

langen stattfinden. Der Kurzlehrgang wendet sich an all diejenigen, die selbst Rechenprogramme für Strömungssimulationen entwickeln oder aber kommerzielle Softwarepakete anwenden. Weitere Infos, die vollständige Broschüre und die Online-Anmeldung finden Sie auf der angegebenen Web-Site.

Termin : 10.–13. März 2008
Ort : LSTM Erlangen
Anmeldung : ab sofort (bis 15.12.2007 Preisnachlaß)
Leitung : Priv.-Doz. Dr.-Ing. M. Breuer
Email : numet2008@lstm.uni-erlangen.de
URL : <http://www.lstm.uni-erlangen.de/numet2008/>

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. Dr. h.c. F. Durst

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: **31.10.2007**

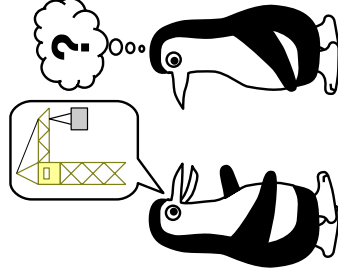
* Quartel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0,27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Inhalt

Editorial	2
Multi-, Many-, Megamania	5
Remote Visualization for the HLRB2	11
IGSSE Project Teams Informatik/Chemie	13
BaCaTeC: Petaflop-Computer	17
Servus HBFG, WAP & CIP	18
Besuch aus dem Morgenland	20
Rückblick: BGCE-Kompaktkurs	21
Elite Goes Hollywood!	23
Elite-Sommerschule auf Schloss Thurnau	25
ICIAM-Nachlese	27
KONWIHR Workshop 2007	28
CSE-„Fakultätentag“ in München	32
Leserbrief-Sektion?	35
Bitte notieren	35



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

Diesmal wollen wir uns mit dem Juniorprofessor befassen – nein, nein, nicht mit dem Juniorprofessor an sich (schließlich liegt dem Quartl nichts ferner als plumpe Verallgemeinerungen oder pauschale Kritik), sondern ganz konkret mit dem Juniorprofessor Thomas H. aus K. (so viel Anonymität muss sein ...).

Zur Vorgeschichte: Die Bewerbungen zum CSE-Masterstudiengang der TUM werden zunächst im Sinne einer Eignungsfeststellung gesichtet und nach fachlicher Qualifikation kategorisiert. Die Unterlagen der hierbei überzeugendsten Kandidaten werden dann dem Zulassungsausschuss der TUM zur Überprüfung der Formalia und, wenn nichts dagegen spricht, Erteilung der Zulassung übergeben. Um unsere Bewerberinnen auf dem Laufenden zu halten, teilen wir ihnen das Ergebnis dieser ersten Stufe umgehend mittels einer formlosen Email mit: „... *We want you as a new CSE student this fall. In case that all formal issues, possibly still open now, are completely settled, you will get the direct admission to the CSE program by TUM's administration. The formal admission can take some time – this email is to inform you that the light is on green and that you should start your preparations.*“ Bisher waren alle dankbar für diese frühe Rückmeldung. Und dass der Hinweis, sich rechtzeitig um Dinge wie Visum, Stipendium oder Wohnung zu kümmern, nicht überflüssig ist, zeigt jedes Jahr aufs Neue der verspätete Start einzelner CSE'ler aufgrund ebensolcher Probleme. Es gab auch noch nie Interpretationsprobleme. Bis zu besagtem Juniorprofessor Thomas H.

Besorgt um das Schicksal einer Bewerberin aus dem Iran (zugleich Cousine seiner Gattin), schrieb er mir, unter Bezugnahme auf unsere Informations-Email, nun seinerseits: „*Dies ist eine klare und unmissverständliche Aussage darüber, dass Frau D. einen Studienplatz in Ihrem Masterprogramm erhalten wird – und lediglich FORMALE (sic!) Punkte zu klären sind. Sie fordern Sie insbesondere auf, Vorbereitungen für den Eintritt in das Studienprogramm zu treffen.*“ Sorry, aber ganz falsch, Herr Kollege!

Nun hatte uns zwischenzeitlich das TUM-Zulassungsausschuss mitgeteilt, dass

Leserbrief-Sektion?

Auch das Quartl macht sich natürlich ständig Gedanken über Änderungen und Ergänzungen im Format. Angesichts der Reaktionen auf das letzte Heft wird in der Redaktion derzeit heftig über eine Seite mit Leserbriefen nachgedacht.

Der konkrete Anlass: Die Nachricht mit Heft 45 hatte den Münchener Mail-Server kaum verlassen, da erreichte mich eine Email von Prof. Friedel Hossfeld, dem früheren langjährigen obersten Höchstleistungsrechner aus Jülich. Als steter und aufrechter Bundesgenosse in Sachen HPC und, keinesfalls nur durch seine Funktion als FORTWIHR- und KONWIHR-Beirat, gewissermaßen als Personifizierung der guten Beziehungen der Bundesrechnerstandorte Jülich und Garching hatte ihn die Quartl-Sottise zum Gauß-Zentrum und darin insbesondere die Anspielung auf die legendäre SPD-Männerfreundschaft und -Troika doch beunruhigt. Es schloss sich an ein sehr netter Email-Austausch, in dessen Verlauf wir unter anderem übereinkamen, lieber nicht weiter darüber nachzudenken, wer aus dem Standort-Trio Jülich, Stuttgart und München denn gegebenenfalls mit welchem Charakter aus der Sozi-Troika zu belegen sei ... Doch es kam auch Konstruktives heraus: Prof. Hossfeld wird als Festredner der nächsten Graduation Ceremony der beiden Münchener BGCE-Studiengänge Computational Mechanics und Computational Science and Engineering München mal wieder einen Besuch abstatten – wir freuen uns sehr darauf! Übrigens ebenso wie auf weitere solche Leserbriefe!

H.-J. Bungartz

Bitte notieren

- Nach dem großen Erfolg in den vergangenen Jahren wird der Kurzlehrgang **NUMET** (Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen) auch 2008 wieder in Er-

9. Oktober 2007	Diskussion mit weiteren Gästen
9.00 - 9.30	TOP 4: Einführung für die hinzugekommenen Gäste
10.00 - 10.15	Prof. v. Stryk, TU Darmstadt: Übersicht über CE/COME/CSE Studiengänge
10.15 - 10.45	TOP 5: Zusammenfassung vom Vortag
10.45 - 11.15	TOP 6: Einbindung der Studiengänge in Praxis, Forschung und Verbänden
11.15 - 12.30	Top 6.1 Bericht zweier Absolventen Kaffeepause TOP 6.2: Impulsreferate zu Anforderungen und Erfahrungen aus der Sicht eines Softwarehauses, Dienstleisters und Industrieunternehmens: – Dr. Katz, Sofistik AG – Dr. Müller, CADFEM – M. Ganser, BMW Group Diskussion
12.30 - 13.45	Mittagessen
13.45 - 15.15	TOP 6.3: Impulsreferate zur Entwicklung, Platz und Rolle von CE/COME/CSE aus der Sicht von: – Dr. Meier, DFG Referat Computational Engineering – N.N. Gesellschaft für Informatik – N.N. VBI – Prof. van Rienen, 4Ing Diskussion
15.15 - 16.15	TOP 7: Graduiertenschulen, Promotionen – Prof. Rank, TU München: Vorstellung International Graduate School for Science and Engineering – Prof. Behr, RWTH Aachen: Vorstellung Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science Diskussion
16.15 - 16.45	Pressegespräch

infolge der Empfehlungen der zentralen Prüfungsstelle in Bonn der iranische Abschluss von Frau D. nicht als dem Abschluss eines dreijährigen Bachelorstudiengangs in Deutschland gleichwertig anerkannt werden könne, wenn die Regelstudienzeit nicht mindestens 5 Jahre betrage. Diese Regelstudienzeit ist aber leider den Bewerbungsunterlagen nicht zu entnehmen – dort wird nur die tatsächliche Studiendauer (4,5 Jahre) erwähnt. Auf Rückfragen stellte dann Frau D. leider nicht klar, dass die Regelstudienzeit nur 4 Jahre beträgt, sodass dieses Problem erst später aufkommen konnte. Die Konsequenz: vorerst keine Zulassung, und eine entsprechende Informations-Email von uns an Frau D.

Nun schaltet sich dem Juniorprofessor seine Frau (richtig, die Cousine der Bewerberin) ein, ruft uns an und erhält die klare Botschaft, dass nach geltender Praxis nur mindestens 5-jährige iranische Studiengänge den direkten Eintritt in deutsche Masterprogramme ermöglichen (i.W. aufgrund des frühen Eintritts in das Studium – nach deutscher Lesart noch zu gymnasialen Zeiten). Was dann in der Email des Gemahls zu „... teilte ihr mit, dass bei CSE üblicherweise 5 Jahre Studiendauer erwünscht wären für den Eintritt in das Masterprogramm.“ umgedeutet wird. Sorry, aber schon wieder falsch, Herr Kollege.

