

Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
Bayes'sche Inversion am Beispiel des Fadenpendels	6
„CoolMUC-3“ - Neuer energieeffizienter Hochleistungsrechner am LRZ	19
Summer of Simulation 2017	25
Supercomputing 2017: „Best Paper Awards“	29
Ferienakademie 2017	31
BGCE/COME/CSE: Absolventenfeier 2017	34
New preCICE Release v1.0.0	36
SPPEXA News: Konferenzen zum Sommerbeginn 2017	38

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

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

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

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

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.03.2018**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartl: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

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



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

Editorial

Aus aktuellem Anlass befasst sich das Editorial diesmal mit der Informatik. Für uns war es die Nachricht des angelaufenen Studienjahres, und sie platze mitten in die erste institutionelle Evaluierung unserer Fakultät: 5399 Studierende sind im laufenden Wintersemester in den verschiedenen Bachelor- und Master-Studiengängen der Fakultät für Informatik der TUM eingeschrieben – Austauschstudierende und Promovierende nicht mitgezählt. Wir erinnern uns: Im Jahr 2008 waren es unter 1900. Das ist natürlich ein neues Allzeit-Hoch, und es bringt ein paar Superlative mit sich: hinsichtlich Anzahl an Studierenden sind wir nun die größte Fakultät der TUM, größte Informatik-Fakultät in Deutschland (und wahrscheinlich – sieht man mal von China und Indien ab – auch weltweit). Soeben meldet die Gesellschaft für Informatik (GI) deutschlandweit rückläufige Anfängerzahlen – bei uns hingegen gingen die Anfängerzahlen im Bachelor nochmals leicht (auf nun 1030) und im Master nochmals deutlich hoch (auf jetzt 975). Soweit die Zahlen, die natürlich eine Reihe von Fragen aufwerfen.

Ist die Entwicklung diesmal nachhaltig? Prognosen sind immer so eine Sache, aber im Gegensatz zum Hype vor der Jahrtausendwende, vor dem Platzen der so genannten dot-com-Blase, haben wir es aktuell mit einer Entwicklung zu tun (Stichwort Digitalisierung), die praktisch alle Bereiche von Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft erfasst hat. Das wird nicht in fünf Jahren vorüber sein. Es wird wahrscheinlich nicht dauerhaft die Ströme so heftig in Richtung Informatik lenken wie derzeit, aber die Informatik wird als treibende methodische Kraft dahinter weiter von der Entwicklung profitieren.

Sind große Zahlen ein Wert an sich? Sicherlich nicht, aber sie sind schon eindeutig positiv zu werten. Sie drücken die Attraktivität aus – des Standorts München, der TUM sowie deren Informatik; sie sichern einen ganz wesentlichen Standortfaktor ab – den Nachwuchs, den Wissenschaft wie Wirtschaft so dringend benötigen (und die Industrie registriert das und kommt, sofern sie nicht eh schon da ist, nach München und auf den Campus Garching); die Zahlen beschleunigen somit die Dynamik der Genannten; und sie stärken unsere Argumente im Wettbewerb um Ressourcen.

Der kommende März wird ein spannender SPPEXA Monat.

SPPEXA @ SIAM PP – 07. bis 10. März 2018

Zunächst ist SPPEXA großflächig auf der SIAM PP (Parallel Processing in Scientific Computing) in Tokyo vertreten – auch durch unsere Partner in Japan. Folgende Minisymposia werden durch SPPEXA Projekte (co-)organisiert:

- Large-Scale Simulation in Geodynamics,
- Modern Techniques to Bridge Flexibility and Performance for Parallel Numerical Codes,
- Parallel Multigrid Methods and Iterative Solvers,
- Performance Engineering from the Node Level to the Extreme Scale,
- Performance in Particle Simulations: Parallelism, Prediction, Auto-Tuning,
- Scalable Eigenvalue Computation,
- Solving Complex Partial Differential Equations on Massively Parallel Machines
- ... und sicherlich noch viele andere.

Annual Plenary Meeting – 21. und 22. März 2018

Anschließend findet auch schon unser Jahrestreffen in Garching statt. Innerhalb von 2 Tagen trifft sich das gesamte SPPEXA Konsortium für einen intensiven Austausch. Neben kurzen Vorträgen aller Projekte zum aktuellen Stand, wird es auch wieder eingeladene Sprecher und einen Gender-Workshop geben. Die Anmeldung wird in Kürze freigeschaltet. Über nähere Informationen informieren wir Sie dann auf www.sppexa.de.

Benjamin Uekermann

Führt das nicht zu immer größeren logistischen Problemen? Natürlich, denn keine Infrastruktur kann so schnell und stark wachsen wie die Studierendenzahlen dies tun, ob es nun um Hörsäle, Übungsgruppen, Arbeitsplätze, wissenschaftliches Personal, Beratungskapazitäten oder administratives Personal geht. Zum einen muss man eben ausbauen, wo es geht – das beschlossene Hörsaalgebäude „Interim-2“, die Neue Mitte „Galileo“ mit einem neuen Audimax mit 1400 Plätzen sowie 18 weiteren Räumen mit Kapazitäten zwischen 30 und 300, verschiedene Ausbauprogramme oder der Aufwuchs in der Professorenschaft durch den TUM-Erfolg im Programm „1000 Tenure Track Professuren“ Programm des Bundes und der Länder, die Bereitstellung von mehr Mitteln für den Tutorienbetrieb, etc. etc., all dies hilft. Zum anderen muss uns allen aber auch klar sein, dass es schon Grenzen des Wachstums gibt, zumindest eines gesunden Wachstums, die man nicht ignorieren darf.

Führt das Wachstum nicht zu Qualitätsproblemen? Natürlich wird man bei doppelt so vielen Studierenden irgendwo auch doppelt so viele schwächere haben, die mehr Aufwand bedeuten. Aber es gibt eben auch doppelt so viele im oberen Segment. Eine Verschlechterung der Kohorten zeichnet sich nicht ab, zumindest nicht jenseits des Bauchgefühls, dass früher alles besser war. Vielmehr hat sich die durchschnittliche Abiturnote unserer Anfängerinnen und Anfänger in den letzten zehn Jahren stärker verbessert als der bayerrische Abschnitt insgesamt. Außerdem haben wir nicht an der Größe der Übungsgruppen gerüttelt – was Raum-, Personal- und Mittel-technisch nicht einfach, aber zu schaffen ist.

Es gibt schon erste lustige Vorschläge, die allerdings nur im Quartl ihren berechtigten Platz haben: zum Beispiel einen Gebäudetausch zwischen Maschinenwesen und Mathematik & Informatik. Im Ernst: Es muss sich was tun, aber das wird man auch ohne Mord und Totschlag hinkriegen.

Heben wir jetzt ab? Nein, sicher nicht. Immerschön auf dem Teppich bleiben. Andere Fächer sind auch toll!

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen, liebe Leserinnen und Leser, eine ruhige und (zumindest etwas) besinnliche Weihnachtszeit, einen guten Rutsch und ein rundum erfreuliches Neues Jahr 2018, das hoffentlich wieder hinreichend Nahrung für Quartl-Sottisen bereithält. In Quartl-Landen wird 2018 natürlich dominiert vom Mega-Jubiläum „150 Jahre TUM“. Wobei das

mit den 150 historisch wohl nicht ganz korrekt ist. Zwar stimmt es, dass im April 1868 der Bayerische König Ludwig II. die Gründungsurkunde der „Königlich-Bayerischen Polytechnischen Schule zu München“ unterzeichnete – aber war das auch wirklich der Anfang? Bereits im achten Jahrhundert wurde die Benediktinerabtei Weihenstephan eingerichtet, und um das Jahr 1040 gründeten die frommen Mönche dann dort die Brauerei Weihenstephan – heute die älteste ununterbrochen Gerstensaft produzierende Brauerei weltweit. Da diese heute bekanntermaßen zur TUM gehört, ist doch irgendwie auch die TUM so alt, und verweist damit die vermeintlich ältesten Universitäten Europas wie Bologna (1088) oder Prag (1348) klar auf die Plätze. Sie sehen – an Superlativen wird es nicht fehlen. Frohes Fest!

Hans-Joachim Bungartz.



Figure 1: We also made stickers of our new preCICE logo. For the design, a big thanks to SOSK.it

References

- [1] Bungartz, H.-J., Lindner, F., Gatzhammer, B., Mehl, M., Scheufele, K., Shukaev, A. and Uekermann, B. preCICE – A fully parallel library for multi-physics surface coupling. *Computers and Fluids*, 141:250–258, 2016.
- [2] Uekermann, B., Bungartz, H.-J., Cheung Yau, L., Chourdakis, G. and Rusch, A. Official preCICE Adapters for Standard Open-Source Solvers. *Proceedings of the 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia*, 2017.

