besteht eine große Herausforderung in der Modellierung offener MD-Ränder, da an diesen kontinuiersseitig molekulare Kraftfelder fortgesetzt bzw. emuliert werden müssen. Neue Ansätze zur automatisierten Kraftfeld-Datenanalyse und anschließender Emulation sind Gegenstand aktueller Forschung.

Das letzte Open-Source Release von *MaMiCo* ist über die CPC Program Library verfügbar¹⁰.

Philipp Neumann

SCSCCS - der Sport Club am SCCS

Genug gewitzt über das Drachenbootrennen - der SCCS trifft sich regelmäßig für lockeren Sport zur Erholung. Sei es zum Training für den Campuslauf, zur Blade Night, Ski fahren, jedwedes Fussball Event, eine Partie Beach Volleyball oder Tischtennis. Eine gesunde Erheiterung zum tristem Büroalltag.



Abbildung 2: SCCS'ler auf dem Sella Stock.

Severin Reiz

⁸P. Jarmatz, P. Neumann. ICCS 2019 proceedings, LNCS 11539:451-464, 2019

⁹L. Grinberg. J. Comput. Phys. 231(16):5542-5556, 2012

¹⁰<https://dx.doi.org/10.17632/w7rgdrhb85.1>

Ein Drachenboot Team besteht aus 16 Paddlern und einem Trommler - zusätzlich wird das Boot von einem externen Steueremann geleitet. Die International Graduate School of Science and Engineering (kurz: IGSSE) nimmt seit Jahren teil, und die Verbindung zum SCCS (Scientific Computing in Computer Science) Lehrstuhl besteht durch das ExaNIML Projekt: An Exascale Library for Numerically Inspired Machine Learning - ein Kooperationsprojekt mit der University of Texas at Austin. Der Aufruf zur Teilnahme kam von der IGSSE Doktorandensprecherin Veronica Bessone - die bis zuletzt mit Absagen zu kämpfen hatte.

IGSSErians beim Drachenbootrennen

All das Vorgeplänkel hinter sich gelassen - beim Drachenbootfahren kommt es auf kräftigen Gleichschlag an: „synchron wie eine Militärkapelle“. Dass damit die bunten IGSSErianer so ihre Probleme hatten, das lässt sich auf dem Bild unschwer erkennen. Doch es stand der Spaß im Vordergrund. Nach kräfteaufreibender Fahrt hat es für die IGSSErians leider nicht zum Halbnaleinzug gereicht, und so sagten sie sportlich nach der Vorrunde „good bye“. Jetzt fragen Sie sich sicher: Wer gewann? TUM oder LMU? Hier gab es eine Professoren- und eine Studierenden-Wertung. Bei den Studierenden gewann ein Team der LMU, bei den Professoren die TUM – somit ein ungelöstes Unentschieden.

Nach dem sportlichen „good bye“ befassten sich das IGSSE Team mit interdisziplinärem Ideenaustausch. Sport verbindet – und so war die Hürde gemeinsame Doktoranden-Leidensgeschichten, oder auch den heißesten Shit zu teilen, gering. Robo-Fussball war nur ein diskutiertes Schmankerl. Nach dem Sport kamen auch noch verletzte Kollegen hinzu, und so entstand neben gesundem Geist in gesundem Körper („Mens sana in corpore sano“) auch ein gesunder Geist in flüssigem Umtrunk („Mens sana in campari soda“).

SPPEXA: Final Symposium in Dresden



Das DFG-Schwerpunktprogramm 1648 „Software for Exascale Computing“ (SPPEXA) hat in den letzten sechs Jahren die deutsche HPC-Forschungslandschaft mit 17 interdisziplinären Teilprojekten, 60 Principle Investigators, und 60 Doktorand/innen geprägt. Nach zwei dreijährigen Förderungsphasen läuft das Programm zum Jahresende weitgehend aus.



Abbildung 1: Teilnehmer des zweiten tri-lateralen Workshop (Oktober 2018)

Abschluss-Symposium in Dresden

Als Abschluss findet vom 21. bis 23. Oktober ein finales Symposium an der TU Dresden statt. Das Event besteht aus Minisymposien der 17 Projekte. Aufgrund des trilateralen Aufbaus von SPPEXA (Japan, Frankreich, Deutschland) werden zahlreiche internationale Sprecher/innen vertreten sein, zumal die Projekte neben den internen Redner/innen zu ihren Veranstaltungen auch externe Experte/innen aus aller Welt einladen. Zusätzlich zu den Symposien beinhaltet das Programm die eingeladenen Plenarvorträge, die Verleihung der SPPEXA-Preise für Nachwuchswissenschaftler/innen und ein

Festkolloquium. In Vorbereitung der Konferenz findet für Interessierte ein Networking-Event zur Stärkung der Geschlechterverteilung im HPC statt. Die Anmeldung ist bis zum 30. September möglich.

