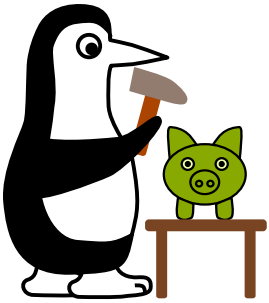
Quartl

1/2020
93. Ausgabe

Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	6
Workshop in Schloss Dagstuhl	9
Von einem, der auszog, neue Gipfel zu stürmen	13
Forschungsprojekt ArKTiK startet am LRZ	16
preCICE Workshop 2020	21
KONWIHR: new projects 2019	23
Your KONWIHR contacts	25
PARNUM 2019	27
Monte Carlo in New Mexiko	29
Ferienakademie 2020: Kursprogramm & Bewerbung	33
Das Lehrstuhltreffen in Zeiten von Corona	35
Nachwuchswissenschaftler	37
Notiz*Notiz*Notiz	38

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

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

Editorial

Eigentlich gehe ich ja fest davon aus, dass die Leserschaft des Quartls mit dem Begriff „Phrasenschwein“ vertraut ist. Um aber sicherzugehen, schauen wir schnell auf der Webseite der GfdS (Gesellschaft für deutsche Sprache e.V.) nach und lesen dort in einer Glosse:
„*Das Wort Phrasenschwein hat es bislang noch nicht ins Wörterbuch geschafft, ist aber allen Menschen geläufig, die sonntags um elf Uhr das Deutsche Sportfernsehen einschalten und die Sendung „Doppelpass“ anschauen. Für alle Leser/-innen, die das nicht tun, sei erläutert, was es mit dem Phrasenschwein auf sich hat: Es handelt sich um ein Sparschwein, und von den Gästen der Sendung, die den aktuellen Bundesligaspieltag zwei Stunden lang analysieren, wird Geld hineingeworfen. Dieses Geld wird immer dann als Strafe fällig, wenn einer der Herren (abgesehen von einem einzigen der Redaktion erinnerlichen Besuch der ZDF-Sportjournalistin Katrin Müller-Hohenstein handelt es sich bei den Gästen ausschließlich um Herren) eine Phrase verwendet.*“
Und mit einer solchen Phrase wollen wir unser Editorial diesmal beginnen. Zwar ist es fraglich, ob man diese beim „Doppelpass“ antreffen würde, aber eine Strafzahlung wert ist sie allemal: *Das einzig Beständige ist der Wandel.* Ende des Vorspiels.

Im Rahmen ihres ja im vergangenen Jahr für förderwürdig erklärten Zukunftskonzepts erfindet sich die TUM gerade strukturell neu: Aus aktuell 15 Fakultäten werden in den kommenden Jahren sieben Schools werden – größer, breiter aufgestellt hinsichtlich des Fächerspektrums und vor allem handlungsfähiger, so der Plan. Im Gegensatz zu vielen Konzernen, wo grundlegende Umstrukturierungen ja fast in der Frequenz von Schaltjahren auf der Agenda zu stehen scheinen (bzw. jeder neue CEO das vom Vorgänger Zusammengelegte trennen, das vom Vorgänger Getrennte zusammenlegen, das Zugekaufte verkaufen und Verkauftes durch Zukäufe ersetzen zu müssen scheint), passiert das bei Universitäten ja nicht ganz so oft. Im Regelfall ist man dort zwar in Sachen Forschung und Lehre sehr innovativ und stets offen für Neues, in strukturellen Dingen gibt man sich aber meist betont konservativ: Alter, Tradition sowie ein Schuss „Das haben wir schon immer

so gemacht“ geben meist den Ton an. Der Bezug zum Phrasenschwein ist aber dennoch gerechtfertigt, wenn man bedenkt, dass einige der Fakultäten der TUM gerade mal ein paar Jahre (TUM School of Governance, TUM School of Education) bzw. Monate (Fakultät für Luftfahrt, Raumfahrt und Geodäsie) auf dem Buckel haben. Und da steht sie bei Nachfragen dann schon des Öfteren im Raum, die obige Phrase.

Wenn Sie jetzt verwirrt sein sollten, weil hier eine „TUM School of Education“ als Fakultät (alt) genannt wird, die nach dem zuvor Gesagten demnächst in einer School (neu) aufgehen soll, aber irgendwie doch auch schon School ist, dann sind Sie mit Ihrer Verwirrung nicht allein. Und die Verwirrung geht sogar noch weiter, gibt es doch an der TUM noch einen dritten School-Begriff, sichtbar etwa an der „Munich School of Engineering“ (MSE). Die nun wiederum ist weder Fakultät (alt) noch School (neu), sondern ein so genanntes „Integrative Research Center“ (IRC), Freunden der Matrix-Struktur am besten zu verklickern als Zeile in einer Organisationsmatrix, in der Fakultäten (heute) bzw. Schools (morgen) die Spalten darstellen. Man könnte an dieser Stelle auch noch näher auf den feinen Unterschied zwischen einer *Munich* School und einer *TUM* School eingehen, aber das würde den Rahmen dieses Editorials sprengen. Zumal es auch noch einen vierten School-Begriff gibt, den man z.B. in der „Munich School for Data Science“ findet. Im Gegensatz zur „Munich School of Engineering“, die zwar *Munich* heißt, aber im Grunde *TUM* ist, ist die *Munich School for Data Science* wirklich *Munich*, sind dort doch mehrere Universitäten und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen institutionell verbandelt. Aber wir in der Wissenschaft lösen ja bekanntlich schwierige Probleme.

Ach ja, das bringt mich noch auf eines der ganz alten ungelösten Probleme der Menschheit – nämlich, ob es nun im Englischen (bzw. American English, Britisch English, English English, ...) eigentlich „Dingsbumms OF ...“ oder „Dingsbumms FOR ...“ heißt, oder ob am Ende gar beide Formulierungen erlaubt sind?

Doch zurück zu den Schools – also den neuen, an der TUM die Fakultäten ersetzenden. Eines wollen und werden wir hier nicht tun: in die Diskussion der Sinnhaftigkeit einsteigen. Wie Sie, liebe Leserinnen und Leser, sich fraglos denken können, wurde das an meiner Universität erschöpfend (in jedem Sinne dieses Wortes) getan. Und auch wenn bei Weitem nicht jeder oder jede eine ihn bzw. sie zufriedenstellende Antwort erhalten hat, so findet dieser Prozess jetzt statt. Also bitte nicht „Augen zu und durch!“, und bitte auch kein Fake-Konstrukt à la „alter Wein in neuen Schläuchen“, das manche als elegant ansehen, in Wahrheit aber eine gigantische Zeitverschwendung wäre. Sondern lasst uns etwas draus machen, das uns voranbringt. So sind wir aktuell im konkreten Fall am Basteln der „TUM School of Computation, Information, and Technology“ (CIT), im Wesentlichen ein Zusammenschluss der drei Fakultäten für Mathematik, für Informatik sowie für Elektrotechnik und Informationstechnik. Deren Narrativ – die grundlegenden Technologien der Digitalisierung unter einem Dach vereint (weshalb auch mal der Name „TUM School of Digital Science and Technology“ im Raume stand) – hat ja durchaus Charme, und ist jetzt auch nicht etwas, das es international an jeder renommierteren Straßenecke schon gibt. Da kann man also Akzente setzen – und eine gewisse Wucht entfalten. Denn das CIT-Gebilde wird grob geschätzt um die 14,000 Studierende und 150 Professuren umfassen, was an so manch anderem Ort ja schon mal zur Universität ausreicht ...

