

## Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
EuroTech – CovidTech – SimTech	7
KONWIHR: New projects from fall 2020	11
preCICE Workshop 2021	13
RSE Paper: A paper worth reading	15
Four in a row is almost a handful	17
8. BGCE Student Paper Preis	19
Größte Simulation einer interstellaren Turbulenz	23
Notiz*Notiz*Notiz	26

---

### Quartl\* - Impressum

#### Herausgeber:

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

#### 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),

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

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **01.06.2021**

\* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

---

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



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

## Editorial

Beginnen wir dieses Editorial (das erste im Jubeljahr – wir nähern uns dem hundertsten Quartal!) mit einer ganz groben Überschlagsrechnung: fünf einstündige Talk-Shows zu Corona pro Tag, mit jeweils fünf Teilnehmern (natürlich sind auch Teilnehmerinnen sowie solche des dritten und aller in Zukunft noch dazukommenden Geschlechter inkludiert), an jeweils fünf Werktagen pro Woche – das macht schon mal 125 Stunden nutzlos vertaner Zeit. Zählt man dann noch die Stunden der Millionen von Zuschauern dazu (es werden wohl Millionen sein, sonst hätten die Sender schon längst die Sätze beendet), ebenso nutzlos vertan, dann entsteht ein volkswirtschaftlicher Schaden, der sogar den von Grußworten in den Schatten stellt. Und jener ist gewaltig, glaubt man dem schon legendären Spruch, dass durch Grußworte in Deutschland ein größerer volkswirtschaftlicher Schaden als durch Streiks entstehe.

Seit fast einem Jahr geht es Abend für Abend um die Pandemie. Bis zum 20. Januar sorgte wenigstens „The best President ever“ noch für eine gewisse Abwechslung (mit in aller Regel deutlich höherem Unterhaltungswert), aber seitdem ist es absolut unerträglich. Da ist zunächst Markus Lanz, der inoffizielle Weltmeister der Moderationskärtchen; dann Maybrit Illner, Anne Will, und wie sie alle heißen – kaum eine(r) kennt mehr ein anderes Thema. Sodann die Typen auf der anderen Seite – allen voran die Naturkonstante, oder Invariante, aller Corona-Events: Karl „der Mahner“ Lauterbach. Ferner die restliche Fraktion der Experten. Da waren zunächst die phantastischen Drei: der Blogger aus Berlin, der Grandseigneur aus Halle und der Streber aus Bonn. Dann kamen weitere Damen und Herren dazu: Epidemiologen, Infektiologen, Virologen, Intensivmediziner und Allgemeinmediziner (also nicht die Labormäuse aus der Etappe, sondern die armen Hunde von der Front), etc. Schließlich die dritte Expertengeneration: die Modellierer und Simulanten. Und spätestens jetzt meldet sich das Quartal mit Fug und Recht zu Wort.

### \* Notiz \* Notiz \* Notiz \*

#### Termine 2020/21 (falls Corona es erlaubt)

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**  
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **International Supercomputing Conference 2021**  
The event for High Performance Computing, Machine Learning and Data Analytics) – ISC DIGITAL:  
24.06. - 02.07.2021 <https://www.isc-hpc.com/>

Stolz wie Harry äußerten sich nun also die Modellierer vor Kameras und in Studios – Mathematiker, theoretische Physiker oder ebensolche Biologen, von Max Planck, Helmholtz oder Unis. Also jene, die sonst eher mit Papier, Bleistift und großen Rechnern zu tun haben (ich weiß, wovon ich rede ...). Mal befassen sie sich im Hauptberuf mit Verkehr, mal mit physikalischen Teilchen, mal tatsächlich mit Viren. Aussagen der Art „Wir sehen in unseren Modellrechnungen eindeutig, dass bei dieser oder jener Popelaktion dieser oder jener Mega-Effekt eintritt“ oder „Forscher der TU Buxtehude haben gezeigt, dass ohne Schnelltests die dritte Welle kommt“ sind da zu hören. Oh heilige Wissenschaft. Weil sie keine Zeit haben oder keine Zeit kriegen, fällt das an dieser Stelle so eminent wichtige „Zu Risiken und Nebenwirkungen fragen Sie ...“ einfach weg: Was sind die Modellthesen, wie viel Uncertainty liegt in den Eingabedaten, was wissen wir überhaupt hierüber und darüber, welche Effekte werden vernachlässigt? Etc. etc. Anfangs ungläubig bestaunt, ja verehrt („Sie sind Mathematikerin – toll!“), inzwischen ähnlich verunglimpft wie seinerzeit Paul Kirchhof (Sie erinnern sich, der fast legendäre „Professor aus Heidelberg“).

Inzwischen kennen wir gefühlt auch den letzten Virologen, die letzte Epidemiologin von der Hochschule Oer-Erkenschwick. Vielleicht glauben die Sender, dass die Botschaften, egal welcher Couleur, glaubhafter klingen, wenn von mehr Expertinnen vorgetragen? Oder dass die Monotonie erträglicher wird, wenn von wechselnden Gesichtern verursacht? Vielleicht aber müssen die Dauergäste ja tatsächlich auch mal was in ihrem Hauptberuf arbeiten und brauchen deshalb Verstärkung.

