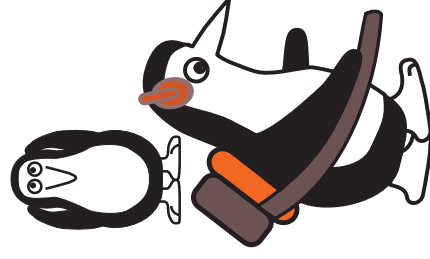


The three levels of idiocy – a state chart

- (1) This guy is such an idiot. He did not get it. He's just not qualified. Didn't he see how cool this idea is? I'm sure he's just jealous. Why have they chosen exactly this guy to read it? I'm so sick of running through this document. I'm not gonna do it. I just can't see this piece of work anymore.
- (2) [Few weeks later] This guy is an idiot. He should not make his negative view of everything stop high quality work. And he refuses to recognise that this is an outstanding piece of work. But there's no way around: I have to rewrite this and do the new experiments. Too much time already went into this manuscript and it would be foolish to throw all this work away just because of one stupid guy.
- (3) [Weeks later] This guy doesn't like my work. Unfortunately, he's right - the presentation and language of the paper could have been better. And now that I have these new experiments, this is really a lot better. I got his point. Perhaps he is right. Niet – he's still an idiot whoever it is...

The process always ends with the resubmit button.

T. Weinzierl



Inhalt

Editorial	2
Effiziente Algorithmen für UQ	4
Iterationsschleife	10
ExaHyPE	11
High Performance and Parallel Computing	13
Invasive Computing im Sarntal	14
SPPEXA Doctoral Retreat 2015 in Passau	16
Ankündigung: SPPEXA Symposium	18
BGCE Award	19
The three levels of idiocy – a state chart	20

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)

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

J. Daniel, C. Halfar, C. Kowitz, 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: **15.02.2016**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartl: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Editorial

Und wieder wurde dankenswerterweise ein Zufälliger aus dem Quartl-Netzwerk aktiv – fast könnte man angesichts des Folgenden von einem Pferdeflüsterer sprechen. Doch der Reihe nach.

Auch an der Universität Stuttgart gibt es ein Mentoring-Programm für Frauen in Wissenschaft und Forschung, einschließlich eines maßgeschneiderten Weiterbildungsangebots. Im laufenden Wintersemester 2015/16 weist das Programm vier thematisch unterschiedliche Workshops aus: „Erfolgreicher Umgang mit Assessment-Centern“; „Motivstrukturanalyse: Wissen, was mich erfolgreich und zufriedener macht“; „Burnout-Prävention“; sowie „Coaching mit Pferden“. Als völliger Analphabet in Sachen kavaleriesischer Coachings lese ich sofort neugierig weiter: „*Coaching mit Pferd ist eine erlebnisorientierte, faszinierende und sehr beruhigende Arbeit an der Persönlichkeitsentwicklung. Pferde sprechen unser limbisches System im Gehirn an. Dort ist der direkte Zugang zu unseren Emotionen und zu unserer Intuition. Hier hält unser Unbewusstes den Schlüssel für die richtige Entscheidung oder auch die Möglichkeiten für nachhaltige Veränderungen bereit. Im Anschluss an das Coaching steht der Transfer der Erkenntnisse in die individuellen Lebenszusammenhänge im Vordergrund. Wann habe ich mich am stärksten in meinem Potential erlebt? Welche Reaktion der Pferde hat mich verunsichert und warum? Welche Strategien habe ich zur Verfügung – welche brauche ich noch? Konkrete Veränderungsschritte können geplant werden. Ziel ist die Stabilisierung der neuen Erfahrung.*“

Spontan fallen mir dazu zuallererst zwei Loriot-Zitate ein: erstens „*Ah ja*“ und zweitens „*Meine Frau reitet ... beruflich.*“ Interessant auch der prägnante Hinweis, dass für eine erfolgreiche Teilnahme an diesem Workshop weder Reit- noch Pferdekenntnisse erforderlich sind und kein Pferd geritten wird.

Für Kundigere in Sachen Pferdecocoachings sei angemerkt, dass in besagtem Workshop sechs Methoden zum Einsatz gelangen: Begegnungsviereck, Individualübungen, Coaching, Feedback, Performance mit den Pferden sowie Videoanalyse. Abschließend dann noch der Hinweis, dass im Anschluss an den Kurs bei einem gemeinsamen Mittagessen ausgetauscht und reflektiert werden kann. Vegetarier möchten sich bitte vorab zu erkennen geben

Team der SPPEXA-Koordination freut sich auf spannende Vorträge und regen wissenschaftlichen Austausch.

P. Neumann



Newsjournal of the Society for Industrial and Applied Mathematics

Volume 48/Number 6
July/August 2015
siamnews.siam.org

BGCE Prize Finalists In the Spotlight at CSE15

It has become a tradition: After successful presentations in Costa Mesa (2007), Miami (2009), Reno (2011), and Houston (2013), the SIAM BGCE Prize Finalists returned to Salt Lake City, Utah, to host the student paper competition sponsored by the Bivariate Graduate School of Computational Mathematics and Applied Sciences at the University of Utah. The competition is a biennial competition recognizes and promotes outstanding student research in CSE.