Also kein weiterführendes Pro & Contra im Quartl. Einen Gedanken möchte ich aber noch kurz aufgreifen, der etwas grundsätzlicher ist; eine Frage, mit der ich als Dekan in den letzten Monaten immer wieder konfrontiert wurde, wenn Kollegen oder Kolleginnen mich fragten „Warum sollen wir das tun? Es läuft doch gut.“ Und schon war man in einer Defensiv-Position, rang um Argumente – obwohl man doch vielleicht selbst gar nicht von jeder Facette überzeugt war. Warum muss eigentlich der (oder die – ich lasse das jetzt weg ...), der morgens etwas ändern möchte, sich erklären; der, der morgens nichts ändern möchte, dagegen nicht? Warum bedarf das Ändern der Rechtfertigung, das Belassen dagegen nicht? Es ist doch kein Naturgesetz, dass eine herausragende Ausgangsposition ein Freibrief für den Bestand ist. Wenn man diesen Gedanken weiterspinnt, nähert man sich fast unweigerlich wieder der

eingangs genannten Phrase, samt eines ihrer Kontrahenten, „Never change a winning team“.

Aber jenseits aller Philosophie: Es ist, wie es ist, wir basteln mit Hochdruck an den Schools, vor allem an „unserer“ CIT-School, und sie wird gut werden!

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, Frohe Ostern, eine erfolgreiche Eiersuche und, natürlich, viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls - gerade in diesen nicht so erbaulichen Corona-Zeiten!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=34
04. März 2020

Mitunter bezeichnet man es als Dualität – das Phänomen, dass Menschen einerseits einen Körper haben und andererseits auch etwas was man meist als Geist bezeichnet. Im christlichen Menschenbild kommt dazu die Seele, sodass sich eine Trinität, ein komplexes Zusammenspiel dreier Komponenten, ergibt. Die Zuordnung menschlichen Verhaltens zu den zwei oder drei Komponenten zeigt die Schwierigkeit, die sich aus dem Konzept ergibt. Ist ein Verhalten „genetisch“ bzw. „biologisch“ bedingt? Gibt es so etwas wie den „freien Willen“ oder ist das was wir als freien Willen empfinden nur eine logische Funktion der biologisch materiellen Voraussetzungen?

Eine Zeit lang galt die Genetik als eine Art Wunderwaffe um Menschen und ihr Verhalten zu erklären. Populäre Wochenzeitungen wie der Spiegel verkündeten etwa, dass dieses oder jenes Phänomen rein biologisch und damit naturwissenschaftlich erklärbar sei. So wurde etwa diskutiert, dass Vergewaltigungen ein logisches biologisch verursachtes Verhalten seien und die Berichte gingen so weit, die Frage zu stellen, ob die Täter überhaupt noch als verantwortlich im juristischen Sinn angesehen werden könnten oder ob sie im juristischen Sinn nicht eigentlich de facto schuldunfähig seien – da biologisch determiniert. Die Gegenüberstellung von „rational biologischer“ Analyse und „irrational religiös“ geprägten Denkweisen war dabei nur ein schwacher Versuch, durch einen Schwarz-Weiss-Effekt eine These zu stützen, die von Anfang an auf schwachen Füßen stand – war doch den Experten der Genetik sehr schnell klar, dass die Reduktion menschlichen Verhaltens auf ein einziges Gen nicht annähernd ausreichen konnte um komplexe soziale Verhaltensweisen zu beschreiben.

Die Aufrechterhaltung der Dualität – oder Trinität – menschlicher Natur war lange Aufgabe monotheistischer Religionen. Die Annahme ist naheliegend: wenn der Mensch sich materiell – also in seiner Materialität – nicht vom Tier unterscheidet, so muss es ein Element außerhalb der materiell biologischen Welt geben, das diesen Unterschied verursacht. Der Geist und die Seele werden so zu einem Element außerhalb der Biologie, das dann auch von außen – und intentional – der Materie beigefügt wird. „Da machte Gott der Herr den Menschen aus Staub von der Erde und blies ihm den Odem des Lebens in seine Nase. Und so ward der Mensch ein lebendiges Wesen.“[a]

[a] https://www.die-bibel.de/bibelstelle/1.Mose%202,4b%E2%80%933,24

Das Faktum eines menschlichen Geistes wird also erklärt über ein dem Menschen übergeordnetes Wesen, das die Fähigkeit hat, dem zunächst rein materiellen Produkt eben diesen Geist einzugeben und ihn damit erst zum „Menschen“ zu machen. Damit steht das übergeordnete Wesen zunächst außerhalb aller menschlichen Überlegungen. Das beeindruckende an Jesus Christus ist dann die Geschichte von der Menschwerdung Gottes – also die Aufhebung dieses Gegensatzes, zumindest für einen historischen Moment.

Lehnt man diese Theorie ab – und aus wissenschaftlicher Sicht finden sich Argumente für eine solche Ablehnung – so stellt sich die Frage aber noch immer: was führt dazu, dass aus der Materie der „Geist“ entsteht und was ist dieser Geist? Die aktuell am weitesten verbreitete These ist die These vom Umschlag der Quantität in eine neue Qualität. Durch die steigende Komplexität und Größe des Gehirns ergäbe sich irgendwann (der Zeitpunkt wird weder genannt noch gibt es nachvollziehbare Kriterien) ein menschliches Bewusstsein und ein menschlicher Geist. Das Konzept ist so beliebt, dass es sich sowohl in der Wissenschaft als auch in der Trivialliteratur großer Beliebtheit erfreut. Symbolisch für diese Ansicht über den Geist und das Selbstbewusstsein ist eine Sequenz aus dem Film „I, Robot“ (ein Film der sich an das Buch „I, Robot“ des amerikanischen Autors Isaac Asimov anlehnt) in der der geniale Entwickler Dr. Lanning meint es hat immer Geister in der Maschine gegeben. Zufällige Codesegmente gruppierten sich und formten unerwartete Protokolle. Diese unvorhergesehenen freien Radikale rufen grundlegende Fragen hervor nach freiem Willen, Kreativität und sogar nach der Natur dessen, was wir Seele nennen. Auffallend dabei ist die Herleitung und die Konnotierung die in dieser kurzen Sequenz vorgenommen wird – die aber zentral in ihrer Bedeutung zur Erklärung des gesamten Konzepts intelligenter Roboter ist. Zunächst spricht der Film von „Geistern“ in der Maschine. Diese Geister und ihre Entstehung werden erklärt durch Begriffe wie „zufällig“, „unerwartet“ und „gruppierten sich“. Wieder ist der Prozess magisch. Doch diesmal gibt es nicht den externen „Begeisterer“, sondern es spielt sich „zufällig“ ab. Ähnlich wie in der göttlichen Entstehungsgeschichte ergibt aber auch die zufällige Begeisterung das gesamte Paket und wir sehen „freien Willen“, „Kreativität“ und – wenn auch mit Einschränkungen – „Seele“.

Alles nur Unterhaltung? Der Autor Raymond Kurzweil beschreibt in seinem Buch „Singularität“ eine ähnliche Entstehung. Demnach wird es im Bereich der „Künstlichen Intelligenz“ irgendwann einen Umschlag der Quantität in Qualität geben. Irgendwann ist die Rechenleistung so hoch, dass Intelligenz entstehen muss.

Viel weiter sind wir als Menschen wohl bisher noch nicht gekommen. Nur Gott oder der Zufall erscheinen uns als Möglichkeiten, uns selbst zu erklären. Und auch wenn der Zufall sich doch aus entweder der Biologie oder der technischen Entwicklung erheben soll, so bleibt doch zuletzt die Essenz: wir wissen nicht wie, aber wir glauben an den Zufall.

Kann es Zufall sein, dass Sie das hier lesen, verstehen und darüber nachdenken können? Und sind Lesen, Denken, Verstehen, Urteilen tatsächlich immaterielle Phänomene? Ist Gott nur das mythologische Gegenstück zum wissenschaftlichen Zufall? Oder ist der wissenschaftliche Zufall nur der Versuch, Gott zu erklären ohne ihn beim Namen zu nennen?

