
Quartl

1/2016
77. Ausgabe



Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
Simulation of Additive Manufacturing	6
CoolMUC-2 am LRZ: Kühlen mit Wärme	15
SPPEXA Symposium München 2016	18
Ultimate BGCE: Frisbee Feldstudie	20

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

K O N W I H R



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

Um gar keinen falschen Verdacht aufkommen zu lassen: Ich habe nichts gegen empirische Wissenschaften, und ich möchte deren Verdienste ganz bestimmt nicht kleinreden. Aber es geht mir zunehmend auf den Geist, wenn bestimmte Forschende ihre Arbeit auslagern und mit nervigen Umfragen anderen (und natürlich denke ich da insbesondere an mich) die Zeit stehlen.

Wenn eine Zahlentheoretikerin ein Theorem beweisen möchte, schickt sie dann eine Umfrage an alle, sammelt die Ergebnisse ein und publiziert dies dann als Beweis? Nein, sie beweist das Theorem selbst! Wenn ein Wüstenforscher die Wüste erforschen will, schickt er dann eine Umfrage an alle, wertet die Ergebnisse aus und publiziert dies dann als seine neueste Forschung? Nein, er bereist die Wüste und durstet selbst. Wenn aber jemand die Qualität von irgendwas bewerten will, dann macht er oder sie sich keine Gedanken, wie die Qualität denn wohl ist, sondern man schickt eine Umfrage an alle, wertet die Ergebnisse aus und publiziert dies kurzerhand als Ergebnis der eigenen Forschung.

Wenn man dabei feststellt, dass Kinder lieber mehr Geschenke als weniger bekommen, Studierende lieber auf ihre Bedürfnisse eingehende Dozenten haben oder Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler immer weniger Zeit für Wissenschaft haben (übrigens auch, weil sie an immer mehr Umfragen und Evaluierungen teilnehmen sollen ...), dann sind das selbstredend keine Banalitäten, sondern A-Journal-fähige Forschungsergebnisse. Bahnbrechend geradezu.

Wir kennen das Muster: Eine unscheinbare Email geht ein, und zunächst mal wird Mitleid zu wecken oder an das Pflichtgefühl zu appellieren versucht: „*Im Rahmen meiner Masterarbeit am Institut für Wissenschaftsbelästigung der Universität Nether Ethelthorp (Schreibweise ohne Gewähr ...) untersuche ich allerlei Unsinniges. Dabei bin ich auf Ihre Mithilfe angewiesen, und ich bitte Sie herzlich, mich zu unterstützen.*“ Oder irgendwas anderes dieser perfiden Art.

Als nächstes dann immer eine faustdicke Lüge, wie sie faustdicker kaum sein könnte: „*Die Beteiligung an der Umfrage wird Sie maximal zehn Mi-*

gelassen. Das brachte uns in der Spiritwertung auf einen geteilten ersten Platz und motivierte uns natürlich in Zukunft (überhaupt) zu trainieren. Damit landet hoffentlich ein weiteres sportliches Großereignis neben dem Elite Cup auf dem Kalender der BGCE und wir freuen uns auf nächstes Jahr.

C. Kowitz

Quartf* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

J. Daniel, C. Halfar, C. Kowitz, Dr. S. Zimmer
Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München
Tel./Fax: ++49-89-289 18630 / 18607

e-mail: halfar@in.tum.de, www: <http://www5.in.tum.de/quartf>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **15.06.2016**

* Quartf: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,
→ das Quart: 1/4 Kanne = 0,27 l
(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

nuten Ihrer Zeit kosten.“ Die Realität dagegen sieht anders aus: Zwanzig Minuten später bin ich bei Frage 17 angekommen, und der (gut gemeinte, hier aber eher frustrierende) Fortschrittsbalken steht gerade mal bei 35% ...

Früher hieß es mal „Wenn einer nicht mehr weiter weiß, dann gründ‘t er einen Arbeitskreis.“ Wer heute nicht weiter weiß, führt mal schnell eine Studie durch (die man sich, selbstredend, mit Credits oder Forschungsgeldern üppig bezahlen lässt, wobei eine Ausschüttung des Erlöses an die Anteiligen Leistenenden nie angedacht ist; ach ja, manchmal winkt jedem 1000. Mitarbeiter ein Kinogutschein ...), entwirft, unter Anwendung ausgefeilter Fragetechniken, einen Fragebogen, und los geht’s mit der Beglückung der Menschheit.

