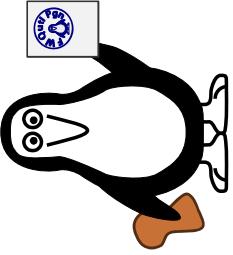


Quartl

103. Ausgabe
3/2022

Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	6
Combining deep learning with Full-Waveform detection in non-destructive testing	9
High Performance Computing für die KI-Ausbildung an Hochschulen für angewandte Wissenschaften	16
Best Paper Award for MD-Bench at PPAM 2022	19
The COME-CSE Summer Trip is Back! SCCS und R-CCS - PART TWO	21
KONWIHR Workshop – October 2022	25
	29



Quartl* - Impressum

Herausgeber:

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

Redaktion:

S. Herrmann, S. Reiz, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München
Tel./Fax: +49-89-289 18611 / 18607
e-mail: hermata@in.tum.de,
<https://www.cs.cit.tum.de/sccs/startseite/>

Redaktionschluss für die nächste Ausgabe: **01.12.2022**

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



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

Der 30.9.2022 war ein denkwürdiger Tag – wahrscheinlich in verschiedener Hinsicht, ganz bestimmt aber aus einem Blickwinkel. An diesem Tag um 23:59 Uhr wurde die Fakultät für Informatik der TU München aufgetöst, nach exakt 30 Jahren. Gemeinsam mit ihren beiden Schwesterfakultäten für Mathematik sowie für Elektrotechnik und Informationstechnik machte sie Platz für die, bzw. ging sie auf in der neuen TUM School of Computation, Information, and Technology – kurz CTI.

Erinnern wir uns kurz: Am 1.10.1992 waren die beiden damaligen TUM-Fakultäten für Mathematik und für Informatik aus der zuvor gemeinsamen Fakultät hervorgegangen. Mit dem Rigorosum im Juni 1992 war meine Promotion wohl eine der letzten vor der Trennung, und nun bin ich der erste Dekan, oder Gründungsdekan der beiden wieder- und auch gleich noch mit der Elektro- und Informationstechnik vereinigten Fakultäten. Damals hatte man sich für die Trennung entschieden, weil das gemeinsame Haus zu klein sowie manche Unterschiede vermeintlich zu groß geworden waren. Die Informatik hatte zu dieser Zeit übrigens keine 15 Lehrstühle und weniger als 25 Professuren. Nicht wenige bemühten hier auch den Begriff der Fachkulturen als Argument für das Auseinandergehen. Heute führt man dagegen zusammen, weil man an Größe zulegen (die Informatik allein marschiert aktuell auf die 70 Professuren zu, nur mal so am Rande), kritische Masse erreichen sowie disziplinäre Zerstückelung und Isolation überwinden möchte. Es ist müßig darüber zu diskutieren oder gar zu streiten, ob das nun von der Art „Erst hü, dann hott“ ist (es soll ja auch Großkonzerne geben, die einen Konzernteil abstoßen und ein paar Jahre später wieder eingliedern, oder umgekehrt), oder ob es doch aus dem jeweiligen historischen bzw. wissenschaftsstrukturellen Kontext heraus immer genau die richtigen Schritte waren – da gibt es durchaus valide Argumente auf beiden Seiten. Denn der Wechsel ist vollzogen: Die Fakultäten sind tot, lang lebe die School! Hoffen wir auf zumindest 30 Jahre; man weiß ja nie, was uns in einigen Jahren für Exzellenzkapriolen und entsprechende Kontexte blühen.

Die IN-Geschichte ist eine Erfolgsgeschichte – hoffentlich nicht nur aus der nostalgischen Perspektive eines gewesenen Dekans einer gewesenen Fakultät. Am Anfang ging's rasant voran, dann kam das berühmte Platzen der Dot-com-Blase, und am Tiefpunkt um das Jahr 2008 hatten wir gerade mal 1868 Studierende (ich weiß die Zahl deshalb so präzise, weil 1868 das Gründungsjahr der TUM ist ...). Danach ging es eigentlich nur noch bergauf – Studierende (hier ist der Faktor am größten – im Studienjahr 2021/22 lagen wir bei über 8300), Professor:innen, Mitarbeitende (allerdings ist bei den wissenschaftsstützenden Kräften das Wachstum nahe der schwarzen Null), Drittmittel. Beim Raum freilich ist der Gradient alles andere als steil, aber da ist zumindest Land in Sicht. Aber auch sonst – die TUM-Informatik ist eine Marke, damals wie heute, national wie international. Bei einem der führenden Rankings waren wir kürzlich sogar einmal auf Platz 9 weltweit (ich agiere hier getreu meinem Motto „Ich glaube nicht an Rankings, aber ich nutze sie ...“). Ego: Wir übergeben eine funktionierendes Fakultät, und wir ziehen als starker Partner mit zwei weiteren starken Partnern in unser neues Haus CIT.

Und auch die CIT kommt wuchtig daher. Ca. 14000 Studierende – so etwas nennt sich anderswo schon mal Universität. Mit dieser Bemerkung muss ich allerdings vorsichtig sein, löst sie doch in hochschulleitenden Kreise gerne reflexartigen Widerspruch aus. Aber keine Angst – wir arbeiten nicht an einer Unabhängigkeitserklärung, wir sind mit unserem gemeinsamen Dach TUM doch sehr zufrieden.

