

Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	6
Pedestrian dynamics: a ten years research journey at HM and TUM	10
Emmy Noether Junior Research Group for Felix Dietrich	20
Update zum „Munich Quantum Valley“	28
KONWIHR: New projects from autumn 2021	31
Nachlese zur Ferienakademie 2021	33
Auflösung des Quartl Preisrätsels	36

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

S. Herrmann, S. Reiz, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

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

e-mail: herrmasa@in.tum.de,

<https://www.in.tum.de/index.php?id=5353>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **15.06.2022**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Das Quartl erhalten Sie online unter <https://www.in.tum.de/index.php?id=5353>



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

Editorial

Das hat etwas von Déjà-vu: Schon einmal, im fünfzigsten Quartl, hatten wir ein Preisrätsel mit allerlei Fragen rund ums Quartl veröffentlicht. Und auch damals war die Zahl der Antworten im Nachgang ziemlich überschaubar – um präzise zu sein, war’s die Kultzahl der Informatik schlechthin, nämlich die Null. Nun steht sie also erneut, die Null. Fassungslos steht die Redaktion vor der Apathie der Quartl-Leserschaft: Geht es Ihnen zu gut, brauchen Sie keinen Hauptgewinn? Oder war es schlicht und ergreifend zu schwer, sodass Frustration um sich griff? Wie dem auch sei, die vorgesehenen Preise bringen wir auch so unter’s Volk, und im hinteren Teil dieses Hefts finden Sie die Auflösung, die Antworten auf alle gestellten Fragen. Viel Spaß, oder Erkenntnis, damit!

Ansonsten hält sich der Spaß aktuell ja einigermaßen in Grenzen. Kaum scheint sich die Virentfront etwas zu entspannen, da tut sich eine andere Front – im wahrsten Sinne des Wortes – auf, da schlägt der irre Iwan zu. Mit einem Muster, das für die allermeisten hierzulande eher der Kiste „finstere Vergangenheit“ entnommen ist, wohingegen dies den – oder dem – Protagonisten der jüngsten Eskalation aus Südost offensichtlich eher als glorreiche Vergangenheit erscheint. Putin wolle zurück zur Sowjetunion, analysieren Analysten dieser Tage recht häufig. Also zurück zu Holodomor, Hitler-Stalin-Pakt, Gulag, Säuberungen, Ungarn 1956 und Prag 1968, etc. etc.? Echt jetzt?

Wenn wir schon bei der Beleuchtung ruhmreicher Vergangenheiten sind: Auch wenn Vergleiche historischer Kontexte immer etwas problematisch sind, so kommt es hier doch zu höchst ungunstigen Reminiszenzen an unsere eigene ruhmreiche Vergangenheit, konkret an die späten Dreißigerjahre. Damals gab es das Münchener Abkommen, das Pendant unserer Tage wurde in Minsk ausgehandelt; damals wurde im so genannten Sudetenland Deutschen vermeintlich übelst mitgespielt, jetzt hören wir von der angeblichen Unterdrückung der russischen Bevölkerung in den beiden so genannten Republiken Donbas und Luhansk; damals faselte ein gewisser Adolf Hitler etwas von legitimen Sicherheitsinteressen der Deutschen, jetzt nutzt Putin

dasselbe Argument, eben auf Russisch – und beide Male ging's und geht's nur um dieses depperte Großmachtgehabe, verbrämt mit „wir sind wieder wer, die Welt nimmt uns ernst“; bekanntlich hatte Hitler die so genannte „Rest-Tschechei“ und viel mehr im Visier, heute geht es um die gesamte Ukraine und wohl auch mehr; damals log Hitler allen die Hucke voll, jetzt ist Putin der Lügenbaron; damals legte Hitler in „Mein Kampf“ seine persönliche Version der Geschichtsschreibung dar, ein Stuss andersgleichen, jetzt doziert Putin in seinen Ansprachen über seine Auslegung der Geschichte – eine Sehweise, mit der die Mongolei Anspruch auf Westeuropa geltend machen könnte, denn schließlich war ein gewisser Dschingis Khan doch mal hier, oder zumindest beinahe. Sollten wir doch mal wieder in Ostpreußen vorbeischaun? Schauerlich! Immerhin sind mir noch keine K(r)ampf-ähnlichen Werke von Putin bekannt – aktuell zitiert er primär aus dubiosen Meisterwerken der russischen Literatur.

Nicht nur angesichts dieser Parallelen ist es grotesk, wer da entnazifizieren möchte – mal ganz unabhängig davon, ob die Nazi-Dichte in seinem Zielgebiet größer ist als anderswo oder nicht. Auch soll der Überfall dazu dienen, die Korruption zu beenden. Dazu schauen wir mal auf den aktuellen (2021) Korruptionsindex von Transparency International. Dort findet man die Ukraine tatsächlich auf Platz 122 von 180, gemeinsam mit Eswatini (dem früheren Swasiland) – wahrlich kein Ruhmesblatt. Die selbsternannte Anti-Korruptions-Truppe kommt allerdings ausgerechnet aus dem Land, das den stolzen Platz 136 einnimmt – in guter Gesellschaft mit Angola, Liberia und Mali. Wie war das gleich mit Bock und Gärtner? Vom angeblichen Genozid mal ganz zu schweigen.

Was wir dann in den letzten Februar-Tagen in Deutschland erleben konnten, war schon äußerst bemerkenswert. Da haben sich binnen weniger Tage, ja Stunden fundamentale Bausteine der deutschen Nachkriegspolitik und -gesellschaft förmlich in Luft aufgelöst, da krachend gescheitert: Zuvor noch Friedensbewegte schicken Waffen in Kriegsgebiete und geloben Aufrüstung – vergessen diese jedem Kabarettisten zur Ehre reichende Slapstick-Einlage mit den 5000 Helmen. Die Mär vom netten Mütterchen Russland, das uns

doch kulturell und historisch viel näher sei als der tumbe Cowboy von jenseits des Atlantiks – pulverisiert, nie war die atlantische Achse präsenter, wichtiger und stärker. Dieses ewige „man muss Putin verstehen, die Nato breitet sich immer weiter aus, man spricht Russland Großmacht-Status ab“ ist (endlich!) auch auf dem Rückzug: Obama hatte das seinerzeit treffend auf den Punkt gebracht, und wurde von den Putin-Verstehern heftig beschimpft dafür. Wäre Russland nur etwas netter zu seinen Schützlingen, etwas weniger militärisch und dafür ökonomischer unterwegs, etwas wirtschaftlich erfolgreicher und etwas weniger gestrig, würden Staaten wie die Ukraine ihr Heil doch nicht in dieser komischen Nato sehen, und dann würde man auch nicht despektierlich von einer Regionalmacht reden. Würde die russische Führung nur ein bisschen weniger „Seht her, ich ringe den sibirischen Tiger in der Taiga mit bloßen Händen nieder“ und ein bisschen mehr „Lieber Onkel Bill“ verkörpern, dann würde das Bild vom „Mütterchen Russland“ auch außerhalb der Russischen Föderation auf größere Akzeptanz stoßen.

Auch hierzulande lösen sich die Fraktionen der Russland-Versteher und Putin-Flüsterer in Luft auf. Als eine der Letzten tat dies die Ministerpräsidentin von Mecklenburg- Vorpommern, der gute Geist von Nordstream2. Als sie endlich(!) und mit salbungsvollen Worten umschwenkte, twitterte der ukrainische Botschafter ebenso ehrlich wie treffend „das ist zum Kotzen“. Nur unser Ex-Kanzler gibt unermüdlich das gallische Dorf – zumindest noch zum Zeitpunkt des Entstehens dieses Editorials. Als man anfing, die staatlichen Zuwendungen an ihn in Frage zu stellen, machten seine Mitarbeitenden das einzig Richtige und rannten von hinnen. Erbärmlich, skandalös oder vielleicht schlicht und ergreifend altersstarrsinnig?

Man höre und staune: IOC und FIFA, sonst nicht gerade als aufrechte Streiter für Menschenrechte bekannt, waren diesmal bei den frühen Sanktionierern. Dirigenten werden gefeuert, Diven ausgeladen, die Allianz der Wissenschaftsorganisationen tritt brutalstmöglich auf die Bremse. Als das Internationale Paralympische Komitee verkündete, russische und belarussische Sportler:innen zu den Paralympics 2022 zuzulassen, brach ein solcher Sturm bei Verbänden, Athlet:innen und Öffentlichkeit los, dass man sich noch in der Nacht ument-

6. **Frage** Wo wurden die frühen Ausgaben des Quartls gedruckt?

TIPP: https://www5.in.tum.de/FORTWIHR/quartl/quartl_info_d.html

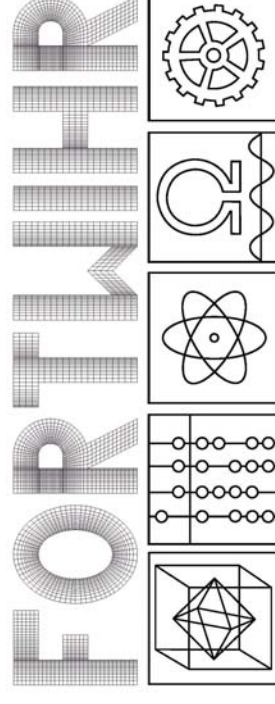
Antwort: Die ersten Ausgaben des Quartls wurden bei der Fachschaft Maschinenbau der TUM gedruckt.