Dann die Gruppe der Sekundärexperten: die Ethikräte kennen wir inzwischen (von Europa, Deutschland, Bundesländern oder der Kleingartensiedlung „Glück-auf!“ in Bottrop), viele Ökonomen auch, und dass Journalisten sich wechselseitig gerne einladen, ist nicht neu; auch wenn sich mir die besondere Qualifikation von „jahrelanger Autor im Echernacher Merkur“ nicht erschließt. Oder die authentischen „Leute wie du und ich“: ein Friseur, der klagt, wie blöd der Lockdown für Friseure ist; eine Restaurantbesitzerin, die klagt, wie blöd der Lockdown für Restaurantbesitzerinnen ist.

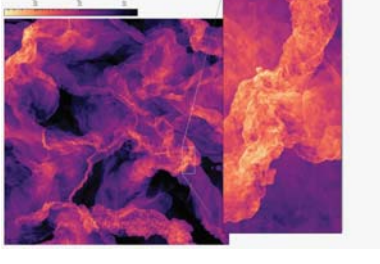
Völlig d' accord, aber das hätten wir auch so gewusst. Schließlich die Politiker – in den bekannten Rollenspielen: Die mit Regierungsverantwortung müssen sich für Pannen und Murks rechtfertigen, und die aus der Opposition tun alles, um zu zeigen, dass sie keinesfalls mehr Ahnung haben. Nichts Neues im Westen.

Doch nun die Gretchenfrage: Bringt uns die allabendliche Beschallung weiter? Nein – es ist immer derselbe „wenn, dann“ Mist, immer dasselbe „wir wollen öffnen, aber – huch, die Infektionszahlen!“; bzw. „wir müssen ein zweites Bergamo verhindern, aber – huch, wir dürfen Wirtschaft und Gesellschaft nicht überfordern“. Alles richtig, aber wir haben auch nicht jeden Abend Talkshows zu „2+2=4“. Lernen wir etwas? Offensichtlich nicht – wenn nach einem Jahr immer noch viele nach Klarheit und Verlässlichkeit rufen. Wer noch immer nicht geschnallt hat, dass es gerade die nicht geben kann, dass wir zwar detaillierte Öffnungsszenarien formulieren können, dass die aber ggf. das Papier nicht wert sind, auf dem sie stehen, dem helfen auch Talkshows nicht. Insofern bitte machen – überhaupt machen, besser machen, schneller machen; aber nicht ständig drüber reden und angeblich besser wissen!

Falls darüber Unklarheit herrschen sollte: Ja, ich kenne den Aus-Schalter am Fernseher oder alternativen Empfangsgerät; ja, es wird noch ganz anderer Unsinn produziert und gesendet; und nein, ich bin nicht masochistisch veranlagt, nur weil ich trotzdem immer wieder reinschaue. Das Editorial will schließlich geschrieben sein.

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, Frohe Ostern, eine erfolgreiche Eiersuche (unter welchen dann geltenden Restriktionen auch immer), ein passendes Impfangebot und einen möglichst Lanz- und Lauterbach-freien Frühsummer. Bleiben Sie gesund und haben Sie viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.



**Abbildung 1:** Interstellare Gase formen eine Turbulenz. Die Abbildung aus der Simulation zeigt einen Schnitt durch das turbulente Gas. Turbulenz schafft Bewegung und dadurch entstehen in den Gaswolken Dichtekontraste, die eine Schlüsselrolle bei der Entstehung von Sternen spielen. Foto Ch. Federrath, R. Klessen et al

Weiterführende Informationen sind abrufbar unter:

- Bericht Nature <https://www.nature.com/articles/s41550-020-01282-z>
- Bericht LRZ <https://www.lrz.de/presse/ereignisse/2021-01-26-Simulation-Turbulenz/>
- Bericht Gauss-Centre <https://www.gauss-centre.eu/news/research-highlights/article/researchers-use-lrz-hpc-resources-to-perform-largest-ever-supersonic-turbulence-simulation/>
- Paper <http://de.arxiv.org/pdf/2011.06238v1>
- Visualisierung Youtube <https://www.youtube.com/watch?v=EPe1Ho5qRuM>

S. Vieser



Sie halfen beim Anpassen der Algorithmen an den SuperMUC, kontrollierten die laufenden Rechenarbeiten des Supercomputers in Garching, aber auch die regelmäßige Speicherung der Zwischenergebnisse oder Snapshots, die bei solchen großen Projekten weiteren Analysen und der Sicherung von Daten oder Rechenergebnissen dienen.

