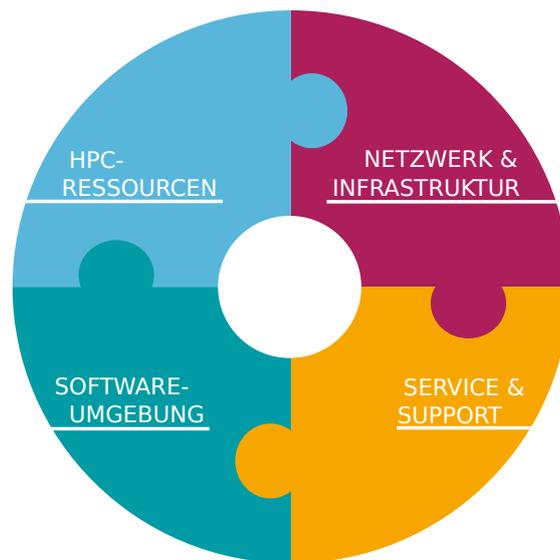


Ausführlicher Bericht des Arbeitspaketes 2: Beratung, Schulung, Tutorials, Workshops

HPC.NRW*

Mai 2019 bis September 2020



*Kontakt: contact-ap2@hpc.nrw

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Deliverables	3
2.1	Deliverables bis Herbst 2020	3
2.2	Ausstehende Deliverables bis Frühjahr 2022	4
3	Aufbau eines flächendeckenden HPC-Helpdesks	5
4	HPC-Kurse, Tutorials und Dokumentation	6
4.1	Schulungsunterlagen und Online-Tutorials	6
4.2	Liste der HPC-Kurse/Tutorials/Workshops	8
4.3	HPC-Dokumentation	9
5	Community-spezifische Intensivberatung	9
5.1	Success Stories	9
5.2	Standortspezifische und HPC.NRW-übergreifende Maßnahmen	15
5.3	Erste Schritte zu einer impliziten und dynamischen Bildung fachspezifischer Kompetenzcluster	18
6	Qualifizierte Unterstützung in der Performanceanalyse	20
7	Bereitstellung von integrierten Profiling- und Performance-Monitoring-Tools	22
8	Heranführung von neuen Nutzendenkreisen an HPC-Nutzung in Ebene 3	24
9	NRW-weite Nutzendenbefragung	24
A	Referenzen	26
B	Veröffentlichungen mit Unterstützung von HPC.NRW	28
B.1	Erfassungsmodus	28
B.2	RWTH Aachen	28
B.3	Universität Bielefeld	32
B.4	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn	33
B.5	Technische Universität Dortmund	34
B.6	Universität Duisburg-Essen	36
B.7	Universität Düsseldorf	40
B.8	Universität zu Köln	44
B.9	Westfälische Wilhelms-Universität Münster	50
B.10	Universität Paderborn	54
B.11	Universität Siegen	59
B.12	Bergische Universität Wuppertal	62

1 Einleitung

Im Rahmen des Projektes *HPC.NRW*, in welchem ein landesweites Kompetenznetzwerk für High Performance Computing (HPC) zwischen 12 Universitäten etabliert werden soll, wurden vier verschiedene Arbeitspakete definiert. Das Arbeitspaket 2 (AP2), um welches es in diesem Bericht gehen wird, arbeitet dabei an Themen zur Verbesserung von Beratungs- und Schulungsangeboten für Nutzende im Bereich des HPC. Zu diesem Zwecke werden einerseits die Bedarfe der Nutzenden über verschiedene Wege erfasst, andererseits Tutorials und Workshops erarbeitet und angeboten, aber auch eine standortübergreifende Supportinfrastruktur entwickelt.

Für jedes Arbeitspaket wurden bestimmte Zielvereinbarungen (sog. *Deliverables*) getroffen. Eines dieser Deliverables für das AP2 ist die Dokumentation und Veröffentlichung der Maßnahmen des Arbeitspaketes in Form eines jährlichen Berichtes. Dieser Bericht stellt den ersten Jahresbericht im Rahmen der getroffenen Zielvereinbarungen dar und umfasst die erste Phase des Projektes von **Mai 2019 bis September 2020**.

Zu Beginn wird eine kurze Übersicht über die bislang erfüllten Deliverables gegeben. Anschließend wird ausführlicher über etwaige Aufgaben des AP2 berichtet. Diese umfassen zunächst den Aufbau eines landesweiten Helpdesks sowie die Bereitstellung von Kursen, Tutorials und Dokumentationen für den Bereich HPC. In diesem Zuge wird auch über besonders erfolgreiche sowie standortübergreifende Maßnahmen berichtet, welche in ersten Schritten zur Bildung fachspezifischer Kompetenz-Cluster münden. Darüber hinaus wird berichtet, wie man die Nutzenden qualifiziert bei der Performanceanalyse unterstützen kann sowie über Maßnahmen zur Bereitstellung von Profiling- und Performance-Monitoring-Tools. Weiter wird die Heranführung neuer Nutzendengruppen an den Tier-3 Standorten dargelegt. Zum Ende dieses Berichtes wird zusammenfassend auf die durchgeführte, NRW-weite Nutzendenbefragung mit Bezug zum AP2 eingegangen. Zudem beinhaltet der Bericht in Anhang B eine Aufstellung der mit Hilfe des Kompetenznetzwerks entstandenen Veröffentlichungen.

2 Deliverables

Im Folgenden wird zunächst eine Übersicht über die *Deliverables* gegeben, welche bis Herbst 2020 fertigzustellen waren. Zudem wird auch der aktuelle Stand und erste Erfolge der Deliverables aufgeführt, die bis Frühjahr 2022 zu erfüllen sind.

2.1 Deliverables bis Herbst 2020

1. **Die Maßnahmen des Arbeitspaketes werden dokumentiert und in einem jährlichen Bericht auf der Projektwebseite `hpc.nrw` veröffentlicht.**

Alle Tätigkeiten des Arbeitspaketes 2 werden in einem projektinternen Gitlab-Wiki (bereitgestellt durch die RWTH Aachen) festgehalten und protokolliert. Diese Inhalte bilden die Basis zur Erstellung eines jährlichen Berichtes und somit zur Erfüllung dieses Deliverables. Der aktuelle Bericht fasst alle Maßnahmen im Projektzeitraum Mai 2019 bis September 2020 zusammen und wird öffentlich zur Verfügung gestellt.

2. **Die mit Unterstützung des Kompetenznetzwerks entstandenen Veröffentlichungen werden gesammelt und sind Teil des jährlichen Berichtes.**

Je nachdem, welche Informationen zu Veröffentlichungen eines Standortes verfügbar sind, werden entweder nur die Veröffentlichungen aufgelistet, die mit direkter Unterstützung des Kompetenznetzwerks entstanden sind, oder alternativ alle mit Hilfe des dortigen Clustersystems entstandenen Veröffentlichungen. Dabei wurden für die RWTH Aachen, die Universität Paderborn, die Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, die Universität Bielefeld und die Universität Köln nur Publikationen gelistet, die explizit mit Unterstützungsleistungen des Kompetenznetzwerks entstanden sind. Da es ein solches explizites Tracking jedoch nicht bei allen Standorten gibt, listen die Universität Duisburg-Essen, die Westfälische Wilhelms-Universität Münster, die Bergische Universität Wuppertal, die Technische Universität Dortmund, die Universität Siegen und die Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn jeweils alle Publikationen, die mit Hilfe des dortigen Clusters entstanden sind. An der Ruhr-Universität Bochum wurden noch keine Publikationen erfasst, da sich deren zentrale HPC-Infrastruktur noch im Aufbau befindet.

Diese Listen der Veröffentlichungen nach Standort befinden sich im Anhang B.

3. **Zur internen Abstimmung werden monatliche Abstimmungsmeetings der Projektbeteiligten durchgeführt.**

Es hat sich recht schnell gezeigt, dass monatliche Abstimmungsmeetings nicht für so ein umfangreiches Arbeitspaket ausreichen. Seit Oktober 2019 finden daher alle zwei Wochen, in besonders arbeitsintensiven Phasen, wie seit Mai 2020, sogar wöchentlich, Videokonferenzen statt, um dem hohen Koordinationsbedarf gerecht zu werden. Bis Ende September 2020 wurden insgesamt 35 Videokonferenzen abgehalten und im internen Gitlab-Wiki protokolliert.

4. **Zwei Online-Tutorials stehen zur Verfügung.**

Die Themen für Online-Tutorials haben sich im Projekt aus den Einsichten der durchgeführten Nutzendumfrage herauskristallisiert. Neben Einführungskursen, wie z. B. einer Linux-Einführung für HPC-Nutzende oder der parallelen Programmierung mit OpenMP, wurden auch Konzepte zu spezielleren Themen, wie dem Profiling von Software zur Performance-Optimierung, erarbeitet. Über die Zielvorgabe hinausgehend, wurden bereits drei Online-Tutorials fertiggestellt und sind über <https://hpc-wiki.info> öffentlich zugänglich:

- **Introduction to Linux in HPC:** https://hpc-wiki.info/hpc/Introduction_to_Linux_in_HPC
- **Gprof Tutorial:** https://hpc-wiki.info/hpc/Gprof_Tutorial
- **OpenMP in Small Bites:** https://hpc-wiki.info/hpc/OpenMP_in_Small_Bites

Für die Tutorials wurden Foliensätze erstellt, Storyboards ausgearbeitet und Möglichkeiten zum interaktiven Lernen vorbereitet. Projektmitglieder verschiedener Standorte haben sich dafür zu besonderen Kompetenzteams zusammengeschlossen, sich in geeignete Tools zur Videoerstellung und -verarbeitung eingearbeitet und eine HPC.NRW-Introsequenz erstellt. Um eine möglichst hohe Qualität der Aufnahmen zu gewährleisten, wurde ein Sprechtraining organisiert und durchgeführt, sowie geeignete Aufnahmemöglichkeiten (z. B. Film- und Tonstudio), sofern vorhanden, gesucht oder alternativ geschaffen.

2.2 Ausstehende Deliverables bis Frühjahr 2022

1. Vier Online-Tutorials stehen zur Verfügung

Für zwei weitere Tutorials wurden bereits Themen gefunden und Inhalte geplant. Konkret soll ein Tutorial zum Schreiben von Codes für GPUs entstehen und eines zum Thema Benchmarking. Ersteres geht auf die verschiedenen Methoden ein, mit denen GPUs angesprochen werden können. Es richtet sich damit sowohl an Einsteigende, um für sie geeignete Methoden zu finden, als auch an Fortgeschrittene, die ihre Codes optimieren wollen. Das Benchmarking-Tutorial soll Nutzende in die Lage versetzen, die Ressourcenanforderungen sowie das Optimierungspotential ihrer eigenen Codes besser abschätzen zu können.

2. Integrierte Profiling-Tools stehen zur Verfügung

Um schlecht gewählte Ressourcenanforderungen und nicht optimal laufende Codes erkennen zu können, bieten sich automatisch arbeitende Tools an, die laufende Jobs der Nutzenden möglichst detailliert überwachen und analysieren. Typische Anforderungen wurden zusammengetragen und bestehende Lösungen bereits evaluiert. Ein Plan für eine einheitliche, datenschutzkonforme Monitoring-Lösung ist in Arbeit.

3. Ein interner Guide zur Vermittlung von Intensivberatungen steht zur Verfügung

Die Aktivitäten der einzelnen Standorte in der Intensivberatung heterogener Nutzendengruppen werden innerhalb von HPC.NRW bezüglich Inhalt, Arbeitsaufwand, Kontaktweg und beauftragten Mitarbeitenden tabellarisch erfasst, wobei besonders erfolgreiche Beispiele detailliert beschrieben werden, wie in Abschnitt 5.1 gezeigt. Anhand dieser Erkenntnisse werden in der nächsten Arbeitsphase Best-Practices entwickelt, welche im Rahmen der Ausgestaltung der in Abschnitt 5.2 beschriebenen standortspezifischen und standortübergreifenden Verbesserungsmaßnahmen konkretisiert werden. Diese Best-Practices können zukünftig zu Rate gezogen werden, um erfolgreiche Konzepte bei weiteren Fragestellungen anzuwenden.

4. Zwei interne Schulungen zur qualifizierten Unterstützung bei der Performanceanalyse wurden durchgeführt

Neben der Performanceanalyse ist die Korrektheitsanalyse ein wichtiger Bestandteil der Softwareentwicklung im wissenschaftlichen Kontext. In diesem Sinne wurde die Auffassung der geforderten Deliverables auch auf Werkzeuge zu eben dieser Korrektheitsanalyse erweitert, um die HPC.NRW Mitarbeiter in beiden Bereichen fortzubilden. Deswegen fand am 22.10 und 06.11.2020 bereits die erste interne Schulung *TotalView - Train-the-Trainer* statt, welche die Mitarbeitenden von HPC.NRW im Umgang mit dem Debugger TotalView schulte. Eine

weitere Schulung, durchgeführt von Intel, zu Intel Compilern, MPI und numerischen Bibliotheken sowie Performanceanalyse-Tools ist bereits geplant und wird am 1. und 2. Dezember 2020 stattfinden. Diese Schulung wurde zuerst den HPC.NRW Mitarbeitenden angeboten und danach auch allgemein für Nutzende dieser HPC-Infrastrukturen zugänglich gemacht. Weitere Schulungen im Bereich der Performanceanalyse sind bereits angedacht und könnten, z. B. als VI-HPS Tuning Workshop oder in einem ähnlichen Kontext, durchgeführt werden.

5. Eine Nutzendenbefragung an mindestens 8 Standorten wurde durchgeführt

Eine erste Nutzendenbefragung wurde bereits im Sommer 2020 an allen Standorten durchgeführt. Die Auswertung der Umfrage findet sich in einem separaten Dokument: <https://hpc.dh.nrw/nutzerbefragung-1>. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse fließen bereits in die Bemühungen zu allen Arbeitspaketen ein, dies geschieht sowohl lokal, als auch standortübergreifend. Die Nutzendenbefragung soll in regelmäßigen Abständen mit einem ähnlichen Fragenkatalog wiederholt werden, mit dem Ziel, mehr Nutzende zu erreichen, Trends zu erkennen und die getroffenen Maßnahmen bezüglich ihrer Effektivität zu überprüfen.

3 Aufbau eines flächendeckenden HPC-Helpdesks

Ein weiteres Projektziel war die Evaluation, ob ein gemeinsames, übergreifendes Ticket-System hilfreich sein kann. Dies wurde recht schnell als positiv beantwortet und darüber hinausgehend beschlossen, im Rahmen des Kompetenznetzwerks einen NRW-weiten Helpdesk für HPC-Fragen einzurichten. Hierfür konnte nach Rücksprache auf eine bereits bestehende Infrastruktur der Gauss-Allianz (GA) [1] zurückgegriffen werden. Die Gauss-Allianz betreibt bisher ein OTRS-Ticketsystem [2] für die Belange der Gauss-Allianz [3]. Im DFG-Projekt “ProPE” [4] wurde dieses Ticketsystem bereits im Kontext des *Performance Engineering* von der RWTH Aachen, der TU Dresden und der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg genutzt.

Ausgehend von den Erfahrungen des ProPE-Projektes, wurde für HPC.NRW entschieden, das Ticketsystem als eigenständiges Ticketsystem für den 3rd-Level-Support zu nutzen. Dies bedeutet, dass HPC-Nutzende der einzelnen Standorte weiterhin ihren lokalen Support in Anspruch nehmen, sodass einfache Support-Anfragen direkt am jeweiligen Standort gefiltert und bearbeitet werden. Erst, wenn weder 1st- noch 2nd-Level-Support an einem Standort ein Problem lösen können oder Rückfragen an andere Kollegen in dem Arbeitsbereich erwünscht sind, erstellt ein Supportmitglied des jeweiligen Standortes ein eigenes Ticket im GA-Ticketsystem. Hierfür wurde innerhalb des Ticketsystems eine feingliedrige Queue-Struktur geschaffen, nach welcher die eintreffenden Tickets einsortiert werden können, sodass Anfragen zielgerichtet an andere Experten des Kompetenznetzwerks gestellt werden können. Um zu gewährleisten, dass eingehende Tickets zeitnah bearbeitet und in den Queues die richtigen Kontakte innerhalb des Kompetenznetzwerks erreicht werden, wurde ein *Partner-on-Duty*-System eingerichtet, bei dem Monat für Monat wechselnde HPC.NRW-Mitarbeitende die eingehenden Tickets beobachten und gegebenenfalls unterstützend eingreifen, falls ein Ticket zu lange auf eine Antwort wartet. Auch wurden die Erfahrungen aus dem ProPE-Projekt in einen internen Leitfaden für die Ticketbearbeitung eingearbeitet, sodass neue Mitarbeitende sich bei der Bearbeitung von Tickets daran orientieren können.

Für HPC-Nutzende in NRW ohne eigenen Support sind zwei Wege für Support-Anfragen eingerichtet: Wenn Nutzende bereits an einem der HPC.NRW-Standorte die dortige Infrastruktur verwenden, kann und soll die dort verfügbare Support-Infrastruktur in Anspruch genommen werden. Wenn Nutzende bisher noch keines der HPC-Systeme der HPC.NRW-Partner nutzen, können sie sich an die allgemeine Support E-Mail-Adresse helpdesk@hpc.nrw wenden, welche in das OTRS-Ticketsystem weitergeleitet wird. In diesem Fall agiert das eingerichtete Ticketsystem als 1st-Level-Supportstruktur. Das Anliegen wird von der HPC.NRW-Geschäftsstelle evaluiert und an eine passende Einrichtung in NRW weitergeleitet. Zielgruppe für diesen Kommunikationsweg sind insbe-

sondere Nutzende von Fachhochschulen, wie in Abschnitt 8 weiter ausgeführt.

Auch ohne konkrete Anfragen von HPC-Nutzenden, wird das OTRS-Ticketsystem darüber hinaus gerne von HPC.NRW-Mitarbeitenden selbst genutzt. So wurde schon mehrfach auf die Expertise der anderen Standorten zurückgegriffen, um beispielsweise zu erfahren, wie dort ein bestimmtes Problem gelöst wird oder wie deren Erfahrungen zu einem bestimmten Thema sind.

4 HPC-Kurse, Tutorials und Dokumentation

4.1 Schulungsunterlagen und Online-Tutorials

Ein wichtiger Teil von HPC.NRW ist eine langfristig gedachte Schulung von HPC Nutzern in relevanten Themen über alle Hochschulen hinweg. Aus diesem Grund wurden bestehende Kurse und Materialien an den Partner-Universitäten zusammengetragen und es wurde evaluiert, wie man Themenkomplexe zusammenführen kann, wo neue Materialien erarbeitet werden müssen, und welche Themen priorisiert behandelt werden sollten. So gehen beispielsweise aus der Nutzendenbefragung vor allem Bedarfe an Einführungen in die Bedienung von HPC-Clustern, Methoden zu Performance-Profiling und -Optimierung, aber auch nach weiterführenden Materialien zu fach- und architekturenspezifischen Themen hervor. In der ersten Arbeitsphase wurde daher ein umfangreiches Tutorial zur Einführung in die Nutzung von Linux mit speziellem Fokus auf HPC sowie ein Tutorial zum Performance-Profiling mit Gprof erstellt. Diese Tutorials werden durch ein Einstiegstutorial zur Parallelisierung mit OpenMP ergänzt.

Beim Erstellen der Tutorials wurde von Anfang an darauf geachtet, eine Pipeline zu definieren und mit dieser Erfahrung zu sammeln, um zukünftige Tutorials einfacher und schneller erstellen zu können. Es wurden deshalb mehrere Varianten diskutiert. Die letztendlich gewählte Variante besteht aus einer Reihe von kurzen Einzelvideos, jeweils bestehend aus Vortrag und Live-Demonstrationen, ergänzt durch kurzen Aufgaben und Quizfragen. Für die Folien zu den Tutorials wurde ein einheitliches Layout entwickelt.

Für die Tutorials wurde jeweils unter Einbeziehung der Expertise aller HPC.NRW-Projektmitarbeitenden eine Liste mit Schlüsselkonzepten erstellt, die zu dem betreffenden Thema vermittelt werden sollten. Daraus wurden Storyboards erstellt, die die Materie in logische Segmente aufteilen und eine parallele Entwicklung von Vortrags- und Übungsteilen ermöglichen. Die Videos eines Tutorials wurden dann gefilmt, eingesprochen und geschnitten.

Es wurden Tutorials zu den folgenden Themen erstellt:

- **Introduction to Linux in HPC:**

https://hpc-wiki.info/hpc/Introduction_to_Linux_in_HPC

In dieser umfangreichen, allgemeinen Einführung in Linux geht es in mehreren Teilen um Grundlagenthemen wie die Kommandozeile, die Verzeichnisstruktur, Dateien, Nutzer, Rechte, Prozesse, den VIM Texteditor, Shell-Skripting, Umgebungsvariablen, SSH-Verbindungen und Datentransfers. Die Aufteilung in einzelne Videos ermöglicht es aber auch fortgeschritteneren Nutzenden, einfach und komfortabel noch einmal nachzuschauen, wenn man beispielsweise die Bedienung von VIM vergessen hat.

- **Gprof Tutorial:** https://hpc-wiki.info/hpc/Gprof_Tutorial

In diesem einteiligen Tutorial geht es speziell um das Thema Performanceanalyse von Anwendungen mit dem GNU Profiler Gprof. Es wird gezeigt, wie man Anwendungen instrumentiert, daraus Performance-Informationen zu einem Anwendungslauf generiert und diese schließlich auswerten kann. Darüber hinaus wird eine Möglichkeit zur Visualisierung der Anwendungsstruktur mittels Call Graphen gegeben und wie man den Quellcode der Anwendung mit Laufzeitinformationen annotieren lassen kann. An drei Realwelt-Beispielen aus den Bereichen Biologie, Informatik und Maschinenbau wird demonstriert, dass dies mit unterschiedlichen

Programmiersprachen (C/C++, Fortran), verschiedenen Compilern (GNU, Intel) und sogar parallelen Anwendungen (Threads, MPI) funktioniert.

- **OpenMP in Small Bites:** https://hpc-wiki.info/hpc/OpenMP_in_Small_Bites
Dieser Kurs richtet sich Anfangs an Einsteiger und in späteren Teilen auch an fortgeschrittene Nutzende für die Shared-Memory Parallelisierung von Anwendungen mittels OpenMP Programmierung. Die Konzepte werden dabei “häppchenweise” in insgesamt 11 Teilen vermittelt und decken die Themen Worksharing, Data Scoping, Tasking und Non-Uniform Memory Access ab.

Weitere Tutorials zur GPU-Programmierung und zu Themen wie Benchmarking und Skalierung sind bereits in Arbeit; Lehrmaterialien zu Intel VTune und Python sind in Planung.

Die entstandenen Schulungsunterlagen wurden über das HPC-Wiki sowie den neuen YouTube-Kanal des Kompetenznetzwerks¹ bereitgestellt.

Um eine möglichst hohe Qualität der Tutorials zu erzielen, wurden im Vorfeld zu den Aufnahmen Sprechtrainings durchgeführt, professionelle Aufnahmegeräte und -räumlichkeiten ermittelt, sowie Kriterien bezüglich der minimal zu erfüllenden Videoparameter erstellt. Es wurde ein für alle Tutorials gemeinsamer Vorspann entwickelt und die aufgenommenen Videos teilweise nachvertont.

Die Schulungsunterlagen, die in HPC.NRW erstellt werden, werden unter der Creative Commons Lizenz CC-BY-SA [5] der weltweiten HPC-Community zur Verfügung gestellt. Obwohl noch nicht durchgeführt, ist es geplant, ebenfalls die Quellen der Foliensätze zu veröffentlichen, um der HPC Community zu ermöglichen, auch an diesen mitzuwirken, sie zu verbessern und zu erweitern.

¹<https://www.youtube.com/channel/UCQVg7fuJyBD9PDsgnZNwifA>

4.2 Liste der HPC-Kurse/Tutorials/Workshops

Standort	Kurs/Tutorial/Workshop	Datum	Link
Aachen	Aurora Deep Dive Workshop	02.05.2019 – 03.05.2019	Link
	2nd Aurora Deep Dive Workshop	28.11.2019 – 29.11.2019	Link
	aiXcelerate 2019	02.12.2019 – 05.12.2019	Link
	Introduction to High-Performance Computing 2020	03.03.2020	Link
Bielefeld	Scientific Python	09.09.2019	
	Introduction to scientific computing on GPUs	30.09.2019 – 11.10.2019	
	Introduction to scientific computing on GPUs	26.10.2020 – 06.11.2020	
Dortmund	HPC Programmierung mit C/C++	WiSe 2019/20	Link
Düsseldorf	Compiling and installing tools for HPC (part 1 of 2)	23.06.2020	
	Compiling and installing tools for HPC (part 2 of 2)	02.07.2020	
	HPC Einführungskurs	03.07.2020	
	HPC Fortgeschrittenenkurs	28.07.2020	
	Introduction to HPC	23.09.2020	
Köln	High Performance Computing	07.08.2019	Link
	Parallelprogrammierungskurs	20.08.2019 – 22.08.2019	Link
Münster	High Performance Computing	26.08.2019 – 30.08.2019	Link
Paderborn	Training: Productive Design for Intel FPGAs	20.05.2019	Link
	Software Container with Singularity for Machine Learning and GPUs	06.05.2019	
	HPC Introduction Course	23.05.2019	Link
	HPC Introduction Course	25.06.2019	Link
	Advanced Topics of HPC	11.07.2019	Link
	HPC Introduction Course	27.07.2019	Link
	Cray Optimization Workshop	14.10.2019 – 15.10.2019	Link
	Linux Introduction Course	22.10.2019	Link
	HPC Introduction Course	05.11.2019	Link
	Advanced Topics of HPC	26.11.2019	Link
	Best Practice in Scientific Computing	27.11.2019 – 29.11.2019	Link
	Performance Engineering Course	17.12.2020 – 18.11.2020	Link
	Linux Introduction Course	14.01.2020	Link
	HPC Introduction Course	21.01.2020	Link
	International Winter School on Electronic Structure Calculations	10.02.2020 – 14.02.2020	Link
	Linux Introduction Course	23.04.2020	Link
	HPC Introduction Course	30.04.2020	Link
	Advanced Topics of HPC	26.05.2020, 28.05.2020	Link
	Linux Introduction Course	30.06.2020	Link
	HPC Introduction Course	07.07.2020	Link
Software Development Practices Applied to Computational Research	06.10.2020 – 09.10.2020	Link	
Linux Introduction Course	14.10.2020	Link	
HPC Introduction Course	27.10.2020	Link	
Siegen	Linux-Einführungskurs (mit HPC-Fokus)	05.02.2020	Link
	Cluster-Einführungskurs	12.05.2020	Link
	MATLAB - Parallelization, Performance, Debugging	09.06.2020	Link
	Linux Introduction Course (with HPC Focus)	21.07.2020	Link
HPC.NRW-weit	Training C++ for Beginners	05.10.2020 – 09.10.2020	Link
	Totalview Training	22.10.2020, 06.11.2020	Link

4.3 HPC-Dokumentation

Innerhalb des ProPE-Projektes wurde das HPC-Wiki [6] als HPC-Dokumentationsplattform aufgebaut, welches eine umfassende Plattform für HPC-Dokumentation in Deutschland und potentiell darüber hinaus bieten soll. Im Rahmen von HPC.NRW wurde entschieden, das Vorhaben aufzunehmen und weiterzuführen. Initiale Anstrengungen in diesem Bereich konzentrierten sich darauf, die Dokumentation im Bereich “HPC-Admin” auszubauen. Hier wurden mehrere *Best-Practice-Guides* für die Konfiguration und den Betrieb von HPC-Systemsoftware erarbeitet und dem Wiki hinzugefügt. Im Rahmen des Projektes ist geplant, weitere Artikel sowohl für alle bestehenden Bereiche “HPC-User”, “HPC-Developer” und “HPC-Admin” zu erstellen und bestehende Artikel zu ergänzen und, wenn nötig, zu aktualisieren.