7. **Frage** Die Ausgabe 2/95 brachte eine drucktechnische Innovation – welche?

Antwort: „Unser Drucker (der Maschinenbaustudent Bernd Klenk) hat sich hier an einen Pinguin mit zwei Schmuckfarben gewagt – auf der Fachschaftsdruckerpresse kein leichtes Unterfangen“.

8. **Frage** Für das ursprüngliche Logo des FORTWIHR wurden 1993 Buchstaben mit Gittergeneratoren erzeugt – aber der Rest (also die Logos innerhalb des Logos) ist geklaut: Woher?

Antwort: Es sind die damaligen Fakultätslogos der TUM.



Das große Quartl-Preisrätsel

Liebe Leser:innen,
hier die Auflösung zu unserem großen Quartl-Preisausschreiben!

1. **Frage:** Wie viele der Pinguin-Titel-Cartoons im Quartl stammen nicht aus der Feder des Redaktionsmitglieds Stefan Zimmer?
Antwort: Alle Cartoons wurden von Stefan Zimmer konzipiert, folglich 0.
2. **Frage:** Wie viele der Pinguin-Titel-Cartoons (inkl. der 100. Ausgabe) gibt es insgesamt, welche Ausgabennummer(n) musste(n) ohne Pinguin auskommen?
Antwort: Es gibt insgesamt 91 verschiedene Pinguine. Nur die Ausgaben 1, 5, 28, 34, 36, 37, 38, 39, 40 mussten ohne einen Cartoon auskommen.
3. **Frage:** Wieviele Seiten hatte die erste Ausgabe des Quartls?
TIPP: https://www5.in.tum.de/FORTWIHR/quartl/quartl_1_94.html
Antwort: Die erste Ausgabe hatte keine klassischen Seiten, sie war eine Homepageseite lang.
4. **Frage:** Wieviele Seiten hatte die 99. Ausgabe des Quartls?
TIPP: <https://www.in.tum.de/i05/weiterfuehrende-informationen/quartl/>
Antwort: Die Ausgabe 99. hatte einen Umfang von 28 Seiten.
5. **Frage:** Wieviele Bundeskanzler gab es in der bisherigen Ära des Quartls? Wie hießen sie?
Antwort: In der Ära des Quartl's gab es vier Kanzlerschaften: Herr Dr. Helmut Kohl, Herr Gerhard Schröder, Frau Dr. Angela Merkel, Herr Olaf Scholz.

schied. Einerseits ist dieser Gleichschritt ein starkes und wichtiges Signal, andererseits gilt aber natürlich auch hier, dass jede Brücke, die jetzt zerstört wird, hinterher wieder aufgebaut werden muss. Wenn nicht am Ende eh alles darniederliegt. Aber wir wollen nicht defätistisch werden. Alles wird gut – hoffentlich.

Doch damit genug für heute. Die gesamte Quartl-Redaktion begrüßt Sie herzlich im zweiten Ausgaben-Jahrhundert des Quartls und wünscht Ihnen und ganz besonders der Ukraine und ihren Bürgerinnen und Bürgern – wo immer sie sich derzeit aufhalten müssen, können oder dürfen – ein friedvolles Frühjahr. Zunächst aber natürlich wünschen wir Ihnen viel Vergnügen mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=42 07. März 2022

Zwei einfache Leben

42 ist, wie wir alle wissen, die Antwort auf die ultimative Frage nach der Bedeutung von „Life, The Universe, and Everything“^a. Doch diese Antwort, die im Buch ein Supercomputer nach 7,5 Millionen Jahren errechnet hat, ist - wie wir wissen - nutzlos. Die Realität sieht heute anders aus, und sie ist auch nicht durch den Ratschlag „Don't Panic“^b zu bewältigen.

Statt einer Analyse dessen, was gerade in der Welt passiert und was niemand sich wirklich vorstellen konnte, erzähle ich lieber die Geschichte zweier einfacher Leben.

Sie wurde zu Beginn des ersten Weltkriegs in der k.u.k.-Monarchie geboren^c. Er kam 1937 in der heutigen Ukraine zur Welt. Ihr Vater war Beamter in Triest. Sein Vater verschwand in den stalinistischen Säuberungen^d in den Lagern und keiner weiß wann und wo er gestorben ist. Sie erlebte den ersten Weltkrieg nicht bewusst und ging mit ihrem Vater 1919 nach Österreich^e damit der Vater seinen Beamtenstatus behalten konnte^f. Er erlebte als vierjähriger die Eroberung der heutigen Ukraine durch die Wehrmacht^g und 1943 die Rückeroberung^h.

^aDouglas Adams, The Hitchhiker's Guide to the Galaxy, 1979

^bAuch das ein ikonischer Satz aus dem genannten Buch

^cDer Ausdruck k.u.k. Monarchie bezeichnet das Habsburgerreich nach dem Ausgleich zwischen Österreich und Ungarn, der der ungarischen Reichshälfte eine Reihe von Zugeständnissen machte.

^dIm Rahmen der Kampagnen gegen sogenannte „Kulaken“ in der Ukraine sollte die „Klasse“ der „Kulaken“ eliminiert werden, weil sie angeblich revolutionsfeindlich war. Im Rahmen dieser Kampagne wurden nicht nur 100.000de in Arbeitslager verfrachtet oder ermordet, sondern in der Ukraine auch eine Hungersnot ausgelöst, die heute in der Ukraine unter dem Begriff des „Holodomor“ bekannt ist und zwischen 3 und 7 Millionen Tote gefordert hat.

^eDie österreichische Regierung sagte nach dem ersten Weltkrieg zu, alle k.u.k. Beamten im Dienst zu belassen, die sich rechtzeitig auf das Staatsgebiet der neugegründeten Republik Österreich begaben.

^fDiesem Status verlor er in der Finanzkrise von 1923 als Österreich beschloss, 100.000 Beamtenstellen abzubauen.

^gSeine Heimatstadt wurde am 28. Oktober 1941 besetzt.

^hSeine Heimatstadt wurde am 5. September 1943 offiziell befreit.

- dem Südtiroler Sanitätsbetrieb (dem Pendant zu deutschen Gesundheitsämtern) für die sehr effiziente und konstruktive Abstimmung,
- den Wirtsfamilien der Gasthöfe vor Ort im Sarnthal mit allen Mitarbeiter*innen,
- den Organisierten der FA in den Gasthöfen,
- den Dozent*innen und Mitarbeiter*innen der Kurse,
- und vor allem natürlich den Studierenden, ohne die alle Planungen stets nur Makulatur sind, und die die Ferienakademie zusammen mit den Dozent*innen und Mitarbeiter*innen mit Leben füllen.



Abbildung 1: Das Poster der Ferienakademie 2021.

Tobias Neckel

6. Addressing Global Environmental Challenges: Where Technology, Politics, and Society Meet
7. Deep Learning in Image and Video Processing
8. Nanoelektronik: Von CMOS bis zu Molekularen Schaltern
9. Computational Medical Imaging

Details zu den Kursinhalten sind unter <https://www.ferienakademie.de/kurse-2021/> zu finden. Darüber hinaus gab es auch noch einen Doktorandenkurs im Bereich der Elektro- und Informationstechnik, der von den Professoren Gerhard Kramer (TUM) und Ralf Müller (FAU) geleitet wurde.

In diesem Jahr gab es für die knapp 220 Teilnehmer*innen natürlich gewisse Besonderheiten (ganz gegen die alte FA-Weisheit „Das haben wir immer schon so gemacht“): 2G (zu einem Zeitpunkt, als es noch nicht in aller Munde war), kein Mischen der Gasthöfe und damit auch keine traditionellen Tischtennis- oder Schachturniere oder gemischte Wanderungen, drohende Kasernierung in Gossensaß für die Isolationsdauer im Falle eines positiven PCR-Test, etc.

Aber der Eindruck, den wir an vielen Stellen hatten, war stets, dass alle Beteiligten so froh waren, dass überhaupt eine derartige Veranstaltung stattfinden konnte, dass die Einschränkungen gerne in Kauf genommen wurden, sofern sie denn überhaupt spürbar waren. Und an mancher Stelle lässt uns das auch einzelne traditionelle Abläufe bei der Ferienakademie wie beispielsweise das Tischtennisturnier zwischen den Gasthöfen ein wenig auf die wirkliche Notwendigkeit hin hinterfragen.

Wir danken allen, die zur erfolgreichen Durchführung der Ferienakademie in diesem Jahr beigetragen haben:

- den Krisenstäben oder äquivalenten Einrichtungen der drei ausrichtenden Universitäten,

Sie ging mit 18 nach England als Kindermädchen in einen jüdischen Haushalt^a. Er beendete die Schule 1953 als bester seines Jahrgangs mit 16^b und hatte das Glück, dass Stalin im März des Jahres verstorben war^c.

