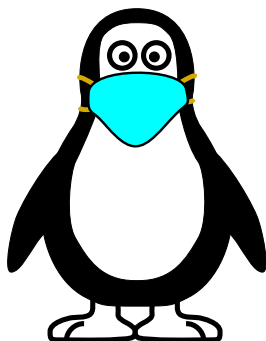


Inhalt



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

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 Engineering* (BGCE)

Editorial

Heute steht zur Abwechslung mal wieder ein Beitrag aus dem Bereich Medizin und Gesundheit auf dem Programm, allerdings ganz ohne Corona-Bezug.

Dann und wann holt einen der Prozess des Älterwerdens trotz heftigen eigenen Ignorierens einfach ein. Und so ereilte mich Anfang Mai 2019 eines Morgens beim Joggen plötzlich ein heftiger Schmerz – am unteren Rücken, am Gesäß und im rechten Oberschenkel. Und obwohl ich mich eigentlich der „Stell-dich-nicht-so-an“-Fraktion zurechne, musste ich das Laufen tatsächlich abbrechen – es ging einfach nicht. Nachdem im „Normalzustand“ aber nichts mehr zu spüren war, versuchte ich es an den Folgetagen einfach wieder – aber es war immer dasselbe. Also tat ich das, was ich nur höchst ungern tue – ich wandte mich an einen Arzt, in diesem Fall einen niedergelassenen Orthopäden und Sportorthopäden, den ich aus meinem Streichquartett kenne.

Zuhören, anschauen, anfassen, Röntgen – nach wenigen Minuten stand die Diagnose: nichts wirklich Problematisches am Gestell erkennbar, aber wohl eine Blockade des Iliosakralgelenks. Normalerweise beugt Bewegung dieser vor und tut eher gut, aber manchmal, wenn die Blockade schon erfolgt sei, könne dann starke Bewegung eben gerade starke Schmerzen auslösen. Damit war die handwerkliche Seite des Orthopädendaseins gefragt: er streckte, stauchte, ruckte, klopfte, verdrehte mich. Dann irgendwann ein „Jetzt hat’s geschnackelt!“, jetzt sei alles wieder gut, und ich solle weiter fleißig laufen. Und so war’s dann im Wesentlichen (bisher) auch.

So weit zur Vorgeschichte. Anfang Juni 2020 dann das Déjà-vu, wieder eines Morgens und wieder beim Joggen. Nicht so wirklich überraschend, da drei der oft genannten Gründe für so etwas – Bewegungsarmut und zu viel Sitzen, Übergewicht und Stress – in meinem Leben jetzt nicht so wirklich absent sind ... Insbesondere nicht in diesen beknackten Corona-Zeiten, wo man zwischen zwei Meetings nicht den Ort, das Gebäude, das Stockwerk oder wenigstens den Flur wechseln muss, sondern einfach von Zoom über DFNconf zu Webex umschalten muss – der diesbezügliche „Höhepunkt“

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 malträtiertens 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

oder Kernspin machten keinen Sinn (solche Aussagen sind insbesondere gegenüber Privatpatienten ja bekanntlich eher rar ...). Ich solle einfach wieder heimgehen, vielleicht nur einen Kilometer joggen (was absurd war – ich hatte ihm gesagt, dass der Schmerz nach maximal einem halben Kilometer kommt ...), und bei erneutem Auftreten dann sofort kommen (was ebenfalls absurd ist angesichts der aktuellen Corona-Regelungen mit verpflichtender Voranmeldung ...). Gerne verschreibe er mir auch ein Schmerzmittel. Mein Gedanke daraufhin: nur raus hier – sonst kommen in mir zwar keine Suizid-, aber dafür Mordgelüste auf!

Akt 3 – der Erfolg. Obwohl er immer wieder betonte, dass es keine Blockade sein könne und er diese daher auch nicht lösen könne, hat er die nicht bestehende Blockade wohl doch irgendwie gelöst. Ich gleich am selben Abend zum Laufen – und es ging wieder. Der Zustand hält bislang auch an ... toi toi toi. Also aus einer utilitaristischen Perspektive alles gut.

