

## Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	6
Simulation von Flugzeugbauteilen	9
CompBioMed	14
Come Dine with me	19
The first (virtual) KONWIHR Workshop	21
BGCE Research Days: Coronavirus Report	23
SPPEXA 2016-2019: Abschlussband	25
Feierliche Übergabe eines Monitors	27
Notiz:*Notiz:*Notiz	29

---

### 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](mailto:herrmasa@in.tum.de), [www5.in.tum.de/quartl](mailto:www5.in.tum.de/quartl)

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **01.09.2020**

\* Quarttel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartt: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

---

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 Engineer-*  
*ring* (BGCE)

waren an einem Tag im April knapp 13 Stunden im Wesentlichen non-stop in Videokonferenzen. Also, schnell beim Arzt angerufen – Pflingsturlaub. Nachdem ich die Diagnose ja zu kennen glaubte, dachte ich, das Entblockieren werde auch sonst jemand können. Und so begann der eigentliche Teil der Geschichte.

**Akt 1 – der Arzttermin.** Mein erster Versuch galt als TUM'ler natürlich dem TUM-Klinikum rechts der Isar. In der Orthopädie dort war allerdings der Anrufbeantworter dran. Die Ansage, etwas pointiert: Das Telefon sei derzeit nicht besetzt; wenn der Kopf zu mindestens 90% ab sei (o.Ä.), dann möge man sich bitte an die Notaufnahme wenden; ansonsten eine Email schicken. Auf die Email passierte geraume Zeit erst mal nix. Also entweder waren die alle im Home Office, oder sie mussten alle der Myriaden kommender Corona-Infizierter und der damit verbundenen Überlastung des Gesundheitssystems harren und durften nicht auf Behandlungsbitten reagieren. Na bravo. Also Plan C – das Rückeninstitut der Schön-Klinik in München. Der erste Schritt klappte schon mal besser – ich bekam von Freitag auf Montag einen Termin (ja, ich bin ungeduldig, aber das entfallende Laufen ist weder in puncto Bewegungsarmut, Übergewicht noch Stress hilfreich).

**Akt 2 – der Arztbesuch.** Die Klinik schick, die Privatambulanz geradezu opulent, allerdings kam ich mir irgendwie fehl am Platze vor. Im Wartezimmer war ich (mit Abstand!) der Jüngste (was nun wirklich nicht an meiner Taufkirche liegt), alle anderen hatten irgendeine Art Gerät – einen Stock, einen Rollator, oder etwas am Nacken. Ich bekam einen iPad und sollte ein paar Fragen beantworten. Zwei Highlights daraus: „Sind Ihre Schmerzen so stark, dass Sie nicht mehr schlafen können? Denken Sie ab und zu an Suizid?“ Du lieber Gott, wo bin ich hier – schoss es mir durch den Kopf. Der behandelnde Arzt dann schenkte erst mal meiner vorgetragenen Diagnose keinen Glauben. ISG-Blockaden spüre man morgens beim Aufstehen, nicht aber beim Laufen – Laufen sei gut. Nach intensivem Anschauen und malträtierten meinerseits (durchaus ähnlich zum Vorjahr) war er tiefenfrustriert, dass er bei mir keinen Schmerz auslösen konnte. Das könne alles gar nicht sein – und ich fühlte mich schon als Malade Imaginaire. Zumal er meinte, Röntgen

Was dazu geführt hat, dass dieser als Auto sich fraglos für ein „H-Nummernschild“ qualifiziert hätte und heutzutage eher als Laptop-Monitor durchgegangen wäre. Und so fragte der Kollege quasi offiziell, ob er mir einen neuen und großen Monitor schenken dürfe. Ja aber sicher doch, so die Antwort des Schwaben. Nach einigen Problemen bei der Vereinbarung eines Termins für die feierliche Übergabe kam es dann zu dieser, wie auf dem Foto, der Bedeutung des Anlasses angemessen, für die Nachwelt dokumentiert wurde. Erste Gespräche zu einer weiteren Zuwendung (was ist ein Monitor ohne einen Rechner?) wurden bereits aufgenommen.

Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass ich mich natürlich rückversichert habe in Sachen Compliance. Nach allgemeiner Einschätzung ist eine derartige Zuwendung eines Lehrstuhls an einen anderen Lehrstuhl nicht als bedenklich einzustufen, unabhängig von Funktionen des Inhabers des empfangenden Lehrstuhls.

Hans-Joachim Bungartz.

Der Vollständigkeit halber sei angemerkt, dass ich doch noch eine Email-Antwort vom Klinikum rechts der Isar bekam, die den (durchaus sinnvollen) Hinweis enthielt, mich ggf. an die Neurochirurgie zu wenden.

**Akt 5 – die Rechnung.** Steht noch aus, ich werde berichten.

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, einen schönen Sommer. Kommen Sie weiterhin gut durch die Corona-Zeit! Zunächst aber natürlich wie immer viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

*The book has an interdisciplinary appeal: scholars from computational subfields in computer science, mathematics, physics, or engineering will find it of particular interest.*

Aufgrund von Verlagsprozessen müssen wir uns leider noch etwas gedulden. Wir erwarten das Erscheinungsdatum etwa im Juni dieses Jahres. Jedoch – um eine breite Kommunikation zu fördern – wird das Buch frei zugänglich (OpenAccess) erscheinen. Eine elektronische Version wird auf der Springer Seite lesbar sein; für Freunde physikalischer Bücher wird man sich auch sein persönliches Exemplar kaufen können.

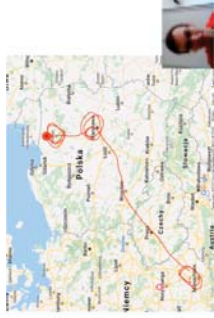
Severin Reiz

Geht man von der utilitaristischen Ethik aus, so bestimmen die Folgen einer Handlung ob eine Handlung als ethisch oder unethisch zu betrachten ist. Daher müssen die Folgen einer Handlung in vollem Umfang vorhersehbar sein. Was zunächst einfach klingt, erweist sich in der Praxis als nicht ganz so einfach. Die vermuteten Folgen einer Handlung sind von Menschen einfach abzuschätzen. Eine Berechnung der Folgen dagegen ist erheblich schwieriger. Sicherheit über die Zukunft aber haben wir nie.

Als Beispiel sei das Trolley-Problem genannt. Manche deutschen Philosophen nutzen dieses Problem aktuell, um die Gefahren der künstlichen Intelligenz zu erklären. Das Beispiel geht in seiner einfachsten Form so: Ein Zug fährt auf eine Gruppe von Menschen zu. Ein Weichensteller kann die Weiche so stellen, dass der Zug nicht die Gruppe von Menschen tötet, sondern nur eine Person die auf einem Nebengleis ist.

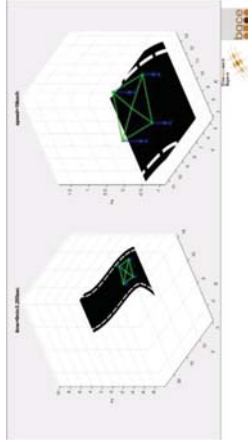
Wenn Philosophen dieses Beispiel erzählen fangen sie meist an, über die ethische Abwägung der beiden Optionen zu sprechen. Dabei kommen Fragen ins Spiel wie die Entscheidung des Weichenstellers, der Wert eines menschlichen Lebens und die Frage nach der Abwägung zwischen vielen Leben und wenigen Leben. Erstaunlicherweise fragen sich Philosophen höchst selten ob das Beispiel gut geeignet um ethische Vereinfachung ist das Beispiel tatsächlich gut geeignet um ethische Entscheidungsprobleme zu diskutieren. Aber in seiner Einfachheit ist es auch in etwa so spannend wie die laminare Strömung von Wasser in einem geraden Rohr – die Lösung ist langweilig, weil bekannt.