Warum eigentlich darf ich in keinem Hotel mehr übernachten, ohne mich hinterher darüber zu äußern, ob ich beim Friseur oder auf Empfehlung von Tante Käthe dieses Hotel gefunden hatte (mei, in irgendeinem Bett muss man ja schlafen)? Ob das Personal am Empfang nett oder schrecklich nett oder gigantisch nett gewesen ist (mei, sie haben halt „Hallo!“ gesagt und mir den Zimmerschlüssel gegeben)? Ob ich den Zimmerpreis für angemessen halte (natürlich nicht, aber – wie schon gesagt – irgendwo muss man ja pennen)?

Warum werde ich nach jedem zehnten Flug gefragt, wie oft ich in den letzten zwei Jahren überhaupt geflogen sei (wer erinnert sich denn bitte an so was?), bzw. wie oft mit dieser Airline (erwarten die im Ernst, dass jemand da was anderes als 007 oder 42 reinschreibt)? Warum kann ich kaum eine Tagung mehr besuchen, ohne dass ich hinterher angeben soll, wie zufrieden ich mit den bei der Postersession gereichten Snacks war (gab’s da überhaupt welche?)?

Und auch die Funding Agencies lassen sich nicht lumpen. Ein Beispiel gefällig? Da opfert man mehrere Nachmittage im schönen bayerischen Spätsommer und verbringt zudem zwei Tage im nasskalten Oslo, um dazu beizutragen, dass in Norwegen die besten der eingereichten Anträge eine Förderung bekommen. Zum Dank erhält man dann in regelmäßigen Abständen per Email eine Aufforderung, das gesamte norwegische Begutachtungssystem überhaupt und insbesondere dieses konkrete Förderprogramm zu bewerten; und das Ganze so trottelig, dass sich manche Fragen zwar nur an Antrag-

steller, andere nur an Gutachter richten, aber alle alles gefragt werden und beantworten sollen ...

Warum das so ist? Ich weiß es nicht. Vielleicht hat es damit zu tun, dass heute sich kaum mehr jemand traut oder trauen darf, eine Note ohne Anwendung eines fixen Bewertungsrasters zu vergeben, bzw. eine Sache anzubieten, durchzuführen oder zu bewerten, ohne dabei auf eine Evaluierung per Umfrage zurückgegriffen zu haben. Ach ja, dass ein Austauschstudent drei Referenzen braucht, bevor er andermorts auf's Klo gehen darf, gehört wohl auch in diese Kategorie.

Frust? Aber nein. Ich nehme einfach nicht mehr an Umfragen teil. Dass darunter auch mal wichtige sein mögen? Pech, that's life!

Liebe Leserinnen und Leser, nun heißt es leider Abschied nehmen. Seit der ersten Ausgabe des Quartls im letzten Jahrtausend war Christa Halfar an Bord der Quartl-Redaktion, und heute zählen wir immerhin schon die siebenundsiebzigste Ausgabe. Nun tritt sie ihren – wie heißt es so schön – wohl verdienten Ruhestand an, der für die meisten ja irgendwie immer zur Unzeit kommt. Kaum vorstellbar, dass wir diesen Verlust ohne intensiven Zuspruch durch unser Teammitglied Jack Daniel werden verschmerzen können. Liebe Christa, das Quartl wird ohne dich nicht mehr das alte sein. Am Ende wird noch jemand die LaTeX-Doktrin infrage stellen – mit dir unvorstellbar. Ganz herzlichen Dank für deinen unermüdlichen Einsatz und für die prächtige Stimmung, die du immer in die Redaktion getragen hast. Genieße die kommenden Jahre, und insbesondere deinen neuen Status als Quartl-Leserin!

Doch genug der einleitenden Worte – die Quartl-Redaktion wünscht allen frohe Ostern, verbunden mit einer erfolgreichen und umfragearmen Eier suche. Und vor allem wünschen wir natürlich anhaltenden Spaß mit dieser neuen Ausgabe Ihres Quartls!

H.-J. Bungartz



eine Feldstudie. Unser BGCE Team ("Die Simulanten"), geführt vom Frisbee Veteranen Kilian Röhner, konnte die eigene Unerfahrenheit in einigen gelungenen Kombinationen gekonnt überspielen und punkten. Bei unseren Unsicherheiten im Regelwerk wurde uns freundlicherweise von den gegnerischen Teams während der Spiele geduldig geholfen. Dadurch, und mit den taktischen Anweisungen unseres Kapitäns, konnten wir uns so von Spiel zu Spiel steigern und die Höhe unserer Niederlagen kontinuierlich reduzieren. Trotz dem daraus folgenden letzten Platz haben wir die Köpfe nicht hängen-

Am 26. Januar ging es für die Symposiumsteilnehmer nachmittags zu einer Exkursion ins Herz von München. Zunächst besuchten sie die geschichtsträchtigen Ausstellungen im NS-Dokumentationszentrum. Am Abend versammelte man sich dann zum Get-Together und Conference-Dinner im Augustiner Bierkeller.