M. Resch

Workshop in Schloss Dagstuhl, 01.03.-06.03.2020

Resiliency in Numerical Algorithm Design for Extreme Scale Simulations

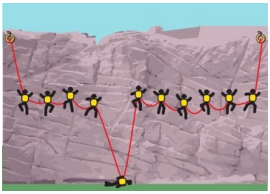
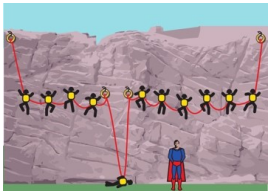
Das Leibniz-Zentrum für Informatik in Schloss Dagstuhl im Saarland veranstaltet wöchentlich Seminare zu Themen der Informatik. Nach dem Vorbild des mathematischen Forschungsinstituts in Oberwolfach finden die Seminare jeweils von Sonntag Abend bis Freitag mit ca. 40 Teilnehmern in klösterlicher Abgeschiedenheit statt, so dass viel Zeit für Vorträge, Diskussionen und Gespräche besteht. Das Seminar in der Woche 01.03. - 06.03.2020 wurde von Linda Stals (Australian National University), Luc Giraud (Inria Bordeaux) und Ulrich Rüde (FAU Erlangen und CERFACS) organisiert mit dem Thema „Resiliency in Numerical Algorithm Design for Extreme Scale Simulations“.

Bei den extrem großen Rechnern im Exascale-Bereich wird die Fehlertoleranz und Ausfallsicherheit zunehmend zu einem kritischen Faktor. Dies liegt darin begründet, dass in so großen Systemen die Zahl der Einzelkomponenten sehr groß ist, so dass die durchschnittliche Zeit bis zum Ausfall einer der Komponenten immer kürzer wird. Herkömmliche Rechnerarchitekturen stürzen leider als Ganzes ab, selbst wenn nur eine der vielen Komponenten ausfällt. Ebenso problematisch sind aber auch sogenannte „silent errors“, also Fehler, bei denen einfach ohne extra Warnung ein Bit umkippt. Dies kann z.B. durch kosmische Strahlung ausgelöst werden. Selbst wenn die Wahrscheinlichkeit sehr klein ist, dass somit eine einzelne digitale Zahl einen Fehler bekommt, kann das bei Algorithmen, in denen viele Trilliarden Rechenoperationen ausgeführt werden, nicht mehr von vornherein ausgeschlossen werden. Der Bau von sehr großen und trotzdem zuverlässigen Supercomputern erfordert deshalb, dass man Redundanz schafft, was die ohnehin schon sehr hohen Anschaffungs- und Betriebskosten dieser Supercomputer noch weiter hochtreiben würde. Insbesondere der sowieso schon sehr hohe Energieverbrauch würde damit noch weiter ansteigen.

Eine andere Möglichkeit, sich vor Fehlern zu schützen, ist das Prinzip der „Checkpoints“. Dabei werden die Daten periodisch auf Platte geschrieben, so dass nach einem erkannten Fehler oder Teilabsturz das System die Berechnung nicht von Beginn an wiederholen, sondern nur bis zum letzten „Checkpoint“ zurückgehen muss. Aber auch dieses Prinzip erreicht bei großen Datenmengen seine Grenzen. In manchen Szenarien kann man ausrechnen, dass das Hinausschreiben eines Checkpoints auf den Plattenspeicher länger dauern könnte als die durchschnittliche Zeit zwischen zwei Hardwarefehlern. Damit sind dem Prinzip des „Checkpoint-Restart“ ebenfalls Grenzen gesetzt.
Im Bereich des Exascale Computing wird deshalb zunehmend erforscht, ob Algorithmen selbst Fehler erkennen können, ob bekannte Algorithmen anfällig gegen Fehler sind, oder ob sie fehlertolerant sind, z.B. weil sie mögliche Fehler automatisch und inhärent korrigieren können. Andere Algorithmen können so erweitert werden, dass sie auf einen Fehlerfall gezielt reagieren können, sobald dieser erkannt wurde. Dies bringt dann zusätzlich das Problem mit sich, wie man erkennt, ob ein Fehler aufgetreten ist. Kurz, aus der Fragestellung der „Resiliency“ ergeben sich höchst anspruchsvolle und neuartige Forschungsfragen, zu deren Beantwortung eine interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Algorithmenentwicklern, Rechnerarchitekten und Spezialisten in der Systemsoftware unerlässlich ist. Allein schon die Klassifikation der Fehlerarten ist nicht einfach.

Ein mögliches Konzept um den Ausfall von Prozessoren zu kompensieren, die in Bayern erfundene, sogenannte „Superman“-Strategie [1] wird in den folgenden Cartoons erläutert. Tritt in einer parallelen Rechnung ein Fehler auf, d.h. wenn einer der Kletterer abstürzt, dann werden zunächst die unversehrten Kletterer gesichert. Ein besonders leistungsstarker Prozessor, der „Superman-Kletterer“ wird zum Einsatz gebracht um das nun fehlende gelbe Datenpaket möglichst schnell zu rekonstruieren. Währenddessen können die anderen Kletterer auch weiterarbeiten. Kann ein Fehler so geködert werden, tritt im Vergleich zur ungestörten Ausführung kaum eine Verzögerung auf.

[1] Huber, M, Gmeiner, B, Rude, U, Wohlmuth, B 2016; Resilience for massively parallel multigrid solvers; SIAM Journal on Scientific Computing, 38-5, S217-S239

Die Fragen zur Fehlertoleranz wurden auch im DFG-Schwerpunktprogramm Software für Exascale Computing (SPPEXA) bearbeitet. Nicht zuletzt durch diese wichtigen Fördermaßnahmen hat die deutsche Forschung in diesen Bereichen eine Spitzenstellung erreicht, so dass mehrere Vertreter von SPPEXA-Projekten nach Dagstuhl eingeladen waren. Natürlich war das Seminar auch hochrangig international besetzt mit Teilnehmern aus den USA, Australien, der Schweiz, Frankreich, Spanien und Italien. Besonders erfreulich war, dass auch viele jüngere Wissenschaftler eingeladen werden konnten.

Das Seminar begann in Dagstuhl mit einer kurzen Vorstellungsrunde der Teilnehmer. Danach folgten im Wechsel Diskussionsrunden in Arbeitsgruppen und Sitzungen mit allen Teilnehmern. Dadurch konnte die kreative Arbeit in kleinen Gruppen erfolgen, und die so erzielten Teilergebnisse und Teilthemen konnten gut aufeinander abgestimmt werden. Die Ergebnisse wurden dazu jeweils direkt im Laufe des Seminars immer wieder in Präsentationsfolien gegossen, und auch der Berichtstext wurde gleich ausgearbeitet. Nach fünf Tagen intensiver Arbeit konnte damit bereits die Rohfassung eines Berichts zum Thema „Resiliency in Numerical Algorithm Design for Extreme Scale Simulations“ erarbeitet werden, der sowohl den Stand der Forschung zusammenfasst als auch einen Ausblick auf zukünftige Entwicklungen und wichtige neue Forschungsthemen bietet.