5 Community-spezifische Intensivberatung

Fachspezifische Intensivberatung hat bei vielen der Konsortialpartner eine lange Tradition, welche in der ersten Arbeitsphase von HPC.NRW weitergeführt, ausgebaut und dokumentiert wurde. Standorte, die noch nicht oder erst seit kurzer Zeit über zentrale HPC-Ressourcen verfügen, oder solche, die erst durch HPC.NRW eine ausreichende personelle Aufstellung erreicht haben, etablierten in der ersten Arbeitsphase die notwendige Infrastruktur, um den, auch aus der ersten Nutzendumfrage hervorgehenden, Bedarf an Intensivberatung zu decken.

Zusätzlich zur standortspezifischen Intensivberatung, trägt HPC.NRW durch Personal sowie Methoden- und Technikkompetenz direkt und indirekt zu landes-, bundes-, aber auch weltweit ausgerichteten fachspezifischen und fachübergreifenden Schulungsangeboten bei. In HPC.NRW tätiges Personal war zum Beispiel maßgeblich an der Organisation der “International Winter School on Electronic Structure Calculations” am Standort Paderborn beteiligt. Hier wurde im Februar 2020 ein fünftägiges Programm geboten, welches von einleitenden theoretischen Themen, über einleitende HPC-spezifische Tutorials bis hin zu weiterführenden theoretischen und praktischen Themen Nutzende aller Erfahrungsniveaus ansprach. Am Standort Düsseldorf wurde Ende Juni/ Anfang Juli 2020 für eine der dortigen Hauptnutzengruppen ein zweitägiger Workshop zum Thema *Compiling and Installing Tools for HPC* mit einem Fokus auf den Bereich der Genom-Forschung durchgeführt.

Diese fachspezifischen Workshops und Schulungen werden durch fachübergreifende Workshops komplementiert. Beispiele hierfür sind: ein Workshop zu fortgeschrittenen Themen und Fragen rund ums HPC am Standort Düsseldorf Ende Juli 2020, der HPC-Tuning-Workshop aiXelerate am Standort Aachen im Dezember 2019 und ein *Cray Optimization Workshop* sowie ein Workshop zum Thema *Best Practice in Scientific Computing* im Oktober und November 2019 am Standort Paderborn. Schlussendlich bieten einige Standorte zentrale Lehrangebote zu HPC-Themen an, wovon eine Auswahl in Abschnitt 4.2 dokumentiert ist. Es werden aber teilweise auch in den Fakultäten und an Instituten Veranstaltungen mit HPC-Bezug durchgeführt, auf deren Auflistung wir aber verzichten.

5.1 Success Stories

Anhand von expliziten Beispielen lässt sich zeigen, dass besonders enge Zusammenarbeit mit Nutzenden zu fachspezifischen Themen schon zum jetzigen Zeitpunkt einen wesentlichen wissenschaftlichen Mehrwert bringt, der ohne die Bereitstellung von Personal, Technik- und Methodenkompetenz durch HPC.NRW nicht oder nur schwer zu erreichen wäre. Die Aktivitäten der einzelnen Standorte in der Intensivberatung heterogener Nutzengruppen werden (ab einem bestimmten Mindestaufwand) innerhalb HPC.NRW bezüglich Inhalt, Arbeitsaufwand, Kontaktweg und beauftragten Mitarbeitenden tabellarisch erfasst. Dabei werden besonders erfolgreiche Beispiele detailliert beschrieben und liefern somit wichtige Fallstudien, welche Konzepte sich in der Intensivberatung als

besonders erfolgversprechend herausgestellt haben. Diese Erkenntnisse können langfristig zum Aufbau interner Best-Practices in der Intensivberatung beitragen. Im Folgenden werden ausgewählte, besonders erfolgreiche Beratungsgeschichten für die einzelnen HPC.NRW Standorte wiedergegeben.

Aachen: Im Dezember 2019 wurde von der RWTH Aachen der zielgerichtete HPC-Tuning-Workshop aiXcelerate für ca. 30 erfahrene und fortgeschrittene Nutzende veranstaltet. Dabei stand der erste Teil (zwei Tage) mit einer Mischung aus Experten-Vorträgen und Hands-On-Sessions einem breiteren Publikum offen, bei dem die grundlegende Terminologie des Performance-Engineering und der Performanceanalyse vorgestellt wurde. Insbesondere der Workflow zur Identifikation und Quantifizierung von Performance-Bottlenecks wurde erläutert, um die HPC-Methodenkompetenz der Teilnehmenden zu schulen. In den Hands-On-Sessions konnten die erlernten Fähigkeiten entweder mit Hilfe vorbereiteter Beispiele oder anhand eines eigenen Codes erprobt werden.

Für den zweiten Teil der Veranstaltung (zwei Tage) wurden die Top-Nutzenden/-Gruppen des HPC-Systems eingeladen, um gezielt deren Codes zu optimieren, die einen signifikanten Anteil an der vergebenen Rechenzeit haben. Hierbei wurde jedem der sieben Projekte mindestens ein persönlicher HPC-Experte des IT-Centers zugeordnet, um ein möglichst enges Betreuungsverhältnis zu gewährleisten. Unterstützt wurde dies zusätzlich mit Experten von Intel und des Regionalen Rechenzentrums Erlangen (RRZE).

Äußerst erfolgreich war beispielsweise die Forschendengruppe rund um den JuKKR-Code [7]. Zur Analyse wurden dabei verschiedene Tools verwendet (Intel Parallel Studio, likwid, Score-P, Vampir). In dem mittels MPI und OpenMP hybrid-parallelisierten Fortran-Code konnte ein Last-Ungleichgewicht an einem wichtigen Hotspot (KKRhost) identifiziert und behoben werden (vgl. Abbildung 5.1). Für den während des Workshops verwendeten repräsentativen Datensatz konnte die Laufzeit um ca. 60% verbessert werden.

Der optimierte Code wurde nach der aiXcelerate im Rechenzeitprojekt jara0191 (Umfang 3 Mio Core-h) verwendet. Darüber hinaus wurden in der aktuellen Antragsperiode weitere (Folge-)Rechenzeitprojekte eingereicht (Umfang: ca. 3 Mio Core-h und ca. 10 Mio Core-h), welche ebenfalls den optimierten Code nutzen. Im Falle der Genehmigung profitieren diese folglich ebenfalls von den erzielten Verbesserungen. Im Gegensatz zu Rechnungen, die in der Vergangenheit gemacht wurden, ist der Einfluss der Verbesserung durch geänderte Anforderungen (z. B. Dichte der k-Punkte, Problemgröße) signifikant. Die neue Version ist hier insgesamt 20-30% schneller. Obwohl die Verbesserungen im Entwicklungszweig des Codes immer mit einer leichten Zeitversetzung beim Nutzenden ankommen, konnte der verbesserte Code bereits für zwei Veröffentlichungen [8, 9] verwendet werden und es ist zu erwarten, dass weitere wissenschaftliche Veröffentlichungen im Anschlussprojekt folgen. Darüber hinaus wird der optimierte Code nicht nur auf den lokalen Systemen eingesetzt, sondern auch im europäischen Umfeld. So konnten auch mindestens zwei Projekte des “Greek Research & Technology Network (GRNET)” des nationalen HPC-Systems “ARIS” (Projekt IDs pr00504-TopMag und pr007039-TopMagX) profitieren [10]. HPC.NRW konnte somit maßgeblich durch konkrete Tuning-Maßnahmen und die Vermittlung von HPC-Methodenkompetenz zu einer nachhaltigen Verbesserung der Laufzeit beitragen.

Bielefeld: Im Rahmen einer Masterarbeit in der theoretischen Physik wurde an der Universität Bielefeld zum Vergleich mit analytischen Ergebnissen die sogenannte *asymptotic level spacing distribution* der ersten 10 Eigenwerte des *chirality-preserving Gaussian unitary ensemble* (chGUE) bestimmt. Der Masterstudent hatte hierfür vorab ein Python-Programm entwickelt und wollte dieses auf dem Rechencluster einsetzen, hatte jedoch zu diesem Zeitpunkt noch keine wesentliche HPC-Erfahrung. Hier konnten die Mitarbeitenden von HPC.NRW dem Studenten bei einer Parallelisierung mit Hilfe der *multiprocessing*-Bibliothek unterstützen und eine hohe Performance-Steigerung erreichen. HPC.NRW trug auf diese Weise maßgeblich zur fristgerechten Fertigstellung der Masterarbeit bei.

Ein weiteres Beispiel, welches insbesondere den Wert des HPC.NRW-Kompetenznetzwerks hervorhebt, stammt aus der Astrophysik und handelt von einer Masterarbeit zur Berechnung von



Abbildung 1: Der obere Vampir-Screenshot zeigt das Verhalten der Anwendung **KKRhost** zu Beginn des aiXcelerate Workshops in Aachen. Insbesondere ist erkennbar, dass einige der MPI-Prozesse in einer kollektiven MPI-Reduktion auf Ergebnisse warten (rote Bereiche). Der untere Screenshot zeigt das Verhalten am Ende des Workshops: Das Last-Ungleichgewicht in dieser Anwendung konnte entfernt werden, sodass unnötige Wartezeit in der Kommunikation weitestgehend vermieden wird.

Sternbahnen der Andromedagalaxie. Da das Rechencluster in Bielefeld hauptsächlich auf GPUs aufbaut, die Berechnungen für diese Masterarbeit jedoch eine größere Menge an CPU-Stunden voraussetzen, konnte dieser Bedarf lokal nicht erfüllt werden. Es wurde zusammen mit dem Studenten ein Antrag auf Rechenzeit in Paderborn angefertigt und dort auch bewilligt. Im Zuge der ersten Berechnungen traten technische Probleme auf, die der Student mit den Bielefelder HPC.NRW-Mitarbeitenden zu lösen versuchte. Durch die engen Kontakte im Kompetenznetzwerk konnte von Seiten Paderborns schnell Hilfe geleistet werden, sodass die Berechnungen zur Masterarbeit zum Zeitpunkt dieses Schreibens bereits im Gange sind.

Bonn: Das High Performance Computing and Analytics Lab (HPC/A-Lab) der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn pflegt eine historisch gewachsene Zusammenarbeit mit der Gruppe von Professor Carsten Urbach am Helmholtz-Zentrum für Strahlen- und Kernphysik (HISKP) im Forschungsbereich der Gitterfeldtheorie und Gitter-QCD. Im Rahmen dieser Kooperation wird, in Zusammenarbeit mit Forschenden des Forschungszentrum Jülich, den römischen Universitäten 2 und 3, dem Cyprus Institute sowie den Universitäten Jena und Bern die Performanceportabilität von Softwarelösungen für die Gitterfeldtheorie erforscht.

Wie andere Felder auch, durch den enormen Rechenzeitbedarf jedoch in noch größerem Maße, steht die Gitterfeldtheorie vor der Herausforderung, für eine immer heterogener und komplexer werdende Landschaft von Rechnerarchitekturen Software zu entwickeln, die gleichzeitig portabel ist und den höchsten Performanceansprüchen genügt. In dieser Kooperation konnte schon in wenigen Monaten durch Performanceanalyse und -verständnis eine breite Palette von Ansätzen zur Performanceportabilität auf eine überschaubare Anzahl eingeschränkt werden. Durch Methoden- und Algorithmenentwicklung, aber auch Grundlagenforschung zur Nutzung von Meta-Programmierung und der Nutzung modernster Features von C++, werden jetzt Werkzeuge zur Performanceportabilität entwickelt. Hierbei wird auch besonders berücksichtigt, dass Bachelor- oder Masterstudierende bei der Anfertigung von Abschlussarbeiten in der Gitterfeldtheorie erst durch die entstehenden Abstraktionen befähigt werden, modernste Rechnerarchitekturen zu nutzen.

Intensive Kooperationen an der Schnittmenge zwischen fach- und HPC-spezifischer Forschung sollen in Zukunft auch in anderen Fachbereichen aufgebaut und gepflegt werden. Die Beispiele für fachspezifische Intensivberatungen innerhalb des Kompetenznetzwerks dienen als wertvolle Vorlage und der durch HPC.NRW bereitgestellte personelle Zuwachs trägt wesentlich dazu bei, die notwendigen Rahmenbedingungen zu schaffen.

Dortmund: An der Technischen Universität Dortmund wurde in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Mathematik im Rahmen des Studiums von Finite-Elementen-Methoden eine Lösung gefunden, die es Nutzenden ermöglicht, sehr große Jobs auf dem Cluster auszuführen. Die Ausführung solcher Jobs ist in der Regel mit einer langen Wartezeit verbunden (in diesem konkreten Fall waren es mehrere Monate) und durch das vorhergehende Leerlaufen des Clusters wird die Gesamtauslastung reduziert. Diese Problematik wurde nun so gelöst, dass diese großen Jobs im Anschluss an eine Downtime oder eine Wartung des gesamten Clusters durchgeführt werden. Hierzu wurde eine spezielle Partition erstellt, die nach der Wartung ausgeführt wird. Technisch sehr interessant ist, dass alle unterschiedlichen Teilsysteme des Clusters in der Partition enthalten sind und so auch heterogene Anwendungsfälle untersucht werden können, z. B. Grobgitterlöser für Mehrgitterverfahren, die dazu führen, dass wenige Ranks sehr viel Speicher benötigen und auf den entsprechenden Knoten ausgeführt werden, während andere Teile der Rechnung auf anderen Teilen des Clusters laufen. Ein angenehmer Nebeneffekt ist, dass diese großen Jobs auch einen Stresstest für das Netzwerk des Clusters bedeuten und somit auch Hinweise auf aus den Wartungsarbeiten resultierende Probleme liefern können.

Ein weiteres Beispiel geht zurück auf eine Kontaktaufnahme einer Studentin aus dem Institut für Schulentwicklungsforschung der Fakultät Erziehungswissenschaft, Psychologie und Soziologie im November 2019 mit dem HPC-Support zu allgemeinen Fragen zur HPC-Nutzung. Der erste

Austausch ergab, dass diese Nutzerin aus einem sehr HPC-fernen Bereich kommt und im Zuge einer Bachelorarbeit statistische Auswertungen auf dem Cluster durchführen wollte. Um dies zu ermöglichen, wurde die Studentin individuell in die Nutzung eines HPC-Clusters eingeführt, im Laufe der Berechnungen bei der Optimierung ihrer Auswertung betreut und konnte so die anvisierte Analyse erfolgreich durchführen. Eine Intensivberatung dieser Art und in diesem Umfang wäre ohne die zusätzlichen, durch HPC.NRW ermöglichten, Beratungskapazitäten nicht denkbar gewesen.

Duisburg-Essen: Das aktuelle, zentrale HPC-System magnitUDE (HPC2) der Universität Duisburg-Essen (UDE) soll im Jahr 2021 durch ein weiteres HPC-System (HPC3) ergänzt werden. Im Rahmen der Erstellung des zugehörigen Antrags für Forschungs Großgeräte nach Art. 91b GG wurde in vielerlei Hinsicht beraten. Ein besonders spannendes und auch aktuelles Thema ist dabei eine komplexe Technologieberatung zum Thema Kühlung. In den aktuell vorhandenen Serverräumen der UDE kann u. a. aus Platzgründen, Energieversorgung und Klimatisierung kein weiteres HPC-System aufgestellt werden. Daher wurde zeitgleich mit den Vorbereitungen für das HPC3 die Planung eines neuen Datacenters für die UDE begonnen, welches schlussendlich in Duisburg-Wedau errichtet werden wird. Dieses wird erneut, wie auch schon für das aktuelle Datacenter SZ, welches u. a. das HPC-System magnitUDE beherbergt, durch einem lokalen Dienstleister (DVV, ein Tochterunternehmen der Duisburger Energieversorger) gebaut und an die UDE vermietet.

Im Rahmen der Datacenter-Konzeption kam von der DVV die Anfrage, ob sich die UDE für das HPC-System eine Warmwasserkühlung vorstellen könnte. Ziel sollte es sein, die anfallende Abwärme für die Einspeisung in ein Nahfeld-Fernwärmenetz zu nutzen. Ein wichtiger Aspekt in dieser Überlegung ist es, dass ein für die Fernwärme interessantes Temperaturniveau erreicht wird. Daher wurde zunächst der Kontakt mit einigen Herstellern von HPC-Systemen aufgenommen, die solche Kühllösungen anbieten, um sich mit den aktuellen und zukünftig geplanten Technologien vertraut zu machen. Zeitgleich wurden auch Gespräche mit einigen Partnern aus HPC.NRW bezüglich deren Erfahrung mit Warmwasserkühlung geführt. Auf Grundlage dieser Erkenntnisse konnten die Antragstellenden aus der Wissenschaft, das UDE-Gebäudemanagement, und der externe Dienstleister dahingehend beraten werden, dass ein geeignetes Temperaturniveau nach dem Standard der American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers (ASHRAE) für die Auslegung des Datacenters festgelegt werden konnte.

Düsseldorf: An der Heinrich-Heine-Universität (HHU) Düsseldorf wurde zusammen mit einer recht neuen Professur im Rahmen eines Konsortialprojektes ein Konzept entwickelt, um Rechnungen aus dem Feld der Genom-Forschung in akzeptabler Zeit auf dem Cluster „Hilbert“ durchzuführen, ohne andere Nutzende signifikant zu benachteiligen. Es handelte sich hierbei um tausende SMP-Jobs mit jeweils 160 GB Hauptspeicherbedarf, einer Nutzung von zwanzig Prozessorkernen pro Job und Laufzeiten von bis zu vier Stunden. Aus einer ersten Abschätzung ergab sich ein voraussichtlicher Rechenzeitbedarf von ungefähr drei bis vier Wochen.

Die Arbeitsgruppe hatte sich glücklicherweise frühzeitig an den HPC-Support gewandt, wodurch das Projekt gut vorbereitet und möglichst schnell umgesetzt werden konnte. Zu diesen Vorbereitungen zählten unter anderem die Neukompilierung und das Tuning der Software speziell für die genutzte HPC-Hardware, Skalierungsmessungen, um die optimalen Parameter für jeden Job zu finden und eine Optimierung der angestrebten, effizienten *JobArrays*, um die Gesamtlaufzeit zu minimieren. Da eine schnelle Bearbeitung in diesem Falle besonders wichtig war, weil alle anderen Konsortiumsgruppen auf die Ergebnisse warteten, wurde ein neues Bonussystem eingeführt und in diesem Projekt das erste Mal getestet. Mit diesem System können HPC-Nutzende, wie diese Gruppe, ihren Jobs einen Prioritätsschub („Boost“) für das Batchsystem geben. Dadurch überholen solche Boost-Jobs andere wartende Jobs und laufen so schneller an. Abgesehen davon liegt der große Vorteil darin, dass der normale Clusterbetrieb nicht angehalten oder eingeschränkt werden muss. Andere Jobs laufen ganz normal weiter, starten nur manchmal etwas verzögert. Durch Einsatz der

Boosts dieses neuen Bonussystems fühlte sich diese Gruppe fast als „Exklusivnutzende“ des Clusters, weil alle Jobs zeitnah und damit ohne größere Verzögerungen starteten. Das Projekt konnte so in einer fantastischen Zeit von gerade mal einer Woche erfolgreich abgeschlossen werden und die Hilfestellung des HPC-Supports stieß auf regen Zuspruch. Dieses Bonussystem in Zusammenhang mit einem Accounting und einer Art Bonuswährung soll zukünftig zugunsten eines HHU-zentralen HPC-Dienstes, z. B. bei Kostenbeteiligungen oder in Berufungsverhandlungen als Ersatz für die oft gewünschten aber meist unwirtschaftlichen exklusiven kleinen Clusterlösungen, dienen.

Köln: Am Regionalen Rechenzentrum der Universität zu Köln (RRZK) wurde zusammen mit einer Gruppe aus der Onkologie in der Vergangenheit das Werkzeug SClust entwickelt, welches einen alternativen Ansatz zur Bestimmung von subclonalen Populationen in Tumorzellen bietet. Dies ist von besonderer Bedeutung für eine wirksame Krebstherapie. Als Beitrag und Unterstützung wurden der Code profiliert, Teile, die in R implementiert wurden, in optimierten C-Code migriert und Hotspots des Programms, die in C implementiert waren, optimiert und für SMP parallelisiert. Auf dieser Basis wurde das CaMuS-Werkzeug entwickelt, welches zur Identifikation von Mutationsprozessen in Krebszellen dient, die bestimmte Muster in den Genomen der Krebszellen hinterlassen. In der Projektlaufzeit wurden das Werkzeug im Rahmen des Supports für die Veröffentlichung systematisch vermessen und die Kundin bei der Verbesserung des Werkzeuges beraten. Die Codebasis enthält erhebliche, durch das RRZK optimierte Anteile. Das Ergebnis ist die bislang schnellste Implementierung eines solchen Werkzeuges, welches beispielsweise fünfmal schneller arbeitet als das häufig verwendete Werkzeug SigFit. Die Ergebnisse wurden zusammen mit der Kundin als Paper [11] in dem Journal Nature eingereicht, wobei die Veröffentlichung noch aussteht.

Paderborn: In Kooperation mit dem Fachbereich für Leistungselektronik und elektrische Antriebstechnik der Universität Paderborn wurde durch HPC.NRW-Mitarbeitende des Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) die komplette Parallelisierung von MATLAB überarbeitet. Durch Umgehung der nativen MATLAB-Parallelisierungsmechanismen wurden Flaschenhälse in der Verteilung der Inputdaten auf Clusternodes im Zusammenhang mit MATLAB Simulink behoben und eine nahezu optimale Skalierung erreicht. Die Verbesserung ist in Abbildung 2 gezeigt. Die genutzte Simulationssoftware kann nun auf wesentlich mehr Knoten skalieren und ist fast um einen Faktor vier schneller.

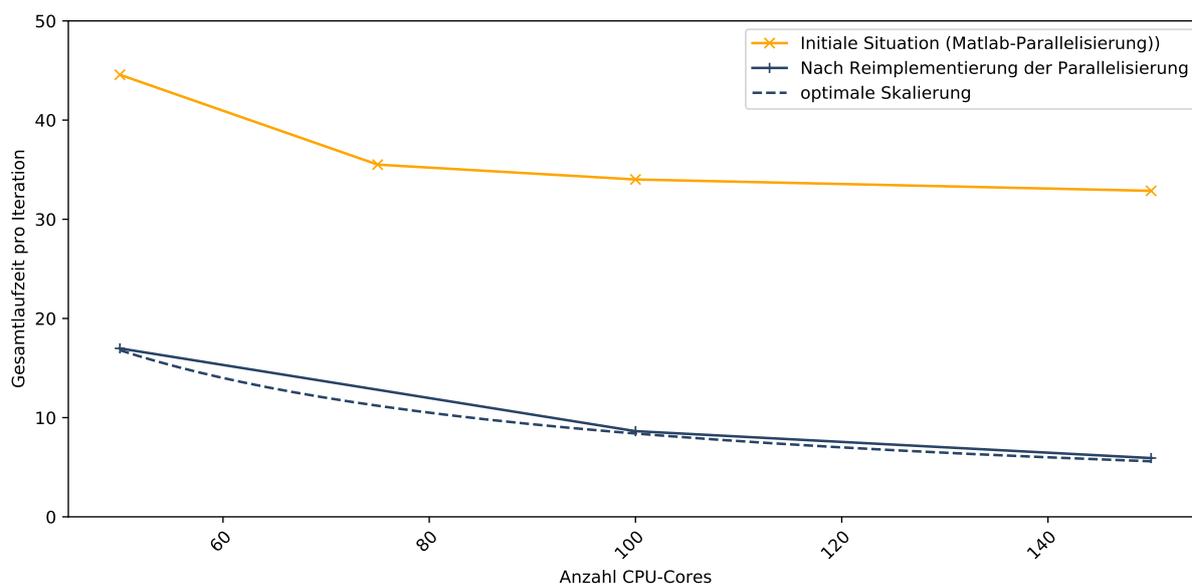


Abbildung 2: Änderung der Laufzeit durch Reimplementierung der Matlab-Parallelisierung.

Als weiteres Beispiel dient eine Zusammenarbeit mit dem Fachbereich für die Theorie funktio-

naler photonischer Strukturen der Universität Paderborn. Es wurde im Rahmen einer sehr umfangreichen Bandstrukturrechnung mit HSE-Funktionalen [12] mit VASP ein sehr hoher Speicherbedarf festgestellt, welcher schlussendlich auf ein Speicherleck in Verbindung mit spezifischen MPI-Implementationen zurückgeführt werden konnte. Das Speicherleck konnte beseitigt und die Rechnungen erfolgreich durchgeführt werden.