This year, 24 students representing 23 institutions were invited to present their work at the annual meeting of the SIAM Salt Lake City.

1. **Jessica Boehm** (Max Planck Magdeburg): Efficient solution of Galn-Hillside Systems
2. **David Emerson** (Tufts University): Advanced Discretizations and Multigrid Methods for the Energy Minimization of Elastic Structures
3. **Evan Garlik** (Stanford): A High-order Finite Element Method for Moving Boundary Problems Using Universal Meshes
4. **Michael Griebel** (University of Würzburg): Towards a Hybrid Parallelization of Chebyshev Filtered Subspace Iteration
5. **Dhanya Mathura** (TUM): A New Approach to the Numerical Solution of Parabolic Volterra Integral Equation
6. **David Emerson** (Tufts University): Stakes Solver for Flows in Complex Geometries
7. **Other Winners** (TU Kaiserslautern): A New Approach to the Numerical Solution of Parabolic Volterra Integral Equation
8. **Other Winners** (TU Kaiserslautern): Response Analysis of Mechanical Vibrations based on Inverse Models

See BGCE Prize on page 5



See of the staff BGCE prize finalists sponsored at CSE15 with the prize committee. From left: Emmond Ng, Carol Woodward, David Emerson, Omar Ghattas, Dhanya Mathura, Michael Griebel, Peter Turner, Evan Garlik, Oliver Weggen, Marina Zinevits, and Ulrich Rüde.

BGCE Prize

continued from page 4

A student at Tufts University, Medford, Emerson works on the simulation of nanometric liquid crystals, whose uses include display technology (e.g., liquid crystal displays). He is currently working on a project that is related to the work of the sixth BGCE Student Prize competition in 2017.

—*Maria Zinevits, Peter Turner, Evan Garlik, Ulrich Rüde, Regina Ammer, and Tobias Weid*

beginning of July, with a one-week stay at BGCE's two home universities, Universität Würzburg and Technische Universität München.

Having hosted four excellent BGCE Student Prize winners in Bavaria (see <http://www.siamnews.org/2013/07/2013-bgce-student-prize-winners-in-bavaria/>), we eagerly look forward to the sixth BGCE Student Prize competition in 2017.

—*Maria Zinevits, Peter Turner, Evan Garlik, Ulrich Rüde, Regina Ammer, and Tobias Weid*

kleine Produktlinie zu implementieren, und SPL Conqueror, um die Einflüsse von Optionen auf die Laufzeit von Programmvarianten herauszufinden, und diskutierten, ob sich die Sprache Julia in ihrer derzeitigen Form für HPC-Programmierung eignet.

Die Gruppe blieb die ganze Woche über – auch bei den Mittagessen in der Passauer Mensa und den Abenden in diversen Passauer Lokalitäten – zusammen, was auch außerhalb des Vorlesungssaals und des Rechnerlabors einen eifrigen Austausch zuließ. Ein besonderes Highlight war die Exkursion, die aus einer Bootsfahrt auf dem Zusammenfluss von Donau, Inn und Ilz und einem Aufstieg zur die Stadt überragenden Veste Oberhaus bestand. Als offensichtlichster SPPEXA-Fan hatte Petrus gerade dazu noch einmal einen Sommernachmittag eingelegt.

So wurde man über die Tage zusehends vertrauter und schied am Ende mit dem festen Vorsatz, die Tools in den eigenen Projekten zu nutzen und miteinander in konkreter Verbindung zu bleiben. Und das ist ja schließlich der Sinn eines Doctoral Retreats!

C. Lengauer

Ankündigung: SPPEXA Symposium

Von 25. – 27. Januar 2016 wird das SPPEXA Symposium am Leibniz Rechenzentrum in Garching stattfinden. Neben 13 geplanten Minisymposia – ein Minisymposium pro SPPEXA-Projekt – mit jeweils zwei SPPEXA- und zwei eingeladenen Vorträgen sind mit George Biros (UT Austin), Takayuki Aoki (Tokyo Tech) und Craig Stewart (Indiana Univ) drei hochkarätige Sprecher aus dem Feld des High-Performance und Exascale Computing eingeladen.

Daneben stellen sich in einer separaten Session die potentiellen neuen SPPEXA-Projekte der zweiten Phase des Schwerpunktprogramms den Ur-SPPEXA-ianern vor. Abgerundet wird das Symposium durch die SPPEXA-Hauptversammlung und geplantem Gender-Training am 27. Januar, sowie durch den Besuch des neuen NS-Dokumentationszentrums in München. Das

(na ja, Pferdesalami wird ja hoffentlich nicht gereicht werden zum Lunch).