SuperMUC, der vorherige Supercomputer des LRZ, arbeitete bis 2019 mit 9216 Rechnerknoten, jeweils mit zwei Intel Xeon E5-2680 Prozessoren ausgestattet. „Diese Arbeit basiert auf einer Simulation mit 4096 solcher Knoten, für insgesamt 65536 Rechenkerne und 50 Millionen Kernstunden“, schreibt das Team in seinem kürzlich veröffentlichten Paper. Zum Einsatz kam FLASH, ein Open-Source-Hydrodynamik-Code, der in der Astrophysik weit verbreitet ist. Dieser wurde auf drei Arten modifiziert, um die Datenmengen zu beherrschen und die Leistung des Rechners zu steigern: So wurden die Anzahl der gespeicherten 3D-Felder auf ein Minimum reduziert. Aufrufe der Zustandsgleichungs-Routinen wurden ebenfalls entfernt, um diese Operationen direkt im Riemann-Solver auszuführen. Nicht zuletzt wurde ein hybrider Code erstellt, der Gasvariablen in einfacher Genauigkeit, also mit 4 Byte pro Fließkommazahl, speichert. Kritische Operationen wurden weiterhin in doppelter Genauigkeit aufgenommen. So konnten bei hoher Genauigkeit die Rechenzeit, die Message-Passing-Interface-Kommunikation sowie der Gesamtspeicherbedarf erheblich reduziert werden. Das Speichervolumen sank in etwa um den Faktor 4. Dafür lief der Code schneller.

High Performance Computing kann noch mehr: Die Anwendungs- und Visualisierungs-Spezialist:innen des LRZ verarbeiteten die Daten der interstellaren Turbulenz zu einer Visualisierung, die bereits mehrfach ausgezeichnet wurde. Federrath und Klessen bereiten indes schon die nächste Simulation vor – sie soll um Magnetfelder, Chemie und Abkühlung erweitert werden, um die Geburt von Sternen noch besser nachvollziehen zu können. Dafür aber sind noch mehr Rechenleistung, Speicherplatz und vor allem clevere Codes notwendig.

## Iterationsschleife

N=38

05. März 2021

Ein Cyborg<sup>a</sup> sei eine Mischung aus einem Körper<sup>b</sup> und künstlichen Bauteilen sagt uns Wikipedia. Manfred E. Clynes und Nathan S. Kline veröffentlichten dazu schon 1960<sup>c</sup> einen Artikel mit dem Titel „Cyborgs and Space“ in dem sie diskutierten, dass es klüger sei, Menschen durch kybernetische Eingriffe an die lebensfeindliche Welt im All anzupassen, als den Versuch zu unternehmen, Orte im All an die Notwendigkeiten des Menschen anzupassen. Sie verwenden für das so geschaffene Wesen den Begriff des Cyborgs aber auch „manmachine systems“. In ihrem Artikel beschreiben sie diverse Apparate mit denen man Menschen für Reisen ins All fit machen kann. Die Idee der Kombination aus natürlichen und künstlichen Komponenten tritt seither sowohl in der Realität als auch in der Fiktion auf.

Will Smith<sup>d</sup> etwa, der in „I Robot“<sup>e</sup> Jagd auf den Mörder eines Roboterentwicklers macht, verfügt im Film über mechanische Bauteile in seinem Körper, die es ihm ermöglichen, gegen Roboter zu kämpfen. Die Idee des Cyborgs wird damit zur Idee der Integration von Werkzeugen in den menschlichen Körper. Während die klassische Sicht des Werkzeugs dieses als Erweiterung des Körpers ansieht, um die Fähigkeiten des Menschen zu verbessern bzw. zu erweitern, geht es dem Konzept des Cyborgs nicht um die Erweiterung, sondern um die Integration – und mithin um die Verbesserung des menschlichen Körpers an sich.

Diese Idee der Verbesserung kommt zwar aus den Überlegungen der Raumfahrt deutet aber in ihrer kulturellen Umsetzung gleichzeitig auf eine Vorstellung vom menschlichen Körper als defizitär hin und steht damit in einer christlichen Tradition, die den Körper sowohl als Gefäß für die menschliche Seele als auch als eine dauernde Herausforderung für das Heil dieser Seele ansieht.

<sup>a</sup>Cyborg steht als Abkürzung für den Begriff cybernetic organism.

<sup>b</sup>Meist wird angenommen, dass es sich um einen menschlichen Körper handelt, doch ist auch jeder andere Körper zu-lässig wobei mitunter auch eine Einschränkung auf Säugtiere gemacht wird.

<sup>c</sup>Manfred E. Clynes and Nathan S. Kline, Cyborgs and Space, Astronautics (September, 1960)

<sup>d</sup>Will Smith (25.9.1968 - ) ist ein US-amerikanischer Rapper und Schauspieler

<sup>e</sup>I Robot ist ein Film aus dem Jahr 2004 von Alex Proyas, der auf der Basis von Isaac Asimovs (2.1.1920 – 6.4.1992) Buch „I Robot“ (1950) entstand

Tatsächlich finden sich Ansätze wie von Clynes und Kline beschrieben auch in der heutigen Medizin. So werden zur Behandlung von Zuckerkrankheiten Insulinpumpen implantiert, die dort bis zu 10 Jahre verbleiben können. Ebenso werden Herzschrittmarker implantiert, die regelmäßig gewartet werden und deren Batterie nur noch selten gewechselt werden muss. Cyborgs sind also unter uns, und die Idee des Cyborgs hat die Lebensqualität vieler Menschen verbessert.

