

## Inhalt



Editorial	2
Parallelisierung von Fastest-3D	4
Moleküldynamik-Simulationen mit GPGPUs	8
Iterationschleife	14
LRZ startet Partnerschaftsinitiative	14
Elite-Ergebnis der BGCE beim Elite-Cup	16
George Biros als Fellow am TUM-IAS <sup>a</sup>	19
Workshop Adaptive and Local MOR	21
SPPEXA Doctoral Retreat 2013	24
Taumelnde Sphärozyylinder in Strömungen	27
Kompaktkurs „Parallel Mesh Refinement“	29
Kurz berichtet	30
Bitte notieren	30

---

<sup>a</sup>TUM, Institute for Advanced Study

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

Wer die Ferienakademie kennt (für die Ahnungslosen unter den Quartl-Lesern: siehe [www.ferienakademie.de](http://www.ferienakademie.de)), der weiß, dass sie jedes Jahr im Herbst, genauer zur Oktoberfest-Zeit, im schönen Sarntal in Südtirol stattfindet; seit 1984. Wer mit Bundestags- und bayerischen Landtagswahlen vertraut ist (da gehe ich jetzt doch davon aus, dass sich die Ahnungslosen in Grenzen halten), der weiß, dass es da durchaus zeitliche Koinzidenzen zur Ferienakademie gibt. Denn in der Tat: 2002, 2003, 2005, 2009, 2013 – der deutsche oder der bayerische Wahlsonntag im Sarntal haben schon Tradition. Und an diesen Sonntagabenden sind die Ferienakademiker mitnichten die Einzigen, die dann immer gebannt auf die Bildschirme und die dort angezeigten Hochrechnungen schauen – schließlich blickt man in Südtirol ja bekanntlich traditionell gern gen Norden.

In der anderen Richtung ist das politische Interesse naturgemäß nicht ganz so groß. Doch das soll und wird sich ändern. Denn was sich Ende Oktober in Südtirol (oder korrekt in der italienischen Provinz „Provincia autonoma di Bolzano – Alto Adige“) abgespielt hat, kommt einer Revolution gleich, stellt Garibaldi, Bismarck oder die Machtübernahme von Rot-Grün im Bund 1998 völlig in den Schatten. Es ist, und man ringt förmlich nach Worten, ein Erdbeben, ein Erdbeben, eine Sensation: Die Südtiroler Volkspartei (SVP) hat im neuen Südtiroler Landtag keine absolute Mehrheit mehr – 131,236 Stimmen, 45,7 %, reichen nurmehr für 17 der 35 Sitze.

Gemäß vorläufigem amtlichen Endergebnis werden neun Parteien im neuen Landtag vertreten sein, wobei es sicher nicht zur Entmachtung der SVP kommen wird – dafür sind die anderen acht zu bunt: Freiheitliche sind dabei, nach noch mehr Freiheit rufende Separatisten, Demokraten, Grüne, Ladiner. Vier davon haben es gerade mal auf gut 2% der Stimmen und somit einen einzigen Sitz gebracht. Wenn da einer mal austreten (also auf die Toilette, nicht aus der Partei) muss, verändern sich sofort die Machtverhältnisse sowie die Zusammensetzung des Parlaments. Da heißt es aufpassen, ihr Konfirmandenbläschen. Aber zurück: Die SVP wird also nicht auf die harten Oppositionsbänke müssen, aber dennoch – man wird reden müssen, und das auch noch mit Vertretern anderer Parteien. Unglaublich.

Doch nun zur Schlüsselfrage der historischen Aufarbeitung: Wie konnte es dazu kommen? Wir erinnern uns: Jahre lang outeten sich Ferienakademiker, die bei der Ankündigung „Der Bürgermeister kommt!“ fragten, „Von welcher Partei ist denn der?“ als völlige Ignoranten der politischen Szene. Jahrzehnte lang waren die entscheidenden Fraktionen die Gastwirte in der SVP, die Landwirte in der SVP, die Gewerbetreibenden in der SVP, die „frag-mich-nicht-wer’s“ in der SVP. „Das ist wie bei euch in Bayern“, wurde ein ums andere Mal gesagt, und da schwangen viel landsmannschaftliche Verbundenheit, viel Beruhigendes und viel Stolz mit. Der Fassungslosigkeit erster Teil dann im Herbst 2008, als der große Bruder Bayern das Ende der absoluten Mehrheit für die CSU verkünden musste, oder durfte. Würde jetzt das Chaos ausbrechen? Bayern dem Warschauer Pakt beitreten (dass es den längst nicht mehr gab, wird da zur Nebensächlichkeit)? Trachtenhemd und Dirndl vom selbst gestrickten Pulli an die Wand gedrückt? Bier durch Kaffee fair ersetzt? Und ganz wichtig: Würden da jetzt ganz andere Bayern im Spätherbst in Südtirol einfallen zum Wandern und, vor allem, zum Dauertörggelen?

Die politische Landschaft Südtirols (also die SVP) war 2008 verunsichert, ja besorgt. Einige wenige hatten den Nerv zu Spott – der meistens mit einem „Wartet’s nur ab, das wird euch auch noch erreichen!“ erwidert wurde. Das wollte, nein konnte damals niemand glauben. Und nun, fünf Jahre später, erleben wir der Fassungslosigkeit zweiter Teil in Südtirol. Jetzt ist die SVP also ihre absolute Mehrheit los – und den großen Bruder zum gegenseitigen Trösten gleich auch noch. Denn Bayern ist ja wieder in dem Zustand angelangt, den der durchschnittliche Südtiroler stets als „geordnete Verhältnisse“ empfunden und bezeichnet hat. Und dies ausgerechnet zur Zeit der größten Not im eigenen Lande.

Ist das der Untergang des Abendlands, den Oswald Spengler meinte? Zumindest desjenigen (alles andere als unwichtigen) Teils des Abendlands, den man, von Norden kommend, am Brenner betritt? Noch wirkt das Land wie paralysiert. Das hat ja auch was Gutes: Flüchtlingstrecks gen Norden (nach Süden geht’s ja nicht, da müsste man ja nach „Iddalien“) wurden bisher noch nicht gesichtet. Das vorsichtshalber eingerichtete Auffanglager des BRK bei Kiefersfelden konnte wieder abgebaut werden. Also vielleicht alles doch nicht so schlimm? Man soll auch mit Koalitionen regieren können.

Die SVP hat dabei acht Optionen – was entsprechende Spielräume für Sondierungsgespräche schafft. Man wird sehen, spätestens nächsten Herbst bei der Ferienakademie. Und dann auch mal ohne Wahl in Deutschland – sofern nicht bei uns Unvorhergesehenes passiert. Aber wer weiß das schon in diesen Zeiten.

Doch genug gelästert – die gesamte Quartl-Redaktion hofft, dass Sie gut ins Wintersemester gestartet sind und den immer früher einsetzenden Lebkuchen-Attacken noch widerstehen konnten. In diesem Sinne viel Spaß mit der neuen Ausgabe Ihres Quartls und eine gute Zeit!

H.-J. Bungartz

## **Parallelisierung und Optimierung von Fastest-3D für Multicore Systeme**

**Im Rahmen der Multicore-Software-Initiative des KONWIHR wurde am Regionalen Rechenzentrum Erlangen eine umfassende Analyse des Single-Core Performance und der Skalierbarkeit von Fastest-3D durchgeführt. Zu einer erheblichen Steigerung der Single-Core Performance sowie der Skalierbarkeit von Fastest-3D führte die Implementierung der daraus abgeleiteten Maßnahmen.**

Der Strömungslöser Fastest-3D<sup>1</sup> wird bereits seit den 90er Jahren in seiner ursprünglichen Version in Erlangen am Lehrstuhl für Strömungsmechanik entwickelt. Heute wird Fastest-3D in verschiedenen Varianten an Instituten der TU Darmstadt, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Helmut-Schmidt-Universität Hamburg weiterentwickelt und u. a. auf Probleme der turbulenten Strömung, Verbrennung und Fluid-Struktur-Akustik Interaktion angewandt.

Während die in Fastest-3D verwendeten Methoden kontinuierlich weiterentwickelt wurden, waren die Parallelisierung und Single-Core-Optimierungen immer noch stark auf den Einsatz auf Vektorrechnern ausgelegt. Um auch in Zukunft HPC-Ressourcen effizient nutzen zu können, wurden entsprechende Anpassungen in Fastest-3D notwendig.