New preCICE Release v1.0.0

After a hard working summer, we are happy to finally announce the new preCICE release v1.0.0.

preCICE is a coupling library for partitioned multi-physics simulations, including, but not restricted to fluid-structure interaction and conjugate heat transfer simulations. preCICE couples existing simulation software in a minimally invasive way and is open-source under the LGPL3 license. We reported on the development of preCICE during the last decade in Quartl number 80. We provide official ready-to-use adapters for many community code: ANSYS Fluent, CalculiX, Code_Aster, COMSOL, and SU2. An official OpenFOAM adapter will be available end of this year. Adapters for in-house codes can be written easily, already in as few as 30 lines of code.

After several years of working with continuous integration, we decided to come back to a semantic versioning to handle the increasing numbers of users and their requests. For this first new release, we decided to boil preCICE down to the features that our users actually use, leaving out older, currently not thoroughly tested features (such as the geometry interface or the file communication). On the other side, all included features have been ported to the new parallelization scheme, such that the old server mode can be regarded as deprecated. At the same time, we have added many checks to prevent false user input and make preCICE fully usable for non-developers.

How to find out more:

- Open-source project: www.precice.org
- Source code: github.com/precice
- Subscribe to the preCICE mailing list
- Follow us on Research Gate

Benjamin Uekermann, Benjamin Rüth

Iterationsschleife

N=25

4. Dezember 2017

Die Iterationsschleife lahm und gerät in den Strudel der Zeit. Die Realität hat sie längst überholt noch bevor der Autor den Gedanken ausformuliert und zu Papier (zu Laptop?) bringen konnte. Angesichts von #metoo sollte diesmal die Frage diskutiert werden, ob und wenn ja warum der Prinz kein Recht hatte, Dornröschen zu küssen. Vorzubringen wäre hier das Recht auf die eigene Persönlichkeit in das der Prinz unteilbar und massiv mit seinem Kuss eingegriffen hat. Die Degradierung der Prinzessin zum Objekt seiner Kussbegierde kommt erschwerend hinzu. Darüber hinaus wurde das Recht auf sexuelle Selbstbestimmung massiv verletzt, da der Prinz ja über die sexuellen Präferenzen der schlafenden Prinzessin nicht informiert war und damit Gefahr lief, eine weitere Strafanschärfung durch Küssen einer lesbischen oder auch intersexuellen Prinzessin ohne deren Zustimmung zu gewärtigen.

Die Debatte hat sich erledigt, denn eine engagierte Mutter hat wenige Tage vor Erscheinen von N=25 das Thema mutig aufgegriffen und ein Verbot des Märchens gefordert.^a

Man könnte lächelnd zur Tagesordnung übergehen, wäre da nicht die merkwürdige Frage, die einen beim Vorlesen Grimmscher Märchen immer wieder in den Sinn kommt. Denn ehrlich gesagt, ist das doch alles recht veraltet was da in den Märchen passiert. Ob dann nicht das Tradieren solcher Rollenbilder auch eine Mitschuld daran hat, dass es beinahe illusorisch ist, in Deutschland den Anteil der weiblichen Studierenden in den sogenannten MINT-Fächern zu erhöhen?

Die Wahrscheinlichkeit, im Studium nach langem Schlaf von einem Prinzen zur Magistra geküsst zu werden ist doch gering. Und wie steht es mit den männlichen Studierenden die sich einem Anforderungsprofil gegenüber sehen, dass so gar nichts mit dem kühnen Durchdringen von Dornenhecken oder gar dem Töten von Drachen zu tun hat? Wie viel Grimm steckt in uns? Wie grimmig ist Deutschland?

M. Resch

^ahttp://www.pnp.de/nachrichten/panorama/2752948_Mutter-beklagt-sexuelle-Belaestigung-bei-Dornroeschen.html

Bayes'sche Inversion am Beispiel des Fadenpendels

1 Hintergrund

Am 21. Oktober 2017 fand der Tag der Offenen Tür im Forschungszentrum Garching statt. Doktoranden aus dem IGSSSE-Projekt BAYES und Mitarbeiter des Lehrstuhles für Numerische Mathematik nutzten diese Gelegenheit, um ihre Forschung in der Öffentlichkeit vorzustellen. Arbeitsschwerpunkt ist die Bayes'sche Inversion - das Schätzen oder "Lernen" von Parametern in mathematischen Modellen mit Methoden der Bayes'schen Statistik. Eine solche Inversion sollte ganz konkret mit vor Ort gesammelten Daten durchgeführt werden. Ein hinreichend einfaches und zugleich interessantes Problem für einen solchen Aufbau ist die Schätzung der Erdbeschleunigung anhand von Positions- und Zeitmessungen mit einem Fadenpendel.

Anhand dieses Experimentes möchten wir die Bayes'sche Inversion genauer betrachten. Wir erklären zunächst allgemeine statistische Schätzprobleme und deren Bayes'sche Lösung. Danach diskutieren wir das mathematische Modell eines gedämpften Pendels und das entsprechende Schätzproblem. Schließlich werden wir erläutern, wie man dieses inverse Problem in die Sprache der Bayes'schen Statistik übersetzt.

2 Statistisches Schätzen und Lernen

Aufgabenstellung der Statistik. Gegeben sei ein Datensatz d . Die Daten werden mit einem parametrisierten Zufallsexperiment erzeugt, d.h., sie werden als Realisierung einer Zufallsvariable aufgefasst. Diese Zufallsvariable hat eine Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{L}_θ . Hierbei ist θ ein unbekannter, aber fester (deterministischer) Parameter. Aufgabe der Statistik ist es nun, mit Hilfe des Datensatzes d den Parameter θ zu identifizieren.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{L}_θ ist typischerweise mittels einer



Abbildung 1: Interne Absolventenfeier COME & CSE: Absolventen von COME (links) und Absolventen von CSE (rechts).



Abbildung 2: Interne Absolventenfeier COME & CSE: Gastredner Dr. Stephan Sicklinger (links) und Verabschiedung von Alfredo Parra (rechts).



nicht nur, beim Elitecup, dem jährlichen Fußballturnier des ENB :-)). Wir wünschen Alfredo Parra an seiner neuen Wirkungsstätte in Berlin beruflich wie privat das Allerbeste.

Absolventenfeiern generell leisten nicht nur für die Studierenden einen wichtigen Beitrag und einen formalen Abschluss einer Lebensphase, sie helfen auch den "zurückbleibenden" Dozenten und Koordinatoren bei allem Abschied von tollen Studierenden und Kollegen, das lachende mehr als das weinende Auge in Erinnerung zu behalten.

Tobias Neckel, Michael Rippl

BGCE/COME/CSE: Absolventenfeier 2017

Die Absolventenfeier des ENB fand dieses Jahr erst am 15. Dezember statt, diesmal in Würzburg. Dort wurden wieder die vielen Absolventen von den mittlerweile 25 Elitestudiengängen, 7 internationalen Doktorandenkollegs und aus insgesamt über 1900 Max-Weber-Stipendiaten verabschiedet und in feierlichem Rahmen mit einem leckeren Buffet gebührend gefeiert.

Die zentrale ENB-Absolventenfeier ersetzt aber nicht die eigene, familiärrere Absolventenfeier, die die Studiengänge „Computational Mechanics“ (COME) und „Computational Science and Engineering“ (CSE) zusammen abhalten. Fachlicher Austausch, mehr Platz für Familienangehörige der Absolventen und ein lockeres Klima prägten die Veranstaltung am 23. November dieses Jahres. Gastgeber war dieses Jahr COME, wobei aufgrund diverser Baumaßnahmen in der Innenstadt auf den Campus Garching ausgewichen werden musste. Das ist konsistent zu letztem Jahr, wo CSE als Gastgeber wiederum nur in der Innenstadt raumtechnisch fündig wurde.

Gastredner war heuer Stephan Sicklinger, selbst COME- und BGCE-Absolvent und ehemaliger Doktorand der BGU-Fakultät der TUM und inzwischen bei der BMW Group tätig. Stephan Sicklinger zeigte ein fachlich interessantes und abwechslungsreiches Potpourri an Aktivitäten vom Ende seines Studiums bis zur aktuellen Tätigkeit bei BMW, dessen verbindendes Element die Kopplung verschiedener Physiksimulationen und zugehöriger Codes war. Das Highlight der Veranstaltung waren auch 2017 die studentischen Vorträge, die alle Facetten von abwechslungsreich über emotional und lustig bis hin zu feierlich boten. Insbesondere die Anekdoten aus dem Studentenleben ließen erahnen, wie gut und eng die Gemeinschaft der Studierenden und wie divers und horzionterweiternd die Internationalität der Programme ist.