Akt 4 – der Befund. Positiv ist zu vermerken, dass ich diesen bereits nach vier Tagen hatte. Damit endet aber auch das Positive. Der Befund beginnt mit dem Satz „Wir berichten über die Patientin, Frau Hans-Joachim Bungartz“. Als Diagnose: „Verdacht auf Überlastungsreaktion der Muskulatur“ – ähm?? Dann steht da noch, dass der Schmerz von ihm nicht „profoziert“ (sic!) werden konnte. Schließlich eine lange Liste von Dingen, die unauffällig seien, was ja durchaus beruhigend wäre, wenn das Vertrauen an dieser Stelle noch bestehen würde. Aber an ein solches Vertrauen war leider nicht mehr zu denken. Denn ich gehöre zu den Menschen, die einem Koch die Fähigkeit der Zubereitung eines französischen Gerichts absprechen, wenn er oder sie es nicht richtig schreiben kann, und die folglich auch einem Arzt die Fähigkeit zur Diagnose der Ursache eines Schmerzes absprechen, wenn „profoziert“ wird. Und dass ein Arzt einfach so akzeptiert, dass er’s nicht versteht, und einen daraufhin heimschickt, ohne mögliche andere Ursachen auszuschließen, entspricht auch nicht so meiner Vorstellung, wie es sein sollte.

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.

Iterationsschleife

N=35

31. Mai 2020

Betrachtet man ethische Diskussionen so stellt man fest, dass es grundsätzlich zwei Ansätze zu geben scheint, die jeweils zu unterschiedlichen Ergebnissen führen können, wenn man sie auf ein ethisches Problem anwendet. Da wäre zum einen die deontologische Ethik nach der eine Handlung nach ihrer ethischen Qualität zu bewerten ist - aber nicht nach ihren Folgen. Andererseits wäre da die utilitaristische Ethik wonach eine Handlung nach ihren Folgen bewertet werden muss – und damit als Handlung an sich nicht unbedingt eine ethische Qualität haben muss, sondern diese durch das Ergebnis der Handlung erst erreicht.

Betrachtet man die beiden Ethiken aus der Sicht der Informatik, so sind beide ganz offensichtlich grundsätzlich implementierbar. Beide können also als Grundlage für „moralische Maschinen“ dienen. Allerdings unter einer ganz bestimmten Voraussetzung: Sowohl die Regeln als auch die Konsequenzen einer Handlung müssten zuverlässig „berechenbar“ sein.

Geht man von der deontologischen Ethik aus so müssen also alle Regeln im System hinterlegt sein und daraus müssen dann Handlungsanweisungen ableitbar sein. Das war die Grundlage von Expertensystemen der 80er und 90er Jahre. Sie haben die künstliche Intelligenz lange beschäftigt und die Ansätze haben zu einem Problem geführt. Denn in der Praxis setzt die „richtige“ Entscheidung immer mehr voraus als nur die Kenntnis der Regeln und ihres Zusammenspiels. Jede Entscheidungssituation erweist sich letztlich als einmalig und selten ist sie so eindeutig, dass das einfache Anwenden von Regeln genügt.

Darüber hinaus hat die Implementierung großer Regelsysteme (wie etwa der Versuch juristische Expertensysteme zu implementieren) zu einer unangenehmen Erkenntnis geführt: menschlich gemachte Regeln sind – in der Regel – nicht widerspruchsfrei. Da diese Regelwerke aber seit Jahrzehnten oder sogar Jahrhunderten in Gebrauch sind, ist eine neue – die Logik berücksichtigende – Entwicklung fast ausgeschlossen. Wer möchte verantworten, dass das deutsche Rechtssystem für Jahre auf Eis gelegt wird, weil ein neues und in sich völlig logisches System entwickelt werden muss?

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 Sinn macht. In seiner 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.