---

<sup>1</sup> [http://www.fnb.tu-darmstadt.de/forschung\\_fnb/software\\_fnb/software\\_fnb.en.jsp/\\_fnb.en.jsp](http://www.fnb.tu-darmstadt.de/forschung_fnb/software_fnb/software_fnb.en.jsp/_fnb.en.jsp)

Ausgangspunkt für alle Optimierungsmaßnahmen war eine detaillierte Analyse von Fastest-3D sowohl auf einem Socket als auch im Rahmen von Skalierungsläufen auf SuperMUC. Wie in Tab. 1 dargestellt, wird ca. 50% der Rechenzeit zum Lösen des linearen Gleichungssystems verwendet. Die entsprechenden Routinen des Gleichungslösers sind *resforward3d*, *backward3d* und *lu3d*. Gleichzeitig konnte mittels des Tools `likwid-perfctr`

time %	self [s]	calls	name
37.45	125.03	8100	resforward3d_pp
14.52	48.47	8100	backward3d_pp
11.26	37.59	1800	flx1
9.01	30.07	645	calcdp_exp
6.78	22.65	15	calcp_exp
5.72	19.09	270	celuvw_exp
5.06	16.89	900	lu3d_pp

Tabelle 1: Profil eines typischen Simulationslaufs mit sechs MPI-Prozessen auf einem Socket auf LiMa.

aus der am RRZE entwickelten LIKWID Toolsuite<sup>2</sup> ermittelt werden, dass die Performance der meisten Komponenten von Fastest-3D durch die Hauptspeicherbandbreite limitiert ist. Dies führt zu einem typischen Sättigungsverhalten über die Kerne eines Multicore-Chips und lässt darauf hoffen, dass die Verwendung einfach-genauer Gleitkommazahlen eine deutliche Verbesserung der Performance nach sich zieht.

Die parallele Skalierbarkeit mit MPI wurde auf dem LiMa-Cluster des RRZE mittels des Intel Trace Analyzers durchgeführt. Ein Ausschnitt der *Event Timeline* ist in Abb. 1 dargestellt. Wie sich daraus erkennen lässt, führt die Verwendung von blockierenden MPI Funktionen zu einer partiellen Serialisierung. Zu Steigerung der Single-Core Performance und der parallelen Skalierbarkeit wurden deshalb zwei wesentliche Maßnahmen implementiert:

- Der lineare Gleichungslöser (SIP-Solver) wurde mit einfacher Genauigkeit implementiert, um die Nutzung der begrenzten Speicherband-

<sup>2</sup> <http://code.google.com/p/likwid/>

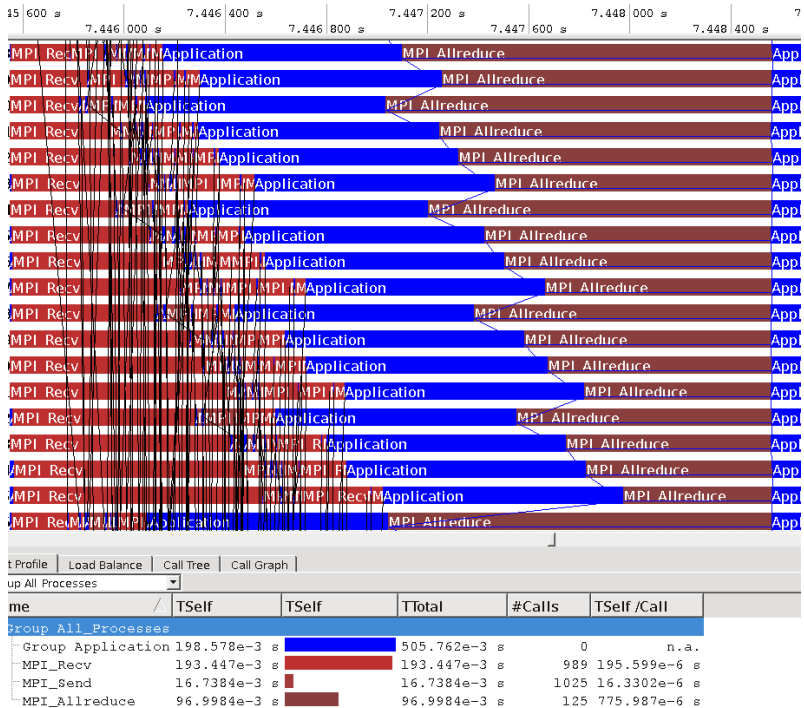


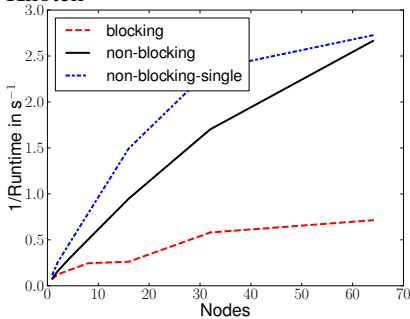
Abbildung 1: Ausschnitt aus dem zeitlichen Verlauf der Kommunikation in Fastest-3D (Intel Trace Analyzer Event Timeline).

breite zu verbessern. Im Idealfall ergibt sich dadurch eine Halbierung der Code-Balance.

- Die Verwendung von nicht-blockierenden Kommunikationsaufrufen vermeidet unnötige Wartezeiten von MPI-Prozessen und hebt die künstliche Serialisierung der Kommunikation auf. Außerdem wird eine „full-duplex“-Kommunikation ermöglicht. Ein Überlapp der Kommunikation mit der Rechnung ist hier nicht das Ziel.

Zur Messung des Effekte dieser Implementierungen in Fastest-3D wurden Skalierungsläufe auf SuperMUC für eine typische Konfiguration von Fastest-3D mit konstanter Problemgröße durchgeführt. In Abb. 2 sind die inverse Rechenzeit pro Zeitschritt in Sekunden und die parallele Effizienz für die

## Inverse Laufzeit pro Zeitschritt vs. Knoten



## Parallele Effizienz vs. Knoten

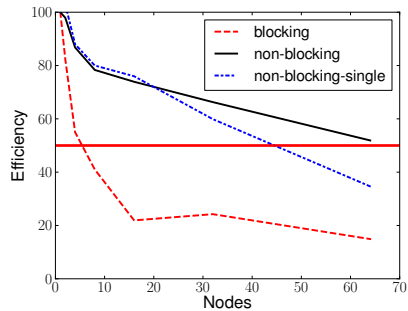


Abbildung 2: Performance-Messungen auf SuperMUC, 16 ppn,  $12.5 \cdot 10^6$  Unbekannte, starke Skalierung. *Non-blocking* bezeichnet die Verwendung nicht-blockierender MPI-Kommunikation, und *single* den Einsatz eines Gleichungslösers mit einfacher Genauigkeit.

Ausgangsversion, eine Version mit nicht-blockierender Kommunikation sowie eine Version mit nicht-blockierender Kommunikation und einfacher Rechengenauigkeit des Gleichungslösers dargestellt.

Wie zu erkennen ist, kann Fastest-3D mittels der überarbeiteten Kommunikationsroutinen deutlich mehr Knoten bei einer bestimmten Problemgröße effizient nutzen. Außerdem kann im Bereich hoher paralleler Effizienz mittels des einfach genauen Gleichungslösers eine zusätzliche Beschleunigung erzielt werden (der stärkere Abfall der Effizienz bei großen Knotenzahlen ist selbstverständlich zu erwarten). Bei aktuell durchgeführten Simulationen wurde bei einer minimalen parallelen Effizienz von mehr als 50% eine Beschleunigung der Simulation um fast das Zehnfache erzielt. Details zur Implementierung und weitere Performancedaten finden sich unter <http://arxiv.org/abs/1303.4538>.

Der Erfolg dieses Projektes zeigt, dass mit relativ geringem Aufwand an Arbeitskraft und finanziellen Mitteln bestehende Software wieder fit für den Einsatz auf aktuellen Systemen gemacht werden kann. Die KONWIHR-Softwareinitiative ist dafür weiterhin das ideale Förderinstrument.

S. Becker, G. Hager, C. Scheit, J. Treibig, G. Wellein

## Moleküldynamik-Simulationen mit GPGPUs Simulationen heute: Das numerische Experiment

Simulationen haben sich in den letzten Jahren dank immer leistungsfähiger Rechensysteme neben den klassischen Methoden von Theorie und Experiment als dritte Art des wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns etabliert. Sie werden mittlerweile in vielen naturwissenschaftlichen Bereichen routinemäßig eingesetzt, z.B. in der Astronomie, Meteorologie und den sogenannten *Life Sciences*.

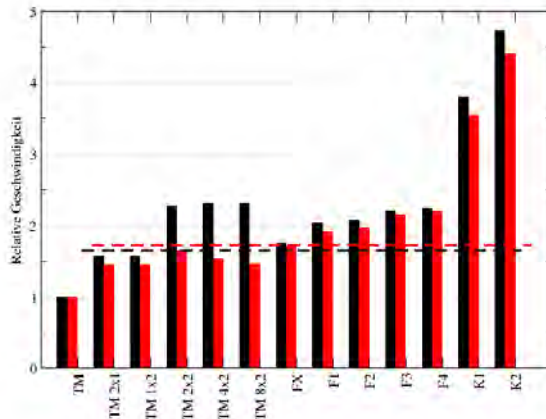


Abbildung 3: Relative Rechengeschwindigkeit verschiedener GPU-Konfigurationen bei Moleküldynamiksimulationen für ein mittleres (schwarz) und ein großes (rot) System. Die gestrichelten Linien geben den Vergleichswert der CPU-Rechnung auf den tinyblue-Cluster an.