Die interne Absolventenfeier war auch ein passendes Format, um den lang-jährigen CSE- und BGCE-Koordinator Alfredo Parra feierlich zu verabschieden. Michael Rippl bedankte sich im Namen aller Beteiligten für Alfredos herausragendes Engagement und seinen Einsatz (auch, aber natürlich längst

Wahrscheinlichkeitsdichte gegeben, d.h.

$$\mathcal{L}_\theta(A) = \int_A L(a|\theta) da,$$

für ein beliebiges Ereignis A . In diesem Fall beschreibt man \mathcal{L}_θ durch die Dichte $L(\cdot|\theta)$, welche auch *Likelihoodfunktion* genannt wird.

Beispiel 1. Gegeben sei eine Münze. Eine Seite der Münze nennen wir Kopf, die andere Seite nennen wir Zahl. Wir möchten wissen, wie gross die Wahrscheinlichkeit ist, dass nach einem Münzwurf die Kopfseite nach oben gedreht liegt. Das Zufallsexperiment ist das 20malige Werfen der Münze. In diesem Zufallsexperiment ist der Parameter $\theta \in [0, 1]$ die Wahrscheinlichkeit, dass die Kopfseite oben liegt. Ein möglicher Datensatz d ist

$$d = \begin{pmatrix} \text{Kopf, Zahl, Zahl, Zahl, Kopf} \\ \text{Kopf, Zahl, Kopf, Kopf, Zahl} \\ \text{Zahl, Kopf, Zahl, Zahl, Kopf} \\ \text{Kopf, Zahl, Kopf, Kopf, Kopf} \end{pmatrix}.$$

Die Likelihoodfunktion ist in diesem Beispiel

$$L(d|\theta) := \theta^{\#\text{Kopf}(d)} (1 - \theta)^{\#\text{Zahl}(d)}$$

wobei $\#\text{Kopf}(d)$ angibt, wie oft Kopf in d vorkommt, und $\#\text{Zahl}(d)$ angibt, wie oft Zahl in d vorkommt.

2.1 Frequentistische Inferenz

In der klassischen, frequentistischen Statistik studiert man *Schätzer*. Ein Schätzer ist eine Funktion $\hat{\theta}(d)$, die den unbekanntem Wert θ schätzt basierend auf dem Datensatz d . Ist die Likelihoodfunktion L bekannt, kann man zum Beispiel den *Maximum-Likelihood-Schätzer* konstruieren:

$$\hat{\theta}(d) = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} L(d|\theta) = \begin{cases} \text{derjenige Wert } \theta, \text{ für den die} \\ \text{Daten } d, \text{ laut Funktion } L, \text{ die} \\ \text{größte Wahrscheinlichkeit haben.} \end{cases}$$

Beispiel 1. (Fort.) Der Maximum-Likelihood (ML)-Schätzer im Münzwurf-Beispiel ist

$$\hat{\theta}(d) = \frac{\#\text{Kopf}(d)}{20} = \frac{11}{20} = 0.55. \quad (1)$$

Basierend auf dem ML-Schätzer können Hypothesentests durchgeführt werden. Angenommen, die Hypothese lautet $\theta = 0.5$. Mit Hilfe des Schätzers und von Konfidenzintervallen lässt sich nun beurteilen, ob der echte Wert signifikant abweicht von 0.5, oder ob es keine hinreichenden Belege für eine derartige Aussage gibt. Wir verfolgen diesen Ansatz hier nicht weiter.

2.2 Bayes'sche Inferenz: Wissen und Lernen

Wikipedia bezeichnet *Lernen* als “[...] den absichtlichen (intentionales Lernen) und den beiläufigen (inzidentelles und implizites Lernen) Erwerb von neuen Fertigkeiten.” *Lernt* man den Wert eines Parameters in einem statistischen Problem, so liefert dieses erlernte Wissen oftmals eine bessere Schätzung des Parameters. Wir erläutern jetzt näher, was damit gemeint ist.

Den Schätzwert des Parameters kann man im Allgemeinen als einen Wissensstand bzgl. des Parameters bezeichnen. In der frequentistischen Statistik ist dieser Wissensstand der Wert des Schätzers und damit eine feste Zahl. In der Bayes'schen Statistik wird der Wissensstand durch eine

das Feedback der TeilnehmerInnen selber motiviert uns alle, den nicht immer ganz unaufwändigen Prozess für einen erfolgreichen Abschluss einer Ferienakademie auch in den kommenden Jahren weiterzuführen.



Abbildung 1: Teilnehmer der FA: Hohe Gipfel und hohe Motivation.

Denn wie immer gilt “nach der Ferienakademie ist vor der Ferienakademie”: Die Planungen für das Kursprogramm in 2018 sind aktuell bereits fast komplett abgeschlossen und versprechen auch für nächstes Jahr wieder sehr interessante und vielfältige Kurse. Wir freuen uns bereits jetzt darauf! Und alle Oktoberfestfans seien beruhigt: Nachdem die FA immer am Sonntag des ersten Wiesenwochenendes startet und am Freitag vor dem letzten Wiesenwochenende endet, gibt es also durchaus Feiernmöglichkeiten neben einer Teilnahme an der FA.

Tobias Neckel

bis zwei Gastdozenten. Die Anzahl studentischer Teilnehmer je Kurs beträgt ca. 15. Kurse finden typischerweise im Seminarformat oder als Projektkurse statt, die Teilnehmer gestalten also einen erheblichen Teil des Programms selbst. Die beteiligten Fachrichtungen der oft sehr interdisziplinär orientierten Kurse sind: Elektro- und Informationstechnik, Biologie, Chemie, Informatik, Ingenieurwissenschaften, Mathematik, Medizin, Philosophie, Physik, usw.

2017 gab es insgesamt elf Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen:

1. Moderne Algorithmen: Randomisiert, online, approximativ
2. Creating Animations by Machine Learning and Simulation
3. Physik und Elektronik im Alltag
4. From Room Acoustics to Ultrasound – Modeling, Simulation and Measurements
5. Let's play! Simulated Physics for Games and Movies
6. Literatur und Naturwissenschaft: Ethik, Ästhetik, Kognition
7. Nanoelektronik: Von CMOS bis zu Molekularen Schaltern
8. Energiematerialien / Energy Materials
9. Compressed Sensing
10. Statistical Methods in Risk Management
11. Systemidentifikation bei Unsicherheiten - Nix g'naus woas ma ned

Außergewöhnlich viele Bewerbungen von qualitativ auch sehr tollen Studierenden machten es den KursleiterInnen und der Auswahljury im Vorfeld nicht leicht. Am Ende hatte jeder Kurs aber eine wirklich gute Kombination von Teilnehmern, sodass von den DozentInnen der Kurse durchweg sehr positive Rückmeldungen in der Abschlussbesprechung kamen. Und auch

Wahrscheinlichkeitsverteilung ausgedrückt. Im Gegensatz zur frequentistischen Beschreibung erlaubt die Bayes'sche Beschreibung, Unsicherheiten zu berücksichtigen.

Unsicherheiten sind im Grunde deterministisch - der genaue Wert ist unbekannt, nicht zufällig. Die Bayes'sche Wahrscheinlichkeitstheorie liefert eine Interpretation für Wahrscheinlichkeiten, die nicht auf dem Konzept des "Zufalls" beruht: Angenommen, einer Person ist nicht bekannt, ob ein bestimmtes Ereignis eintritt. Die Person ordnet dem Eintreten dieses Ereignisses die Wahrscheinlichkeit P zu. Der Wert P ist folgendermaßen definiert: Wettet die Person mit einer anderen Person und setzt auf den Eintritt des Ereignisses, so ist P derjenige Preis, den sie maximal an die andere Person zu zahlen bereit wäre, um beim Eintreten des Ereignisses eine Geldeinheit zu gewinnen.

Beispiel 1. (Fort.) Der Münzwurf ist ein physikalisch präzise beschreibbares Experiment. Leider ist die physikalische Beschreibung sehr kompliziert und erfordert viele Informationen, wie Abwurfgeschwindigkeit, Luftwiderstand und Gewicht der Münze. Deshalb gehen wir in der Regel davon aus, dass Kopf oder Zahl jeweils mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit "zufällig" eintreten. Dies ist im Prinzip eine Bayes'sche Beschreibung des physikalischen (nicht-zufälligen) Experiments.