Gehen wir zurück zum Weichensteller. Was kann er als sicher annehmen? Den Tod der vielen? Oder werden diese sich durch einen Sprung in letzter Sekunde retten? Wer sind die vielen? Arbeitskollegen, die mit dem Weichensteller vertraut sind und mit ihm im engen sozialen Kontakt stehen? Was kann auf der anderen Seite der einzelne tun um sich zu retten? Kann er in letzter Sekunde zur Seite springen? Wer ist dieser Einzelne?

Und wenn wir das Trolley-Problem betrachten, wen sehen wir dann? Uns als Mitglieder einer Gruppe die durch die Opferung des Einzelnen gerettet werden soll? Oder uns als den Einzelnen der nicht geopfert werden soll für die Allgemeinheit?

M. Resch

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.

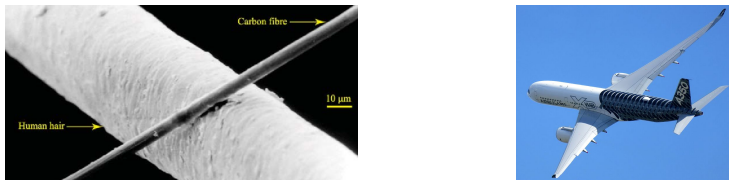


Abbildung 1: Die unterschiedlichen Skalen, die aufgelöst werden müssen, führen bei der Simulation von Karbon immer wieder zu Schwierigkeiten. Von links nach rechts: Fasern (Skala $5\mu\text{m}$) bis zum gesamten Flugzug (Boeing A350)¹.

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”.

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

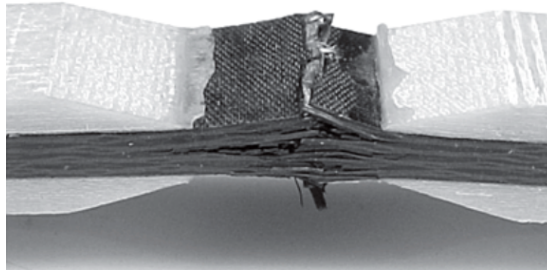


Abbildung 2: Die Schichten von Kohlenstofffasern lösen sich beim Brechen komplett voneinander.

Sowohl beim Legen der Fasern, als auch beim Trocknen des Kunststoffes, kann es zu kleinen (oder auch größeren) Unebenheiten kommen. Diese Unebenheiten sind meist nur Millimeter hoch, allerdings können sie einen sehr großen Effekt auf die Stärke des Bauteils haben. Eine unerwünschte Eigenschaft von Karbon ist nämlich, dass es sehr spröde ist. Die Lagen von Kohlenstofffasern lösen sich voneinander und auch ein sehr kleiner Riss kann die Stärke des Bauteils stark beeinträchtigen (Sandhu, 2018).

Da gesamte Flugzeugbauteile oft hunderttausende Euro für die Herstellung kosten und somit nicht bei jeder kleinen Unebenheit weggeworfen werden sollten, ist es sehr wichtig, richtig vorherzusagen, welchen Einfluss sie auf die Stärke des Bauteils haben. Leider hat Simulationssoftware große Schwierigkeiten Karbonstrukturen präzise zu modellieren. Warum ist das so?

- **Größe der Berechnungen.** Man muss jede Lage von Fasern auflösen, zum Teil mit mehreren Elementen pro Lage und das für das gesamte Bauteil. In einem Beispiel einer Flügelkiste brauchten wir zum Beispiel ca. 200 Millionen Freiheitsgrade. Es gibt nur wenige numerische Löser die in der Lage sind, solche Systeme in brauchbarer Zeit zu lösen.
- **Material Anisotropie.** Die Stärke von Karbonmaterialien ist in Faserichtung wesentlich stärker als quer zur Faserrichtung. Das bedeutet, man hat einen hohen Kontrast in den Materialeigenschaften. Erschwe-

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 Gleichungssystem² $Ax = b$ 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,³ aber die Anzahl an Iterationen vom konjugiertem Gradientenverfahren (also die

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

³ Es handelt sich hierbei um ein additives Schwarz Verfahren.