Die Möglichkeit der ständigen Beeinflussung menschlichen Verhaltens und der menschlichen Biologie führt zu Ideen, auch andere Defizite des menschlichen Körpers auszugleichen. Wenn das emotionale Verhalten von Menschen biochemisch beeinflusst werden kann, dann können Phänomene wie Aggressivität, Neid oder Hass auch aus dem menschlichen Leben eliminiert werden. Wäre also nur noch die Frage zu klären, wie wir Aggressivität, Neid und Hass definieren und wer darüber befinden soll, wann die Grenze zu den negativen Gefühlen überschritten wird? Oder wäre auch noch die Frage zu klären, was der Begriff „Mensch“ zu besagen hat, wenn es uns gelingen sollte, den Körper des Menschen so zu modifizieren, dass er einem - noch politisch auszuhandelnden - Ideal entspricht? Die Zurückhaltung des menschlichen Körpers zur Optimierung des menschlichen Zusammenlebens wäre also eine der Fragen, die das 21. Jahrhundert zu klären hätte.

Der österreichische Sänger Wolfgang Ambros singt dazu<sup>2</sup>:

A Mensch möcht' i bleib'n  
 Und net zur Numma möcht' i werd'n  
 Und Menschen möcht' i seh'n  
 Wei i bin sehr dageg'n  
 Dass ma unsere Häusa nur mehr für Robota baun  
 Die deppat, nur im Fernseha schau'n.

Ersetzt man „Fernseha“ durch „Computer“ so hat man den Eindruck, eine Beschreibung der Menschheit in Coronazeiten vor sich zu haben. Unsere Dystopien begleiten uns wohl ebenso durchs Leben wie unsere Utopien.

M. Resch

<sup>2</sup> „A Mensch mecht I bleibn“, erschien 1974 unbeachtet als Single und wurde zum Titellied eines 1982 erschienenen gleichnamigen Albums

## Größte Simulation einer interstellaren Turbulenz



Eine Billion Gleichungen und Auflösungspunkte, mehr als 130 Terabytes Arbeitsspeicher: Die größte Simulation interstellarer Turbulenzen, die am SuperMUC des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) berechnet wurde, bricht nicht nur technisch Rekorde. Die bemerkenswerte Forschungsarbeit macht das Geschehen in den Gaswolken von Galaxien verständlich. Das Team um Prof. Dr. Ralf Klessen vom Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg und Prof. Dr. Christoph Federrath von der Australian National University Canberra lokalisierte darin erstmals die Schallskala oder Sonic Scala, also jene Zone, wo Überschall- in Unterschall-Geschwindigkeiten übergehen.

Die Schallskala prägt die Eigenschaften dichter Wolkenkerne. Rasante, turbulenzdominierte Bewegungen im Überschallbereich reißen Materie auseinander, langsame schwerkraft-dominierte führen sie indes zusammen: „Dieses turbulente Verhalten scheint ein Schlüssel dafür zu sein, wie interstellare Gaswolken unter ihrer eigenen Schwereanziehung fragmentieren und sich zusammenballen, um Sterne und Sternenhaufen zu bilden“, erläutert Klessen. Von großräumigen Schwaden bis hin zu kleinsten Verwirbelungen – um die Turbulenz zu modellieren, arbeitete das Team mit unterschiedlichen Maßstäben, vom 10.000-er bis zum Billionenbereich. Es berechnete zudem verschiedene Gasdichten und entwickelte dafür komplexe Gleichungen. „Für die Simulation, in der wir die Überschall- wie auch die Unterschallkaskade der Turbulenz sowie die Schallskala dazwischen aufzeigen wollten, waren mindestens vier Größenordnungen an räumlicher Auflösung notwendig“, berichtet Federrath. So entstanden mehr als eine Billion Auflösungselemente, außerdem mehr als 100 Snapshots, von denen jeder für sich bereits rund 23 Terabytes an Festplattenplatz beansprucht. Unterstützt wurden die Forschenden dabei von den Anwendungsspezialist:innen des LRZ.

Die Preisträger\*innen der vergangenen sieben BGCE-Preise sind:

- 2019: Elizabeth Qian (MIT) und Zakia Zaimib (SISSA)
- 2017: Robert Gantner (ETH Zürich)
- 2015: David Emerson (Tufts University)
- 2013: Tobin Isaac (ICES, UT Austin)
- 2011: Andrea Manzoni (EPF Lausanne)
- 2009: Gisela Widmer (ETH Zürich) und Chad Lieberman (MIT)
- 2007: Alfonso Bueno Orovio (Universidad de Castilla-La Mancha, Spain)

Tobias Neckel

## EuroTech – CovidTech – SimTech

As a postdoc, you expect a certain level of uncertainty in your live and career planning. The Covid pandemic, however, spiced up the overall situation. Let me tell you the story of my last two years in three chapters.

### 1 EuroTech

EuroTech is a strategic alliance of six European technical universities: Technical University of Denmark (DTU), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), L'École Polytechnique à Paris (l'X), Technion Israel Institute of Technology, Eindhoven University of Technology (TU/e), and Technical University of Munich (TUM). To strengthen their collaboration, the alliance created a funding program specifically for postdocs – the EuroTech PostDoc Program. The program is co-funded by the universities and the European Union and is currently in its second phase<sup>1</sup>. Each phase has two calls. The second call of the second phase will open in November 2021 and close in February 2022. Each call awards 35 Marie Skłodowska-Curie fellowships, which fund the postdocs' positions for two years. The fellows need to choose a host and a co-host institution. Moreover, the EU mobility rule applies – fellows may not have lived in the country of the host institution before the fellowship. The research projects are bottom-up projects – this means that the postdocs write the proposals to fund their own research.