Ebenfalls in Paderborn wurde in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Dynamik der Kondensierten Materie von Prof. Dr. Thomas Kühne ein neuer Algorithmus zur massiv-parallelen DFT-Simulation mit CP2K (<https://www.cp2k.org/>) entwickelt und auf CPUs, GPUs und FPGAs implementiert. Dieser Beitrag wurde zur SC20 akzeptiert [13] (<https://sc20.supercomputing.org/presentation/?id=pap438&sess=sess151>) und ist bereits in die offizielle Version von CP2K eingegangen, sodass HPC.NRW-Mitarbeitende des PC² als Koautoren zu einer großen Überblickspublikation zu CP2K beitragen konnten [14].

5.2 Standortspezifische und HPC.NRW-übergreifende Maßnahmen

Der weitere Ausbau der community-spezifischen Intensivberatung ist ein klar gestecktes Ziel der HPC.NRW-Konsortialpartner. Hierfür werden an den einzelnen Standorten, aber auch über die Standorte hinaus, folgende Maßnahmen ergriffen. Mittelfristig werden anhand der dokumentierten Erkenntnisse Best-Practices definiert, um die Vermittlung zielführender Intensivberatung zu unterstützen.

Bochum: Der zentrale HPC-Rechner der Ruhr-Universität Bochum wird erst im Laufe des Jahres 2022 installiert, der momentane Beratungsaufwand beschränkt sich daher auf Machbarkeitsstudien beziehungsweise auf Prüfung der Eignung von Projekten für HPC überhaupt. Des Weiteren bestehen Nachfragen von Nutzenden nach HPC-Ressourcen und Zugangsmöglichkeiten; womit ein Bedarf nach Beratung auf verschiedenen Ebenen besteht.

Der Zugang zur HPC-Beratung wird über eine Mailingliste und ein Ticketsystem gewährleistet. Zusätzlich wird die Webseite ausgebaut und das System beworben, wenn es installiert ist. Die Heranführung von neuen Nutzenden, aber auch die Intensivberatung wird durch Sprechstunden, Workshops und Schulungen gewährleistet werden.

Bonn: Die Universität Bonn hat einen signifikanten Ausbau ihres zentralen HPC-Bereichs beschlossen. Ein zentrales HPC-System besteht an der Universität Bonn erst seit etwa Mitte 2019, die Beschaffung eines größeren Systems ist für 2021 geplant. Anfang 2020 nahm das Digital Science Center (DiCe) seine Arbeit auf, unter dessen Dach das „High Performance Computing and Analytics Lab“ (HPC/A-Lab) angesiedelt ist. Inzwischen sind zwei von vier geplanten Stellen für erfahrene wissenschaftliche Beschäftigte besetzt, für drei weitere HPC-Stellen, die im HRZ angesiedelt sind, laufen die Einstellungsverfahren.

Die Supportinfrastruktur für die zentralen HPC-Ressourcen der Universität Bonn befindet sich gegenwärtig noch im Aufbau, es konnten aber schon erste Erfahrungen und Kontakte gesammelt werden. Vorrangig besteht ein zentrales Ticketsystem, welches von den Administratoren des Clusters, den Mitgliedern des HPC/A-Labs sowie den zahlreichen HPC-Administratoren an den verschiedenen Instituten gemeinsam bedient wird. Mit Hilfe dieser Vernetzung wird sichergestellt, dass ein Bedarf nach Intensivberatung die richtigen lokalen Ansprechpersonen findet und auch an HPC.NRW eskaliert werden kann. Darüber hinaus bietet das HPC/A-Lab Sprechstunden an, womit ein niederschwelliger Zugang zu Intensivberatung gewährleistet wird. Nicht zuletzt sucht das HPC/A-Lab aktiv den Kontakt zu den Nutzenden über mehrere Mailinglisten, der Teilnahme an Projekttreffen und Workshops, zum Beispiel jenen der Exzellenzcluster der Universität Bonn, sowie die enge und frühzeitige Einbindung in Berufungsverhandlungen mit HPC-Bezug. Zusätzlich werden regelmäßige Meetings mit den HPC-Administratoren der verschiedenen Institute der Universität geführt, um den Austausch zwischen zentralen und dezentralen Ebenen zu gewährleisten. Die

Angebote des HPC/A-Labs sollen auch auf den Webseiten der Universität künftig besser beworben werden.

In Zukunft soll der Aufbau einführender Schulungen und fachspezifischer Workshops zu fortgeschrittenen Themen zu passenden Lehrangeboten für Nutzende führen. Dies soll auch den Bekanntheitsgrad der schon bestehenden Beratungsangebote steigern und durch Empfehlungen aus den Bekanntenkreisen der Nutzenden zu neuen Kooperationen führen.

Die im Abschnitt 5.1 bereits erwähnte Kooperation mit der Gruppe von Professor Carsten Urbach soll fortgeführt und ausgebaut werden, und ähnliche Kooperationen mit weiteren Fachgruppen werden angestrebt. Als Versuch, diese Art der fachspezifischen Kooperation auf der administrativen und beratenden Ebene auch innerhalb von HPC.NRW zu stärken, wird das HPC/A-Lab sich aktiv daran beteiligen, Kontakte zu anderen Standorten mit starken Gruppen in der Gitterreichfeldtheorie zu suchen, wie zum Beispiel Bielefeld, Münster und Wuppertal.

Dortmund: An der Technischen Universität Dortmund besteht eine rege Intensivberatung, es wurde aber beobachtet, dass Nutzende oft erst an den Support herantreten, wenn sie von Problemen direkt in ihrer Forschungstätigkeit eingeschränkt oder gar daran gehindert werden. In vielen Fällen stellt sich heraus, dass selbst bei „Powerusern“ erhebliches Optimierungspotential besteht und die Nutzung der zentralen HPC-Ressourcen effizienter gestaltet werden kann. Um dies zu gewährleisten, ist geplant, diese Nutzenden proaktiv anzusprechen und zu Beratungsgesprächen einzuladen.

Des Weiteren sollen in Zukunft die Nutzendengruppentreffen wiederbelebt werden, um quartalsweise Kontakt mit den Nutzenden zu halten. Diese Treffen hatten in Zeiten der Vorgängersysteme (LiDO1 und LiDO2) eine lange Tradition, wurden aber im Übergang auf das momentane System LiDO3 vernachlässigt. Die Wiederbelebung dieser Treffen soll den Kontakt zwischen Nutzendengruppen und HPC-Support stärken und es ermöglichen, dass Probleme und Bedarfe schon frühzeitig erkannt werden können.

Düsseldorf: An der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf gibt es zwar schon länger HPC-Systeme, doch waren diese bislang eher auf wenige, aber dafür gut auf HPC spezialisierte Nutzende beschränkt. Spätestens seit dem Einzug in die allgemeine Lehrtätigkeit mehrerer Institute rückt das Thema HPC schon viel früher in den Fokus von viel mehr Nutzenden. Daher soll HPC zukünftig auch zu einem redundanten Basisdienst ausgebaut werden. Jeder Student und Mitarbeiter der HHU kann sehr einfach und schnell Zugang zum HPC bekommen und zudem wird bspw. auch versucht, über JupyterHub einen besonders niederschweligen Einstieg in die Entwicklung mit Python zu ermöglichen. Andererseits ist HPC an der HHU aber mittlerweile auch zu einem unverzichtbaren Mittel für viele Forschende geworden. Dadurch ist zum einen der Bedarf an Einstiegsberatungen (oft schon für Bachelorstudiengänge) aber auch an Intensivberatungen (z. B. für große Forschungsvorhaben) enorm angestiegen. Insbesondere dieser Beratungsbedarf wird durch die neu geschaffene HPC.NRW Stelle bedient und von den Nutzenden dankend angenommen. So konnten beispielsweise schon deutlich mehr Kurse und Schulungen angeboten werden (siehe Abschnitt 4.2), als zuvor personell machbar waren - dies soll in 2021 fortgeführt und ausgebaut werden. Darüber hinaus sollen vermehrt die dortigen Anwendungen untersucht werden, um Performanceprobleme frühzeitiger erkennen und beheben zu können. Die Vielfältigkeit in den Studiengängen der HHU spiegelt sich auch in der heterogenen HPC-Architektur und den Anwendungen wider. Deswegen werden Expertenteams aus Forschenden und Mitarbeitenden des HPC-Supports für Schwerpunkte (z. B. für die Fächer Chemie oder Biologie) gebildet. Diese Expertenteams sollen für Standardprobleme aus Natur- oder Lebenswissenschaften Vorschläge erarbeiten und an konkreten Lösungen (z. B. auf Basis von KI-Ansätzen) mitwirken.

Köln: Das Regionale Rechenzentrum der Universität zu Köln bietet seit Jahren intensive Beratung für seine Nutzendenschaft an. Diese umfasst den gesamten wissenschaftlichen Workflow vom Erstgespräch über den Zugang auf die Systeme, die Auswahl optimaler Anwendungen, Abschätzung

von Rechenaufwand, Optimierung von Nutzendencodes, optimale Provisionierung und Ausgestaltung von Batchjobs und Auswahl von innovativen Rechenarchitekturen für spezielle Anforderungsprofile. Ferner werden Dokumentationen und Schulungen angeboten, die zum Teil aus dem HPC-Team, zum Teil über externe Vortragende realisiert werden. Das RRZK plant neue Schulungsaktivitäten auf Basis der Beschaffung des nächsten Großrechners. So wird das Interesse an Deep-Learning-Mechanismen zur Unterstützung der Forschungsaktivitäten zunehmend größer und bei der Beschaffung des nächsten HPC-Systems berücksichtigt. Flankierend hierzu werden Schulungen zum Themenbereich Deep-Learning angeboten werden und es sollen die über viele Jahre aufgebauten Beratungskompetenzen im Bereich der Lebenswissenschaften weiter ausgebaut werden. Das RRZK hat hierzu bereits eine neue spezialisierte Stelle besetzt. In genau diesem Themenfeld liegen zusätzliche Herausforderungen bei der vertraulichen Verarbeitung von personenbezogenen Daten. Diese umfassen beispielsweise Genome von onkologischen Proben, wie auch von seltenen Krankheiten, aus denen ein gesteigerter Sicherheitsbedarf erwächst. So ist der nächste Supercomputer explizit auf Sicherheit ausgerichtet und unterstützt verschiedene Verschlüsselungsverfahren und Sicherheitsperimeter. In der optimalen Nutzung plant das RRZK diverse Schulungen aus dem Themenbereich „Secure Computing“ und dem sicheren Umgang mit personenbezogenen Daten vor dem Hintergrund der DSGVO. In Abhängigkeit von der Prozessorarchitektur des zu beschaffenden HPC-Systems sind Schulungen zu der Nutzung der passenden Compiler, Debugger und Profiling-tools geplant.

Münster: An der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster ist geplant, ab November 2020 eine Interessensgruppe für Machine-Learning aufzubauen, bei der interessierte Nutzende in einen intensiven Austausch miteinander und mit dem Rechenzentrum gebracht werden. Ziele sind, sowohl die Nutzung der vorhandenen (GPU-basierten) Ressourcen zu erläutern, als auch Kompetenzen in der Methodenentwicklung zu verbessern und eventuelle Bedarfe an Tutorials zu ermitteln. Weiterhin sollten Nutzende angesprochen werden, deren Jobs eine suboptimale Auslastung der angeforderten Knoten zeigen um die Gesamtauslastung des Clusters zu verbessern.

Siegen: An der Universität Siegen wird erwartet, dass die Installation des neuen HPC-Clusters Ende 2020 eine größere und vielfältigere Nutzendenschaft anziehen wird. In Vorbereitung darauf wurde zunächst eine wöchentliche Sprechstunde zum wissenschaftlichen Rechnen eingeführt, die einen unkomplizierten und niederschweligen Kontakt zum HPC-Support ermöglicht. Komplementär hierzu soll das Schulungsangebot, welches sich bisher auf eine Einführung in die Nutzung von Linux und HPC-Clustern beschränkt, auch über Online-Videos und -Tutorials erweitert werden. Mit der Installation des Clusters wird zudem eine Infrastruktur zum Performance-Monitoring aufgebaut werden (mit automatisiertem Reporting und einer Online-Performance-Visualisierung), welche zur Unterstützung der Nutzendenschaft bei der Prozess-, Auslastungs- und Anwendungsoptimierung eingesetzt werden soll.

Paderborn: Das Paderborn Center for Parallel Computing der Universität Paderborn sieht vor, die schon umfangreichen Beratungs- und Lehrangebote durch gezielte Maßnahmen zu ergänzen. Hierzu wird das PC² an Einführungsveranstaltungen für neue Mitarbeitende insbesondere im wissenschaftlichen Bereichen teilnehmen, um sicherzustellen, dass neue Mitarbeitende sich der Verfügbarkeit von HPC-Ressourcen und HPC-Support von Anfang an bewusst sind.

Um genauer auf die Bedürfnisse einzelner Nutzendengruppen eingehen zu können, werden Nutzendenworkshops geplant, in denen Nutzende über ihre Software und Nutzungsszenarien berichten können. Dies gilt insbesondere für Anwendungsbereiche, in denen das PC² selbst nur über begrenzte Fachberatungskompetenz verfügt, wie zum Beispiel praktische Aspekte des Machine-Learnings. In diesem Rahmen wird überlegt, inwiefern eine NRW-weite Öffnung solcher Workshops einen wissenschaftlichen Mehrwert haben könnte.

Zusätzlich soll die Organisation fachspezifischer Workshops, wie zum Beispiel der oben genann-

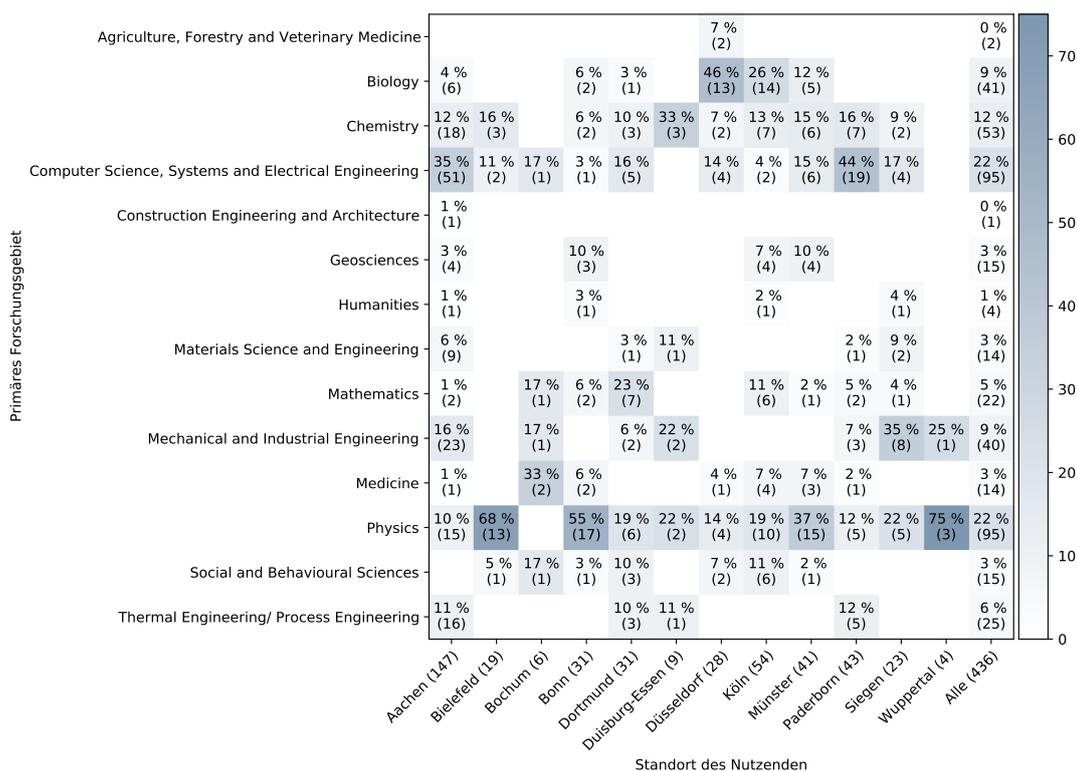


Abbildung 3: Auswertung der HPC.NRW-Nutzendenumfrage 2020 bezüglich der Zugehörigkeit zu Fachbereichen nach HPC-Standorten aufgeschlüsselt. In Klammern ist die absolute Zahl von Antworten je Standort und Fachbereich angegeben.

ten *International Winter School on Electronic Structure Calculations*, ausgebaut werden, um eine breitere Nutzendenschaft zu erreichen.

Wuppertal: An der Bergischen Universität Wuppertal bezieht sich der HPC-Support momentan hauptsächlich auf den Betrieb mit einer überschaubaren Nutzendenzahl und bereits bestehenden persönlichen Kontakten. Es wird erwartet, dass durch eine neue Beschaffung Anfang 2021 die Nutzendenschaft anwächst und Bedarf entsteht, den Support auszuweiten und zu formalisieren. Es ist geplant, dass für den HPC-Support ein eigenes Ticket System, eine HPC-Sprechstunde und ein extra Kontakt für GPU- und MPI-Entwicklungen im HPC-Kontext eingerichtet werden.

5.3 Erste Schritte zu einer impliziten und dynamischen Bildung fachspezifischer Kompetenzcluster

Die gemeinsame Dokumentation herausragender Beispiele von Intensivberatung innerhalb von HPC.NRW hilft beim Verständnis, wie einzelne Standorte die Herausforderungen in der Beratung heterogener Nutzendengruppen angehen und welche Konzepte sich im Umgang mit intensivem Beratungsbedarf bewährt haben. Die in der ersten Arbeitsphase entstandene Infrastruktur und Vernetzung fördert die standortübergreifende Zusammenarbeit innerhalb des Kompetenznetzwerks und wird in Zukunft unweigerlich dazu führen, dass auch Mitarbeitende verschiedener Standorte in die Lösung verschiedener Probleme eingebunden werden können. Die Bildung des Kompetenznetzwerks HPC.NRW hat es in vielen Fällen überhaupt erst ermöglicht, dass solche Intensivberatungen an Tier-3-Standorten angeboten werden können und die lokalen Bemühungen werden durch die Kooperation im Netzwerk optimal ergänzt. Sowohl die HPC- als auch die fachspezifischen Kernkompetenzen der Mitarbeitenden in HPC.NRW wurden tabellarisch erfasst, um bei spezifischen

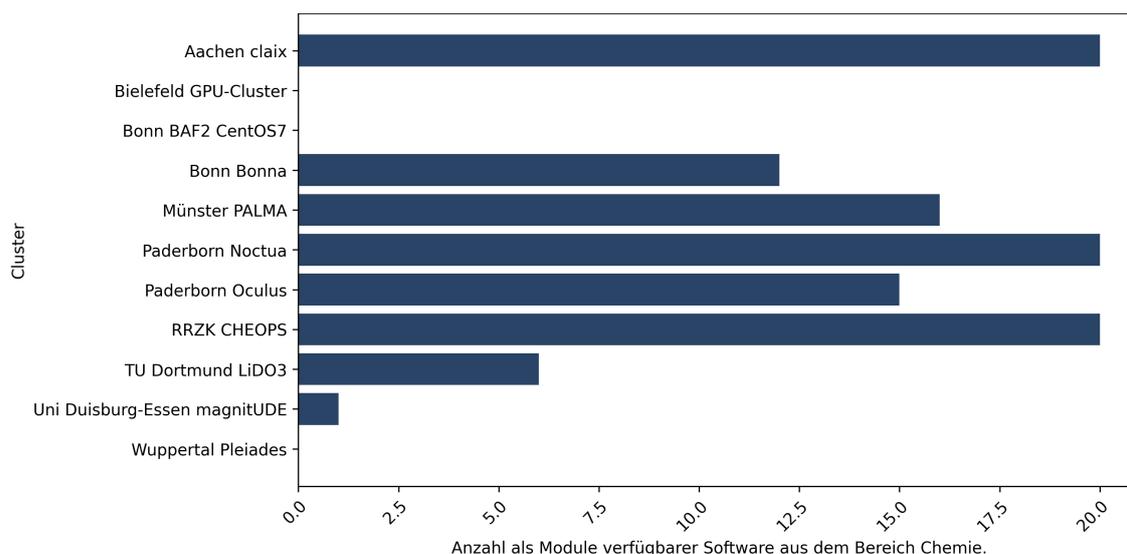


Abbildung 4: Anzahl der als Module verfügbarer Software aus dem Bereich der rechnergestützten Chemie, Festkörper- und Materialphysik nach Cluster.

Fragestellungen entsprechende Ansprechpartner identifizieren zu können.

Der Aufbau eines flächendeckenden HPC-Helpdesks hilft schon jetzt dabei, eine dynamische fachspezifische Clusterbildung zu unterstützen. Beispielhaft kann man hier auf eine Supportanfrage aus Düsseldorf verweisen, die auf einen Bug in R und dem Paket `data.table` in Verbindung mit dem Intel-Compiler hinweist. Münster und Bonn konnten dank der dortigen Erfahrung unterstützend Tests beisteuern, den betroffenen Nutzer um weiterführende Informationen bitten, sowie einen vorübergehenden Workaround vorschlagen.

Die Bestrebung einer dynamischen und impliziten Bildung standortübergreifender, fachspezifischer Kompetenzcluster wird durch die schon durchgeführte Nutzendenbefragung und geplante, zukünftige Befragungen, sowie die in AP3 durchgeführte Kartierung der eingesetzten HPC-Software maßgeblich unterstützt. So können erste Rückschlüsse auf mögliches Kollaborationspotential aus der Aufschlüsselung der Nutzendenschaft nach Fachbereichen getroffen werden, wie in Abb. 3 für alle Standorte gezeigt. In den Verteilungen finden sich Hinweise auf mögliche Cluster in der Physik, Chemie, Informatik, den Ingenieurwissenschaften, der Biologie und der Mathematik, obwohl die Datenlage – mit Rückläufen teilweise im einstelligen Bereich – noch keine festen Schlüsse zulässt. Diese wird jedoch durch gewonnene Erkenntnisse aus der Bedarfserfassung und Softwareangaben in Rechenzeitanträgen, insbesondere aber durch die Erfassung von Umgebungsmodulen bezüglich der bereitgestellten und eingesetzten HPC-Software ergänzt. Da in der Regel eine klare Teilung der Software in allgemeine und fachspezifische Bereiche möglich ist, erlaubt die Verteilung der fachspezifischen Software ebenfalls Rückschlüsse auf potentielle Cluster. Dies kann anhand von drei Beispielen verdeutlicht werden, eine vollständige Aufarbeitung für verschiedene Fachbereiche wurde zur internen Nutzung erstellt.

Rechnergestützte Chemie, Festkörper- und Materialphysik: Wie in Abb. 4 gezeigt, lässt die Verteilung der Module über Rechencluster den Schluss zu, dass mit Ausnahme von Bielefeld, Duisburg-Essen und Wuppertal, alle Standorte auf diesem Gebiet Expertise haben, eine Einschätzung die sich auch mit den Angaben der Befragten aus Abb. 3 deckt.

Geowissenschaften: Wie in Abb. 5 gezeigt, sind vor allem in Bonn, Münster, Köln und Dortmund Module der Geowissenschaften in den Modulbäumen vorhanden. Die Nutzendenbefragung und die Modulkartierung sind auch in diesem Fall vergleichbar, wobei die Geowissenschaften in Dortmund in der Befragung nicht auftauchen und sich umgekehrt in Aachen nicht in den Softwaremodulen niederschlagen.

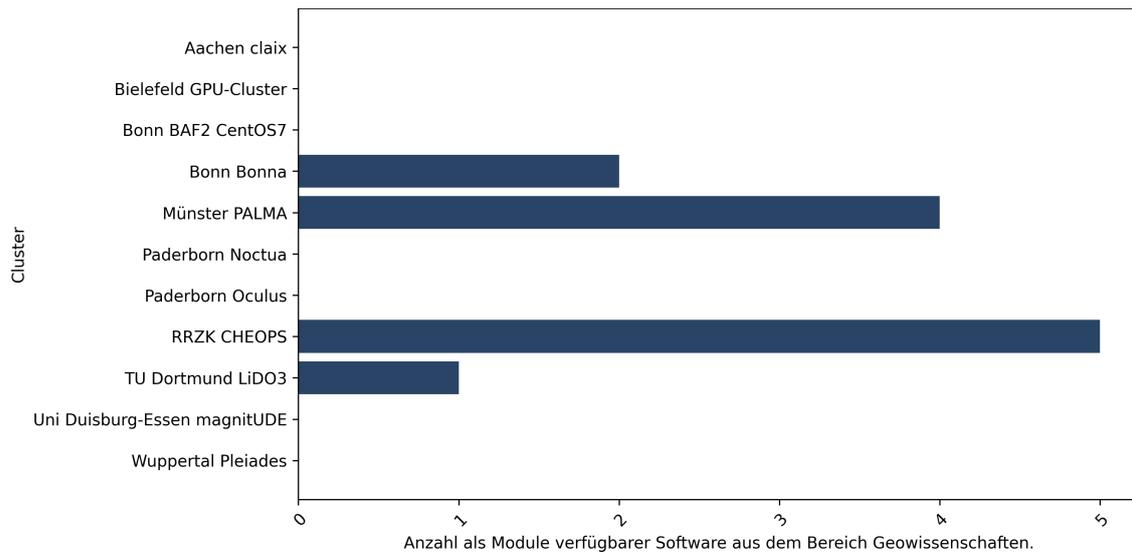


Abbildung 5: Anzahl der als Module verfügbaren Software aus dem Bereich der Geowissenschaften.

Biologie und Medizin: Wie in Abb. 6 zu sehen ist, wird besonders in Münster und Köln Software aus diesen Fachbereichen über das Modulsystem zur Verfügung gestellt. Würde man lediglich das Modulsystem zu Rate ziehen, würde Düsseldorf trotz der dortigen großen Nutzendenschaft in diesen Fachbereichen aus dem Raster fallen, da hierfür noch keine Daten vorliegen. Kombiniert man die Erkenntnisse aus Nutzendenumfrage und Modulkartierung, ergeben sich Hinweise auf eine mögliche Clusterbildung zwischen den Standorten Bochum, Düsseldorf, Köln und Münster.