Im Anschluss an das Symposium findet noch ein Festkolloquium zum 60. Geburtstag von Wolfgang Nagel statt. Wolfgang Nagel ist Gründungsdirektor und Leiter des Zentrums für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH), und durch das gemeinsame SPPEXA-Projekt gut mit unserem Lehrstuhl verbunden (H.-J. Bungartz und W. Nagel sind die Koordinatoren). Weitere Informationen unter <https://www5.in.tum.de/workshops/SPPEXAFinalSymposium2019/info.php>

Tagungsband in Springer LNCSE

Zum Ende des Programms werden die Meilensteine der 6 Jährigen Forschungssphase in einem DFG-Abschlussbericht zusammengefasst. Damit das nicht nur der DFG Administration, sondern der breiten Öffentlichkeit zugänglich gemacht wird, erscheint es als Tagungsband in den Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE).

- Der Band besteht aus Überblicksartikeln der Projekte, die zum einen ihren Projektfortschritt, zum anderen aus den innovativen Beiträgen zu Exascale Software berichten.
- Erscheinungsdatum wird im Januar 2020 sein – geplant ist sogar OpenAccess.

Dritter Tri-lateraler HPC Workshop in Tokio

Wie erfahrene Quartl Leser eventuell bereits wissen, ist die Besonderheit der zweiten SPPEXA Phase die tri-laterale Förderungsstruktur. Nach einem tri-lateralen HPC Workshop 2017 in der französischen Botschaft in Tokio, folgte 2018 die zweite Auflage in der deutschen Botschaft in Tokio. 2019 findet die dritte Auflage wieder in der französischen Botschaft in Tokio statt.

Titel der diesjährigen Veranstaltung ist „Convergence of HPC and Data Science for Future Extreme Scale Intelligent Applications“, und zielt auf

Drachenbootrennen: Mens sana in corpore sano

Die lateinische Redewendung „Ein gesunder Geist in einem gesunden Körper“ hat ja eine nicht unkritische Geschichte hinter sich. Ich möchte zu Anfangs den Zusammenhang konkretisieren: Die Umkehrung, dass in kranken und schwachen Körpern kein gesunder Geist innewohnt, ist schlichtweg falsch. Als bekanntestes Gegenbeispiel lässt sich hier Stephen Hawking nennen, der trotz seiner unheilbaren Krankheit immense wissenschaftliche Beiträge leistete.

Am Freitag, den 12. Juli 2019 um 16:00 Uhr fand auf dem Olympiasee das 10. Drachenbootrennen statt. Das Event besteht aus rund 20 Teams - aus der Technischen Universität München (TUM) oder der Ludwig Maximilian Universität München (LMU). Wie so oft entstand der Wettkampf „TUM gegen LMU“. Es ging aber nicht um „Siegen um jeden Preis“, sondern um das olympische Motto „Dabei sein ist alles“.

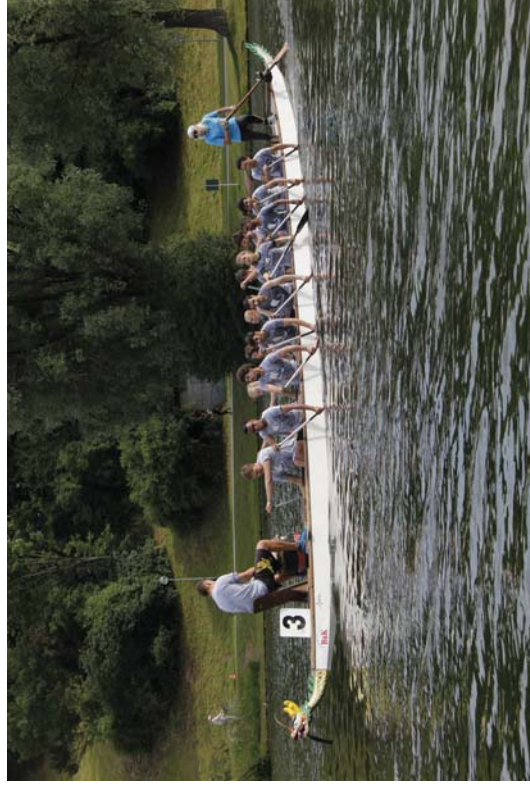


Abbildung 1: Das IGSSSE Drachenboot Team mit kultigen Steuerermann. Vom SCCS waren Ivana und Severin dabei.