Einige Wahrscheinlichkeitsverteilungen, zusammen mit ihren Interpretationen als Wissensstände sind in Abbildung 1 dargestellt. Damit ist der Begriff *Wissen* bzw. *Wissensstand* fürs Erste geklärt und wir können übergehen zum *Lernen*.

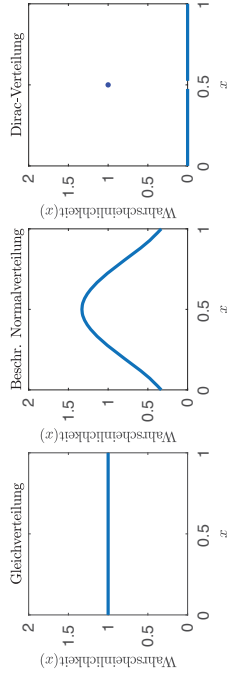


Abbildung 1: Wissensstand bezüglich des Parameters θ . Gleichverteilung (links): Keine Informationen über θ . Beschränkte Normalverteilung (mitte): Tendenz zum Wert $\theta = 0.5$, aber noch immer deutliche Unsicherheiten. Dirac-Verteilung (rechts): Keine Unsicherheiten, der Wert $\theta = 0.5$ ist bekannt.

Das Lernen ist, wie in Abbildung 2 beschrieben, ein Prozess. Dieser startet bei einem alten Wissensstand und endet mit einem neuen Wissensstand. Den alten Wissensstand bezeichnet man als *A-Priori-Wissen* und den neuen Wissensstand als *A-Posteriori-Wissen*. Beide Wissensstände werden wieder mittels Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben. Die entsprechenden Dichten nennen wir A-Priori-Verteilung (prior) und A-Posteriori-Verteilung (post). Der Lernprozess wird bestimmt durch das zu lernende Material. Das sind Daten, Modelle und Ähnliches, welche über die Likelihoodfunktion des statistischen Modelles gegeben sind.

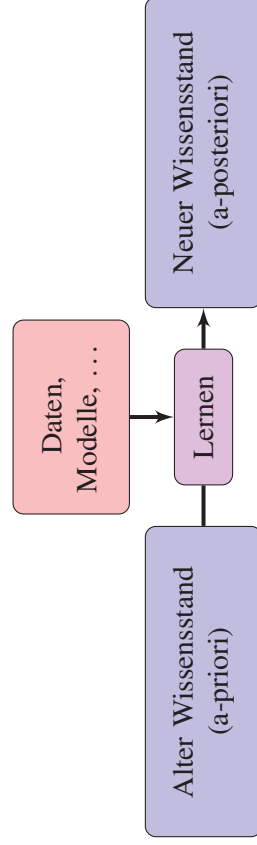


Abbildung 2: Lernen als Übergang von einem alten Wissensstand zu einem neuen Wissensstand basierend auf Daten und Modellen.

Fassen wir zusammen: Der Lernprozess besteht aus der Konstruktion der A-Posteriori-Verteilung unter Verwendung der A-Priori-Verteilung und der

Ferienakademie 2017

Die letzten beiden Wochen des September sind in Süddeutschland seit Jahrzehnten legendär besetzt. Nein, nicht mit dem Oktoberfest (das in dem Zeitraum zwar auch stattfindet), sondern mit der Ferienakademie³, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird.

Für alle die, die mit dem Format dieser Sommerschule nicht so vertraut sind, hier nochmal das Wichtigste in Kürze:

- Die Ferienakademie gibt es seit 1984.
- Traditionell findet die FA in der Oktoberfestzeit (zwei Wochen vor dem ersten Sonntag im Oktober) im schönen Sarntal in Südtirol in fünf Gasthöfen statt.
- Das Konzept ist—wie der Name schon sagt—eine Kombination aus *Ferien* und *Akademie*: Sehr gute und motivierte Studierende sollen neben spannenden Wissenschaftsthemen die Möglichkeit zu intensivem Kontakt untereinander sowie zu Professoren und Mitarbeitern über Standorte und Disziplinen hinweg erhalten. Neben Wanderungen gehören auch Schach- und Tischtennisturniere sowie der Lauf um den Durmholzer See zum etablierten Programm der FA.
- Wer bezahlt die Ferienakademie?
Interessierte Unternehmen können die FA durch Spenden unterstützen. Fördervereine der drei veranstaltenden Universitäten tragen die FA mit, und auch aus Eigenmitteln der drei veranstaltenden Universitäten wird die FA finanziert.
- Was für Kurse gibt es auf der FA?
Typischerweise werden zwischen neun und zwölf Kurse pro Jahr angeboten. Jeder Kurs wird im Regelfall von zwei Professoren aus verschiedenen Universitäten durchgeführt, dazu kommen häufig noch ein

³www.ferienakademie.de



Abbildung 2: v.l.n.r.: Michael Heroux(SC Chair), Klaudius Scheufele, Miriam Mehl, Amir Gholami, George Biros, Anne Benoit (SC Chair)

Neben diesem Münchner Erfolg gab es auch im benachbarten spröden Schwa- ben Anlass zur Freude: Amir Gholami von der University of Texas at Austin gewann mit seinen Teammitgliedern Klaudius Scheufele (Universität Stutt- gart), Andreas Mang (UT Austin), Christos Davatzikos (University of Penn- sylvania), Miriam Mehl (Universität Stuttgart, bis 2013 TUM, ehemalige IAS-Fellow an der TUM) und George Biros (UT Austin, ebenfalls ehemaliger IAS-Fellow an der TUM) den Preis für das Best Student Paper. Thema der Arbeit war hier die inverse Simulation des Wachstums von Gehirntumoren. Dazu gibt es beim TACC (Texas Advanced Computing Center) einige weitere Informationen.²

Miriam Mehl, Michael Bader

²<https://www.tacc.utexas.edu/-/scientists-enlist-supercomputers-machine-learning-to-automatically-identify-brain-tumors>

Likelihoodfunktion. Konkret verwendet man dazu die *Bayes-Formel*

$$\text{post}(\theta|d) = \frac{L(d|\theta)}{\text{evid}(d)} \times \text{prior}(\theta). \quad (2)$$

Der Nenner $\text{evid}(d)$ heisst *Evidenz* und ist eine Normalisierungskonstante. Die Bayes-Formel gilt für $0 < \text{evid}(d) < \infty$. Sie trägt den Namen des englischen Pfarrers und Mathematikers Thomas Bayes (1702-1761), wurde von ihm aber nur in einem Spezialfall diskutiert. Die o.g. allgemeinere Formel stammt vom französischen Mathematiker und Astronomen Pierre Simon Laplace (1749). In Abbildung 3 ist Laplace zu sehen zusammen mit der Textpassage aus seinem Buch “Théorie analytique des probabilités” (1812, S. 182), in welchem die Bayes-Formel eingeführt wird. Es gibt nur ein Bild von Thomas Bayes, allerdings ist dessen Authentizität zweifelhaft.



ce qui est le principe énoncé ci-dessus, lorsque toutes les causes sont à priori également possibles. Si cela n'est pas, en nommant P la probabilité à priori de la cause que nous venons de considérer; on aura $E = Hp$; et en suivant le raisonnement précédent, on trouvera

$$P = \frac{Hp}{S.Hp}$$

ce qui donne les probabilités des diverses causes, lorsqu'elles ne sont pas toutes, également possibles à priori.

Pour appliquer le principe précédent à un exemple, supposons qu'une urne renferme trois boules dont chacune ne puisse être que.

Abbildung 3: Pierre Simon Laplace (links; Quelle: Wikipedia.org). Textstelle, in der die Bayes-Formel eingeführt wird (rechts; Quelle: Google Books).

Beispiel 1. (Fort.) Verwenden wir die Verteilungen aus Abb. 1 als A-Priori-Verteilungen und die Likelihoodfunktion aus dem Münzwurf-Beispiel, so erhalten wir die A-Posterior-Verteilungen in Abb. 4. Dies entspricht dem Bayes'schen Lernen der Wahrscheinlichkeit, dass die Münze nach einem Wurf mit dem “Kopf” nach oben liegt.