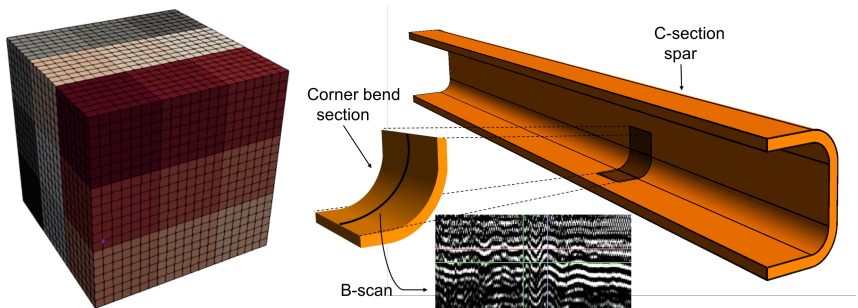


Abbildung 3: Links: Gebietszerlegung in Teilgebiete. Die unterschiedlichen Farben bilden das "grobe Gitter" (Bild entnommen aus (Butler, 2019)). Rechts: Eine Hälfte eines Flügelkastens (Bild entnommen aus (Sandhu, 2018)).

Kosten), steigt mit der Anzahl der Teilgebiete. Bei sehr großen Problemen wird das schnell zum Problem.

Deswegen fügt man zu den Lösungen auf den einzelnen Teilgebieten noch globale Informationen hinzu. Wir wählen dazu eine Basis auf einem "groben Gitter", also auf einem Gitter in dem jedes Element eines der Teilgebiete ist. Die Idee als Basis Eigenfunktionen des Operators zu verwenden liegt nicht fern und wurde schon in vielen Verfahren verwendet.

Wir verwenden die GenEO-Basis, oder **G**eneralised **E**igenproblems in the **O**verlaps (Spillane, 2014). Da bei uns der Fehler an den Grenzen der Teilgebiete am höchsten ist, werden die Eigenprobleme auch nur in diesem Bereich gelöst. Das genaue Eigenproblem welches wir lösen, ist genau so gewählt, dass die Konditionszahl von $M^{-1}A$ unabhängig von der Anzahl der Teilgebieten (und vom Kontrast in den Materialeigenschaften) bleibt.

Diesen Löser haben wir dann anhand unserer Anwendung getestet⁴. Als Bauteil haben wir uns einen Flügelkasten vorgenommen, siehe Fig. 3. Dies ist ein Bauteil welches den Großteil des Flügels ausmacht. Es ist mehrere Meter breit und bei vielen Flugzeugen mit Sprit gefüllt. Dadurch entstehen relativ komplizierte Ladebedingungen: ein Druck von innen und Verformungen

⁴Der Löser funktioniert für elliptische Probleme jeglicher Art.

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.

Den Menschen simulieren

SuperMUC-NG kämpft mit seinen Mitteln gegen Corona: Der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums in Garching ist zurzeit damit beschäftigt, aus Arzneimittel-Bibliotheken und Millionen von chemischen Substanzen, natürlichen Heilmitteln oder zugelassenen Medikamenten jene Wirkstoffe herauszufiltern, mit denen das Corona-Virus oder SARS-CoV-2 besiegt werden kann. „Supercomputer sind eine bemerkenswerte Ressource für die Entwicklung von COVID-19-Behandlungen“, sagt Peter Coveney, Mehrfach-Professor, Direktor des Zentrums für Computational Science (CCS) an der University College London (UCL) und Initiator von CompBioMed. „Sie können durch eine Vielzahl von Methoden wie maschinelles Lernen und künstlicher Intelligenz komplexe molekulare Dynamik sowie mögliche Wirkstoffe identifizieren. Wir müssen nicht nur Moleküle finden, die sich an die Stacheln auf dem Coronavirus binden, sondern auch modellieren, wie gut sich diese binden, wenn die Stacheln sich bewegen.“