Allen realen Anwendungen ist gemein, dass die betrachteten Systeme immer größer und die benötigten Rechenzeiten damit immer länger werden. Dieses Problem wurde in der Vergangenheit u.a. durch Parallelisierung der entsprechenden Codes angegangen, so dass sich HPC-Anlagen gut nutzen lassen.



Seit einiger Zeit gibt es jedoch auch die interessante Entwicklung, dass die Rechenleistung von Graphikkarten zur Beschleunigung verwendet wird. Im Vergleich zu ihren CPU-Gegenstücken besitzen GPUs eine wesentlich höhere Rechenleistung, allerdings nur für Operationen in *single precision*.

Für das Moleküldynamik-Programmpaket AMBER[1], das zur Simulation von DNA, Proteinen und anderen Biomolekülen eingesetzt wird, wurde vor einiger Zeit eine erste Version vorgestellt, die auf Nvidia GPGPUs eingesetzt werden konnte. Um eine hohe Ausführungsgeschwindigkeit bei gleichzeitiger numerischer Stabilität in den Simulationen zu erreichen, wurde dabei ein Umweg über eine gemischte Verwendung von *single* und *double precision* notwendig[2]. Ein weiterer Kunstgriff konnte nun die Geschwindigkeit der Implementierung weiter steigern: Statt *double precision* werden in den numerisch kritischen Bereichen jetzt *fixed precision*-Variablen auf Basis von 64-Bit-Integern verwendet[3]. Für die Praxis wird allerdings empfohlen, dass die ersten Schritte einer Simulation stets mit *double precision* gerechnet werden sollten: die behandelten Systeme müssen zunächst relaxiert werden, und numerische Ungenauigkeiten können dabei zu einem fehlerhaften Simulationsverlauf führen.

### **Vergleich verschiedener GPUs**

Damit diese neue Methodik an realen Systemen getestet werden könnte, hat Dr. Thomas Zeiser vom Regionalen Rechenzentrum Erlangen (RRZE) mehrere GPU-spezifische Versionen von AMBER kompiliert. Dank des CUDA-Standards läuft dasselbe Programm nun auf allen Nvidia-Karten des *tiny-gpu*-Clusters am RRZE. Dieser besitzt acht Knoten mit je zwei baugleichen TeslaM1060-Graphikkarten von Nvidia (GT200-Generation) und Infiniband-Vernetzung; dazu wurden in jüngerer Vergangenheit nochmal zwei Knoten mit verschiedenen neueren Graphikkarten hinzugefügt (4x Fermi-Generation, 1x Kepler GK104-Generation und 1x Kepler GK110-Generation). Auch am Leibniz-Rechenzentrum München (LRZ) gibt es einen kleinen Cluster aus vier Knoten mit je zwei baugleichen Nvidia-Karten der Fermi-Generation, die sich mit AMBER nutzen lassen.

Um ein Gefühl für die Leistungsfähigkeit dieser GPU-Implementation zu bekommen, wurden zwei Testsysteme mit 420 bzw. 1680 Aminosäurereste in explizitem Lösungsmittel (150.000 bzw. 610.000 Atome) aufgesetzt und die Rechenleistung in simulierten Nanosekunden pro Tag gemessen. Ab-

Name	Kürzel <sup>a</sup>	Ausstattung	Konfiguration
Tesla M1060	TM	4095 MB; 1,3 GHz; 30 Proc	einzel/parallel
Tesla X2070	FX	5375 MB; 1,15 GHz; 14 Proc; ECC-on	einzel/parallel <sup>b</sup>
Tesla C2070	F1	5375 MB; 1,15 GHz; 14 Proc; ECC-on	einzel
Tesla C2075	F2	5375 MB; 1,15 GHz; 14 Proc; ECC-on	einzel
Tesla C2070	F3	6143 MB; 1,15 GHz; 14 Proc; ECC-off	einzel
Tesla C2050	F4	3071 MB; 1,15 GHz; 14 Proc; ECC-off	einzel
GeForce GTX680	K1	2047 MB; 1,06 GHz; 8 Proc; kein ECC	einzel
Tesla K20c	K2	4799 MB; 0,71 GHz; 13 Proc; ECC-on	einzel

Tabelle 2: Übersicht über die verschiedenen GPU-Systeme. <sup>a</sup> vgl. Abbildung 3  
<sup>b</sup> nur einzeln getestet

Abbildung 3 zeigt die jeweils normierten Ergebnisse, die GPU-Kürzel sind in Tabelle 2 erklärt.

Interessant ist, dass das kleinere System im Falle der TeslaM1060-GPUs von der Parallelisierung immerhin bis zu 2x2, also zwei über DDR-Infiniband verbundene Knoten mit jeweils 2 GPUs, merklich profitierte, während beim größeren System bereits nach 2 GPUs ein Maximum erreicht war. Die Parallelisierung über 8 oder 16 GPUs (4x2 bzw. 8x2) brachte für keines der Systeme einen Leistungszuwachs. Ähnliches gilt für die Fermi-Karten vom LRZ, bei denen sich die Parallelisierung ebenfalls nicht signifikant auswirkte. Die Gründe für diese Skalierungseffekte sind im Moment noch unklar; eine Möglichkeit wäre eine erhöhte Kommunikation zwischen den parallelen Prozessen für größere Systeme.

Bemerkenswert ist die Leistungssteigerung der Nvidia-Karten von einer Generation zur nächsten: Von Tesla zu Fermi, und dann von Fermi zu Kepler kommt es jeweils etwa zu einer Verdopplung der Geschwindigkeit.

Zum Vergleich wurden beide Systeme auch als CPU-Version auf dem RRZE-Cluster `tinyblue` gerechnet. Auf 4 Knoten mit je 8 Xeon 5550 (+SMT) erreichten die Systeme einen relativen Geschwindigkeitswert von 1,6 bis 1,7. Vergleicht man das mit den leistungstärksten GPUs in Abbildung 3, erkennt man die Attraktivität solcher Hardware für Moleküldynamik-Simulationen.

### **Testprojekt: Alzheimer-Amyloid**

Als umfangreiches Testprojekt für die GPU-Implementierung von AMBER wird von der Bioinformatik in Erlangen der Einfluss von positiv geladenen

Metallionen auf die Struktur und Dynamik von Amyloid- $\beta$ -Aggregaten untersucht. In diesen fibrillären Strukturen, einem molekularen Kennzeichen der Alzheimer-Krankheit, kommen sich an der Außenseite Aminosäurereste mit gleicher Ladung räumlich nahe, eine energetisch ungünstige Konstellation, die aber durch experimentell-bestimmte Strukturen belegt ist.

In Ergänzung zu früheren systematischen Untersuchungen [4, 5] sollen die Simulationen klären, ob sich eine erhöhte Konzentration von Gegenionen stabilisierend auf solche fibrillären Strukturen auswirkt, ob die Natur der Gegenionen ( $\text{Na}^+$  oder  $\text{K}^+$ ) zu Unterschieden führt und ob die Größe der Strukturen dabei ebenfalls eine Rolle spielt.

Als Einblick in das noch laufende Projekt zeigt Abbildung 4 die Endstruktur eines zweilagigen Amyloid- $\beta$ -Aggregats aus insgesamt 48 einzelnen Amyloid- $\beta$ -Ketten. Deutlich erkennbar ist die Wechselwirkung der Ionen aus der wässrigen Lösung mit den geladenen Aminosäuren.

Aus den vergleichenden Ergebnissen aller Simulationen lassen sich Rückschlüsse auf den Mechanismus der Fibrillenbildung und deren Stabilität ziehen, was wiederum für die Entwicklung von geeigneten Alzheimer-Medikamenten wichtig sein kann.

### **Resümee**

GPUs sind ihren CPU-Verwandten in der *single precision*-Rechenleistung klar überlegen. Echte HPC-Karten sind in der Anschaffung zwar nicht unbedingt günstig, doch auch günstigere Consumer-Karten lassen sich in manchen Fällen mit einem guten Preis-Leistungsverhältnis einsetzen: Für das Moleküldynamik-Programm AMBER wurde kürzlich durch die Einführung von *fixed precision*-Variablen im GPU-Code eine optimierte Balance zwischen numerischer Stabilität einerseits und Rechengeschwindigkeit andererseits gefunden. Diese Faktoren machen eine Anschaffung von modernen GPU-Systemen speziell für Moleküldynamik-Simulationen zur attraktiven Ergänzung zum traditionellen CPU-Cluster.