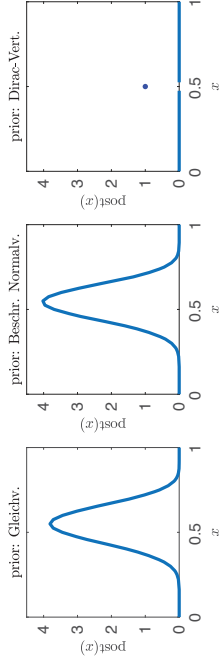


Abbildung 4: A-Posteriori-Verteilungen im Beispiel 1. Die entsprechenden A-Priori-Verteilungen sind in Abb. 1 zu sehen.

Die linke und die mittlere Verteilung unterscheiden sich kaum, wohl weil die A-Priori-Verteilungen beide recht uninformativ sind. Bei der rechten Verteilung waren wir uns schon vor dem Betrachten der Daten absolut sicher, dass der Wert $\theta = 0.5$ korrekt ist. Dieser Wissensstand kann nicht verändert werden.

Die Auswertung der Bayes-Formel erfordert insbesondere die (numerische) Berechnung der Modellevidenz

$$\text{evid}(d) = \int L(d|\theta)\text{prior}(\theta)d\theta. \tag{3}$$

Dies kann beispielsweise durch Monte Carlo, Quasi-Monte Carlo oder Quadraturverfahren geschehen. Die Modellevidenz ist jedoch oft sehr klein, was ihre Auswertung teuer oder sogar unmöglich macht. Es gibt auch Methoden, welche die Modellevidenz nicht auswerten müssen, wie zum Beispiel Markov Chain Monte Carlo.

Supercomputing 2017: beide „Best Paper Awards“ gehen in den Süden

Trotz der Dominanz asiatischer Gruppen, insbesondere chinesischer, gab es auf der diesjährigen Supercomputing Konferenz in Denver (SC17, www.sc17.org) auch für süddeutsche Teams einiges zu feiern. Die Gruppe um den Erdbbensimulationscode SeisSol – Carsten Uphoff, Sebastian Rettenberger und Michael Bader von der TUM, sowie Stephanie Wollherr, Thomas Ulrich, Elizabeth Madden und Alice Gabriel von der LMU – wurde für Ihren Artikel zur Simulation des Sumatra-Erdbebens von 2004 mit dem „Best Paper Award“ ausgezeichnet. Das GCS veröffentlichte ein ausführliches News Feature zur Simulation:¹

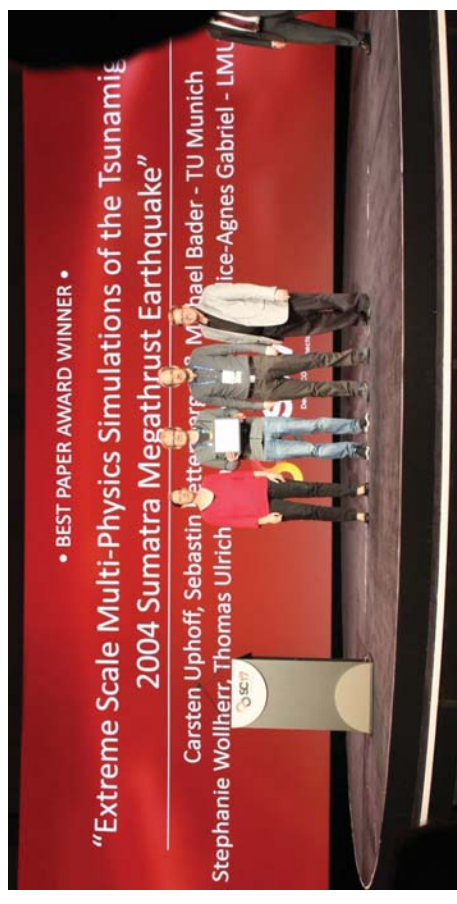


Abbildung 1: v.l.n.r.: Anne Benoit, Carsten Uphoff, Michael Bader, Michael Heroux

¹http://www.gauss-centre.eu/SharedDocs/Meldungen/GAUSS-CENTRE/EN/2017/news_18_Largest_Multi-physics_Earthquake.html

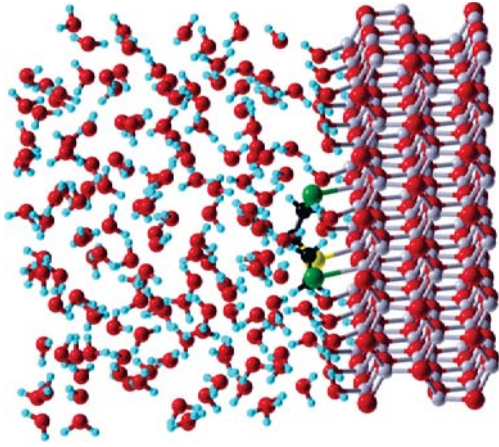


Figure 4: Sulfur mustard adsorbed on a zinc oxide surface.

In January, the participants will submit their final reports. Due to the great success and positive feedback from the participants, the LRZ will prepare the next instance of the “Summer of Simulation”, hopefully with new exiting projects to come.

Acknowledgments: We are indebted to the SuperMUC steering committee, particularly Prof. Wellein for his support and the referees for their fast review of the projects.

Gerald Mathias, Momme Allalen



Abbildung 5: Linkes Bild: Das Fadenpendel, welches vom BAYES-Team in der Mainstrale des Mathematikgebäudes am Campus Garching aufgehängt wurde. Rechtes Bild: Mitglieder des Pendel-Teams: Elizabeth Bismut, Jonas Latz und Matthieu Bulté. Nicht im Bild sind Ionuț-Gabriel Farcaș, Mario Parente und Laura Scarabosio.

3 Mathematische Modelle und inverse Probleme

Mathematische Modelle werden in den Natur-, Ingenieur-, Wirtschafts- und Sozialwissenschaften verwendet. Beispielsweise kann ein solches Modell eine zeitabhängige Funktion sein, welche für jeden Zeitpunkt das Verhalten eines Objektes beschreibt.

Beispiel 2. Wir betrachten ein Fadenpendel, dessen Schwingungen einer Dämpfung unterliegen. Die Dämpfung wird zum Beispiel durch den Luftwiderstand oder die Reibung des Fadens verursacht. Ein Fadenpendel ist in Abbildung 5 zu sehen. Mathematisch lässt sich die Bewegung des gedämpften Pendels als Anfangswertproblem beschreiben:

$$\begin{aligned} \ddot{\varphi}(t) &= -b\dot{\varphi}(t) - \frac{\theta}{\ell} \sin(\varphi(t)), \\ \varphi(0) &= \varphi_0, \\ \dot{\varphi}(0) &= 0. \end{aligned}$$

Die *Lösung* dieses Anfangswertproblems ist eine Funktion $\varphi(t)$, die den Auslenkungswinkel des Pendels zum Zeitpunkt t beschreibt. Weiter sind:

φ_0 der Auslenkungswinkel des Pendels zum Zeitpunkt 0,

$\dot{\varphi}(t)$ die Winkelgeschwindigkeit zum Zeitpunkt t ,

$\ddot{\varphi}(t)$ die Winkelbeschleunigung zum Zeitpunkt t ,

b ein Dämpfungsparameter,

θ die Erdbeschleunigung und

ℓ die Länge des Pendels.

Das Auswerten mathematischer Modelle erfordert oft numerische Simulationen auf Computern oder gar Supercomputern. Je nach Komplexität des Modells und erforderlicher Genauigkeit der Simulation kann eine solche Auswertung wenige Sekunden, einige Stunden oder mehrere Tage dauern.

Beispiel 2. (Fort.) Die Auswertung des Pendelmodells erfordert das Lösen des o.g. Anfangswertproblems. Auch bei längerem Zeithorizont ist dies mit einem einfachen Einschrittverfahren auf einem normalen PC möglich. Ein Simulationsergebnis ist in Abb. 6 dargestellt.

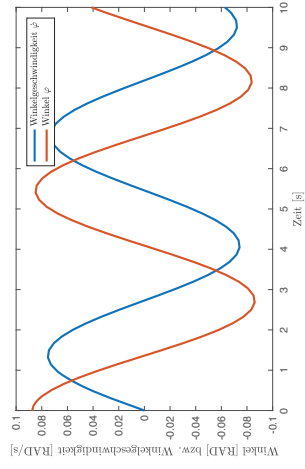


Abbildung 6: Löst man das Anfangswertproblem numerisch mit $\theta = 9.81 \text{ m/s}^2$, $\ell = 7.4 \text{ m}$, $b = 0.01 \text{ Nm} \cdot \text{s}$, $\varphi_0 = \pi/36 \text{ RAD}$, so ergibt sich der in der Grafik dargestellte zeitliche Verlauf von Auslenkungswinkeln und der Winkelgeschwindigkeit.

the 3D visualization cave (fig. 2) and VR headsets for visualizing molecular structures and dynamics.