Und nun gerät der Juniorprofessor in Fahrt: „Dies ist eine Anforderung, die den Richtlinien des CSE für Bewerber NICHT (sic!) zu entnehmen ist.“ [Es folgen eine Lesung aus der CSE-Webseite sowie der Hinweis des erfahrenen Kollegen, dass ein Bachelor-Degree mit einer Studiendauer von 5 Jahren weltweit sehr unüblich wäre – danke für die Belehrung!] Doch weiter: „Ihrem unmissverständlichen Rat folgend hatte Frau D. bereits im Mai mit den Vorbereitungen Ihres (sic!) Studiums in Deutschland begonnen, u.a. die Formalitäten zur Erteilung eines Visums eingeleitet, sich über ihre Cousine (meine Frau) bzgl. einer Wohnung in München informiert – und die Kündigung ihrer festen Anstellung in einer internationalen Firma in Teheran beabsichtigt und dazu bereits erste Schritte eingeleitet! Sie werden sicher verstehen, welche (unangenehme und unnötige) Überraschung die Kommunikation der letzten Tage für Frau D. darstellte. Ich bitte Sie daher sehr

herzlich um Klärung dieser Angelegenheit – im Sinne Ihrer bereits gegebenen informellen Zusage des Studienplatzes.“

Und dann zum Schluss die Krönung: „P.S.: Wie Sie der Adressatentliste entnehmen können, erlaube ich mir eine Kopie dieser Email an meine Rechtsanwältin Frau B. R. weiterzuleiten.“ Liebe Leser, Sie werden sich vorstellen können, dass es mich einigermassen an Überwindung gekostet hat, hier die Contenance zu wahren; eine kleine Kopfwäsche war schon fällig – schon allein, damit Thomas H. verstand, welche (unangenehme und unnötige) Über-raschung sein Geschreibsel für uns darstellte. Ich hoffe inständig, dass zukünftig nicht mehrere Bewerberinnen ihre Cousinen samt angeheirateten Juniorprofessoren ins Feld schicken, die dann mit grandiosem Halbwissen den Prof heraushängen und in ihrer Impertinenz gleich die Anwaltskeule schwingen.

Nun zum eigentlich Wichtigen: Wir kämpfen derzeit heftig darum, die Zulassung von Frau D. zu erwirken (das „we want you“ war nämlich ernst gemeint, und daran können auch Kohorten Pfälzer Juniorprofessoren nichts ändern!). Wenn wir nicht in diese dämliche Korrespondenz hätten einsteigen müssen, könnten wir vielleicht schon den Erfolg verkünden ...

Doch nun Themenwechsel. Der Wissenschaft wird zuweilen vorgeworfen, sich wie in einem Elfenbeinturm zu gerieren und in unverständlichen Fachsprachen zu ergehen. Geradezu legendär sind beispielsweise die mit Fachvokabular gespickten und dem normalen Sterblichen kaum zugänglichen Fachtexte der Medizin. Doch die Konkurrenz schläft nicht, auch die Industrie sucht ihr Heil neuerdings im Unverständlichen – und das sogar in Werbetroschüren. Ein Beispiel gefällig? Nun, im Prospekt eines im Spargelland angesiedelten Baumaschinenherstellers lesen wir: „Teleskopmäklergeräte bilden zusammen mit angebauten resonanzfreien Rüttlern eine optimale Einheit zum Einbau von Spundwänden. Ihre hohe installierte Motorleistung ermöglicht zusätzlich den Betrieb von Mixed-in-Place Schnecken Systemen.“ Wie bitte, Systeme aus vor Ort gemischten Schnecken??

Oder: „Hydraulischer Schlitzwandgreifer auf Seilbagger mit hydraulischer Schlauchauffrollung“ – vom Satzbau eher nach „Carpaccio von der fri-

8. Oktober 2007

Interner Austausch

- TOP 1: Eröffnung, Begrüßung
- TOP 2: Allgemeine Diskussion zu den Studiengängen
- TOP 2.1: Kurzvorstellung ausgewählter Studiengänge:
 - CPS, Jacobs-Universität Bremen
 - Computational Engineering, Ruhr-Universität Bochum
 - CE, TU Dresden
 - CM, Universität Duisburg-Essen
 - Computergestützte Ingenieurwissenschaften, Leibniz Universität Hannover
 - COMMAS, Universität Stuttgart
- Diskussion der folgenden Themen:
 - Zielgruppe, Schwerpunkte, Berufsbilder der Absolventen, Einbindung in die Fakultäten, konsekutiver/nicht konsekutiver Studiengang

12.00 - 13.00 Mittagessen

- TOP 2.2: Nischenausbildung/Ingenieurdisziplin der Zukunft? Impulsreferate CE Erlangen, CSE München, COME München mit Blick auf Lehrmethoden, Zielgruppe und Inhalte, Diskussion
- TOP 2.3: Bewerbung und Zulassung
 - Diskussion und Erfahrungsaustausch zu: Zulassungsverfahren, Vorbereitungsemester, Prep-Kurse/Anforderungskatalog, Berufspraxis und Masterstudiengänge, Vergleich der Leistungsfähigkeit und wechselseitige Anerkennung

14.00 - 15.30 Kaffeepause

- TOP 2.4: Förderungen
 - C. Schmecken, DAAD: „Überblick über Fördermöglichkeiten des DAAD und anderer Wissenschaftsorganisationen: Programme zur Internationalisierung von Studium und Lehre und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses“.
 - Diskussion

15.30 - 16.00

- TOP 2.5: Akkreditierungen
- TOP 3: Gründung eines Vereins für ein gemeinsames Auftreten der Studiengänge

16.00 - 17.00

- TOP 3: Gründung eines Vereins für ein gemeinsames Auftreten der Studiengänge

17.00 - 17.30

- TOP 3: Gründung eines Vereins für ein gemeinsames Auftreten der Studiengänge

17.30 - 18.30

- TOP 3: Gründung eines Vereins für ein gemeinsames Auftreten der Studiengänge

18.30 - 19.30

- TOP 3: Gründung eines Vereins für ein gemeinsames Auftreten der Studiengänge

mehr als wünschenswert.

Mehr Informationen über die Veranstaltung:

<http://www10.informatik.uni-erlangen.de/en/Misc/EIHECS3/index.shtml>

G. Wellein, M. Brehm, A. Bode

Erster „Fakultätentag“ Computational Science and Engineering in München

Computational Engineering, Computational Mechanics und Computational Science and Engineering

Am 8. und 9. Oktober 2007 findet in München ein Novum statt: Die Arbeitsgemeinschaft der Computational-Engineering-Studiengänge im deutschsprachigen Raum, zu der sich vor ein paar Jahren die einschlägigen Programme in Darmstadt, Erlangen, Braunschweig, Aachen, Zürich und München zusammengeschlossen hatten, lädt zu einer Art erstem „Fakultätentag CSE“ nach München.

Das zweitägige Programm (siehe Kasten), zu dem auch Vertreter weiterer CSE- oder CE-Programme erwartet werden (z.B. aus Bochum, Bremen, Dresden, Duisburg-Essen, Hannover und Stuttgart) soll die Bildung einer „Corporate Identity“ befördern und zudem in Wissenschaft, Wirtschaft, Politik und Öffentlichkeit das Bewusstsein für dieses interdisziplinäre Fach stärken. Neben Wissenschaftlern werden dabei auch Absolventen, Industrievertreter sowie Repräsentanten etablierter Fachorganisationen (GI, 4ING), des DAAD und der DFG als zentraler Förderinrichtung zu Wort kommen.

H.-J. Bungartz

schen Lammlende auf Ingwerparfait mit karamelisierten Heidelbeerkernen“ klingend, erinnert diese Phrase einen sodann fast unweigerlich an Schlauchstecker und Schlauchnut aus der Gebrauchsanweisung des Lortotschen Saugblasers Heinzelmann. Schließlich „CSM, eine revolutionäre neue Methode zur Herstellung von Baugrubenwänden wie auch Dichtwänden durch Vermischen des anstehenden Bodenmaterials mit Bindemittel durch Fräsiränder“ – noch Fragen?

So viel für diesmal. Wenn Sie Ihre nächste Baumaschine kaufen, achten Sie auf die Formulierungen der Werber – es lohnt sich. Doch nun viel Spaß mit der neusten Ausgabe des Quartls,

H.-J. Bungartz.

Multi-, Many-, Megamania

Vom Hype zur Realität

Die selbsternannten Spatzen pfeifen es seit mehr als einem Jahr von allen Dächern: Multicore kommt! Die Welt wird parallel! Die Party ist vorbei! Sogar anerkannte HPC-Experten wie Thomas Sterling¹ bezeichnen Mehrkern-Prozessoren als „disruptive technology“, also etwas, das die üblichen Maßstäbe sprengt und zu Umwälzungen führen könnte, die einen Paradigmenwechsel herbeiführen. Allerorten, auch und gerade im HPC-Umfeld, wird ein Hype geschürt, der uns allen weismachen will, die bisherigen Ansätze zur effizienten Programmierung wären verbesserungsbedürftig und man brauche insbesondere immer neue Initiativen und Projekte, um dies auch zu implementieren. In Produktpräsentationen für HPC-Software wie Compiler und Performance Tools liest man stets „Multi-core ready“, weil so ohne viel Aufwand – aber dafür mit umso mehr Aufhebens – eine vermeintlich neue Qualität erworben und verkauft werden kann.