In mir kommen da unweigerlich sofort zwei Fragen auf: Wer nimmt denn bitte an so etwas teil, und wer hält so etwas ab? Nun, zur Klärung der ersten Frage müsste man wohl hingehen – wozu mir leider zwei wesentliche, ja notwendige Voraussetzungen fehlen: eine Frau zu sein bzw. der Universität Stuttgart anzugehören. Zur Dozentin (warum nur wundere ich mich nicht über ihren klangvollen Doppelnamen?) erfährt man aus der Broschüre jedoch durchaus Aufschlussreiches. Gleich fünf Berufe werden da genannt: Die Dame ist Transaktionsanalytikerin (DGTA – wahrscheinlich Deutsche Gesellschaft für Transaktionsanalytik?), psychotherapeutische Heilpraktikerin, systemische Paartherapeutin, Hebamme und Erwachsenenbildnerin (SVEB 1). Außerdem – und da kommt endlich der doch eigentlich im Zentrum stehende Gaul ins Spiel – Partnerin von Horse-Sense International Training and Coaching. Wow! Hier greife ich jetzt für ein passendes Zitat auf typische Großeltern zurück: „*Bub, lern was G'scheit.s!**“

Und somit also trotz aller Transaktionsanalyse: Wäre ich eine Frau und wissenschaftlich an der Universität Stuttgart zugange, ich würde die Pferdekunst verschmähen und die Burnout-Prävention belegen. Aber die Frage stellt sich ja eh nicht...

And now for something completely different: Herbst ist, das Laub fällt – und diese unsäglichen Blätterbläser terrorisieren wieder das Land. Überall sieht, hört und riecht man diese Plage: Auf dem Rücken Motor und Tank, in der Hand eine Art invertierten Staubsauger, Sisyphos-gleich irgendwelche herumliegenden Blätter von links nach rechts und dann wieder von rechts nach links blasend.

Das Ganze geht mit derart viel Gestank und jaulendem Getöse einher, dass man sich wirklich kein Stück Software vorstellen kann, das Abgaswerte so fälscht, dass diese Monstergedäte irgendwo auf dieser Welt irgendeine Art von Zulassung erhalten. Ganz zu schweigen von der Frage nach dem Sinn dieses beknackten Hin- und Hergeblases auf Höfen. Wenn man dann im Büro sitzt und das 10-Sekunden-Intervall zwischen zwei (nicht weniger terrorisierenden) eingehenden Emails für einen halben Gedanken nutzen möchte – schon dröhnt wieder eines dieser furchtbaren Dinger. Auch hier wird man bei Lorient mit einer passenden Bemerkung fündig: „*Ich bringe sie um. Morgen bringe ich sie um.*“ Wieder einmal ein Beispiel, dass nicht jede

Erfindung, nicht jedes Gerät, um das man einen Markt oder ein Business Model basteln kann, auch nur im Ansatz sinnvoll oder hilfreich sein muss.

Schließlich dringt Google inzwischen schon in Auto-Replies vor – stand da doch neulich in einem solchen: *„I am currently on vacation, more or less off-grid. I will have VERY limited access to e-mail. In case of some emergency, please contact XYZ, you will find his details by googling. I will be back on-line by the 1st of October. Best regards, UVW.“*

Doch genug der einleitenden Worte – die Quartl-Redaktion wünscht allen eine kommunikative und erfolgreiche Adventszeit. Und vor allem wünschen wir natürlich anhaltenden Spaß mit dieser neuen Ausgabe Ihres Quartls!

H.-J. Bungartz

Effiziente Algorithmen zur Unsicherheitsquantifizierung: Ein kurzer Überblick

There are known knowns;

there are things we know we know.

We also know there are known unknowns;

that is to say, we know there are some things we do not know.

But there are also unknown unknowns – the ones we don't know we don't know.

U. S. Secretary of Defense, Donald Rumsfeld, DoD News Briefing; Feb. 12, 2002

Welche Unsicherheiten sind gemeint und wie quantifiziert man sie? Der Begriff „unsicher“ hat sich eingebürgert als Übersetzung des englischen Wortes „uncertain“. Mit „unsicher“ meinen wir nicht „gefährvoll“ oder das Gegenteil von „selbstsicher“. „Ungewiss“ oder „unbekannt“, also „unknown“ ist vielleicht eine bessere Übersetzung. Heutzutage finden wir in vielen Lebensbereichen ungewisse, z.B. fehlerbehaftete oder nicht zugängliche, nicht genau bekannte Daten und Modelle vor. Beispiele sind Finanzmärkte, Versicherungen, Wetter- und Klimaforschung, Prozesse unter der Erdoberfläche (Grundwasser, Öl), radioaktiver Zerfall, hochkomplexe Brücken und Bauwerke oder die Medikamentenforschung. Die Computersimulation solcher



- Softwareproduktlinien (mit den Tools FeatureIDE, Clafer und der Passauer Bibliothek SPL Conqueror),
- Analyse von PDE-Lösern (mit der Kommando-Shell IPython) und
- die domänenspezifische Sprache Julia (mit der Kommando-Shell Julia).