Seine Zulassung zur Universität war zunächst völlig undenkbar – sein Vater war ja ein Opfer Stalins gewesen – doch der Tod des Diktators öffnete den Weg zum Studium^d.

Sie kam 1938 – unter Tränen von den Kindern verabschiedet und mit Geschenken der Eltern versehen – nach dem Anschluss Österreichs^e ins deutsche Reich zurück^f.

Er beendete sein Studium 1958 und begann eine wissenschaftliche Karriere. Sie fand 1938 Arbeit bei der Gestapo^g als Sekretärin und lernte ihren Ehemann – einen SA⁷-Mann – kennen. Die Ehe blieb kinderlos.

^aAufgrund der Weltwirtschaftskrise, die Ende der 20er Jahre begann, verließen viele junge Menschen Österreich um vor allem in Serviceberufen im Ausland tätig zu sein.
^bDer Übergang von der Schule auf die Universität erfolgt im sowjetischen System typischerweise im Alter von 16 Jahren.

^cMit dem Tod Stalins setzte keine unmittelbare Wende ein. Die berühmte Geheimrede Chruschtschows wurde erst im Februar 1956 gehalten.

^dEiner seiner ersten Lehrer war ein jüdischer Absolvent der Lomonossow-Universität der aufgrund seines Judentums und der Angst Stalins vor einer jüdischen Verschwörung nicht in Moskau hatte bleiben und forschen dürfen. Er hielt noch mit 85 Jahren Vorlesungen.

^eIn der Nacht vom 11. zum 12. März 1938 marschierten deutsche Truppen in Österreich ein. Gleichzeitig bestellte der österreichische Bundespräsident Miklas den Nationalsozialisten Seyß-Inquart zum Bundeskanzler. Der Anschluss wurde am 10. April durch eine Volksabstimmung „bestätigt“ (mit mehr als 99% Zustimmung). Seyß-Inquart wurde 1946 in Nürnberg als Hauptkriegsverbrecher verurteilt und hingerichtet.

^fHitler hatte alle im Ausland lebenden Österreicher:innen aufgefordert, sich „heim ins Reich“ zu begeben.

^gDie Geheime Staatspolizei (Gestapo) war die politische Polizei des NS-Regimes die insbesondere in der Verfolgung von Gegnern des NS-Regimes eingesetzt wurde.

^hDie Sturmabteilung (SA) der NSDAP war die paramilitärische Organisation der NSDAP, die eigene Veranstaltungen schützte und Gegner der NSDAP und deren Veranstaltungen angriff. Sie war bis 1934 für die meisten Gewalttaten der Nationalsozialisten verantwortlich. 1934 wurde sie im sogenannten „Röhm-Putsch“ weitgehend entmacht.

Er heiratete und bekam zwei Kinder. 1973 durfte er im Rahmen des Wissenschaftsaustausches zwischen Ost und West – der in einer Phase des Tauwetters^a im kalten Krieg^b vereinbart wurde – nach Deutschland. Sie wurde nach dem zweiten Weltkrieg Sekretärin bei den britischen Besatzungstruppen^c – ihre Sprachkenntnisse und die Erfahrung als Sekretärin der Gestapo waren hilfreich.

Er erlebte 1991 mit 54 das Ende der Sowjetunion^d und den Beginn einer unabhängigen Ukraine^e. Seine Ersparnisse verfielen zu Gunsten der russischen Staatsbank. Dafür bekam er die kleine Wohnung in der er lebte als Eigentum zugesprochen. Die Kontakte mit deutschen Freunden waren nun leichter zu pflegen. Sie verlor mit 56 ihren Ehemann und war von da an Beamtin. Ihr Mann war von der SA fast direkt in den österreichischen Staatsdienst^f übernommen worden.

^aAls Tauwetter bezeichnete man die Phase der Entspannung zwischen dem Westen und dem Ostblock, die Ende der 60er-Jahre begann und in der Konferenz für Sicherheit und Zusammenarbeit (KSZE) 1973 – 1975 ihren Höhepunkt hatte. Ergebnis war unter anderem die Organisation für Sicherheit und Zusammenarbeit in Europa (OSZE).

^bDer „kalte Krieg“ (1947 – 1989) beschreibt die Phase der Feindschaft zwischen der UdSSR (1917 – 1991) und ihren Verbündeten einerseits und den USA (1776 -) und ihren Verbündeten andererseits.

^cÖsterreich war von 1945 – 1955 in vier Besatzungszonen aufgeteilt (Frankreich, USA, Großbritannien, Sowjetunion).

^dDie Union der Sozialistischen Sowjetrepubliken (UdSSR) löste sich schon im Jahr 1990 de facto auf und wurde erst offiziell mit dem Vertrag von Almaty (26.12.1991) aufgelöst.

^eDie Ukraine als moderner Staat existiert erst seit 1991. Zwischen 1917 und 1922 gab es unterschiedliche Staatsgründungen auf dem Gebiet der heutigen Ukraine. Mit der Gründung der UdSSR 1922 wurde die ukrainische sozialistische Sowjetrepublik (UdSSR) Teil der UdSSR und verlor ihre Eigenstaatlichkeit. Trotzdem war die Ukraine (ebenso wie Weißrussland) am 24. Oktober 1945 aus politischen Gründen ein eigenständiges Gründungsmitglied der UNO.

^fDerartige Übergänge waren in Österreich nicht ungewöhnlich. Die Entnazifizierung entfernte zwar zunächst belastete Menschen aus dem Staatsdienst. Mit dem Nationalsozialistengesetz vom 6. Februar 1947 stand dem Bundespräsidenten nach §27 die Möglichkeit der Begnadigung zu. Die zahlreichen Anträge wurden in aller Regel positiv beschieden.

Nachlese 2021

FERIENAKADEMIE

Im Herbst 2021 hat zum 37.ten Mal die Ferienakademie⁶ im Sarntal (Südtirol) stattgefunden, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird.

Nach dem Covid-19-bedingten Ausfall in 2020 war auch heuer lange nicht klar, ob die Ferienakademie sinnvoll veranstaltet werden könnte.

Bereits im Mai startete die Entwicklung eines detaillierten Hygienekonzepts für den Aufenthalt im Sarntal — Hans Bungartz hat im Editorial der 99. Quartl-Ausgabe dazu ja bereits viele Details beschrieben. Glücklicherweise konnte die Ferienakademie dann tatsächlich auch wie geplant vom 19. September bis zum 1. Oktober durchgeführt werden, insbesondere auch ohne Covid-19-Vorkommnisse. Ein wesentlicher Baustein dafür war sicherlich auch die „Gnade der mittleren FA-Geburt“: Ende September war vermutlich der im Nachhinein bestmögliche Zeitpunkt, zu dem einerseits alle Teilnehmer*innen ohne extremen Stress vorab die vollständige Impfung erhalten konnten (sofern sie nicht genesen waren), und zudem andererseits die vierte Welle noch entfernt war und noch keine explodierenden Inzidenzzahlen verursachte.

In diesem Jahr fanden damit insgesamt neun Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen statt:

1. Collaborative Drone Interactions in Decentralized Resource Networks
2. Quantum Computing und Quantum Games
3. Physik und Elektronik im Alltag
4. Earth System Modeling: Program a Planet
5. Let's save! Simulations for the energy transition

⁶www.ferienakademie.de

About KONWIHR

The main objective of KONWIHR is to provide technical support for the use of high performance computers and to expand their deployment potential through research and development projects. Close cooperation between disciplines, users and participating computer centres as well as efficient transfer and fast application of the results are important. Read more on konwihhr.de.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihhr.de

Your email will be read carefully and answered by Katrin Nusser or Gerasimos Chourdakis, KONWIHR's current contact people in the Bavarian North and South. Together with Prof. Gerhard Wellein and Prof. Hans-Joachim Bungartz (who you can also reach using the same address), we collect and process your proposals two times per year (1st of March and 1st of September). Learn more about how you can apply for funding at:

<https://www.konwihhr.de/how-to-apply/>

Katrin Nusser, Gerasimos Chourdakis

Die jährlichen Urlaubsreisen in alle Kontinente dieser Welt – von denen die Souvenirs in ihrer Wohnung Zeugnis gaben - vermisse sie. Er baute sich ein neues Leben mit vielen Kontakten nach Deutschland auf, pflegte seinen kleine Schrebergarten^a und erzählte seinen Gästen begeistert von ukrainischer Literatur^b, Malerei^c, Musik^d und Sport^e. Sie starb friedlich noch vor dem Ende des kalten Kriegs. Gemeinsam mit ihrer Schwester hatte sie zuvor ihren Schwager begraben und beklagt, dass mit seinem Tod nun auch die Hoffnung dahin war, wenigstens einmal noch nach Paris zu kommen, das 1941 so schön gewesen sei^f. Er sitzt heute in der Ukraine im Keller und hofft, auch diesen Krieg^g noch zu überleben. Zwei ganz normale Leben des 20ten Jahrhunderts.