¹<http://www.cct.lsu.edu/~tron/>

Der künstliche Rummel hält keiner objektiven Betrachtung stand. Was nach den vielen Marketing-Blendgranaten übrig bleibt, sind einige simple Weisheiten, die man sich auch schon bei Erscheinen der ersten Multicore-Chips – was übrigens lange vor dem ersten Pentium D im März 2005 stattfand – an einem verregneten Samstagnachmittag hätte überlegen können. Zeichnen wir also kurz die wirklich wichtigen Fakten nach, die jede(r) innerlichen sollte, die/der mit paralleler Programmierung zu tun hat.

Mitnichten neu

Im High Performance Computing ist ein Dualcore-Chip seit der Power4-CPU (damals, 2001, im Pleistozän der Computertechnik) nichts Neues mehr. Damals hatte IBM natürlich verstanden, dass zwei Kerne an einem Bus einen Bottleneck erzeugen und bot eine spezielle „HPC-Variante“ ihres p690-Systems an, in der einer der beiden Cores deaktiviert war. Das verbesserte zwar die Balance (Bandbreite pro Peak-Flop) der Maschine, führte aber zu der paradoxen Situation, dass für nicht bandbreitengebundene Applikationen ein doppelt so großes System angeschafft werden musste. Bei der schlechten Effizienz des Speicherzugriffs konnte man jedoch gar keine anderen Codes sinnvoll laufen lassen... aber wir schweifen ab. Jedenfalls schrieb niemand zu diesem Zeitpunkt nach einem Paradigmenwechsel; Dualcore war da, sogar mit getrennten L1- und – keuch! – gemeinsamen L2-Caches, und keinen hat es aufgeregt, am wenigsten den Durchschnittsanwender. Nur eine kleine Komplikation, mehr nicht. Zum Thema Bottlenecks gleich noch mehr.

Bandbreiten-Blues

Dass es nur wenige Systeme gibt, die unter Beibehaltung des UMA-Prinzips alle Prozessoren mit ihrer maximalen Speicherbandbreite versorgen können, ist seit vielen Jahren akzeptierte Realität. Respektable – und teure – Ausnahmen bilden die Hitachi SR8000 (sie ruhe in Frieden) und die NEC SX-Serie von Vektormaschinen. Bei weniger dickem Geldbeutel muss man mit Kompromissen leben, was gut ist, denn schließlich ist Bandbreite nicht immer der Engpass. Multicore macht diese Kompromisse schmerzhafter, denn trotz aller Beteuerungen, der einzelne Rechenkern werde in seiner

se zwischen Organismen dar und finden z. B. bei der Erforschung von Erbkrankheiten, der Analyse und Klassifizierung krebsregener Viren oder der Entwicklung neuer Medikamente Anwendung. Anhand der neuen Verfahren konnte die Größe der „berechenbaren“ Datensätze um eine Größenordnung erhöht werden, was der aktuellen explosionsartigen Akkumulation von Sequenzdaten Rechnung trägt und die Genauigkeit der Rekonstruktion verbessert.

- Prof. Durst (Centre of Advanced Fluid Mechanics, Erlangen) zeigte schließlich, wie Berechnungen des Blutflusses in Gefäßen bei der Beurteilung der Gefährdung bei Aneurysmen helfen können. Er stellte in seinem Vortrag eindrucksvoll dar wie Methoden und Werkzeuge die in den vergangenen Jahren auf Supercomputern und mit Hilfe des KONWIHR Projektes BESTWIHR – zunächst für Grundlagenforschung wie der Turbulenzsimulation – entwickelt wurden nun ihren Einzug in sozio-ökonomisch höchst relevante Bereiche halten.

Da die Begeisterung, die Prof. Durst bei seinem Vortrag versprühte, es nicht vermuten ließ, wies Dr. Wellein anschließend darauf hin, dass Prof. Durst im September 2006 in den „Unruhestand“ verabschiedet wurde. Sein Wirken in den vergangenen Jahrzehnten wird immer eng verbunden bleiben mit der erfolgreichen Entwicklung des Themas HPC in Bayern, die nun in den Bemühungen des LRZ München um einen europäischen Pflop/s Rechner gipfelt. Insbesondere die Forschungsverbünde FORTWIHR und KONWIHR haben Herrn Prof. Durst viel zu verdanken, und es bleibt zu hoffen, dass er auch in Zukunft sich weiter derart intensiv des Themas High Performance Computing annimmt, wie er es zu seinen „aktiven“ Zeiten getan hat.

Über ihren ursprünglichen Zweck als Resultworkshop hinaus entpuppte sich die Veranstaltung auch als wichtiges Forum zum Informationsaustausch zwischen den einzelnen Gruppen. Eine Wiederholung im Jahr 2008 ist daher

ein Verfahren entwickelt, das Voraussagen für das Verhalten von sehr großen, realitätsnahen Systemen erlauben soll. Bei der Kopplung der Basismetrisen entstehen sehr große Matrizen, die nur mit Hilfe von Supercomputern verarbeitet werden können. Die Computersimulationen sollen dazu genutzt werden, gezielt nach Materialien mit besseren Eigenschaften (wie zum Beispiel einer höheren Sprungtemperatur) zu suchen.

- Die Mitarbeiter des Projektes NBW (Prof. Igel, LMU) führen auf dem Rechner Gefährdungs- und Risikostudien für Erdbeben durch. Anhand von Studien eines Bebens der Stärke 6 bei Grenoble zeigten sie, wie Sedimentschichten im Untergrund ein solches Beben verstärken können. Im Rechner simulierten sie auch künftig mögliche Beben im Becken von Los Angeles. Sie konnten dabei zeigen, dass die bisher gemachten Annahmen über die Abschwächung eines Bebens mit zunehmendem Abstand vom Erdbebenherd um mehr als eine Größenordnung falsch sein können.
- Das Projekt VISImLab (Prof. Rank, P. Wenisch, Dr. van Treek, TU München) nutzt den HLRB-II um die Luftzirkulation und den Klimakomfort in Fabrikhallen, Operationssälen, Eisenbahnwagons oder Flugzeugen zu berechnen. Ihr Ziel ist es, den Superrechner mit graphischen 3-D-Ausgabegeräten für die virtuelle Realität zu koppeln. Dies ermöglicht dem Ingenieur, interaktiv Parameter oder Auslegungen zu verändern und sofort das neue Strömungsfeld angezeigt zu bekommen.
- Im Rahmen des ParBaum-Projektes (M. Ott, Prof. A. Bode, TU München / Dr. Stamatakis, EPF Lausanne) wurden Suchalgorithmen und Modellapproximationen zur Rekonstruktion molekularer Stammbäume aus DNS- und Proteinsequenzen entwickelt, sowie neue Ansätze für deren effiziente Parallelisierung auf Hochleistungsrechnern erarbeitet. Phylogenetische Bäume stellen die Verwandtschaftsverhältnisse

Leistung stagnieren, haben es Intel und AMD bisher trefflich geschafft, auch denen eine schnelle CPU zu bieten, die der zweite Core kalt lässt (oder die ihn kalt lassen...?). Die Balance des Gesamtsystems sinkt also beträchtlich, und da gibt es nur zwei mögliche Gegenmittel:

1. Design von Algorithmen mit weniger Hunger nach Bandbreite. Das funktioniert in einigen Fällen ganz gut, wie durch eine vom Lehrstuhl für Systemsimulation (Prof. Rüde) der FAU und der HPC-Gruppe des RRZE gemeinsam betreute Masterarbeit eindrucksvoll zeigen konnte². (Abb. 1)

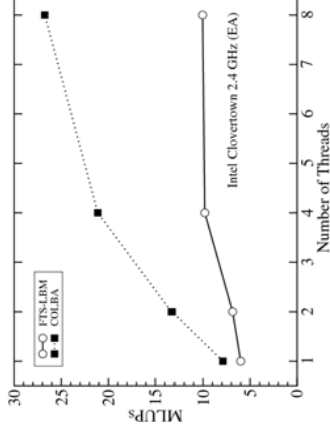


Abb. 1: Leistungsgewinn durch ein cache-oblivious Verfahren

Ob man in jedem Fall so einen Algorithmus finden kann, und ob dieser dann die gleiche Universalität besitzt wie das Original, sei dahingestellt, aber eine gute Idee war das natürlich schon lange vor Multicore. Siehe die Kommentare zum Thema „Kompromisse“ weiter oben.