Egal, wie die eigene Position aussah oder aussieht, ob man nun für oder gegen diese Umstrukturierung war oder ist: Die Komplexität dieses Prozesses ist sicher von den allermeisten der Beteiligten unterschätzt worden. Denn auf dem Papier sieht ja alles recht einfach aus: Aus Sicht des Hochschulgesetzes ist die School halt eine große Fakultät. Somit verschmelzen eben drei Fakultäten zu einer; aus drei Dekanen wird einer; was vorher drei Fakultätsräte regelten, obliegt nun einem School Council; und die Studiengänge bleiben ja zunächst auch dieselben; etc. etc. Wo ist also das Problem?

Zunächst mal ist es nicht ein Problem, sondern es sind derer viele. Die jeweils zusammenzuführenden Einheiten gibt es vielleicht gar nicht überall; was hier zentral geregelt wird, findet dort eventuell dezentral statt; und selbst wenn es sie dreimal gibt, so sind Prozesse und Zuständigkeiten sicher nicht überall gleich. Und dann gibt es doch tatsächlich nicht nur Gremien, Prozesse und Diagramme, die man auf einem Tableau fröhlich hin und her schieben kann. Vielmehr sind Menschen im System – Mitarbeitende, die sich über ihre Rolle in der neuen Struktur Gedanken machen; die hinterfragen, warum die eigenen Abläufe angepasst werden sollen – schließlich hat man diese doch über Jahrzehnte entwickelt, diskutiert und optimiert; und die vielleicht auch Ängste vor der Veränderung an sich haben – ein nicht ganz seltenes Phänomen. Die Frage der Ressourcenverteilung ist bekanntermassen heikel. Und das Argument der unterschiedlichen Fachkulturen kommt natürlich auch wieder auf den Tisch – manchmal wohl begründet, manchmal eher als Vorwand.

So haben wir uns also mit fast drei Jahren Vorlauf ans Werk gemacht – zwei Jahre in Eigenregie, mit diversen eingesetzten Teams mit speziellen Teilaufgaben und einem „Zwöferrat“ zur Koordinierung des Ganzen; und dann ein drittes Jahr mit dem Übergangskonstrukt einer „School in Gründung“, wodurch es praktisch zwei Parallelwelten gab: Die eine noch rechtskräftig, aber schon mit dem Stigma des Auslaufmodells, und die andere als das Modell der Zukunft, allerdings noch ohne Entscheidungskompetenzen. Und alle schielten, verständlicherweise, auf die Hochschulwahlen Anfang Juli, wo es die neuen Gremien und Mandatsträger:innen zu wählen galt. Einiges liegt also bereits hinter uns – aber es steht auch noch hinreichend Schwieriges vor der Tür.

Zum Abschluss noch eine kleine Anekdote – damit alle sehen, wo die wahren Schwierigkeiten liegen. Beim Antrag für ein Dienstsiegel für die neue School hat man uns zunächst mitgeteilt, dass die Regularien (da war wohl das Hauptzollamt im Spiel – eine sich geradezu aufdrängende Instanz für Angelegenheiten des Lordsiegelbewahrens ...) maximal 40 Zeichen für den Namen

KONWIHR Workshop – October 2022



Our online workshop took place on October 12, 15:00–18:00, in which new projects were presented their goals and challenges. Find more details on the KONWIHR website.

About KONWIHR

The main objective of KONWIHR (competence network for scientific high-performance computing in Bavaria) is to provide technical support for the use of high performance computers and to expand their deployment potential through research and development projects. Close cooperation between disciplines, users and participating computer centres as well as efficient transfer and fast application of the results are important. Read more on konwihr.de.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

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/>

Katrin Nusser, Gerasimos Chourdakis

the city has the “New München Köbe Taishikan”, a brewery and restaurant specializing in Munich-style Weißbier. Next, “Stadt Heuriger”, an Austrian restaurant with authentic dishes run by Japanese owners who speak German. Furthermore, at the top of the Kobe Nunobiki Herb Gardens, is a rest house supposedly designed after the Warburg where one can buy a selection of sausages and Allgäuer beer. This ‘little Germany’ is connected to the rest of the city via a modern Austrian Doppelmayr lift. In conclusion, I can only emphasize how interesting and beneficial a research stay can be and that Kobe is an excellent choice. I would like to thank the CPS group, especially Prof. Makino and his secretaries for making this such a pleasant experience.



Figure 3: left: Grill set of local delicacies. right: Sushi

der Einrichtung vorsehen, was der ausgeschriebene Name der School definitiv sprengt – wir müssten also den Namen ändern. Das ist doch „Form follows function“ at its best! Aber ändern können—dürfen—wollen wir natürlich nicht. Also muss eine Abkürzung her, z.B. „TUM School of CIT“. Wenn eine Abkürzung auf einem Dienstsiegel erscheinen soll, muss aber anscheinend unser Ministerium zustimmen. Nun gut, beantragen wir dies, man gönnst sich ja sonst nichts. Und all das, weil wir einen Stempel wollen ... pardon, ein Siegel.

Doch damit genug für heute. Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen einen schönen Herbst – mit sich hoffentlich nicht weiter verschärfenden Krisen. Zunächst aber natürlich wünschen wir Ihnen viel Vergnügen mit der neusten Ausgabe Ihres Quarts!

Hans-Joachim Bungartz.

Fabio Gratl

Iterationsschleife

N=44

24. September 2022

Mann und Frau

Zu Mann und Frau ist viel gesagt, und jede und jeder hat dazu eine Meinung – kein Wunder, sind doch alle davon betroffen. Entweder als Mann oder als Frau oder als Person, die sich mit dieser klaren Einteilung der Menschheit in zwei Geschlechter nicht abfinden mag, oder auch kann. Die Biologie steht verwundert vor der Debatte^a und muss doch lernen, dass der Mensch nicht nur Biologie ist, sondern darüber hinaus geht. Wie Menschen aber darüber hinaus gehen ist nicht mehr biologisch determiniert, sondern – erfreulicherweise – ein Teil jener Freiheit des Geistes auf den die Menschheit doch stolz zu sein scheint^b. Wiewohl der Philosoph Oswald Wiener^c die biologische Determiniertheit unseres Denkens als Ergebnis unserer Hirnstruktur diskutiert hat^d.