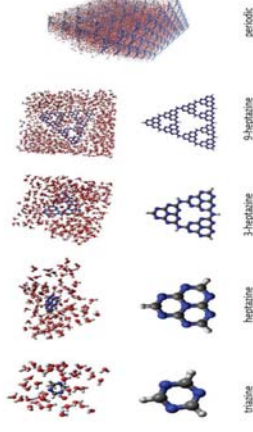


Figure 3: Carbonitride systems for photochemical water splitting.

J. Ehrmaier (group Prof. Domcke, TU Munich) investigated the optical properties of carbo-nitride molecules of increasing complexity in solution, and thereby produce hydrogen gas. Understanding these processes and selecting optimal molecules could provide the technology for photochemical solar-energy production.

Finally, T. Klöffel (group Prof. Meyer, FAU Erlangen) investigated how sulphur mustard is adsorbed and hydrolysed on zinc-oxide surfaces. More than 7,500 tons of this chemical warfare agent out of German stocks have been dumped in the Baltic Sea after World War II. As the grenades are starting to deteriorate, they pose a major hazard for the ecosystem and the neighbouring countries. Experiments with these substances are difficult and expensive due to the high safety level required. Here, computer experiments are a viable and risk free alternative. In a recent KONWIHR project, T. Klöffel optimized the code path within CPMD needed for these computations. With the improved node-level and parallel performance this system now runs one order of magnitude faster, which now makes the chemical reactions accessible in the simulation.

End of October, all participants met for a results workshop at the LRZ and presented their projects and the progress they made over the summer. Noteworthy is that two projects originated in groups that are new to molecular simulations: J. Herrmann from the group of Prof. Weuster-Botz (Institute of Biochemical Engineering, TU Munich) examines how mutations can influence the crystallization behaviour of proteins. From the group of Prof. Winter (Pharmaceutical Technology and Biopharmaceutics, LMU Munich) S. Eisele and A. Tosstorff investigate how detergents stabilize pharmacological proteins against aggregation and thermal denaturation. Here, MD simulations help them to interpret their own experimental findings.

Further biochemical projects from the “Summer of Simulation” dealt with the parametrization of efficient implicit solvent models (M. Zachmann, group Prof. Antes, TU Munich) or how chemical modifications influence the switching behaviour of GTPase signalling proteins (D. Pourafar-Dehkordi, group Prof. Zacharias TU Munich). Material science oriented projects dealt with the deposition of photovoltaic layers of surfaces (H. Mirhosseini, group of Prof. Felser, MPG Dresden), doping of metal-oxides to improve their piezoelectric properties (M. Falkowski, group of Prof. Kersch, Munich UAS), and nanoparticles for electrolytic cell membranes (J. Timmermann, group of Prof. Reuter, TU Munich). For the latter project, help with visualization was also given by Rubén García Hernández (V2C group of the LRZ) within the framework of the NOMAD project (Novel Materials Discovery, www.nomad-coe.eu). During the workshop, he also showed a presentation of



Figure 2: V2C cave presentation for the participants of the “Summer of Simulation”.

In der Regel enthält ein mathematisches Modell diverse Modellparameter. Diese Parameter sind oft unbekannt und müssen basierend auf gesammelten Messdaten geschätzt werden. Dies entspricht der Kalibrierung des mathematischen Modells, wobei die Modellparameter an die gemessene Situation angepasst werden. Mathematisch lässt sich diese Aufgabe oftmals als *inverse Problem* formulieren. Konkret ist damit die Lösung der folgenden Gleichung gemeint:

$$\mathcal{G}(\theta) = d, \tag{4}$$

wobei θ der unbekannte Modellparameter ist, d bezeichnet die Messdaten und \mathcal{G} ist ein Beobachtungsoperator, welcher Modellparameter auf Daten abbildet. Oftmals sind die Daten jedoch nicht präzise messbar, sondern mit Messfehlern behaftet. Deshalb betrachtet man die folgende, modifizierte Gleichung

$$\mathcal{G}(\theta) + \eta = d. \tag{5}$$

Dabei ist $\eta \sim N(0, \Gamma)$ ein normalverteilter Messfehler. Diese Modellannahme ist manchmal zu restriktiv. Wir verallgemeinern sie daher zur folgenden Gleichung:

$$\mathcal{G}(\theta, d) + \eta = 0. \tag{6}$$

Beispiel 2. (Fort.) Im Pendelversuch möchten wir die Erdbeschleunigung θ schätzen. Gegeben sind die Daten von einem Pendel, dessen Länge (ℓ), Dämpfungsparameter (b) und Startposition (φ_0) wir bereits kennen. Die Daten d sind Zeitpunkte ($t_1, t_2, t_3, \dots, t_D$) und entsprechende gemessene Auslenkungswinkel ($\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_D$). Der Datensatz d lässt sich schreiben als

$$d = \begin{pmatrix} t_1, t_2, t_3, \dots, t_D \\ \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_D \end{pmatrix}.$$

Wir nehmen an, dass wir bei jeder Winkelmessung einen normalverteilten Messfehler $\eta_1, \dots, \eta_D \sim N(0, \gamma^2)$ haben, dass die Zeitmessungen jedoch exakt sind. Damit lautet das inverse Problem: Finde θ , sodass

$$\begin{aligned} \varphi(t_1; \theta) - \varphi_1 + \eta_1 &= 0 \\ \varphi(t_2; \theta) - \varphi_2 + \eta_2 &= 0 \\ \vdots &\vdots \\ \varphi(t_D; \theta) - \varphi_D + \eta_D &= 0. \end{aligned} \tag{7}$$

Hierbei ist $\varphi(t; \theta)$ eine Modellauswertung zum Zeitpunkt t unter der Annahme, dass θ die Erdbeschleunigung ist. Der Beobachtungsoperator \mathcal{G} lässt sich damit definieren als

$$\mathcal{G}(\theta, d) := (\varphi(t_i; \theta) - \varphi_i)_{i=1, \dots, D} = (\varphi(d_{1,i}; \theta) - d_{2,i})_{i=1, \dots, D}. \quad (8)$$

In der Numerik wird ein inverses Problem oft mit einem regularisierten Kleinste-Quadrate-Ansatz gelöst:

$$\tilde{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \|\mathcal{G}(\theta, d)\|_2^2 + \operatorname{Reg}(\theta). \quad (9)$$

Ein solcher Ansatz ignoriert jedoch die Unsicherheiten, die durch die fehlerbehafteten Daten im Modell vorhanden sind. Um die Unsicherheiten zu berücksichtigen, müssen wir das inverse Problem als statistisches Modell auffassen.

4 Bayes'sche Inversion

Betrachtet man das inverse Problem als statistisches Modell und löst dieses mit einem Bayes'schen Ansatz, so spricht man von einem *Bayes'schen Inversen Problem* oder von der *Bayes'schen Inversion*. Dabei sind die Daten d Realisierungen einer Zufallsvariable - eben jener Zufallsvariable, deren Verteilung durch die Likelihoodfunktion gegeben ist. Aus der Gleichung $\mathcal{G}(\theta, d) + \eta = 0$ folgt, dass $\mathcal{G}(\theta, d') \sim N(0, \Gamma)$, wobei d' die o.g. Zufallsvariable ist. Damit ist die gesuchte Likelihoodfunktion gerade

$$L(d'|\theta) := \exp\left(-\frac{1}{2} \|\Gamma^{-1/2} \mathcal{G}(\theta, d')\|_2^2\right).$$

Nun muss eine passende A-Priori-Verteilung gefunden werden. Die Modellierung des Vorwissens ist im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe. Wie bereits erklärt muss die A-Priori-Verteilung so gewählt werden, dass die Evidenz $\operatorname{evid}(d)$ endlich und strikt positiv ist. Außerdem darf die A-Priori-Verteilung nur Parameterkandidaten mit positiver Wahrscheinlichkeit

Summer of Simulation 2017

How can computer simulations help to develop a nose spray against MRSA germs? How do new photochemical materials split water for solar-energy production? How can theoretical chemistry help to neutralize mustard-gas remains of World War II lying on the bottom of the Baltic Sea? Those and other questions have been addressed during the second "Summer of Simulation" conducted by the BioLab of the LRZ application support. The project was initiated last year to help Master and PhD students employing molecular dynamics or quantumchemical simulations to tackle their problems on current supercomputers. After submitting a short one-page proposal in June, nine participants were invited to port their problems on SuperMUC. Supported by tutors from the LRZ BioLab, they optimized their setups and conducted scaling tests, which were included in individual HPC project proposals. After passing the scientific review, the participants could consume altogether more than 60 Mio core hours that they had requested.