2. Das Silizium für einige Cores als notwendigen Verlust abschreiben. Das ist vielleicht gar nicht so schlimm, da den Löwenanteil der Chipfläche sowieso der Cache frisst, und der steht – bei Intel sowieso und bei AMD demnächst – allen Cores zur Verfügung. Dabei lassen wir mal vorerst die

²T. Zeiser, G. Wellen, A. Nitsure, K. Iglberger, U. Rütde and G. Hager: Introducing a parallel cache oblivious blocking approach for the lattice Boltzmann method. To be published in Progress in Computational Fluid Dynamics, 2007

Intel-Unsittie mit den zwei Chips in einem Gehäuse außen vor, wie sie mit dem Pentium D ein- und dem Quadcore „Clovertown“ unruhlich geführt wurde. Unter dem Strich steht also vernünftige Rechenleistung mit – oder gerade wegen – großen Caches. Das klingt fast nach einem „free lunch“, aber leider mischen sich zwei Wermutstropfen in diese Argumentation: Erstens bewirkt eine Vergrößerung des Caches ab einer gewissen Grenze keine signifikante Beschleunigung mehr, oder zumindest nur für immer weniger Applikationen. Zweitens war ja ein Argument für den Schwank auf mehr Kerne, dass die vielen Transistoren, die uns Moore’s Law noch mindestens für die kommenden zehn Jahre beschert, bei immer komplexeren Designs nicht mehr effizienter, sondern nur noch heißer arbeiten. Wenn ein Teil der Cores nicht arbeitet, sind die Transistoren aber ebenfalls verloren...

Deal with it!

Das vielleicht wichtigste Missverständnis über Multicore liegt im Marketing der Prozessorfirma begründet, das sich trotz des kürzlich erwachten Engagements für High Performance Computing ausschließlich am Massenmarkt orientiert. Freilich ist auf dem Desktop oder sogar dem Laptop der Doppelkern heute ein Novum. Anwendungs- und Spieleprogrammieren bläst der Wind kalt ins Gesicht, und selbst für Microsoft ist nach eigenem Bekunden „die Party vorbei“, will sagen, mehr Leistung für den nächsten Betriebssystem- oder Office-Moloch gibt es nicht mehr umsonst. Aber in der HPC-Welt kann uns der Desktop doch herzlich egal sein (Hauptsache, er beherrscht ssh und hat im Notfall einen X-Server). Im HPC wissen wir seit Urzeiten, wie man parallel programmiert! Seit den ersten Multiprozessor-Systemen mit gemeinsamem Speicher (ja, das war eigentlich schon 1961, aber wir wollen mal nicht so genau sein und definieren den Zeitpunkt dort, als eine mehr oder weniger standardisierte Softwareumgebung ein Entwicklung portable Software unter UNIX möglich machte, also so um 1990) hat man eine ziemlich genaue Vorstellung davon entwickelt, was bei Shared-Memory-Parallelisierung zu beachten ist. Race conditions, Deadlocks, Load imbalance, Synchronisation, False sharing und wie sie alle heißen sind bekannte Probleme, die sich auch mit Dual-, Multi- oder Manycore

nen in HPC Know-how reiche Früchte tragen und zahlreiche Gruppen die Herausforderungen bei der anstehenden massiven Parallelisierung nicht mehr ohne entsprechend ausgerichtete Förderprogramme werden meistern können.

Bereits für die effiziente Nutzung des HLRB-II war die KONWIHR „Rest-Förderung“ in den Jahren 2006 und 2007 häufig Grundstein des wissenschaftlichen Erfolgs im HPC, wie hier exemplarisch verdeutlicht werden soll:

- Das Projekt HHG (T. Gradl, Prof. Rüdiger, Universität Erlangen) stellte einen hoch performanten Ansatz vor, mit dem es möglich ist, Gleichungssysteme mit mehr als 300 Milliarden Unbekannten zu lösen. Das verwendete Programm HHG („Hierarchical Hybrid Grids“) ist ein Multigrid-Löser für Finite-Elemente und erreicht auf 9170 Prozessor-Kernen des HLRB-II eine Rechenleistung von mehr als 8 TFlop/s.
- In ähnliche Größenordnungen stößt auch das Projekt HQS@HPC (Prof. Fehske, Universität Greifswald / Dr. Wellein, RRZE, Universität Erlangen) vor. Auf dem neuen Rechner wird die Wechselwirkung von Elektronen mit den Schwingungen des Kristallgitters untersucht. Wichtig sind diese Studien z.B. für das Verständnis der Eigenschaften von Materialien mit Riesenmagnetwiderstand (CMR Manganate). Der neue Rechner bietet die Möglichkeit, in vollständig neue Regionen vorzustoßen. Für die größte Simulation – der Diagonalisierung einer dünn besetzten Matrix der Dimension $3,8 \times 10^{11}$ – wurden 16 TByte Hauptspeicher und mehr als 5000 Prozessoren verwendet. Im Vergleich zum Vorgängerrechner konnte die Simulationsgüte um eine Größenordnung gesteigert werden.
- Dem Ursprung und dem Verständnis der Hochtemperatur-Supraleitung versucht das Projekt CUHE (Prof. Hanke, Universität Würzburg) mit Hilfe des Rechners auf die Spur zu kommen. Basierend auf den exakten Eigenschaften von kleinen Basisgittern hat die Gruppe

Meier von der DFG teilnahmen. „CSE Has Landed. Who Will Give it a Home and Budget?“ – unter diesem Oberthema wurden verschiedene Fragen zum Teil durchaus kontrovers diskutiert: Sollte CSE eher eine Vertiefungsrichtung in klassischen Studienfächern wie Mathematik oder den Ingenieurdisziplinen sein, oder doch besser als eigener Studiengang etabliert werden? Und falls letzteres, dann grundständig oder nur als Master-Studiengang? Braucht CSE eine eigene Department- oder Fakultätsstruktur, oder ist es in bestehenden Fakultäten gut aufgehoben, und wenn, dann in welchen? Sind die bestehenden Förderstrukturen für CSE geeignet, oder drohen Anträge (und wissenschaftliche Lebensläufe) zwischen die Stühle zu geraten? Auch wenn manche Statements etwas politisch gerieten – die Vertreter des grundständigen Wegs empfanden diesen als den rechten und wunderten sich, dass „eine Hochschule wie die TUM es sich leisten könne, nur Masterstudiengänge anzubieten“ (tja, wir können – Anmerkung der Redaktion); außerhalb der Informatik Angesiedelte verwahrten sich geradezu gegen mehr informatischen Einfluss (was mehr an örtlichen Reibereien als an profunden inhaltlichen Argumenten zu liegen schien); und die DFG zeigte sich überzeugt, dass bzgl. Förderung zumindest seitens der DFG alles zum Besten steht – so war es doch für Diskussionsteilnehmer wie Auditorium eine kurzweilige und informative Stunde. Und um die Zukunft von CSE braucht einem nicht bange zu sein.

H.-J. Bungartz

KONWIHR Workshop 2007

Am 2. Juli 2007 lud das KONWIHR zu einem öffentlichen „Results-workshop“ an das RRZE nach Erlangen ein. Obwohl der Förderumfang für KONWIHR Projekte in den Jahren 2006 und 2007 auf Grund der noch immer fehlenden Anschlussfinanzierung deutlich reduziert werden musste, stieß die Veranstaltung auf große Resonanz. Die Vorträge über den Stand der einzelnen Projekte zeigten deutlich, dass Investition-

nicht ändern werden, und deren Lösung nach bekannten Prinzipien erfolgt. Auch hier hat man im Detail natürlich kleine Komplikationen zu verdauen, z.B. kann sogar bei Intel-Systemen von echtem UMA (Uniform Memory Access) nicht mehr die Rede sein: Wenn zwei oder mehr Cores in einem Sockel stecken und man es mit mehr als einem Sockel zu tun hat, kommt es schon darauf an, wo die Threads oder Prozesse der Applikation liegen, damit nicht die ohnehin schon überlasteten Datenpfade noch mehr verstopft werden – Stichwort „Thread Placement“. Für den Programmierer wird UMA auf Ebene der Caches so quasi zu ccNUMA (Abb. 2). Vielleicht sollte man für diese anisotropen Designs die Bezeichnung „pseudo-UMA“ pflegen.