Die Geschichte des 21ten Jahrhunderts wird gerade geschrieben.

M. Resch

^aEr nennt es liebevoll Datscha.

^bBulgakow, Gogol, Kopelew, Schewttschenko, Tolstoi

^cDas Kunstmuseum in Donezk ist einen Besuch wert. Kasimir Sewerinowitsch Malewitsch (18788 – 1935) bezeichnete sich wahlweise als Ukrainer oder Pole um schließlich jede Nationalität abzulehnen.

^dRichter, Schljapin, Kipnis, Solowjanenko

^eEr ist ein Fan von Serhij Bubka und Schachtor Donezk

^fDer Schwager war 1940 mit der deutschen Wehrmacht in Paris einmarschiert.

^gAm 24. Februar 2022 überfiel Russland die Ukraine ohne Kriegserklärung.

Pedestrian dynamics: a ten years research journey at HM and TUM

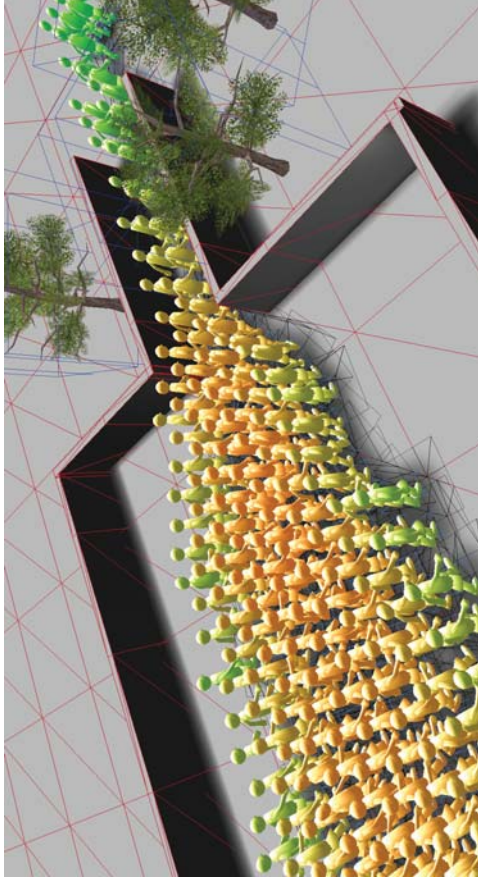


Figure 1: A crowd passing a bottleneck as simulated with the gradient navigation model.

1 It started with a real problem

About fifteen years ago, when I was still working with Siemens, my boss came into my office and asked: ‘What do you have to say about homeland security?’. It was in the aftermath of 9/11 were so many died while evacuating the collapsing twin towers of New York’s world trade center. We were a modeling and simulation group. So what else could we do, but model an evacuating crowd? My colleagues and I built a cellular automaton model of pedestrian motion that, to my best knowledge, is still useful.

In 2010 I succumbed to the lure of academia to become a professor of modeling and simulation, at Hochschule München. I took my experience with simulating pedestrian motion with me together with funding from my former

KONWIHR: New projects from autumn 2021



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of autumn 2021. In every round, we accept proposals for “normal” (up to 12 months) and “small” (up to 3 months) projects, as well as “basis” projects to establish contact points. In this round, the following projects were funded:

- *Semiempirische Molekülorbital-Theorie für sehr große Systeme*
– Prof. Timothy Clark (FAU Computer Chemie Centrum)
- *Greedy algorithms for fair allocations and efficient assignments within facility location optimization problems* – Dr. Bismark Singh (FAU Chair of Analytics & Mixed-Integer Optimization)
- *Largescale data processing and mass production of cosmicray background simulations for H.E.S.S.* – Prof. Christopher van Eldik, Dr. Andreas Specovius (Erlangen Centre for Astroparticle Physics, FAU)
- *MRzero – Scaling of a differentiable end-to-end optimization for magnetic resonance imaging* – Prof. Moritz Zaiss (Multimodal Imaging in Clinical Research, Zentrum für Medizin, Physik und Technik, FAU)
- *Efficient Remeshing in preCICE* – Dr. Benjamin Uekermann (TUM Chair for Scientific Computing in Computer Science)

You can find more details about these projects at

<https://www.konwihhr.de/konwihhr-projects/>

We would like to invite you to our online workshop on April 21, 16:00–18:00, in which new projects will present their goals and challenges. For more details, please watch our konwihhr-announcements mailing list.

Speziell in unserer Forschungsgruppe wollen wir uns auf vier Forschungsrichtungen konzentrieren: (i) Simulation von Quantensystemen auf klassischen Rechnern, insbesondere mit Hilfe von Tensornetzwerkmethoden und im HPC-Umfeld; (ii) Algorithmen auf Quantencomputern zur Simulation von Ziel-Quantensystemen aus der Festkörperphysik oder Chemie; (iii) Methoden zum Lösen hochdimensionaler Optimierungsprobleme auf Quantencomputern; (iv) Compiler- und Softwarekomponenten sowie Laufzeitumgebungen für Quantencomputer. Ein vielversprechendes Software-Werkzeug für (i) und (iv) ist das LLVM Compiler-Infrastruktur-Projekt und das darin integrierte MLIR Projekt. Längerfristig hoffe ich, dass sich hiermit eine synergetische Verknüpfung von wissenschaftlichem Rechnen mit Quantensimulation realisieren lässt.

Christian Mendl

employer to look into modeling of small groups in crowds [7]. At the same time, making full use of my new freedom at a university, I started to question everything I had done before.

In particular, I was unhappy about the coarse resolution of cellular automata where each pedestrian would occupy a human-sized square cell, making collision avoidance beautifully simple and well coded software incredibly fast, but ... Together with two bachelor students, Marion Gödel and Michael Seitz, we looked into the competition. We quickly found out that the classic ODE approaches for pedestrian motion looked better only on the surface [8]. Numerical instability of the non-smooth model equations of social force models would either demand tiny step sizes or introduce artifacts that the evacuation dynamics community were unaware of. One did not easily see the mathematical flaws underneath the high-level model description. Calibration of the model turned out to be a nightmare. Also, we fundamentally doubted, that human walk was well described by the equations of a harmonic oscillator. Don't humans take steps? One after the other?

So we came up with an alternative, more precisely, Michael did [16]: In the optimal steps model agents put their foot in the next position that balances goals such as getting closer to the destination, skirting obstacles, avoiding collisions, and, if wanted, staying with one's group. For this poor 'homo economicus' must solve an optimization problem.

2 The MEPKA project on artifacts and stability of crowd modeling — and first steps towards psychology

In 2011 BMBF kindly agreed to fund my soul searching endeavor. The MEPKA project became the first in a string of projects on pedestrian dynamics in the context of safety science. This is also where the cooperation with Hans-Joachim Bungartz's chair began. We needed an institution that could offer a graduation program and degree to PHD candidate Isabella von Sivers while she was working for me and with Hochschule München. Hans, with his excellent modeling team at TUM, was our first choice and, to our delight, he was willing.

Isabella refined the optimal steps model [18] and made it competitive among fine resolution locomotion models. In parallel, then HM bachelor student Felix Dietrich, added a competitive ODE model to our toolbox, without the unwanted, oscillatory second order terms and with navigation along a floor field: the gradient navigation model [1].

In her PHD work, Isabella turned our research focus to psychological aspects of crowd motion. We had the nagging feeling that whether or not a crowd acted as a social entity would effect crowd safety far more than the exact way individuals would step along their paths. Isabella joined crowd psychologist John Drury's team for a few months at the University of Sussex. Together with John's PHD candidate Anne Templeton, she looked into helping behavior among the survivors of a bomb attack in the London underground [19]. This was also the first investigation where we cooperated with Hans' team on uncertainty quantification. One simply cannot measure, how many in a crowd would be willing to help others. The parameter is uncertain to an extreme extent. Yet, the situation is not hopeless. On the contrary, Isabella found out that the exact value doesn't matter for the outcome as long as a certain threshold is surpassed. This is an important results for evacuation engineers and psychologist alike. Since then, both, modeling social identification and quantifying uncertainties have become standard components of our research methods.

3 The MultikOSi project on the psychology of motion and on surrogate models

Do people really solve an optimization problem each time they step ahead? Michael, by now a PHD candidate in the MultikOSi project, did not believe in it. We argued that humans rather use heuristics to make good, but not necessarily optimal, decisions. We looked deeper into the psychology of decision making. The result is the behavioral heuristics model [15] for which Michael won the Joseph-Ströbl price. With the help of John Drury, we also worked out a proposal how to introduce crowd psychology into computer models [17].