Bei dieser Art, ein Seminar durchzuführen, war erstaunlich zu erleben, wie gut inzwischen Software zur kooperativen, gemeinsamen Erstellung von Dokumenten funktioniert. Ohne diese technischen Möglichkeiten wäre das Seminar in dieser Form sicher nicht durchführbar gewesen. Wir haben auch die Erfahrung gemacht, dass gerade die gemeinsame Arbeit an einem längeren Text oft zu besonders intensiven Diskussionen geführt hat. Diese ungewöhnliche Organisationsform eines Fachseminars wurde deshalb von vielen Teilneh-

mern gelobt.
Wir möchten aber auch herausstellen, dass die Arbeitsatmosphäre in Dagstuhl wesentlich zum Gelingen des Konzepts beigetragen hat. Dazu gehört die Abgeschiedenheit des Instituts und die persönliche Anwesenheit der Teilnehmer über einen längeren Zeitraum. Viele der Diskussionen finden letztlich auch bei den gemeinsamen Mahlzeiten oder Kaffeepausen statt, und sie werden oft genug auch bei einem Glas Wein bis in die späte Nacht fortgesetzt. Leider mussten relativ viele Eingeladene kurzfristig ihre Teilnahme absagen. Neben individuellen Erkrankungen haben vor allem die Reisebeschränkungen infolge der Covid-19-Pandemie vermehrt zu Absagen geführt. Um dies auszugleichen, wurde es auch ermöglicht, dass Teilnehmer sich per Videokonferenz zu einigen Sitzungen dazu schalten konnten. Auch wenn dies die persönliche Teilnahme an den Diskussionen nicht ersetzen kann, konnten so doch einige der ansonsten verhinderten Kollegen zum Seminar und zu dem entstehenden Bericht beitragen. Der Bericht wird nach Abschluss des Seminars noch im Detail überarbeitet werden, und natürlich wird er nach der Fertigstellung in einer der nächsten Quartl-Ausgaben dann noch genauer vorgestellt werden.

Abbildung 1: Teilnehmer am Seminar in Schloss Dagstuhl

Ulrich Rüde

Von einem, der auszog, neue Gipfel zu stürmen

HTW Chur
Hochschule für Technik und Wirtschaft
University of Applied Sciences

Grüezi wohl! Nachdem ich den trauten Schoß der TUM im Oktober verlassen habe, ist es nun an der Zeit, ein kurzes Ping aus dem „EU-Ausland“ zu schicken. Bei fast vollständiger Netzabdeckung in der Schweiz auch keine sonderliche Schwierigkeit, oder? Nur falls der Andi, also der Scheuer, mal vorbeikommen möchte. Obwohl, dann parkieren auf dem Trottoir demnächst lauter E-Scooter und ein etabliertes Mautsystem wird (pseudo-)revolutioniert. Ich schweife ab. Dabei wollte ich doch über das Zügeln sprechen. Und die damit verbundenen Tücken. Spätestens wenn man am Grenzübergang gefragt wird, ob man etwas zu verzollen hätte. Natürlich nicht. „Gut, dann würde ich gerne noch die Zollerklärung für Ihr KFZ sehen.“ Upps! Inzwischen wurde mein bajuwarisches Fortbewegungsmittel nach Begleichung der CO2-Sanktion (nicht gerade wenig) und erfolgreicher Motorfahrzeugkontrolle, kurz MFK, eingelöst und vorne sowie hinten prangen Schweizer Kontrollschilder, die schon von weitem meine kantonale Zugehörigkeit verraten. Wer jetzt ans Heidiland denkt, liegt fast richtig. Es hat mich in den Bündner Kantonshauptort Chur verschlagen, genauer gesagt an die FHGR *formerly known as* HTW.

Die Fachhochschule Graubünden ist seit dem 01.01.2020 eigenständig und damit die achte öffentlich-rechtliche Fachhochschule in der Schweiz. Mit etwas über 2.000 Studierenden und knapp 300 Mitarbeitern bietet sie diverse Bachelor- und Masterstudiengänge aus den Bereichen Architektur, Bauingenieurwesen, Tourismus, Management, Multimedia Production, Technik und Digital Science. Jüngstes Kind ist das Zentrum für Datenanalyse, Visualisierung und Simulation (DAViS), das der Kanton im November 2018 bewilligt hat und mit einem Beitrag von 3,6 Millionen Franken unterstützt. Zusammen mit dem Schweizerischen Institut für Allergie- und Asthmaforschung (SIAF) in Davos soll in den oben genannten Schwerpunkten mittels DAViS Forschung, Beratung und Lehre betrieben werden. In enger Kooperation mit dem Schweizerischen Supercomputing-Center (CSCS) hat DAViS

zudem Zugriff auf den Höchstleistungsrechner „Piz Daint“ in Lugano, auch wenn der gleichnamige Berg in Graubünden und nicht im Tessin steht. Kantonale Feinheiten. Apropos - Graubünden ist der einzige Kanton mit drei Amtssprachen: Deutsch, Italienisch und Rätoromanisch. Für letztere gibt es an der FHGR zwar Sprachkurse, aber im Rahmen eines aktuellen Forschungsprojekts möchte das DAViS-Team dem Rumantsch mittels Deep Learning-Methoden seine Eigenheiten entlocken. Na dann, *vinavant*!

Da ich bekanntermaßen kein NLP-Spezialist bin (Neuro-Linguistische Programmierung war durchaus Teil meiner ProLehre-Ausbildung, aber hier geht’s ja um Natural Language Processing), gehören Simulation und HPC zu meinen Hauptaufgaben. An Industriepartnern mangelt es keineswegs, sodass uns seitens DAViS momentan mehr Möglichkeiten als Kapazitäten für zukünftige Forschungsvorhaben zur Verfügung stehen. Der hiesige Fördertopf heisst übrigens Innosuisse, bei dem Universität und Industriepartner gemeinsam Anträge stellen mit dem Ziel, die Schweizer Industrielandschaft zu stärken. Der Partner stellt dabei 50 % der Gesamtsumme (10 % cash, 40 % in-kind) bereit, die Universität erhält den gleichen Teil als Förderung von Innosuisse. Ich werde versuchen, hier regelmässig zu berichten sowie spannende Entwicklungen vorzustellen.

Abbildung 1: Blick aus dem Büro

Da ja eingangs vom Zügeln die Rede war, greife ich das Thema nochmals auf. Inzwischen haben wir unseren (nahezu) gesamten Hausstand nach Chur verfrachtet. Nach sorgfältiger Inventarisierung aller 150 Umzugskartons gab es keine weiteren Zwischenfälle beim Zoll. Sehr entgegenkommend sind da auch die Schweizer Regularien bei der Einfuhr von Alkohol. Im Rahmen eines Umzugs dürfen haushaltsübliche (!) Mengen zollfrei eingeführt werden, d. h. 200 Liter unter 25 % vol und 12 Liter über 25 % vol. Langsam wird mir auch klar, weshalb bei uns am Institut so eine ausgeprägte Apéro-Kultur vorherrscht. Man gewöhnt sich schnell an die lockere Lebensart der Eidgenossen, oder? Und wer vermisst da schon Funklöcher, unpünktliche Züge, halbfertige Flughäfen u. s. w. ? Na gut, hierzulande fängt die Luftwaffe keine entführten Flugzeuge außerhalb der Bürozeiten ab; aber davon erzähle ich ein anderes Mal. Fortsetzung folgt...

Ralf-Peter Mundani

Forschungsprojekt ArKTiK startet am LRZ

Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Die Physik lässt sich bekanntermaßen nicht betrügen. Insofern gilt auch beim Betrieb von Hochleistungsrechnern der Energieerhaltungssatz und insbesondere der erste Hauptsatz der Thermodynamik: Energie wird nicht verbraucht sondern lediglich umgewandelt. Beim Betrieb von Computern wird elektrische Energie ohne Verluste in Wärme umgewandelt. Die Berechnungen, die der Computer bei diesem Prozess ausführt sind aus thermodynamischer Sicht noch nicht einmal ein Abfallprodukt, da sie ja keinerlei Energie enthalten. Für den Betreiber eines (Hochleistungs-) Rechners verhält es sich natürlich genau umgekehrt: er oder seine Kunden sind an den Ergebnissen der Berechnungen interessiert und die dabei entstehende Wärme ist ein Abfallprodukt, das unter Einsatz zusätzlicher Energie entsorgt werden muss.