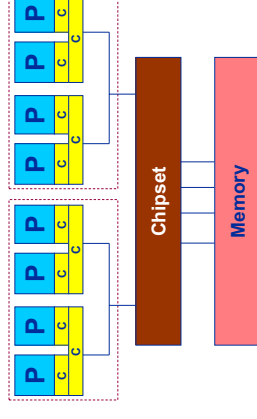


Abb. 2: UMA? ccNUMA? Pseudo-UMA!

ccNUMA lässt grüßen

Aber sogar das ist bekanntes Terrain, denn mit ccNUMA-Maschinen hat man Lokalitätsprobleme schon lange, und zwar auf großen Skalen (Beispiel SGI Origin und Altix). Der Opteron (Abb. 3) brachte ccNUMA im Jahr 2002 in die kleinen Server und PC-Cluster, ein Einschnitt, dessen Bedeutung die von Multicore-CPU's weit übertragt, aber damals die verdiente Publicity eben nicht bekam. Geniales Marketing? Vielleicht, aber seither wundert sich Anwender und Systemadministratoren, warum die Performance parallel Codes auf ihren Opteron-Knoten immer so stark schwankt, manchmal

abhängig davon, welches Programm vorher dort gelaufen ist. Willkommen in der Welt von ccNUMA! Bandbreite satt gibt es eben nicht umsonst, entweder sie kostet Euros oder Schweiß. Nächstes Jahr wird auch Intel mit dem Schwenk auf die „QuickPath“-Architektur (ehemals „CSi“) auf den ccNUMA-Zug aufspringen, was den notorisch ineffizienten Speicherinterfacedes der bisherigen Chipsätze und dem überholten Frontsidebus-Konzept den Garaus machen wird. Der Preis/Performance-Sweetspot im Clustergeschäft wird sich also vollends Richtung ccNUMA verschieben. Gute Neuigkeiten für alle, die die Zeichen der Zeit bereits früh erkannt und ihre Codes und Systemumgebungen entsprechend optimiert haben.

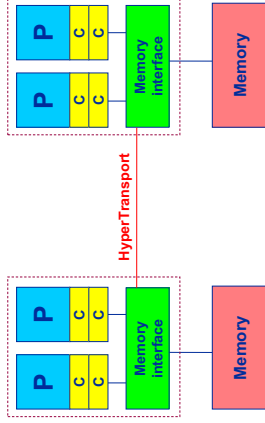


Abb. 3: ccNUMA im Opteron

Zurück in die Zukunft

Das soll natürlich nicht heißen, dass Multicore nicht doch ein paar interessante Papers wert ist. Die relevanten Herausforderungen stecken in der vielschichtigen Cache-Struktur, den immer enger werdenden Flaschenhälsen zum Hauptspeicher und der massiveren Parallelität³. Wer aber glaubt, damit wären die Umwälzungen für die nächsten paar Jahre vorgezeichnet, der irrt. Multicore ist nur die Spitze eines Eisbergs, der langsam vor uns

³K. Asanovic et al.: The Landscape of Parallel Computing Research: A View from Berkeley. <http://www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/2006/EECS-2006-183.html>

Symposium „Computational Science and Engineering“ auf der ICIAM

Mitte Juli fand in Zürich die ICIAM 2007, die International Conference on Industrial and Applied Mathematics, statt. Dieses Großereignis mit über 3000 Teilnehmern und teilweise mehr als 65 parallelen Sitzungen, das nur im Vierjahresrhythmus abgehalten wird, beherbergte zudem eine ganze Reihe weiterer Konferenzen, wie beispielsweise die GAMM-Jahrestagung 2007. Ein hervorragendes Podium also, um in der mathematischen Community das Bild von CSE zu festigen. Aus diesem Grund hatte die Arbeitsgemeinschaft der CSE-Studiengänge ein Minisymposium „CSE“ angeregt, das unter der Leitung der Professoren Kaspar Nipp (ETH Zürich), Oskar von Stryk (TU Darmstadt) sowie Hans-Joachim Bungartz (TUM) gleich am ersten Tag der ICIAM Realität wurde.

Auf dem Programm standen ein exemplarischer Beitrag zur CSE-Forschung (Thomas Weiland, TU Darmstadt: State of the Art and Future Research Directions of Computational Electromagnetics), zwei studentische Beiträge (Claudia Guenther, RWTH Aachen: Comparison of Hybrid Methods for Numerical Prediction of Aeroacoustic Noise; Markus Gebhard, Universität Erlangen-Nürnberg: Numerical Simulations of Fluid-Structure-Acoustic Interactions to Analyze Human-Voice Generation), drei Überblicksvorträge zu bestehenden CSE-Programmen (Michael Mascagni, Florida State University: Computational Science Education in the United States; Lennart Edsberg, KTH Stockholm: CSE Programs in Europe; Oskar von Stryk, TU Darmstadt: CSE/CE Programs in Germany) sowie schließlich ein konkreten Lehrinhalten und Lehrformaten gewidmeter Beitrag (Hans-Joachim Bungartz, TUM: How to Teach CSE?).

Zum Abschluss gab's dann noch eine Podiumsdiskussion, an der neben T. Weiland, M. Mascagni, L. Edsberg und H.-J. Bungartz auch Wilfried von Gunsteren (ETH Zürich), Dieter Bothe (RWTH Aachen) sowie Michael

ten lassen sich heute auf Höchstleistungsrechnern mit 10 000 Prozessoren in 90 Sekunden lösen. Die Steigerung der Leistung mathematischer Algorithmen übersteigt damit die der Hardware um ein Vielfaches. Eine solche Aufgabe, wenn auch nicht immer in dieser Größenordnung, kommt praktisch im Kern jedes mathematischen Verfahrens vor und muss dort oft Tausende Male gelöst werden, wie z.B. bei Optimierungsproblemen mit partiellen Differentialgleichungen als Nebenbedingungen, einem hochaktuellen Forschungsgebiet der Angewandten Mathematik mit immenser Bedeutung für technisch-wissenschaftliche Anwendungen.



In der angenehmen und inspirierenden Umgebung des teilweise frisch renovierten Schlosses Thurnau bot sich reichlich Gelegenheit für wissenschaftliche Gespräche zwischen den renommierten Experten und den Kollegiaten. Sicherlich konnte dem Elite-Nachwuchs manch ein nützlicher Ratsschlag mit auf den Weg gegeben werden.

H.J. Pesch

auftaucht. Mit ClearSpeed-Koprozessoren, FPGAs und ähnlicher Spezialhardware lassen sich bestimmte Probleme in einem Bruchteil der Zeit (und mit einem Bruchteil der Verlustleistung) lösen, die ein Standardprozessor braucht, und habe er noch so viele Kerne. Grafikchip-Hersteller wie NVIDIA erkennen langsam das Potenzial ihrer hochgezüchteten SIMD-Hardware für numerische Anwendungen und stellen Programmierern Bibliotheken zur Verfügung, die auf relative einfache Weise hunderte von GFlops auf Grafikhardware nutzbar machen. Wer die Nachrichten verfolgt, dem wird nicht entgangen sein, dass sowohl Intel als auch AMD in den letzten Jahren durch Zukäufe oder Eigenentwicklungen massives Know-how auf dem Grafiksektor aufgebaut haben, was vermuten lässt, dass in naher Zukunft Speziallösungen zusammen mit Standard-Designs auf einem Chip landen werden. IBM hat mit dem Cell-Prozessor erstmals den Schritt zu einer heterogenen Architektur gewagt, in der eine konventionelle CPU über eine Anzahl schneller, aber einfach gestrickter vektorartiger Einheiten wacht. Und Suns Niagara-Architektur weist den Weg zu massivem On-Chip-Multithreading, das die allseits gegenwärtigen Latenzen durch massive Parallelität überdeckt.

Aus der Sicht von Microsoft mag die Party vorbei sein. Im High Performance Computing fängt sie gerade erst an.

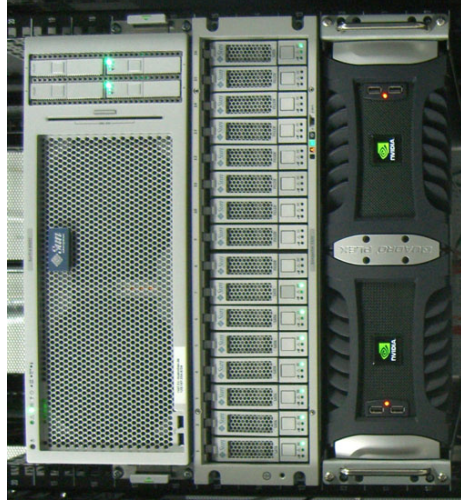
G. Hager

Remote Visualization for the HLRB2

The LRZ has acquired a powerful graphics server, which is to be used for the visualization of large data sets produced by simulations that are performed on the HLRB2. This visualization system is based on a SUN x4600 server with 8 dual-core Opteron CPUs, 128GB RAM and a local RAID array with a capacity of 3TB. A 10Gbit ethernet network interface and a direct connection to the CFXS file system of the HLRB2 allow for a fast access on the simulation results. The graphics capabilities

ties are provided by two nVidia Quadroplex units, which are connected via PCIexpress and contain two high-performance Quadro FX5500 graphics cards each, so that in total 4GB of graphics memory are available.