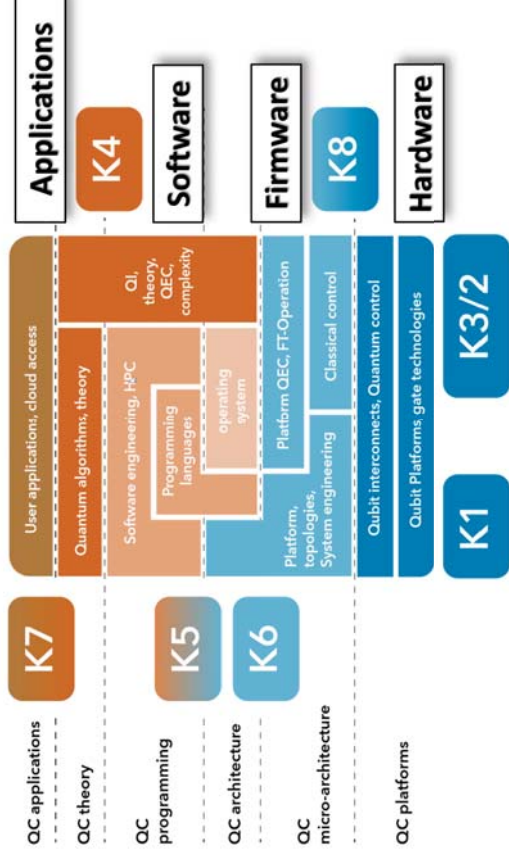


Abbildung 1: Organisatorische Gliederung in "Konsortien" zur Realisierung eines vollen "Quantum Computing Stack" durch das Munich Quantum Valley und assoziierte Forschungsprojekte.

Aus der Perspektive der Förderlinien wird das Kerngerüst des MQV aus Mitteln der Hightech Agenda Bayern mit einem Volumen von 300 Millionen Euro unterstützt. Diese Mittel zielen auf die akademische Forschung ab. Industriebeteiligung wird komplementär dazu durch weitere, hauptsächlich vom Bund (BMBWF, BMWK, ...) geförderte Forschungsprojekte ermöglicht. Hierzu zählen unter anderem MUNIQC-SC (Munich Quantum Valley Quantencomputer Demonstratoren – Supraleitende Qubits), DAQC (Digital-Analoge Quantencomputer), Q-Exa (Quantum computer extension by exascale HPC), QuaST (Quantum-enabling Services und Tools für industrielle Anwendungen), ... (Es ist nicht ganz einfach, den Überblick zu behalten.) Erfreulicherweise waren (zumindest die mir bekannten) Anträge auch tatsächlich alle erfolgreich, und das MQV ist nun mit einem Kick-Off Event am 28. Januar 2022 gestartet.

Update zum „Munich Quantum Valley“

Wir erinnern uns: Das Munich Quantum Valley (MQV, www.munich-quantum-valley.de) hat sich das ehrgeizige Ziel gesetzt, Quantum Computer und zugehörige Infrastruktur von Grund auf in Bayern zu entwickeln und zu etablieren (siehe Quartl 92, Ausgabe, 4/2019). Das heißt, angefangen von der Hardware (also einem physikalischen Quantencomputer) über hardware-nahe Compiler, Schnittstellen und HPC-Anbindung, zwischengeschaltete QuantenschaltkreISOptimierung, bis hin zum Cloud-Access für Benutzer und anwendungsorientierte Algorithmenentwicklung. In dem umfangreichen Vorhaben sind neben den Münchner Unis und der FAU Erlangen-Nürnberg auch Max-Planck-Institute, Fraunhofer, das LRZ, das Walther-Meißner Institut sowie zahlreiche Firmen beteiligt, unter anderem IQM Germany, Infineon, ParityQC, BMW, ...

Zur Koordination ist das MQV in acht Konsortien eingeteilt. K1, K2, K3 repräsentieren drei unabhängige Hardware-Plattformen, nämlich K1 die *superconducting qubits* (womit auch die bekanntesten Quantencomputer von IBM und Google arbeiten) am Walther-Meißner Institut in der Gruppe von Stefan Filipp, sowie K2/K3 *ultracold atoms* in der Gruppe von Immanuel Bloch am Max-Planck-Institut für Quantenoptik, bzw. *trapped ion* Quantencomputer, die von dem Startup Alpine Quantum Technologies (AQT, www.aqt.eu) aus Innsbruck entwickelt werden; AQT soll fürs MQV einen solchen Quantencomputer in München aufbauen. Die weiteren Konsortien sind für alle Bereiche “über” der eigentlichen Hardware zuständig, d.h. zusammengefasst Firmware, Software und Anwendungen. Eine besondere Herausforderung ist sicherlich das Zusammenführen und die Integration der verschiedenen Arbeitspakete und Einzelprojekte, so dass z.B. ein Anwender ohne Quanten-Hintergrundwissen letztendlich einen klaren Einstiegspunkt in die entwickelte Infrastruktur findet.

In the meantime, our crowd models had become more and more complex. This makes sampling to quantify the effects of parameters extremely expensive. Felix, by now the second PHD candidate in the MultiKOSi project, suggested to build surrogate models from the simulations and sample those. To capture the dynamics of the system despite imperfect observations he dived deeply into the mathematics of unsupervised learning. Time-delayed embedding combined with diffusion maps, lead to new coordinates that describe the system well indeed: Felix termed the coordinates closed observables [2]. He earned a PHD in mathematics for this, becoming the exotic among Hans’ and my computer science protégés. From Hochschule München Felix went to join Ioannis Kevrekidis’ team at Johns-Hopkins University for two years, returned to TUM as a postdoc, and, very recently, has become an Emmy-Noether scholar with TUM.

4 The S2UCRE project: code acceleration and uncertainty quantification

In BMBF projects you closely cooperate with partners who want to directly apply your work. In our case, these often are event organizers or police or fire departments who need to know what happens next. Can we predict the next few minutes of crowd evolution with our models? If not, what is keeping us back? This is what we asked in the S2UCRE project. Two problems were obvious: we were too slow and our results’ dependency on model parameters was ill understood.

Benedikt Zönnchen tackled the first problem: He accelerated our free and open VADERE simulation framework, using every trick in the box, so that the optimal steps model can now simulate half a million agents in real time instead of about 500. Another highlight is Benedikt’s EikMesh algorithm, available as a separate library, that efficiently computes very high quality triangulations. See fig. 2 and [20, 21]. The overall result is so impressive and the programming is so beautiful that Benedikt won TUM’s dissertation award as the first among HM’s and TUM’s joint PHD candidates. Marion Gödel tackled the second problem: unquantified uncertainties. She

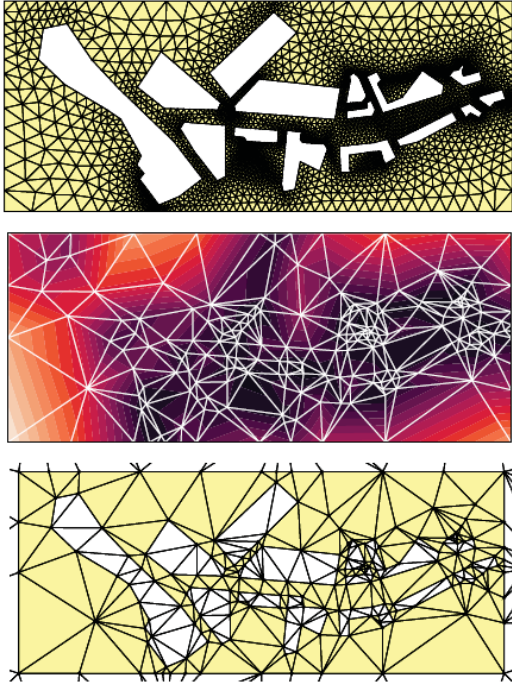


Figure 2: Triantulation of the city of Kaiserslautern with the EikMesh algorithm: Background mesh, local feature size, EikMesh result. The Figure is taken from [22].

created and customized uncertainty quantification tools for crowd dynamics, from scores to identify important influences [4] to Bayesian methods to calibrate the system [3]. In her PHD work, she was able to reduce uncertainty in key scenarios to a degree that is safety relevant. This, we hope, will make the rest of the community follow her lead. While being great successes in themselves both PHD projects taught us that prediction through simulation would probably be limited to special cases. But we are convinced that we can use simulated data to train data hungry machine learning algorithms.