Konventionelle Rechenzentren arbeiten typischerweise mit Luftkühlung: die Rechner werden mit kalter Luft (um die 20°C) gekühlt, die zumindest in den Sommermonaten mit Hilfe von Kältemaschinen unter enormem Energieaufwand erzeugt werden muss. Je nach klimatischen Bedingungen und Effizienz der Anlage, benötigt diese Art der Kühlung 100-300 Watt elektrischen Strom um ein Kilowatt Kälteleistung zu erzeugen. Der Aufschlag für Luftkühlung liegt also mithin bei 10-30%. In der kühlen Jahreshälfte kann die Kälte jedoch auch ohne Kältemaschinen, durch sog. freie Kühlung, aus der Umgebungsluft erzeugt werden und der Aufschlag für die Kühlung sinkt auf wenige Prozent. Betreibt man einen Höchstleistungsrechner wie den SuperMUC-NG am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften mit einer durchschnittlichen elektrischen Leistungsaufnahme von 2,5 Megawatt, würden bei Einsatz von Luftkühlung weitere 250-750 Kilowatt Strom verbraucht werden, um die Maschine zu kühlen. In Anbetracht der hohen Strompreise in Europa und insbesondere in Deutschland würde eine solche Kühlung die Betriebskosten des Höchstleistungsrechners massiv erhöhen.

Glücklicherweise kann man sich auch hier die Physik zu Nutze machen. Luft ist ein denkbar schlechtes Medium zur Kühlung: ihre Wärmekapazität ist gering und der Wärmewiderstand sehr hoch. Deshalb muss man bei Luftkühlung riesige Mengen an kalter Luft bewegen, um die gewünschte Kühlleistung zu erzielen. Deutlich besser geeignet ist Wasser, das die Abwärme leichter aufnehmen und abtransportieren kann. Verwendet man Wasser zur Kühlung, benötigt man niedrigere Volumenströme und kann mit deutlich höheren Temperaturen arbeiten.

Das LRZ setzt deshalb bei seinen Hochleistungsrechnern seit 2011 direkte Warmwasserkühlung ein. Dabei wird warmes Wasser von bis zu 50°C über Kühlkörper direkt an die heißen Komponenten des Rechners wie Prozessoren und Speichermodule herangeführt, um diese zu kühlen. Aufgrund der hervorragenden thermischen Eigenschaften von Wasser können diese Komponenten selbst mit so warmem Wasser ausreichend gekühlt werden. So liegt beispielsweise die Oberflächentemperatur eines Prozessors im SuperMUC-NG unter Volllast selbst bei Wassertemperaturen von 50°C deutlich unter der Temperatur, die er bei Luftkühlung mit 20°C hätte. Der große Vorteil dieser Art der Kühlung liegt darin, dass durch die hohen Temperaturen keine Kältemaschinen erforderlich sind, um diese zu erzeugen. Selbst im Hochsommer bei Außentemperaturen über 30°C kann das Kühlwasser durch die Umgebungsluft auf 50°C gehalten werden. Dadurch liegt der Kühlaufschlag für den SuperMUC-NG das ganze Jahr über bei wenigen Prozent. Die Warmwasserkühlung trägt somit stark dazu bei, den Gesamtstromverbrauch des Rechners zu reduzieren und die Betriebskosten zu senken.

Wie eingangs erwähnt, geht Energie nicht verloren sondern wird nur umgewandelt. Im Fall des SuperMUC-NG wird sie also von elektrischer Energie in Wärme umgewandelt, die dank der direkten Wasserkühlung im Wasser gebunden ist. Dadurch lässt sie sich, anders als in Luft gebundene Wärme, leicht weiterverwerten. Beispielsweise für Heizungszwecke oder als Prozesswärme in industriellen Anlagen. Leider gibt es am Forschungscampus Garching keine industriellen Anlagen, die diese Prozesswärme verwerten

könnten und der Bedarf an Heizwärme ist, nicht nur im Sommer, dank immer besser gedämmter Gebäude auch nur gering. Zwar gibt es am Campus ein Fernwärmenetz, in das man die Abwärme theoretisch einspeisen könnte, jedoch ist dessen Temperaturniveau deutlich höher als die 55°C, die der SuperMUC-NG maximal erzeugen kann.

Das LRZ forscht deswegen seit vielen Jahren an Konzepten, um die Abwärme seiner Hochleistungsrechner anderweitig zu nutzen. Ein vielversprechender Ansatz ist hier die Nutzung von Adsorptionskühlung um aus Abwärme Kälte zu erzeugen. Dabei wird in einem kontinuierlichen Prozess Wasser unter Abgabe von Kälte verdampft, der Wasserdampf durch ein Sorptionsmittel unter Abgabe von Wärme adsorbiert, danach unter Zufuhr von Wärme wieder desorbiert und schließlich unter Abgabe von Wärme an einem Kondensator wieder verflüssigt. Durch diese vielen Änderungen des Aggregatszustands des Wassers wird im Wesentlichen, unter Einhaltung des Energieerhaltungssatzes, die Wärmeenergie zwischen unterschiedlichen Temperaturniveaus hin- und hergeschoben. Die Details würden den Umfang dieses Artikels deutlich sprengen, an dieser Stelle ist jedoch folgendes Verständnis völlig ausreichend: über den sog. Hochtemperaturkreis (HT, 50°C) wird der Adsorptionskältemaschine die Abwärme zugeführt und über den Niedertemperaturkreis (LT, 20°C) die entstehende Kälte abgeführt. Die Wärmeenergie, die diesen beiden Kreisen entnommen wird, muss dann über den Mitteltemperaturkreis (MT, 25°C) rückgekühlt werden, beispielsweise über einen Kühlturm. Da bei diesem Verfahren kaum mechanische Arbeit verrichtet werden muss, muss auch nur wenig zusätzliche Energie in Form von Strom zugeführt werden. Der Aufschlag für Adsorptionskühlung liegt deshalb in etwa auf dem gleichen Niveau wie der für freie Kühlung.

Zwar setzt das LRZ bei seinen Hochleistungsrechnern stark auf Warmwasserkühlung und versucht die Luftkühlung weiter zurückzudrängen, jedoch wird es auf absehbare Zeit auch weiterhin viele Komponenten (wie Speichersysteme und Netzwerkkomponenten) in Rechenzentren geben, die mit kalter Luft gekühlt werden müssen. Deshalb ist für das LRZ der Einsatz von Adsorptionskühlung interessant, da dadurch auch luftgekühlte Komponenten

mit einer ähnlichen Effizienz wie direktwassergekühlte Komponenten gekühlt werden können.

Nach ersten prototypischen Installationen von Adsorptionskältemaschinen am CooLMUC-1 (6kW Kälteleistung) und CooLMUC-2 (60kW Kälteleistung) und deren Evaluierungen, beteiligt sich das LRZ nun am BMBF-geförderten Verbundforschungsprojekt ArKtIK (Adsorptions-Kältetechnologie für Informationstechnologie-Kühlung). Zusammen mit den Partnern Invensor, Megware und Cloud&Heat soll in diesem Projekt die Technologie entwickelt werden um die Adsorptionskühlung besser an die Bedürfnisse von Rechenzentren anzupassen. Im Mittelpunkt der Forschungsaktivitäten wird dabei einerseits stehen, den Adsorptionsprozess bei den in Rechenzentren vorherrschenden Temperaturniveaus effizienter zu gestalten. Typischerweise sind Adsorptionskältemaschinen nämlich auf Antriebtemperaturen über 70°C ausgelegt, die in Rechenzentren kaum zu erreichen sind wo sie sich eher im Bereich unter 60°C bewegen.