### **Danksagung**

Der Autor dankt Thomas Zeiser vom Regionalen Rechenzentrum Erlangen (RRZE) für die langjährige und gute Zusammenarbeit, insbesondere die Bereitstellung optimierter Amber-Programme für CPUs und GPUs auf den RRZE-Clustern, sowie die Anregung zu diesem Beitrag. Das Simulations-

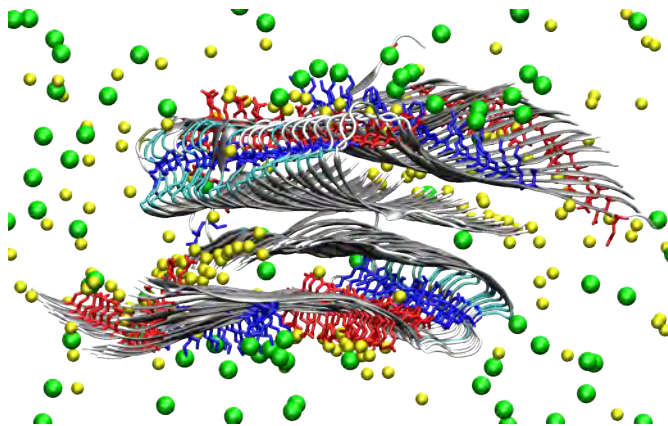


Abbildung 4: Amyloid- $\beta$  in NaCl-Lösung. Die 48 Ketten sind u-förmig angeordnet und in zwei gleichgroßen Stapeln organisiert. Geladene Aminosäuren sind als Stäbchen dargestellt (rot: negativ, blau: positiv). Die geladenen Natrium- und Chlorid-Ionen sind als gelbe bzw. grüne Kugeln zu sehen. Die Wassermoleküle des Lösungsmittels sind der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt.

projekt wird von der Alzheimer Forschung Initiative e.V. mit einem Pilot Grant (12812) gefördert.

A. Horn<sup>1</sup>

## Literatur

- [1] <http://ambermd.org>.
- [2] A. W. Götz, M. J. Williamson, D. Xu, D. Poole, S. Le Grand, R. C. Walker, Routine Microsecond Molecular Dynamics Simulations with AMBER on GPUs. 1. Generalized Born., *J Chem Theory Comput* **2012**, *8*, 1542–1555, DOI 10.1021/ct200909j.
- [3] S. le Grand, A. W. Götz, R. C. Walker, SPFP: Speed without compromise – A mixed precision model for GPU accelerated molecular dynamics simulations, *Comp. Phys. Comm.* **2013**, *184*, 376–380, DOI 10.1016/j.cpc.2012.09.022.
- [4] A. H. C. Horn, H. Sticht, Amyloid-beta42 oligomer structures from fibrils: a systematic molecular dynamics study., *J Phys Chem B* **2010**, *114*, 2219–2226, DOI 10.1021/jp100023q.
- [5] A. Kahler, H. Sticht, A. H. C. Horn, Conformational Stability of Fibrillar Amyloid-Beta Oligomers via Protofilament Pair Formation - A Systematic Computational Study., *PLoS One* **2013**, *8*, e70521, DOI 10.1371/journal.pone.0070521i.

<sup>1</sup>Institut für Biochemie, FAU Erlangen-Nürnberg, Anselm.Horn@fau.de

**Iterationsschleife N=10**

24. Oktober 2013

Die österreichische Schriftstellerin Christine Lavant (1915 – 1973) schreibt 1946 in ihrem autobiographischen Werk „Aufzeichnungen aus einem Irrenhaus“<sup>a</sup> das erst posthum 2001 erschien: „... wir alle gehen der Richtung nach, in die wir geworfen worden sind.“ Der Text geht auf einen sechswöchigen Aufenthalt der Autorin in einer Nervenheilanstalt in Klagenfurt im Jahr 1935 zurück. Lavant sieht sich selbst in die Richtung geworfen, schreiben zu müssen – auch wenn dieses Schreiben und Beschreiben der wahrgenommenen und erlebten Realität und der damit verbundenen Gefühle und Gedanken im eklatanten Widerspruch zu ihrem religiösen Erziehungshintergrund steht.

Lachse, so heißt es, folgen nicht der Richtung des Stroms. Man ist versucht, sie als Gegenbeispiel zu Christine Lavants Satz zu sehen. Geboren im Süßwasser verbringen sie ihr Leben im Meer um schließlich an ihren Geburtsort zurückzukehren. Sie schwimmen dazu flussaufwärts – als in die falsche Richtung oder entgegen der Richtung – und gelten damit als Paradebeispiel für das Schwimmen gegen den Strom. Fragt man nach den Gründen für dieses Verhalten, so lernt man schnell, dass es in der Natur der Lachse liegt, gegen den Strom zu schwimmen. Ein Lachs der gegen den Strom schwimmt folgt also seiner Natur oder – um bei Lavant zu bleiben – geht doch wieder nur der Richtung nach in die er geworfen worden ist.

Um im übertragenen Sinn gegen den Strom zu schwimmen müsste ein Lachs also lernen mit dem Strom zu schwimmen. Der Protest des Lachses wäre also - im Widerspruch zu seiner Natur - der Verzicht auf die kräfteraubende Rückkehr zum Ursprung seiner Reise. Ein Anreiz für diesen Protest wäre die erhöhte Lebenserwartung des renitenten Lachses. Während seine artgerecht gegen den Strom schwimmenden Artverwandten nämlich – sofern sie die Reise überleben und nicht vor Erschöpfung sterben oder von glücklichen Bären und anderen Räubern gefressen werden – nach dem Laichen meist sterben, würde der aufmüpfige Lachs seine Kräfte sparen und seine Lebenserwartung erhöhen. Bezahlen würde der rebellische Lachs seinen Trotz mit dem Verzicht auf Nachwuchs. Menschen sind – wie man sagt - keine Lachse. Sie können selbständig Entscheidungen treffen. Ob sie aber mit dem Strom schwimmen oder gegen den Strom ist auch für sie selber nicht immer klar zu erkennen. Der Blick auf die Mitmenschen hilft dabei nicht weiter. Anders als Lachse können Menschen sich nicht einfach am Verhalten der Artgenossen orientieren wenn sie ihre Ziele erreichen wollen.

<sup>a</sup>Christine Lavant, Aufzeichnungen aus einem Irrenhaus, Haymon Verlag, Innsbruck, 2008

Bleibt als Ausweg aus dem Lavantschen Diktum vielleicht doch Kants Verweis auf das, was den Menschen vom Lachs unterscheidet: Habe Mut, dich deines eigenen Verstandes zu bedienen?<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Immanuel Kant, Was ist Aufklärung?, Felix Meiner Verlag, Hamburg, 1999

M. Resch

## **LRZ startet Partnerschaftsinitiative Computational Sciences $\pi^{CS}$**

**Die Computational Sciences haben einen Grad an Komplexität erreicht, der es erforderlich macht, dass die Experten aus der jeweiligen wissenschaftlichen Domäne ihre Forschung in enger, interdisziplinärer Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern aus dem Bereich der numerisch-algorithmischen Methodik sowie mit Spezialisten für IT-Infrastrukturen weiterentwickeln.**

Um die Anforderungen der Forscher aus den verschiedenen Wissenschaftsgebieten auch in Zukunft optimal erfüllen zu können, hat das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ) die „Partnerschaftsinitiative Computational Sciences“ ( $\pi^{CS}$ ) ins Leben gerufen. Diese Partnerschaftsinitiative hat sich zum Ziel gesetzt, Fachwissenschaftler der jeweiligen Forschungsgruppen mit den Entwicklern neuer Algorithmen und Rechenmethoden aus Mathematik und Informatik sowie den Betreibern der Höchstleistungsrechner in der Praxis zusammen zu bringen.

### **Thema Umwelt im Fokus**

Im Rahmen des Besuchs einer Delegation des Bayerischen Umweltministeriums wurde  $\pi^{CS}$  den Leitern der Umweltforschungsstation Schneefernerhaus (UFS) vorgestellt. Prof. Arndt Bode, Vorsitzender des Direktoriums des LRZ, betonte dabei: „Die intensive und kontinuierliche Kommunikation mit den Wissenschaftlern ist unerlässlicher Bestandteil unserer Arbeit, damit wir die besten IT-Dienste für internationale Spitzenforschung bereitstellen können. Das umfangreiche Kompetenznetzwerk des LRZ im Bereich Computational Sciences kann hier zu neuen und wissenschaftlich hochinteressanten Ergebnissen führen.“ (s. a. Pressemitteilung der BAdW vom 24.