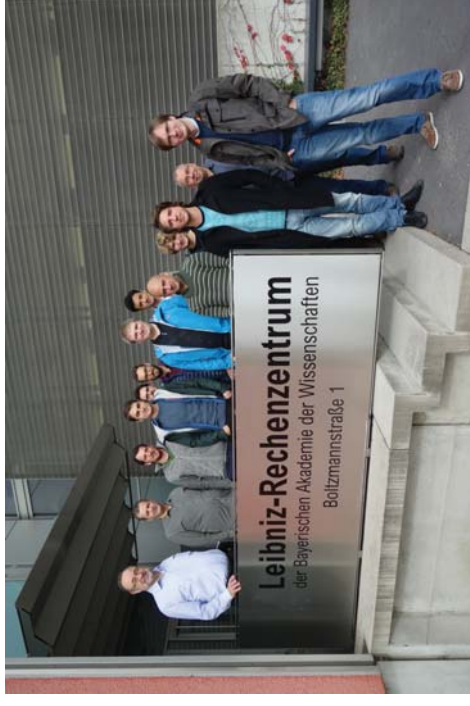


Figure 1: Participants and tutors of the SoSe2017.

Das neue Cluster im Überblick

Hardware	
Anzahl Rechenknoten	148
Cores pro Rechenknoten	64
Hyperthreads pro Core	4
Core-Standardfrequenz	1.3 GHz
Hauptspeicher (DOR4) pro Rechenknoten	96 GB (Bandbreite 80.8 GB/s)
High Bandwidth Memory pro Rechenknoten	16 GB (Bandbreite 460 GB/s)
Bandbreite pro Rechenknoten zum Interconnect	25 GB/s (2 Links)
Anzahl Omnipath Switches (100SWE48)	10 + 4 (je 48 Ports)
Bisektionsbandbreite des Interconnect	1.6 TB/s
Latenz des Interconnect	2.3 µs
Spitzenrechenleistung des Gesamtsystems	394 TFlop/s
Infrastruktur	
Elektrische Leistung unter Last	62 kVA
Mögliche Inlet-Temperaturen der Wasserkühlung	30 ... 50 °C
Temperaturdifferenz zwischen Outlet und Inlet	4 ... 6 °C
Software (Betriebssystem und Programmentwicklung)	
Betriebssystem	SLES12 SP2 Linux
MPI	Intel MPI 2017, alternativ OpenMPI
Compiler	Intel icc, ifort, ifort 2017
Performance-Bibliotheken	MKL, TBB, JPP
Tools zur Performance- und Korrektheitsanalyse	Intel Cluster Tools

Die in der Tabelle angegebenen Leistungszahlen sind theoretische Werte, die von realen Anwendungen in der Regel nicht erreicht werden können. Es wird eine Speicherbandbreite von ca. 450 GB/s erreicht, und die LINPACK-Systemrechenleistung wurde zu 255 TFlop/s gemessen.

Ludger Palm

versehen, für welche die Likelihoodfunktion tatsächlich ausgewertet werden kann. Wenn diese Bedingungen erfüllt sind, besitzt das Bayes'sche Inverse Problem eine eindeutige Lösung.

Beispiel 2. (Fort.) Zurück zum Pendelbeispiel. Das statistische inverse Problem basiert auf der folgenden Likelihoodfunktion:

$$L(d|\theta) := \exp\left(-\frac{1}{2\gamma^2} \sum_{i=1}^D (\varphi(d_{1,i}; \theta) - d_{2,i})^2\right).$$

Eine A-Priori-Verteilung für θ muss sicherstellen, dass fast sicher $\theta > 0$ gilt. Außerdem muss die Modellevidenz endlich und positiv sein. Beide Bedingungen können beispielsweise erfüllt werden mit einer uniformen A-Priori-Verteilung auf dem Intervall $[a, b]$, wobei $0 < a < b < \infty$. Wir nehmen also an:

$$\text{prior}(\theta) = \begin{cases} 1/(b-a), & a < \theta < b, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (10)$$

Dann gilt tatsächlich, dass fast sicher $\theta > 0$. Außerdem ist

$$\text{evid}(d) = \int L(d|\theta)\text{prior}(\theta)d\theta \geq c \cdot (b-a),$$

wobei $c = \min_{a \leq \theta \leq b} L(d|\theta) > 0$ und

$$\text{evid}(d) \leq (b-a) < \infty,$$

da $L(d|\theta) \leq 1$. Damit ist die Evidenz strikt positiv und endlich. Damit ist im Allgemeinen die Existenz der A-Posteriori-Verteilung gesichert.

Grundsätzlich kann die A-Posteriori-Verteilung in einem Bayes'schen inversen Problem genauso bestimmt werden, wie in anderen Bayes'schen Schätzproblemen. Problematisch ist hier jedoch die wiederholt notwendige und oft teure Auswertung des mathematischen Modells sowie die oftmals

große Dimension des Parameterraumes.

5 Zusammenfassung

Über 60 junge Nachwuchsforscherinnen und -forscher nahmen am 21. Oktober 2017 am Pendalexperiment teil. Die Teilnehmer haben Daten mit Hilfe des Pendels und der Stoppuhr gesammelt. Danach wurde ein Importance Sampling Algorithmus genutzt, um die Erdbeschleunigung anhand der Daten zu lernen. Ausgangspunkt des Lernprozesses war immer eine (dieselbe) uniforme A-Priori-Verteilung.

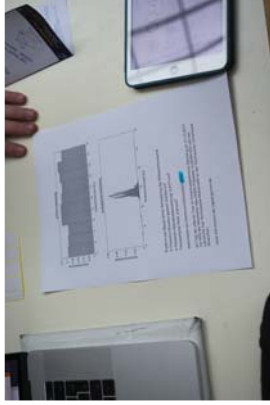


Abbildung 7: Elisabeth Bismut erläutert dem Nachwuchsforscher Abdi die Bayes'sche Schätzung.

Jeder Teilnehmer bekam nach Abschluss des Experimentes einen Ausdruck mit A-Priori und der geschätzten A-Posteriori-Verteilung. Dieser Ausdruck, zu sehen in Abb. 7, dient als Erinnerung an das Experiment und den Tag der Offenen Tür. Anhand der jeweiligen A-Posteriori-Verteilungen konnten die Teilnehmer vor Ort ein konkretes Beispiel für das Bayes'sche Lernen erleben.

Die gesammelten Daten werden zurzeit im Rahmen einer Bachelorarbeit ausgewertet.

Jonas Latz, Elisabeth Ullmann

der Abwärme zur Erzeugung von Prozesskälte für die noch verbleibenden luft- oder kaltwassergekühlten Hardware-Komponenten (etwa Storage-Systeme); nach einer ausführlichen Pilotstudie in Kollaboration mit der Firma Sortech wurde im Jahr 2016 erstmals ein Adsorptionskühler in Produktion genommen, der etwa die Hälfte der Abwärmeleistung des von Lenovo installierten Clusters „CoolMUC-2“ als Kühlleistung wiederverwertet.



Mit dem Many-Core-Cluster wurde nun ein weiterer Schritt in der Verbesserung der Energie-Effizienz gegangen: Durch Einführung der Wasserkühlung auch für Netzwerk-Komponenten und elektrische Netzteile wird es möglich, die Racks thermisch zu isolieren und damit praktisch keine Wärme mehr an die Umgebungsluft des Rechneraums abzugeben. Damit wurde die letzte Stufe für den möglichst energieeffizienten Betrieb von HPC-Komponenten am Rechenzentrum erreicht.

auch solche Zugriffe deutlich reduzieren. Für eine Reihe von Anwendungen hat das LRZ in Kollaboration mit Intel solche Optimierungen (etwa des Datenlayouts) bereits auf dem „Knight's Corner“-basierten Prototyp-Cluster „SuperMIC“ durchgeführt und damit wesentliche Teile des für die Unterstützung des künftigen KNL-Produktionsbetriebs notwendigen Know-How erarbeitet.

In Bezug auf den Instruktionssatz ist die Knights Landing-Architektur übrigens rückwärtskompatibel mit früheren Prozessorarchitekturen, sodass etwa auf anderen (älteren) Intel-Prozessoren kompilierte Programme, soweit nicht Unterschiede der benutzten Betriebssysteme dem entgegenstehen, auch auf dem Many-Core-Knoten ausgeführt werden können.