Der Veranstaltungsort wechselte je nach Bedarf zwischen einem Hörsaal, in dem die theoretischen Grundlagen der jeweiligen Themen vermittelt wurden, und einem Rechnerlabor, in dem die Teilnehmer das Erlernete in praktischen Übungen selbst umsetzen konnten. Dabei gaben die Vortragenden einen Dialog mit den Tools vor, der dann vom Publikum nachvollzogen wurde. Im Anschluss konnte man kleine Aufgaben selbst lösen. So evaluierten die Teilnehmer die Performanz verschiedener HDF5-Konfigurationen, jagten Performanz-Bottlenecks mittels Score-P und Vampir, ließen Polly Schleifencodes parallelisieren, betrachteten verschiedene numerische Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme, benutzten FeatureIDE, um eine

timierung des Energieverbrauchs paralleler Programme.

In intensiven Diskussionen wurden die Voraussetzungen zur Vorhersagbarkeit der Ausführungszeit und anderer Qualitätseigenschaften von Aktorbasierten X10 Programmen besprochen, sowie für die weiteren Arbeiten im TRR 89 eine formale Notation und Ideen für das Benchmarking invasiver Programme entwickelt. Auch die praktische Realisierung einer Shallow Water Equation-Simulation in der X10-Aktorbibliothek sorgte für angeregte Diskussionen.

Die angenehme Atmosphäre der Ferienakademie und des Hotels in Durnholz haben sehr zum Gelingen der Veranstaltung beigetragen.

Unser Dank geht an die Organisatoren der Ferienakademie, die uns die Möglichkeit gaben, in dieser herrlichen Gegend den Forschungsaspekten der Vorhersagbarkeit von invasiven Programmen nachzuspüren.

M. Gerndt, M. Glaß



In der dritten Septemberwoche trafen sich 22 HPC-Freunde in Passau zum SPEXA Doctoral Retreat "HPC Software: Synthesis, Analysis, and Optimization".

Engeladen hatten der Lehrstuhl für Programmierung der Universität Passau und das ZIH der TU Dresden. Das Publikum bestand aus 12 Promotionsstudierenden der Projekten ExaStencils, DASH, ExaHD, EXASOLVERS und TERRA-NEO. Es ging darum, moderne Ansätze und Tools zum Thema des Retreats kennenzulernen.

Das Programm bot einen Mix aus Tutorien mit Praxiseinlagen zu den Themen:

- Schleifenparallelisierung im Polyedermode (mit der polyedrischen Bibliothek isl und dem LLVM-Plugin Polly),
- hierarchische Ablage großer Daten im Filesystem HDF5 (mit dem Tool HDFView und dem Python-Interface von HDF5)
- Leistungsanalyse (mit den Dresdner Tools Score-P und Vampir),

Prozesse erfordert Eingangsdaten, welche oftmals mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sind. Aufgabe der Unsicherheitsquantifizierung ist es, konkrete Angaben über die Auswirkungen dieser Datenunsicherheiten zu treffen und damit eine Bewertung und Interpretation von Simulationsergebnissen zu unterstützen. Stochastische Unsicherheitsquantifizierung verwendet dazu Werkzeuge und Methoden aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik.

Modellierung Die mathematische Modellierung der betrachteten Prozesse erfolgt durch partielle Differentialgleichungen (PDEs) mit zufälligen Koeffizienten. Die Herausforderung besteht darin, daß diese Gleichungen komplexe physikalische Prozesse mit einem stochastischen Parameterraum komplex. Aufwendige, hochauflösende Diskretisierungen erhalten eine zusätzliche „Dimension“ in Form von parametrisierten Koeffizienten, Quelltermen, Randbedingungen oder Geometrien. Anstelle einer fixen Konfiguration von Eingangsdaten ist man jetzt daran interessiert, ein parametrisiertes Problem zu lösen, und zwar gleichzeitig für alle denkbaren Parameterkonfigurationen. Eine zusätzliche Schwierigkeit ergibt sich dadurch, dass, abhängig von den statistischen Eigenschaften der Eingangsdaten, ein hochdimensionaler Parameterraum erforderlich sein kann; dieses Problem ist als „Fluch der Dimension“ bekannt.

Methoden Simulationen mit unsicheren Daten sind immer sehr rechenintensiv. Grund hierfür ist, daß wir nicht einfach Zufallszahlen generieren wollen. Wir erzeugen Realisierungen oder Approximationen von *zufälligen Funktionen*, die gewissen physikalischen Gesetzen gehorchen (PDE). Jede einzelne Stichprobe dieser zufälligen Funktionen ist teuer, weil dafür eine diskretisierte PDE gelöst werden muß. Letztendlich ist dies aber auch nur ein Baustein innerhalb realistischer Simulationsschleifen, welche oftmals Parameteridentifikation (z.B. Bayes'sche Inversion) oder Designoptimierung ausführen. Eine effektive Umsetzung der Unsicherheitsquantifizierung erfordert deshalb die effiziente Diskretisierung von PDEs mit zufälligen Koeffizienten und die Entwicklung von robusten Lösern und kostengünstigen Schätzern für die diskretisierten Gleichungen.