Nach zwei Tagen mit 14 Sessions fand abschließend am 27. Januar nachmittags die Jahresvollversammlung von SPPEXA statt. In diesem Rahmen wurde das Steering Committee für die zweite Förderphase gewählt und bestärkt.

Neben den Mitgliedern der ersten Phase (Koordinatoren Hans Joachim Bungartz und Wolfgang E. Nagel, sowie Hans-Peter Bunge, Christian Lengauer, Sabine Roller, Dörte Sternel) begrüßen wir die neuen Mitglieder Takayuki Aoki und Nahid Emad recht herzlich im Team – *Konnichiwa* und *Bienvenue!*

Die SPPEXA-Zentralkoordination bedankt sich bei allen Beteiligten für die tolle Atmosphäre des Symposiums und die breit gefächerten Vorträge in den Minisymposien, als auch bei den eingeladenen Rednern George Biros, Takayuki Aoki und Craig Stewart für die spannenden Vorträge.

Weiterführende Informationen zum Symposium gibt's unter:

<http://www.sppexa.de/sppexa-activities/annual-plenary-meeting/2016.html>

P. Neumann

Ultimate BGCE: Frisbee Feldstudie

Die Dynamik von Flugscheiben, welche durch eine schnelle Rotation in der Luft gehalten werden, wurde von einer interdisziplinären Gruppe von BGCE Mitgliedern und Assoziierten ausgiebig in einem Kompaktkurs Ende Februar studiert.

Interessanterweise werden solche Scheiben ("Frisbees") in einem schnellen Laufsport, dem sogenannten "Ultimate Frisbee", eingesetzt. Eine Teilnahme an einem Ultimate Freizeitturnier eignete sich somit wunderbar für

Iterationsschleife

N=18

21. Januar 2016

Ob's nun edler im Gemüt, Europa zu suchen, oder ein böötisches Theben zu gründen, bleibt auch nach dem Studium der Geographie, Politik, Wirtschaft und Mythologie ungewiss.

15 Iterationen weiter stellt sich die Frage anders, und Optimisten und Nörgler^a liegen in ihrer Einschätzung über Europa weiter auseinander denn je.

Während die einen sagen, die EU habe immer Konflikte ausgetragen und sei immer durch Streit zu weiteren Schritten der Kooperation gekommen, sehen die anderen den Zerfall der EU auf uns zukommen.

Während die einen die Austrittsdrohungen des Vereinigten Königreichs nur als Säbelfasseln abtun, das seit dem Beitritt des Vereinigten Königreichs im Jahr 1973 zum Standardrepertoire britischer Premierministerinnen und Premierminister gehört („What we are asking is for a very large amount of our own money back“^b), sehen die anderen mit dem möglichen Austritt der Briten eine Verschiebung der Gewichte im euro-amerikanischen Gefüge.

Während die einen den Euro als harte Währung gerne als Kredit annehmen, wollen die andern den harten Euro lieber sparen – und leider stimmen die Spar- und Kreditsummen nicht immer überein.

Wo die einen freie Reise haben wollen (von Ost nach West), wollen die anderen freie Exporte (von West nach Ost).

Wo die einen von offenen Grenzen schwärmen, stehen die anderen am Waiserberg und warten eine Stunde im Stau auf der A8 auf die deutsche Grenzkontrolle.

^aHier paraphrasiert nach Karl Kraus, Die letzten Tage der Menschheit, in: Die Fackel, zweitausendseins, 1976

^bMargret Thatcher am 30. November 1979 in Dublin in einem Statement an die Presse <http://www.margarethatcher.org/speeches/displaydocument.asp?docid=104180>

Wo die einen von Demokratie sprechen, und damit den sozialen Rechtsstaat für alle meinen, sehen die anderen die starke und nationale Demokratie für das Mehrheitsvolk, und die britische Insel – die immer wieder von sich einerseits und Europa andererseits spricht, obwohl sie zu Europa gehört – erschauert vor dem kontinentalen Nationalen ebenso wie vor dem Sozialen und wünscht sich zurück in die Zeit des Liberalen Imperialismus^a.

Europa zu finden, ist schwerer denn je. Ist Europa doch nur ein Mythos? Ist dann der Nationalstaat die Alternative für Europa und kommt nach der AfD alphabetisch die AFE?

Oder folgen wir Heidegger und versuchen, Rom (die römischen Verträge^b) zu überwinden, um den griechischen Mythos Europa zu finden?