Andererseits sollen im Projekt modulare Adsorptionskältemaschinen entwickelt werden, durch die sich ihr Installationsaufwand und dessen Komplexität deutlich reduzieren lassen. Da Adsorber wie oben beschrieben insgesamt 3 Wasserkreisläufe haben, die mit externen Komponenten durch Rohrleitungen verbunden werden müssen, ist der Installationsaufwand nämlich bei herkömmlichen Adsorptionskältemaschinen extrem hoch. Durch die Entwicklung von kompakten und modularen Adsorbern, die sich zum Einbau in Computerracks eignen, kann dieser Aufwand deutlich reduziert werden: durch die unmittelbare räumliche Nähe zu Wärmeerzeugern und Kälteverbrauchern, können der HT- und LT-Kreis durch kurze Schlauchverbindungen ausgeführt werden, und es muss lediglich der MT-Kreis von den Rückkühlwerken in den Computerraum geführt werden.
Insofern würde sich der Verrohrungsaufwand einer solchen Lösung kaum von dem der direkten Warmwasserkühlung unterscheiden. Außerdem wird durch diese modulare Bauweise die Wiederverwendung der Adsorptionskältemaschinen bei der nächsten Rechnergeneration deutlich erleichtert.
Während IT-Infrastrukturen typischerweise Lebenszyklen von 5 oder 6 Jahren

haben, wird Kühlinfrastruktur eher für 20-30 Jahre ausgelegt.

Das ArKTIK-Projekt startete am 1. März 2020 und hat eine Laufzeit von 2,5 Jahren.

Ludger Palm

Workshop 2020

The 1st preCICE Workshop could not have taken place anywhere else rather than at its first home, at the TUM Department of Informatics and the SCCS. 42 participants traveling “preferably by train” from 8 countries had the chance to present their research in coupled problems, learn about the preCICE coupling library, actively shape its future, and discuss with the community.

As the first workshop in a series, we wanted to create a place where both novice and experienced users can work together and learn from each other. In the same tune, the schedule featured 9 talks and a much heavier part of interactive sessions: a chance for everybody to present their research, a 3h hands-on introductory course, a ”world-café”, and 14h of user support sessions (with the invaluable help of HiWi students). The interaction among the participants was further enhanced by the social program, including long breaks (with vegetarian-only food) and a quite special augmented tour in the medieval Munich.

Figure 1: The participants

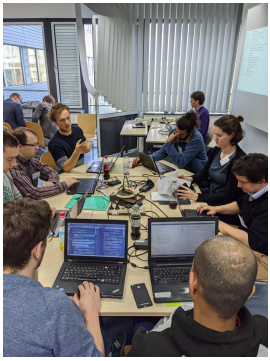


Figure 2: Hands-on user support

In the introductory course, participants coupled Python-based example codes and learned about auxiliary tools that are shipped with preCICE. Everybody had something to learn, including us: providing a ready-to-use (virtual) system worked very well and it can greatly accelerate and focus the learning

experience, leaving room for additional content.

Figure 3: A very motivated audience in the first-ever preCICE course

In the "preCICE world café", the participants visited six different tables in small groups and 10min rounds, discussing the usability, community, future, marketing, teaching aspects of preCICE, and providing feedback on the workshop itself. The discussions resulted in table covers full of hand-written notes, feedback, and ideas that will take us a while to integrate.

Figure 4: preCICE World Café

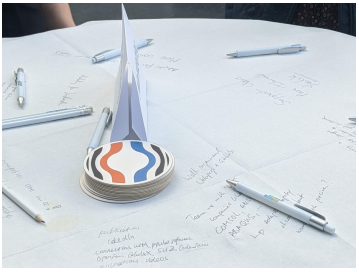


Figure 5: World Café outcome

For those interested in the talks, you can now find them on YouTube, in the preCICE coupling channel. If you want to live the full experience, keep reading the Quartl or subscribe to our mailing list to find out the date of our next workshop. Finally, thank you, SPPEXA for the financial support!

Gerasimos Chourdakis

KONWIHR: New projects 2019

KONWIHR, the competence network for scientific high-performance computing in Bavaria, welcomes the new projects that succeeded in the two application rounds of 2019. As every year, we accepted proposals of "normal" (up to 12 months) and "small" (up to 3 months) projects. We also welcome three new "basis" projects, aiming to establish central contact partners for questions on research, support, and training on HPC at Bavarian universities and colleges.

Normal projects

- *A modern framework for classical spin models and lattice field theory on general topologies* - Prof. Florian Goth (Univ. Würzburg)
- *Coarse grid solver optimization for extreme-scale geometric multigrid methods on hierarchical hybrid grids* - Prof. Ulrich Rüde (FAU)
- *Efficient finite cell computations for image-based analyses* - Prof. Ernst Rank (TUM)
- *Efficient parallel HPC implementation of pH-dependence in molecular dynamics simulation using LAMMPS* - Prof. Dirk Zahn (FAU)
- *High Performance Emulation for File System like I/O (HiPEF)* - Prof. Burkhard Rost (TUM)
- *Integration of efficient compute kernels for phase field models into the waLBerla simulation framework using code generation and performance engineering techniques* - Prof. Harald Köstler (FAU)
- *Optimizing and Parallelizing a 3D freeze drying simulation* - Prof. Thorsten Pöschel (FAU)

- *Parallel in Time Integration with Rational Approximations targeting Weather and Climate Simulations* - Dr. Martin Schreiber (TUM)
- *Scalable framework for scoring deleteriousness of genetic variants with CADD and Kipoi* - Prof. Julien Gagneur (TUM)
- *Spacefilling Fractal Tilings* - Prof. Jörg Arndt (TH Nürnberg)

Small projects

- *Analyse der parallelen Skalierbarkeit für unterschiedliche Turbulenzmodelle unter Berücksichtigung der Gittergrößen mittels des CFD-Codes ANSYS CFX für den Anwendungsfall der Radialventilatoren* - Prof. Philipp Epple (HS Coburg)
- *Effective OpenFOAM MPI-I/O library for HDF5 archive output* - Prof. Stefan Becker (FAU)
- *Efficient checkpointing technique for the unsteady adjoint solver in SU2* - Prof. Stefan Becker (FAU)

Basis projects

- Compute center *TH Deggendorf* - Prof. Helena Liebelt
- Compute center *Univ. of Regensburg* - Dr. Christoph Bauer
- Compute center *Univ. of Würzburg* - Aleksander Paravac

You can find more details about these projects on

`https://www.konwihr.de/konwihr-projects/`

Gerasimos Chourdakis

Your KONWIHR contacts

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihr.de

Your email will be read carefully and answered by Katrin and Gerasimos, KONWIHR's current contact people in the Bavarian North and South.

My name is Katrin Nusser and I have studied Computational Engineering at FAU, with a focus on thermodynamics and fluid dynamics. Last year I finished my Ph.D., during which I was researching the coupling between fluid flow, structural vibration, and induced sound. Currently, I am working at the HPC group at RRZE. Here, I am responsible for cluster administration, user support, and of course, KONWIHR.

My name is Gerasimos Chourdakis and I have studied Computational Science and Engineering at TUM, with a focus on computational fluid dynamics and coupled simulations. I am currently a doctoral candidate at the TUM SCCS, in which I am working on flexible algorithms and software for geometric multi-scale coupling. I am also part of the preCICE development team and, of course, of KONWIHR.

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 on:

`https://www.konwihr.de/how-to-apply/`

Katrin Nusser & Gerasimos Chourdakis

PARNUM 2019

From the 28th to the 30th of October 2019, the 13th international ”Parallel Numerics” workshop (PARNUM) took place in the beautiful city of Dubrovnik. The objective of the conference is the exchange of research results in the area of parallel scientific computing, parallel algorithms, and high-performance computing. Since 1994, the particular goal of PARNUM is to bring together young and experienced researchers in a welcoming environment with excellent opportunities for networking. This year the workshop celebrates 25 years since the first conference and the first time in Croatia with previous workshops held in Austria, Germany, Slovakia, Slovenia, and Poland. The Centre for Advanced Academic Studies (CAAS), which belongs to the University of Zagreb, hosted the event with 25 participants.