Falls die zufälligen Koeffizienten mittels eines niedrigdimensionalen Parameterraums beschrieben werden können, ist es vom Rechenaufwand her vertretbar, sogenannte Stochastische Galerkin-Verfahren (Ghanem & Spanos; 1991) einzusetzen. Dabei kombiniert man Finite-Element-Diskretisierungen mit einer Reihenentwicklung der zufälligen Koeffizienten (Xiu & Karniadakis; 2002). Die Stochastische Finite-Element-Methode führt allerdings zu einer vollständigen Kopplung von physikalischen und stochastischen Freiheitsgraden im Galerkin-System. Dies erfordert eine Modifikation wohlbekannter und erprobter Iterationsverfahren für Galerkin-Diskretisierungen mit rein deterministischen Koeffizienten und wird aktiv erforscht. In höherdimensionalen Parameterräumen (mehr als 10-20) kann man die zufälligen Größen mithilfe von Tensoren approximieren, siehe z.B. (Dolgov et al.; 2015). Der „Fluch der Dimension“ wird durch Ausnutzen der Tensorstruktur des stochastischen Parameterraums gehandhabt. Das ist im Moment ein „heißes“ Thema, welches uns sicherlich noch eine Weile beschäftigen wird. Alternativ kann man die physikalischen und stochastischen Freiheitsgrade entkoppeln. Viele relevanten statistischen Kenngrößen lassen sich nämlich als Erwartungswert, sprich Integral, über dem stochastischen Parameterraum ausdrücken und entsprechend durch Quadratur approximieren. Die Quadraturknoten sind entweder zufällig verteilt (Monte Carlo) oder deterministisch (stochastische Kollokation, Quasi-Monte-Carlo). Kollokationsverfahren basierend auf Dünnen Gittern (Nobile et al.; 2008) sind sehr effizient, erfordern aber eine gewisse Glattheit des Integranden und eine moderate Dimension des stochastischen Parameterraums. Monte-Carlo-basierte Schätzer sind diesbezüglich robuster, konvergieren aber extrem langsam. Dies kann behoben werden, indem man mehrere Schätzer mit einer Hierarchie von Finite-Element-Gittern kombiniert. Diese sogenannte Multilevel-Monte-Carlo-Methode wurde ursprünglich bei Problemen aus der Finanzmathematik (Giles; 2008) eingesetzt und ist inzwischen sehr erfolgreich bei PDEs mit zufälligen Koeffizienten. Die Pionierarbeiten hier sind (Barth et al.; 2011) und (Cliffe et al.; 2011).

Aktuelle Themen Abhängig von der konkreten Anwendung kann es erforderlich sein, Probleme mit hoch- oder niedrigdimensionalen Parameter-



Der Kurs beschäftigt sich mit Möglichkeiten zur Vorhersage nicht-funktionaler Eigenschaften von Programmen auf invasiven Mehrkernarchitekturen. Programme, die in einer Erweiterung der Programmiersprache X10 geschrieben sind, können Anforderungen an z.B. die maximale Ausführungszeit oder den Energieverbrauch stellen. Das Betriebssystem teilt dann eine Menge von Rechenkernen zu. Die Systemsoftware garantiert dabei die Einhaltung der gestellten Anforderungen. Dabei können insbesondere auch verschiedene vorberechnete Pareto-optimale Konfigurationen genutzt werden, so dass die Einbettung der Anwendung erleichtert wird.

Die Doktoranden des TRR 89 präsentierten ihre aktuellen Arbeiten aus den Gebieten der X10 Sprachdefinition, Compiler, Systemsoftware, Hardware und Anwendungen. Zusätzlich hielten Professoren der TUM und FAU Übersichtsvorträge zur Vorhersagbarkeit, speziell im Kontext von Betriebssystemen, Zuverlässigkeit, generellen Optimierungsproblemen und zur Op-

main workshops, with a total of 75 invited talks, focused on recent advances in parallel and high performance computing environments, exascale computer structures, parallel programming platform (i.e. MPI and OpenMP), techniques for parallelization of existing algorithms, as well as mathematical models and exascale enabled algorithms for simulating materials defects and multiphase/complex fluids.

Tutorial lectures on Parallel Domain Decomposition Methods and Parallel Hierarchical Grid (PHG) were delivered by Xiao-Chuan Cai (University of Colorado Boulder, USA) and Linbo Zhang (Chinese Academy of Sciences, China). There was also a winter school which had five tutorials and three special seminars, and covered topics in defects in crystals, Density Functional Theory and the Kohn-Sham model, the discontinuous Galerkin (DG) method, mathematical equations for modeling quantized vortices in superfluidity and superconductivity, and the asymptotic and numerical methods for rarefied gas flows based on kinetic theory.

The tutorial speakers were David Strolovitz (University of Pennsylvania, USA) and Penn Institute for Computational Science, USA), Eric Cancès (Ecole des Ponts ParisTech and INRIA, France), Jianxian Qiu (Xiamen University, China), Weizhu Bao (National University of Singapore) and Kazuo Aoki (Kyoto University, Japan). About 40 research projects/ papers were initiated during the program. There were a total of 141 participants and among them 33 were graduate students.

Invasive Computing im Sarntal

Im Rahmen der Ferienakademie im Sarntal fand vom 20.09. bis 2.10. ein Doktorandenkurs zum Invasiven Rechnen statt.