Digitale Zwillinge für personalisierte Medizin

Die Corona-Krise bestätigt den gesellschaftlichen Nutzen von CompBioMed, einem von der EU geförderten Projekt zur Grundlagenforschung rund um die Medizin. In den letzten fünf Jahren entwickelten Wissenschaftler und Universitäten aus Europa und den USA unter Coveney's Leitung rund 20 Programme, Algorithmen und Anwendungen für High Performance Computer (HPC), mit denen ein virtuelles Modell des Menschen geschaffen werden kann. Damit lassen sich die Bewegungsabläufe von Muskeln und Knochen, biochemische und molekulare Prozesse sowie das Geschehen in Gefäßen, Adern, im Herzen oder beim Blutfluss berechnen und simulieren. Die Codes und Programme verarbeiten Massendaten zu einem virtuellen Menschen oder



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 Wirkungsweisen 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 anberaumt. „Während der Konferenz wurde diskutiert, wie die

Computerwissenschaften und die Informatik zur Lösung von konkreten Problemen in der biomedizinischen Forschung beitragen können“, berichtet David Wilfing, promovierter Medizinalchemiker und neuer LRZ-Koordinator für CompBioMed. „Außer HPC und Simulationen spielen bei diesem Projekt Big Data, maschinelles Lernen und künstliche Intelligenz eine große Rolle, etwa wenn es darum geht, Medikamente und Wirkstoffe zu erforschen.“

Mit Daten und künstlicher Intelligenz sollen Supercomputer in der zweiten Projektphase nun dreidimensionale, maßstabsgerechte Modelle in voller HD-Auflösung visualisieren. Erste Meilensteine dabei sind bereits erreicht: Mit Daten der Schweizer IT’IS-Foundation sowie dem CompBioMed-Programm HemeLB simulierte und visualisierte der Supercomputer des LRZ den Fluss roter Blutkörperchen in den Adern. „Verglichen mit einer Expedition auf den Mount Everest, bewegen wir uns jetzt auf Camp 2 zu“, beschreibt Coveney den Stand von CompBioMed.

Unterstützung beim Management von Daten

Neben der Beratung, Ausbildung und Unterstützung beim Supercomputing – Coveneys Code zur Erforschung von Wirkstoffen forderte erstmals alle 311 040 Rechnerknoten des noch neuen SuperMUC-NG – wird das LRZ helfen, die Daten von CompBioMed aufzuarbeiten und mit Metadaten zu katalogisieren. So werden sie online leichter gefunden und nutzbar für Wissenschaft, Medizin und Wirtschaft. Das LRZ hat für vergleichbare Aufgaben bereits das Speichersystem LRZ Data Science Storage aufgebaut, bietet Tools zur automatisierten Hochdurchsatz-Analytik von riesigen Datenmengen und für die Datensicherheit. Bei CompBioMed wird das LRZ außerdem mit EUDAT, der Open European Science Cloud, zusammenarbeiten: „Das ist interessant, weil EUDAT für das Datenmanagement eine reichhaltige Toolbox anbietet, die wir vielleicht mit unseren Services verbinden können“, sagt Stephan Hachinger, Leiter des Research Data Management-Teams. CompBioMed kann von den Erfahrungen, die das LRZ-Team in Datenmanagement-Projekten wie LEXIS oder Generic Research Data Infrastructure (GerDI) bereits sammelt, profitieren und umgekehrt.

Klüger durch künstliche Intelligenz

CompBioMed fordert auch die Spezialisten für Big Data und künstliche Intelligenz am LRZ: „Machine Learning ist in der Forschung und Medizin angekommen, es wird überall eingesetzt und ergänzt die klassische Computersimulation“, hat Peter Zinterhof, Mitarbeiter im Team Big Data und Künstliche Intelligenz des LRZ, während des CompBioMed-Treffens festgestellt. „Durch die Überprüfung der Arbeitsweise von austrainierten Netzen können wir mehr über die inneren Zusammenhänge der Fragestellung lernen.“ In riesigen Datenmengen, etwa aus medizinischen Screenings oder Massentests, finden Algorithmen oft mehr Muster und Regelmäßigkeiten als Menschen. Das bringt die Forschung auf neue Fragen und zu mehr Wissen. Zinterhof, der am LRZ auch das Projekt DigiMed zur Digitalisierung in der bayerischen Medizin betreut, rechnet damit, dass sich künstliche Intelligenz und Machine Learning, Bilderkennung und andere smarte System daher jetzt stärker in der Medizin ausbreiten. Supercomputing etabliert sich gerade in den Lebenswissenschaften.