6 Qualifizierte Unterstützung in der Performanceanalyse

Neben verschiedenen Community-spezifischen Beratungsangeboten, soll durch HPC.NRW auch ein flächendeckendes Angebot an Community-übergreifender Unterstützung bei der Performance- und Korrektheitsanalyse aufgebaut werden. Ein zentraler Bestandteil dessen ist die Beschaffung von landesweiten Lizenzen für verschiedene kommerzielle Softwarepakete in diesem Bereich. Solche Lizenzen konnten im Kontext von HPC.NRW für Intel Parallel Studio XE, Perforce Totalview Debugger, and ARM Forge Supercomputing verhandelt werden. Des Weiteren stehen auch Open Source Tools in diesem Kontext zur Verfügung. Im Rahmen einer Harmonisierung der Softwareumgebungen, wird somit daran gearbeitet, jedem Partner den vollen Umfang an verfügbaren Softwarelösungen zur Performance- und Korrektheitsanalyse bereitzustellen. Um neben der Software auch ein tieferes Verständnis für die eingesetzte Software aufzubauen, werden im Rahmen von HPC.NRW auch Train-the-Trainer-Workshops geplant und abgehalten. Im Oktober/November 2020 wurde zum Beispiel ein zweitägiger Train-the-Trainer-Workshop zum parallelen Debugger Totalview durchgeführt. Dabei wurden im HPC-Support tätige Mitarbeitende von HPC.NRW-Standorten von Experten und Entwicklern von Totalview in die Nutzung des Werkzeugs eingeführt und auf die Weitervermittlung dieser Kenntnisse in eigenen Schulungen vorbereitet.

Der von HPC.NRW und der Universität Siegen organisierte und von einem sehr erfahrenen externen Vortragenden gestaltete 5-tägige C++-Kurs für Anfänger, richtete sich an erfahrene Programmierer, die Einblicke in eine neue Programmiersprache gewinnen wollten. Es ging insbesondere darum, modernes C++ zu lehren, wie es heute üblicherweise in der Praxis genutzt wird. Neben dem hohen Wert für die Nutzenden, war dieser Kurs aber auch für potentielle Vortragende sehr wertvoll. Er enthielt implizit viele Anregungen und Hinweise für die Gestaltung eigener Kurse zum Thema, sodass er auch den Zweck eines Train-the-Trainer indirekt erfüllte.

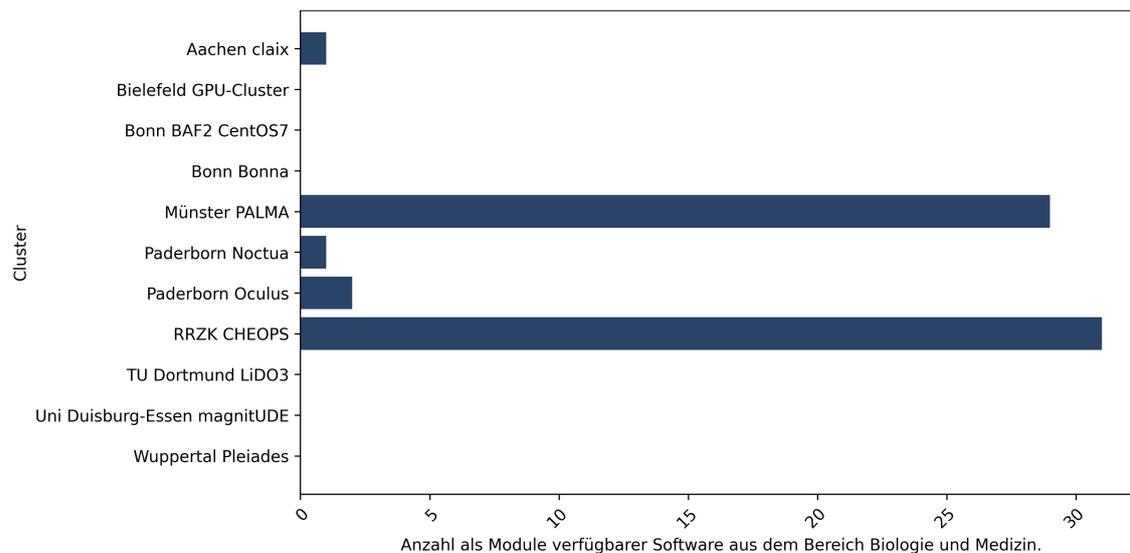


Abbildung 6: Anzahl der als Module verfügbaren Software aus dem Bereich der Biologie und Medizin.

Ziel ist es, das Wissen innerhalb des HPC.NRW Kompetenznetzwerks auszubauen, um mittelfristig weitere HPC.NRW-Trainer und HPC-Anwender in NRW - z. B. in der Nutzung des TotalView Debuggers - zu schulen und somit ihre Methodenkompetenz auszubauen. Bedingt durch die in 2020 eingeführten Kontaktbeschränkungen durch die SARS-CoV-2/COVID-19 Pandemie, entwickelt sich im Rahmen der Online-Tutorials auch ein langfristig funktionierendes Kurskonzept. Das sehr erfolgreiche Kurskonzept der aiXcelerate am Standort Aachen, welches als Präsenzveranstaltungen mit ausgeprägtem Anwendungsanteil angelegt ist, wird hierfür weiterentwickelt. Klassische Themen der aiXcelerate sind hier die Werkzeuge des Intel Parallel Studio XE, welches auch im Rahmen der zentralen Softwarebeschaffung für alle Partner lizenziert wurde. In 2019 kamen noch weitere Werkzeuge aus dem Bereich des VI-HPS hinzu, um den Software-Teams ein möglichst breites Spektrum an Werkzeugen für die Arbeit an ihrer Software zu bieten. Die Werkzeuge des Intel Parallel Studio XE wurden hier von Mitarbeitenden des Intel Kollegiums präsentiert und die Experten blieben über den Zeitraum des gesamten Workshops für Fragestellungen und Problembearbeitungen bei der Analyse verfügbar. Im klassischen aiXcelerate-Konzept wird eine begrenzte Anzahl an Software-Teams eingeladen bzw. ausgewählt, mit ihrer Software an dem Workshop teilzunehmen. Jedem Software-Team wird dann für den Zeitraum des Workshops ein Tutor zugeordnet, um die in den Workshop-Präsentationen gelernten Inhalte auf der eigenen Software anzuwenden. Ähnlich der seit langen Jahren erfolgreichen VI-HPS Tuning Workshops [15] wird bei der aiXcelerate viel Zeit für die Arbeit an der eigenen Software eingeplant, denn der Übergang bei der Anwendung der präsentierten Werkzeuge von vorbereiteten Beispielen auf die eigene, teils viel komplexere Software, ist ein kritischer Aspekt für die Akzeptanz und Übernahme der vorgestellten Werkzeuge in den Entwicklungsalltag der Software-Teams nach dem Workshop. Hier arbeiten die Tutorierenden eng mit den Software-Teams zusammen, um meist schon während des Workshops Erfolge in der Analyse vorzuweisen und gegebenenfalls leistungsrelevante Änderungen an der Software durchzuführen. Aus der Erfahrung vergangener Workshops bleiben einzelne Software-Teams auch nach dem Workshop weiterhin in Kontakt mit ihren Tutorierenden, um angefangene Fragestellungen aus dem Workshop zu Ende zu führen oder aber auch, um neue Fragestellungen in der weiteren Entwicklung abzuklären.

In ähnlichen Kontext wurden für einen mehrtägigen „Cray Optimization Workshop“ in 2019 Nutzende des Paderborner HPC-Systems Noctua und Experten der Firma Cray eingeladen. Die Nutzenden wurden dort mit den Möglichkeiten der Performance-Analyse mit CrayPAT [16] vertraut gemacht. Sie brachten auch eigene Codes (u.a. QuantumEspresso und CP2K) mit vorbereiteten

Inputs mit zu dem Workshop, wo diese zusammen mit Mitarbeitenden des PC² und Experten von Cray, mithilfe der Cray-Tools, analysiert und optimiert wurden. Auch dieser Workshop setzt auf den Wert der direkten Umsetzung von Lerninhalten in die Praxis im Kontext eines HPC-Systems.

7 Bereitstellung von integrierten Profiling- und Performance-Monitoring-Tools

Im allgemeinen HPC-Support, der Community-spezifischen Intensivberatung und insbesondere der Performanceanalyse, sind Werkzeuge für das Profiling und die Performanceuntersuchung essentiell notwendig. Diese Werkzeuge können grob in zwei Kategorien aufgeteilt werden: Auf der einen Seite sind dies Profiling- und Debugging-Tools, die anlassbezogen und für einen begrenzten Zeitraum verwendet werden. Auf der anderen Seite zählen auch Monitoringmechanismen im Sinne eines Job-spezifischen Monitorings dazu, die auf einem Clustersystem kontinuierlich Daten sammeln.

Für die Bereitstellung von Werkzeugen aus beiden Kategorien ist eine enge Zusammenarbeit des HPC-Supports, der Intensivberatung und des Rechnerbetriebs notwendig. Viele Werkzeuge für anlassbezogene Performanceuntersuchungen sind als Open Source oder kostenfrei verfügbar, zum Beispiel Gprof, Score-P, Scalasca, Valgrind und Tau. Jedoch auch kommerzielle Softwarepakete wie Tools aus Intel Parallel Studio XE (VTune Profiler, Advisor), ARM Software (MAP, Performance Reports), PGI Profiler oder Vampir sind für die verschiedenen Anforderungen der Performanceanalyse oft unumgänglich. Deshalb wird der flächendeckenden Verfügbarmachung dieser Pakete in den Softwareanschaffungen im Projekt HPC.NRW eine Priorität eingeräumt und Anwender werden bei der Nutzung unterstützt. Landeslizenzen für Intel Parallel Studio XE und ARM Software konnten schon über das Projekt erfolgreich abgeschlossen und finanziert werden.

Neben der anlassbezogenen und fokussierten Performanceuntersuchung für Programme ist auch das kontinuierliche Performance-Monitoring eines HPC-Systems und insbesondere das Job-spezifische Performance-Monitoring in seiner Wichtigkeit nicht zu unterschätzen. Eine geeignete Überwachung kann zum einen direkt sehr viele Arten von pathologischen Jobs aufdecken und identifizieren und zum anderen wertvolle Hinweise zur Verbesserung der Jobausführung oder von Anwendungen selbst liefern. Im Gegensatz zur anlassbezogenen Performanceuntersuchung gibt es zum Job-spezifischen Monitoring noch keine etablierten Pakete, da diese in die restliche Clusterinfrastruktur und das Betriebskonzept integriert sein müssen. Im Rahmen der DFG-Projekte „Performance Engineering für wissenschaftliche Software“ (Januar 2017 bis Dezember 2019) wurden zahlreiche Ansätze für integrierte Systeme für Job-spezifisches Monitoring evaluiert und entwickelt. Im Projekt HPC.NRW wird direkt auf diesen Erfahrungen aufgebaut und ein direkter Austausch mit den (ehemaligen) Projekten gesucht. Direkte Austausche zu diesen Thema wurden vom Projekt HPC.NRW bereits mit dem Jülich Supercomputing Centre (JSC) über das dort entwickelte und genutzte LLview [17] sowie mit dem Regionalen Rechenzentrum Erlangen (RRZE) über das dort entwickelte ClusterCockpit [18] durchgeführt. Insbesondere im Bereich der Definition und Dokumentation von erhobenen Metriken hat sich dabei ein wichtiger Kooperationsbereich gezeigt, der in Zukunft vertieft wird.

Zur zielgerichteten flächendeckenden Etablierung eines job-spezifischen Monitoring-Systems an möglichst allen Standorten in NRW sind zuerst die Anforderungen an ein solches System formuliert worden. Danach wurden die bei einigen Partnern wie Aachen, Bielefeld, Bonn, Düsseldorf, Köln und Paderborn schon existierenden Lösungen in Bezug auf diese Anforderungen analysiert, insbesondere auf die Integrierbarkeit in existierende HPC-Umgebungen. Die vorhandenen Lösungen stellten sich als sehr unterschiedlich in ihrem Konzept, technischer Umsetzung und Leistungsfähigkeit heraus und keines war ein direkter Kandidat für die landesweite Nutzung.

Als Umsetzung eines flächendeckend nutzbaren Systems bietet sich ein modulares Konzept mit klar definierten Interfaces an. Die Hauptmodule sind dabei:

Datenerhebung durch Kollektoren: Hierfür bieten sich kleine Skripte oder Programme an, die von der betreffenden Komponenten wie Rechenknoten, Speichersystem oder Interconnect

Daten periodisch erheben und an eine Datenbank senden. Durch eine geeignete Schnittstellendefinition können die Kollektoren leicht modifiziert oder erweitert werden. Hier muss insbesondere eine Leistungsbeeinträchtigung der eigentlichen Nutzendenjobs vermieden werden.

Datenbank: Zur zentralen Datensammlung ist eine Datenbank oder ähnliche Struktur unvermeidlich. Hier muss jedoch auch ein Augenmerk auf Skalierbarkeit, Konfigurationsaufwand und Wartbarkeit gelegt werden. Auch Umsetzungsmöglichkeiten, bei denen keine zentrale Datenbank sondern das parallele Dateisystem des Clusters mit einem geeigneten Dateiformat zur Datenspeicherung genutzt wird, werden hier mit einbezogen.

Visualisierung: Eine moderne, responsive und flexible Visualisierung per Webbrowser ist notwendig, um die Daten direkt sowie aggregiert in Statistiken darstellen zu können. Dabei können direkt hilfreiche HPC-spezifische Darstellungen wie Roofline-Modelle mit angezeigt werden. Eine API zum Export der erhobenen Daten für einen Job ist notwendig, um den Nutzenden eigene Analysen der Daten zu ermöglichen.

Empfehlungssystem: Ein automatisiertes Empfehlungssystem ist notwendig, um unter hunderttausenden Jobs automatisiert und effizient pathologische oder problematische Jobs zu identifizieren und somit auch eine Filterfunktion für den HPC-Support bereitzustellen. Die Empfehlungen sollen regelbasiert formuliert werden und direkt Links auf passende Hilfsdokumente enthalten, die Wege erklären, um die Aspekte weiter zu untersuchen oder zu beheben.

Anbindung an Scheduler: Eine geeignete Anbindung an den Scheduler ist notwendig, um Daten über Jobs abrufen zu können. Des Weiteren kann dadurch eine Deaktivierung des Job-Monitoring für einzelne Jobs durch Argumente bei der Job-Submission realisiert werden und auch das Job-Monitoring zum Beispiel in Bezug auf zeitliche Granularität oder Aktivierung von zusätzlichen Metriken vom Nutzenden für einzelne Jobs konfiguriert werden. Die Scheduler-Anbindung beinhaltet auch Funktionalitäten, um automatisierte Auswertungen und Empfehlungen dem Nutzenden direkt in das Arbeitsverzeichnis des Jobs (z.B. als `slurm-JOBID.recommendation`) bereitzustellen oder per E-Mail zukommen zu lassen.

Die modulare Struktur erlaubt es existierende Komponenten, wo sinnvoll, zu integrieren. Zur Umsetzung des Vorhabens wurde im Projekt eine Roadmap entwickelt, die grob drei Schritte umfasst:

1. **Datensammlung und einfache Visualisierung** als ersten Schritt beinhaltet die Sammlung von existierenden Kollektoren, die Definition eines gemeinsamen Satzes von Metriken/Kollektoren sowie deren Dokumentation, eine Installationsanleitung für die Datensammlung mit einer Zeitreihendatenbank und eine einfache Visualisierung für die Nutzung durch den HPC-Support.
2. **Automatisierte Empfehlungen** für HPC-Support und Nutzende wurden als essentieller Teil eines Systems zum Job-spezifischen Monitorings identifiziert und deshalb gegenüber der Visualisierung für Nutzende priorisiert. Es werden geeignete Erkennungsregeln definiert und ein Dienst zu Evaluierung umgesetzt. Dieser Schritt enthält auch die direkte Scheduler-Integration und die Zustellung der Empfehlungen an Nutzende und HPC-Support.
3. **Visualisierung für Nutzende** ist der technisch herausforderndste Teil, durch Sicherheits- und Komfortanforderungen, die umgesetzt werden müssen. Hier ist das Ziel eine moderne, reaktionsschnelle und flexible Visualisierung per Webbrowser.

Die Umsetzung der Datensammlung und Visualisierung für den Support wird bis etwa Frühjahr 2021 erwartet und die Auswertung von automatisierten Empfehlungen bis Sommer 2021. Dabei ist vor allem eine Kombination von existierenden Komponenten geplant, wie den schon existierenden Kollektoren und Erfahrungen mit Zeitreihendatenbanken sowie zum Beispiel dem Empfehlungssystem für Job-spezifisches Monitoring, das in Paderborn entwickelt worden ist.

8 Heranführung von neuen Nutzendenkreisen an HPC-Nutzung in Ebene 3

Einer der Kernpunkte von HPC.NRW ist die Heranführung neuer Nutzendengruppen an das Hochleistungsrechnen. Dies geschieht vorzugsweise an den Standorten der Ebene 3, da hier die Einstiegshürde, was den Zugang zu HPC-Ressourcen betrifft, geringer ausfällt.

Um unerfahrenen Nutzenden, die studiumsbedingt bisher nicht mit Themen wie der Nutzung von Linux oder dem Erstellen von Code in Berührung gekommen sind, den Einstieg zu erleichtern, wurden verschiedene Maßnahmen ergriffen. Als erstes sei hier, wie zuvor bereits erwähnt, die Erstellung von **Online-Tutorials** genannt. Besonders für Neulinge stellt der sichere Umgang mit Linux und der Kommandozeile zur Manipulation von Rechnungen und Daten anfangs eine große Hürde dar. Daher wurde ein *Linux Introduction for HPC*-Tutorial erstellt, welches eine komplette Einführung in Linux im HPC-Kontext darstellt. Dies geschieht mithilfe von erklärenden Texten, interaktiven Übungen und selbst erstellten Begleitvideos, die über das **HPC-Wiki** öffentlich zur Verfügung gestellt werden. Um auch neue Nutzende für den effizienten Umgang mit HPC-Ressourcen zu sensibilisieren, entstand außerdem ein Einstiegstutorial zum Performance-Profiling mit Gprof. Zudem werden nun lokale HPC-Schulungen und -Workshops, welche offen für externe Besucher sind, an allen beteiligten Hochschulen publik gemacht und Nutzende dazu eingeladen, an **Schulungen** anderer Standorte teilzunehmen.

Weiterhin ist es gelungen, neue Nutzende durch die erstmalige Einrichtung von offenen **HPC-Sprechstunden und HPC-Einführungsveranstaltungen** (vor Ort und digital) zu gewinnen und kompetent zu beraten. So konnte beispielsweise in Siegen eine wöchentliche Sprechstunde zum wissenschaftlichen Rechnen eingeführt werden. Damit haben auch Forschende, die bisher noch nicht auf dem Cluster arbeiten, eine erste Anlaufstelle, um sich über Methoden und Ressourcen zu informieren. Zusätzlich dient die Sprechstunde der Kontaktpflege, wodurch die Bedürfnisse und Probleme der Forschenden überhaupt erst erkannt werden können. So wurde, aufgrund der Gespräche im Rahmen der Sprechstunde, ein Jupyter-Konzept erarbeitet, welches derzeit umgesetzt wird. Das Ausführen von Jupyter-Notebooks war bisher nicht auf dem Cluster vorgesehen, sodass erst durch die Sprechstunde der Bedarf erfasst wurde. Zudem stehen nun Ressourcen für die Betreuung der Webseite, Implementierung von Anleitungen (Best-Practice-Guides/Tutorials/Schulungen) und natürlich für Intensivberatungen zur Verfügung, wodurch die Schwelle zur Clusternutzung enorm reduziert ist.

Um den Zugang zu HPC-Ressourcen für Nutzende *ohne* lokales HPC-System zu vereinfachen, wurde eine funktionale Adresse als einheitliche Anlaufstelle eingerichtet. Unter **helpdesk@hpc.nrw** können so beispielsweise nun auch Mitglieder der Fachhochschulen Hilfe erhalten.

Als einheitlicher Anlaufpunkt für die Beantragung von Rechenzeit auf den verschiedenen Systemen wurden sog. **Quick-Reference-Cards** (QRCs) für viele Standorte erstellt. Diese Informationsblätter geben Auskunft über den jeweiligen Antragsprozess und sind mit standortspezifischen Kontaktadressen und weiteren Hinweisen versehen. Die QRCs findet man auf der Webseite von HPC.NRW sowie beim jeweiligen Rechenzentrum. Die standortspezifischen QRCs werden von einer standortübergreifenden QRC ergänzt, die neuen Nutzenden bei der Orientierung und Auswahl passender Rechnersysteme behilflich ist.

Um die Sichtbarkeit von HPC.NRW zu erhöhen und die Möglichkeiten der einzelnen Rechenzentren besser zu kommunizieren, wurden **weitere Kontaktpunkte**, wie z. B. Berufungsverhandlungen, Fachgruppentreffen, Messen, Workshops und Mailverteiler identifiziert, die künftig zusätzlich in den Informationsfluss eingebunden werden sollen.

9 NRW-weite Nutzendenbefragung

High-Performance Computing (HPC) gewinnt im Bereich Forschung und Entwicklung immer mehr an Bedeutung. Im Rahmen des Projektes HPC.NRW wurde daher eine HPC-Nutzendenumfrage

entwickelt und vom 01.06.2020 bis zum 03.07.2020 an allen HPC.NRW-Standorten durchgeführt. Ziel war es, den Bedarf für HPC-Support, HPC-Software oder HPC-Anwenderschulungen in NRW zu erfassen. Auf Basis der Ergebnisse sollen zukünftig Support, Software, Tools und Schulungen an die Bedürfnisse der Nutzenden angepasst und optimiert sowie Barrieren bezüglich der Nutzung von HPC-Ressourcen abgebaut werden. Zielgruppe der Umfrage waren alle Nutzende der am Projekt beteiligten Rechenzentren.

An der Umfrage nahmen insgesamt 456 Personen teil, wobei die Nutzenden in Aachen (147), Köln (54), Paderborn (43) und Münster (41) den größten Anteil ausmachten. Was die Forschungsgebiete betrifft, war Physik mit 106 Antworten führend, gefolgt von Informatik, System- und Elektrotechnik (101), Chemie (55), Biologie (42) und Maschinenbau & Wirtschaftsingenieurwesen (40).

Beispielhaft sollen hier ein paar wenige, aber relevante Zahlen, insbesondere für das Arbeitspaket 2, angegeben werden. So beeindruckt z. B. schon die Relevanz von HPC in der Forschung. Rund 74% aller Nutzenden gaben an, dass HPC von größter Wichtigkeit für ihre Arbeit sei, und weitere 20% sehen im HPC eine wichtige Unterstützung ihrer Forschung. In der Lehre ist das Thema allerdings noch nicht sehr verbreitet: knapp 90% aller Befragten gaben an, dass das Thema HPC in diesem Bereich (noch) keine oder nur eine untergeordnete Rolle spielt. Etwas mehr als die Hälfte der Befragten (242) hat innerhalb der letzten 18 Monate bereits eine Publikation mit Hilfe eines HPC-Clusters erreicht. Gut 2/3 der Befragten (310) gaben an, dass eine solche Veröffentlichung derzeit in Vorbereitung ist oder sich bereits in einem Review-Prozess befindet. Etwa 26% der Nutzenden wünschen sich einen Ausbau des Supports, vom derzeitigen Support Gebrauch machten immerhin schon 65% aller Befragten. Die häufigsten Gründe, den Support zu kontaktieren, sind Fragen zur Job Submittierung (32%), anwendungsspezifische Probleme (31%) und Fragen zum Cluster-Zugang (31%), gefolgt von Problemen mit Daten oder dem Dateisystem (23%) und Schwierigkeiten beim Kompilieren (22%). Die Auswertung der Freitextantworten ergab, dass neben dem Wunsch nach mehreren generellen Support-Ressourcen, der Wunsch nach HPC-Ansprechpersonen in den Fachbereichen existiert und dass der Support den Kontakt zu den Nutzenden suchen könne, da die Hemmschwelle, den Support zu kontaktieren, seitens der Nutzenden doch generell recht hoch ist. 80% der Befragten sind grundsätzlich an einer Schulung interessiert, einen Ausbau des Schulungsangebotes wünschen sich 55%, davon 30% allgemeine Schulungen und 25% auf fortgeschrittenem Niveau. Als beliebte Basis-Themen wurden Einführungen ins Profiling/HPC Code-Optimierung (52%), effiziente Datenspeicherung (39%), Software Container (39%) und Debugging (34%) angegeben. Bei den fortgeschrittenen Kursen gaben die Befragten an, dass Techniken zur Code-Optimierung (54%), zum parallelen Debugging (48%), zu Compilern und Bibliotheken (45%) sowie zum parallelen Profiling (44%) vorrangig interessant sind. Allerdings wird auch ersichtlich, dass 34% der Nutzenden, z.B. aus Mangel an Informationen über angebotene Kurse oder wegen fehlender Kurse an sich, noch gar keine HPC-Veranstaltungen besucht haben.

Eine ausführliche Auswertung der HPC.NRW Nutzendenbefragung befindet sich in einem separaten Dokument unter <https://hpc.dh.nrw/nutzerbefragung-1>.