In contrast to conventional solutions, the high graphics power is also available to users working remotely (via ssh or VNC) on the new system. This capability is provided by the Sun Shared Visualization software package, which consists mainly of the open-source projects VirtualGL and TurboVNC. These tools intercept the 3D graphics commands issued by OpenGL applications on the server (normally these commands would be sent to the remote users' machine). The intercepted commands are then executed on the powerful server graphics cards and the resulting images are compressed and sent to the users' computer. Instead of huge amounts of 3D data only compressed 2D images have to be transferred over the network. Therefore a 100 MBit/s ethernet connection is sufficient to allow for a image quality that is nearly undistinguishable from the one experienced by local users. For slower connections down to several MBit/s the image quality is reduced, but still acceptable.



Elite-Sommerschule in Mathematischer Optimierung auf Schloss Thurnau

Vom 23.–27. Juli 2007 fand auf Schloss Thurnau die erste Sommerschule des internationalen Doktorandenkollegs „Optimization and Control with Applications in Modern Technologies“ statt, das im Rahmen des Elitenetzwerks Bayern vom Freistaat Bayern finanziell mit 12 Doktorandenstipendien an den Universitäten Bayreuth, Erlangen-Nürnberg und Würzburg gefördert wird. International herausragende Wissenschaftler auf den Gebieten Mathematische Optimierung, Kontrolltheorie, Optimale Steuerung und Numerische Mathematik aus den USA (Prof. Seidman, Univ. of Maryland, Baltimore, und Heinkenschloss, Rice Univ., Houston), China (Prof. Yuan, Chin. Akad. der Wissenschaften, Beijing), Israel (Prof. Ben-Tal und Yavneh, Technion, Haifa), Belgien (Prof. Sepulchre, Univ. Liège) und Österreich (Prof. Borzi, Univ. Graz) haben in Übersichtsvorträgen ihr Forschungsgebiet vorgestellt.

Den Kollegiaten bot sich die Möglichkeit, ihre Forschungsergebnisse vor den auswärtigen Experten und ihren Betreuern zur Diskussion zu stellen. Das Spektrum der Anwendungen reichte von der Optimierung von Brennstoffzellen über die Steuerung autonomer Roboter, die Zertrümmerung von Nierensteinen mit optimierten Ultraschall-Techniken und Mustererkennungsmethoden bis hin zu Gesichtsidifikationsverfahren, die sogar die Unterscheidung von eineiigen Zwillingen sicher meistern.

Die Bandbreite der unterschiedlichen Anwendungsthemen zeigt die Kraft mathematischer Methoden, die ohne Zweifel zu der Anerkennung der Mathematik als Schlüsseltechnologie beigetragen haben. Den Absolventinnen und Absolventen dieses Fachgebietes bieten sich seit vielen Jahren exzellente Berufsaussichten. Nichts kennzeichnet den messbaren Erfolg von Mathematik und Informatik so, wie die Geschwindigkeit, mit der heute lineare Gleichungssysteme gelöst werden können, die für zwei Unbekannte vielen noch aus der Schule vertraut sind: Systeme mit 100 Milliarden Unbekann-

CSE 2007

First BGCE Student Prize in CSE

This year, for the first time, the SIAM Conference on Computational Science and Engineering hosted a student paper competition. The aim is to promote excellence by recognizing outstanding work in the field by undergraduate or graduate students. To enter, students were to submit four-page papers. The prize committee received 13 submissions from students in seven countries, showing wide international interest in the field and in the prize.

The winner will spend one week as a guest of the prize sponsor, the Bavarian Graduate School in Computational Engineering (BGCE) in Bavaria. BGCE is a consortium of two Bavarian universities—Technische Universität München and Universität Erlangen-Nürnberg—which offer a joint International Master Program with an “Honors Track” for their best students in computational engineering (BGCE students are not eligible for the competition).

Eight finalists were invited to present their work in two minisymposia at the SIAM conference. Seven students gave presentations (one student was unable to attend and thus was not eligible for the prize):

- Alfonso Bueno Orovivo, Universidad de Castilla-La Mancha, Spain
- Fang Fang, TU Delft, The Netherlands
- Won-Ki Jeong, University of Utah
- Taeyoung Lee, University of Michigan
- Jan Kosam, University of Leeds, UK
- Robert Shuttleworth, University of Maryland
- Weigang Zhang, University of Maryland

In their talks the students highlighted essential components of research in CSE—mainly, along with an emphasis on computational aspects of the work, the highly in-

terdisciplinary nature of the field. Moreover, every one of the finalists demonstrated excellent communication skills (essential for the collaborative work characteristic of CSE) with their clearly organized and well-thought-out presentations. These student presentations turned out to be the highlight of the competition and, in our opinion, of the conference as a whole.

Together, the speakers covered a wide range of topics in computational science and engineering at a uniformly impressive academic level. Presented with near-perfection, the prize committee—Tamara Kolda (Sandia National Labs), Denis Donnelly (Stena College), Hans Bungartz (München), and Ulrich Rüde (Erlangen)—found the task of selecting the winner both enjoyable and difficult. On behalf of the prize committee, we

congratulate all of the finalists for their impressive accomplishments. After much deliberation, the committee agreed to award the prize to Alfonso Bueno Orovivo. The research described in his presentation, “Extension of Spectral Methods to Irregular Domains Via a Fictitious Domain Approach,” had all the ingredients of advanced research in CSE: development of innovative computational techniques and methods for a challenging and important real-life application in science. Though the method is widely applicable, Bueno Orovivo developed it specifically for simulation of the electrophysiology of the heart. His work also included careful implementation in three dimensions and impressive visualizations. Alfonso Bueno Orovivo will visit Munich and Erlangen from June 13 to 21.—
Tamara Kolda and Ulrich Rüde.



W/ing for a week at the Bavarian Graduate School in Computational Engineering, finalists for the BGCE student paper prize presented their papers at the 2007 SIAM Conference on CSE. Shown here with prize committee members Tamara Kolda and Hans Bungartz (far left) and Denis Donnelly (fifth from right) are Jan Kosam, Taeyoung Lee, Won-Ki Jeong, Robert Shuttleworth, Alfonso Bueno Orovivo (who received the prize), Fang Fang, and Weigang Zhang. Ulrich Rüde, also a member of the prize committee, took the picture.

Titelseite des SIAM Journals

Auch der dezente (und nicht ganz ernst gemeinte) Hinweis auf die Chancenlosigkeit des spanischen Produkts gegen ICE und TGV konnte daran nichts ändern. So blieb es denn für die BGCE bei den besagten €70 für die Stormierung der Hotelreservierung. Schade, dass aus dem Besuch nichts geworden ist, aber wir wünschen unserem Preisträger natürlich trotzdem alles Gute für seinen weiteren Berufsweg!

H.-J. Bungartz

Owing to the fact that the system is based on standard x86_64 technology a broad variety of visualization applications is available. The LRZ plans to provide the commercial visualization solutions Amira and EnSight, as well as the open-source application Paraview. More specialized application can be installed on user request. The software installed on the Linux cluster will also be available on the visualization server. The server is in a testing phase right now, but should soon be accessible for all users of the HLRB2 and the Linux cluster.

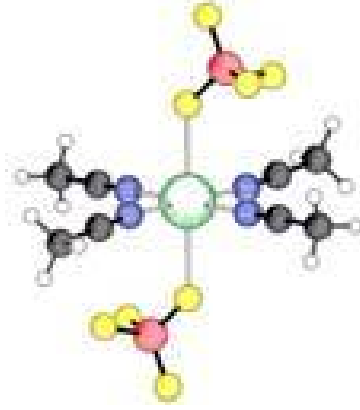
L. Scheck

Neue IGSSE Project Teams Informatik/Chemie

Nach der Bewilligung im Frühjahr sind im Juni zwei neue interdisziplinäre IGSSE Project Teams in den Bereichen Informatik/experimentelle Chemie gestartet: “Development of new methods for the production of highly reactive polyisobutenes” (Lehrstuhl für Anorganische Chemie, Lehrstuhl für Informatik mit Schwerpunkt Wissenschaftliches Rechnen, beide TU München) und “Hardware-oriented Simulation and Computing” (Lehrstuhl für Rechnerarchitektur und Rechnerorganisation/Parallelrechnerarchitektur, Lehrstuhl für Informatik mit Schwerpunkt Wissenschaftliches Rechnen, beide TU München).