Auch bei der Erforschung von SARS-CoV-2 und Corona arbeiten Supercomputer Hand in Hand mit künstlicher Intelligenz oder Algorithmen: „Wir nutzen die immense Leistung von Supercomputern, um schnell eine riesige Anzahl potenzieller Verbindungen zu suchen, die das neuartige Coronavirus hemmen könnten“, erklärt Coveney, „und verwenden die gleichen Computer erneut, aber mit unterschiedlichen Algorithmen, um diese Liste auf die Verbindungen mit der besten Bindungsaffinität zu verfeinern. So identifizieren wir die vielversprechendsten Verbindungen, um danach in herkömmlichen Laboren die wirkungsvollste Behandlung oder Impfung gegen COVID-19 zu finden.“

HPC beschleunigt Medikamenten-Entwicklung

Mit gewohnter Laborarbeit und Analysen kann die Entwicklung eines marktreifen Medikaments bis zu 12 Jahre dauern und bis zu zwei Milliarden US-Dollar kosten. HPC, auch das eine grundsätzliche Erfahrung von ComBioMed, minimiert den Aufwand beträchtlich. Die Hoffnung besteht, dass ein Impfstoff gegen die aktuelle Pandemie mit Hilfe von HPC in den nächsten

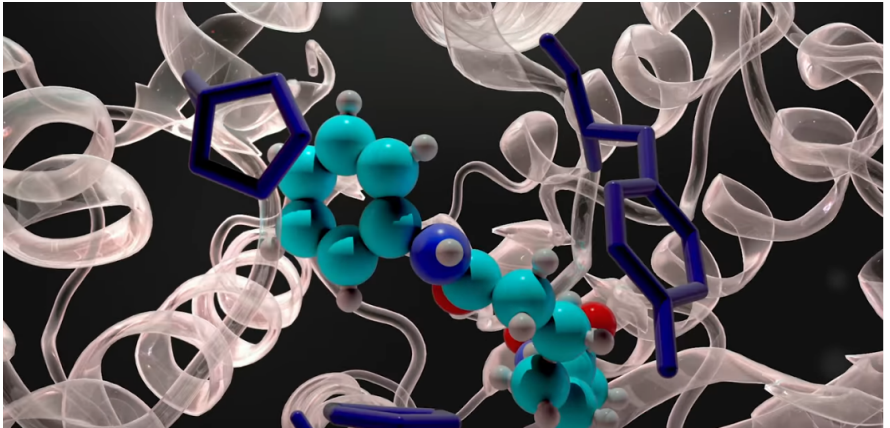


Abbildung 2: Bild: CompBioMed Projekt

Jahren vorliegen könnte. Doch CompBioMed ermöglicht noch mehr: Anhand eines digitalen Zwillings 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.compbio-med.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

Come Dine with me

Daten in den Chip oder erst mal auf den Compute-Node zu schaufeln gilt gemeinhin als eine der Kernherausforderungen hinter Exascale. Das muss zeitnah erfolgen, im Idealfall komplett hinter den Berechnungen, sollte robust sein (Stichwort Resiliency oder Dynamic Routing), und muss langfristig die Daten schon im richtigen Format anliefern. Sie erst mal in den Chip zu bringen und dann umzubauen ist zu teuer. SmartNICs sind ein Trend, der verspricht, dass man dies überhaupt erst mal technisch kann. Mellanox Blue-Field ist so eine SmartNIC-Architektur, die Netzwerkkarten mit ARM-Chips ausstattet. Diese Chips können MPI-Messages abfangen, umleiten oder ihren Inhalt verändern.