Es trafen sich 19 Forscher des Transregio/Sonderforschungsbereichs TRR 89 „Invasive Computing“, davon 13 Doktoranden und 4 Gastvortragende.

Neben Vorträgen und intensiven Diskussionen zum Thema Vorhersagbarkeit durch Invasives Rechnen konnte die Gruppe auf einer Ganztagswanderung und zwei Halbtags Touren die schöne Bergwelt des Sarntals bei herrlichem Sonnenschein genießen.

räumen zu behandeln. Deshalb beschäufte ich mich sowohl mit Iterationsverfahren für Stochastische Galerkin-Diskretisierungen als auch seit kurzem mit Multilevel-Monte-Carlo-Methoden.

Seltene Ereignisse. Bei Belastungstests von Tragwerken und anderen Komponenten oder Bauteilen in den Ingenieurwissenschaften ist man oftmals daran interessiert, die Versagenswahrscheinlichkeit des Bauteils bzw. der Komponente abzuschätzen. Diese Ereignisse treten allerdings nur sehr selten auf (zum Glück!) und machen eine Schätzung mit Monte-Carlo sehr teuer, weil die Anzahl der benötigten Realisierungen bzw. Simulationsläufe umgekehrt proportional zur Versagenswahrscheinlichkeit ist. In den Ingenieurwissenschaften wird deshalb eine verbesserte Monte-Carlo-Methode eingesetzt, die sogenannte „Subset Simulation“ (Au & Beck; 2001). Die (sehr kleine) Versagenswahrscheinlichkeit berechnet man als Produkt von größeren (und damit billiger zu schätzenden) Teilwahrscheinlichkeiten. Allerdings erfolgte die physikalische Diskretisierung in der Subset Simulation bisher stets auf ein und demselben Gitter und ist insgesamt immer noch sehr kostenintensiv. In (Ullmann & Papaioannou; 2015) haben wir eine Multilevel-Version der Subset Simulation auf einer Gitterhierarchie entwickelt. Im Moment interessieren wir uns für Multilevel-Versionen anderer Verfahren, die seltene Ereignisse effizient abschätzen können, z.B. Importance Sampling.

Stochastische inverse Probleme. Bayes'sche Inversion mit zufälligen, verteilten Materialparametern ist ein weiteres Forschungsthema, für welches wir vor kurzem Fördergelder für ein IGSS-Projekt "Bayesian Updating of Engineering Models with Spatially Variable Properties" gewinnen konnten. Dabei sollen Modellierungsaspekte und algorithmische Aspekte der verschiedenen "Bausteine" eines Inversionszyklus (Prior-Likelihood-Posterior-Prediction) untersucht werden.

Iterative Löser für Stochastische Galerkin-Verfahren. Das einfachste Modell einer stationären Grundwasserströmung ist eine Diffusionsgleichung mit einem lognormalen Koeffizienten. Die Standard-Diskretisierung mit stochastischen Finiten Elementen liefert eine Block-Galerkin-Matrix mit dünn besetzten Blöcken, die aber insgesamt nicht dünn besetzt ist (Matthies & Keese; 2005). In (Ullmann et al.; 2012) wurde deshalb eine alternative Problemformulierung als Konvektions-Diffusions-Problem mit einer zufälligen

konvektiven Geschwindigkeit betrachtet. Dieses (nicht konvektions-dominierte!) Problem ergibt eine dünnbesetzte Galerkinmatrix, allerdings erkauft durch die Nichtsymmetrie. Die Konstruktion von effizienten Vorkonditionierern wird dadurch schwieriger, aber auch interessanter! In (Ullmann & Powell; 2015) haben wir eine gemischte Formulierung des Konvektions-Diffusions-Problems aufgestellt und neue Block-Vorkonditionierer für die nichtsymmetrische Galerkinmatrix analysiert. Für Grundwasserströmungen ist das interessant, weil sich damit der volumetrische (Darcy) Fluß akkurat berechnen läßt.

Optimalsteuerung mit PDE-Nebenbedingungen. Die optimale Steuerung von physikalischen Prozessen ist ein Dauerthema in der Angewandten Mathematik. Verschiedene Kostenfunktionale sollen minimiert werden; diese modellieren oftmals den "Abstand" zu einem gewünschten Zustand, der mit geringstmöglichen Kosten ("Energieverbrauch") erreicht werden soll. Bei vielen physikalischen Prozessen müssen natürlicherweise PDEs als Nebenbedingungen erfüllt werden, z.B. beim energiesparsamen Erwärmen vom Mittagessen in der Mikrowelle die Wärmeleitungsgleichung! Ungewisse Materialparameter können auch hier als zufällige Funktionen modelliert werden, was natürlich auf eine zufällige optimale Steuerung führt. Sinnvoller wäre es, eine robuste, deterministische optimale Steuerung zu fordern, allerdings sollte diese dann optimal für alle möglichen zufälligen Parameterkonfigurationen sein! Theoretische und algorithmische Aspekte der Optimalsteuerung mit zufälligen PDE-Nebenbedingungen sind noch weitestgehend ungeklärt. Im Moment haben wir einen Projektantrag im Rahmen des IGDK 1754 "Optimization and Numerical Analysis for Partial Differential Equations with Nonsmooth Structures" gestellt. Dort sollen Multilevel-Monte-Carlo-Schätzer für Optimalsteuerungsprobleme untersucht werden.

