



Poznan University of Technology  
Faculty of Computing and Telecommunications  
Institute of Computing Science

Doctoral dissertation

**METHODS FOR MODELLING AND ASSESSING CONFIDENCE OF  
HETEROGENEOUS MULTISCALE SIMULATIONS IN  
HIGH-PERFORMANCE COMPUTING ENVIRONMENTS**

Bartosz Bosak, M.Sc. Eng.

Supervisor  
Krzysztof Kurowski, Ph. D., Dr. Habil

Poznań, 2025

# Streszczenie

W rozprawie doktorskiej podsumowano wyniki badań dotyczących rozwoju metod obliczeń wieloskalowych, których efektem było opracowanie wysokopoziomowych i abstrakcyjnych modeli oraz rozwiązań systemowych wspierających projektowanie i uruchamianie symulacji wieloskalowych w wysokowydajnych środowiskach obliczeniowych (HPC, ang. High-Performance Computing). Przedstawiono innowacyjne metody wprowadzające nowe podejścia do integracji modeli obliczeniowych oraz rozwiązujące kluczowe problemy związane z ich złożonością, dokładnością oraz propagacją niepewności.

W rozprawie zaprezentowano autorskie podejścia do integracji i współdziałania modeli wieloskalowych, które stanowią jedno z kluczowych narzędzi bardzo wielu współczesnych symulacji naukowych i inżynierskich. W efekcie, zaproponowane metody dla modelowania wieloskalowego umożliwiają łączenie modeli opisujących różne skale przestrzenne i czasowe, co pozwala zwiększyć precyzję, wiarygodność oraz zakres zastosowań symulacji, a tym samym przezwyciężyć ograniczenia tradycyjnych technik modelowania i symulacji komputerowych.

Jak wykazano w rozprawie doktorskiej, złożony charakter obliczeń wieloskalowych, w tym częsta wymiana danych pomiędzy powiązаныmi modelami, może znacząco wpływać na propagację niepewności i prowadzić do spadku dokładności wyników. W pracy zaproponowano oryginalne procedury weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ, ang. verification, validation and uncertainty quantification), a także analizy Wrażliwości (SA, ang. sensitivity analysis), które mają na celu zwiększenie wiarygodności i powtarzalności złożonych modeli obliczeniowych. Szczególną uwagę poświęcono problemom równoległego przetwarzania i oceny modeli w rozproszonych środowiskach obliczeniowych HPC, co stanowi istotny aspekt realizacji algorytmów oceny niepewności w środowiskach obliczeń dużej skali.

Istotną część rozprawy doktorskiej stanowi również omówienie zagadnień związanych z automatyzacją i usprawnieniem realizacji złożonych przepływów obliczeniowych, w szczególności dotyczących symulacji wieloskalowych oraz procedur VVUQ. Rozprawa omawia i porównuje różne podejścia umożliwiające uproszczenie i optymalizację procesów przygotowania, uruchamiania oraz zarządzania eksperymentami obliczeniowymi wykonywanymi na zasobach obliczeniowych HPC.

Wyniki eksperymentalne badań potwierdzają postawioną hipotezę badawczą, zgodnie z którą zastosowanie strategii obliczeniowych dedykowanych modelowaniu wieloskalowemu oraz procedurom VVUQ znacząco usprawnia proces projektowania symulacji wieloskalowych, zwiększa efektywność ich wykonywania oraz wzmacnia zaufanie do wyników zaawansowanych symulacji naukowych. Opracowane metody przyczyniają się również znacząco do rozwoju nowoczesnych technik obliczeń wieloskalowych i VVUQ, poprawiając ich użyteczność, efektywność i zwiększają niezawodność w środowiskach HPC. Ponadto, wspierają one tworzenie nowej generacji systemów, narzędzi i środowisk obliczeniowych, umożliwiających dokładniejsze, skalowalne i wiarygodne modelowanie wieloskalowe w różnych dziedzinach nauki i inżynierii.