Wie mit jeder neuen Technologie ergibt sich ein gewisses Henne-Ei-Problem: Das Zeug kommt auf den Markt, aber der Markt als Ganzes scheut zurück, massiv zu investieren ohne Proof-of-Concept. Für Proof-of-Concepts wiederum fehlt die Umgebung. Jetzt gibt es für SmartNICs große Anwendungsfälle in Rechenzentren, die z.B. Rechner on-demand offerieren. MPI-Messages abzufangen ist ein überzeugendes Security-Argument. Aber im HPC-Bereich sind SmartNICs, nunja, nicht gerade omnipräsent.

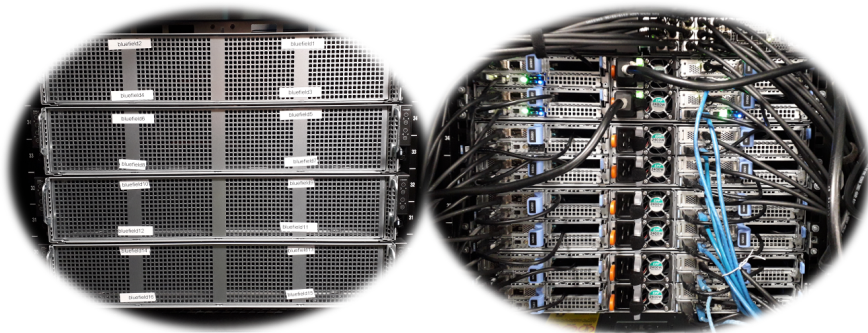


Abbildung 1: <https://www.dur.ac.uk/icc/cosma/facilities/dine/>

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

The first (virtual) KONWIHR Workshop



In the beginning of 2020, we invited projects that joined the "KONWIHR family" in 2019 to participate in a KONWIHR workshop - the first of its kind for a long time. Project leaders and staff were asked to present scientific context and goals of their projects, and most importantly, where they need support from RRZE and LRZ to achieve them. Furthermore, we wanted to provide an environment, where researchers from different areas could discuss their projects and find common ground and synergies between them. The workshop was scheduled to take place at RRZE in Erlangen at the end of March. Then came Corona.

Two weeks before the workshop, measures to slow the spread of Covid-19 were increased daily, until it became clear that we wouldn't be able to host the workshop as planned. We decided to change to a virtual format. Due to the lack of experience with larger video conferences, at first we were a bit skeptical how well it would work, but we were pleasantly surprised. Nearly all speakers were able to participate, everyone's network connection seemed to be stable and no major technical difficulties occurred (at least none that we noticed). Most participants did not enable their video at any point, so it took a bit getting used to speaking into a black void. For the ones who were unable to attend on the first date, we offered a second one two weeks later. Due to the much lower organizational effort of the digital format (and everybody's much emptier appointment calendars), this was easy.

During the workshop, the longer running projects of the first funding call in spring 2019 presented their preliminary work and discussed first results of their investigations. The more recently funded projects of fall 2019 gave an overview of their project goals and presented their planned work packages. Additionally, first ties to the HPC experts at the computing centers were established. Even though there was no coffee break where participants could socialize in person, there was a lively exchange over common ground in the

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

BGCE Research Days: Coronavirus Report



With the arrival of a new summer semester, comes, once again, the familiar welcoming of the latest batch of BGCE junior members, fifteen strong, from the cohort of Winter Semester 2019/2020. Uncustomarily, instead of a fun-filled weekend of contracting, copious team-building and ice-breaking activities between the BGCE members (new and old) and the associated professors, the new members experienced a Corona-induced quarantine.

As a measure to retain the functionality of BGCE research days, we took a page from the multiple international institutions worldwide and reacted accordingly: bringing research days to an online format. This impromptu format, orchestrated via a MacGyvered combination of Moodle, Zoom and (eventually) Slack came together to produce the first research day on the 14th of May.

The online BGCE format consists of a synchronous and asynchronous portion: the asynchronous portion involved the uploading of the main presentations from a typical research day. For the first online research day, Shiva Dinesh and Nupur Patel, CE students from FAU Erlangen, uploaded their Work-In-Progress videos, describing the development of vehicular on-board diagnostic tests and a weather interpreter module implementation for sizing battery storage systems, respectively.