Omnipath-Verbindungsnetzwerk

Mit dem Kauf von Netzwerk-Technologien innerhalb des vergangenen Jahrzehnts hat sich Intel eine neue Strategie auf die Fahnen geschrieben, nämlich die zunehmende Integration des Netzwerks mit der Prozessorarchitektur. Mit dem am LRZ erstmals eingesetzten Omnipath-Verbindungsnetzwerk kommt eine bereits recht ausgereifte erste Generation dieser Technologie zum Einsatz. Sie zeichnet sich durch deutlich kleinere applikationsseitige Latenzen, hohe erzielbare Nachrichtenraten und hohe aggregierte Bandbreiten zu günstigem Preis für die Hardware-Komponenten im Vergleich mit konkurrierenden Netzwerk-Technologien aus. Dem LRZ dient das System dazu, erste Erfahrungen mit Management, Betriebsstabilität und Applikationsperformance dieser Technologie zu sammeln.

Kühlungs-Infrastruktur

Das LRZ war beim Einsatz von Warmwasserkühlung für HPC-Systeme Vorreiter in Europa. Mit „CoolMUC“ wurde Mitte 2011 erstmals von MEGWARE ein solches System am LRZ installiert; etwas mehr als ein Jahr später wurde dann das mit IBM/Lenovo kontrahierte 3-Pflop-System „SuperMUC“ in Betrieb genommen, das erstmals Einlauftemperaturen von etwa 40 °C und damit den ganzjährigen Systembetrieb mit freier Kühlung ermöglichte. Darüber hinaus gestattet die hohe Wassertemperatur eine Wiederverwertung

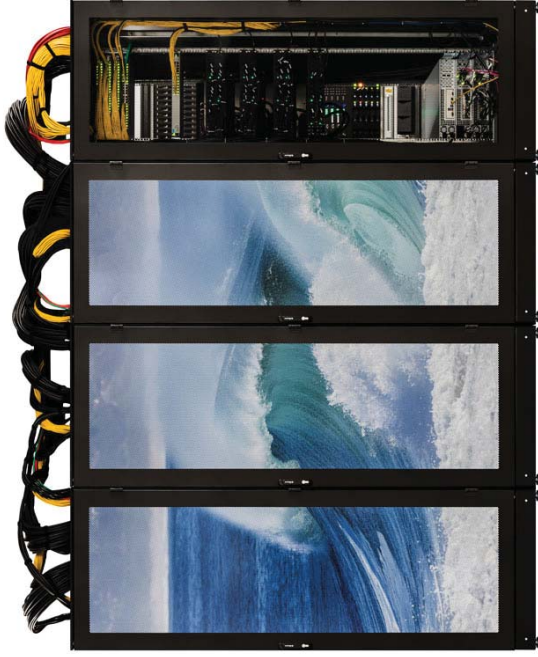
„CoolMUC-3“ – Neuer energieeffizienter Hochleistungsrechner am LRZ

Das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften hat seinen neuen Hochleistungsrechner „CoolMUC-3“ basierend auf Intel Many-Core-Prozessoren in Betrieb genommen. Mit CoolMUC-3 beschreibt das LRZ nicht nur auf dem Gebiet der Prozessor-Architektur, sondern auch beim Verbindungsnetzwerk und der Kühlungstechnologie Neuland. Die Ziele des LRZ bei der Beschaffung des Many-Core-Clusters waren:

- Ein für die Abarbeitung von hochgradig vektorisierbaren bzw. gut skalierend thread-parallelen Anwendungen geeignetes System bereitzustellen,
- das auch gute Skalierungseigenschaften über die Grenzen der Rechenknoten hinweg aufweist, sowie
- Einsatz einer Kühlinfrastruktur der neuesten Generation, die einen Betrieb praktisch ohne Wärmeeintrag in die Raumluft des Rechneraumes gestattet.

Darüber hinaus wurde bei der Beschaffung darauf geachtet, das System von vorn herein erweiterbar auszuliegen, sodass zu einem späteren Zeitpunkt weitere Rechenknoten unterschiedlicher Architekturen nahtlos in das System integriert werden können. Das Beschaffungsverfahren wurde über einen Forschungsgeräte-Antrag finanziert und als europaweite Ausschreibung ab November 2016 durchgeführt. Als Gewinner der Ausschreibung ergab sich gemäß angebotener Hardware, zugesagter Benchmark-Leistungswerte (inklusive Bewertung des Energieverbrauchs) und beschriebener Systemeigenschaften die Chemnitzer Firma MEGWARE. Das neue Cluster besteht aus 148 Rechenknoten vom Typ Intel Xeon Phi 7210-F (Knight's Landing, KNL), die über ein Intel Omnipath-Netzwerk mit Fat-Tree-Topologie miteinander verbunden sind. Für Entwicklungsarbeit und Job-Submission steht darüber hinaus ein Login-Knoten basierend auf Standard-Intel-Prozessoren zur Verfügung. Die Installation umfasst insgesamt vier Racks, von denen drei

die wassergekühlten Compute-Knoten enthalten, und eines die wenigen noch luftgekühlten Komponenten.



Many-Core-Architektur: der „Knights Landing“-Host-Prozessor

Mit der in diesem System eingesetzten Generation von Many-Core-Prozessoren stellt Intel erstmals eine stand-alone-Variante bereit; vorherige Prozessorgenerationen waren nur als Beschleuniger-Karten erhältlich, was sowohl bei der Provisionierung als auch der Programmierung und Nutzung solcher Systeme einen beträchtlichen Zusatzaufwand nach sich zog. Das vom LRZ beschaffte System kann hingegen direkt mit einem Standard-Betriebssystem versehen und wie klassische Xeon-basierte Cluster mit den wohlbekanntesten parallelen Programmierparadigmen genutzt werden. Die Anbindung der Rechenknoten an das Hochgeschwindigkeits-Netzwerk erfolgt über einen direkt auf dem Mainboard integrierten Dual-Port-Adapter, was für latenz-dominierte parallele

le Anwendungen einen Performance-Vorteil gegenüber einem als PCI-Karte implementierten Adapter liefert.

Ein weiteres neues Architektur-Merkmal ist das eng mit dem Prozessor integrierte MCDRAM, auch als „High-Bandwidth Memory“ (HBM) bezeichnet. Im Vergleich zu Standard-Speichertechnologien kann man bei Nutzung dieses Speicherbereichs um eine Größenordnung erhöhte Speicherbandbreiten gewinnen; er kann als Cache-Speicher, als direkt adressierbarer Speicher, oder als hybride (50/50) Mischung aus beiden Varianten konfiguriert werden. Die Vektor-Einheiten wurden nochmal verbreitert: Ein Core besitzt zwei AVX-512 VPUs (vector processing units) und kann daher, wenn kombinierte Multiplikationen und Additionen zu verarbeiten sind, maximal 32 doppelt genaue Floating-Point Operationen pro Takt durchführen. Jeweils 2 Cores sind eng miteinander und mit einem geteilten 1 MB Level 2 Cache zu einem sog. „Tile“ verbunden, und 32 aktive Tiles untereinander über ein zweidimensionales Netzwerk mit einer internen Bisektionsbandbreite von mehr als 700 GB/s, in dem die Cache-Kohärenz und der Fluss des Datenverkehrs auf unterschiedliche, vom Benutzer prinzipiell einstellbare Weise konfiguriert werden kann. Inwieweit solche dynamischen Konfigurationsänderungen zum Optimieren spezifischer Benutzer-Jobs ermöglicht werden können, ist derzeit noch in Untersuchung, da in der Regel hierzu ein Neustart der angeforderten Knoten notwendig ist.

Wegen der relativ niedrigen Taktung der Cores, und auch wegen des relativ kleinen pro-Core-Anteils am Hauptspeicher ist das System etwa für serielle Durchsatzlast eher ungeeignet. Für parallele Anwendungen wird es darauf ankommen, etwa durch hybride Programmierung (also der Kombination von Programmierpraktiken für verteilten und einheitlichen Speicher, wie etwa MPI und OpenMP) deren Speicherverbrauch zu minimieren, um dann, nach Optimierung der Datenlokalität auf die ersten zwei Stufen der Cache-Hierarchie, Vorteil aus den Vektor-Einheiten ziehen zu können. Bei konkurrierenden Zugriffen von allen Cores auf das HBM wird durch Vektorisierung kein Performance-Vorteil mehr für die entsprechenden Daten zu erzielen sein; eine hybride Programmier-Methodik kann gegebenenfalls