Im Jahr 1949 greift Simone de Beauvoir^e diese grundlegende Idee von der Freiheit des Geistes auf und kehrt sie in Bezug auf die Geschlechterfrage um. Der Geist befriest uns nicht mehr von der Biologie, sondern verstärkt die Biologie. In ihrem Buch über „Das andere Geschlecht“^f behauptet sie kühn „On ne naît pas femme, on le devient“^g. Sie gilt damit als Vorreiterin der Emanzipation^h in Europa.

^aMarie-Luise Vollbrecht, „Geschlecht ist nicht (Ge)schlecht: Sex, Gender und warum es in der Biologie zwei Geschlechter gibt“, Humboldt Universität zu Berlin (HU), 14. Juli 2022

^bSapere aude (Verständig, zu sein sollst Du wagen) macht deutlich, dass der Schritt von der Biologie zum Geist Mut erfordert. Interessant auch, dass sapere auch „als schmecken“ also als eine sensorische Wahrnehmung genutzt und übersetzt werden kann. Verstecken als eine Erfahrung oder ein geschmackliches „Begreifen“.

^cOswald Wiener, österreichischer Künstler und Philosoph, 1935 – 2021

^dPersönliche Kommunikation mit Oswald Wiener

^eSimone de Beauvoir, französische Philosophin, 1908 - 1986

^fSimone de Beauvoir, „Das andere Geschlecht“, 1951 bzw. „Le Deuxième Sexe“, 1949

^gMan wird nicht als Frau geboren, man wird es

^hEmanzipation: aus dem Lateinischen übernommener Begriff (emancipatio: Entlassung des Sohnes aus der väterlichen Gewalt) der heute durch Begriffe wie „Gleichstellung“ ersetzt wurde und gerade dabei ist, im Begriff der „Diversity“ zu verschwinden.



Figure 2: Massive floats at Kyoto's Gion Festival.

how to live in Japan. The residence was located near the research facility on Port Island, one of many artificial islands in Osaka bay. Most importantly, every room featured a well-working AC unit to survive the punishingly warm and insanely humid Japanese summer. “Fun fact”: due to the heat wave in Europe, temperatures in Kobe were actually cooler (or realistically speaking slightly less hot) than in Munich. Finding the office, which was located next to the supercomputer was also pleasantly easy as the machine itself is announced on the Port Liner (fig 1). An autonomous elevated railway connecting the island to the mainland.



Figure 1: left: Kobe city slogan. right: Fugaku announced in Port Liner.

All in all, working conditions were great, and despite lots of project management work for the chair back in Germany, good progress was made on the scientific front. The cooperation with CPS yielded interesting insights into how to work with the ARM-based A64FX processor, optimize code for it and profile its performance. Conclusion: Fugaku is difficult!

Also, cultural aspects were not cut short. The stay fell into a period of many Japanese holidays and festivities, such as Marine Day and Mountain Day, as well as Kyoto’s Gozan no Okuribi and Gion festivals (fig 2). No report about a trip to Japan can ever be considered complete without high praise for Japanese food such as Ramen (fig 3), Gyoza, Tempura, Sushi (fig 3), and of course the well known Kobe Beef (fig 3)! Interestingly, when it comes to food, Kobe is surprisingly international. To give a few examples,

Der fragende Blick auf biologisch und sozial festgelegte Rollen von Mann und Frau ist aber kein Alleinstellungsmerkmal des Westens. 1911 schreibt Yosano Akiko^a: „Ich erkenne fließende Unterschied im Rahmen der Gleichheit natürlich an. Die Menschen haben sich nun einmal in ihren Fähigkeiten voneinander ab, bedingt durch verschiedene artige Erbanlagen, Milieus und Erziehungsformen. Aber das sind eben Unterschiede auf der Grundlage von Erbanlage, Milieu und Erziehung, nicht auf der Grundlage des Geschlechts. Der Unterschied zwischen Mann und Frau hat seinen Ursprung in den jeweiligen physiologischen Gegebenheiten der Eltern^b. Die Leser:innen sind überrascht. Japan mit seiner konfuzianischen Tradition^c gilt nicht als Hort von Gleichstellung und „Emanzipation“^d. Die Jahre der Jahrhundertwende um 1900 waren jedoch geprägt vom Versuch, westliches Denken mit östlichem Denken zu verbinden und Yosano Akiko fand in ihren Essays eine Sprache dafür. In den späten 20er-Jahren des 20. Jahrhunderts war dieses Fenster der Liberalisierung jedoch dabei sich zu schließen und in den 30er-Jahren rückt Tanizaki Jun’ichiro^e die männliche Welt wieder „gerade“.

Um die in Jahrhunderalten Traditionen befangenen japanischen Frauen auf dieselbe Stufe wie ihre westlichen Geschlechtersgenossinnen emporzuheben, braucht es sowohl in geistiger wie in körperlicher Hinsicht eine Einübung und Konditionierung über mehrere Generationen.^e

Tanizaki Jun’ichiro versteckt seine Einstellung zu Frauen und japanischen Frauen im Speziellen nicht. Zunächst definiert er sie als niedriger stehend (denn sie müssten zu den westlichen Frauen erst emporgehoben werden). Dann spricht er ihnen sowohl die notwendigen geistigen Fähigkeiten als auch die körperliche Eignung zur westlichen Frau – sein Ideal – ab. Selten wird die abfällige Betrachtung des weiblichen Körpers so offen formuliert.