E. Ullmann¹

¹Elisabeth Ullmann studierte Angewandte Mathematik an der TU Bergakademie Freiberg. 2008 promovierte sie dort in Mathematik und war anschließend Postdoc im DFG-Schwerpunktprogramm „Extraktion quantifizierbarer Informationen aus komplexen Systemen“. 2009 absolvierte sie einen Forschungsaufenthalt an der University of Maryland, College Park. Von 2011 bis 2014 war sie als Postdoc an der University of Bath in England und danach an Universität Hamburg tätig. 2015 wurde sie als Assistant Professor für Wirtschaftliches Rechnen an die TUM berufen.

tatsächliche (Code-) Entwicklung des Projektes voranzutreiben⁶. Nach dem zweiten nicht minder erfolgreichen Tag sind die Mitstreiter wieder ausgeschwärmt, nicht ohne sich mit der Verabredung einer Coding Week Anfang Dezember auch schon wieder zusammenzufinden⁷.

M. Bader, V. Varduhn

High Performance and Parallel Computing for Materials Defects and Multiphase Flows (1 January - 31 March 2015)

This program brought together mathematicians, computer scientists, physicists, materials scientists and mechanical engineers to exchange ideas, and to promote interdisciplinary research in high performance and parallel computing with applications to the simulation of materials defects, material- related processes, multiphase flows and complex fluids.^{8 9}



A series of interrelated workshops and tutorials, which offered the participants first-hand knowledge of the latest research, were organized. The three

⁶ <http://www.exahype.eu/news>

⁷ <http://www.tum.de/die-tum/aktuelles/pressemitteilungen/kurz/article/32716/>

⁸ aus: IMPRINTS, Institute FOR MATHEMATICAL SCIENCES, July – December 2015

⁹ <http://www2.ims.nus.edu.sg/imprints/imprints-26-2015.pdf>

IKT) an. Italien ist mit der Universität Trento (Michael Dumbser, Numerische Analysis) beteiligt, Großbritannien mit der Durham University (Tobias Weinzierl, High Performance Computing). Komplettiert wird das Konsortium durch den russischen Supercomputer-Hersteller ZAO „RSC Technologies“ (CEO Alexander Moskovsky). Als assoziierter Partner wird zudem das Leibniz Rechenzentrum ExaHyPE unterstützen.

Das KickOff, bei dem auch Jakub Jerabek (Schlumberger) und Martin Käser (Munich Re) als Vertreter des Industry Boards anwesend waren, startete mit einem lebhaften ersten Tag erfüllt von Vorträgen über die Entwicklungen, die sich seit dem Schmieden des Projektes im Herbst 2014 ergeben haben. Neben den fachlichen Inhalten konnten auch die organisatorischen Aspekte beleuchtet und bürokratische Anforderungen des Projektes hinreichend ausgearbeitet werden.



Mit der Örtlichkeit dieses Treffens in den Räumen des LRZ durfte natürlich eine Besichtigung des SuperMUC nicht fehlen (siehe Beweisfoto), sowie das informelle und gemütliche Ausklingen des Abends. Am zweiten Tag ist ein etwas kleiner Kreis noch einmal zusammengekommen, um auch die

Literatur

S.-K. Au and J. L. Beck. Estimation of small failure probabilities in high dimensions by subset simulation. *Prob. Eng. Mech.*, (16):263–277, 2001.

A. Barth, Ch. Schwab, and N. Zollinger. Multi-level Monte Carlo finite element method for elliptic PDE's with stochastic coefficients. *Numer. Math.*, 119:123–161, 2011.

K.A. Cliffe, M.B. Giles, R. Scheichl, and A.L. Teckentrup. Multilevel Monte Carlo methods and applications to elliptic PDEs with random coefficients. *Comput. Visual. Sci.*, 14(1):3–15, 2011.

S. Dolgov, B.N. Khoromskij, A. Litvinenko, H. G. Matthies. Polynomial chaos expansion of random coefficients and the solution of stochastic partial differential equations in the tensor train data format. *SIAM/ASA J. Uncert. Quantif.*, 3:1109-1135, 2015.

R. Ghanem and P. Spanos. *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*. Springer-Verlag, New York, 1991.

M.B. Giles. Multilevel Monte Carlo path simulation. *Operations Research*, 56(3):607–617, 2008.

H.G. Matthies, A. Keese. Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12):1295–1331, 2005.

F. Nobile, R. Tempone and C. G. Webster. A sparse grid stochastic collocation method for partial differential equations with random input data, *SIAM J. Numer. Anal.*, 46(5):2309-2345, 2008.

E. Ullmann, H.C. Elman, and O.G. Ernst. Efficient iterative solvers for stochastic Galerkin discretizations of log-transformed random diffusion problems. *SIAM J. Sci. Comput.* 34(2):A659–A682, 2012.