14. X. Li, F. Guo, H. Kuang, and H. Zhou. "Effect of Psychological Tension on Pedestrian Counter Flow via an Extended Cost Potential Field Cellular Automaton Model". In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 487:Supplement C (2017), pp. 47-57. issn: 0378-4371. doi: doi.org/10.1016/j.physa. 2017.05.070.
15. H. Lu and D. M. Tartakovsky. "Dynamic Mode Decomposition for Construction of Reduced-Order Models of Hyperbolic Problems with Shocks". In: *Journal of Machine Learning for Modeling and Computing* 2.1 (2021), pp. 1-29. doi: 10.16161/j-machlearnmodelcomput.2021036132.
16. S. M. Lundberg and S.-I. Lee. "A Uni ed Approach to Interpreting Model Predictions". In: *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*. Long Beach, California, USA, 2017, pp. 4768-4777. isbn: 978-1-5108-6096-4.
17. I. Manojlovic, M. Fomoberova, R. Mohr, A. A. cuk, Z. D. c, Y. Kevrekidis, and I. Mezic. "Applications of Koopman Mode Analysis to Neural Networks". In: (June 2020). arXiv: 2006.11765.
18. P. Mehta and D. J. Schwab. "An Exact Mapping between the Variational Renormalization Group and Deep Learning". In: arXiv (Oct. 2014). arXiv: 1410.3831v1.
19. R. M. Neal. "Priors for In nite Networks". In: *Bayesian Learning for Neural Networks*. Springer New York, 1996, pp. 29-53. doi: 10.1007/978-1-4612-0745-0_2.
20. C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams. *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation And Machine Learning)*. The MIT Press, 2005. isbn: 0-262-18253-X.
21. W. T. Redman. "Renormalization Group as a Koopman Operator". In: *Physical Review E* 101.6 (June 2020), p. 060104. doi: 10.1103/physreve.101.060104.
22. M. T. Ribeiro, S. Singh, and C. Guestrin. "Why Should I Trust You?": Explaining the Predictions of Any Classifier". In: *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. San Francisco California USA: ACM, Aug. 2016, pp. 1135-1144. isbn: 978-1-4503-4232-2. doi: 10.1145/2939672.2939778.
23. S. Rosenberg. *The Laplacian on a Riemannian Manifold*. Cambridge University Press, 1997. doi: 10.1017/cbo9780511623783.
24. P. Sadowski and P. Baldi. "Deep Learning in the Natural Sciences: Applications to Physics". In: *Braverman Readings in Machine Learning. Key Ideas from Inception to Current State*. Ed. by L. Rozonoer, B. Mirkin, and I. Muchnik. 2018, pp. 269-297. doi: 10.1007/978-3-319-99492-5_12.
25. M. Schreiber, P. S. Peixoto, T. Haut, and B. Wingate. "Beyond Spatial Scalability Limitations with a Massively Parallel Method for Linear Oscillatory Problems". In: *The International Journal of High Performance Computing Applications* 32.6 (Feb. 2017), pp. 913-933. doi: 10.1177/1094342016687625.
26. U. Shaham, K. Stanton, H. Li, B. Nadtler, R. Basri, and Y. Kluger. "SpectralNet: Spectral Clustering Using Deep Neural Networks". In: arXiv (Jan. 2018). arXiv: 1801.01587v6.
27. C. Shen and H.-T. Wu. "Scalability and Robustness of Spectral Embedding: Landmark Diffusion Is All You Need". In: arXiv:2001.00801 (Jan. 2020). arXiv: 2001.00801.

If you are interested in my work and ongoing developments in Harmonic Artificial Intelligence for the combination of Scientific Computing and Machine Learning, please get in touch!

Felix Dietrich, Daniel Lehmberg

<https://fd-research.com/harmonic-ai>

References

1. P. Baldi, P. Sadowski, and D. Whiteson. "Searching for Exotic Particles in High-Energy Physics with Deep Learning". In: *Nature Communications* 5 (July 2014), p. 4308. doi: doi.org/10.1038/ncomms5308.
2. M. Belkin and P. Niyogi. "Laplacian Eigenmaps and Spectral Techniques for Embedding and Clustering". In: *Advances in Neural Information Processing Systems 14 [Neural Information Processing Systems: Natural and Synthetic, NIPS 2001, December 3-8, 2001, Vancouver, British Columbia, Canada]*. Ed. by T. G. Dietterich, S. Becker, and Z. Ghahramani. MIT Press, 2001, pp. 585-591.
3. T. Bertalan, F. Dietrich, I. Mezic, and I. G. Kevrekidis. "On Learning Hamiltonian Systems from Data". In: *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* 29.12 (Dec. 2019), p. 121107. doi: 10.1063/1.5128231.
4. E. M. Bollt, Q. Li, F. Dietrich, and I. Kevrekidis. "On Matching, and Even Rectifying, Dynamical Systems through Koopman Operator Eigenfunctions". In: *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems* 17.2 (Jan. 2018), pp. 1925-1960. doi: 10.1137/17m116207x.
5. M. Budisic, R. Mohr, and I. Mezic. "Applied Koopmanism". In: *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* 22 (2012), p. 047510. doi: 10.1063/1.4772195.
6. H.-J. Bungartz and M. Griebel. "Sparse Grids". In: *Acta Numerica* 13 (2004), pp. 147-269. doi: 10.1017/s0962492904000182.
7. R. R. Coifman and S. Lafon. "Diffusion Maps". In: *Applied and Computational Harmonic Analysis* 21.1 (July 2006), pp. 5-30. issn: 1063-5203. doi: 10.1016/j.acha.2006.04.006.
8. F. Dietrich, T. N. Thiem, and I. G. Kevrekidis. "On the Koopman Operator of Algorithms". In: *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems* 19.2 (Jan. 2020), pp. 860-885. doi:10.1137/19m1277059.
9. D. Heaven. "Deep Trouble for Deep Learning". In: *Nature* 574 (Oct. 2019), pp. 163-166. doi: 10.1038/441586-019-05013-5.
10. A. Jacot, F. Gabriel, and C. Hongler. "Neural Tangent Kernel: Convergence and Generalization in Neural Networks". In: *Advances in neural information processing systems* (June 2018), pp. 8571-8580. arXiv: 1806.07572.
11. B. O. Koopman. "Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 17.5 (1931), pp. 315-318. doi: 10.1073/pnas.17.5.315.
12. J. Lee, J. Sohl-dickstein, J. Pennington, R. Novak, S. Schoenholz, and Y. Bahri. "Deep Neural Networks as Gaussian Processes". In: *International Conference on Learning Representations*. 2018, pp. 1-17.
13. D. Lehmberg, F. Dietrich, G. Koster, and H.-J. Bungartz. "Datafold: Data-Driven Models for Point Clouds and Time Series on Manifolds". In: *Journal of Open Source Software* 5.51 (July 2020), p. 2283. doi: 10.21105/joss.02283.

5 The QUEST project: operator AI for crowds

Thus we became even keener on exploring machine learning, notably operator-based methods. Felix had imported them from the US and infected us with the (harmless) operator virus. PHD candidate Daniel Lehmberg intensified our collaboration with Felix and Hans in my DFG project: QUEST. Daniel gifted the research community with *datafold*, an easy to handle software that offers a full pipeline for operator-based learning, from feature extraction through time-delayed embedding, and diffusion maps to dictionary construction for an extended dynamic mode decomposition. This makes it so much easier to compute, for example, the eigenvalues and eigenfunctions of the Koopman operator, that is, the time-stepping operator of a particular system. We get a spectral decomposition, an evolution algorithm, and insight into the system's structure in one go. See Figure 3.

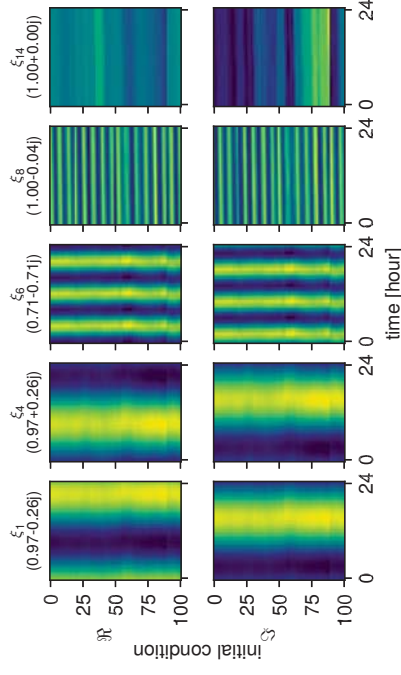


Figure 3: Selected approximate Koopman eigenfunctions (with their associate eigenvalue in brackets, real part at top, imaginary part at bottom row) of the spectral representation of 11 sensors counting pedestrians in the city of Melbourne. All eigenvectors reveal intrinsic spatio-temporal system properties: higher oscillations ξ_6 , weekly patterns in ξ_8 and seasonal patterns in ξ_{14} . The Figure is taken from [9].

6 The OPMOPS project: cooperative behavior in crowds

In parallel to this mathematical approach, we plunged deeper into truly interdisciplinary territory. We observed that current pedestrian models implement a rather uncooperative type of agent. The agents would not let anybody through a dense crowd, not even to help an injured person. This is not how most people act. Benedikt Kleinmeier renewed our cooperation with the psychologists in Sussex to look into self-categorization and social identity. Now, our agents can select behaviors from a portfolio of behaviors – depending on which social identity is salient for them: another beautiful dissertation [5].

As full blooded computer scientists, Benedikt Kleinmeier and Benedikt Zönnchen also introduced modern test concepts like continuous integration to Vadere [6]. We now strictly adhere to these standards.