^aYosano Akiko, japanische Schriftstellerin. 1878 - 1942

^bYosano Akiko, „Männer und Frauen“, Manesse, 2022, Seite 49
^cKonfuzius (mutmaßlich 551 – 479 v. Chr.) fordert zur Stabilität und Harmonie der Gesellschaft vor allem hierarchische Unterordnung – des Untertans unter den Herrscher, des Sohnes unter den Vater, der Frau unter den Mann, des jüngere unter den älteren Bruder, des Freundes unter den Freunden

^dTanizaki Jun’ichiro (1886 – 1965), japanischer Schriftsteller, Stand 1964 auf der short list für den Literaturnobelpreis, der dann aber an Jean-Paul Sartre vergeben wurde – den Lebensgefährten von Simone de Beauvoir. Sartre lehnte die Annahme des Preises ab. Ironie der Geschichte: mit Sartre wurde die Annahme der Frau auszeichnet, deren Konzept des sozialen Geschlechts Tanizaki Jun’ichiro ablehnte. Simone de Beauvoir wurde dieser Preis übrigens nie angeboten.

^eTanizaki Jun’ichiro, „Liebe und Sinnlichkeit“, Manesse, 2011, Seite 33

Tanizaki Jun'ichiro kann das. Als er diesen Essay verfasst, hat sich Japan längst auf den Pfad eines autoritären Staates begeben und die konfuzianische Unterordnung in allen Bereichen wieder durchgesetzt.

Auch Yosano Akiko schließt sich dem allgemeinen Rechtsruck an. Während des japanisch-russischen Kriegs^a hatte sie noch ein Antikriegsgedicht^b verfasst und ihren Bruder gebeten, sein Leben nicht in diesem Krieg zu geben. 1932 fasst sie ihre Abwendung vom Pazifismus und Demokratie in ein Gedicht^c anlässlich der kriegerischen Auseinandersetzung in Shanghai^d und beendet damit ihren Weg, der sie aus einer traditionellen japanischen Familie zum Leben einer pazifistischen emanzipierten Frau und wieder zurück in den Schoß einer autoritären Gesellschaft geführt hat. Das Ende ihrer Träume erlebt Yosano Akiko 1945 nicht mehr mit auch wenn sie im April 1942 die Bombardierung japanischer Städte in der Operation Doolittle^e erlebt haben muss. Sie stirbt im Mai 1942 kurz nach dem japanischen Überfall auf Pearl Harbour und dem Beginn des japanisch-amerikanischen Kriegs auf die noch literarisch unterstützt hat. Den Wiederaufbau des Landes nahmen ab 1945 ihre Kinder^f in Angriff^g.

M. Resch

^aJapanisch-russischer Krieg 1904 – 1905 endete mit einem Sieg Japans über Russland. Diese Niederlage löste in Russland die Revolution von 1905 aus und machte Japan zur führenden Macht in Ostasien.

^bYosano Akiko, Kimi shinitanō koto nakare „Du sollst nicht sterben“ 1905

^cYosano Akiko, „rosenwangiger Tod“, 1932 (keine englische oder deutsche Übersetzung auffindbar)

^dJapan verfolgte in Shanghai die Strategie eines nicht erklärt Krieges (heute wohl Spezialoperation genannt) indem es japanische Militäreinheiten und militante Gruppen (heute wohl Söldner genannt) in einem bewaffneten Konflikt in Shanghai gegen Chinesen einsetzte.

^eOperation Doolittle fand am 18. April 1942 statt und sollte den Japanern die Verletzlichkeit ihrer Städte zeigen und die Moral der amerikanischen Truppen nach dem Schock der Bombardierung von Pearl Harbour heben. In der Operation wurden Tokio, Yokohama, Yokosuka, Nagoya und Kobe angegriffen wobei rund 50 Menschen starben, rund 400 verletzt wurden und geringer Schaden an Industrieanlagen entstand. Die Operation wird im amerikanischen Spielfilm „Pearl Harbor“ (2001) filmisch verarbeitet.

^fYosano Akiko hatte 13 Kinder von denen 11 das Erwachsenenalter erreichten.
^gJapan ist heute eine moderne Demokratie nach westlichem Vorbild. Frauen in Japan beklagen nach wie vor die Schlechterstellung und bei besuchten japanischer Firmen und Einrichtungen wird deutlich, dass Frauen weiterhin eine stark untergeordnete Rolle spielen.



SCCS und R-CCS – PART TWO

There were two initial ideas for an HPC and particles-related research stay in Kobe, Japan. On the one hand, SCCS Alumni Steffen Seckler visited the group of Prof. Junichiro Makino at the Riken Center for Computational Science (see Quartl 87⁴) in 2018. On the other hand, the supercomputer Fugaku is located there, which was, at the time of the planning of the research stay, the number one system in the Top500⁵ list.

After endless uncertainty, thanks to corona, Japan opened up its borders, at least to students and business travelers. So as soon as it was possible, the intense interaction with the very intense Japanese bureaucracy started. Thankfully, the secretaries of CPS, the Center for Planetary Science⁶ which is the new group of Prof. Makino at Kobe University, were very helpful with that so that by mid of June a “cultural activities” visa was issued and the two-month research stay could start.

Unfortunately, Putin’s war on Ukraine affected this endeavor too. As Russian airspace is closed to European and Japanese airlines, a longer southern route over Turkey, Kazakhstan, Mongolia, and China adds about 2000 km or 20% to the flight distance.