I can highly recommend the program. It opens many opportunities without too many strings attached. There are almost no reports to hand in, the fellows are encouraged to regularly update their work program, and the accompanying course program (two weeks per year) was helpful most of the time. The program helps to explore new opportunities, to get independence, and to push one's career. My fellowship took me to Eindhoven, where I joined Harald van Brummelen's group. I got to know Harald at various conferences and, of course, through his publications. His research is best located in between applied math and mechanical engineering. So, Harald knows the burden of

<sup>1</sup><https://postdoc2.eurotech-universities.eu/>



interdisciplinary research, but from a different angle as myself. My intention from the beginning was to be forced out of my comfort zone. Suddenly, sketching finite element formulations on the white board was the new normal. As co-host, I chose Hans Bungartz, which allowed me to stay in close touch with the preCICE team and SCCS at TUM.

It's a quasi prerequisite of an academic career today to once get to know the academic system of another country. However, I didn't expect how different some things are handled in the Netherlands – of course some better, some worse. On the plus side there's this German buzz word *Digitalisierung*. At TU/e, there's one student and employee card for everything: getting into buildings, buying coffee, printing all over campus, and entering your sports class – to only name a few. Moreover, you can apply for and reimburse a business trip in really only one minute. Another thing we could learn from the Dutch is the welcoming culture. Three examples: There's a specific expat center in Eindhoven, where foreigners can handle all their legal things; all letters from the city are obviously in Dutch and English; and the TU/e HR helps you filling out your tax forms.

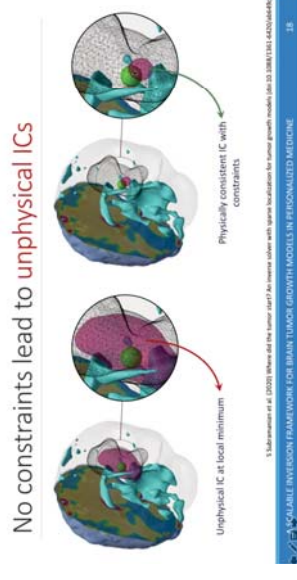
I also have to mention some odd and funny things. No joke, you can exchange your holidays for a bike financing plan. And then there's those *lunch meetings*, which take relaxing lunch breaks and turn them into awkward meetings where you never know whether and when you should eat.

All in all, I really enjoyed my time in Eindhoven. Sadly, February last year, the EuroTech chapter came to a sudden stop. During the SCCS chair retreat, TU/e announced to close its doors due to the swelling pandemic.

## 2 CovidTech

The pandemic caught us all by surprise. My original plan was to directly go back to Eindhoven after the chair retreat. Instead, I decided to stay in Munich for the moment. Thank god we had kept our apartment here. Once the situation would settle, I would go back to Eindhoven. As we all know now, the situation didn't settle. I had to postpone my plan several times. In June, we finally decided to cancel our place in Eindhoven. From February

Das Votum der Jury war trotz durchwegs extrem hoher Qualität der Vorträge einstimmig: Der diesjährige Gewinner ist Shashank Subramanian vom Oden Institute for Computational Engineering and Sciences der University of Texas at Austin.



**Abbildung 1:** links: Im Screenshot von Shashank Subramanians Vortrag ist die erfolgreiche Rück-Berechnung eines Gehirntumorherds (kleiner roter Ball ganz rechts im Bild) dargestellt. rechts: Foto des Preisträgers Shashank Subramanian.

Wir freuen uns bereits jetzt auf Shashanks Besuch, der natürlich erst stattfinden wird, sobald das Corona-bedingt wieder sinnvoll möglich ist!



vability Criterion for Sensor Selection for Configuration-dependent Linear Bayesian Inverse Problems With Correlated Noise

- Michael G. Kapteyn, Department of Aeronautics and Astronautics, Massachusetts Institute of Technology: A Probabilistic Graphical Model Foundation For Enabling Predictive Digital Twins At Scale
- Georg Maierhofer, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge: A general method for moment computation in Filon methods
- Jens Hahne, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften, Bergische Universität Wuppertal: Time-Parallel Simulation of an Induction Machine using MGRIT with Spatial Coarsening
- Terrence Alsup, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University: Trading-off Deterministic Preconditioning and Sampling in Bayesian Inference
- Maria Strazzullo, mathLab, Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Trieste: Reduced Order Models for Parametrized Optimal Control in Advanced Applications: From Nonlinearity To Time Dependency
- Shashank Subramanian, Oden Institute for Computational Engineering and Sciences, University of Texas at Austin: A Scalable Inversion Framework for Brain Tumor Growth Models in Personalized Medicine

Die Paper und Vorträge wurden im Anschluss von einer internationalen Jury bewertet, die sich aus folgenden Wissenschaftler\*innen zusammensetzte: Hartwig Anzt (Karlsruhe), Hans-Joachim Bungartz (TUM), Rolf Krause Università della Svizzera italiana, CH), Esmond Ng (Lawrence Berkeley National Laboratories, USA), Anne Reinartz (Durham University, UK), Barbara Wohlmuth (TUM), Carol Woodward (Lawrence Livermore National Laboratories, USA).