Figure 1: Group picture in front of the Centre for Advanced Academic Studies

The founder of the PARNUM workshop Marin Vajteric co-chaired together with the local organizer Sanja Singer from the University of Zagreb. They did an excellent job in making the conference a pleasure for all of the attendees.

The conference committee also invited two excellent speakers to present their work. Edoardo Di Naplo from the Jülich Supercomputing Centre and the RWTH Aachen talked about Subspace Iteration in the era of HPC. Olaf Schenk from the Universita della Svizzera italiana presented various research topics of his group.

Naturally, the social event was a walking tour inside the old city of Dubrovnik. The guided tour covered this UNESCO World Heritage Site with its beautiful narrow streets and medieval flair. The attendees gained inside into the history of the town and the disastrous siege by Serbian troops during the Croatian war of independence. The group lunches and especially the conference banquet provided great chances for exciting discussions. More information about the PARNUM 2019 can be found on the website:
`https://www.fsb.unizg.hr/parnum2019`

Dominik Thönnes

Monte Carlo in New Mexiko

„Albukwerke, Albatros, Albuwas? Wo ist das denn?“ So oder so ähnlich haben es manche aufgenommen, als ich ihnen gesagt habe, wo es für meinen internationalen Forschungsaufenthalt hingehen sollte. „Ah, dort spielt doch Breaking Bad!“ kam dann oftmals als Folgesatz. „Aber genau sagen, wo es liegt, kann ich jetzt auch nicht.“ Zugegeben, auch ich musste mich erst einmal orientieren, als ich vor ein paar Jahren zum ersten Mal davon gehört habe.

Daher ein bisschen Erdkunde: Albuquerque ist die größte Stadt im Bundesstaat New Mexico in den Vereinigten Staaten. (Man erinnert sich vielleicht, dass der Bundesstaat auch kürzlich in den Nachrichten war, da ein bestimmter Präsident eine Mauer zum nördlich angrenzenden Colorado bauen wollte.) Sie liegt 1600 m über dem Meeresspiegel und ist bei knapp 500.000 Einwohnern in der Fläche über eineinhalbmal so groß wie München. Distanzen haben hier einen anderen Stellenwert und über öffentlichen Nahverkehr oder gar Fahrverbote wird nicht diskutiert. Die Stadt hatte für mich ihren Reiz, denn sie beheimatet mit dem Sandia National Laboratories eine der größten wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA.

Meine Gastgeber dort, Michael S. Eldred und Gianluca Geraci, kenne ich bereits seit meiner Masterarbeit im Jahr 2016. Mike und Gianluca sind beide Teil der „Optimization and UQ“-Gruppe im „Center for Computing Research“ bei Sandia und arbeiten im Feld der Unsicherheitsquantifizierung (UQ) und Optimierung unter Unsicherheiten (OUU). In ihrer Gruppe wird zum Beispiel auch die Software Dakota entwickelt, die für manche Leser ein Begriff sein mag. Seit meiner Masterarbeit standen wir regelmäßig in Kontakt und trafen uns immer wieder auf Konferenzen, während wir an gemeinsamen Themen arbeiteten. So kam uns im Sommer 2018 die Idee eines Besuchs meinerseits, um direkter zusammenarbeiten zu können.

Der Aufenthalt war für den Sommer 2019 gedacht und eine frühe Planung war notwendig, denn als „Foreign National“ muss man doch einige Hürden überspringen, bis man zu Sandia Zutritt bekommt—v.a. wenn man „nur“ Besucher ist. Nach einigen Monaten mit Sicherheitstraining und anderen Einweisungen, trat ich letztlich meinen Flug Ende August an – und blieb bis Anfang November 2019.

Während meines Aufenthalts überlegten wir, wie Multilevel Monte Carlo Methoden in der OUU verwendet werden kann. Das heißt, wir wollen Probleme der folgenden Form lösen

$$\begin{aligned} \text{(Zielfunktion) } & \min_x R^f(x,\theta) \\ \text{(Nebenbedingungen) } & R^{c_i}(x,\theta) <= 0, i = 1,\dots,r, \end{aligned} \tag{1}$$

wo $x \in \mathbb{R}^d$ unsere Designvariable beschreibt, während $\theta \in \Theta$ eine Zufallsvariable ist. Um nun einen sogenannte robuste Lösungen zu finden, werden Robustheitsmaße verwendet, z.B. $R^f := \mathbb{E}_\Theta[f(x,\theta)]$ oder $R^c := \mathbb{E}_\Theta[f(x,\theta)] - \alpha\sigma_\Theta[f(x,\theta)]$. Das heißt, in jedem Optimierungssschritt muss ein Integral für den Erwartungswert, $\mathbb{E}$, oder die Standardabweichung, σ, ausgewertet werden. Falls nun eine Hierarchie von Diskretisierungen des zugrundeliegenden Modells zur Verfügung steht, bieten sich Multilevel Monte Carlo (MLMC) Methoden an, bei denen man ein optimales Verhältnis zwischen Auswertungen auf jedem Gitter und Genauigkeit zur Lösung des Integrals sucht.[2]

Die Verteilungen der Auswertungen bei MLMC ist jedoch optimiert für die Berechnung des Erwartungswertes. Wenn nun höhere Momente, wie z.B. die Varianz, verwendet werden, liefert der klassische Ansatz schlechtere Genauigkeit im Vergleich zur klassischen Monte Carlo Methode. Deshalb haben wir während meines dreimonatigen Aufenthalts an MLMC Methoden für die Varianz und Standardabweichung gearbeitet. Durch die herausragende und enge Betreuung und Zusammenarbeit machten wir schnell Fortschritte.

[2] Michael B. Giles, *Multilevel Monte Carlo methods*, Acta Numerica, 2015.

Die Grundidee ist, dass sich das zugrundeliegende Optimierungsproblem für die Verteilung der Auswertungen über die Gitter ändert und nur noch numerisch lösbar ist. Wir entwickelten und implementierten die neue Methodik und verwendeten sie zur robusten Optimierung der Ausrichtung von Windkraftanlagen. (Ein weiterer Pluspunkt eines Instituts wie Sandia ist die breite Auswahl an spannenden Anwendungen.) Wir erzielten vergleichbare Ergebnisse zu Monte Carlo bei Reduzierung der Rechenkosten. Die ersten Ergebnisse stellten wir dann zusammen auf der American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) SciTech Konferenz zu Beginn dieses Jahres vor. [3]

Neben der aktuellen Forschung und Arbeitsatmospähre bei Sandia hat auch Albuquerque selbst seinen Reiz. Der kam für mich persönlich aber eher durch die umliegende Natur, als die Stadt selbst. Durch ihre Größe ist man in der Stadt ohne Fortbewegungsmittel mehr oder weniger aufgeschmissen. Auch ist sie relativ flach und besitzt nur einen kleinen Stadtkern. Für mich ist sie eher ein riesiger Vorort, als eine Großstadt. Dafür ist man in zehn Minuten in den Sandia Mountains, deren höchster Punkt auf 3255 m liegt und zu dem zahlreiche Wanderwege führen. Die Landschaft selbst gleicht einer Wüste und ist daher nicht vergleichbar mit z.B. den Alpen. Da das Wetter zusätzlich selten seine schlechte Seite zeigte–es regnete ungefähr fünfmal in drei Monaten—verbrachte ich die meisten Wochenenden als Ausgleich außerhalb des Büros und war entweder zu Fuß oder mit dem Fahrrad unterwegs. Auch Ausflüge zu umliegenden National Parks, Santa Fe und Los Alamos kann ich nur empfehlen.

[3] Higher moment multilevel estimators for optimization under uncertainty applied to wind plant design, FM, GG, Daniel T. Seidl, MSE, Ryan King, Hans-Joachim Bungartz, Youssef Marzouk, AIAA 2020-1952, 2020

Abbildung 1: Aussicht von den Sandia Mountains mit Albuquerque im Hintergrund.