This was the second minisymposium of its kind, continuing the 1st minisymposium in the ECCOMAS ECCM-ECFD 2018 in Glasgow. As the family has now grown more than the size the ECCOMAS conferences can host, we are now organizing our own, 1st preCICE Workshop on February 17-18, where everything started: in our TUM Department of Informatics! Coupling colleagues & partners are welcome to submit presentation abstracts until November 15¹³.

Finally, thank you, SPPEXA for the financial support!

Gerasimos Chourdakis

die positive Zusammenarbeit der drei Länder für HPC, Big Data und KI ab. Nach einem ersten Tag, an dem führende Experten aus den drei Ländern ihre jeweiligen Fortschritte im Bereich High-Performance-Computing im Plenum vorstellen werden, widmet sich der zweite Tag thematischen Sitzungen zur Konvergenz der verschiedenen Bereiche (HPC, Big Data und KI). Schließlich wird der dritte Tag aus parallelen Arbeitssitzungen in kleinen Gruppen bestehen, die die Diskussion fördern, um die Leitlinien für die Zusammenarbeit zwischen unseren Ländern festzulegen.

Die Teilnahme an der Veranstaltung ist kostenlos, weitere Informationen sind unter folgenden Links abrufbar:

- <https://jp.ambafrance.org/Workshop-France-Allemagne-Japon-sur-le-calcul-haute-performance-la-science-des-donnees-et-1-IA>
- <https://www.dwh-tokyo.org/en/event/hpc-and-big-data-convergence-for-future-extreme-scale-intelligent-applications-a-french-german-japanese-workshop-in-tokyo/>
- <https://hpc-and-ai.sciencesconf.org/>

Severin Reiz

¹³preCICE Workshop 2020: <https://www.precice.org/precICE2020>

Minisymposium at the ECCOMAS Coupled Problems 2019



The bi-annual ECCOMAS Coupled Conference this June in Barcelona had something special. No, it was not just another ECCOMAS conference near the sea; it also included a full day of presentations from preCICE¹¹ users and developers! The 15 presentations were spread over three sessions on Wednesday, June 5, 2019¹² and everybody in the European coupled problems community had the opportunity to join at least some of the talks in the preCICE sessions, or talks of preCICE users and developers in other parallel sessions.



Figure 1: Speakers & preCICE friends after a long day and a bit of wine.

Apart from talks, this was a rare opportunity to associate faces with mailing list and chat room names and discuss issues, code, and potential collaborations. Seeing the progress of people we had only exchanged emails with over the past year was a very fulfilling experience. Among the speakers were users from the TU Delft, Univ. Manchester, KIT, LKR Leichtmetallkompetenzzentrum Ranshofen GmbH, Univ. Siegen, TU Darmstadt, Italian

¹¹preCICE coupling library: <https://www.precice.org/www.precice.org> and <https://github.com/precice/github.com/precice>

¹²Invited Sessions “Multi-physics Simulations with the Coupling Library preCICE” in the conference program: <https://congress.cimne.com/coupled2019/frontal/programprint.aspx?congress=cimne.com/coupled2019>

Aerospace Research Center, Univ. of Strathclyde and Amirkabir Univ. of Technology in Tehran, Iran. The applications ranged from fluid-structure-acoustics interaction to conjugate heat transfer of molding and fluid-fluid coupling between Navier-Stokes and Lattice Boltzmann solvers. The speakers & closest preCICE friends met each other already the evening before for a specially arranged tapas dinner (Fig.1), very hungry after two days of supermarket sandwich lunches.

The very productive day ended (or that’s what we initially thought) with the conference dinner, where one could see professors with long numerical beards dancing to the rhythms of catalan music. Later at night, a large group of the participants had the marvelous team-building idea of night swimming in the sea of Sitges, Barcelona (Fig. 2). Blue shirts got off and we found a swimming suit for (almost) everybody. After a quick refresh, the night continued with more beer, next to the parallel Pride parade (Fig.3).



Figure 2: left: Team building and on the right more team building