^aSiehe den britischen Historiker Niall Ferguson, *Der Westen und der Rest der Welt*, Propyläen, 2011

^bDie römischen Verträge wurden am 25. März 1957 geschlossen und gelten als wesentlicher Grundstein für die politische Union in Europa, die über die ursprünglich rein wirtschaftliche Kooperation bei Kohl und Stahl wesentlich hinausging.

M. Resch

The Finite Cell Method for the Simulation of Additive Manufacturing

Additive manufacturing (AM) has emerged as a very promising technique for creating highly complex and customized solid structures on the basis of digital models. AM successively joins layers of material of different shapes to form a finished part Numerous variants of this technique have been proposed over the past years. One special additive manufacturing process able to produce load bearing parts is selective laser melting (SLM). SLM fuses metal powder with a laser as illustrated in Fig. 1. In order to use parts produced by SLM e.g. in aerospace or orthopedics,



Abbildung 9: Teilnehmer des SPPEXA-Symposiums

sailles Saint-Quentin-en-Yvelines, RIKEN, Tokyo Institute of Technology

- ExaDG: High-order Discontinuous Galerkin for the Exa-scale
Universität Heidelberg, Technische Universität München
- MYX: MUST Correctness Checking of YML and XMP Programs
RWTH Aachen, Maison de la Simulation, University of Tsukuba, RIKEN

Nicht nur an den beteiligten Institutionen der neuen Projekte erkennt man die internationale Vernetzung von SPPEXA und das trilaterale Deutschland-Frankreich-Japan-Konstrukt der zweiten Förderphase. So kamen die Teilnehmer des Symposiums aus 12 Nationen (110x Deutschland, 14x Japan, 12x USA, 5x Schweiz, 3x England, 3x Frankreich, 1x Australien, 1x Holland, 1x Österreich, 1x Saudi-Arabien, 1x Tschechien, 1x Türkei) angereist.

chenknoten mit insgesamt 11.200 Rechenkernen und 25.500 GB Arbeitsspeicher. Gemeinsam erreichen diese eine Leistung von 366,4 Teraflops, was in der aktuellen Top500 Liste der schnellsten Supercomputer der Welt einen Platz im Mittelfeld bedeutet. Die Beschaffung des CoolMUC-2 wurde mit 949.000 Euro aus Mitteln der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und des Freistaats Bayern finanziert. Die Rechenleistung steht im Rahmen des Linux-Clusters des LRZ akademischen Nutzern aus ganz Bayern kostenlos zur Verfügung, also auch allen KONWIHR-Projekten.

BILD Die Absorptionskältemaschine der SorTech AG (Vordergrund) nutzt die Abwärme des CoolMUC-2 (Hintergrund links, während der letzten Hardwarearbeiten) zur Kühlung der Plattenspeicher

L. Palm



Symposium in München 2016

Von 25. – 27. Januar 2016 fand das SPPEXA Symposium am Leibniz Rechenzentrum in Garching statt.

Die insgesamt 153 Teilnehmer des Events tauschten sich zu verschiedenen Aspekten des aufkommenden Exascale Computings im Rahmen des Schwerpunktprogramms *1648 Software for Exascale Computing (SPPEXA)* aus. Insbesondere konnte jedes SPPEXA-Projekt seine Ergebnisse aus der ersten Förderphase des Programms im Rahmen eines selbstorganisierten Minisymposiums den anderen Teilnehmern vorstellen. Abgerundet wurde jedes Minisymposium durch 2-3 weitere eingeladene Vorträge.

Daneben stellten sich die vier neuen Projekte vor, die in der zweiten Phase (2016-2018) zum Schwerpunktprogramm hinzugestoßen sind:

- ADA-FS: Advanced Data Placement via Ad-hoc File Systems at Extreme Scales
TU Dresden, Johannes Gutenberg Universität Mainz, Karlsruher Institut für Technologie
- AIMES: Advanced Computation and I/O Methods for Earth-System Simulations
Universität Hamburg/ Deutsches Klimarechenzentrum, Universität Ver-

the mechanical performance of the end product must be understood. To this end it is advantageous to simulate the SLM process in order to predict the dimensional accuracy and the residual thermal stresses within the part.

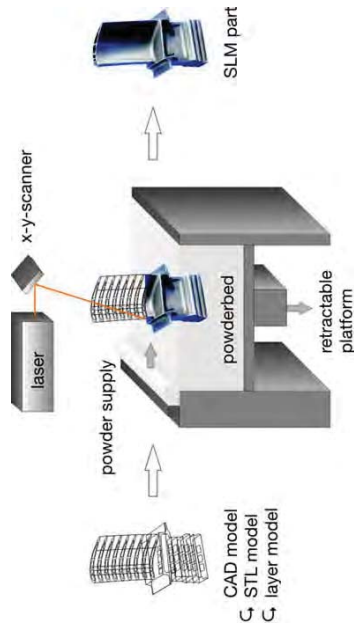


Abbildung 1: Selective laser melting process¹

There are numerous challenges involved in the simulation of the SLM process. The domain evolves during the process due to adding new layers of powder. Phase changes from powder to liquid to solid, which occur under the influence of the laser and states need to be tracked as a conversion is only possible from powder to liquid to solid but not from solid to powder.