A Referenzen

- [1] GAUSS-ALLIANZ. HPC in Deutschland: Technologie und Wissenstransfer. URL <https://www.gauss-allianz.de/>.
- [2] OTRS AG. OTRS: A smart, agile, safe communication platform. URL <https://otrs.com/product-otrs/>.
- [3] GAUSS-ALLIANZ. Kollaborativer ServiceDesk für das nationale HPC in Deutschland. URL <https://servicedesk.gauss-allianz.de/>.
- [4] PROPE PROJECT. ProPE: Process-Oriented Performance Engineering. URL <https://blogs.fau.de/prope/>.
- [5] CREATIVE COMMONS. CC-BY-SA: Attribution-ShareAlike 4.0 International. URL <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>.
- [6] PROPE PROJEKT. HPC-Wik: The source for site-independent HPC information. URL <https://hpc-wiki.info/>.
- [7] P. RÜSSMANN, F. BERTOLDO, and S. BÜGEL. DFT made in Jülich. URL <https://jukkr.fz-juelich.de/>.
- [8] P. RÜSSMANN, F. BERTOLDO, and S. BLÜGEL. The AiiDA-KKR plugin and its application to high-throughput impurity embedding into a topological insulator, 2020. [arXiv:2003.08315](https://arxiv.org/abs/2003.08315) [cond-mat.mtrl-sci].
- [9] A. TCAKAEV, V. B. ZABOLOTNYY, C. FORNARI, P. RÜSSMANN, F. STIER, M. DETTBARN, T. R. F. PEIXOTO, E. WESCHKE, E. SCHIERLE, P. BENCOK, P. H. O. RAPPL, E. ABRAMOF, H. BENTMANN, E. GOERING, F. REINERT, and V. HINKOV. Incipient antiferromagnetism in the Eu-doped topological insulator. *submitted*, 2020.
- [10] A. KOSMA, P. RÜSSMANN, S. BLÜGEL, and P. MAVROPOULOS. Strong Spin-Orbit Torque effect on magnetic defects due to topological surface state electrons in Bi₂Te₃, 2020. [arXiv:2006.14555](https://arxiv.org/abs/2006.14555) [cond-mat.mtrl-sci].
- [11] M. CARTOLANO, N. ABEDPOUR, V. ACHTER, T.-P. YANG, S. ACKERMANN, M. FISCHER, and M. PEIFER. CaMuS: simultaneous fitting and de novo imputation of cancer mutational signature. *Nature*, 2020 (submitted for publication).
- [12] J. HEYD, G. E. SCUSERIA, and M. ERNZERHOF. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *The Journal of Chemical Physics*, 118(18):8207–8215, 2003. URL <https://doi.org/10.1063/1.1564060>. <https://doi.org/10.1063/1.1564060>.
- [13] M. LASS, R. SCHADE, T. D. KÜHNE, and C. PLESSL. A Submatrix-Based Method for Approximate Matrix Function Evaluation in the Quantum Chemistry Code CP2K, 2020. [arXiv:2004.10811](https://arxiv.org/abs/2004.10811) [physics.comp-ph].
- [14] T. D. KÜHNE, M. IANNUZZI, M. DEL BEN, V. V. RYBKIN, P. SEEWALD, F. STEIN, T. LAINO, R. Z. KHALIULLIN, O. SCHÜTT, F. SCHIFFMANN, D. GOLZE, J. WILHELM, S. CHULKOV, M. H. BANI-HASHEMIAN, V. WEBER, U. BORŠTNIK, M. TAILLEFUMIER, A. S. JAKOBOVITS, A. LAZZARO, H. PABST, T. MÜLLER, R. SCHADE, M. GUIDON, S. ANDERMATT, N. HOLMBERG, G. K. SCHENTER, A. HEHN, A. BUSSY, F. BELLEFLAMME, G. TABACCHI,

- A. GLÖSS, M. LASS, I. BETHUNE, C. J. MUNDY, C. PLESSL, M. WATKINS, J. VANDEVONDELE, M. KRACK, and J. HUTTER. CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package - Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 152(19):194,103, 2020. URL <https://doi.org/10.1063/5.0007045>. <https://doi.org/10.1063/5.0007045>.
- [15] VI-HPS. VI-HPS Tuning Workshops. URL <https://www.vi-hps.org/training/tws>.
- [16] P. C. FOR PARALLEL COMPUTING. Cray Optimization Workshop 2019. URL <https://pc2.uni-paderborn.de/de/teaching/trainings/hpc-user-trainings/specialized-courses/cray-optimization-workshop-2019>.
- [17] JÜLICH SUPERCOMPUTING CENTRE (JSC). LLview: Graphical monitoring of batch system controlled cluster. URL https://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Expertise/Support/Software/LLview/_node.html.
- [18] REGIONALES RECHENZENTRUM ERLANGEN (RRZE). ClusterCockpit. URL (<https://github.com/ClusterCockpit/ClusterCockpit>).

B Veröffentlichungen mit Unterstützung von HPC.NRW

B.1 Erfassungsmodus

Je nach an den Standorten verfügbaren Informationen sind entweder die mit Unterstützung des Kompetenznetzwerkes entstandenen Veröffentlichungen oder alternativ alle mit Hilfe des dortigen Clustersystems entstandenen Veröffentlichungen aufgelistet:

- Standorte, an denen die Unterstützungsleistungen des Kompetenznetzwerkes explizit getrackt wurden und die nur jene Publikationen listen, die mit dieser Unterstützung entstanden sind: RWTH Aachen, HHU Düsseldorf, Universität Paderborn, Universität Bielefeld, Universität Köln
- Standorte, an denen die Unterstützungsleistungen des Kompetenznetzwerkes nicht explizit getrackt wurden und alle entstandenen Publikationen listen: Universität Bonn, Universität Duisburg-Essen, Universität Münster, Universität Wuppertal, Universität Dortmund, Universität Siegen
- Standorte ohne Publikationen: Ruhr-Universität Bochum (noch kein zentrales Clustersystem vorhanden)

B.2 RWTH Aachen

1. A. DRICHEL, U. MEYER, S. SCHÜPPEN, and D. TEUBERT. Analyzing the real-world applicability of DGA classifiers. In *Proceedings of the 15th International Conference on Availability, Reliability and Security*. ACM, July 2020. URL <https://doi.org/10.1145/3407023.3407030>.
2. K. PAUL, C. ZIMMERMANN, T. X. DUONG, and R. A. SAUER. Isogeometric continuity constraints for multi-patch shells governed by fourth-order deformation and phase field models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 370:113,219, October 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113219>.
3. K. PAUL, C. ZIMMERMANN, K. K. MANDADAPU, T. J. R. HUGHES, C. M. LANDIS, and R. A. SAUER. An adaptive space-time phase field formulation for dynamic fracture of brittle shells based on LR NURBS. *Computational Mechanics*, 65(4):1039–1062, January 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s00466-019-01807-y>.
4. M. LENZ, D. JÖST, F. THIEL, S. PISCHINGER, and D. U. SAUER. Identification of load dependent cell voltage model parameters from sparse input data using the Mixed Integer Distributed Ant Colony Optimization solver. *Journal of Power Sources*, 437:226,880, October 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.226880>.
5. O. MOKROV, M. SIMON, R. SHARMA, and U. REISGEN. Effects of evaporation-determined model of arc-cathode coupling on weld pool formation in GMAW process simulation. *Welding in the World*, 64(5):847–856, March 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s40194-020-00878-3>.
6. K. BOBZIN, M. ÖTE, M. A. KNOCH, and H. HEINEMANN. Influence of the Injector Head Geometry on the Particle Injection in Plasma Spraying. *Journal of Thermal Spray Technology*, 29(4):534–545, March 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s11666-020-01009-6>.
7. A. FISCHER and B. EIDEL. Error analysis for quadtree-type mesh coarsening algorithms adapted to pixelized heterogeneous microstructures. *Computational Mechanics*, 65(6):1467–1491, March 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s00466-020-01830-4>.

8. M. ANDRESEN, I. KLEINER, M. SCHWELL, W. STAHL, and H. V. L. NGUYEN. Microwave Spectrum and Internal Rotations of Heptan-2-one: A Pheromone in the Gas Phase. *The Journal of Physical Chemistry A*, 124(7):1353–1361, January 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b11577>.
9. T. NGUYEN, C. DINDIC, W. STAHL, H. V. L. NGUYEN, and I. KLEINER. ¹⁴N Nuclear quadrupole coupling and methyl internal rotation in the microwave spectrum of 2-methylpyrrole. *Molecular Physics*, 118(11):1668,572, September 2019. URL <https://doi.org/10.1080/00268976.2019.1668572>.
10. H. R. ARJMANDI and S. GRIESHAMMER. Defect formation and migration in Nasicon Li_{1+x}Al_xTi_{2-x}(PO₄)₃. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(43):24,232–24,238, 2019. URL <https://doi.org/10.1039/c9cp04792a>.
11. X.-Y. CHEN, M. PU, H.-G. CHENG, T. SPERGER, and F. SCHOENEBECK. Arylation of Axially Chiral Phosphorothioate Salts by Dinuclear Pd I Catalysis. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(33):11,395–11,399, August 2019. URL <https://doi.org/10.1002/anie.201906063>.
12. E. SENOL, T. SCATTOLIN, and F. SCHOENEBECK. Selenolation of Aryl Iodides and Bromides Enabled by a Bench-Stable Pd I Dimer. *Chemistry – A European Journal*, 25(40):9419–9422, April 2019. URL <https://doi.org/10.1002/chem.201900951>.
13. S. AGASTI, B. MONDAL, T. K. ACHAR, S. K. SINHA, A. S. SUSEELAN, K. J. SZABO, F. SCHOENEBECK, and D. MAITI. Orthogonal Selectivity in C–H Olefination: Synthesis of Branched Vinylarene with Unactivated Aliphatic Substitution. *ACS Catalysis*, 9(10):9606–9613, September 2019. URL <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b03019>.
14. H.-G. CHENG, M. PU, G. KUNDU, and F. SCHOENEBECK. Selective Methylation of Amides, N-Heterocycles, Thiols, and Alcohols with Tetramethylammonium Fluoride. *Organic Letters*, 22(1):331–334, December 2019. URL <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.9b04400>.
15. M. MENDEL, I. KALVET, D. HUPPERICH, G. MAGNIN, and F. SCHOENEBECK. Site-Selective, Modular Diversification of Polyhalogenated Aryl Fluorosulfates (ArOSO₂F) Enabled by an Air-Stable Pd I Dimer. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(5):2115–2119, January 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.201911465>.
16. I. KALVET, K. DECKERS, I. FUNES-ARDOIZ, G. MAGNIN, T. SPERGER, M. KREMER, and F. SCHOENEBECK. Selective ortho -Functionalization of Adamantylarenes Enabled by Dispersion and an Air-Stable Palladium(I) Dimer. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(20):7721–7725, March 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202001326>.
17. A. TCAKAEV, V. B. ZABOLOTNYY, C. FORNARI, P. RÜSSMANN, F. STIER, M. DETTBARN, T. R. F. PEIXOTO, E. WESCHKE, E. SCHIERLE, P. BENCOK, P. H. O. RAPPL, E. ABRAMOF, H. BENTMANN, E. GOERING, F. REINERT, and V. HINKOV. Incipient antiferromagnetism in the Eu-doped topological insulator Bi₂Te₃. [*submitted*], 2020.
18. A. BUKAEMSKIY, V. VINOGRAD, and P. KOWALSKI. Ion Distribution Models for Defect Fluorite ZrO₂ - AO_{1.5} (A = Ln, Y) Solid Solutions: I. Relationship between Lattice Parameter and Composition. *SSRN Electronic Journal*, 2020. URL <https://doi.org/10.2139/ssrn.3614844>.
19. P. M. KOWALSKI. Formation enthalpy of Ln₂B₂O₇-type (B=Ti, Sn, Hf, Zr) compounds. *Scripta Materialia*, 189:7–10, December 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2020.07.048>.

20. M. SUN, J. STACKHOUSE, and P. M. KOWALSKI. The +2 oxidation state of Cr incorporated into the crystal lattice of UO₂. *Communications Materials*, 1(1), March 2020. URL <https://doi.org/10.1038/s43246-020-0014-5>.
21. D. BOSBACH, F. BRANDT, A. BUKAEMSKIY, G. DEISSMANN, P. KEGLER, M. KLINKENBERG, P. M. KOWALSKI, G. MODOLO, I. NIEMEYER, S. NEUMEIER, and V. VINOGRAD. Research for the Safe Management of Nuclear Waste at Forschungszentrum Jülich: Materials Chemistry and Solid Solution Aspects. *Advanced Engineering Materials*, 22(6):1901,417, February 2020. URL <https://doi.org/10.1002/adem.201901417>.
22. P. M. KOWALSKI, S. LANGE, G. DEISSMANN, M. SUN, K. O. KVASHNINA, R. BAKER, P. KEGLER, G. MURPHY, and D. BOSBACH. Modeling of Nuclear Waste Forms: State-of-the-Art and Perspectives. *MRS Advances*, 5(5-6):213–222, 2020. URL <https://doi.org/10.1557/adv.2020.38>.
23. S. FINKELDEI, M. C. STENNETT, P. M. KOWALSKI, Y. JI, E. DE VISSER-TÝNOVÁ, N. C. HYATT, D. BOSBACH, and F. BRANDT. Insights into the fabrication and structure of plutonium pyrochlores. *Journal of Materials Chemistry A*, 8(5):2387–2403, 2020. URL <https://doi.org/10.1039/c9ta05795a>.
24. S. BISWAS, S. J. EDWARDS, Z. WANG, H. SI, L. L. VINTRÓ, B. TWAMLEY, P. M. KOWALSKI, and R. J. BAKER. Americium incorporation into studtite: a theoretical and experimental study. *Dalton Transactions*, 48(34):13,057–13,063, 2019. URL <https://doi.org/10.1039/c9dt02848j>.
25. Y. JI, N. A. MARKS, D. BOSBACH, and P. M. KOWALSKI. Elastic and thermal parameters of lanthanide-orthophosphate (LnPO₄) ceramics from atomistic simulations. *Journal of the European Ceramic Society*, 39(14):4264–4274, November 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2019.05.038>.
26. F. M. DRABER, C. ADER, J. P. ARNOLD, S. EISELE, S. GRIESHAMMER, S. YAMAGUCHI, and M. MARTIN. Nanoscale percolation in doped BaZrO₃ for high proton mobility. *Nature Materials*, 19(3):338–346, December 2019. URL <https://doi.org/10.1038/s41563-019-0561-7>.
27. I. RONNEBERGER, Z. ZANOLLI, M. WUTTIG, and R. MAZZARELLO. Changes of Structure and Bonding with Thickness in Chalcogenide Thin Films. *Advanced Materials*, 32(29):2001,033, June 2020. URL <https://doi.org/10.1002/adma.202001033>.
28. B. J. KOOI and M. WUTTIG. Chalcogenides by Design: Functionality through Metavalent Bonding and Confinement. *Advanced Materials*, 32(21):1908,302, April 2020. URL <https://doi.org/10.1002/adma.201908302>.
29. J.-P. HANKE, F. FREIMUTH, B. DUPÉ, J. SINOVA, M. KLÄUI, and Y. MOKROUSOV. Engineering the dynamics of topological spin textures by anisotropic spin-orbit torques. *Physical Review B*, 101(1), January 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.101.014428>.
30. W. FENG, J.-P. HANKE, X. ZHOU, G.-Y. GUO, S. BLÜGEL, Y. MOKROUSOV, and Y. YAO. Topological magneto-optical effects and their quantization in noncoplanar antiferromagnets. *Nature Communications*, 11(1), January 2020. URL <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13968-8>.
31. T. R. F. PEIXOTO, H. BENTMANN, P. RÜSSMANN, A.-V. TCAKAEV, M. WINNERLEIN, S. SCHREYECK, S. SCHATZ, R. C. VIDAL, F. STIER, V. ZABOLOTNYY, R. J. GREEN, C. H. MIN, C. I. FORNARI, H. MAASS, H. B. VASILI, P. GARGIANI, M. VALVIDARES, A. BARLA, J. BUCK, M. HOESCH, F. DIEKMANN, S. ROHLF, M. KALLÄNE, K. ROSSNAGEL, C. GOULD,

- K. BRUNNER, S. BLÜGEL, V. HINKOV, L. W. MOLENKAMP, and F. REINERT. Ubiquitous impact of localised impurity states on the exchange coupling mechanism in magnetic topological insulators, 2020. [arXiv:2001.05541](https://arxiv.org/abs/2001.05541) [cond-mat.str-el].
32. P. RÜSSMANN, P. MAVROPOULOS, and S. BLÜGEL. Ab Initio Theory of Fourier-Transformed Quasiparticle Interference Maps and Application to the Topological Insulator Bi₂Te₃. *physica status solidi (b)*, page 2000031, June 2020. URL <https://doi.org/10.1002/pssb.202000031>.
 33. C. SANCHEZ-MARTIN, E. MORONI, M. FERRARO, C. LAQUATRA, G. CANNINO, I. MASGRAS, A. NEGRO, P. QUADRELLI, A. RASOLA, and G. COLOMBO. Rational Design of Allosteric and Selective Inhibitors of the Molecular Chaperone TRAP1. *Cell Reports*, 31(3):107,531, April 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.celrep.2020.107531>.
 34. D. MUSIC, D. M. HOLZAPFEL, F. KAISER, and E. WEHR. Aspartic acid adsorption on thermoelectric surfaces. *Applied Surface Science*, 496:143,716, December 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.143716>.
 35. D. MUSIC and B. STELZER. Intrinsic Thermal Shock Behavior of Common Rutile Oxides. *Physics*, 1(2):290–300, August 2019. URL <https://doi.org/10.3390/physics1020022>.
 36. ACHENBACH, SAHU, VÖLKER, HANS, PRIMETZHOFFER, MILJANOVIC, SCHEU, and SCHNEIDER. Synthesis and Properties of Orthorhombic MoAlB Coatings. *Coatings*, 9(8):510, August 2019. URL <https://doi.org/10.3390/coatings9080510>.
 37. L. ELALFY, D. MUSIC, and M. HU. First Principles Investigation of Anomalous Pressure-Dependent Thermal Conductivity of Chalcopyrites. *Materials*, 12(21):3491, October 2019. URL <https://doi.org/10.3390/ma12213491>.
 38. P. KEUTER, S. K. AGHDA, D. MUSIC, P. KÜMMERL, and J. M. SCHNEIDER. Synthesis of Intermetallic (Mg_{1-x}, Al_x)₂Ca by Combinatorial Sputtering. *Materials*, 12(18):3026, September 2019. URL <https://doi.org/10.3390/ma12183026>.
 39. C. KWAKERNAAK, D. MUSIC, J. SCHNEIDER, and W. SLOOF. Computation of formation enthalpies and molar volumes of halides. *Solid State Ionics*, 343:115,081, December 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2019.115081>.
 40. KEUTER, MUSIC, STUER, and SCHNEIDER. Temperature and Impurity Induced Stabilization of Cubic HfV₂ Laves Phase. *Condensed Matter*, 4(3):63, July 2019. URL <https://doi.org/10.3390/condmat4030063>.
 41. M. MEYER, J. WIESNER, and C. ROHLFING. Optimized Convolutional Neural Networks for Video Intra Prediction. In *IEEE International Conference on Image Processing(ICIP)*. IEEE, October 2020.

B.3 Universität Bielefeld

1. A. HOTTUNG and K. TIERNEY. Neural large neighborhood search for the capacitated vehicle routing problem. *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, 325:443, 2020. URL <https://doi.org/10.3233/FAIA200124>.
2. L. ALTENKORT, A. M. ELLER, O. KACZMAREK, L. MAZUR, G. D. MOORE, and H.-T. SHU. Heavy quark momentum diffusion from the lattice using gradient flow. 2020. [arXiv:2009.13553](https://arxiv.org/abs/2009.13553) [hep-lat].
3. O. KACZMAREK, F. KARSCH, A. LAHIRI, L. MAZUR, and C. SCHMIDT. QCD phase transition in the chiral limit. 3 2020. [arXiv:2003.07920](https://arxiv.org/abs/2003.07920) [hep-lat].
4. D. BOLLWEG, F. KARSCH, S. MUKHERJEE, and C. SCHMIDT. Higher order cumulants of net baryon-number distributions at non-zero μ_B . In *28th International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions*. 2 2020. [arXiv:2002.01837](https://arxiv.org/abs/2002.01837) [hep-lat].
5. A. BAZAVOV ET AL. Skewness, kurtosis, and the fifth and sixth order cumulants of net baryon-number distributions from lattice QCD confront high-statistics STAR data. *Phys. Rev. D*, 101(7):074,502, 2020. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.101.074502>. [arXiv:2001.08530](https://arxiv.org/abs/2001.08530) [hep-lat].
6. A. BAZAVOV ET AL. Meson screening masses in (2+1)-flavor QCD. *Phys. Rev. D*, 100(9):094,510, 2019. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.100.094510>. [arXiv:1908.09552](https://arxiv.org/abs/1908.09552) [hep-lat].
7. J. GOSWAMI, F. KARSCH, A. LAHIRI, M. NEUMANN, and C. SCHMIDT. Critical end points in (2+1)-flavor QCD with imaginary chemical potential. *PoS, CORFU2018:162*, 2019. URL <https://doi.org/10.22323/1.347.0162>. [arXiv:1905.03625](https://arxiv.org/abs/1905.03625) [hep-lat].
8. H. DING ET AL. Chiral Phase Transition Temperature in (2+1)-Flavor QCD. *Phys. Rev. Lett.*, 123(6):062,002, 2019. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.062002>. [arXiv:1903.04801](https://arxiv.org/abs/1903.04801) [hep-lat].
9. L. ALTENKORT, O. KACZMAREK, L. MAZUR, and H.-T. SHU. Color-electric correlation functions under gradient flow. *PoS, LATTICE2019:204*, 2019. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0204>. [arXiv:1912.11248](https://arxiv.org/abs/1912.11248) [hep-lat].
10. L. MAZUR, L. ALTENKORT, O. KACZMAREK, and H.-T. SHU. Euclidean correlation functions of the topological charge density. *PoS, LATTICE2019:219*, 2020. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0219>. [arXiv:2001.11967](https://arxiv.org/abs/2001.11967) [hep-lat].
11. A.-L. LORENZ, H.-T. DING, O. KACZMAREK, H. OHNO, H. SANDMEYER, and H.-T. SHU. Thermal modifications of quarkonia and heavy quark diffusion from a comparison of continuum-extrapolated lattice results to perturbative QCD. *PoS, LATTICE2019:207*, 2020. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0207>. [arXiv:2002.00681](https://arxiv.org/abs/2002.00681) [hep-lat].
12. H. S. SANDMEYER. *Hadronic correlators from heavy to very light quarks: Spectral and transport properties from lattice QCD*. Ph.D. thesis, U. Bielefeld, 2019. URL <https://doi.org/10.4119/unibi/2936264>.

B.4 Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. K. BASSLER, W. FUJII, T. S. KAPELLOS, A. HORNE, B. REIZ, E. DUDKIN, M. LÜCKEN, N. REUSCH, C. OSEI-SARPOG, S. WARNAT-HERRESTHAL, A. WAGNER, L. BONAGURO, P. GÜNTHER, C. PIZARRO, T. SCHREIBER, M. BECKER, K. HÄNDLER, C. T. WOHNHAAS, F. BAUMGARTNER, M. KÖHLER, H. THEIS, M. KRAUT, M. H. WADSWORTH, T. K. HUGHES, H. J. G. FERREIRA, J. SCHULTE-SCHREPPING, E. HINKLEY, I. H. KALTHEUNER, M. GEYER, C. THIELE, A. K. SHALEK, A. FEISST, D. THOMAS, H. DICKTEN, M. BEYER, P. BAUM, N. YOSEF, A. C. ASCHENBRENNER, T. ULAS, J. HASENAUER, F. J. THEIS, D. SKOWASCH, and J. L. SCHULTZE. Alterations of multiple alveolar macrophage states in chronic obstructive pulmonary disease. *bioRxiv*, page 2020.05.28.121541, May 2020. URL <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.05.28.121541v1>.
2. T. A. SCHAUB, E. A. PRANTL, J. KOHN, M. BURSCH, C. R. MARSHALL, E. J. LEONHARDT, T. C. LOVELL, L. N. ZAKHAROV, C. K. BROZEK, S. R. WALDVOGEL ET AL. Exploration of the Solid-State Sorption Properties of Shape-Persistent Macrocyclic Nanocarbons as Bulk Materials and Small Aggregates. *Journal of the American Chemical Society*, 142(19):8763–8775, 2020.
3. R. MACCHIERALDO, J. INGENMEY, and B. KIRCHNER. Understanding the Complex Surface Interplay for Extraction: A Molecular Dynamics Study. *Chemistry – A European Journal*, n/a(n/a). URL <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/chem.202002744>.
<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/chem.202002744>.
4. J. OSTMEYER, E. BERKOWITZ, S. KRIEG, T. A. LÄHDE, T. LUU, and C. URBACH. The Semimetal-Mott Insulator Quantum Phase Transition of the Hubbard Model on the Honeycomb Lattice, 2020. arXiv:2005.11112 [cond-mat.str-el].

B.5 Technische Universität Dortmund

1. H. HAJDUK, D. KUZMIN, T. KOLEV, and R. ABGRALL. Matrix-free subcell residual distribution for Bernstein finite element discretizations of linear advection equations. *Comput. Method. Appl. M.*, 359:112,658, 2020.
2. G. S. U. PHILIPP SCHERING and D. S. SMIRNOV. Spin inertia and polarization recovery in quantum dots: Role of pumping strength and resonant spin amplification. *Physical Review Research*, 1, 2019.
3. M. NOETHE. *Monitoring the high energy universe*. Ph.D. thesis, TU Dortmund, 2020.
4. M. P. F. Z. MARCO PLEINES, JENIA JITSEV. Obstacle Tower Without Human Demonstrations: How Far a Deep Feed-Forward Network Goes with Reinforcement Learning. *CoG 2020 Proceedings, IEEE*.
5. R. BERTHELSEN. *Computational homogenisation of thermomechanical problems*. Ph.D. thesis.
6. R. BERTHELSEN and A. MENZEL. Computational homogenisation of thermo-viscoplastic composites: Large strain formulation and weak micro-periodicity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 348:575 – 603, 2019. ISSN 0045-7825. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004578251830639X>.
7. S. A. KEWELOH. A Generalized Method of Moments Estimator for Structural Vector Auto-regressions Based on Higher Moments. *Journal of Business & Economic Statistics*, 0(0):1–11, 2020.
8. B. T. M. A. NOLL, I. A computational phase transformation model for selective laser melting processes. *Comput Mech*, 2020.
9. J. RIEGER, J. RAHNENFÜHRER, and C. JENTSCH. Improving Latent Dirichlet Allocation: On Reliability of the Novel Method LDAPrototype. In E. MÉTAIS, F. MEZIANE, H. HORACEK, and P. CIMIANO, editors, *Natural Language Processing and Information Systems*, pages 118–125. Springer International Publishing, Cham, 2020. ISBN 978-3-030-51310-8.
10. R. J. VON NORDHEIM, G. Im Zerrspiegel des Populismus. *Publizistik*, 65:403–424, 2020.
11. J. BAHNE, N. BERTRAM, M. BÖCKER, J. BODE, J. FISCHER, H. FOOT, F. GRIESKAMP, F. KURPICZ, M. LÖBEL, O. MAGIERA, R. PINK, D. PIPER, and C. POEPLAU. SACABench: Benchmarking Suffix Array Construction. In *SPIRE*, volume 11811 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 407–416. Springer, 2019.
12. J. ELLERT and F. KURPICZ. Parallel External Memory Wavelet Tree and Wavelet Matrix Construction. In *SPIRE*, volume 11811 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 392–406. Springer, 2019.
13. P. DINKLAGE, J. FISCHER, and F. KURPICZ. Constructing the Wavelet Tree and Wavelet Matrix in Distributed Memory. In *ALLENEX*, pages 214–228. SIAM, 2020.
14. F. KURPICZ. *Parallel text index construction*. Ph.D. thesis, Technical University of Dortmund, Germany, 2020. URL <http://hdl.handle.net/2003/39196>.
15. P. SCHERING, P. W. SCHERER, and G. S. UHRIG. Interplay of spin mode locking and nuclei-induced frequency focusing in quantum dots. *Phys. Rev. B*, 102:115,301, Sep 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.115301>.