Dabei ist doch am Trolley-Problem die in Wirklichkeit interessante Frage die Frage nach der Sicherheit, die wir glauben über die Zukunft zu haben. Philosophen lassen diese Frage hinter dem Wort „Annahme“ verschwinden. Das ist für theoretische Trockenübungen ein durchaus hilfreicher Ansatz. In der Praxis erweist er sich jedoch als untauglich. Betrachtet man etwa das Trolley-Problem aus der Sicht des autonomen Fahrens so stellt sich nicht die Frage nach dem Tod von vielen vs. den Tod eines Einzelnen. Es stellt sich in Wirklichkeit die Frage nach der Sicherheit über diese beiden angenommenen zukünftigen Ereignisse.



**Figure 1:** COME junior describing the Corona-induced difficulties of travelling to Munich

After a quick round of introductions to allow for the matching of names to faces, the main event took place: the BGCE CSE seniors were presenting the culmination of their 9-month-long Honours Project: ‘A High Performance Vehicle Dynamics Model for Autonomous Driving Simulation’.



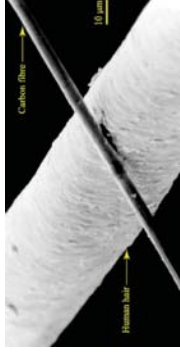
**Figure 2:** CSE Honours Project: Multi-body Vehicle Model

The conclusion of the presentation also served as the end of the first (of several) online BGCE research day sessions planned for this semester. Despite the intermittent seclusion enforced by this virulent incursion, BGCE research days and the accompanying scientific discussion continues online until the resumption of post-quarantine regular life.

Keefe Huang

## Simulation von Flugzeugbauteilen

Kohlenstofffaserverstärkter Kunststoff (Karbon) wird immer häufiger im Flugzeugbau verwendet. In modernen Flugzeugen (z.B. Airbus A350, Boeing 787) macht Karbon über 50% der Konstruktion aus. Das liegt hauptsächlich an der extrem niedrigen Dichte (ca. ein Viertel von Stahl) und hohen Steifigkeit des Materials.



**Abbildung 1:** Die unterschiedlichen Skalen, die aufgelöst werden müssen, führen bei der Simulation von Karbon immer wieder zu Schwierigkeiten. Von links nach rechts: Fasern (Skala 5µm) bis zum gesamten Flugzeug (Boeing A350)<sup>1</sup>.

Karbon wird aus sehr dünnen Kohlenstoff-Fasern hergestellt. Diese sind weniger als 1mm dick und werden von noch dünneren Kunststofflagen getrennt (weniger als 0.05mm). Das komplette Bauteil ist häufig einige Meter lang, siehe Fig. 1.

Karbon-Bauteile werden im Vergleich zu vorher verwendeten Materialien zum selben Zeitpunkt erzeugt wie das Material selbst. Dabei werden Lagen von sehr dünnen Kohlenstoff-Fasern übereinander verlegt. Die Fasern selbst sind sehr steif, aber natürlich kann man sie seitlich leicht auseinander ziehen. Deshalb werden die Lagen in unterschiedliche Richtungen gelegt. Danach werden die Fasern mit Hilfe von einem Kunststoff busammengeklebt<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> „Größenvergleich von C-Faser und Menschenhaar“ by Saperaud commonswiki and „Airbus A350 XWB“ by FlugKerl2 are licensed under CC BY 4.0.

projects and connections across different research areas were established. All in all, this first (virtual) KONWIHR workshop was a success. We are hoping to be able to host the next KONWIHR workshop in fall 2020 in person, but if not, we are well prepared for another virtual one!

Katrin Nusser

rend hinzu kommt, dass Schichten der Fasern in unterschiedliche Richtungen gelegt werden, welches zu einem komplexen Muster führt. Es sind also bestimmte Freiheitsgrade sehr viel stärker miteinander gekoppelt, als andere. Der starke Kontrast führt zu einem schlecht konditionierten Gleichungssystem und die komplexen Kopplungen zwischen Freiheitsgraden machen es schwierig, eine „grobe“ Approximation an die Lösung zu finden.