Moreover it is a multi-scale process. The laser only has a diameter of approximately 100 micrometers i.e. it is highly localized but its effects are critical to the process such that this scale needs to be resolved. However, the scale of the finished product is in the order of decimeters and a clear separation is not straightforward because the scale of the layers which comprise a finished product lies in between. In addition to the spatial scales, the temporal scale differences are large as well. Local melting and solidification only

¹Xi'an Bright Laser Technologies LTD. [Online; accessed February 03, 2016] <http://www.xa-bl.com/en/about/?116.html>

take milliseconds but the process of producing a part may take up to a few days.

All these challenges are posed on computational domains which are not only changing in time but also their shape and topology may be extremely complex.

In this contribution we propose to use the Finite Cell Method (FCM) [2] laid out in Sec. 1, combined with the multi-level *hp*-method explained in Sec. 2 as a basis for simulation of this transient multi-scale and multi-physics problem. We describe the mathematical and implementational structure for simulating the SLM process in Sec. 3 and discuss computational results in Sec. 4 before we conclude with Sec. 5.

1 The Finite Cell Method

The Finite Cell Method combines the high-accuracy of high order finite elements with the flexibility of fictitious domain methods.

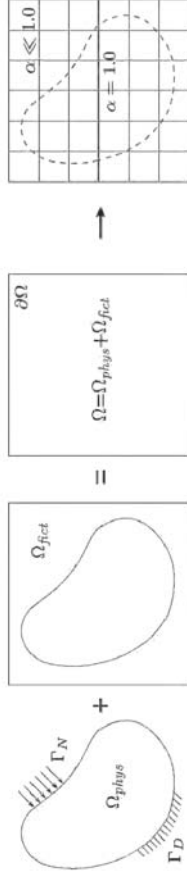


Abbildung 2: The Finite Cell Method: physical domain Ω_{phys} , fictitious domain Ω_{fict} and computational domain Ω

The basic idea of the FCM is depicted in Fig. 2. A physical domain Ω_{phys} is extended with a fictitious domain Ω_{fict} , such that their combination yields a simple-shaped computational domain Ω . The corresponding boundary value problem is then solved on Ω instead of Ω_{phys} . The advantage lies in the fact that Ω may easily be meshed and the resulting discretization does not have to be changed if Ω_{phys} is evolving in time. As a model problem a

wurde, ausgestattet.

Diese Art der Kühlung erlaubt es, die Wärme der Prozessoren direkt mit Wasser, statt wie üblich mit Luft, aus dem Rechner abzuführen. Zusätzlich sorgen am CoolMUC-2 sechs Adsorptionskältemaschinen von SorTech dafür, dass die beim Rechnen erzeugte Abwärme zur Kälteproduktion verwendet wird. Zurzeit wird damit ein Teil der Plattenspeichersysteme des SuperMUC gekühlt.

Bereits im Jahr 2012 hatte das LRZ mit dem CoolMUC-1 gezeigt, dass es grundsätzlich möglich ist, Rechnerabwärme zur Kühlung zu verwenden. Bei diesem System musste allerdings noch mit einer Wärmepumpe nachgeholfen werden, um die für den Betrieb der Adsorptionskältemaschine notwendigen hohen Temperaturen zu erreichen. „Einige Schwächen, die sich beim Betrieb des ersten CoolMUC gezeigt haben, sind beim CoolMUC-2 nun ausgeräumt. Vor allem durch den Wegfall der Wärmepumpe ist die Anlage nicht nur deutlich effizienter, sondern auch wesentlich preiswerter“, erklärt Prof. Dr. Arndt Bode, Leiter des LRZ.

Neuerungen in der Hardware machten dies möglich. Durch die Weiterentwicklung der direkt-wassergekühlten NextScale WCT Systeme von Lenovo ist es nun möglich, die Prozessoren des Rechners selbst bei hohen Eingangstemperaturen des Kühlwassers von ca. 50°C ausreichend zu kühlen. Beim Austritt aus dem Rechner hat sich das Wasser auf ca. 60°C erwärmt. Hier setzt die Firma SorTech mit ihren Spezialmaschinen an. „Das ist genau die Temperatur, ab der unsere Maschinen effizient arbeiten“, erläutert Walter Mittelbach, Vorstand der SorTech AG. Die SorTech-Adsorptionskälteaggregate der neuesten Generation verfügen zudem über eine deutlich flexible Steuerung. Diese und eine deutlich sensiblere Vermessung der gesamten Anlage machen es dem LRZ möglich, in den kommenden Monaten die optimalen Betriebsparameter zu bestimmen.