Abbildung 2: Im National Museum of Nuclear Science & History. Sandia Mountains im Hintergrund.

So erfuhr ich ein neues Amerika, ganz anders, als ich es von der Ostküste kannte. Auch das Arbeiten in einem Unternehmen, mit Nähe zur Forschung, war für mich eine tolle Erfahrung. In den knapp drei Monaten sammelte ich viele neue Eindrücke, knüpfte Beziehungen und genoss einen produktiven Aufenthalt in einer inspirierenden Umgebung.

Friedrich Menhorn

Ferienakademie 2020: Kursprogramm & Bewerbung

FERIENAKADEMIE

Im Herbst 2020 wird zum 37.ten Mal die Ferienakademie[4] im Sarntal (Südtirol) stattfinden, die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird.

In diesem Jahr wird es insgesamt zehn Kurse zu ganz unterschiedlichen Themen geben:

1. Motion Planning for Autonomous Vehicles
2. Collaborative Drone Interactions in Decentralized Resource Networks
3. Physik und Elektronik im Alltag
4. Earth system modeling: program a planet
5. Let's save! Simulations for the energy transition
6. Addressing Global Environmental Challenges: Where Technology, Politics, and Society Meet
7. Perceptual Audio Coding - From Theory to Software
8. Deep Learning in Image and Video Processing
9. Scientific Machine Learning with Focus on Fluid Mechanics
10. Computational Medical Imaging

Zusätzlich wird es auch noch einen Doktorandenkurs im Bereich der Elektro- und Informationstechnik geben. Details zu den Kursen sind unter `https://www.ferienakademie.de/kurse-2020/` sowie unter `https://youtu.be/hDzz30KTRMM` zu finden. Die Bewerbung für die Studierenden wird ab nächster Woche im Onlineportal möglich sein und bis zum 3. Mai diesen Jahres laufen.

Tobias Neckel

[4] `www.ferienakademie.de`

Abbildung 1: Das Poster der Ferienakademie 2020.

Das Lehrstuhltreffen in den Zeiten von Corona

Abbildung 1: Der Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen auf dem Hesselberg

Jedes Frühjahr findet während der vorlesungsfreien Zeit die einwöchige Klausur unseres Lehrstuhls statt. Dieses Jahr war die Wahl (ebenso wie letztes Jahr) auf den Jägerhof im Sarntal (Südtirol) als Rückzugsort für die Wissenschaftler gefallen. Die Verpflegung ist dort reichlich, die Berge sind nah und das Gelände wurde durch die regelmäßig im Sarntal stattfindende Ferienakademie ausreichend erkundet. Die Lehrstuhlklausur sollte vom 9.3. bis zum 13.3. stattfinden und alle Vorbereitungen waren getroffen. In der Woche vor der Abfahrt gab es jedoch einen Grund zur Beunruhigung: das Coronavirus (SARS-CoV-2) hatte sich in Italien inzwischen stark ausgebreitet. Zu diesem Zeitpunkt wurde Südtirol vom zuständigen Robert-Koch-Institut jedoch noch nicht als Risikoregion eingestuft und an der TUM gab es keine direkten Auswirkungen des Coronavirus. Es schien so, als könnte die Lehrstuhlklausur wie geplant stattfinden. Am Donnerstag vor der Abfahrt überschlugen sich jedoch die Ereignisse: Am Morgen gab es die Anweisung des Präsidenten der TUM, dass Dienstreisen in Risikoregionen bis auf Weiteres untersagt sind. Am Abend des selben Tages wurde Südtirol als Risikoregion eingestuft und damit war der Lehrstuhl am Freitagmorgen, drei Tage vor Abfahrt, ohne Reiseziel und ohne Unterkunft. Ein Notfallplan musste her! Es musste innerhalb eines Tages eine Unterkunft mit 40 Betten für eine Woche gefunden werden oder die Lehrstuhlklausur würde in einem Seminarraum in der Münchner Innenstadt stattfinden - die Berge und das gute Essen waren für das allgemeine

Wohlbefinden natürlich nach wie vor sehr wichtig.

Statt nach Durnholz - ging es nun zum Hesselberg in der Nähe von Dinkelsbühl. Angekommen im hinteresten Eck Bayerns stellte die Gruppe fest: wir sind zwar auf der höchsten Erhebung Mittelfrankens (689,4m ü. NN), aber mit den alpinen Hochgefühlen der Jakobsspitze im Sarntal hat das wenig zu tun. Eine 15-minütige Wanderung reichte für die Erklimmung des Hesselbergs.

Nach ein paar einführenden Worten über die Lehrstuhlphilosophie kamen Vorträge und Workshops über Themen, die sonst im Alltag (zu) wenig Aufmerksamkeit finden:

- **Fachlich**: Übersicht über die Projekte, Maschinelles Lernen, Unsicherheitsquantifizierung, Modernes C++, CERN, Quantum Computing
- **Werkzeuge zum effizienten Arbeiten**: Datenvisualisierungstechniken (mit Java Script), Prozess-Automatisieren (für HPC Anwendungen), Unix als Entwicklerumgebung
- **Lehrstuhlinfos**: Auslandsaufenthalte, Lehrmethoden in Zeiten von Corona (Video-Tools)

Diskussionen in kleinen Gruppen, tägliche Kaffepausen, und interessante, lange Abende mit den Arbeitskollegen rundeten unsere nette Klausur ab. Und so lässt sich resümieren: im gefühlt infektionssicheren Hinterland macht eine Lehrstuhlklausur – trotz der überschlagenden Nachrichten zum “Shutdown”von Deutschland – richtig Spaß.

Benjamin Rüth, Severin Reiz

I.-G. Farcas ”Bester rumänischer Nachwuchswissenschaftler im Ausland”

Ionut-Gabriel Farcas, Doktorand am Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen (Prof. H.-J. Bungartz), wurde kürzlich als „Bester rumänischer Nachwuchswissenschaftler im Ausland 2019“ in der Kategorie „Promotion in Europa“ ausgezeichnet. Der Wettbewerb wird jährlich von der „League of Romanian Students from Abroad (LSRS)“ organisiert und ist die einzige Würdigung ihrer Art von Rumänen, die in Europa, Nordamerika oder auf anderen Kontinenten studieren. In einer ersten Phase bewertet eine Jury, bestehend aus den Vorjahressiegern, alle Kandidaten. In allen Kategorien werden dann einige von diesen für die jeweilige Endrunde ausgewählt (in diesem Jahr fünf im Bereich „Promotion in Europa“). In einer zweiten Phase bestimmt eine hochkarätig besetzte Jury, bestehend aus rumänischen Wissenschaftlern und anderen wichtigen rumänischen Persönlichkeiten, die Finalisten. 2019 ging hierbei Ionut-Gabriel Farcas als Sieger hervor. Der Wettbewerb schloss am 7. Januar 2020 mit einer Galaveranstaltung im Parlament in Bukarest. https://www.in.tum.de/news-single-view/article/i-g-farcas-ist-bester-rumaenischer-nachwuchswissenschaftler-im-ausland/

* Notiz * Notiz * Notiz *

Termine 2020 (falls Corona es erlaubt)

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
  `https://www.siam.org/conferences/calendar`
- **ECCOMAS WCCM 2020**
  Minisymposium: Multiphysics simulations with the coupling library preCICE 19.07-24.07.2020 in Paris, France
  `https://wccm-eccomas2020.org/`

Quartl* - Impressum

Herausgeber:
Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde
Redaktion:
S. Herrmann, S. Seckler, Dr. S. Zimmer
Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München
Tel./Fax: ++49-89-289 18611 / 18607
e-mail: herrmasa@in.tum.de, www5.in.tum.de/quartl
Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.06.2020**

* Quartel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,
→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l
(Brockhaus Enzyklopädie 1972)