**Rozprawa doktorska składa się z następujących prac:**

- [P1] Borgdorff, J., Bona-Casas, C., Mamonski, M., Kurowski, K., Piontek, T., Bosak, B., Rycerz, K., Ciepiela, E., Gubala, T., Harezlak, D., Bubak, M., Lorenz, E., and Hoekstra, A. G. (2012). A distributed multiscale computation of a tightly coupled model using the multiscale modeling language. *Procedia Computer Science*, 9:596–605. Proceedings of the International Conference on Computational Science, ICCS 2012
- [P2] Borgdorff, J., Mamonski, M., Bosak, B., Groen, D., Belgacem, M. B., Kurowski, K., and Hoekstra, A. G. (2013). Multiscale computing with the multiscale modeling library and runtime environment. *Procedia Computer Science*, 18:1097–1105. 2013 International Conference on Computational Science
- [P3] Borgdorff, J., Mamonski, M., Bosak, B., Kurowski, K., Ben Belgacem, M., Chopard, B., Groen, D., Coveney, P., and Hoekstra, A. (2014). Distributed multiscale computing with muscle 2, the multiscale coupling library and environment. *Journal of Computational Science*, 5(5):719–731
- [P4] Alowayyed, S., Piontek, T., Suter, J., Hoenen, O., Groen, D., Luk, O., Bosak, B., Kopta, P., Kurowski, K., Perks, O., Brabazon, K., Jancauskas, V., Coster, D., Coveney, P., and Hoekstra, A. (2019). Patterns for high performance multiscale computing. *Future Generation Computer Systems*, 91:335–346
- [P5] Bosak, B., Piontek, T., Karlshoefler, P., Raffin, E., Lakhli, J., and Kopta, P. (2021). Verification, validation and uncertainty quantification of large-scale applications with qcg-pilotjob. In Paszynski, M., Kranzlmüller, D., Krzhizhanovskaya, A. V., Dongarra, J. J., and Sloot, P. M., editors, *Computational Science – ICCS 2021*, pages 495–501, Cham. Springer International Publishing
- [P6] Groen, D., Arabnejad, H., Jancauskas, V., Edeling, W. N., Jansson, F., Richardson, R. A., Lakhli, J., Veen, L., Bosak, B., Kopta, P., Wright, D. W., Monnier, N., Karlshoefler, P., Suleimenova, D., Sinclair, R., Vassaux, M., Nikishova, A., Bieniek, M., Luk, O. O., Kulczewski, M., Raffin, E., Crommelin, D., Hoenen, O., Coster, D. P., Piontek, T., and Coveney, P. V. (2021). Vecmatk: a scalable verification, validation and uncertainty quantification toolkit for scientific simulations. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 379(2197):20200221
- [P7] Bosak, B., Kopta, P., Kulczewski, M., and Piontek, T. (2025). muqsa – an online service for uncertainty quantification and sensitivity analysis. In Paszyński, M., Barnard, A. S., and Zhang, Y. J., editors, *Computational Science – ICCS 2025 Workshops*, volume 15911 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 57–70. Springer, Cham
- [P8] Wright, D. W., Richardson, R. A., Edeling, W., Lakhli, J., Sinclair, R. C., Jancauskas, V., Suleimenova, D., Bosak, B., Kulczewski, M., Piontek, T., Kopta, P., Chirca, I., Arabnejad, H., Luk, O. O., Hoenen, O., Węglarz, J., Crommelin, D., Groen, D., and Coveney, P. V. (2020). Building confidence in simulation: Applications of easyvvuq. *Advanced Theory and Simulations*, 3(8):1900246
- [P9] Kulczewski, M., Bosak, B., Kopta, P., Szeliga, W., and Piontek, T. (2024). Fostering uncertainty quantification in global challenges with muqsa toolkit. In Wyrzykowski, R., Dongarra, J. J., Deelman, E., and Karczewski, K., editors, *Parallel Processing and Applied Mathematics*

(*PPAM 2024*), volume 15581 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 35–46. Springer, Cham

# Abstract

This dissertation summarises recent research on multiscale computing methods, leading to the development of abstract models and system-level solutions for multiscale simulations in high-performance computing (HPC) environments. The study presents innovative methods developed at the Poznań Supercomputing and Networking Center, introducing novel approaches to integrating computational models while addressing key challenges such as computational complexity, accuracy, and uncertainty propagation.

The study presents innovative methods that introduce novel approaches to the integration of computational models while addressing key challenges such as computational complexity, accuracy, and uncertainty propagation. Multiscale computing has become a critical tool in scientific and engineering simulations, enabling the integration of models across different spatial and temporal scales. This approach improves simulation precision and applicability, overcoming the limitations of traditional modelling techniques.

Given the complexity of multiscale simulations, frequent data exchanges between models can have a significant influence on uncertainty propagation and lead to reduced result accuracy. The research proposes original procedures for verification, validation and uncertainty quantification (VVUQ), as well as sensitivity analysis (SA), to improve reliability of the complex computational models. In particular, the dissertation addresses challenges related to parallel processing of model evaluations in high-performance systems, inherently connected to execution of uncertainty quantification algorithms.