Arndt Bode fasst zusammen: „Der Stromverbrauch unserer jetzigen Adsorptionskältemaschine ist im Vergleich mit üblichen Kompressionskältemaschinen nur noch halb so hoch. Wir werden damit weiterhin unserem Anspruch gerecht, weltweit zu den Pionieren für den energieeffizienten Betrieb von Rechenzentren zu gehören.“

CoolMUC-2 besteht aus 400 Lenovo NeXtScale nx360M5 WCT Re-



anfallende Abwärme wird mittels Adsorptionstechnik in Kälte umgewandelt. Das LRZ nutzt diese energiesparende Variante der Kälteproduktion im Rechenzentrum zur Kühlung weiterer Systeme. Diesen innovativen Ansatz hat das LRZ in Zusammenarbeit mit der SorTech AG, einem Spezialisten für thermische Kühlung, und IBM Research – Zürich implementiert.

Sowohl der Betrieb als auch die Kühlung der Rechner treiben den Energieverbrauch in Rechenzentren enorm in die Höhe. Innovative Kühlkonzepte, die Energie einsparen, werden deshalb schon seit längerer Zeit am LRZ erprobt. In enger Zusammenarbeit mit der SorTech AG, IBM Research – Zürich und der Lenovo Deutschland GmbH entwickelte das LRZ den CoolMUC-2. Genau wie sein großer Bruder, der Höchstleistungsrechner SuperMUC, ist CoolMUC-2 mit einer direkten Warmwasserkühlung von Lenovo, die ursprünglich am IBM Forschungszentrum in Zürich entwickelt

general bilinear form of the boundary value problem is given in (1).

$$\mathcal{B}(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\Omega} = \int_{\Omega} [\mathbf{L}\mathbf{v}]^T \alpha(\mathbf{x}) \mathbf{C}[\mathbf{L}\mathbf{u}] d\Omega \quad (1)$$

where $\alpha(\mathbf{x})$ is a indicator function defined as

$$\alpha(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_{phys} \\ 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_{fict}. \end{cases} \quad (2)$$

The indicator function recovers the original geometry but introduces a jump in the continuous integral of (1) which must be taken into account during spatial integration of bilinear form. To this end, we apply adaptive methods such as space trees, which are easy to implement for Cartesian grids. A two dimensional version of the integration scheme for a high order element matrix (called cell matrix in the context of FCM) of a cut cell with a quadtree is illustrated in Fig. 3.

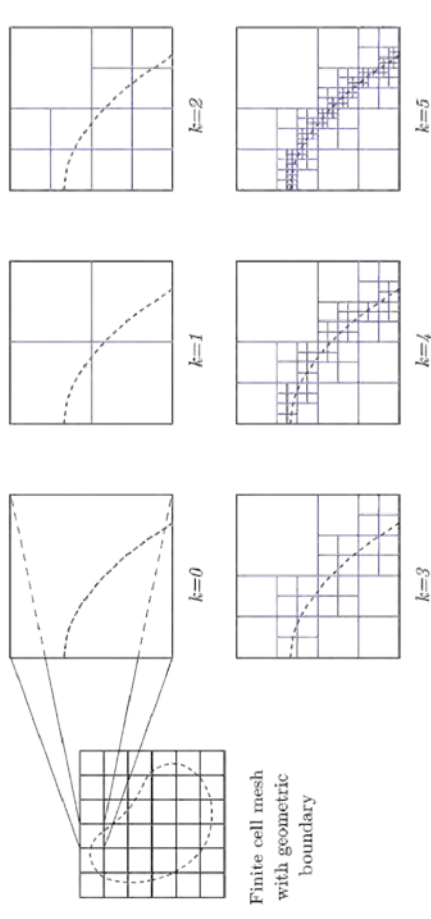


Abbildung 3: Adaptive integration of the cut elements

2 Multi-level *hp*-refinement

We combine the finite cell method with the multi-level *hp*-method [4] to achieve high-order convergence rates even for singular problems. At the same time we add the possibility to discretize the computational domain around the laser with element sizes much smaller than for regions further away. The multi-level *hp*-method is a recently proposed variant of the *hp* finite element method. It eases the implementational effort usually being associated with hanging nodes, edges and faces.