Finally arriving in Kobe, the lodging was very nice, with a big room, long bed, a small kitchen, and all of that for a decent price. Since it was provided by the university of Kobe, there were also lots of international students from all around the world, so together we were all trying to wrap our heads around

⁴https://www5.in.tum.de/quartl/2018/quartl187_n.pdf

⁵<https://www.tcp500.org/system/179807/>

⁶<https://www.cps-jp.org/index.htm.en>

This made for a heavy sprint, but we ultimately made it into the already heavily populated train. As for the others, they calmly went into the beer garden next to the station to enjoy a nice cold drink before finally departing for Munich as well, putting a close to the nice but eventful first post-corona COME-CSE Summer Trip – as is tradition.

Hayden Liu Weng

Combining deep learning with Full-Waveform detection in non-destructive testing

This contribution provides an overview over recent attempts to combine structural health monitoring and deep learning in the broader context of inverse modeling. The discussed setting forms the starting point for the project DeepMonitor¹ funded by the Georg-Nemetscheck Institut.

1 Structural Health Monitoring

Structural health monitoring is a crucial field in civil engineering. It includes the detection of defects in built structures. One demand is the assessment of prolonged deterioration of structures over an extended period of time as it is the case in monument protection (“Denkmalschutz”) depicted on the left side of fig 1. Besides, there is also a need for quality insurance directly



Figure 1: Two typical examples of structural health monitoring applications: left: non-destructive evaluation of the weathering state on a marble obelisk [14], right: typical damage of a bridge girder due to the impact of a truck [27].

after production. An especially critical topic is the determination of damage caused by single events such as natural disasters as well as the assessment of man-made incidents like a collision of a vehicle with a bridge (see right side of fig 1). The detection and assessment of defects in these fields is a challenge, because it must be un-intrusive and work with large structures of

¹<https://www.mdsi.tum.de/gni/projekte/deepmonitor/>

practically arbitrary shape in an automatable fashion. Additionally, the analysis must be performed rather quickly – especially for important infrastructure such as dams or bridges.

To meet these high demands, data-driven approaches known from deep learning gain attention [25]. For example, advances in computer vision have recently augmented the field of data-driven structural health monitoring. Automated visual inspection is used not only at the global scale, but also for local damage detection [4, 6]. However, the severity of a crack, for example, may not be assessed by visual inspection alone. The methods can't decide how far a crack has propagated into the interior of the structure. Worse, critical defects can be completely invisible from outside the structure. In such cases Ultrasonic Health Monitoring provides a remedy, see [17] for a review. Ultrasonic Health Monitoring is a superordinate concept and includes Full Wave Form Inversion [5], Ground Penetrating Radar, Ultrasonic Pulse Velocity [17], and Travel Time Tomography [15]. The general idea of all of these methods is to emit waves and to judge the integrity of the structure by the travel time and reflections recorded by sensors. The drawback of many of these methods are usually the limited resolution and the complex interpretation of the results. Utilizing just travel time and reflectivity data limits the information of the full wave propagation characteristics. This leads to a lack of ability to detect some defects like debondings or delamination all of which are important and frequently encountered issues during concrete inspections for quality control and assurance. On the other hand, Waveform Inversion has very recently been further developed to be a viable tool in structural health monitoring [24, 8]. Information about the full wave propagation characteristics enable a much more detailed picture of the internal state of a structure. This comes with the cost of solving an inverse problem see e.g. [3] which is usually ill posed. Yet, the inclusion of Waveform inversion is very beneficial. Figure 2 showcases an example where a commercial shear-wave tomography device was augmented by Waveform Inversion to detect internal anomalies and defects with unprecedented accuracy.

Similar approaches are also being used in CT/MRI scans in the medical domain [2] and to retrieve subsurface properties from seismic activity in geophysics [7], where actuation and sensing is on a much larger spatial

To round off the trip and let adrenaline levels drop, we leisurely paced around the west bank of the lake. Perhaps relaxing a bit too much as we completely missed the dock where we would board the boat back to the train station, ending up deeper into Fischhausen. While we checked for further information, double-checking whether the boat was even running or if we'd have to walk the other half of the circuit back to the station, some participants took a short break to contemplate the lake and dip their feet in the water.
Before anyone had a chance to relax too much, we realized that the next boat would be leaving not much later, and we needed to make rush to catch it – or wait for the next boat one hour later.



Figure 2: left: Taking a short break at the shore. right: Boat ride at the Schliersee.

Barely getting there without making the boat wait (too much), we managed to enjoy a very peaceful ride back. However, we were still not scot-free: some people were a bit hard pressed to catch the very next train – me included. Thus, the race was on as soon as we hit land... and the boat had come to a complete stop, as per the captain's instructions.

Instead of light rain as the weather forecast predicted, we enjoyed a rather sunny hike – a bit **too** sunny, some complained. As we reached our first destination, we took a moment to stop and enjoy the scenic view of lake Schliersee and the Bavarian alps. While some participants were already satisfied with the hike and decided to continue enjoying the panorama along with some coffee or card games, a significant portion of the group was up for a bit more adventure. Thus, the adventurous ones made their way to the woody peak of the Rhönberg after another hour of hiking, accompanied with philosophical discussions on the future of the COME and CSE programs, as well as the pervasive nature of everything quantu... sorry, “q-word-which-must-not-be-named” related. After several attempts at taking a group picture which fit everyone, we started the descent to reunite both groups and have lunch, spoiling ourselves with some typical Bavarian cuisine.

After giving ourselves a bit of time to digest, we had to make our way down. However, rather than hiking back the way we came, there were more interesting ways to descend: we offered the participants a choice between a gentle ride on the cable car with an extensive birds-eye view, or the more adventurous Sommerrodelbahn - a sledge track with almost 1 km length and 63 turns.