Oktober 2013<sup>2)</sup>)

Da eine solche intensivierete Zusammenarbeit mit zusätzlichem Aufwand verbunden ist, kann zu Beginn natürlich nicht die gesamte Bandbreite der Computational Sciences abgedeckt werden. Daher strebt das LRZ zunächst eine Fokussierung auf das Thema Umwelt an. Von besonderem Interesse sind Partnerschaften mit Forschungsgruppen aus den computergestützten Bio-, Geo-, Energie- und Astro-Wissenschaften, die einen starken Bezug zu umweltrelevanten Fragestellungen haben und die für ihre wissenschaftliche Weiterentwicklung auf neue, innovative und performante IT-Technologien angewiesen sind. Da auch ein starker regionaler Bezug durchaus erwünscht ist, werden insbesondere solche Projekte ins Auge gefasst, die Umweltthemen aus Bayern und seiner näheren Umgebung aufgreifen, wie zum Beispiel das Ökosystem Alpenraum, die Wassersituation an der oberen Donau oder Forschungen zur tiefen Geothermie.

#### **Was bedeutet das für die Wissenschaftler?**

Das LRZ erweitert zukünftig das Dienstleistungsangebot für ausgewählte Wissenschaftlergruppen um individualisierte Leistungen. Das LRZ bietet zum Beispiel individuelle Beratung in IT-Fragen, maßgeschneiderte Trainings, Workshops und Lehrveranstaltungen sowie die Bereitstellung exklusiver Ressourcen oder spezieller Infrastruktur. Um die Kooperation zu intensivieren, stellt das LRZ jeweils einen direkten Ansprechpartner für die entsprechenden Forschungsgruppen ab. Um die benötigten IT-Leistungen noch zielgerichteter erbringen zu können, ist angestrebt, dass sich LRZ-Mitarbeiter Domänenwissen aneignen, soweit dies für ein tieferes Verständnis der IT-bezogenen Probleme erforderlich ist. Es soll auch die Möglichkeit geschaffen werden, dass sich LRZ-Mitarbeiter an der universitären Lehrtätigkeit beteiligen, um Informationen zu Einsatz und Nutzung von Höchstleistungsrechnern frühzeitig den Studenten aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften zur Verfügung zu stellen.

#### **Gibt es das umsonst?**

Diese enge Zusammenarbeit kann aber nur dann fruchtbar wirken, wenn auch der wissenschaftliche Partner einen entsprechenden Beitrag leistet. So

---

<sup>2)</sup>[http://www.badw.de/aktuell/pressemitteilungen/archiv/2013/PM\\_2013\\_27/index.html](http://www.badw.de/aktuell/pressemitteilungen/archiv/2013/PM_2013_27/index.html)

ist es etwa notwendig, dass LRZ-Mitarbeiter in wissenschaftliche Arbeitsgruppen und Vorhaben eingebunden werden. Dies erfordert nicht nur eine intensive Kommunikation und erhöhte Mobilität. Auf dem Weg zu der angestrebten wissenschaftlichen Kooperation werden gemeinsame Workshops veranstaltet, die dazu dienen sollen, ein besseres Verständnis für die Schwierigkeiten der Forschung zu erhalten. Weitere Schritte könnten regelmäßige Treffen, Gastaufenthalte oder Kooperationen in geförderten Projekten sein. Um den Aufbau einer wissenschaftlichen Partnerschaft im Sinne der Zielsetzung dieser Initiative voranzutreiben, ist insbesondere auch die Einbindung des LRZ in geförderte Forschungsprojekte bereits in der Antragsphase angeraten. Ziel ist eine enge Zusammenarbeit in einer gemeinsamen Arbeitsgruppe, in der kooperative wissenschaftliche Ergebnisse entstehen, die nicht nur die natur- oder ingenieurwissenschaftliche Forschung voranbringt, sondern auch in den Bereichen der Mathematik und Informatik einen wissenschaftlichen Beitrag leistet.

Für sich selbst erhofft das LRZ aus einer solchen intensivierten Kooperation neue Erkenntnisse, wohin sich die Anforderungen der Forschung an die Computational Sciences und die IT-Infrastruktur entwickeln werden.

Sollten Sie Interesse an einer solchen partnerschaftlichen Zusammenarbeit haben, dann wenden Sie sich bitte an

Anton.Frank@lrz.de oder Ferdinand.Jamitzky@lrz.de

A. Frank, F. Jamitzky

## **Das unglaubliche Elite-Ergebnis der BGCE beim Elite-Cup 2013**

**Wie jedes Jahr fand auch 2013 der Elite-Cup des Elitenetzwerks Bayern (ENB) statt, ausgerichtet (nach den letzten Jahren möchte man fast sagen, gewohnheitsmäßig) vom Vorjahressieger CDTM. Und so versammelten sich einige Mannschaften der Studiengänge des ENB samt Fan-Folge am Samstag, den 6. Juni, im Norden Münchens.**

Bei der Analyse der Ergebnisse des BGCE-Teams der letzten Jahre fanden wir einen (positiven) Gradienten. Um diesen zu verstärken, wurden im Vorfeld die Aufnahmekriterien für die BGCE abermals verschärft – um harte



Kriterien wie Lauffähigkeit der fußballspielenden BewerberInnen sowie um Stimmgewalt und Aussehen der CheerleaderInnen ...äh ...sonstigen Bewerber. Dank dieser Bemühungen fand sich 2013 eine Kernmannschaft von immerhin drei studentischen Spielern, die durch Betreuer der BGCE aufgefüllt wurde, sodass ein vollständiges und vor allem schlagkräftiges Team angemeldet werden konnte.



Wie auch in den letzten Jahren versuchten die Organisatoren des Elite-Cups, unser Team in einen zermürbenden Psychokrieg zu verwickeln. Nachdem unser erstes Spiel spontan um eine Stunde nach vorne verlegt worden war, da sich die Anreise mancher Mannschaften bedingt durch den Stau zu Ferienbeginn verzögere (jaja, schon klar), und damit unsere verzögert eintreffenden starken Auswechselspieler uns noch nicht unterstützen konnten, sowie die Platzwahl mehrmals umgeplant worden war, konnten wir endlich loslegen – gegen den vermeintlich schwächsten Gegner „Theoretische und Mathematische Physik“. Diese, in hoher Zahl angetreten, begannen jedoch druckvoll, sodass das erste Gegentor (auch fast gewohnheitsmäßig) nicht lange auf sich warten ließ. Dadurch jedoch angestachelt, begann unsere Aufholjagd – in einem außergewöhnlich schönen Spielzug setzte der Mittelstürmer den Flügelflitzer geschickt ein, der frei zum Schuss kam – TOOOOORRR, jetzt war wieder alles möglich. Leider schloss das auch den zweiten Gegentreffer kurz vor Schluss durch eine Verkettung äußerst unglücklicher Umstände mit ein, sodass wir das erste Spiel mit 1:2 verloren geben mussten.

Noch besser bestritten wir das zweite Spiel gegen CDTM II, eine der stärksten Mannschaften im Turnier: dank leidenschaftlicher Defensivarbeit

konnte ein respektables 0:2 erreicht werden. Hochmotiviert und gerade warmgespielt für das dritte Spiel, erfuhren wir, dass die vierte Mannschaft in unserer Gruppe gar nicht antritt (sie waren wohl beeindruckt von unseren ersten beiden Spielen auf dem Weg nach München umgekehrt) – sodass uns die hier fest einkalkulierten 3 Zähler durch die Lappen gingen.



So seh'n Sieger aus. . .

So blieb uns nur mehr das Platzierungsspiel um den 11. Rang, das wir aus Fairness – der personellen Unterbesetzung des Gegners geschuldet – mit einer Person weniger auf dem Platz bestritten und knapp gegen Ende mit 0:1 verloren (Zitat des Auswechselspielers: „Gleich sind wir im Elfmeterschießen“ – „Oh, das war's dann“.). Wir verzichteten an dieser Stelle auf das Zuweisen der Schuld an den Schiedsrichter, der einen vielsprechenden Angriff unsererseits in letzter Minute nicht mehr abschließen ließ, sondern tragen auch diese Niederlage mit Fassung. Immerhin wurde ein stolzer 12 Platz mit einem Torverhältnis von 1:4 erreicht (auch ein Ehrentreffer ist nichts

Selbverständliches!). Das Gute war andererseits, dass wir das restliche Turnier als Zuschauer genießen und unterstützen konnten und TopMath – durch unsere Anfeuerung beflügelt – immerhin den dritten Platz nach Garching holte. Das packende Finale zwischen FIM und (erwartungsgemäß) CDTM entschieden überraschenderweise die Gäste 2:1 für sich. Den Abschluss des gelungenen Tages feierten alle Beteiligten beim abendlichen Grillen.