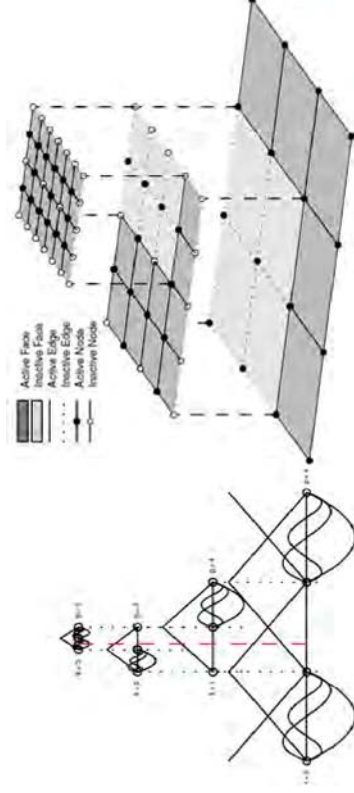


Abbildung 4: Conceptual idea of multi-level *hp*-refinement

The idea of the multi-level *hp*-method is to use hierarchical, high-order overlay meshes for a local enrichment of the discretization (see Fig. 4). These high-order enrichments need to be both linear independent and maintain compatibility at hanging entities. This is easily achieved, also in three dimensions by the following two simple rules: (a) Linear independence is ensured by deactivating all topological components that have active sub-components. (b) Compatibility is ensured by homogeneous Dirichlet boundary conditions on the overlay meshes.

Recent investigations show that the multi-level *hp*-method yields the same excellent approximation capabilities as conventional *hp*-techniques.

vast scales involved in the prediction of mechanical properties of complete products produced by SLM. Future work at the Chair for Computational Engineering will, thus, include methods to reduce the computational complexity by identifying relevant components of the simulation and using reduced order models to further increase the computational efficiency of the approach.

Literatur

- [1] D. Celentano, E. Oñate, and S. Oller. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 37:3441–3465, 1994.
- [2] A. Düster, J. Parvizian, Z. Yang, and E. Rank. The finite cell method for three-dimensional problems of solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197:3768–3782, 2008.
- [3] C. Fu and Y. Guo. Three-dimensional temperature gradient mechanism in selective laser melting of ti-6al-4v. *J. Manuf. Sci. Eng.*, 136:061004–7, 2014.
- [4] N. Zander, T. Bog, S. Kollmannsberger, D. Schllinger, and E. Rank. Multi-level *hp*-adaptivity: high-order mesh adaptivity without the difficulties of constraining hanging nodes. *Computational Mechanics*, 55(3):499–517, 2015.

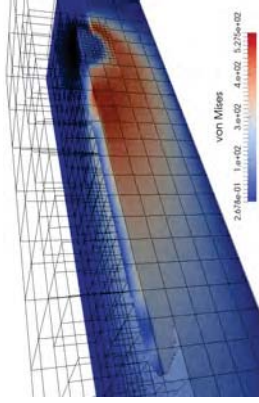
A. Özcan, S. Kollmannsberger, E. Rank

CoolLMUC-2 am LRZ: Kühlen mit Wärme

Am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ging ein neuer Rechencluster in Betrieb, der sogenannte CoolLMUC-2. Bei dem von der Lenovo Deutschland GmbH gelieferten System ist der Name Programm: Die im Betrieb



(a) Temperature distribution



(b) Von Mises stress distribution

Abbildung 8: results of the SLM simulation

distribution of the von Mises stress is presented in Fig. 8b only on the solidified domain. Moreover, the solidified part is warped with the displacement field to reveal the expansion and contraction of the part. It should also be noted that the front of the solidified material passes through the interior of finite cells, taking advantages of the underlying embedded domain approach.

5 Conclusions

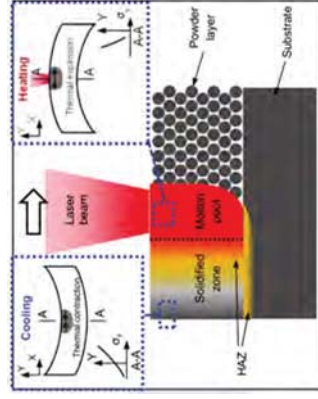
We presented a geometrically flexible concept to simulate SLM processes in the framework of the Finite Cell Method, an embedded domain method of high order accuracy. It is geometrically flexible since the resulting geometry does not need to be resolved by the boundaries of the discretization of the field variables.

Moreover, the multi-scale nature of the SLM process motivated the development of a strictly hierarchical treatment of the state variables, the material coefficients and the field variables. To this end we enriched the Finite Cell Method with the multi-level *h**p*-method and added a hierarchical, spatial treatment of the state variables using octrees.