**Figure 1:** SCCS friends at the Stadsbrouwerij Eindhoven in 2019

to June, I only had the one bag of winter clothes I had brought with me. It's also a fun experience to open your apartment the first time after 5 months while you planned to only be gone for 3 weeks. We packed and cleaned up everything in one weekend, said goodbye to whomever we were able to meet, and properly moved back to Munich. I still left some of my things in the TU/e office as I was sure to be back in September. I haven't been back since then. In the last 12 months, TU/e has followed a rather strict safety policy. For most of the time, it was forbidden to work from the university for researchers who don't rely on lab equipment.

The goodbye from Eindhoven was odd. Some things had just started to click. I had just joined a table tennis team and after the first three games when the season was canceled, we headed the tableau. Still, I was happy to be back in Munich and to work from home at home. I only had to learn again to look out for cars trying to run you over while biking. :-)

### 3 SimTech

There is a postdoc rule of thumb: When you start a new position, you should already start looking for the next position. So, I started to look for the next career step mid 2019. However, the biggest part of the application phase took place while I was working from home in Munich in 2020. In the last year, we all learned how to work remotely – so did the hiring committees. I applied to five positions and experienced committees who had put thorough thought into how to hire remotely and committees who hadn't. Some universities also went on hiatus and haven't replied to me since. Maybe someone from Augsburg reads this? :-)

I'm very happy that all worked out and that, in January 2021, I could start as a junior professor for Sustainability and Usability of Simulation Software<sup>2</sup> at SCCS's old friend, the IPVS at the University of Stuttgart. With the Cluster of Excellence SimTech *Data-Integrated Simulation Science*<sup>3</sup>, Stuttgart is really an exciting place to work at right now. SimTech targets a new class of modeling and computational methods that introduce data into simulations to bring usability and precision of simulations as well as reliability of decisions based upon simulations to a new level. The cluster targets three *visionary examples*: Engineered Geosystems, Digital Human Model, and Next-Generation Virtual Materials Design. With my know-how in coupling and software, I hope to be able to contribute to the challenging mission of SimTech.

So, in the final chapter, I changed jobs from Eindhoven to Stuttgart while working from Munich. We really live in a time of uncertainty. This is why I am honestly thankful I had colleagues and mentors who I could always count on during these last two years.

Benjamin Uekermann

<sup>2</sup><https://www.ipvs.uni-stuttgart.de/departments/us3>

<sup>3</sup><https://www.simtech.uni-stuttgart.de>

### 8. BGCE Student Paper Preis



Auf der **SIAM CS&E Konferenz 2021**, die vom 1.–5. März 2021 im Online-Format stattfand, wurde der 8. BGCE Student Paper Preis <https://www.bgce.de/news/bgce-student-paper-prize/> für hervorragende studentische Arbeiten im Bereich des Computational Science and Engineering vergeben.

Stifter des Preises ist die Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE). Die Gewinnerin bzw. der Gewinner des Preises besucht eine Woche lang kostenlos Bayern, die FAU und die TUM und pflegt intensiven Kontakt zu Vertreter\*innen der BGCE. Das Hauptanliegen des Preises ist es, exzellente Studierende im Bereich CS&E zu fördern und internationalen Austausch in einer frühen Karrierephase zu unterstützen. Für den BGCE Student Paper Preis können sich Masterstudent\*innen und Doktorand\*innen bewerben, indem sie ein kurzes Paper von maximal vier Seiten einreichen.

Aus den insgesamt 24 Einreichungen von namhaften Standorten aus acht Ländern hat ein BGCE-Gremium dieses Jahr folgende acht Preis-Finalist\*innen ausgewählt, die ihre Arbeit in den zwei speziellen „CS&E Student Paper Prize Minisymposien“ MS 6 ([https://meetings.siam.org/session/dsp\\_programmess.cfm?SESSIONCODE=69827](https://meetings.siam.org/session/dsp_programmess.cfm?SESSIONCODE=69827)) und MS 96 ([https://meetings.siam.org/session/dsp\\_programmess.cfm?SESSIONCODE=69828](https://meetings.siam.org/session/dsp_programmess.cfm?SESSIONCODE=69828)) auf der SIAM CS&E 2021 (<https://www.siam.org/conferences/cm/conference/cse21>) vorstellten:

- *Shane A. McQuarrie*, Oden Institute for Computational Engineering and Sciences, University of Texas at Austin: Data-driven Reduced-order Models via Regularized Operator Inference
- Nicole Aretz, Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES), RWTH Aachen University: An Obser-

This work originated from the BGCE project of the CSE students of 18/19, which was in collaboration with Siemens AG. The focus of the work was to adopt a machine learning approach to identify optimal mesh densities for arbitrary geometries. The first part of the work was to set up a fully automated training pipeline to generate a training dataset of about 20000 meshes from 2d wind tunnel simulations. Using this training data, a convolutional neural network is trained for optimal mesh density prediction. Corresponding predictions of those meshes can then be used as input for any mesh generation and CFD tool. Thus, without complex computations, CFD engineers can start their predictions from a high quality mesh, which can be used directly for simulations or as a starting point for further mesh refinement. This may not only have computational advantages but also help inexperienced users who are not proficient in meshing. If you missed the poster during the conference but are interested in this work, feel free to have a look at the arXiv paper.