An dieser Stelle möchten wir uns noch einmal ganz herzlich bei den Organisatoren von CDTM bedanken und ebenso dem diesjährigen Gewinner gratulieren! Wir sind fest davon überzeugt, dass durch den neuen Titelträger dieses Jahr Bewegung in die festgefahrene Platzierungshierarchie der Mannschaften gekommen ist, und wir von dieser Dynamik nächstes Jahr entscheidend profitieren werden (neuer Platz – neues Glück). In diesem Sinne beginnen wir sofort nach Ende der Spielpause mit den Planungen und Vorbereitungen für den Elite-Cup 2014; erste Trainingseinheiten wurden bereits erfolgreich absolviert.

W. Eckhardt, T. Neckel

## **Einstandsbesuch: George Biros als Fellow am Institute for Advanced Study**

**Mitte August bekam die Fokusgruppe High Performance Computing am Institute for Advanced Study der Technischen Universität München Zuwachs aus dem warmen Texas. Der neue IAS Fellow George Biros stattete uns einen ersten einwöchigen Besuch ab, um speziell die Multi-core Aspekte der bisher bereits in der Fokusgruppe vertretenen Anwendungen der beiden Instituts-Emeriti Markus Hegland (hochdimensionale Probleme) und Miriam Mehl (Mehrphysikanwendungen) zu diskutieren.**

In Kombination mit Anwendungen des ICES Instituts<sup>3</sup> in Texas, vor allem im Bereich der Blutflusssimulation (Gordon Bell Prize 2010), die um weitere Effekte und genauere Modelle erweitert werden soll, wurden spannende Forschungsziele definiert und ein Doktorand verpflichtet, der Anfang Dezember mit der Ergänzung der bisherigen Simulationen um Diffusions- und

---

<sup>3</sup>University of Texas, Institute for Computational Engineering and Sciences

Reaktionsprozesse innerhalb der Blutzellen beginnen wird. Ziel ist es dabei, die Erfahrungen aller beteiligten Gruppen auf dem Gebiet der strukturierten kartesischen Gitter in eine hoch effiziente massiv-parallele Simulationsumgebung einfließen zu lassen.

Neben den inhaltlichen Gewinnen brachte der Besuch für George Biros außerdem eine kleine Rundreise durch Süddeutschland mit sich, da die beiden Partner-Fellows Markus Hegland und Miriam Mehl just in dieser Woche auf einer Sommerakademie der Studienstiftung des Deutschen Volkes am Bodensee weilten. Unser Dank gilt an dieser Stelle noch einmal der Studienstiftung, die uns aus diesem Anlass unkompliziert und kurzfristig Unterkunft und Verpflegung zur Verfügung stellte, sowie George Biros selbst, der die Studierenden des Kurses mit einem spontanen Vortrag über Dichteschätzer in der Uncertainty Quantification begeisterte.

Der Verlauf dieser ersten Einstandswoche lässt uns auf eine fruchtbare und spannende Zusammenarbeit über die nächsten drei Jahre zwischen Austin, Canberra, Stuttgart (Miriam Mehl hat es im Oktober dorthin verschlagen.) und München hoffen.



M. Mehl

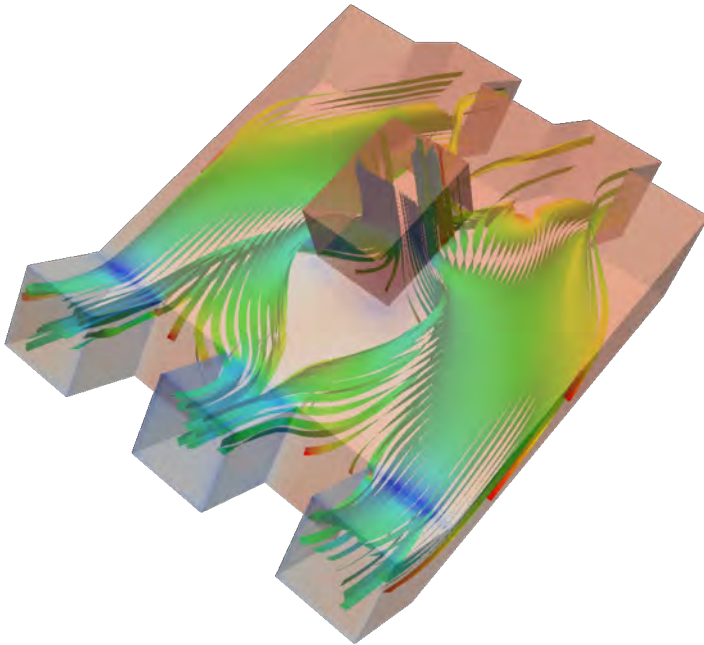
## Workshop „Adaptive and Local Model Order Reduction with Machine Learning for Parametrized Systems“

Den Abschluss eines durch den MIT-Germany Seed Fund (MISTI) gefördertes Projekt machte der Workshop über Model Order Reduction am 19. September 2013 an der TUM.



Die MIT-TUM Kooperation zu “Multi-fidelity Model Order Reduction” wurde von Januar 2012 bis September 2013 gefördert. Das Projekt wurde auf Seiten der TUM von der Gruppe von Hans-Joachim Bungartz und auf Seiten des MIT von Karen Willcox (Aerospace Computational Design Laboratory, AeroAstro) durchgeführt. Die Roadmap wurde am Kick-Off Meeting im März 2012 in Boston festgelegt. In der Folge gab es regen Austausch zwischen den beiden Gruppen sowie gemeinsam durchgeführte Veranstaltungen (z.B. Minisymposium während der SIAM CSE 2013). Den Abschluss machte nun ein Workshop über adaptive und lokale Model Order Reduction Methoden mit Maschinellern Lernen („Adaptive and Local Model Order Reduction with Machine Learning for Parametrized Systems“) am 19. September in München, welcher gemeinsam mit der TUM-IAS HPC Fokusgruppe organisiert wurde.

Der Titel des Workshops grenzte das Thema der Veranstaltung stark ein. Dies war jedoch bewusst gewählt, da die Organisatoren (Bungartz, Willcox, Peherstorfer) explizit den starken Bezug zwischen Model Order Reduction und Maschinellern Lernen herausstreichen wollten. Diesen Bezug erkennt man besonders bei adaptiven und lokalen Methoden, also bei Methoden wo nicht nur einmal ein reduziertes Modell in der Offline Phase erstellt wird, sondern aus mehreren reduzierten Modellen ausgewählt werden kann bzw. Updates des reduzierten Modells möglich sind. In vergangenen Model Order Reduction-Veranstaltungen (MoRePaS II 2012, SIAM CSE 2013, CIRM Workshop 2013 etc.) tauchten diese und ähnliche Methoden immer stärker auf. Das Ziel des Workshops war es, dieses Thema möglichst breit abzudecken und aktuelle Entwicklungen zu präsentieren.

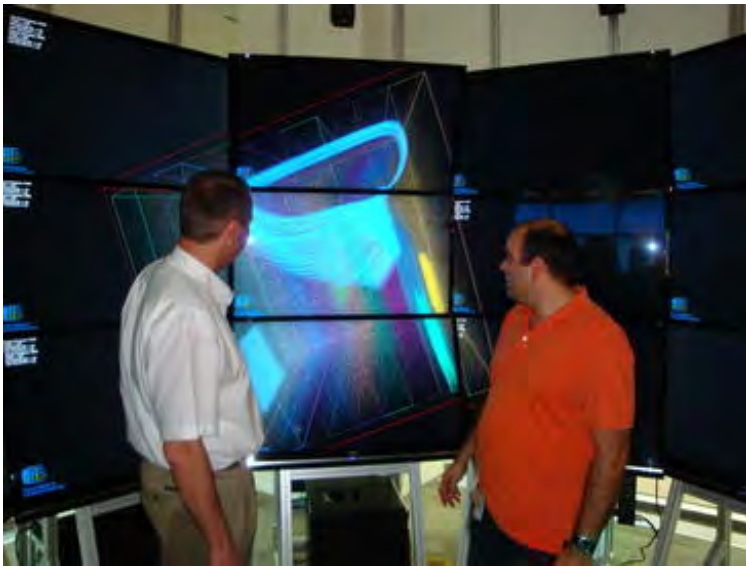


Die Abbildung zeigt ein Beispiel eines parametrisierten Systems. Das System wird durch ein Strömungsfeld durch ein quaderförmiges Objekt beschrieben:

Es besitzt vier Ein- und zwei Ausströmventile. Die Einströmgeschwindigkeiten sind die Parameter des Systems und die "Outputs of Interest" sind die durchschnittlichen Geschwindigkeiten an den Ausströmventilen.