7 The CovidSim project: infection spread in crowds

Meanwhile we have arrived in the present time of this story – and the world is being plagued by Covid. When one owns a simulation model, that very well reproduces human motion in crowds, it becomes something of a civic duty to exploit this tool to help understand infection spread. Interestingly, almost all agent-based attempts rely on distance only to evaluate infection risk. We did that too, more precisely PHD candidate Christina Mayr did it in her spare time [10]. However, aerosol clouds, responsible for the bulk of infections, do not cling to the infected person. They may remain at a location long after the ‘spreader’ has gone, and keep infecting people. And they are invisible. PHD candidate Simon Rahn [12] has found the right level of detail to model virus outlet and virus intake through breathing. The agents are moving so that the relative risk of every-day situations can be assessed and compared. Have a look yourself at first results and how we try to make them available to a broader public: <https://covidsim.cs.hm.edu/>.

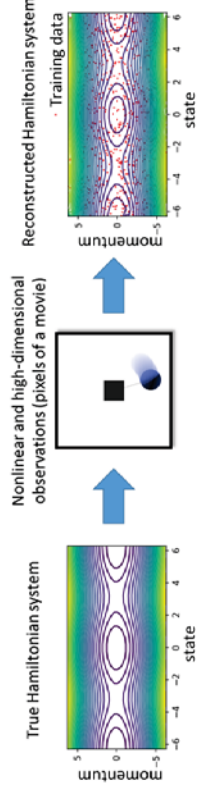


Figure 3: Learning Hamiltonian dynamics from observations [3]. We assume there is a Hamiltonian system (left) underlying the observation data (center). Using a physics-informed auto-encoder network, we recover a symplectomorphic copy of the original Hamiltonian (right).

works may seem quite unrelated. However, there now are almost 30 years of mathematical theory proving that the underlying principles are the same; even though this fact is not well-known in the AI community. The connection between neural networks and the Laplace-Beltrami operator is astonishing: in the limit of infinite-width, a neural network is a Gaussian process—this holds for both deep and shallow networks [12, 19]. More recently, even the stochastic training process of neural networks itself has been shown to correspond to a linear, ordinary differential equation when formulated with respect to a so-called “Neural Tangent Kernel” [10]. The state of this equation is a point in the space of functions over the input data and corresponds to the neural network itself. Training then effectively moves the point toward the minimal cost. This is a dynamic process that can be studied and approximated through its associated Koopman operator. Recent research hints at a connection of the Koopman operator to the layered structure of deep neural networks as well, by relating it to renormalisation group theory in physics [18, 21]. This has wide ranging implications for understanding and training deep neural networks [17]. A principled linear operator theory for deep learning is still missing, however. I want to close this gap with fundamental methodological research on Laplace and Koopman operators. In the second phase, I will devise efficient numerical algorithms that allow scaling to supercomputers. A proof of concept will demonstrate viability in realistic data-driven settings from crowd and quantum dynamics.

analysis. The eigenfunctions ϕ_k only depend on the structure of the data (here, its spherical shape), and not on the task f . In this sense, approximating linear operators separates structure from tasks, form from function. One operator I intend to exploit in this project is the Laplace-Beltrami operator: a core object in harmonic analysis, it is intimately connected to stochastic calculus, its eigenfunctions have a multiscale structure that is related to spatial discretisation schemes such as sparse grids [6], it is the main object employed by spectral approximation and classification methods [2], and the generator of Gaussian (diffusion) processes [23]. Algorithms to approximate the operator are available, for example “Diffusion Maps” formulated by my collaborator R. R. Coifman [7]. We also currently develop a software for the efficient approximation of linear operators, called “datafold”⁴, which was covered in an earlier Quartl⁵!

$$\begin{aligned} \Delta \phi_k(x) &= \lambda_k \phi_k(x), \quad k \in \mathbb{N} \\ f(x) &= c_1 \phi_1(x) + c_2 \phi_2(x) + \dots = \sum_k c_k \phi_k(x) \end{aligned}$$



Figure 2: Eigenfunctions (ϕ_1, \dots, ϕ_5 , color) of the Laplace-Beltrami operator on the sphere.

Another important linear operator was first studied by B. Koopman [11]. This “Koopman operator”, albeit linear, captures the dynamics of nonlinear systems, and allows researchers to predict the evolution of observables [5]. Essentially, the Koopman operator is to dynamical systems what the Laplace operator is to geometry: these operators encode everything about the system or object under study, and numerical approximations of them can therefore be used to access, process, store, and analyse all properties that are important to the respective application [4, 8, 14]. For example, the Hamiltonian for energy-conserving systems is an eigenfunction of the Koopman operator associated to the system (see Figure 3 and our paper [3]). At first sight, techniques such as linear operators and nonlinear neural net-

⁴See <https://datafold-dev.gitlab.io/datafold/index.html> and our paper [13].

⁵See version 99 here <https://www.in.tum.de/index.php?id=5353>.

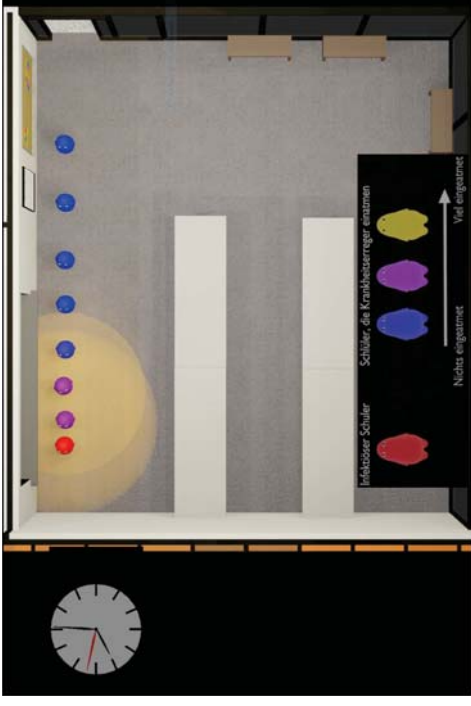


Figure 4: Infection spread in a queue – animated as ‘blob’ pupils lining up for food in the school cafeteria. An animated film explaining infection spread for high school students was created by my class of 3rd year modeling students in 2022.

8 The roVer project: mobile communication and guiding crowds

So far, all our work has been directed towards identifying danger for people and preventing danger through better planning. But what practitioners, like the MVG München, need is a way to nudge people towards safer behavior. For this, they need to communicate with the crowd. Together with my colleague Lars Wischhof at HM, we currently investigate the interplay between crowd movement and communication with the crowd and within the crowd. For us, communication is both technical and psychological: Lars’ PHD candidate Stefan Schubäck couples crowd simulation with simulation of mobile communication and, with this tool, devises a new method to measure crowd density [13, 14]. PHD candidate Christina Mayr takes the density information and the mobile telecommunication channel to provide the crowd

with guidance [11]. For the psychological aspects of this, she will join Anne Templeton in summer 2022. Anne has become a distinguished crowd researcher at the University of Edinburgh.

9 Where next?

Where will we go next? Obviously, the current generation of PHD candidates will finish their degrees. They will further improve our understanding of both, pedestrian dynamics, and the methods that allow us to investigate pedestrian dynamics. From there, I believe that the quickest, and most entertaining road to success, is to marry machine learning and classic modeling. I am looking forward to traveling that road. Keep up-to-date with our work through our website www.vadere.org.

Gerta Köster

<https://orcid.org/0000-0002-3369-6206>

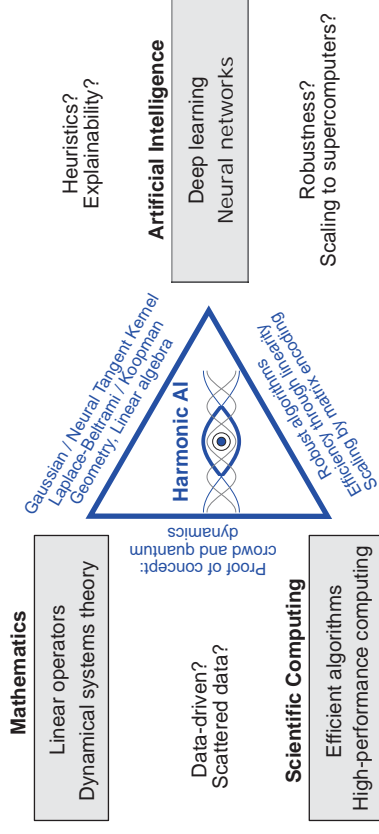


Figure 1: Harmonic AI addresses challenges such as working with scattered data in mathematics and scientific computing, as well as explainability and robustness of heuristic approaches in AI.

Toward the goal of explainable, reliable, and robust AI, I propose to connect scientific HPC and deep learning, forming a concept I call “Harmonic AI”. Specifically, I will combine linear operator theory and deep learning methods through harmonic analysis (see Figure 1). My group will mainly use Gaussian processes [20] toward explanations of geometric concepts with the Laplace operator [7], and the Neural Tangent Kernel (explained below, also see [10]) toward a dynamical systems interpretation of iterative methods through the Koopman operator. To make the theoretical results accessible to a larger research community, we will devise and implement numerical algorithms based on them and make them applicable in the HPC setting so that even large-scale and data-intensive tasks from AI can be tackled using supercomputers.