Abbildung 1: SIAM 2021: Best poster Award

We are of course very happy with this award (and honestly quite positively surprised). This shows that great research is not restricted to PhD level or higher but also student work can be at a very high level and an event like a poster session at a conference is a great opportunity to present this kind of results. Now we are waiting impatiently for the next SIAM CSE conference in Amsterdam in 2023 to see who will “make the hand full”.

Friedrich Menhorn & Qunsheng Huang



## KONWIHR: New projects from fall 2020

The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of fall 2020. As every semester, we accepted proposals of “normal” (up to 12 months) and “small” (up to 3 months) projects.

- Parallel mesh loading and partitioning for large-scale simulation
  - Prof. Florian Frank (FAU)
- Scattering Tool to Advance Research of Materials Structure (STAR-MiSt)
  - Dr. Alberto Leonardi / Prof. Thorsten Pöschel (FAU)
- Implementation of hyper-dimensional thermodynamic integration for parallel HPC molecular dynamics simulation using LAMMPS
  - Prof. Dirk Zahn (FAU)
- Monte Carlo simulations of topological quantum matter
  - Prof. Fakher Assaad, Dr. Florian Goth (Univ. Würzburg)
- Thinking beyond SuperMUC-NG: Porting MGLET to GPUs
  - Dr. Yoshiyuki Sakai, Simon von Wenczowsk, Prof. Michael Manhart (TUM)
- Optimization of Dynamic Mesh Handling in preCICE
  - Dr. Benjamin Uekermann (TUM)

You can find more details about these projects at

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

The new projects are going to participate in an online workshop on March 18, presenting their goals and challenges.



## Reminder: A new mailing list for projects

A common wish of our projects is a common platform to share HPC knowledge among funded projects. Listening to this feedback, we started a new mailing list:

[konwihr-projects@lists.lrz.de](mailto:konwihr-projects@lists.lrz.de)

If you have received funding from KONWIHR or would like to support the current projects, you can subscribe using the Mailman interface. While the new mailing list still has to break the ice, we are confident that there is a lot worth discussing, including common patterns among KONWIHR projects, as well as HPC literature & resources.

### Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

[info@konwihr.de](mailto:info@konwihr.de)

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

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

Gerasimos Chourdakis



## SCCS: „Four in a row is almost a handful“

In Quartl 2/19, edition 90, Ionut Farcas ended his article on winning the SIAM CSE 19 poster award with the following sentence: “For the chair of Scientific Computing in Computer Science, this was the third Best Poster Award in a row, therefore, as a message for the participants in the 2021 conference, no pressure, but you have a legacy to carry on!”

Well, here we are again! This year's SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21) took place virtually from March 1-5. As in every SIAM CSE, a poster sessions is part of the program, where researchers present their work in the form of a poster in a 2 hour session. Usually, this is accompanied by a grand buffet and drinks during one of the conference's evenings, with conference participants strolling through the aisles of posters and talking to presenters. Everything is different this year, of course, and the poster presentation also took place virtually, like the rest of the conference. To realize this, each poster had its own Zoom meeting where participants could look at the poster and interact with the presenter. The presenters were also asked to upload a 30 second video summarizing their work to the conference web page beforehand.

These sessions not only offer great visibility and close interaction, but SIAM also awards prizes to the best posters at the end of the conference. To this end, a total of 160 judges rated the posters based on visual appeal, technical soundness and relevance to CSE; each poster was visited by 8 judges. And, quickly becoming a tradition, our group won one of the awards for best poster, for the fourth time in a row at this conference.

This year's poster was on the topic of

Machine Learning-Based Optimal Mesh Generation in Computational Fluid Dynamics by Qunsheng Huang (SCCS), Moritz Krügener (former CSE/BGCE student), Friedrich Menhorn (SCCS), Alistair Brown and Dirk Hartmann (both Siemens AG).



The paper addresses the following matters:

- Why sustainable software in the first place?
- How to decide which software to sustain?
- Who sustains research software?
- How can research software be sustainably funded?
- Which infrastructure is needed to sustain research software?
- Legal aspects (with the position “public money - public code”)

Each section presents the current situation, the ideal situation (as depicted in a side-story of Kim and a project that could be any of the codes developed at SCCS), and challenges, proposing policies to tackle each issue.

The central recommendation of the paper is to establish a national Software Sustainability Institute, similar to the UK SSI, which could serve with infrastructure, training, and as a national contact for all aspects related to research software. This should be assisted by a central “legal help desk”, by community efforts (such as the recently established deRSE), and by dedicated RSE positions at the universities. This role should be better defined and recognized in the German academic system, especially to avoid skilled RSEs leaving the university due to fixed-term positions and to “maintain a constant level of expertise and prevent knowledge drain concerning domain knowledge and software engineering skills”.

Another recommendation is to increase awareness and provide training in different levels. This should be addressed by dedicated courses (similar to the ones that the computing centers already provide), but also by injecting modern software engineering skills in existing domain courses.