Den Anfang machte Markus Hegland (ANU und TUM-IAS Fellow) mit einer allgemeinen Einführung in Maschinelles Lernen. Dabei legt er den Schwerpunkt auf eine Gitter-basierte Dichteschätzungsmethode. Felix Albrecht (U Münster) führte in seiner anschließenden Präsentation seine „localized reduced basis methode“ ein, welche Lokalität im räumlichen Gebiet (spatial domain) ermöglicht. Die weiteren Vorträge von Bernhard Wieland (U Ulm) und Bernard Haasdonk (U Stuttgart) konzentrierten sich auf Adaptivität und Lokalität im Parametergebiet (parameter domain). Hier reichten deren Ansätze von einfachen und starren aber sehr effektiven Aufspaltun-

gien des Parametergebiets hin zu ausgefeilten Zerlegungen, welche direkt von der Problemstruktur beeinflusst werden. Diese aufwändigen Zerlegungen konnte mit Clustering-ähnlichen Methoden erstellt werden. Einen weiteren interessanten adaptiven Ansatz stellt Benjamin Stamm (University of Pierre et Marie Curie, Paris) vor, wo zuerst eine Vielzahl an möglichen reduzierten Basisvektoren vorberechnet werden (Offline-Phase), und anschließend geeignete ausgewählt werden (Online-Phase). Dabei wird die Auswahl durch eine Metrik basierend auf der Hesse-Matrix des System durchgeführt. Es folgte Lihong Feng (MPI Magdeburg), welche über Fehlerschätzer von pMOR-Methoden für lineare parametrisierte System sprach.



Neben Optimierung und Uncertainty Quantification ist interaktive Visual Exploration ein weiteres Einsatzgebiet von Model Order Reduction.

Den Abschluss machte Qifeng Liao (MIT) mit seinem Vortrag über Decomposition Methoden für Uncertainty Quantification (UQ). Er verfolgt den Ansatz, dass UQ nicht für ein gesamtes System auf einmal geschätzt wird, sondern unabhängig für jede Komponente und anschließend diese Ergebnis-

se kombiniert werden. Damit wurde bestätigt, dass Lokalisierungsansätze auch im Bereich UQ nicht nur machbar sondern unbedingt nötig sind, sobald die dahinterliegenden Systeme zu komplex werden.

Die sieben eingeladenen Sprecher gaben damit einen Überblick über aktuelle Entwicklungen rund um Adaptivitäts- und Lokalisierungsansätze für Model Order Reduction Methoden. Die Folien sind auf der Veranstaltungswebseite <http://www5.in.tum.de/MOR2013> verfügbar<sup>4</sup>.

B. Peherstorfer



## SPPEXA Doctoral Retreat 2013

**Vom 16. – 20. September fand in Darmstadt auf der Lichtwiese das erste *Doctoral Retreat* des DFG-Schwerpunktprogramms SPPEXA mit rund 20 Teilnehmern unter dem Motto „*Application & Algorithm – Combination of Software Tools and Programming*“ statt.**

Solche *Retreats* sind jährlich vorgesehen, um den Austausch zwischen den Doktorandinnen und Doktoranden der verschiedenen SPPEXA-Projekte zu fördern und sie durch inhaltliche Kurse weiterzubilden. Nachdem sich Dörte Sternel (TU Darmstadt) und Sabine Roller (Uni Siegen) bereit erklärt hatten dieses erste *Retreat* zu organisieren, ließen sich auch ziemlich schnell Christian Iwainsky (fortgeschrittener Doktorand bei Christian Bischof, TU Darmstadt) und Verena Krupp (Doktorandin bei Sabine Roller) als Mitglieder des Organisationskomitees begeistern.

Da das Schwerpunktprogramm erst zu Beginn des Jahres begonnen hatte, konnten wir uns schnell darauf verständigen im Wesentlichen Grundlagen vermitteln zu wollen, die im Umfeld des *High Performance Computings* von hoher Relevanz sind, und außerdem den jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern einen Einblick in die Aufgabenstellung der anderen Projekte im SPPEXA zu geben.

Nachdem das grobe Programm stand, die Referenten und ein Termin gefunden waren, erwies sich als Hindernis, dass zeitgleich in Frankfurt die Internationale Automobilausstellung stattfand und damit alle passenden Ho-

---

<sup>4</sup>(Username “mor2013” und Passwort “AdaptLocal”)



tels Messepreise verlangten. Glücklicherweise waren alle Doktoranden damit einverstanden in der Jugendherberge Darmstadt zu übernachten, auch wenn sie damit 4-Bettzimmer in Kauf nehmen mussten.

Um einen Überblick über die Erwartungen und den Wissensstand der Teilnehmer zu erhalten, wurden ca. 3 Wochen vor dem *Retreat* an die 20 angemeldeten Doktoranden Fragebögen verschickt. Die meisten Antworten kamen recht schnell, und so war bereits vor Beginn klar, dass die Gruppe sehr gemischt sein würde – sowohl von den Disziplinen als auch vom Kenntnisstand her.

Obwohl einer der Doktoranden sogar aus Delft anreiste, waren alle am Montag so pünktlich da, dass das Programm wie geplant um 14 Uhr beginnen konnte. In kurzen spannenden Vorträgen stellten die Doktoranden sich und ihre Projekte vor. Da immerhin acht der dreizehn SPPEXA Projekte vertreten waren, wurde die Bandbreite des Schwerpunktprogramms deutlich. Am Anschluss an die Vorträge fuhr man gemeinsam zum *Check-In* in die Jugendherberge und weiter zum Abendessen in den Darmstädter Ratskeller.

Der Dienstag war unter das Motto *Solving the Physical Problem – methods and their behaviour in regard to accuracy and HPC* gestellt. Zuerst gab Dörte Sternel eine kurze Einführung zur Bilanzierung physikalischer Größen, die zu den zu lösenden Gleichungen führen. Anschließend stellte Michael Schäfer (TU Darmstadt) die gängigen Verfahren zur Diskretisierung partieller Differentialgleichungen auf Basis der gewichteten Residuen vor (Finite Volumen, FEM, Spektralmethoden). Verena Krupp hat zum Abschluss des Vormittags noch eine Übersicht über die *Discontinuos Galerkin* Methode gegeben. Am Nachmittag wurden dann von Matthias Bolten (Uni Wuppertal) *Domain Decomposition* und *Multi Grid Methods* zur Lösung der resultierenden Gleichungssysteme vorgestellt. Nach diesem inhaltlich gut angefülltem Tag gab es noch etwas Kultur: eine Führung durch die Darmstädter „Mathildenhöhe“, die zu Beginn des vorigen Jahrhunderts ein Zentrum des Jugendstils war.

Am Mittwoch ging es weiter mit *Introduction to Parallel Computer Architectures and Programming with OpenMP*. Der Tag wurde von der Gruppe von Matthias Müller (RWTH Aachen) gestaltet. Durch einen Wechsel von spannenden Vorträgen und praktischen Übungen boten Sandra Wienke und Tim Cramer allen Teilnehmern die Möglichkeit ihr neu erworbenes



Abbildung 5: Im Seminarraum: Aufmerksam wird dem Vortrag von Michael Schäfer gefolgt.

Wissen auch gleich auszuprobieren. Auch dieser Tag endete mit lokal(er)-Kultur: Markus Lazanowski (*Graduate School of Computational Engineering*, Darmstadt) führte uns nach Frankfurt-Sachsenhausen in eine *Äppelwoiwirtschaft*, in der es wirklich hervorragende Hausmannskost gibt und das *Stöffsche* im großen *Bembel* auf den Tisch kommt – man muss es mögen, aber nach dem 2. Glas geht alles. . .

*Basics of Node-Level Performance: Modeling and Optimization* war das Thema, das Gerhard Wellein und Georg Hager (FAU Erlangen) am Donnerstag vermittelten. Auch hier wurden die theoretischen Grundlagen durch praktische Übungen ergänzt. Als besonderer Ansporn konnte am Ende des Tages das Buch der Beiden „*Introduction to High Performance Computing for Scientists and Engineers*“ gewonnen werden. Der- oder diejenige, der das an diesem Tage vorgestellte *Roof-Top Model* verstanden und direkt auf ein praktisches Beispiel anwenden konnte, hatte dieses interessante Buch in der Tasche. Der letzte gemeinsame Abend begann mit einem Abendessen in einem italienischen Restaurant, und wo er endete, nachdem die Promovierenden unter sich waren, wird nicht verraten, lässt sich aber evtl. in dem einen oder anderen sozialen Netzwerk recherchieren.

Auch wenn der Abend für die meisten erst früh am Morgen endete, fand man sich am Freitag zum verabredeten Zeitpunkt an der Lichtwiese ein. An diesem Vormittag stellte Christian Iwainsky ein Resumée der Fragebögen vor und die Teilnehmer diskutierten die Möglichkeiten und Herausforderungen von Exascale-Computing in Bezug auf ihre Projekte.