16. M. MALKI and G. S. UHRIG. Tunable Signal Velocity in the Integer Quantum Hall Effect of Tailored Graphene. *Journal of the Physical Society of Japan*, 89(5):054,705, 2020.
17. P. BLEICKER, J. STOLZE, and G. S. UHRIG. Probing thermalization in quenched integrable and nonintegrable Fermi-Hubbard models. *Phys. Rev. A*, 102:013,321, Jul 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.013321>.
18. M. DITZHAUS, R. FRIED, and M. PAULY. QANOVA: Quantile-based Permutation Methods For General Factorial Designs, 2019. arXiv:1912.09146 [math.ST].
19. M. DITZHAUS, A. JANSSEN, and M. PAULY. Permutation inference in factorial survival designs with the CASANOVA, 2020. arXiv:2004.10818 [stat.ME].
20. M. DITZHAUS, D. DOBLER, and M. PAULY. Inferring median survival differences in general factorial designs via permutation tests, 2020. arXiv:2006.14316 [stat.ME].
21. L. EBERLEIN, F. R. BEIERLEIN, N. J. R. VAN EIKEMA HOMMES, A. RADADIYA, J. HEIL, S. A. BENNER, T. CLARK, S. M. KAST, and N. G. J. RICHARDS. Tautomeric Equilibria of Nucleobases in the Hachimoji Expanded Genetic Alphabet. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16(4):2766–2777, 2020.
22. T. PONGRATZ, P. KIBIES, L. EBERLEIN, N. TIELKER, C. HÖLZL, S. IMOTO, M. BECK ERLACH, S. KURRMANN, P. H. SCHUMMEL, M. HOFMANN, O. REISER, R. WINTER, W. KREMER, H. R. KALBITZER, D. MARX, D. HORINEK, and S. M. KAST. Pressure-dependent electronic structure calculations using integral equation-based solvation models. *Biophysical Chemistry*, 257:106,258, 2020. ISSN 0301-4622. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301462219303412>.
23. C. E. MUNTE, M. KARL, W. KAUTER, L. EBERLEIN, T.-V. PHAM, M. B. ERLACH, S. M. KAST, W. KREMER, and H. R. KALBITZER. High pressure response of 1H NMR chemical shifts of purine nucleotides. *Biophysical Chemistry*, 254:106,261, 2019. ISSN 0301-4622. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301462219303370>.
24. C. HÖLZL, P. KIBIES, S. IMOTO, J. NOETZEL, M. KNIERBEIN, P. SALMEN, M. PAULUS, J. NASE, C. HELD, G. SADOWSKI, D. MARX, S. M. KAST, and D. HORINEK. Structure and thermodynamics of aqueous urea solutions from ambient to kilobar pressures: From thermodynamic modeling, experiments, and first principles simulations to an accurate force field description. *Biophysical Chemistry*, 254:106,260, 2019. ISSN 0301-4622. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301462219303060>.

B.6 Universität Duisburg-Essen

1. S. ANKE, G. BENDT, I. SINEV, H. HAJIYANI, H. ANTONI, I. ZEGKINOGLU, H. JEON, R. PENTCHEVA, B. ROLDAN CUENYA, S. SCHULZ, and M. MUHLER. Selective 2-Propanol Oxidation over Unsupported Co₃O₄ Spinel Nanoparticles: Mechanistic Insights into Aerobic Oxidation of Alcohols. *ACS Catalysis*, 9(7):5974–5985, 2019. URL <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b01048>. <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b01048>.
2. A. BAGGER, L. ARNARSON, M. H. HANSEN, E. SPOHR, and J. ROSSMEISL. Electrochemical CO Reduction: A Property of the Electrochemical Interface. *J. Am. Chem. Soc.*, 141:1506–1514, 2019. URL <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.8b08839>.
3. F. BELVISO, V. E. P. CLAERBOUT, A. COMAS-VIVES, N. S. DALAL, F.-R. FAN, A. FILIPPETTI, V. FIORENTINI, L. FOPPA, C. FRANCHINI, B. GEISLER, L. M. GHIRINGHELLI, A. GROSS, S. HU, J. ÍÑIGUEZ, S. K. KAUWE, J. L. MUSFELDT, P. NICOLINI, R. PENTCHEVA, T. POLCAR, W. REN, F. RICCI, F. RICCI, H. S. SEN, J. M. SKELTON, T. D. SPARKS, A. STROPPA, A. URRU, M. VANDICHEL, P. VAVASSORI, H. WU, K. YANG, H. J. ZHAO, D. PUGGIONI, R. CORTESE, and A. CAMMARATA. Viewpoint: Atomic-Scale Design Protocols toward Energy, Electronic, Catalysis, and Sensing Applications. *Inorganic Chemistry*, 58(22):14,939–14,980, 2019. URL <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b01785>. PMID: 31668070, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b01785>.
4. S. BURMESTER, G. VAZ, and O. EL MOCTAR. Towards credible CFD simulations for floating offshore wind turbines. *Ocean Engineering*, 209:107,237, 2020. ISSN 0029-8018. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029801820302870>.
5. S. BURMESTER, G. VAZ, S. GUEYDON, and O. EL MOCTAR. Investigation of a semi-submersible floating wind turbine in surge decay using CFD. *Ship Technology Research*, 67(1):2–14, 2020. URL <https://doi.org/10.1080/09377255.2018.1555987>. <https://doi.org/10.1080/09377255.2018.1555987>.
6. G. CHILLCCE, I. MARTIC, M. TELLO RUIZ, J. RAMIREZ, N. DEGIULI, and B. OULD EL MOCTAR. RANS evaluation of the DTC’s vertical motion sailing in finite water depth waves. In M. CANDRIES, E. LATAIRE, K. ELOOT, and G. DELEFORTRIE, editors, *5th MASHCON : International conference on ship manoeuvring in shallow and confined water with non-exclusive focus on manoeuvring in waves, wind and current : conference proceedings*, pages 61–71. Knowledge centre for manoeuvring in shallow and confined water, 2019. ISBN NA. URL http://www.mashcon2019.ugent.be/EN/mashcon2019_proceedings_EN.htm.
7. B. EGGERT, M. E. GRUNER, K. OLLEFS, E. SCHUSTER, N. ROTHENBACH, M. Y. HU, J. ZHAO, T. S. TOELLNER, W. STURHAHN, R. PENTCHEVA, B. R. CUENYA, E. E. ALP, H. WENDE, and W. KEUNE. Interface-related magnetic and vibrational properties in Fe/MgO heterostructures from nuclear resonant spectroscopy and first-principles calculations. *Phys. Rev. Materials*, 4:044,402, Apr 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.4.044402>.
8. B. GEISLER and R. PENTCHEVA. Fundamental difference in the electronic reconstruction of infinite-layer versus perovskite neodymium nickelate films on SrTiO₃(001). *Phys. Rev. B*, 102:020,502, Jul 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.020502>.
9. B. GEISLER and R. PENTCHEVA. Competition of defect ordering and site disproportionation in strained LaCoO₃ on SrTiO₃(001). *Phys. Rev. B*, 101:165,108, Apr 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.165108>.

10. H. HAJIYANI and R. PENTCHEVA. Influence of 3d, 4d, and 5d dopants on the oxygen evolution reaction at α -Fe₂O₃(0001) under dark and illumination conditions. *The Journal of Chemical Physics*, 152(12):124,709, 2020. URL <https://doi.org/10.1063/1.5143236>. <https://doi.org/10.1063/1.5143236>.
11. A. HEINLEIN, C. HOCHMUTH, and A. KLAWONN. Fully algebraic two-level overlapping Schwarz preconditioners for elasticity problems. Technischer bericht, Universität zu Köln, Dezember 2019. URL <https://kups.ub.uni-koeln.de/10441/>.
12. A. HEINLEIN, C. HOCHMUTH, and A. KLAWONN. Reduced Dimension GDSW Coarse Spaces for Monolithic Schwarz Domain Decomposition Methods for Incompressible Fluid Flow Problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 121:1101–1119, 03 2020.
13. A. HEINLEIN, A. KLAWONN, S. RAJAMANICKAM, and O. RHEINBACH. FROSch: A Fast And Robust Overlapping Schwarz Domain Decomposition Preconditioner Based on Xpetra in Trilinos. In R. HAYNES, S. MACLACHLAN, X.-C. CAI, L. HALPERN, H. KIM, A. KLAWONN, and O. WIDLUND, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XXV*, volume 138 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. 2020.
14. C. HOCHMUTH. *Parallel Overlapping Schwarz Preconditioners for Incompressible Fluid Flow and Fluid-Structure Interaction Problems*. Ph.D. thesis, Universität zu Köln, Juni 2020. URL <https://kups.ub.uni-koeln.de/11345/>.
15. E. INANC, N. CHAKRABORTY, and A. KEMPF. Analysis of mixture stratification effects on unstrained laminar flames. *Combustion and Flame*, 219:339 – 348, 2020. ISSN 0010-2180. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218020302182>.
16. C. JIANG, O. EL MOCTAR, G. MOURA PAREDES, and T. E. SCHELLIN. Validation of a dynamic mooring model coupled with a RANS solver. *Marine Structures*, 72:102,783, 2020. ISSN 0951-8339. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0951833920300770>.
17. C. JIANG, O. EL MOCTAR, and T. S. Y. QI. Numerical Investigation of Hydroelastic Effects on Floating Structures. In *Proceedings of WCFS2020*. 2020.
18. C. JIANG, O. EL MOCTAR, T. SCHELLIN, and G. PAREDES. Motion Decay Simulations of a Moored Wave Energy Converter. In *Proceedings of OMAE2020*. 06 2020. OMAE2020-18424.
19. C. JIANG, O. EL MOCTAR, T. E. SCHELLIN, and G. M. PAREDES. Comparative study of mathematical models for mooring systems coupled with CFD. *Ships and Offshore Structures*, 0(0):1–13, 2020. URL <https://doi.org/10.1080/17445302.2020.1790294>. <https://doi.org/10.1080/17445302.2020.1790294>.
20. E. KATSUNO, A. LIDTKE, B. UZ, D. RIJPKEMA, and G. VAZ. Parameter Uncertainty Quantification applied to the Duisburg Propeller Test Case. In *Proceedings of NuTTS2019*. 10 2019.
21. S. KENMOE and E. SPOHR. Computer modeling of semiconductor nanotubes for water splitting. *Curr. Opin. Electrochem.*, 19:88–95, 2020.
22. A. KLAWONN, M. LANSER, O. RHEINBACH, and J. WEBER. Preconditioning the coarse problem of BDDC methods - three-level, algebraic multigrid, and vertex-based preconditioners. *Electronic transactions on numerical analysis ETNA*, 51:432–450, 12 2019.
23. A. KLAWONN, M. LANSER, M. URAN, O. RHEINBACH, S. KÖHLER, J. SCHRÖDER, L. SCHEUNEMANN, D. BRANDS, D. BALZANI, A. GANDHI, G. WELLEIN, M. WITTMANN, O. SCHENK, and R. JANALÍK. EXASTEEL: Towards a Virtual Laboratory for the Multiscale Simulation of Dual-Phase Steel Using High-Performance Computing. In H.-J. BUNGARTZ, S. REIZ,

- B. UEKERMANN, P. NEUMANN, and W. E. NAGEL, editors, *Software for Exascale Computing - SPPEXA 2016-2019*, pages 351–404. Springer International Publishing, Cham, 2020. ISBN 978-3-030-47956-5.
24. M. KLEIN, S. KETTERL, L. ENGELMANN, A. KEMPF, and H. KOBAYASHI. Regularized, parameter free scale similarity type models for Large Eddy Simulation. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 81:108,496, 2020. ISSN 0142-727X. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X19302048>.
 25. P. KRATZER and M. ZAHEDIFAR. Relaxation of electrons in quantum-confined states in Pb/Si(111) thin films from master equation with first-principles derived rates. *New J. Phys.*, 21:123,023, 2019.
 26. I. MARTIC, G. CHILLCCE, M. TELLO RUIZ, J. RAMIREZ, N. DEGIULI, and B. OULD EL MOCTAR. Numerical assessment of added resistance in waves of the DTC container ship in finite water depths. In M. CANDRIES, E. LATAIRE, K. ELOOT, and G. DELEFORTRIE, editors, *5th MASHCON : International conference on ship manoeuvring in shallow and confined water with non-exclusive focus on manoeuvring in waves, wind and current : conference proceedings*, pages 273–283. Knowledge centre for manoeuvring in shallow and confined water, 2019. ISBN NA.
 27. S. MEWES, G. VAZ, O. MOCTAR, S. GUEYDON, A. KOOP, Y. WANG, and H. CHEN. HIGH-FIDELITY MODELLING OF FLOATING OFFSHORE WIND TURBINE PLATFORMS. In *Proceedings of OMAE2020*. 06 2020.
 28. A. PETERS and O. EL MOCTAR. Numerical assessment of cavitation-induced erosion using a multi-scale Euler–Lagrange method. *Journal of Fluid Mechanics*, 894:A19, 2020.
 29. M. PISE, D. BRANDS, G. GEBUHR, M. SARHIL, J. SCHRÖDER, and S. ANDERS. Numerical calibration of elasto-plastic phase-field modeling of fracture for experimental pullout tests of single steel fibres embedded in high-performance concrete. In *Proceedings of the 7th International Conference on Structural Engineering, Mechanics and Computation (SEMC 2019)*, Advances in Engineering Materials, Structures and Systems: Innovations, Mechanics and Applications. 2019. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/pamm.201900255>.
 30. E. POLLMANN, J. M. MORBEC, L. MADAUSS, L. BRÖCKERS, P. KRATZER, and M. SCHLEBERGER. Molybdenum Disulphide Nanoflakes Grown by Chemical Vapour Deposition on Graphite: Nucleation, Orientation, and Charge Transfer. *J. Phys. Chem. C*, 124:2689, 2020.
 31. E. POLLMANN, J. M. MORBEC, L. MADAUSS, L. BRÖCKERS, P. KRATZER, and M. SCHLEBERGER. Molybdenum Disulfide Nanoflakes Grown by Chemical Vapor Deposition on Graphite: Nucleation, Orientation, and Charge Transfer. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(4):2689–2697, 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10120>. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10120>.
 32. V. V. SOKOLOVSKIY, M. E. GRUNER, P. ENTEL, M. ACET, A. ÇAK IR, D. R. BAIGUTLIN, and V. D. BUCHELNIKOV. Segregation tendency of Heusler alloys. *Phys. Rev. Materials*, 3:084,413, Aug 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.3.084413>.
 33. T. SUZUKI, J. LAWRENCE, J. M. MORBEC, P. KRATZER, and G. COSTANTINI. Surface structural phase transition induced by the formation of metal–organic networks on the Si(111)–In surface. *Nanoscale*, 11:21,790–21,798, 2019. URL <http://dx.doi.org/10.1039/C9NR07074E>.

34. A. TERWEY, M. E. GRUNER, W. KEUNE, J. LANDERS, S. SALAMON, B. EGGERT, K. OLLEFS, V. BRABÄNDER, I. RADULOV, K. SKOKOV, T. FASKE, M. Y. HU, J. ZHAO, E. E. ALP, C. GIACOBBE, O. GUTFLEISCH, and H. WENDE. Influence of hydrogenation on the vibrational density of states of magnetocaloric $\text{LaFe}_{11.4}\text{Si}_{1.6}\text{H}_{1.6}$. *Phys. Rev. B*, 101:064,415, Feb 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.064415>.
35. M. URAN. *High-Performance Computing Two-Scale Finite Element Simulations of a Contact Problem Using Computational Homogenization - Virtual Forming Limit Curves for Dual-Phase Steel*. Ph.D. thesis, Universität zu Köln, 2020. URL <https://kups.ub.uni-koeln.de/11401/>.
36. Y. WANG, H.-C. CHEN, G. VAZ, and S. BURMESTER. CFD Simulation of Semi-Submersible Floating Offshore Wind Turbine Under Pitch Decay Motion. In *ASME 2019 2nd International Offshore Wind Technical Conference*, International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering. 11 2019. URL <https://doi.org/10.1115/IOWTC2019-7515>. V001T01A002.
37. Y. WANG, H.-C. CHEN, G. VAZ, and S. MEWES. CFD Simulation of Semi-Submersible Floating Offshore Wind Turbine under Regular Waves. In *Proceedings of ISOPE2020*. 09 2020.
38. C. WIELGOSZ, R. GOLF, A. LIDTKE, G. VAZ, and O. MOCTAR. Numerical and experimental study on the Duisburg Propeller Test Case. In *Proceedings of NuTTS 2019*. 10 2019.
39. M. ZAHEDIFAR and P. KRATZER. Phonon-induced electronic relaxation in a strongly correlated system: The Sn/Si(111) ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) adlayer revisited. *Phys. Rev. B*, 100:125,427, Sep 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.125427>.

B.7 Universität Düsseldorf

1. S. GONNISSEN, J. PTOK, C. GOY, K. JANDER, P. JAKOBS, O. ECKERMANN, W. KAISERS, F. VON AMELN, J. TIMM, N. ALE-AGHA, J. HAENDELER, H. SCHAAL, and J. ALTSCHMIED. High Concentration of Low-Density Lipoprotein Results in Disturbances in Mitochondrial Transcription and Functionality in Endothelial Cells. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2019:1–12, June 2019. URL <https://doi.org/10.1155/2019/7976382>.
2. S. ERKELENZ, G. POSCHMANN, J. PTOK, L. MÜLLER, and H. SCHAAL. Profiling of cis- and trans-acting factors supporting noncanonical splice site activation. *RNA Biology*, pages 1–13, August 2020. URL <https://doi.org/10.1080/15476286.2020.1798111>.
3. E. NIELAND, O. WEINGART, and B. M. SCHMIDT. Fluorinated azobenzenes as supramolecular halogen-bonding building blocks. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, 15:2013–2019, 2019. ISSN 1860-5397.
4. C. V. DUEÑAS, S. JANSSEN, M. OLDENBURG, F. AUER, I. G. HERRERO, A. CASADO-GARCÍA, M. ISIDRO-HERNÁNDEZ, J. RABOSO-GALLEGO, P. WESTHOFF, A. A. PANDYRA, D. HEIN, K. L. GÖSSLING, D. ALONSO-LÓPEZ, J. D. L. RIVAS, S. BHATIA, F. J. GARCIA-CRIADO, M. B. G. CENADOR, A. P. M. WEBER, K. KÖHRER, J. HAUER, U. FISCHER, I. SANCHEZ-GARCIA, and A. BORKHARDT. An intact gut microbiome protects genetically predisposed mice against leukemia. *Blood*, September 2020. URL <https://doi.org/10.1182/blood.2019004381>.
5. S. MARTIN. Market transparency and consumer search-Evidence from the German retail gasoline market. Technical report, DICE Discussion Paper, 2020.
6. A. T. DILTHEY, S. A. MEYER, and A. J. KAASCH. Ultraplexing: increasing the efficiency of long-read sequencing for hybrid assembly with k-mer-based multiplexing. *Genome Biology*, 21(1), March 2020. URL <https://doi.org/10.1186/s13059-020-01974-9>.
7. J. DUNKELAU, S. KRINGS, and J. SCHMIDT. Automated Backend Selection for ProB Using Deep Learning. In *NASA Formal Methods*, volume 11460 of *LNCS*.
8. J. DUNKELAU, J. SCHMIDT, and M. LEUSCHEL. Analysing ProB’s Constraint Solving Backends. In *Rigorous State-Based Methods*, volume 12071 of *LNCS*, pages 107–123. Springer, May 2020.
9. P. KÖRNER, M. LEUSCHEL, and J. DUNKELAU. Towards a Shared Specification Repository. In *Rigorous State-Based Methods*, volume 12071 of *LNCS*, pages 266–271. Springer, May 2020.
10. I. KHAN, R. GRATZ, P. DENEZHKIN, S. N. SCHOTT-VERDUGO, K. ANGRAND, L. GENDERS, R. M. BASGARAN, C. FINK-STRAUBE, T. BRUMBAROVA, H. GOHLKE, P. BAUER, and R. IVANOV. Calcium-Promoted Interaction between the C2-Domain Protein EHB1 and Metal Transporter IRT1 Inhibits Arabidopsis Iron Acquisition. *Plant Physiology*, 180(3):1564–1581, April 2019.
11. D. SCHMIDT, M. BOEHM, C. L. MCCLENDON, R. TORELLA, and H. GOHLKE. Cosolvent-Enhanced Sampling and Unbiased Identification of Cryptic Pockets Suitable for Structure-Based Drug Design. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15(5):3331–3343, April 2019.
12. M. OTTE, A. SCHWEINITZ, M. LELLE, S. THON, U. ENKE, S. YÜKSEL, R. SCHMAUDER, M. BONUS, H. GOHLKE, and K. BENNDORF. Novel Fluorescent Cyclic Nucleotide Derivatives to Study CNG and HCN Channel Function. *Biophysical Journal*, 116(12):2411–2422, June 2019.

13. S. SCHOTT-VERDUGO and H. GOHLKE. PACKMOL-Memgen: A Simple-To-Use, Generalized Workflow for Membrane-Protein-Lipid-Bilayer System Building. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(6):2522–2528, May 2019.
14. S. SCHOTT-VERDUGO, L. MÜLLER, E. CLASSEN, H. GOHLKE, and G. GROTH. Structural Model of the ETR1 Ethylene Receptor Transmembrane Sensor Domain. *Scientific Reports*, 9(1), June 2019.
15. A. KOCH, M. BONUS, H. GOHLKE, and N. KLÖCKER. Isoform-specific Inhibition of N-methyl-D-aspartate Receptors by Bile Salts. *Scientific Reports*, 9(1), July 2019.
16. M. N. PREISING, B. GÖRG, C. FRIEDBURG, N. QVARTSKHAVA, B. S. BUDDE, M. BONUS, M. R. TOLIAT, C. PFLEGER, J. ALTMÜLLER, D. HEREBIAN, M. BEYER, H. J. ZÖLLNER, H.-J. WITTSACK, J. SCHAPER, D. KLEE, U. ZECHNER, P. NÜRNBERG, J. SCHIPPER, A. SCHNITZLER, H. GOHLKE, B. LORENZ, D. HÄUSSINGER, and H. J. BOLZ. Biallelic mutation of human SLC6A6 encoding the taurine transporter TAUT is linked to early retinal degeneration. *The FASEB Journal*, 33(10):11,507–11,527, July 2019.
17. L. KATER, B. FRIEG, O. BERNINGHAUSEN, H. GOHLKE, R. BECKMANN, and A. KEDROV. Partially inserted nascent chain unzips the lateral gate of the Sec translocon. *EMBO reports*, 20(10), August 2019.
18. A. BOVDILOVA, B. M. ALEXANDRE, A. HÖPPNER, I. M. LUÍS, C. E. ALVAREZ, D. BICKEL, H. GOHLKE, C. DECKER, L. NAGEL-STEGER, S. ALSEEKH, A. R. FERNIE, M. F. DRINCOVICH, I. A. ABREU, and V. G. MAURINO. Posttranslational Modification of the NADP-Malic Enzyme Involved in C4 Photosynthesis Modulates the Enzymatic Activity during the Day. *The Plant Cell*, 31(10):2525–2539, July 2019.
19. I. C. FORM, M. BONUS, H. GOHLKE, W. LIN, G. DALETOS, and P. PROKSCH. Xanthone, benzophenone and bianthrone derivatives from the hypersaline lake-derived fungus *Aspergillus wentii*. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 27(20):115,005, October 2019.
20. C. WANG, L. ENGELKE, D. BICKEL, A. HAMACHER, M. FRANK, P. PROKSCH, H. GOHLKE, and M. U. KASSACK. The tetrahydroxanthone-dimer phomoxanthone A is a strong inducer of apoptosis in cisplatin-resistant solid cancer cells. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 27(19):115,044, October 2019.
21. N. PORTA, J. ZASCHKE-KRIESCHE, B. FRIEG, M. GOPALSWAMY, A. ZIVKOVIC, M. ETZKORN, H. STARK, S. H. SMITS, and H. GOHLKE. Small-molecule inhibitors of nisin resistance protein NSR from the human pathogen *Streptococcus agalactiae*. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 27(20):115,079, October 2019.
22. B. WIENEN-SCHMIDT, D. SCHMIDT, H.-D. GERBER, A. HEINE, H. GOHLKE, and G. KLEBE. Surprising Non-Additivity of Methyl Groups in Drug-Kinase Interaction. *ACS Chemical Biology*, 14(12):2585–2594, October 2019.
23. D. WIFLING, C. PFLEGER, J. KAINDL, P. IBRAHIM, R. C. KLING, A. BUSCHAUER, H. GOHLKE, and T. CLARK. Basal Histamine H₄ Receptor Activation: Agonist Mimicry by the Diphenylalanine Motif. *Chemistry – A European Journal*, 25(64):14,613–14,624, October 2019.
24. N. VERMA, P. DOLLINGER, F. KOVACIC, K.-E. JAEGER, and H. GOHLKE. The Membrane-Integrated Steric Chaperone Lif Facilitates Active Site Opening of *Pseudomonas aeruginosa* Lipase A. *Journal of Computational Chemistry*, 41(6):500–512, October 2019.