Finally, we saw already how funding schemes are connected to the original issue. The authors recommend additional criteria to select which projects to sustain with funding, rewarding best practices (such as public code), usage & impact, software transparency & quality, and maturity. They also envision funding periods of five years, with reevaluation and phase-out sustainable funding. Funding agencies should also request that applicants include a software management plan after the end of the project lifetime, plans we could already start thinking of today.

Gerasimos Chourdakis

## preCICE Workshop 2021

The community is here, even if only remotely



In the Quartf issue 93, we celebrated the first preCICE<sup>4</sup> workshop, gathering 42 people from mostly across Europe in the TUM campus Garching, being one of the last in-presence conferences in 2020. Even though the plans to enjoy some Maultaschen together in Stuttgart this year did not succeed, we saw this as a rare opportunity to invite people from across the globe.



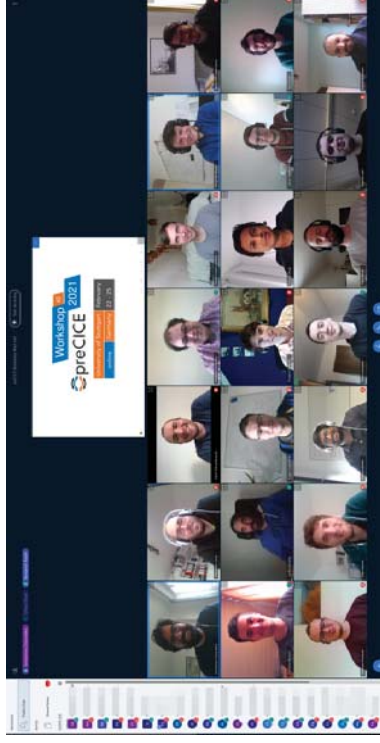
**Figure 1:** Perspective from the library, one of the BBB side-rooms.

During February 22-25, 67 participants met online, in a hopefully not-so-tiring event. After trying different platforms, we stuck with the well-liked TUM BigBlueButton instance, with one “main hall” and a combination of breakout and persistent side rooms (“Conservatory”, “Dining room”, “Kitchen”, “Library”–Fig.1, ...). To avoid surprises, we got all the talks recorded beforehand (with a deadline just days before the conference starts), and streamed them for the first time from YouTube via BBB. This allowed for continuous Q&A during the talks and more fruitful discussions after each talk. Most of the videos will be made public in April, so you can also get a taste.

<sup>4</sup>The coupling library for partitioned multi-physics simulations. Did you hear that we redesigned the website? See <https://www.precice.org/>.

The written communication relied on the BBB chat and last year's "introduction Blitz" was replaced by an introduction thread on our forum<sup>5</sup>, something we hope will help the community form bonds.

Similarly to last year, we wanted to make this a learning experience for people of any background or level of previous knowledge, as well as a balanced mixture of presentations and "stand-up" events. We offered an extended version of the same preCICE course as last year, covering the basics, useful tools, and now also implicit coupling with acceleration on a conjugate heat transfer scenario. The most challenging part was the social event, which converged into self-organized groups discussing topics of common interest. Similarly, a "morning coffee" opening of each day provided further opportunities for networking. Last but not least, on the last day, each of the developers was available for 1-to-1 meetings with users, to discuss their applications, technical issues, and potential collaborations.



**Figure 2:** The group photo we almost forgot to take this time.

Overall, it was a very helpful workshop for us, and we hope that everybody who attended managed to learn something new.

Gerasimos Chourdakis

<sup>5</sup>preCICE forum on Discourse – preCICE Workshop 2021: Introduce yourself.

## A paper worth reading on policies needed to make research software a first-class citizen in Germany

F1000Research

*“Research relies on software and software relies on the people developing and maintaining it. Sustainable research requires sustainable software, and this in turn requires continuity for those who develop and maintain it.”*

This sentence, I think, summarizes the recently published policy/opinion article by Anzt et al.<sup>6</sup> on the open access publishing platform F1000Research. The paper is a community effort of researchers from at least 36 universities and research institutes, with TUM-SCCS included. It is also a nice example not only of quality and storytelling, but also of collaborative writing, editing, and reviewing (partially on GitHub).

You may not yet be familiar with the term “*Research Software Engineer*”, but chances are that you are one, or that you have been one in the past, before leaving software development behind to do more research in your domain. This paper addresses a wide range of stakeholders, ranging from researchers to decision makers in infrastructure and geopolitical units.

The main issue identified in the paper is that while research software is central in research, it is often only considered a by-product of it and does not receive recognition similar to traditional, text-based publications. The developers are maybe often at a disadvantage for developing sustainable software, as they do not invest this time in writing papers. This leads to often non-reusable software and duplication of efforts inside and across institutions, originating also from the current funding schemes. As one of the reviewer states, “*our traditional funding models consider the software to be ‘done’ by the end of the project*”. This view of software projects conflicts with the very nature of continuous software development.

<sup>6</sup>Anzt H., Bach F., Druskat S. et al. An environment for sustainable research software in Germany and beyond: current state, open challenges, and call for action [version 2; peer review: 2 approved. F1000Research 2021, 9:295] (<https://doi.org/10.12688/f1000research.23224.2>)