Without much indecision, all participants opted for the latter, although some did get a bit of cold feet when faced with the wall of text detailing the risks, rules, and regulations for the ride. This very quickly dissipated as, without any injury or too much of a traffic jam, we all made it safely down the mountain.



Figure 2: general idea of using waves for detection of defects: left: emission and recording of sound waves by an array of sensors and receivers, middle: areal view of defected structure: right: reconstruction [3].

scale. Still, current algorithms for such types of inverse problems need to be improved in terms of speed as well as the resources they consume to be more broadly applicable in structural health monitoring. A large number of methods currently being developed in the field of deep learning provide this opportunity.

2 Deep learning for inverse problems

At the moment, three general categories of approaches of deep learning are dominant to address inverse problems in engineering applications. These approaches differ mainly in their use of labeled or unlabeled datasets for training and how they utilize the underlying PDEs. Information about the structure is collected either by synthetic or real observation data \mathbf{u} from simulation or experiments leading to a big amount of labeled or unlabeled datasets. Together with wave actuator data \mathbf{f} , a differential operator \mathbf{L} describes the wave equation $\mathbf{L}(\mathbf{m}, \mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$, where \mathbf{u} is the wave field and \mathbf{m} is the velocity model, i.e. the local wave velocities.

Category 1: data-driven supervised learning The first noteworthy category of supervised deep learning approaches only uses labeled datasets to train a neural network [26, 18, 1, 9, 22]. The underlying physics is not taken into account. A purely data driven approach is considered to represent the



Figure 1: Going down the Sommerrodelbahn.

inverse relation between labeled data \bar{u} and \hat{m} . The difference between the labeled model \hat{m} and predicted model $\hat{\hat{m}}$ is minimized in the training of the neural network.

$$\bar{u} \rightarrow NN^\theta \rightarrow \hat{m} \rightarrow C = (\bar{m} - \hat{m})^2$$

```

graph TD
    u_bar[bar{u}] --> NN["NNθ"]
    NN --> m_hat[" $\hat{m}$ "]
    m_hat --> C["C =  $(\bar{m} - \hat{m})^2$ "]
    C --> update_theta["Update  $\Theta$ "]
    update_theta --> NN
  
```

Figure 3: example figure

Category 2: iterative forward unsupervised learning Iterative forward learning is inspired by approaches such as the full waveform inversion [23]. Here, the neural network still predicts a model \hat{m} after feeding it with an observed set of wave fields \bar{u} . Based on this predicted model a conventional forward simulation calculates the wave field \hat{u} (e.g. finite differences, finite elements). The residual between the indirectly predicted wave field \hat{u} and observed wave field \bar{u} forms the objective function to train the neural network.

$$\bar{u} \rightarrow NN^\theta \rightarrow \hat{m} \rightarrow \hat{u} \rightarrow C = (\bar{u} - \hat{u})^2$$

```

graph TD
    u_bar[bar{u}] --> NN["NNθ"]
    NN --> m_hat[" $\hat{m}$ "]
    m_hat --> forward[" $\hat{u}$ "]
    forward --> C["C =  $(\bar{u} - \hat{u})^2$ "]
    C --> update_theta["Update  $\Theta$ "]
    update_theta --> NN
  
```

Figure 4: example figure

Category 3: physics-informed unsupervised learning In this last category, the forward problem is solved by a physics informed neural network [12, 11, 21]. From the partially observed wave fields \bar{u} (e.g. only at the boundary or selected points) the network predicts the full wave field \hat{u} . On the one side this predicted wavefield must satisfy the physics described by



The COME-CSE
Summer Trip
is Back!

After a long pause due to the corona pandemic, restrictions finally loosened enough to make it possible to hold the customary joint summer trip of the “Computational Mechanics” (COME) and “Computational Science and Engineering” (CSE) master programs this year. This was not an easy task, as the G7 summit at Schloss Elmau, taking place in the same weekend, conflicted with some of the more adventurous agendas considered; the whole Garmisch-Partenkirchen had restricted access from the public. Similarly, the 9-Euro ticket was a double-edged sword: while free transportation increased flexibility, it also meant large groups of travelers and packed trains. Not ones to back down from a nice Ausflug, particularly after extensive doodles to nail down the most suitable day, we headed to Lake Schliersee on Saturday, June 25th.

As expected, the day kicked-off with a rocky start: multiple platform changes, unclear signaling, and a few hard-to-catch announcements exclusively in German took some students off guard - **Senk jù vor trawelling mit Deutsche Bahn!** We ended up splitting across three regional trains before converging at the Schliersee station at 10:00 am. After some announcements, a review of the plan for the day, and a last chance to withdraw cash or head to the toilet, we made our way up to our first checkpoint: the Schliersbergalm.



Figure 1: Rafael Ravedutti with his PPAM 2022 Best Paper Award.

PhD Student Rafael Ravedutti Lucio Machado is a liaison scientist at Erlangen National High Performance Computing Center (NHR@FAU) and works on performance engineering for classical MD applications. A preprint of the paper is available at arXiv:2207.13094; the final version will appear in the PPAM conference proceedings.

Jan Eitzinger

the differential operator including the velocity model \hat{m} . On the other side the residual between observed data and predicted data has to be minimized. The parameters of the neural network and the physical model are updated simultaneously.



Figure 5: example figure

3 Outlook

The project DeepMonitor sets out to investigate all of the approaches named above and to develop an inversion framework suitable for structural health monitoring. To this end, we intend to evaluate inference-based methods [19], neural-network based approaches (PINNs [20], DeepONet and its variants [13]), and Fourier Neural Operators [10]. We will pick and further develop the best variant and augment it with suitable regularizations similar to those presented in [16]. Such regularizations will help to perform inversions also on slightly corrupted experimental data. All of us are looking forward to carrying out this project in the context of the GNI as well as with the Help of KONWIHR and students of the BGCE.