In der *Feedback*-Runde lobten die Teilnehmer die gute Organisation und Abwechslung im Programm. Vor allem die *Hand-On Sessions* um das erlernte Wissen direkt anzuwenden, war für viele wichtig. Gerade der gemischte *Background* der Gruppe war für Diskussionen und das Verständniss aus anderen Blickwinkeln von Vorteil. Das vermittelte Wissen an dem einen oder anderen Tag war für einige Teilnehmer zu detailliert oder schwer zu verdauen, aber jeder konnte einen guten Überblick der wichtigen Themen erhalten und kennt nun Ansprechpartner oder Quellen für weiterführende Informationen. Nicht zu vergessen ist die lobende Erwähnung der sozialen Events an jedem Abend und das resultierende „Vernetzen“ der Teilnehmer untereinander. Ein Kritikpunkt sollte allerdings nicht unerwähnt bleiben: nach dieser sehr intensiven Woche waren alle sehr erschöpft. Ein wenig mehr Luft im Programm wäre für zukünftige *Retreats* wünschenswert.

Abschließend lässt sich feststellen, dass der Horizont der Teilnehmerinnen und Teilnehmer erweitert wurde, nicht zu letzt um kulturelles Wissen – z.B. was ein „Laternchen“ in Darmstadt bedeuten kann. . .

*Seitens des Organisationskomitees lässt sich die hervorragende Mitarbeit der Teilnehmer loben und ein herzlicher Dank gilt den Referentinnen und Referenten, die alle ohne Honorar vorgetragen haben und zum Teil nicht einmal direkt an einem SPPEXA-Projekt beteiligt waren. Und natürlich auch einen Dank an die DFG, durch deren Förderung dieses Retreat erst möglich wurde.*

V. Krupp, C. Iwainky, S. Roller, D. C. Sternel

## **Taumelnde Sphärozyylinder in Stokes-Strömungen**

**Professorin Katarina Gustavsson von der KTH Stockholm war vom 16. bis zum 23. Oktober 2013 zum wiederholten Mal zu Besuch am Lehrstuhl für Systemsimulation (LSS) an der Universität Erlangen. Nachdem sie im Sommersemester 2012 bereits einen BGCE/COSSE-Short Course gehalten hatte (s. Quartl Ausgabe 65), war der Anlass diesmal die Simulation stäbchenförmiger Partikel in Stokes-Strömungen.**

Fallen leichte, benachbarte starre Sphärozyylinder unter Einfluss von Gravitation in einem viskosen Fluid, entstehen sich wiederholende Bewegungs-

muster, wie sie in Abbildung 1 zu sehen sind:



Abbildung 1: Bewegungsmuster von vier fallenden Sphärozyklern in Stokes-Strömungen.

Die vertikal ausgerichteten Sphärozyklern bewegen sich zunächst auseinander, bis sie in horizontaler Richtung orientiert sind. Danach bewegen sie sich wieder aufeinander zu, bis sie die ursprüngliche vertikale Ausrichtung einnehmen. Dieses Verhalten wiederholt sich periodisch.

Im waLLBerla-Framework wird dieses Verhalten mit der mesoskopischen lattice-Boltzmann-Methode zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen simuliert. Der Einfluss der geometrisch voll aufgelösten Starrkörper auf das Fluid wird durch Fluid-Randbedingungen modelliert. Die vom Fluid auf die Starrkörper ausgeübten Kräfte werden durch die „Momentum-Exchange-Methode“ berechnet. Hierbei kann ein breites Spektrum von Aspektverhältnissen simuliert werden.

Die von Professorin Gustavsson entwickelte Methode basiert auf einer „Slender Body“-Formulierung zur Beschreibung der Interaktion ellipsoidförmiger schmaler Starrkörper in Stokes Strömungen. Diese ermöglicht es, das 3-dimensionale Problem in ein System von 1-dimensionalen Integralgleichungen umzuwandeln und diese effizient zu lösen.

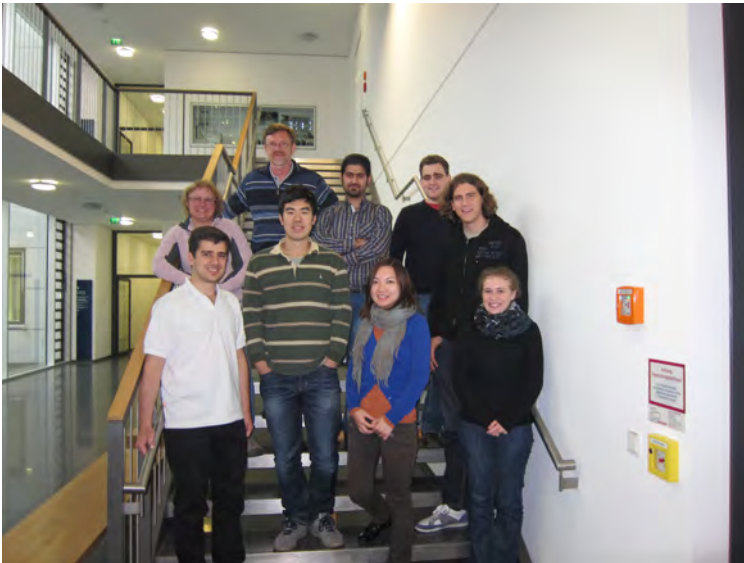
Ziel der Kooperation ist der Vergleich und die Validierung der beiden Simulationsmethoden.

D. Bartuschat

## Kompaktkurs „Parallel Mesh Refinement“

Vom 7. bis 11. Oktober kam Dr. Linda Stals von der Australian National University aus Canberra nach Erlangen, um den COSSE Kompaktkurs mit dem Titel „Introduction to Parallel Mesh Refinement Techniques for the Solution of Partial Differential Equations“ zu halten.

Der Kurs wurde in bewährter Manier abgehalten: Morgens wurde die Theorie in Vorlesungen vorgestellt, nachmittags durften die 8 Teilnehmer selbst einen parallelen Finite-Elemente-Löser mit Mesh-Verfeinerung in Python programmieren.



Zuerst erhielten die Teilnehmer eine Einführung in die Finite-Element-Methode und das CG-Verfahren, aber auch die für viele Teilnehmer noch unbekannte Programmiersprache Python wurde vorgestellt.

Der erste FEM-Löser war dann dank Python erstaunlich schnell implementiert, so dass im zweiten Teil des Kurses dann auf fortgeschrittene Themen wie Gebietsaufteilung, Verfeinerung und Fehlerschätzung eingegangen werden

Beim abschließenden gemeinsamen Essen konnten die Teilnehmer dann von der Dozentin noch interessante Infos über Leben und Studieren in Australien erfahren.

M. Bauer

## Kurz berichtet

- Prof. Ulrich Rüde wurde für 3 Jahre zum Mitglied der DFG-Kommission für IT-Infrastruktur gewählt.

## Bitte notieren

- Am 19. November ist es soweit: Die BGCE wird durch ein Fachgutachtergremium im Rahmen des Weiterführungsantrags evaluiert. Ziel ist es, das erfolgreiche Konzept dieses Honours-Studiengangs über die Maximallaufzeit von 10 Jahren mit Förderung durch das Elitenetzwerk Bayern (ENB), die im ersten Quartal 2015 erreicht werden, hinaus zu implementieren. Die FAU Erlangen-Nürnberg und die TUM haben bereits die vom ENB geforderten formalen Zusagen bzgl. Finanzierung etc. gegeben. Insofern sind alle Beteiligten guter Dinge, dass wir in der nächsten Ausgabe des Quartl die frohe Botschaft von weiteren 5 Jahren BGCE verkünden werden können.
- Die 85. Jahrestagung der GAMM vom 10. bis 14. März 2014 wird von der FAU Erlangen-Nürnberg ausgerichtet. Die Registrierung und die Einführungsveranstaltungen am 10. März werden in der Stadthalle Fürth durchgeführt. Die übrigen Konferenzveranstaltungen vom 11. bis 14. März finden dann im Südgelände des FAU-Campus statt.  
<http://jahrestagung.gamm-ev.de/>



Abgesehen vom Thema „Wahlen“, das im Editorial schon ausführlich behandelt wurde, ist von der diesjährigen Ferienakademie noch zu berichten, dass wir dieses Jahr 30-jähriges Jubiläum hatten, wie diese Urkunde belegt

(der hinzuzufügen ist, dass auch die Ferienakademie den Sarnern sehr dankbar ist für den schönen Rahmen, in dem die Veranstaltung stattfinden kann). Und die Ferienakademie ist auch in ihrem 30. Jahr quicklebendig, was sich auch daran zeigt, dass wir mit zwölf Kursen plus einem Doktorandenkurs und insgesamt deutlich über zweihundert Beteiligten eine im Vergleich zu den Vorjahren sehr große Ferienakademie hatten.

S. Zimmer

---

## Quartl\* - Impressum

### **Herausgeber:**

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

### **Redaktion:**

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

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

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

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **31.01.2014**

---

\* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)