Another key aspect discussed in the dissertation is the automation and streamlining of the execution of complex computational workflows, multiscale and VVUQ in particular. The research outlines and compares several solutions developed with the aim of simplification of typically cumbersome processes related to the preparation, submission, and management of such computational experiments conducted in HPC environments.

The findings of this study confirm the research hypothesis that the application of computational strategies for multiscale modelling and VVUQ streamlines development, improves execution efficiency, and fosters trust in advanced scientific applications. The proposed methods contribute to the advancement of multiscale computing and VVUQ by improving their usability, efficiency, and reliability in HPC-based execution scenarios. Furthermore, they support the development of next-generation computational frameworks, enabling more accurate, scalable, and reliable multiscale modelling across diverse scientific and engineering domains.

## **The thesis consists of the following works:**

- [P1] Borgdorff, J., Bona-Casas, C., Mamonski, M., Kurowski, K., Piontek, T., Bosak, B., Rycerz, K., Ciepiela, E., Gubala, T., Harezlak, D., Bubak, M., Lorenz, E., and Hoekstra, A. G. (2012). A distributed multiscale computation of a tightly coupled model using the multiscale modeling

- language. *Procedia Computer Science*, 9:596–605. Proceedings of the International Conference on Computational Science, ICCS 2012
- [P2] Borgdorff, J., Mamonski, M., Bosak, B., Groen, D., Belgacem, M. B., Kurowski, K., and Hoekstra, A. G. (2013). Multiscale computing with the multiscale modeling library and runtime environment. *Procedia Computer Science*, 18:1097–1105. 2013 International Conference on Computational Science
- [P3] Borgdorff, J., Mamonski, M., Bosak, B., Kurowski, K., Ben Belgacem, M., Chopard, B., Groen, D., Coveney, P., and Hoekstra, A. (2014). Distributed multiscale computing with muscle 2, the multiscale coupling library and environment. *Journal of Computational Science*, 5(5):719–731
- [P4] Alowayyed, S., Piontek, T., Suter, J., Hoenen, O., Groen, D., Luk, O., Bosak, B., Kopta, P., Kurowski, K., Perks, O., Brabazon, K., Jancauskas, V., Coster, D., Coveney, P., and Hoekstra, A. (2019). Patterns for high performance multiscale computing. *Future Generation Computer Systems*, 91:335–346
- [P5] Bosak, B., Piontek, T., Karlshoefler, P., Raffin, E., Lakhilili, J., and Kopta, P. (2021). Verification, validation and uncertainty quantification of large-scale applications with qcg-pilotjob. In Paszynski, M., Kranzlmüller, D., Krzhizhanovskaya, a. V., Dongarra, J. J., and Sliot, P. M., editors, *Computational Science – ICCS 2021*, pages 495–501, Cham. Springer International Publishing
- [P6] Groen, D., Arabnejad, H., Jancauskas, V., Edeling, W. N., Jansson, F., Richardson, R. A., Lakhilili, J., Veen, L., Bosak, B., Kopta, P., Wright, D. W., Monnier, N., Karlshoefler, P., Suleimenova, D., Sinclair, R., Vassaux, M., Nikishova, A., Bieniek, M., Luk, O. O., Kulczewski, M., Raffin, E., Crommelin, D., Hoenen, O., Coster, D. P., Piontek, T., and Coveney, P. V. (2021). Vecmatk: a scalable verification, validation and uncertainty quantification toolkit for scientific simulations. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 379(2197):20200221
- [P7] Bosak, B., Kopta, P., Kulczewski, M., and Piontek, T. (2025). muqsa – an online service for uncertainty quantification and sensitivity analysis. In Paszyński, M., Barnard, A. S., and Zhang, Y. J., editors, *Computational Science – ICCS 2025 Workshops*, volume 15911 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 57–70. Springer, Cham
- [P8] Wright, D. W., Richardson, R. A., Edeling, W., Lakhilili, J., Sinclair, R. C., Jancauskas, V., Suleimenova, D., Bosak, B., Kulczewski, M., Piontek, T., Kopta, P., Chirca, I., Arabnejad, H., Luk, O. O., Hoenen, O., Węglarz, J., Crommelin, D., Groen, D., and Coveney, P. V. (2020). Building confidence in simulation: Applications of easyvvuq. *Advanced Theory and Simulations*, 3(8):1900246
- [P9] Kulczewski, M., Bosak, B., Kopta, P., Szeliga, W., and Piontek, T. (2024). Fostering uncertainty quantification in global challenges with muqsa toolkit. In Wyrzykowski, R., Dongarra, J. J., Deelman, E., and Karczewski, K., editors, *Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2024)*, volume 15581 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 35–46. Springer, Cham