Stefan Kollmannsberger, Felix Dietrich & Hans-Joachim Bungartz

<https://fd-research.com/harmonic-ai>

References

1. Mauricio Araya-Polo, Joseph Jennings, Amir Adler, and Taylor Dahlke. Deep-learning tomography. *The Leading Edge*, 37(1):58–66, January 2018.
2. Simon Arridge, Peter Maass, Ozan Öktem, and Carola-Bibiane Schönlieb. Solving inverse problems using data-driven models. *Acta Numerica*, 28:1–174, May 2019.
3. Ruoya Chen, Khient-T Tran, Hung Manh La, Taylor Rawlinson, and Kien Dinh. Detection of delamination and rebar debonding in concrete structures with ultrasonic SH-waveform tomography. *Automation in Construction*, 133:104004, January 2022.
4. Chuan-Zhi Dong and F Necati Cuhbas. A review of computer vision-based structural health monitoring at local and global levels. *Structural Health Monitoring*, 20(2):692–743, March 2021.
5. Andreas Eichner. Full Seismic Waveform Modelling and Inversion. Advances in Geophysical and Environmental Mechanics and Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
6. Keunyoung Jang, Nanyu Kim, and Yun-Kyu An. Deep learning-based autonomous concrete crack evaluation through hybrid imaging scanning. *Structural Health Monitoring*, 18(5,6):1722–1737, November 2019.
7. Yui Kim and Nori Nakata. Geophysical inversion versus machine learning in inverse problems. *The Leading Edge*, 37(12):894–901, December 2018.
8. T Lahmer, M Schickert, and I Reichert. Possibilities to Enhance Tomography Imaging of Concrete Structures by the Full Waveform Inversion. In *Assessment and Rehabilitation of Civil Structures*, page 6, 2019.
9. Shucai Li, Bin Liu, Xuyiao Ren, Yangkang Chen, Senlin Yang, Yunhai Wang, and Peipei Hang. Deep-Learning Inversion of Seismic Data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 58(3):155–2149, March 2020.
10. Zong-Yi Li, Nikola B. Kovachki, Kamyar Azizzadehsheli, Burigede Liu, Kaushik Bhattacharya, Andrew Stuart, and Anima Anandkumar. Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *ArXiv*, abs/2010.08895, 2021.
11. Zichao Long, Yiping Lu, and Bin Dong. PDE-Net 2.0: Learning PDEs from data with a numeric-symbolic hybrid deep network. *Journal of Computational Physics*, 399:108925, December 2019.
12. Zichao Long, Yiping Lu, Xianzhong Ma, and Bin Dong. PDE-Net: Learning PDEs from Data. *arXiv*: 1710.09668 [cs, math. stat], January 2018.
13. Lu Lu, Ruiqian Jin, Guofei Pang, Zheqiying Zhang, and George Em Karniadakis. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3(3):18–29, March 2021.
14. Johanna Menninga, Siegfried Siegesmund, Daryl Tewellon, and Markus Taupmann. Ultrasonic tomography: Non-destructive evaluation of the weathering state on a marble obelisk, considering the effects of structural properties. *Environmental Earth Sciences*, 77(17):601, September 2018.
15. Dorothee Moser, Michael H. Poelchau, Florian Stark, and Christian Grossé. Application of nondestructive testing methods to study the damage zone underneath impact craters of MEMIN laboratory experiments: Non-destructive testing of impact craters. *Meteoritics & Planetary Science*, 48(1):87–98, January 2013.
16. Subhadip Mukherjee, Marcello Cioni, Ozan Öktem, and Carola-Bibiane Schönlieb. End-to-end reconstruction meets data-driven regularization for inverse problems. In *NeurIPS*, 2021.
17. Nadom Khalifa Muhib, Shahriar Bin Baharom, Ahmed El-Shafei, and Mohd Zaini Nuawi. Ultrasonic health monitoring in structural engineering: Buildings and bridges: Ultrasonic health monitoring in structural engineering. *Structural Control and Health Monitoring*, 23(3):409–422, March 2016
18. A Oishi, K Yamada, S Yoshimura, G Yagawa, S Nagai, and Y Matsuda. Neural Network-Based Inverse Analysis for Defect Identification with Laser Ultrasonics. *Research in Nondestructive Evaluation*, 13(2): 79–96, June 2001.

Best Paper Award for MD-Bench at PPAM 2022



From September 11–14, 2022, the “14th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics” (PPAM) took place in Gdańsk, Poland. PPAM² is a biannual meeting (with a slight hiccup in 2021, when it was canceled and shifted to 2022 due to the pandemic), where a surprising number of parallel computing and HPC bigshots gather for a dense program of keynotes, workshops, and, of course, an extensive main paper track.

The research paper “MD-Bench: A generic proxy-app toolbox for state-of-the-art molecular dynamics algorithms” by Rafael Ravedutti Lucio Machado, Jan Eitzinger, Harald Köstler, and Gerhard Wellein just received the best paper award at PPAM 2022. In this paper, Rafael presented MD-Bench³, a proxy-app for short-range molecular dynamics (MD) algorithms. In contrast to other proxy-apps in this domain, MD-Bench includes algorithms from multiple MD community codes and focuses on a simple and transparent implementation, which makes it well suited for research, teaching, and of course for benchmarking.

The paper described features and benefits of MD-Bench and illustrates its use cases on three examples: an assembly analysis showing how the compiler-generated code can be improved, an investigation of memory latency contributions in a classical material science MD test case, and a systematic compiler code quality study based on hardware performance counter measurements.