25. M. DIMURA, T.-O. PEULEN, H. SANABRIA, D. RODNIN, K. HEMMEN, C. A. HANKE, C. A. M. SEIDEL, and H. GOHLKE. Automated and optimally FRET-assisted structural modeling. *Nature Communications*, 11(1), October 2020.
26. T. LEYPOLD, M. BONUS, F. SPIEGELHALTER, F. SCHWEDE, T. SCHWABE, H. GOHLKE, and J. KUSCH. N6-modified cAMP derivatives that activate protein kinase A also act as full agonists of murine HCN2 channels. *Journal of Biological Chemistry*, 294(47):17,978–17,987, 2019.
27. L. WÄSCHENBACH, C. G. W. GERTZEN, V. KEITEL, and H. GOHLKE. Dimerization energetics of the G-protein coupled bile acid receptor TGR5 from all-atom simulations. *Journal of Computational Chemistry*, 41(9):874–884, December 2019.
28. C. NUTSCHEL, A. FULTON, O. ZIMMERMANN, U. SCHWANEBERG, K.-E. JAEGER, and H. GOHLKE. Systematically Scrutinizing the Impact of Substitution Sites on Thermostability and Detergent Tolerance for *Bacillus subtilis* Lipase A. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60(3):1568–1584, January 2020.
29. A. BOLLINGER, S. THIES, E. KNIEPS-GRÜNHAGEN, C. GERTZEN, S. KOBUS, A. HÖPPNER, M. FERRER, H. GOHLKE, S. H. J. SMITS, and K.-E. JAEGER. A Novel Polyester Hydrolase From the Marine Bacterium *Pseudomonas aestusnigri* – Structural and Functional Insights. *Frontiers in Microbiology*, 11, February 2020.
30. A. VIEGAS, P. DOLLINGER, N. VERMA, J. KUBIAK, T. VIENNET, C. A. M. SEIDEL, H. GOHLKE, M. ETZKORN, F. KOVACIC, and K.-E. JAEGER. Structural and dynamic insights revealing how lipase binding domain MD1 of *Pseudomonas aeruginosa* foldase affects lipase activation. *Scientific Reports*, 10(1), February 2020.
31. D. MULNAES, N. PORTA, R. CLEMENS, I. APANASENKO, J. REINERS, L. GREMER, P. NEUDECKER, S. H. J. SMITS, and H. GOHLKE. TopModel: Template-Based Protein Structure Prediction at Low Sequence Identity Using Top-Down Consensus and Deep Neural Networks. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16(3):1953–1967, January 2020.
32. A. A. J. VASUDEVAN, K. BALAKRISHNAN, C. G. W. GERTZEN, F. BORVETÓ, Z. ZHANG, A. SANGWIMAN, U. HELD, C. KÜSTERMANN, S. BANERJEE, G. G. SCHUMANN, D. HÄUSSINGER, I. G. BRAVO, H. GOHLKE, and C. MÜNK. Loop 1 of APOBEC3C regulates its antiviral activity against HIV-1. February 2020.
33. M. BONUS, A. SOMMERFELD, N. QVARTSKHAVA, B. GÖRG, B. S. LUDWIG, H. KESSLER, H. GOHLKE, and D. HÄUSSINGER. Evidence for functional selectivity in TUDC- and norUDCA-induced signal transduction via $\alpha 5 \beta 1$ integrin towards choleresis. *Scientific Reports*, 10(1), April 2020.
34. L. LIEDGENS, J. ZIMMERMANN, L. WÄSCHENBACH, F. GEISSEL, H. LAPORTE, H. GOHLKE, B. MORGAN, and M. DEPONTE. Quantitative assessment of the determinant structural differences between redox-active and inactive glutaredoxins. *Nature Communications*, 11(1), April 2020.
35. B. SCHEPERS and H. GOHLKE. AMBER-DYES in AMBER: Implementation of fluorophore and linker parameters into AmberTools. *The Journal of Chemical Physics*, 152(22):221,103, June 2020.
36. B. FRIEG, L. GREMER, H. HEISE, D. WILLBOLD, and H. GOHLKE. Binding modes of thioflavin T and Congo red to the fibril structure of amyloid- β (1–42). *Chem. Commun.*, 56:7589–7592, 2020.

37. C. NUTSCHEL, C. COSCOLÍN, D. MULNAES, B. DAVID, M. FERRER, K.-E. JAEGER, and H. GOHLKE. Promiscuous esterases counterintuitively are less flexible than specific ones. June 2020.
38. C. PFLEGER, J. KUSCH, M. KONDAPURAM, T. SCHWABE, C. SATTLER, K. BENNDORF, and H. GOHLKE. Pathways of inter- and intrasubunit allosteric signaling in the C-linker disk and cyclic nucleotide-binding domain of HCN2 channels. June 2020.
39. B. FRIEG, B. GÖRG, N. QVARTSKHAVA, T. JEITNER, N. HOMEYER, D. HÄUSSINGER, and H. GOHLKE. Mechanism of Fully Reversible, pH-Sensitive Inhibition of Human Glutamine Synthetase by Tyrosine Nitration. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16(7):4694–4705, June 2020.
40. A. P. TWIZERIMANA, R. SCHECK, D. BECKER, Z. ZHANG, M. WAMMERS, L. AVELAR, M. PFLIEGER, D. HÄUSSINGER, T. KURZ, H. GOHLKE, and C. MÜNK. Cell type-dependent escape of capsid inhibitors by simian immunodeficiency virus SIVcpz. *Journal of Virology*, September 2020.
41. F. FURTMANN, N. PORTA, D. T. HOANG, J. REINERS, J. SCHUMACHER, J. GOTTSTEIN, H. GOHLKE, and S. H. J. SMITS. Characterization of the nucleotide-binding domain NsrF from the BceAB-type ABC-transporter NsrFP from the human pathogen *Streptococcus agalactiae*. *Scientific Reports*, 10(1), September 2020.
42. M. KONDAPURAM, B. FRIEG, S. YÜKSEL, T. SCHWABE, C. SATTLER, M. LELLE, A. SCHWEINITZ, R. SCHMAUDER, K. BENNDORF, H. GOHLKE, and J. KUSCH. Functional and structural characterization of interactions between opposite subunits in HCN pacemaker channels. *bioRxiv*, 2020.

B.8 Universität zu Köln

1. F. FREYER, S. LEE, Y. B. KIM, S. TREBST, and A. PARAMEKANTI. Thermal and field-induced transitions in ferroquadrupolar Kondo systems. *Phys. Rev. Research*, 2(3), jul 2020. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.033176>.
2. H. WANG, A. HUMBATOVA, Y. LIU, W. QIN, M. LEE, N. CESARATO, F. KORTÜM, S. KUMAR, M. T. ROMANO, S. DAI, R. MO, S. SIVALINGAM, S. MOTAMENY, Y. WU, X. WANG, X. NIU, S. GENG, D. BORNHOLDT, P. M. KROISEL, G. TADINI, S. D. WALTER, F. HAUCK, K. M. GIRISHA, A.-M. CALZA, A. BOTTANI, J. ALTMÜLLER, A. BUNESS, S. YANG, X. SUN, L. MA, K. KUTSCHE, K.-H. GRZESCHIK, R. C. BETZ, and Z. LIN. Mutations in SREBF1, Encoding Sterol Regulatory Element Binding Transcription Factor 1, Cause Autosomal-Dominant IFAP Syndrome. *The American Journal of Human Genetics*, 107(1):34–45, jul 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.ajhg.2020.05.006>.
3. GEORGE, DRISKELL, S. LEDERER, C. BAUER, S. TREBST, and E.-A. KIM. Observation of non-Fermi liquid physics in a quantum critical metal via quantum loop topography. Jul 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2007.07898v1>. arXiv:2007.07898v1 [cond-mat.str-el].
4. A. A. SABERI. Evidence for an ancient sea level on Mars. *The Astrophysical Journal Letters (ApJL) vol. 896, No. 2, L25 (2020)*, Jun 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2006.02164v1>. arXiv:2006.02164v1 [astro-ph.EP].
5. M. BROHMANN, S. WIELAND, S. ANGSTENBERGER, N. J. HERRMANN, J. LÜTTGENS, D. FAZZI, and J. ZAUMSEIL. Guiding Charge Transport in Semiconducting Carbon Nanotube Networks by Local Optical Switching. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(25):28,392–28,403, jun 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acsami.0c05640>.
6. A. WEBER, M. BREUGST, and J. PIETRUSZKA. Experimental and Computational Investigations of the Reaction between alpha, beta-unsaturated Lactones and 1,3-Dienes by Cooperative Lewis-Acid/Brønsted-Acid Catalysis. *Angewandte Chemie International Edition*, jun 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202008365>.
7. M. GANAPATHI, L. ARGYRIOU, F. MARTÍNEZ-AZORÍN, S. MORLOT, G. YIGIT, T. M. LEE, B. AUBER, A. VON GISE, D. S. PETREY, H. THIELE, L. CYGANEK, M. SABATER-MOLINA, P. AHIMAZ, J. CABEZAS-HERRERA, M. SORLÍ-GARCÍA, A. ZIBAT, M. D. SIEGELIN, P. BURFEIND, C. M. BUCHOVECKY, G. HASENFUSS, B. HONIG, Y. LI, A. D. IGLESIAS, and B. WOLLNIK. Bi-allelic missense disease-causing variants in RPL3L associate neonatal dilated cardiomyopathy with muscle-specific ribosome biogenesis. *Human Genetics*, jun 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s00439-020-02188-6>.
8. R. ZHANG, J. GEHLEN, A. KAWALIA, M.-T. MELISSARI, T. C. DAKAL, A. M. MENON, J. HÖFELE, K. RIEDHAMMER, L. WAFFENSCHMIDT, J. FABIAN, K. BREUER, J. KALANITHY, A. C. HILGER, A. SHARMA, A. HÖLSCHER, T. M. BOEMERS, M. PAULY, A. LEUTNER, J. FUCHS, G. SEITZ, B. M. LUDWIKOWSKI, B. GOMEZ, J. HUBERTUS, A. HEYDWEILER, R. KURZ, J. LEONHARDT, F. KOSCH, S. HOLLAND-CUNZ, O. MÜNSTERER, B. URE, E. SCHMIEDEKE, J. NESER, P. DEGENHARDT, S. MÄRZHEUSER, K. KLEINE, M. SCHÄFER, N. SPYCHALSKI, O. J. DEFFAA, J.-H. GOSEMAN, M. LACHER, S. HEILMANN-HEIMBACH, N. ZWINK, E. JENETZKY, M. LUDWIG, P. GROTE, J. SCHUMACHER, H. THIELE, and H. REUTTER. Human exome and mouse embryonic expression data implicate ZFH3, TRPS1, and CHD7 in human esophageal atresia. *PLOS ONE*, 15(6):e0234,246, jun 2020. URL <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0234246>.
9. E. BALOGH, J. C. CHANDLER, M. VARGA, M. TAHOUN, D. K. MENYHÁRD, G. SCHAY, T. GONCALVES, R. HAMAR, R. LÉGRÁDI, ÁKOS SZEKERES, O. GRIBOUVAL, R. KLETA,

- H. STANESCU, D. BOCKENHAUER, A. KERTI, H. WILLIAMS, V. KINSLER, W.-L. DI, D. CURTIS, M. KOLATSI-JOANNOU, H. HAMMID, A. SZŐCS, K. PERCZEL, E. MAKI, G. TOLDI, F. SAVA, C. ARRONDEL, M. KARDOS, A. FINTHA, A. HOSSAIN, F. D'ARCO, M. KALIAKATSOS, J. KOEGLMEIER, W. MIFSUD, M. MOOSAJEE, A. FARO, E. JÁVORSZKY, G. RUDAS, M. H. SAIED, S. MARZOUK, K. KELEN, J. GÖTZE, G. REUSZ, T. TULASSAY, F. DRAGON, G. MOLLET, S. MOTAMENY, H. THIELE, G. DORVAL, P. NÜRNBERG, A. PERCZEL, A. J. SZABÓ, D. A. LONG, K. TOMITA, C. ANTIGNAC, A. M. WATERS, and K. TORY. Pseudouridylation defect due to DKC1 and NOP10 mutations causes nephrotic syndrome with cataracts, hearing impairment, and enterocolitis. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(26):15,137–15,147, jun 2020. URL <https://doi.org/10.1073%2Fpnas.2002328117>.
10. S.-C. PARK. Order-parameter critical exponent of absorbing phase transitions in one-dimensional systems with two symmetric absorbing states. *Physical Review E*, 101(5), may 2020. URL <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.101.052114>.
 11. G. KANOUNGI, M. NOTHNAGEL, T. BECKER, and D. DRICHEL. The exhaustive genomic scan approach, with an application to rare-variant association analysis. *European Journal of Human Genetics*, may 2020. URL <https://doi.org/10.1038%2Fs41431-020-0639-3>.
 12. O. ALBERTON, M. BUCHHOLD, and S. DIEHL. Trajectory dependent entanglement transition in a free fermion chain – from extended criticality to area law. May 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2005.09722v1>. arXiv:2005.09722v1 [cond-mat.stat-mech].
 13. E. POHL-RESCIGNO, J. HAUKE, S. LOIBL, V. MÖBUS, C. DENKERT, P. A. FASCHING, M. KAYALI, C. ERNST, N. WEBER-LASSALLE, C. HANUSCH, H. TESCH, V. MÜLLER, J. ALTMÜLLER, H. THIELE, M. UNTCH, K. LÜBBE, P. NÜRNBERG, K. RHIEM, J. FURLANETTO, B. LEDERER, C. JACKISCH, V. NEKLJUDOVA, R. K. SCHMUTZLER, A. SCHNEEWEISS, and E. HAHNEN. Association of Germline Variant Status With Therapy Response in High-risk Early-Stage Breast Cancer. *JAMA Oncology*, 6(5):744, may 2020. URL <https://doi.org/10.1001%2Fjamaoncol.2020.0007>.
 14. L. LAUTERBACH, B. GOLDFUSS, and J. S. DICKSCHAT. Two Diterpene Synthases from *Chryseobacterium* : Chryseodiene Synthase and Wanjudiene Synthase. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(29):11,943–11,947, may 2020. URL <https://doi.org/10.1002%2Fanie.202004691>.
 15. W. MÖRBE, P. YOGESHWAR, B. TEZKAN, and T. HANSTEIN. Deep exploration using long-offset transient electromagnetics: interpretation of field data in time and frequency domain. *Geophysical Prospecting*, 68(6):1980–1998, may 2020. URL <https://doi.org/10.1111%2F1365-2478.12957>.
 16. H. S. MÜLLER, S. THORWIRTH, and F. LEWEN. Rotational spectroscopy of singly ¹³C substituted isotopomers of propyne and determination of a semi-empirical equilibrium structure. *Journal of Molecular Structure*, 1207:127,769, may 2020. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.molstruc.2020.127769>.
 17. R. UFARTES, H. BERGER, K. TILL, G. SALINAS, M. STURM, J. ALTMÜLLER, P. NÜRNBERG, H. THIELE, R. FUNKE, N. APESHOTIS, H. LANGEN, B. WOLLNIK, A. BORCHERS, and S. PAULI. De novo mutations in FBRSL1 cause a novel recognizable malformation and intellectual disability syndrome. *Human Genetics*, may 2020. URL <https://doi.org/10.1007%2Fs00439-020-02175-x>.
 18. M. KAROW, S. FISCHER, S. MESSLING, R. KONERTZ, J. RIEHL, Q. XIONG, R. RIJAL, P. WAGLE, C. S. CLEMEN, and L. EICHINGER. Functional Characterisation of the Auto-

- phagy ATG12 5/16 Complex in Dictyostelium discoideum. *Cells*, 9(5):1179, may 2020. URL <https://doi.org/10.3390%2Fcells9051179>.
19. A. FATIMA, D. IRMAK, A. NOORMOHAMMADI, M. M. RINSCHEN, A. DAS, O. LEIDECKER, C. SCHINDLER, V. SÁNCHEZ-GAYA, P. WAGLE, W. POKRZYWA, T. HOPPE, A. RADA-IGLESIAS, and D. VILCHEZ. The ubiquitin-conjugating enzyme UBE2K determines neurogenic potential through histone H3 in human embryonic stem cells. *Communications Biology*, 3(1), may 2020. URL <https://doi.org/10.1038%2Fs42003-020-0984-3>.
 20. J. A. HASHMI, F. FADHLI, A. ALMATRAFI, S. AFZAL, K. RAMZAN, H. THIELE, P. NÜRNBERG, and S. BASIT. Homozygosity mapping and whole exome sequencing provide exact diagnosis of Cohen syndrome in a Saudi family. *Brain and Development*, may 2020. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.braindev.2020.04.010>.
 21. D. H. MEYER and B. SCHUMACHER. A transcriptome based aging clock near the theoretical limit of accuracy. *bioRxiv preprint*, may 2020. URL <https://doi.org/10.1101%2F2020.05.29.123430>.
 22. F. FREYER, S. LEE, Y. B. KIM, S. TREBST, and A. PARAMAKANTI. Thermal and field-induced transitions in ferroquadrupolar Kondo systems. Apr 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2004.01201v2>. arXiv:2004.01201v2 [cond-mat.str-el].
 23. S. B. SCHMIDT, M. HÖNIG, Y. SHIN, M. CASSINELLI, A. PERINOT, M. CAIRONI, X. JIAO, C. R. MCNEILL, D. FAZZI, T. BISKUP, and M. SOMMER. Radical Anion Yield, Stability, and Electrical Conductivity of Naphthalene Diimide Copolymers n-Doped with Tertiary Amines. *ACS Applied Polymer Materials*, 2(5):1954–1963, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1021%2Facsapm.0c00151>.
 24. J. J. POWER, F. PINHEIRO, S. POMPEI, V. KOVACOVA, M. YÜKSEL, I. RATHMANN, M. FÖRSTER, M. LÄSSIG, and B. MAIER. Adaptive evolution of hybrid bacteria by horizontal gene transfer. *bioRxiv preprint*, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1101%2F2020.04.23.057174>.
 25. ÖMER TASPINAR, T. WILCZEK, J. ERVER, M. BREUGST, J.-M. NEUDÖRFL, and H.-G. SCHMALZ. Synthesis of the 8,19-Epoxy steroid Eurysterol A. *Chemistry – A European Journal*, 26(19):4256–4260, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1002%2Fchem.202000585>.
 26. L. MALKI, O. SARIG, N. CESARATO, J. MOHAMAD, T. CANTER, S. ASSAF, M. PAVLOVSKY, D. VODO, Y. ANIS, O. BIHARI, K. MALOVITSKI, A. GAT, H. THIELE, B. E. P. WHITE, L. SAMUELOV, A. NANDA, A. S. PALLER, R. C. BETZ, and E. SPRECHER. Loss-of-function variants in C3ORF52 result in localized autosomal recessive hypotrichosis. *Genetics in Medicine*, 22(7):1227–1234, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1038%2Fs41436-020-0794-5>.
 27. E. J. SCHAFFERNICHT, P. LUDWIG, and Y. SHAO. Linkage between dust cycle and loess of the Last Glacial Maximum in Europe. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20(8):4969–4986, apr 2020. URL <https://doi.org/10.5194%2Facp-20-4969-2020>.
 28. B. S. BUDDE, M. A. ALY, M. R. MOHAMED, A. BRESS, J. ALTMÜLLER, S. MOTAMENY, A. KAWALIA, H. THIELE, K. KONRAD, C. BECKER, M. R. TOLIAT, G. NÜRNBERG, E. A. F. SAYED, E. S. MOHAMED, M. PFISTER, and P. NÜRNBERG. Comprehensive molecular analysis of 61 Egyptian families with hereditary nonsyndromic hearing loss. *Clinical Genetics*, 98(1):32–42, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1111%2Fcge.13754>.
 29. T. BÖMERICH, L. HEINEN, and A. ROSCH. Skyrmion and tetron lattices in twisted bilayer graphene. Apr 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2004.13684v1>. arXiv:2004.13684v1 [cond-mat.str-el].

30. N. KELLER, N. MENDOZA-FERREIRA, R. MAROOFIAN, V. CHELBAN, Y. KHALIL, P. B. MILLS, R. BOOSTANI, P. N. TORBATI, E. G. KARIMIANI, H. THIELE, H. HOULDEN, B. WIRTH, and M. KARAKAYA. Hereditary polyneuropathy with optic atrophy due to PDXK variant leading to impaired Vitamin B6 metabolism. *Neuromuscular Disorders*, apr 2020. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.nmd.2020.04.004>.
31. C. BERKE, S. TREBST, and C. HICKEY. Field stability of Majorana spin liquids in antiferromagnetic Kitaev models. *Phys. Rev. B* *101*, 214442 (2020), Apr 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2004.00640v1>. arXiv:2004.00640v1 [cond-mat.str-el].
32. K. XU, H. SUN, T.-P. RUOKO, G. WANG, R. KROON, N. B. KOLHE, Y. PUTTISONG, X. LIU, D. FAZZI, K. SHIBATA, C.-Y. YANG, N. SUN, G. PERSSON, A. B. YANKOVICH, E. OLSSON, H. YOSHIDA, W. M. CHEN, M. FAHLMAN, M. KEMERINK, S. A. JENEKHE, C. MUELLER, M. BERGGREN, and S. FABIANO. Ground-state electron transfer in all-polymer donor–acceptor heterojunctions. *Nature Materials*, 19(7):738–744, mar 2020. URL <https://doi.org/10.1038%2Fs41563-020-0618-7>.
33. D. SEIFRIED, S. WALCH, M. WEIS, S. REISSL, J. D. SOLER, R. S. KLESSEN, and P. R. JOSHI. From parallel to perpendicular – On the orientation of magnetic fields in molecular clouds. Feb 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2003.00017v3>. arXiv:2003.00017v3 [astro-ph.GA].
34. A. J. FORSTNER, S. B. FISCHER, L. M. SCHENK, J. STROHMAIER, A. MAASER-HECKER, C. S. REINBOLD, S. SIVALINGAM, J. HECKER, F. STREIT, F. DEGENHARDT, S. H. WITT, J. SCHUMACHER, H. THIELE, P. NÜRNBERG, J. GUZMAN-PARRA, G. O. DIAZ, G. AUBURGER, M. ALBUS, M. BORRMANN-HASSENBACH, M. J. GONZÁLEZ, S. G. FLORES, F. J. C. FABEIRO, F. DEL RÍO NORIEGA, F. P. PEREZ, J. H. GONZÁLEZ, F. RIVAS, F. MAYORAL, M. BAUER, A. PFENNIG, A. REIF, S. HERMS, P. HOFFMANN, M. PIROOZNA, F. S. GOES, M. RIETSCHEL, M. M. NÖTHEN, and S. CICHON. Whole-exome sequencing of 81 individuals from 27 multiply affected bipolar disorder families. *Translational Psychiatry*, 10(1), feb 2020. URL <https://doi.org/10.1038%2Fs41398-020-0732-y>.
35. I. LESSEL, M.-J. CHEN, S. LÜTTGEN, F. ARNDT, S. FUCHS, S. MEIEN, H. THIELE, J. R. JONES, B. R. SHAW, D. K. CROSSMAN, P. NÜRNBERG, B. R. KORF, C. KUBISCH, and D. LESSEL. Two novel cases further expand the phenotype of TOR1AIP1-associated nuclear envelopathies. *Human Genetics*, 139(4):483–498, feb 2020. URL <https://doi.org/10.1007%2Fs00439-019-02105-6>.
36. M. LINNEMANNSTÖNS, J. SCHWABEDISSEN, A. A. SCHULTZ, B. NEUMANN, H.-G. STAMMLER, R. J. F. BERGER, and N. W. MITZEL. London dispersion-driven hetero-aryl–aryl interactions in 1,2-diaryldisilanes. *Chemical Communications*, 56(15):2252–2255, jan 2020. URL <https://doi.org/10.1039%2Fc9cc09851h>.
37. Y. KARGAPOLOVA, R. REHIMI, H. KAYSERILI, J. BRÜHL, A. ZIRKEL, Y. LI, G. YIGIT, A. HOISCHEN, S. FRANK, N. RUSS, J. TRAUTWEIN, M. LAUGSCH, E. G. GUSMAO, N. JOSIPOVIC, J. ALTMÜLLER, P. NÜRNBERG, G. LÄNGST, F. J. KAISER, E. WATRIN, H. BRUNNER, A. RADA-IGLESIAS, L. KURIAN, B. WOLLNIK, K. BOUAZOUNE, and A. PAPANTONIS. Overarching control of autophagy and DNA damage response by CHD6 revealed by modeling a rare human pathology. *bioRxiv preprint*, jan 2020. URL <https://doi.org/10.1101%2F2020.01.27.921171>.
38. C. HICKEY, C. BERKE, P. P. STAVROPOULOS, H.-Y. KEE, and S. TREBST. Field-Driven Gapless Spin Liquid in the Spin-1 Kitaev Honeycomb Model. *Phys. Rev. Research* *2*, 023361 (2020), Jan 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2001.07699v1>. arXiv:2001.07699v1 [cond-mat.str-el].