Wir haben ein großes lineares Gleichungssystem<sup>2</sup>  $Ax = b$  zu lösen. Der häufigste Ansatz um Probleme dieser Größe zu lösen, ist ein iterativer Löser: Wir verwenden hier das Konjugierte-Gradienten-Verfahren. Die Kosten des Konjugierten-Gradienten-Verfahrens sind im Wesentlichen proportional zur Wurzel der Konditionszahl. Unsere Matrix ist allerdings schlecht konditioniert.

Um das zu ändern, multipliziert man beide Seiten des Gleichungssystems mit einer anderen Matrix. Es ist wichtig, eine gute Wahl für diese Matrix (den sogenannten Vorkonditionierer) zu treffen. Am schnellsten wäre die Konvergenz, wenn man  $A^{-1}$  verwenden würde, das ist allerdings zu teuer zu berechnen. Die optimale Wahl ist also eine Matrix, die möglichst ähnlich zu  $A^{-1}$  und günstig zu berechnen ist.

Wir haben uns an dieser Stelle für eine Gebietszerlegungsmethode entschieden. Die Grundidee ist einfach: wir zerlegen das Gebiet in Teilgebiete (die häufig, aber nicht zwangsweise, den Prozessoren des Computers entsprechen) und rechnen die kleinen Teilprobleme jeweils aus. Das ist im Allgemeinen einfach möglich, wenn die Teilgebiete klein genug sind. Die einzelnen Lösungen der Teilgebiete können dann als Vorkonditionierer verwendet werden. Das einzige Problem ist dann, dass keines der Teilgebiete Informationen über die anderen Gebiete hat und die Lösung somit gerade in den Grenzregionen verkehrt ist. Eine solche Partitionierung ist auf Fig. 3 links zu sehen. Als Vorkonditionierer funktioniert das relativ gut,<sup>3</sup> aber die Anzahl an Iterationen vom konjugiertem Gradientenverfahren (also die

<sup>2</sup>  $A$  kommt aus der Finite-Elemente-Diskretisierung der linearen Elastizitätsgleichung und ist dementsprechend symmetrisch positiv definit und dünn besetzt.

<sup>3</sup> Es handelt sich hierbei um ein additives Schwarz Verfahren.

In Durham haben wir daher Budget für strategische Risikoinvestitionen genommen, um uns einmal einen 16-Knoter mit BlueFields hinzustellen und damit zu spielen. Wir haben erste Paper, die aufzeichnen, wo BlueFields helfen könnten. Siehe z.B. unser letztes SISC Manuskript zu *Enclave Tasking for Discontinuous Galerkin Methods on Dynamically Adaptive Meshes* oder die diesjährige Kollaboration mit Philipp Samfass und Michael Bader auf der ISC (hoffentlich ist der Talk zu *TeaMPI—Replication-based Resilience without the (Performance) Pain* tatsächlich am Ende über YouTube frei verfügbar). Unsere Hoffnung ist, dass wir das nun tatsächlich auf die BlueFields portieren können und baldig spannende Forschungsergebnisse haben. Derweil bleibt zu betonen, dass wir das System auch gerne für andere öffnen. Details gibt es auf der Webpage: <https://www.dur.ac.uk/icc/cosma/facilities/dine/>.

Tobias Weinzierl

des Flügels. Zudem haben wir in eine der Ecken eine kleine Unebenheit eingebaut. Die Form dieser haben wir aus Scans echter Bauteile entnommen.

Das entgültige Model hatte dann bis zu 200 Millionen Freiheitsgrade. Um das zu rechnen, haben wir ARCHER, den nationalen Supercomputer des Vereinigten Königreiches, verwendet. Die Skalierung funktionierte auf über 16,000 Prozessor Kernen sehr gut (Butler, 2019). Im Endeffekt konnten wir so ein großes Bauteil bis auf die Skala der Faserplatten in etwa 17 Minuten vollständig simulieren.