Das Project Team “Development of new methods for the production of highly reactive polyisobutenes” befasst sich mit möglichst ökologischen und ökonomischen Verfahren zur Herstellung sogenannter Polyisobutene, die in der Industrie in großen Mengen benötigt werden. Je nach Molekulargewicht finden sie in der Gummiproduktion oder als Klebstoffe o.ä. Verwendung. Jedes Jahr werden mehr als 100 000t hochreaktive Polyisobutene hergestellt. Daher sind die Effizienz und Umweltverträglichkeit der Produktionsmethoden sehr wichtige Ziele. Bei allen bisher bekannten Produktionsmethoden sind für eine gute Produktqualität allerdings Temperaturen weit unter 0 Grad Celsius und Lösungsmittel wie beispielsweise Methylchloride, Dichlorme-

thane oder Ethene erforderlich. In jüngster Zeit wurde an der TUM (Lehrstuhl für Anorganische Chemie) ein neuer Typ von Katalysatoren entwickelt, die die Produktion hochreaktiver Polyisobutene bei Raumtemperatur und in chlorfreien Lösungsmitteln ermöglichen. Die Ziele dieser Arbeitsgruppe sind der Transfer dieser im Labor entwickelten Methode auf die Skala eines Produktionsreaktors, die Untersuchung der zugrundeliegenden chemischen Reaktionsmechanismen und schließlich die weitere Verbesserung der Methode. Um diese Ziele zu erreichen, werden Synergien zwischen Chemie und Informatik genutzt. Methoden der experimentellen Chemie behandeln dabei die unterschiedlichen Reaktionsmechanismen, das Testen weiterer Katalysatoren sowie der heterogenen Katalyse, etc. Die Informatik beziehungsweise das wissenschaftliche Rechnen liefert in effizienter Weise Simulationsdaten zur Untersuchung und Optimierung der Kühlung der exothermen Reaktionen, Fluss- und Transportprozesse etc. Daraus resultieren aufgrund der komplexen und veränderlichen Geometrien (Rührer) sowie der Mehrphysik/-chemie Problematik sehr hohe Anforderungen an die eingesetzten Simulationsprogramme. Daher ist eine sehr enge Zusammenarbeit mit dem zweiten oben genannten Project Team nötig.



Bei der Isobuten-Polymerisation entstehen hochreaktive Polyisobutene, mit hohem Gehalt (> 95 %) an endständigen Doppelbindungen

und hatte Teilnehmer aus Erlangen, der TU München und der Universität Bayreuth. Die Veranstaltung trug somit auch zu dem Austausch zwischen Studenten und Doktoranden aus verschiedenen Programmen des Elitenetzwerks und den drei beteiligten Standorten bei.

U. Rüdte

Elite Goes Hollywood!

Zwei Tage vor der diesjährigen Oscar-Verleihung und nur einen Katzensprung entfernt wurde auf der International Conference on Computational Science and Engineering 2007 (CSE 2007) der Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) im Februar erstmals der „BGCE Student Prize“ verliehen – der Preis des Bayerischen Elite-Studiengangs Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) für die beste studentische Arbeit auf dem Gebiet des CSE. Das Quartl hatte darüber in der Ausgabe 45 berichtet.

Auch diesmal gibt es Neuigkeiten in dieser Angelegenheit zu berichten. Erstens machte der Preis solche Furore, dass er es auf Anhieb auf die Titelseite der SIAM News schaffte – obwohl es zugegebenermaßen nicht ganz so glamourös wie beim Oscar zugeht. Die Cover Story der Juni-Ausgabe der SIAM News besichert der BGCE, ihren drei Masterstudiengängen sowie deren Trägerhochschulen auf jeden Fall weitere internationale Sichtbarkeit und zeigt, dass unsere Aktivitäten auch jenseits des Atlantiks auf reges Interesse stoßen. Zweitens dürfte es sich mit Kosten von insgesamt €70 um einen der günstigsten Preise der Wissenschaftsgeschichte handeln. Eigentlich hätte der Preisträger, der Spanier Alfonso Bueno-Orovio von der Universität Castilla-La Mancha, ja im Juni für eine Woche nach Bayern kommen sollen. Andere haben aber anscheinend Alfonsos Qualitäten ebenfalls erkannt, und so rechnet er fortan in Diensten des spanischen Hochgeschwindigkeitszugs – der wiederum das Arbeitsverhältnis mit solchem Tempo anging, dass keine Zeit für den Abstecher ins schöne Bayern blieb.

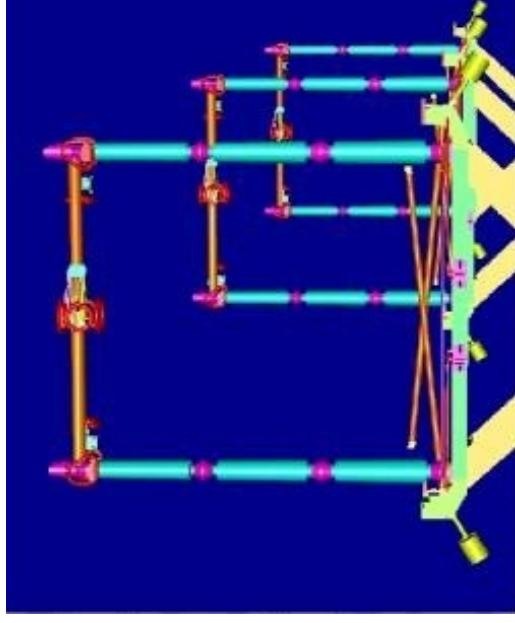
Prof. Toledo gilt als einer der führenden Protagonisten und Entwickler dieser Verfahren. Sein Kurs beinhaltet auch eine Einführung in Eliminationsverfahren und einen Überblick über klassische iterative Algorithmen, wie MINRES und das Verfahren der konjugierten Gradienten. Der Schwerpunkt des Kurses lag jedoch auf den *Support-Tree-Präkonditionierern* und speziell deren Anwendung zur Lösung von Finite-Element-Gleichungssystemen. Der Kurs bestand aus täglich zwei Doppelstunden Vorlesung von Herrn Prof. Toledo sowie praktischen Übungen an den Rechnern des Lehrstuhls für Systemsimulation (LSS), die gemeinsam von Herrn Dipl.-Inf. Köstler am LSS und Herrn Prof. Toledo betreut wurden.



Die traditionelle Pizza-Party zum Kursabschluss

Der Kurs war als gemeinsame Veranstaltung der BGCE, des PhD-Programms *Computational Engineering* der FAU Erlangen-Nürnberg, sowie des Internationalen Doktorandenkollegs *Identifikation, Optimierung und Steuerung für technische Anwendungen* (Sprecher Prof. G. Leugering) konzipiert

Dieses Team (“Hardware-oriented Simulation and Computing”) greift die im Zusammenspiel zwischen effizienten numerischen Algorithmen und zunehmend komplizierteren und vor allem zunehmend parallelen Rechnerarchitekturen auftretenden „Reibungsverluste“ auf. Moderne Rechnerarchitekturen sind, sowohl für Arbeitsplatz- als auch für Hochleistungsrechner, gekennzeichnet durch die erwähnte allgegenwärtige Parallelität, aber auch Leistungsbeschränkungen durch vergleichsweise langsamen Hauptspeicher und das allgemein zunehmend hierarchische Rechnerdesign. Die Berücksichtigung dieser Faktoren ist zum effizienten Ausnutzen der verfügbaren Hardware in zunehmendem Ausmaß erforderlich. Vor diesem Hintergrund sollen in folgenden Anwendungsbereichen prototypische Techniken und Algorithmen zum Hardware-orientierten Hochleistungsrechnen untersucht werden:



Mit Hilfe eines Boundary-Element-Verfahrens berechnete elektrische Felder

- Numerische Simulation von Strömungsproblemen auf dynamisch adaptiven Gittern, insbesondere unter Einsatz rekursiv strukturierter Diskretisierungsgitter und raumfüllender Kurven zur Parallelisierung und inhärent Cache-effizienten Implementierung. Die entwickelten Programme sollen unter anderem zur Simulation der genannten Fluss- und Transportprobleme für Produktionsverfahren hochreaktiver Polyisobutene eingesetzt werden.
- Boundary-Element-Verfahren zur numerischen Berechnung elektrischer Felder (schwerpunktmäßig Lehrstuhl für Rechnertechnik und Rechnerorganisation/Parallelrechnerarchitektur, Prof. A. Bode, Prof. H. M. Gerndt, TU München).
- Algorithmen zur Bildrekonstruktion in der medizinischen Bildverarbeitung (in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Prof. M. Schwaiger, Klinik und Poliklinik für Nuklearmedizin, TU München).

Die beiden Project Teams, bestehend jeweils aus zwei IGSSE Principal Investigators, zwei Team Leaders sowie zwei bis drei Doktoranden konnten sich und ihr Arbeitsprogramm am 13./14. Juli beim offiziellen IGSSE Kick-Off in Raitenhaslach bei Burghausen präsentieren. Erfreulicherweise waren hierbei auch bereits zwei der drei durch die IGSSE-Stipendien geförderten Doktoranden dabei.

Weitere Informationen unter <http://www.igsse.de/teams.html>

M. Mehl

Rückblick: BGCE-Kompaktkurs

Sparse Matrix Algorithms and Support Preconditioning

Im März verbrachte Prof. Sivan Toledo eine Woche als Gast der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE) am Lehrstuhl für Systemsimulation der Universität Erlangen-Nürnberg und hielt dort vom 26. bis zum 30. März einen 5-tägigen Kompaktkurs zum Thema *Sparse Matrix Algorithms and Support Preconditioning*.