Eigenfunctions act as the core concept in this endeavour (see Figure 2): a function f , a “task” that a neural network may be trained to approximate, can be decomposed into eigenfunctions (also called “waves” or “harmonics”) of a linear operator. This decomposition is the main premise of harmonic

References

1. Felix Dietrich and Gerta Koester. Gradient navigation model for pedestrian dynamics. *Physical Review E*, 89(6):062801, 2014.
2. Felix Dietrich, Gerta Köster, and Hans-Joachim Bungartz. Numerical model construction with closed observables. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 15(4): 2078–2108, 2016.
3. Marion Gödel, Nikolai Bode, Gerta Köster, and Hans-Joachim Bungartz. Bayesian inference methods to calibrate crowd dynamics models for safety applications. *Safety Science*, 147:105586, 2022.
4. Marion Gödel, Rainer Fischer, and Gerta Köster. Sensitivity analysis for microscopic crowd simulation. *Algorithms*, 13, 2020.
5. Benedikt Kleinmeier, Gerta Köster, and John Drury. Agent-based simulation of collective cooperation: From experiment to model. *Journal of the Royal Society Interface*, 17:20200396.
6. Benedikt Kleinmeier, Benedikt Zörnchen, Marion Gödel, and Gerta Köster. Vadere: An open-source simulation framework to promote interdisciplinary understanding. *Collective Dynamics*, 4, 2019.
7. Gerta Köster, Michael Seitz, Franz Tremel, Dirk Hartmann, and Wolfram Klein. On modeling the influence of group formations in a crowd. *Contemporary Social Science*, 6(3):397–414, 2011.

Most methods involved in the “traditional” field of scientific computing do not originate in the AI community and are usually reliable and explainable through their foundations in rigorous mathematics. Examples are efficient space discretisation schemes such as sparse grids [6] and scalable, parallel solvers for partial differential equations [25]. Unfortunately, most of them are not immediately applicable to the extremely high-dimensional, scattered data where neural networks are usually used.

3 Focus of the research group

We will focus on efficient, explainable methods for the approximation of linear operators related to neural networks, in an AI setting. This focus demarcates my project from other work. For example, training neural networks on data and then understanding their results afterwards has proven exceedingly difficult. Many previous projects have tried to cope by analysing the trained networks themselves, methods to explain predictions such as SHAP (SHapley Additive exPlanations) [16] and LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations) [22] are used extensively, even though they only provide local information around individual data points.

A history of efficient PDE solvers on supercomputers [25], as well as recent research on linear operators [4, 5, 7, 8, 21] has shown that scientific computing methods overcome explainability issues to a large extent. However, there is barely any research on efficient algorithms to approximate these operators on the large, scattered data sets typical for many AI applications. Very recent first attempts such as SpectralNet [26] and Roseland [27] only focus on specific clustering applications, or attempt to learn operators through network regularization [15, 26] instead of using the robust matrix algorithms already available in scientific computing.

8. Gerta Köster, Franz Tremel, and Marion Gödel. Avoiding numerical pitfalls in social force models. *Physical Review E*, 87(6):063305, 2013.
9. Daniel Lehnberg, Felix Dietrich, and Gerta Köster. Modeling Melbourne—Using the Koopman operator to gain insight into crowd dynamics. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 133:103437, December 2021.
10. Christina Maria Mayr and Gerta Köster. Social distancing with the optimal steps model. *Collective Dynamics*, 2021.
11. Christina Maria Mayr, Stefan Schuhböck, Lars Wischhof, and Gerta Köster. Analysis of information dissemination through direct communication in a moving crowd. *Safety Science*, 142:105386, 2021.
12. Simon Rahm, Marion Gödel, and Gerta Köster. Towards a model for SARS-CoV-2 transmission at a local scale. In *Proceedings of the 10th International Conference on Pedestrian and Evacuation Dynamics (PED2021)*: Melbourne, Australia, November 29–30, 2021, page 20, submitted 2021.
13. Stefan Schuhböck, Nico Dädler, Lars Wischhof, and Gerta Köster. Towards a bidirectional coupling of pedestrian dynamics and mobile communication simulation. In *Proceedings of the OMNeT++ Community Summit 2019*.
14. Stefan Schuhböck and Lars Wischhof. Decentralized pedestrian density maps based on sidelink communication. In *ICC 2021 - 2021 IEEE International Conference on Communications (ICC)*, pages 1–6, 2021.
15. Michael J. Seitz, Nikolai W. F. Bode, and Gerta Köster. How cognitive heuristics can explain social interactions in spatial movement. *Journal of the Royal Society Interface*, 13(121):20160439, 2016.
16. Michael J. Seitz and Gerta Köster. Natural discretization of pedestrian movement in continuous space. *Physical Review E*, 86(4):046108, 2012.
17. Michael J. Seitz, Anne Templeton, John Drury, Gerta Köster, and Andrew Philippides. Parsimony versus reductionism: How can crowd psychology be introduced into computer simulation? *Review of General Psychology*, 21(1):95–102, 2016.
18. Isabella von Sivers and Gerta Köster. Dynamic stride length adaptation according to utility and personal space. *Transportation Research Part B: Methodological*, 74:104–117, 2015.
19. Isabella Katharina Maximiliana von Sivers, Anne Templeton, Florian Künzner, Gerta Köster, John Drury, Tobias Philippides, Andrew and Neckel, and Hans-Joachim Bungartz. Modelling social identification and helping in evacuation simulation. *Safety Science*, 89:288–300, 2016.
20. Benedikt Zörnchen and Gerta Köster. A parallel generator for sparse unstructured meshes to solve the eikonal equation. *Journal of Computational Science*, 32:141–147, 2018.
21. Benedikt Zörnchen and Gerta Köster. GPCPU computing for microscopic pedestrian simulation. In Ian Foster, Gerhard R. Joubert, Lud´ek Ku´cera, Wolfgang E. Nagel, and Frans Peters, editors, *Parallel Computing: Technology Trends*, volume 36, pages 93–104, 2020.
22. Benedikt Sebastian Zörnchen. Efficient parallel algorithms for largescale pedestrian simulation. Dissertation, Technische Universität München, München, 2021.

Emmy Noether: Independent Junior Research Group for Felix Dietrich – “Harmonic Artificial Intelligence based on Linear Operators”

1 Setting

The German Research Foundation (Deutsche Forschungsgemeinschaft, DFG) launched a call for proposals in the Emmy Noether Programme for early career researchers in the context of methods in Artificial Intelligence¹. This call was aimed at individuals from a wide range of disciplines who specialize in the field of AI method development. Successful applicants are given the opportunity to refine their research profile, improve their international visibility and become eligible for a professorship by leading an independent junior research group over a period of six years. Projects based on research questions addressing the development or enhancement of AI methods of any kind, as well as the formation of method theories and the analysis and review of AI methods, were eligible for funding.

I am really happy to announce that my proposal on “Harmonic Artificial Intelligence based on Linear Operators” has been approved at the end of 2021. The group with two doctoral candidates will start at the Technical University of Munich (TUM) in April 2022. It gets even better: TUM bestows the title “TUM Junior Fellow” for Emmy Noether research group leaders². TUM Junior Fellows are entitled to serve as primary reviewer for their own employees in doctoral procedures, as well as to review Bachelor’s, Master’s, and Diploma theses. The fact that I can supervise my own students in this capacity is tremendously important for the independence of my research group. In the following, I will introduce the main research context and also the main research goals I intend to achieve in the next six years.

¹See https://www.dfg.de/en/research_funding/announcements_proposals/2020/info_wissensschaft_20_83/index.html.

²See <https://www.professoren.tum.de/en/tum-junior-fellows>.

2 Research context

Artificial, deep neural networks are the current workhorse of data science, with applications ranging from computer vision to medical science. Inference in artificial intelligence (AI) is often performed by training such a neural network on results from simulations of a model, and then making predictions on unlabelled experimental data. An example is the search for exotic particles in high-energy physics with deep learning [1]. Recent scientific applications that successfully utilise this workflow abound in material, chemical, and physical science, among others [24]. Nevertheless, despite its success it is alarming that the adoption of AI in applications has far outpaced mathematical analysis of the methods involved. This leads to well-known deficiencies, such as the phenomenon of adversarial examples [9], demonstrating that networks can be brittle and liable to provide incorrect predictions, often with unknown biases. According to the EU commission³, “trustworthy AI requires algorithms to be secure, reliable and robust”, presenting a challenge for current neural network research.

Still, the first part of the inference workflow – obtaining data through simulations – has been successful for many decades in the field of scientific high-performance computing (HPC). Here, typically physical objects such as molecules, fluids, or even galaxies are simulated. The results, once processed and visualised, are then used by scientists to understand the emergent properties of the system. In that scenario, it usually is the scientist who learns about the system from the simulated data, and not an AI. However, for highly interconnected systems such as the climate, biology, or society, even the results of the simulations are complex and high-dimensional, and therefore are difficult to understand for humans.

³See https://ec.europa.eu/commission/news/artificial-intelligence-2019-apr-08_en.