E. Ullmann and I. Papaioannou. Multilevel estimation of rare events. *SIAM/ASA J. Uncert. Quantif.*, 3:922-953, 2015.

E. Ullmann and C.E. Powell. Solving log-transformed random diffusion problems by stochastic Galerkin mixed finite element methods. *SIAM/ASA J. Uncert. Quantif.*, 3:509-534, 2015.

D. Xiu and G.E. Karniadakis. The Wiener-Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:619–644, 2002.

Iterationsschleife

N=17

12. November 2015

Was ist eigentlich Simulation? Die Bundesrepublik erlebt eine Blüte der Computersimulation. Studiengänge, die sich einer „Computational“ Disziplin widmen, haben Konjunktur. Allgemein wird es als unstrittig angesehen, dass Computersimulation ein – manchmal auch das – neue Werkzeug ist, um wissenschaftliche Durchbrüche zu erzielen. Manche sprechen von einer dritten Säule der Erkenntnis (neben der Logik und dem Experiment). Andere sehen in der Simulation die Fortsetzung des Experiments mit den Mitteln des Computers. Dritte wiederum sehen die Computersimulation als eine Brücke zwischen Experiment und Theorie. Was also ist Simulation wirklich? Der Fremdwörterduden kennt drei Bedeutungen des Wortes Simulation.

1. Verstellung
2. Vortäuschung
3. Nachahmung

Man ist geneigt, Computersimulation als Nachahmung anzusehen. Mit Hilfe von Modellen werden Vorgänge der Natur und Technik beschrieben und durch die Computersimulation nachgeahmt. Vermutlich würden Simulationsexperten dieser Interpretation am ehesten folgen.

Doch bleiben die beiden anderen Aspekte zu überlegen. Computersimulation kann natürlich auch als die Vortäuschung eines Vorgangs angesehen werden. Der Begriff der „Täuschung“ mag irritieren, doch im Bewusstsein, dass Modelle letztlich immer Abstraktionen sind, täuscht schon das Modell die korrekte Abbildung der Realität in gewissem Umfang nur vor. Schlimmer noch: mitunter verstellt das Modell sogar den Blick auf die zu beschreibende Realität, indem es suggeriert, dass nur dieses eine Modell die Realität abbildet. Indem das Modell zum Synonym für das Phänomen wird, verstellt es den Blick auf die Realität.

Wer aber täuscht sich und wessen Blick wird verstellt?

Letztlich ist es die Wissenschaft, die eben diese Fähigkeit hat, sich selbst zu täuschen und sich selbst den Blick zu verstellen. Nach Thomas Kuhn^a bedarf es immer wieder einer Revolution in der Wissenschaft, um den Blick weiter wandern zu lassen – bis er durch neue Ansätze wieder verstellt wird.

Danke an Thomas Ludwig für diesen Hinweis.

^aThomas Kuhn, *The Structure of Scientific Revolutions*, University of Chicago Press, Chicago 1962

ExaHyPE – Neues „Horizon 2020“-Projekt der FETHPC

Förderlinie mit Kickoff am 23.10.2015 gestartet

Im Umfeld von ETP4HPC², PRACE³, EESI⁴, etc., hat die EU-Kommission im „Horizon 2020“-Rahmenprogramm auch diverse Förderlinien für Exascale-Supercomputing etabliert.

Im FET-PROACTIVE Call „Towards Exascale High Performance Computing“ konnte sich dabei das Projekt „ExaHyPE“ (An Exascale Hyperbolic PDE Engine)⁵ durchsetzen, das nun seit Oktober 2015 über vier Jahre hinweg mit insgesamt 2,8 Millionen Euro gefördert wird. Das seitens TUM koordinierte Projekt hat sich zum Ziel gesetzt, neue algorithmische Ansätze und v.a. Simulationssoftware für Szenarien zu entwickeln, die sich als Systeme hyperbolischer Erhaltungsgleichungen formulieren lassen. Basis sind die Weiterentwicklung des ADER-DG-Verfahrens (Arbitrary DERivative Discontinuous Galerkin) zur Diskretisierung, agile fehlertolerante Lastbalancierung auf dynamisch adaptiven kartesischen Gittern sowie energie-orientierte hardware-nahe Optimierung. Als flexible Open Source Software konzipiert, soll die entwickelte „Engine“ zunächst für Grand Challenge Simulationen in der Seismologie (Erdbebenszenarien) und in der Astrophysik (Rotation von Neutronensternen) eingesetzt werden.

Die ExaHyPE-Projektziele erfordern eine intensive Kooperation über Disziplin- und Ländergrenzen hinweg. Auf deutscher Seite gehören dem Konsortium die Technische Universität München (Michael Bader – High Performance Computing), das Frankfurt Institute for Advanced Studies (Luciano Rezzolla – Theoretische Astrophysik), die Ludwig-Maximilians-Universität München (Alice-Agnes Gabriel und Heiner Igel, Computational Seismology) sowie die Bayerische Forschungsallianz (Robert Iberl – Fachbereich

²European Technology Platform for High Performance Computing

³Partnership for Advanced Computing in Europe

⁴European Exascale Software Initiative

⁵Projekt-Website www.exahype.eu