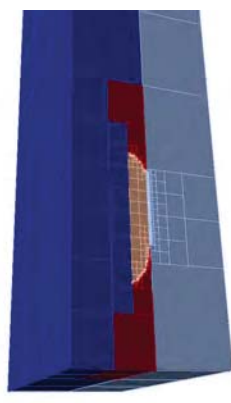
We find our approach to be very promising in terms of computational efficiency and accuracy. However, it will surely not be sufficient to treat the

3 Thermo-mechanical model of the SLM process

The principle of the SLM process is shown in Fig. 5a. It constitutes a multi-physics problem, where the highest temperature gradients as well as the phase changes occur in close vicinity of the moving laser beam. The phase



(a)



(b)

Abbildung 5: Selective laser melting process principle (a)² and multi-level grid (b)

changes between powder, liquid and solid states are simulated by the model introduced by Celentano et. al.[1] which uses the discretized weak form of (3).

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho L \frac{\partial f_{pc}}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad (3)$$

However, the effects of heat diffusion as well as the thermo-mechanical process of residual stress evolution need to be taken into account on all scales. For this purpose, a dynamically adaptable data container (multi-level grid) is used to keep track of the solidified domain Ω_{solid} locally and globally.

²[3]

The container represents a dynamic octree. It stores the current material state of a voxel at all points in time. This additional tracking of the material state is needed since below the melting temperature the material can be either powder or solid and this in turn depends on whether solidification has already occurred previously.

Due to the changes in the temperature during the process, some regions in the domain expand, while some others contract (see Fig. 5a). This generates residual stresses in the part. They are computed by the quasi-static mechanical model, given in (4).

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} - \mathbf{f}^{th} = \mathbf{0} \quad (4)$$

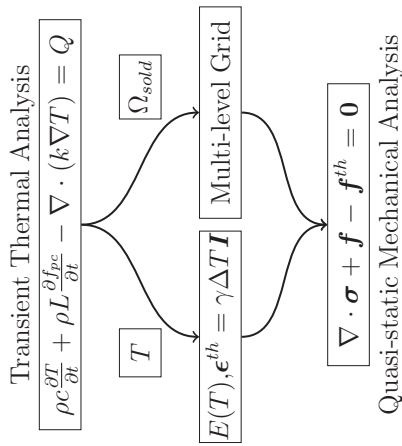


Abbildung 6: Coupling of thermal and mechanical problems

It is assumed that displacements are small and do not produce heat, so that only a one-directional coupling has to be taken into account, i.e. only the displacement field is affected by the changes in the temperature field. As shown in Fig. 6, we take a staggered approach for the solution of the thermomechanically coupled problem. For each time step, firstly the thermal problem is solved to obtain the temperature distribution and the solidified domain Ω_{solid} . The resulting temperature as well as the state dependent (and

temperature-dependent) material coefficients are then converted to equivalent strains used as a load to solve the mechanical problem before the next time step is computed.

4 Results

This section presents some preliminary results of the approach presented above. The problem setup, including the laser path and the dimensions of the domain is illustrated in Fig. 7. The material domain consists of Ti-6Al-4V alloy, being widely used in both aerospace and biomedical applications of SLM. The laser is modeled as a surface heat flux with a Gaussian distribution.

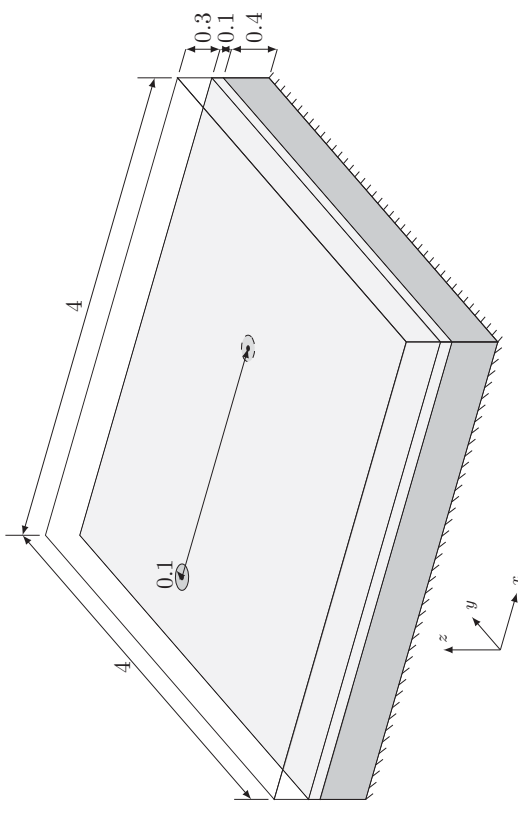


Abbildung 7: Simulation Setup

The results at the end of the simulation are depicted in Fig. 8. The temperature distribution over the entire domain is shown in Fig. 8a, while the