Konzentriertes Arbeiten an den Rechnern des LSS

Prof. Sivan Toledo lehrt an der School of Computer Science der Tel Aviv University. *Support Preconditioner* sind eine neue und vielversprechende Klasse von iterativen Lösungsverfahren, die grafentheoretische Ansätze nutzen, um Präkonditionierer für dünn besetzte Matrizen zu konstruieren. Herr

sowie der Vorsitzende der KfR, Prof. Bungartz, das Wirken Herrn Mönkedieks. Die Etablierung des Integrierten Informationsmanagements als zentrales Thema für Hochschulen, die diesbezügliche Förderinitiative „Leistungszentren“, in deren Rahmen ja auch das TUM-Projekt integraTUM gefördert wird, oder die Initiierung der Position eines CIO auch an Hochschulen sind Beispiele für richtungweisende Maßnahmen, die Joachim Mönkediek mit gestaltet und durchgesetzt hat. Das Quartl wiederholt an dieser Stelle den bereits persönlich überbrachten Wunsch, dass Herr Mönkediek die neuen Freiräume nicht dazu nutzen möge, nach Art des Lortotschen Herrn Lohse seine Gattin mit günstig erstandenen 1000 Senfgläsern zu beglücken!

H.-J. Bungartz

Besuch aus dem Morgenland

Ende Juni besuchte eine ranghohe Delegation aus Saudi-Arabien die TUM, den Campus Garching sowie das Leibniz-Rechenzentrum.

Der Zweck des Besuchs: Derzeit befindet sich die KAUST, die King Abdullah University of Science and Technology, in Gründung – ein ehrgeiziges Projekt, mit dem Saudi-Arabien langfristig eine Kaderschmiede nach Vorbild westlicher Technischer Universitäten etablieren möchte. Nach ersten Kooperationsabkommen mit prominenten US-amerikanischen Institutes of Technology besuchten die Verantwortlichen nun ausgewählte Stationen in Europa, darunter die ETH Zürich und die TUM.

Was das Quartl an der Sache besonders interessiert: Unter den in der ersten Phase vorgesehenen Instituten der KAUST, für die nach Kooperationspartnern zum Aufbau Ausschau gehalten wird, ist auch ein Institut für Computational Sciences. Und diesbezüglich hat der Standort Garching ja in der Tat einiges zu bieten, sodass sich zwei sehr intensive Stunden ergaben.

H.-J. Bungartz

Bayerisch-Kalifornische Zusammenarbeit: Petaflop-Computer

Im Rahmen eines Projektes im Bavarian Californian Technology Center (BaCaTeC) untersuchen die Technische Universität München, das California Institute of Technology, und das Lawrence Livermore National Laboratory Techniken für hochskalierbare Werkzeuge zur Leistungsanalyse von Anwendungen auf Petaflop-Computern.

Ausgangspunkt für dieses Kooperationsprojekt ist die Erfahrung, dass nur durch die gezielte, iterative Optimierung von Anwendungen ein hoher Prozentsatz der Peak Performance (theoretische Maximalleistung) heutiger hochparalleler Supercomputer zu erreichen ist. Durch deren komplexe Architektur ist eine Vorhersage der Leistung eines Programms kaum möglich und es muss auf Messungen realer Programmläufe zurückgegriffen werden. Um diese Programmläufe auf bis zu mehreren tausend Prozessoren analysieren zu können, sind hochskalierbare Leistungsanalysewerkzeuge erforderlich.

Im Rahmen von KONWIHR und eines DFG-Projektes wurde am Lehrstuhl für Rechnertechnik und Rechnerorganisation (LRR) der Technischen Universität München das Werkzeug Periscope entwickelt. In Periscope wird ein neuartiges Analysekonzept realisiert. Eine Menge von unabhängigen Analyseagenten bestimmt ineffiziente Programmteile automatisch während der Programmausführung. Für diese Agenten kann der Anwender zusätzliche Prozessoren anfordern, um die Anwendungsprozessoren so wenig wie möglich zu beeinflussen. Die Anwendungsprozesse und Analyseagenten werden intelligent über alle Prozessoren der Anwendung verteilt, damit Agenten entsprechend der Netzwerktopologie nahe bei den Prozessen gestartet werden, für die sie verantwortlich sind. Hierzu wurde der übliche automatische Start von Anwendungen auf mehreren Partitionen der Altix 4700 am LRZ durch eine spezielle Startprozedur im Frontend von Periscope ersetzt.

Prof. Hans Zima am California Institute of Technology und Jet Propulsion

Laboratory hat im Rahmen des von Cray geleiteten HPCS-Projektes Cascade die Programmiersprache Chapel mitentwickelt. Zukünftige Petaflop-Computer werden eine noch komplexere hierarchische Struktur haben, deren effiziente Nutzung neue Programmierkonzepte erfordern. Im Rahmen dieses Projektes soll das Zusammenspiel von Programmierkonzepten und Leistungsanalysewerkzeugen auch untersucht werden.

Am Lawrence Livermore National Laboratory arbeitet Martin Schulz, ein ehemaliger Mitarbeiter des LRR der TUM, an der Entwicklung von Open Speedshop, einem Open Source Analysewerkzeug. Von hoher Bedeutung ist die Skalierbarkeit solcher Werkzeuge, da das LLNL den zurzeit schnellsten Rechner der Welt betreibt, die Blue Gene/L mit über 360 TFllop/s.

Das Projekt könnte auch für zukünftige Entwicklungen in Europa – vielleicht auch in München – von Bedeutung sein, wenn die Pläne zum Aufbau mehrerer europäischer Supercomputer-Zentren im Rahmen der PACE-Kooperation mit jeweils den leistungsfähigsten Supercomputern der Welt umgesetzt würden.

Weitere Information unter <http://www.bacattec.de/cgi-bin/details/de/422>.

M. Gerndt

HBFG, WAP & CIP – sag beim Abschied leise „Servus“

Bereits seit Jahresbeginn ist es gesetzlich wirksam, und inzwischen ist auch die Umstellung auf die neuen Verfahren vollzogen: Das gute alte HBFG wurde von der Föderalismusreform weggefegt, und bei dieser Gelegenheit wurden gleich zwei Programme mit entsorgt, die die Rechnerausstattung an deutschen Hochschulen in den vergangenen Jahrzehnten maßgeblich geprägt hatten – WAP (Arbeitsplatzrechner für Wissenschaftler) und CIP (Computer-Investitionsprogramm).

Wo genau die Föderalismusreform insgesamt auf einer Skala von nutz-

los bis ärgerlich anzusiedeln ist, sei jedem Leser selbst überlassen. Bzgl. Hochschulbauten, Großgeräten und IT-Infrastruktur kann man sich des Eindrucks eines „Es kreißen die Berge, und ein Mäuslein ward geboren“ nicht ganz erwehren. Insgesamt bleibt das Finanzvolumen in etwa erhalten, und das zunächst komplizierter anmutende Geflecht aus Geldzuweisungen an die Bundesländer und daraus resultierenden Kompetenzen – genaustens geregelt im Grundgesetz, genau in dessen Artikeln 91b und 143c – relativiert sich etwas durch die nahezu unveränderte Zuständigkeit von Wissenschaftsrat und Kommission für Rechenanlagen (KfR) der DFG. Trotzdem: neue Verfahren, neue Verfahrensrichtlinien, neue Formblätter und neue Fallen, in die man tappen kann. Bei dem nicht an die Länder direkt ausgeschütteten Topf etwa spielt fürderhin die „nationale Bedeutung“ der beantragten Ausstattung eine zentrale Rolle. Wenn ein mit Preußen bestücktes Forschungsschiff eines in Preußen angesiedelten Forschungsinstituts sich durch's Packeis kämpft und die Besatzung deutsche Matrosenlieder trällert – nationale Bedeutung? Oder wenn Karlsruhe einen Supercomputer will, um darauf durch Simulation zu beweisen, dass die andauernde Unterjochung Badens durch die Schwaben allzu schrecklich ist – nationale Bedeutung? Schwierig, schwierig. Trickreich auch das Agieren vieler Bundesländer: Wenn man einen Teil des Kuchens schon auf dem eigenen Konto hat, ein weiterer Teil aber immer noch zentral verwaltet wird, so liegt es doch nahe, die Antragsteller zu ermuntern, sich erst mal dort zu bedienen zu versuchen und erst im Misserfallsfall den Griff in die Schatulle des Landes zu unternehmen. Doch wie bei „Räuber und Gendarm“ wurden natürlich flugs Abwehrmechanismen entwickelt – in diesem Fall eine schnelle Vorprüfung mit „Return-to-sender“-Funktion.

Passend zum Verfahrenswechsel gab es auch einen personellen Generationenwechsel: Der Leiter der Gruppe WGI (Wissenschaftliche Geräte und Informationstechnik) der DFG, Dr. Joachim Mönkediek, trat zum 30.6. in den Ruhestand, zu seinem Nachfolger wurde Dr. Werner Bröcker ernannt. In einer Feierstunde in der Geschäftsstelle der DFG in Bonn würdigten u.a. der DFG-Präsident Prof. Kleiner, der DFG-Generalsekretär Dr. Grunwald