²<https://ppam.nlu.edu.pl/>
³<https://github.com/RRZE-HPC/MD-Bench>

Ansprechpartner

Prof. Dr. habil. Jens Grubert

Forschungsprofessor für Mensch-Maschine-Interaktion im Internet der Dinge
Hochschule Coburg

Jens.Grubert@hs-coburg.de

Prof. Dr. Gerhard Wellein

Professur für Höchstleistungsrechnen

Direktor des Zentrums für Nationales Hochleistungstrecken Erlangen

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Gerhard.Wellein@fau.de

Jens Grubert und Gerhard Wellein

19. Elizabeth Qian, Ionut-Gabriel Farca, and Karen Willcox. Reduced operator inference for nonlinear partial differential equations, 2021.
20. M. Raissi, P. Perdikaris, and G.E. Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378:686–707, February 2019.
21. Maziar Raissi. Deep Hidden Physics Models: Deep Learning of Nonlinear Partial Differential Equations. *arXiv:1801.06637 [cs, math, stat]*, January 2018.
22. Jing Rao, Fangshu Yang, Huadong Mo, Stefan Kollmannsberger, and Ernst Rank. Quantitative reconstruction of defects in multi-layered bonded composites using fully convolutional network-based ultrasonic inversion. *arXiv:2109.07284 [cond-mat, September 2021]*.
23. Robert Seidl. Full Waveform Inversion for Nondestructive Ultrasonic Testing. PhD thesis, Technische Universität München, 2018.
24. Robert Seidl and Ernst Rank. Iterative time reversal based flaw identification. *Computers & Mathematics with Applications*, 72(4):879–892, August 2016.
25. Diego A. Thibautura Burgess, Ricardo C. Gomez-Vargas, Cesar Pedreira, David Agés, and Francesc Pozo. Damage Identification in Structural Health Monitoring: A Brief Review from its Implementation to the Use of Data Driven Applications. *Sensors*, 20(3):733, January 2020.
26. Fangshu Yang and Jianwei Ma. Deep-Learning inversion: A next-generation seismic velocity model building method. *Geophysics*, 84:4, 2019.
27. Nur Yazdan and María A.D.L.F. Montero. Structural performance of impact damaged and repainted concrete bridge girder using GFRP rebars. *Innovative Infrastructure Solutions*, 1(0):34, December 2016.

High Performance Computing für die KI-Ausbildung an Hochschulen für angewandte Wissenschaften



Künstliche Intelligenz (KI) ist ein technologischer Schlüssel zur Welt von morgen. Die Ausbildung von Studierenden an deutschen Universitäten und Hochschulen in diesem Bereich trägt einen substanziellen Teil zur Stärkung des Wissenschafts- und Wirtschaftsstandorts Deutschland bei. Hochschulen für angewandte Wissenschaften spielen dabei insbesondere für einen praxisnahen und anwendungsbezogenen Wissens- und Technologietransfer in die Wirtschaft eine wichtige Rolle. Für eine KI-Ausbildung am Puls der Zeit werden jedoch leistungsfähige KI-Hard- und Softwaresysteme benötigt.

Im Rahmen des in der BMBF-Förderrichtlinie KI-Nachwuchs@FH geförderten Projekts „**High Performance Computing for Applied Artificial Intelligence**“ (HPC4AAI) hat die Hochschule für angewandte Wissenschaften Coburg die Möglichkeit eine moderne HPC-Umgebung, bestehend aus sieben GPGPU-Knoten mit jeweils acht NVIDIA A100 80 GB GPUs sowie komplementierenden CPU- und NVMe-Knoten, zu nutzen. Diese werden am Zentrum für Nationales Hochleistungsrechnen Erlangen (NHR@FAU) gemeinsam mit den NHR-Systemen sowie den Tier-3-Systemen der FAU Erlangen-Nürnberg betrieben. Fünf der GPGPU-Knoten sind bereits Teil des Alex-Systems, das im Juni 2022 in der TOP500-Liste Platz 184 erzielen konnte. NHR@FAU bringt in die Kooperation mit der HAW Coburg die Expertise zum effizienten Betrieb von komplexen HPC-Umgebungen ein und stellt den sicheren Zugang zu diesen bereit. An der HAW Coburg werden im Rahmen des HPC4AAI Projekts Schulungskonzepte implementiert, um die Nutzung der HPC-Ressourcen niedrigschwellig für Nachwuchsforschende – von Bachelorstudierenden bis zu Doktorandinnen und Doktoranden – zu ermöglichen.

High Performance Computing für die KI-Ausbildung an Hochschulen für angewandte Wissenschaften

Von den bereitgestellten Rechenressourcen profitieren vielfältige Ausbildungs- und Forschungsaktivitäten an der HAW Coburg in den Bereichen Autonomes Fahren, Bioanalytik, -chemie und -informatik, Sensorik und Aktorik, Erklärbare und verantwortungsvolle Künstliche Intelligenz, Erweiterte und Virtuelle Realität, Data Analytics, Robotik, Security oder Software Engineering. Weiterhin ist das Rechencluster eine zentrale Komponente des sich im Aufbau befindlichen Center for Responsible Artificial Intelligence (CRAI) der Hochschule Coburg. Mittelfristig sollen durch Zugriff auf die Rechnerressourcen und durch die Schulungsangebote auch die Mitglieder des KONWTHR sowie weitere bayerische Hochschulen profitieren können. Die Kooperation zwischen NHR@FAU und der HAW Coburg wird vom Bayerischen Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst gefördert.



Abbildung 1: Parallel-Cluster „Fritz“ und GPU-Cluster „Alex“, NHR@FAU