The BGCE juniors from COME also uploaded in-depth video presentations, henceforth dubbed ‘Rodeo’ videos, that introduced their hobbies, academic interests as well as the various means they coped with the solitary confinement required by the pandemic.

The synchronous portion of the online conference marked the first occasion where the old BGCE regime met the new as the freshest additions to the BGCE family were introduced to the more senior of the roster.

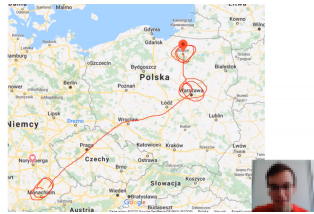


Figure 1: COME junior describing the Corona-induced difficulties of travelling to Munich

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’.

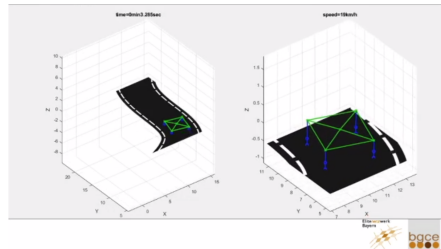


Figure 2: CSE Honours Project: Multi-body Vehicle Model

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

SPPEXA 2016-2019: Abschlussband



SPPEXA – das Schwerpunktprogramm Software for Exascale Computing der DFG – läuft nach zwei drei-jährigen Förderphasen bald aus (wie erfahrene Quartl-Leser wahrscheinlich schon wissen).

Wie üblich bei DFG Projekten, werden die Ergebnisse in einem Abschlussband zusammengefasst – es wird in Springers Reihe *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* erscheinen.



Abbildung 1: Titelseite des Vorgängers *LNCSE edition 113* der ersten Phase

Hier vorab eine Zusammenfassung, die auch auf dem Buchrücken abgedruckt wird:

This open access book summarizes the research done and results obtained in the second funding phase of the Priority Program 1648 “Software for Exascale Computing”(SPPEXA) of the German Research Foundation (DFG) presented at the SPPEXA Symposium in Dresden during October 21-23, 2019. In that respect, it both represents a continuation of Vol. 113 in Springer’s series “Lecture Notes in Computational Science and Engineering”, the corresponding report of SPPEXA’s first funding phase, and provides an overview of SPPEXA’s contributions towards exascale computing in today’s sumpercomputer technology. The individual chapters address one or more of the research directions (1) computational algorithms, (2) system software, (3) application software, (4) data management and exploration, (5) programming, and (6) software tools.

The book has an interdisciplinary appeal: scholars from computational sub-fields 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

Feierliche Übergabe eines Monitors

Sachspenden oder ähnliche Zuwendungen sind an einer unternehmerischen Universität zwar keine Seltenheit, aber der Fall hier ist doch ein besonderer und verdient der Würdigung im Quartl.



Abbildung 1: Übergabe des Monitors

Bei seinen durchaus nicht seltenen Besuchen in meinem Büro war dem lieben Kollegen Alois Knoll immer heftiger ins Auge gesprungen, in welch aus seiner Sicht erbarmungswürdigem Zustand sich die technische Ausstattung meines Arbeitsplatzes befand. Mei, als Schwabe tausche ich einen Monitor halt dann aus, wenn er kaputt ist.

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.

*** Notiz * Notiz * Notiz ***

Termine 2020 (falls Corona es erlaubt)

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**

<https://www.siam.org/conferences/calendar>

- **ECCOMAS WCCM 2020**

Minisymposium: Multiphysics simulations with the coupling library
preCICE 19.07-24.07.2020 in Paris, France

<https://wccm-eccomas2020.org/>

- **Supercomputing 2020**

The International Conference for High Performance Computing, Net-
working, Storage and Analysis (SC20) –

SC 20 in Georgia World Congress Center Atlanta, GA, USA:

15.11.-20.11.2020 <https://sc20.supercomputing.org/>

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, www5.in.tum.de/quartl

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.09.2020**

* **Quartel**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)