Anne Reinarz

## References

- (Spillane, 2014) Spillane N, Dolean V, Hauret P, Nataf F, Pechstein C & Scheichl R, Abstract robust coarse spaces for systems of PDEs via generalized eigenproblems in the overlaps. Numerische Mathematik, 126(4), pp. 741-770, 2014.
- (Sandhu, 2018) A. Sandhu, A. Reinarz, T.J. Dodwell, A Bayesian framework for assessing the strength distribution of composite structures with random defects, Composite Structures, Volume 205, 2018.
- (Butler, 2019) R. Butler, T. Dodwell, A. Reinarz, A. Sandhu, R. Scheichl & L. Seelinger, High-performance dune modules for solving large-scale, strongly anisotropic elliptic problems with applications to aerospace composites, Computer Physics Communications, Volume 249, 2019.

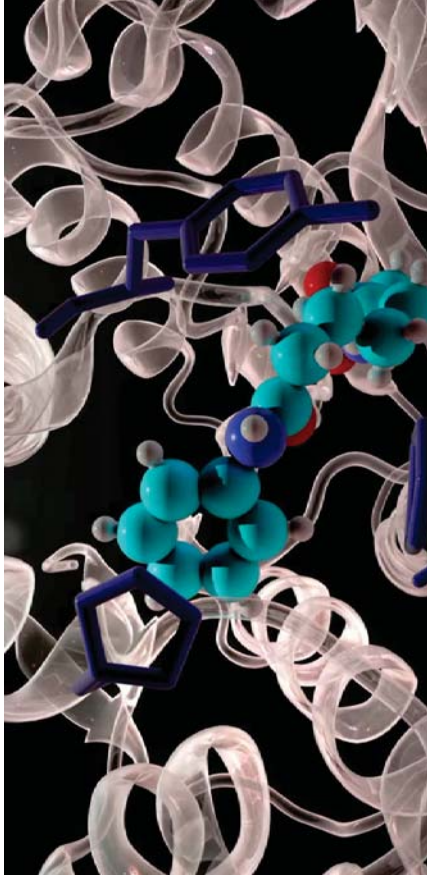


Abbildung 2: Bild: CompBioMed Projekt

Jahren vorliegen könnte. Doch CompBioMed ermöglicht noch mehr: Anhand eines digitalen Zwillinges könnten zum Beispiel Stents und andere invasive Eingriffe präziser platziert und Medikamente oder prothetische Geräte personalisiert werden. Der individuelle Cocktail aus Wirkstoffen zur Linderung von Symptomen wird damit ebenso realisierbar wie passgenaue Gelenke.

Weiterführende Links <https://www.compbioimed.eu>  
<https://www.youtube.com/watch?v=1FvRSJ9W734&feature=youtu.be>  
<https://itis.swiss/news-events/news/latest-news/>  
<https://www.gerdi-project.eu/>  
<https://eudat.eu/>

Sabrina Schulte, Ludger Palm



Abbildung 1: Mensch und Herz, Bild: CompBioMed Projekt

aber die Lebensdaten eines einzelnen Menschen zu seinem digitalen Zwilling – ein Ausgangspunkt für die personalisierte Medizin.

Im Kampf gegen COVID-19 machen sich die Werkzeuge von CompBioMed jetzt bezahlt: Die Simulationsprogramme helfen dabei, das Corona-Virus und sein Vermehrungsverhalten zu modellieren, Moleküle auf ihre Wirkungsweise hin zu prüfen und möglichst schnell Gegenmittel zu entdecken. Dank HPC lagen bereits Wochen nach dem Ausbruch von COVID-19 detaillierte Modelle des Coronavirus vor, aber auch die ersten 40 Wirkstoffe, mit denen der Virus bekämpft werden könnte.

### Modell Mensch in HD-Auflösung

Vier Jahre nach dem Start von CompBioMed startete 2019 die zweite Phase des ehrgeizigen Forschungsprojektes: Das virtuelle Menschen-Modell soll durch die gewachsene Kraft von Hochleistungsrechnern und mit Unterstützung von Big Data, künstlicher Intelligenz und Maschinenlernen ergänzt und noch genauer werden. Das LRZ begleitet CompBioMed seit 2016, seit 2019 ist es Kernpartner im Projekt und verantwortlich für die Analyse und das Management großer Datenmengen. Mitte März war ein dreitägiges virtuelles Arbeitstreffen zum Thema Maschinenlernen und Modellieren anberaunt. „Während der Konferenz wurde diskutiert, wie die