39. F. M. DATO, J.-M. NEUDÖRFL, M. GÜTSCHOW, B. GOLDFUSS, and M. PIETSCH. omega-Quinazolinonylalkyl aryl ureas as reversible inhibitors of monoacylglycerol lipase. *Bioorganic Chemistry*, 94:103,352, jan 2020. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.bioorg.2019.103352>.
40. C. BAUER, Y. SCHATTNER, S. TREBST, and E. BERG. Hierarchy of energy scales in an O(3) symmetric antiferromagnetic quantum critical metal: a Monte Carlo study. *Phys. Rev. Research* 2, 023008 (2020), Jan 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2001.00586v3>. arXiv:2001.00586v3 [cond-mat.str-el].
41. M. WITTEK, C. KRONEBERG, and K. LÄMMERMANN. Who is fighting with whom? How ethnic origin shapes friendship, dislike, and physical violence relations in German secondary schools. *Social Networks*, 60:34–47, jan 2020. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.socnet.2019.04.004>.
42. P. ULLRICH, J. SCHMAUCK, M. BRAUNS, M. MANTEL, M. BREUGST, and J. PIETRUSZKA. Enantioselective Allylation of Indoles: A Surprising Diastereoselectivity. *The Journal of Organic Chemistry*, 85(4):1894–1905, jan 2020. URL <https://doi.org/10.1021%2Facs.joc.9b02573>.
43. D. SEIFRIED, S. HAID, S. WALCH, E. M. A. BORCHERT, and T. G. BISBAS. SILCC-Zoom: H₂ and CO-dark gas in molecular clouds – the impact of feedback and magnetic fields. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 492(1):1465–1483, dec 2019. URL <https://doi.org/10.1093%2Fmnras%2Fstz3563>.
44. G. YIGIT, K. SAIDA, D. DEMARZO, N. MIYAKE, A. FUJITA, T. Y. TAN, S. M. WHITE, A. WADLEY, M. R. TOLIAT, S. MOTAMENY, M. FRANITZA, C. A. STUTTERD, P. F. CHONG, R. KIRA, T. SENGOKU, K. OGATA, M. J. G. SACOTO, C. FRESEN, B. B. BECK, P. NÜRNBERG, C. DIETERICH, B. WOLLNIK, N. MATSUMOTO, and J. ALTMÜLLER. The recurrent postzygotic pathogenic variant p.Glu47Lys in RHOA causes a novel recognizable neuroectodermal phenotype. *Human Mutation*, 41(3):591–599, dec 2019. URL <https://doi.org/10.1002%2Fhumu.23964>.
45. A. RIABINSKA, D. LEHRMANN, R. D. JACHIMOWICZ, G. KNITTEL, C. FRITZ, A. SCHMITT, A. GEYER, C. HENEWEER, M. WITTERSHEIM, L. P. FRENZEL, A. TORGOVNICK, J. L. WIEDERSTEIN, C. M. WUNDERLICH, M. ORTMANN, A. PAILLARD, W. WÖSSMANN, A. BORKHARDT, S. BURDACH, M.-L. HANSMANN, A. ROSENWALD, S. PERNER, G. MALL, W. KLAPPER, A. MERSEBURG, M. KRÜGER, H. GRÜLL, T. PERSIGEHLE, F. T. WUNDERLICH, M. PEIFER, O. UTERMÖHLEN, R. BÜTTNER, F. BELEGGIA, and H. C. REINHARDT. ATM activity in T cells is critical for immune surveillance of lymphoma in vivo. *Leukemia*, 34(3):771–786, nov 2019. URL <https://doi.org/10.1038%2Ffs41375-019-0618-2>.
46. D. GIESE, A. HEINLEIN, A. KLAWONN, J. KNEPPER, and K. SONNABEND. Comparison of MRI measurements and CFD simulations of hemodynamics in intracranial aneurysms using a 3D printed model - A benchmark problem. *PAMM*, 19(1), nov 2019. URL <https://doi.org/10.1002%2Fpamm.201900398>.
47. M. PERGANDE, S. MOTAMENY, ÖZKAN ÖZDEMİR, M. KREUTZER, H. WANG, H.-S. DAIMAGÜLER, K. BECKER, M. KARAKAYA, H. EHRHARDT, N. ELCIOGLU, S. OSTOJIC, C.-M. CHAO, A. KAWALIA, ÖZGÜR DUMAN, A. KOY, A. HAHN, J. REIMANN, K. SCHÖNER, A. SCHÄNZER, J. H. WESTHOFF, E. M. C. SCHWAIBOLD, M. COSSEE, M. IMBERT-BOUTEILLE, H. VON PEIN, G. HALILOGLU, H. TOPALOGLU, J. ALTMÜLLER, P. NÜRNBERG, H. THIELE, R. HELLER, and S. CIRAK. The genomic and clinical landscape of fetal akinesia. *Genetics in Medicine*, 22(3):511–523, nov 2019. URL <https://doi.org/10.1038%2Ffs41436-019-0680-1>.

48. H. S. DAFSARI, A. KAWALIA, R. SPRUTE, M. KARAKAYA, A. MALENICA, P. HERKENRATH, P. NÜRNBERG, S. MOTAMENY, H. THIELE, and S. CIRAK. Novel mutations in SLC6A5 with benign course in hyperekplexia. *Molecular Case Studies*, 5(6):a004,465, oct 2019. URL <https://doi.org/10.1101/2Fmcs.a004465>.
49. X. B. NGUYEN, Y. NAKANO, N. M. DUGGAN, L. SCOTT, M. BREUGST, and D. W. LUPTON. N-Heterocyclic Carbene Catalyzed (5+1) Annulations Exploiting a Vinyl Dianion Synthon Strategy. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(33):11,483–11,490, aug 2019. URL <https://doi.org/10.1002/2Fanie.201905475>.
50. F. THRUN, V. HICKMANN, C. STOCK, A. SCHÄFER, W. MAIER, M. BREUGST, N. E. SCHLÖRER, A. BERKESSEL, and J. H. TELES. Technical Synthesis of 1,5,9-Cyclododecatriene Revisited: Surprising Byproducts from a Venerable Industrial Process. *The Journal of Organic Chemistry*, 84(21):13,211–13,220, aug 2019. URL <https://doi.org/10.1021/2Facs.joc.9b01633>.
51. P. A. MISHCHENKO, Y. KATO, K. O'BRIEN, T. A. BOJESEN, T. ESCHMANN, M. HERMANN, S. TREBST, and Y. MOTOME. Chiral spin liquids with crystalline Z₂ gauge order in a three-dimensional Kitaev model. *Phys. Rev. B* 101, 045118 (2020), Jul 2019. URL <http://arxiv.org/abs/1907.10241v1>. arXiv:1907.10241v1 [cond-mat.str-el].
52. D. KIESE, F. L. BUESSEN, C. HICKEY, S. TREBST, and M. M. SCHERER. Emergence and stability of spin-valley entangled quantum liquids in moiré heterostructures. *Phys. Rev. Research* 2, 013370 (2020), Jul 2019. URL <http://arxiv.org/abs/1907.09490v1>. arXiv:1907.09490v1 [cond-mat.str-el].

B.9 Westfälische Wilhelms-Universität Münster

1. S. ALI, G. BERGNER, H. GERBER, I. MONTVAY, G. MÜNSTER, S. PIEMONTE, and P. SCIOR. Numerical Results for the Lightest Bound States in $N=1$ Supersymmetric $SU(3)$ Yang-Mills Theory. *Physical Review Letters*, 122(22), June 2019. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.122.221601>.
2. S. ALI, G. BERGNER, H. GERBER, I. MONTVAY, G. MÜNSTER, S. PIEMONTE, and P. SCIOR. Continuum extrapolation of Ward identities in $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric $SU(3)$ Yang-Mills theory. *The European Physical Journal C*, 80(6), June 2020. URL <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-020-8113-5>.
3. L. ARMBRUSTER, E. LINSTER, J.-B. BOYER, A. BRÜNJE, J. EIRICH, I. STEPHAN, W. V. BIENVENUT, J. WEIDENHAUSEN, T. MEINNEL, R. HELL, I. SINNING, I. FINKEMEIER, C. GIGLIONE, and M. WIRTZ. NAA50 Is an Enzymatically Active $N\alpha$ -Acetyltransferase That Is Crucial for Development and Regulation of Stress Responses. *Plant Physiology*, 183(4):1502–1516, May 2020. URL <https://doi.org/10.1104/pp.20.00222>.
4. A. ARORA, T. DEILMANN, T. REICHENAUER, J. KERN, S. M. DE VASCONCELLOS, M. ROHLFING, and R. BRATSCHITSCH. Excited-State Trions in Monolayer WS_2 . *Physical Review Letters*, 123(16), October 2019. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.123.167401>.
5. A. ARORA, N. K. WESSLING, T. DEILMANN, T. REICHENAUER, P. STEEGER, P. KOSSACKI, M. POTEMSKI, S. M. DE VASCONCELLOS, M. ROHLFING, and R. BRATSCHITSCH. Dark trions govern the temperature-dependent optical absorption and emission of doped atomically thin semiconductors. *Physical Review B*, 101(24), June 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.101.241413>.
6. P. BASTIAN, M. ALTENBERND, N.-A. DREIER, C. ENGWER, J. FAHLKE, R. FRITZE, M. GEVELER, D. GÖDDEKE, O. ILIEV, O. IPPISCH, J. MOHRING, S. MÜTHING, M. OHLBERGER, D. RIBBROCK, N. SHEGUNOV, and S. TUREK. Exa-Dune—Flexible PDE Solvers, Numerical Methods and Applications. In *Software for Exascale Computing - SPPEXA 2016-2019*, pages 225–269. Springer International Publishing, 2020. URL https://doi.org/10.1007/978-3-030-47956-5_9.
7. G. BERGNER, S. ALI, H. GERBER, C. LOPEZ, I. MONTVAY, G. MÜNSTER, S. PIEMONTE, and P. SCIOR. Continuum limit of $SU(3)$ $\mathcal{N} = 1$ supersymmetric Yang-Mills theory and supersymmetric gauge theories on the lattice. In *Proceedings of 37th International Symposium on Lattice Field Theory — PoS(LATTICE2019)*. Sissa Medialab, January 2020. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0175>.
8. F. BERNS, K. SCHMIDT, A. GRASS, and C. BEECKS. A New Approach for Efficient Structure Discovery in IoT. In *2019 IEEE International Conference on Big Data (Big Data)*. IEEE, December 2019. URL <https://doi.org/10.1109/bigdata47090.2019.9006082>.
9. W. V. BIENVENUT, A. BRÜNJE, J.-B. BOYER, J. S. MÜHLENBECK, G. BERNAL, I. LAS-SOWSKAT, C. DIAN, E. LINSTER, T. V. DINH, M. M. KOSKELA, V. JUNG, J. SEIDEL, L. K. SCHYRBA, A. IVANAUSKAITE, J. EIRICH, R. HELL, D. SCHWARZER, P. MULO, M. WIRTZ, T. MEINNEL, C. GIGLIONE, and I. FINKEMEIER. Dual lysine and N-terminal acetyltransferases reveal the complexity underpinning protein acetylation. *Molecular Systems Biology*, 16(7), July 2020. URL <https://doi.org/10.15252/msb.20209464>.
10. M. C. BÖRNER and J. NEUGEBAUER. Optimizing bidentate N-heterocyclic carbene ligands for the modification of late transition metal surfaces – new insights through theory. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(45):24,926–24,934, 2019. URL <https://doi.org/10.1039/c9cp03840j>.

11. G. CHURAKOV, F. ZHANG, N. GRUNDMANN, W. MAKALOWSKI, A. NOLL, L. DORONINA, and J. SCHMITZ. The multi-comparative 2-n-way genome suite. *Genome Research*, page gr.262261.120, July 2020. URL <https://doi.org/10.1101/gr.262261.120>.
12. T. DEILMANN. Valley selectivity induced by magnetic adsorbates: Triplet oxygen on monolayer MoS₂. *Physical Review B*, 101(8), February 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.101.085130>.
13. T. DEILMANN, P. KRÜGER, and M. ROHLFING. Ab Initio Studies of Exciton g Factors: Monolayer Transition Metal Dichalcogenides in Magnetic Fields. *Physical Review Letters*, 124(22), June 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.124.226402>.
14. T. DEILMANN, M. ROHLFING, and U. WURSTBAUER. Light-matter interaction in van der Waals hetero-structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(33):333,002, May 2020. URL <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ab8661>.
15. G. M. DE DIVITIIS, P. FRITZSCH, J. HEITGER, C. C. KÖSTER, S. KUBERSKI, and A. VLADIKAS. Non-perturbative determination of improvement coefficients b_m and $b_A - b_P$ and normalisation factor $Z_m Z_P / Z_A$ with $N_f = 3$ Wilson fermions. *The European Physical Journal C*, 79(9), September 2019. URL <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-7287-1>.
16. O. DORONIN, K. DERGUN, A. DERGACHEV, A. ILINA, and S. GORLATCH. Testing of multithreaded applications with locks on non-atomic variables. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 20(2):243–248, April 2020. URL <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-2-243-248>.
17. F. EICKHOFF, E. KOLODZEISKI, T. ESAT, N. FOURNIER, C. WAGNER, T. DEILMANN, R. TEMIROV, M. ROHLFING, F. S. TAUTZ, and F. B. ANDERS. Inelastic electron tunneling spectroscopy for probing strongly correlated many-body systems by scanning tunneling microscopy. *Physical Review B*, 101(12), March 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.101.125405>.
18. S. ENGELNKEMPER and U. THIELE. The collective behaviour of ensembles of condensing liquid drops on heterogeneous inclined substrates. *EPL (Europhysics Letters)*, 127(5):54,002, October 2019. URL <https://doi.org/10.1209/0295-5075/127/54002>.
19. L. ESCHMANN, A. SABITOVA, R. TEMIROV, F. S. TAUTZ, P. KRÜGER, and M. ROHLFING. Coverage-dependent anisotropy of the NTCDA/Ag(111) interface state dispersion. *Physical Review B*, 100(12), September 2019. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.100.125155>.
20. O. FEDKEVYCH and L. LÖNNBLAD. Four-jet double parton scattering production in proton-nucleus collisions within the pythia8 framework. *Physical Review D*, 102(1), July 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevd.102.014029>.
21. V. GUZEY and M. KLASSEN. Inclusive dijet photoproduction in ultraperipheral heavy ion collisions at the CERN Large Hadron Collider in next-to-leading order QCD. *Physical Review C*, 99(6), June 2019. URL <https://doi.org/10.1103/physrevc.99.065202>.
22. V. GUZEY and M. KLASSEN. Constraints on nuclear parton distributions from dijet photoproduction at the LHC. *The European Physical Journal C*, 79(5), May 2019. URL <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-6905-2>.
23. B. HAGEDORN, J. LENFERS, T. KÖHLER, X. QIN, S. GORLATCH, and M. STEUWER. Achieving high-performance the functional way: a functional pearl on expressing high-performance optimizations as rewrite strategies. *Proceedings of the ACM on Programming Languages*, 4(ICFP):1–29, August 2020. URL <https://doi.org/10.1145/3408974>.

24. J. HEITGER, F. JOSWIG, and A. VLADIKAS. Ward identity determination of ZS/ZP for $N_f = 3$ lattice QCD in a Schrödinger functional setup. *The European Physical Journal C*, 80(8), August 2020. URL <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-020-8266-2>.
25. S. IVASHCHENKO and W. MUTSCHLER. The effect of observables, functional specifications, model features and shocks on identification in linearized DSGE models. *Economic Modelling*, 88:280–292, June 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.econmod.2019.09.039>.
26. J. JEGGLE, J. STENHAMMAR, and R. WITTKOWSKI. Pair-distribution function of active Brownian spheres in two spatial dimensions: Simulation results and analytic representation. *The Journal of Chemical Physics*, 152(19):194,903, May 2020. URL <https://doi.org/10.1063/1.5140725>.
27. F. JOSWIG, L. CHIMIRRI, P. FRITZSCH, J. HEITGER, M. PANERO, C. PENA, and D. P. AND. Non-perturbative renormalization of $O(a)$ improved tensor currents. In *Proceedings of 37th International Symposium on Lattice Field Theory — PoS(LATTICE2019)*. Sissa Medialab, January 2020. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0212>.
28. H. KLAASEN, L. LIU, H.-Y. GAO, L. VIERGUTZ, P. A. HELD, T. KNECHT, X. MENG, M. C. BÖRNER, D. BARTON, S. AMIRJALAYER, J. NEUGEBAUER, A. STUDER, and H. FUCHS. Intermolecular coupling and intramolecular cyclization of aryl nitriles on Au(111). *Chemical Communications*, 55(77):11,611–11,614, 2019. URL <https://doi.org/10.1039/c9cc03418h>.
29. S. KUBERSKI, J. HEITGER, and F. J. AND. Towards the determination of the charm quark mass on $N_f = 2 + 1$ CLS ensembles. In *Proceedings of 37th International Symposium on Lattice Field Theory — PoS(LATTICE2019)*. Sissa Medialab, December 2019. URL <https://doi.org/10.22323/1.363.0092>.
30. V. KUCHER, J. HUNLOH, and S. GORLATCH. Performance Portability and Unified Profiling for Finite Element Methods on Parallel Systems. *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal*, 5(1):119–127, January 2020. URL <https://doi.org/10.25046/aj050116>.
31. T. LETTMANN and M. ROHLFING. Electronic Excitations of Polythiophene within Many-Body Perturbation Theory with and without the Tamm–Dancoff Approximation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15(8):4547–4554, June 2019. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00223>.
32. C. MAAS and U. HANSEN. Dynamics of a terrestrial magma ocean under planetary rotation: A study in spherical geometry. *Earth and Planetary Science Letters*, 513:81–94, May 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2019.02.016>.
33. A. MASUHR and M. TREDE. Bayesian estimation of generalized partition of unity copulas. *Dependence Modeling*, 8(1):119–131, July 2020. URL <https://doi.org/10.1515/demo-2020-0007>.
34. A. RASCH, R. SCHULZE, and S. GORLATCH. Generating Portable High-Performance Code via Multi-Dimensional Homomorphisms. In *2019 28th International Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT)*. IEEE, September 2019. URL <https://doi.org/10.1109/pact.2019.00035>.
35. J. REN, H. KLAASEN, M. C. WITTELER, L. VIERGUTZ, J. NEUGEBAUER, H.-Y. GAO, A. STUDER, and H. FUCHS. Aryl Triflates in On-Surface Chemistry. *Chemistry – A European Journal*, July 2020. URL <https://doi.org/10.1002/chem.202002486>.

36. N. SANDMANN, J. BACHMANN, A. HEPP, N. L. DOLTSINIS, and J. MÜLLER. Copper(ii)-mediated base pairing involving the artificial nucleobase 3*H*-imidazo[4, 5-*f*]quinolin-5-ol. *Dalton Transactions*, 48(28):10,505–10,515, 2019. URL <https://doi.org/10.1039/c9dt02043h>.
37. F. SCHNEIDER and T. LEIBNER. First-order continuous- and discontinuous-Galerkin moment models for a linear kinetic equation: Model derivation and realizability theory. *Journal of Computational Physics*, 416:109,547, September 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109547>.
38. M. WÖSTE, E. LEITÃO, S. LAURENTINO, B. HORSTHEMKE, S. RAHMANN, and C. SCHRÖDER. wg-blimp: an end-to-end analysis pipeline for whole genome bisulfite sequencing data. *BMC Bioinformatics*, 21(1), May 2020. URL <https://doi.org/10.1186/s12859-020-3470-5>.
39. M. D. ZAHARIEVA, M. TREDE, and B. WILFLING. Bayesian semiparametric multivariate stochastic volatility with application. *Econometric Reviews*, pages 1–24, May 2020. URL <https://doi.org/10.1080/07474938.2020.1761152>.

B.10 Universität Paderborn

1. B. ZHAO and U. MANTHE. Non-adiabatic transitions in the reaction of fluorine with methane. *The Journal of Chemical Physics*, (231102), 2020.
2. C.-D. DONG and S. SCHUMACHER. Molecular Doping of PCPDT–BT Copolymers: Comparison of Molecular Complexes with and without Integer Charge Transfer. *The Journal of Physical Chemistry C*, page 30863–30870, 2019.
3. F. BARKHAUSEN, S. SCHUMACHER, and X. MA. Multistable circular currents of polariton condensates trapped in ring potentials. *Optics Letters*, (1192), 2020.
4. X. MA, B. BERGER, M. ASSMANN, R. DRIBEN, T. MEIER, C. SCHNEIDER, S. HÖFLING, and S. SCHUMACHER. Realization of all-optical vortex switching in exciton-polariton condensates. *Nature Communications*, 2020.
5. M. PUKROP and S. SCHUMACHER. Externally controlled Lotka-Volterra dynamics in a linearly polarized polariton fluid. *Physical Review E*, 2020.
6. X. MA, Y. Y. KARTASHOV, T. GAO, and S. SCHUMACHER. Controllable high-speed polariton waves in a PT-symmetric lattice. *New Journal of Physics*, (123008), 2019.
7. J. REN, Q. LIAO, H. HUANG, Y. LI, T. GAO, X. MA, S. SCHUMACHER, J. YAO, S. BAI, and H. FU. Efficient Bosonic condensation of exciton polaritons in an H-aggregate organic single-crystal microcavity. 2020, submitted for publication.
8. X. MA, Y. Y. KARTASHOV, T. GAO, L. TORNER, and S. SCHUMACHER. Spiraling vortices in polariton condensates. 2020, submitted for publication.
9. B. BERGER, D. SCHMIDT, X. MA, S. SCHUMACHER, C. SCHNEIDER, S. HÖFLING, and M. ASSMANN. Formation dynamics of exciton polariton vortices created by non-resonant annular pumping. 2020, submitted for publication.
10. M. PUKROP, S. SCHUMACHER, and X. MA. Optical vortex core switching in spinor polariton condensates. 2020, Preprint: arXiv:1907.10974.
11. T. KÜHNE, M. IANNUZZI, M. D. BEN, V. V. RYBKIN, P. SEEWALD, F. STEIN, T. LAINO, R. Z. KHALIULLIN, O. SCHÜTT, F. SCHIFFMANN, and ET AL. CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package - Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 152(19194103), 2020.
12. M. LASS, R. SCHADE, T. KÜHNE, and C. PLESSL. A Submatrix-Based Method for Approximate Matrix Function Evaluation in the Quantum Chemistry Code CP2K. *SC20: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing*, 2020.
13. V. RENGARAJ, M. LASS, C. PLESSL, and T. KÜHNE. Accurate Sampling with Noisy Forces from Approximate Computing. *Computation*, 8(239), 2020.
14. H. ELGABARTY and T. D. KÜHNE. Tumbling with a limp: local asymmetry in water’s hydrogen bond network and its consequences. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22:10,397–10,411, 2020. URL <http://dx.doi.org/10.1039/C9CP06960G>.
15. P. SCHÖPPE, S. SCHÖNHERR, M. CHUGH, H. MIRHOSSEINI, P. JACKSON, R. WUERZ, M. RITZER, A. JOHANNES, G. MARTÍNEZ-CRIADO, W. WISNIEWSKI, T. SCHWARZ, C. T. PLASS, M. HAFERMANN, T. D. KÜHNE, C. S. SCHNOHR, and C. RONNING. Revealing the origin of the beneficial effect of cesium in highly efficient Cu(In,Ga)Se₂ solar cells. *Nano Energy*, 71:104,622, 2020. ISSN 2211-2855. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211285520301798>.

16. M. GUC, T. KODALLE, R. KORMATH MADAM RAGHUPATHY, H. MIRHOSSEINI, T. D. KÜHNE, I. BECERRIL-ROMERO, A. PÉREZ-RODRÍGUEZ, C. A. KAUFMANN, and V. IZQUIERDO-ROCA. Vibrational Properties of RbInSe₂: Raman Scattering Spectroscopy and First-Principle Calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(2):1285–1291, 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08781>. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08781>.
17. J. GUJT, P. ZIMMER, F. ZYSK, V. SÜSS, C. FELSER, M. BAUER, and T. D. KÜHNE. Water structure near the surface of Weyl semimetals as catalysts in photocatalytic proton reduction. *Structural Dynamics*, 7(3):034,101, 2020. URL <https://doi.org/10.1063/4.0000008>. <https://doi.org/10.1063/4.0000008>.
18. H. ELGABARTY, T. KAMPFRATH, D. J. BONTHUIS, V. BALOS, N. K. KALIANNAN, P. LO-CHE, R. R. NETZ, M. WOLF, T. D. KÜHNE, and M. SAJADI. Energy transfer within the hydrogen bonding network of water following resonant terahertz excitation. *Science Advances*, 6(17), 2020. URL <https://advances.sciencemag.org/content/6/17/eaay7074>. <https://advances.sciencemag.org/content/6/17/eaay7074.full.pdf>.
19. S. K. SAHOO, J. HESKE, S. AZADI, Z. ZHANG, N. V. TARAKINA, M. OSCHATZ, R. Z. KHALIULLIN, M. ANTONIETTI, and T. D. KÜHNE. On the Possibility of Helium Adsorption in Nitrogen Doped Graphitic Materials. *Scientific Reports*, 10, 2020. URL <https://doi.org/10.1038/s41598-020-62638-z>.
20. T. SPURA, P. VIRNAU, and T. D. KÜHNE. High Precision Estimates of the Liquid-Vapor Critical Point of Water-Salt Mixtures. *J. Chem. Phys.*, 2020, submitted for publication.
21. F. CALCAVECCHIA, T. D. KÜHNE, and M. HOLZMANN. Two-Dimensional Hydrogen Structure at Ultra-High Pressure. *New J. Phys.*, 2020, submitted for publication.
22. A. ELIZABETH, S. K. SAHOO, D. LOCKHORN, A. TIMMER, N. AGHDASSI, H. ZACHARIAS, T. D. KÜHNE, S. SIEBENTRITT, H. MIRHOSSEINI, and H. MÖNIG. Oxidation/reduction cycles and their reversible effect on the dipole formation on calcopyrite surfaces. *Phys. Rev. Mater.*, 2020, submitted for publication.
23. H. WIEBELER, K. R. RAMYA, H. MIRHOSSEINI, and T. D. KÜHNE. Computational Screening of Nitrogen- and Phosphor-Containing Materials as Transparent P-type Conductors. *Chem. Mater.*, 2020, submitted for publication.
24. I. MAJUMDAR, V. PARVAN, B. CHACKO, Y. WANG, D. GREINER, D. SCHLATMANN, I. LAUER-MANN, S. K. SAHOO, T. D. KÜHNE, and H. MIRHOSSEINI. Chemical and electronic effects of KF and RbF treatments at Cu(In,Ga)Se₂. *Chem. Mater.*, 2020, submitted for publication.
25. M. A. SALEM and T. D. KÜHNE. Insight from energy decomposition analysis on a hydrogen-bond-mediated mechanism for on-water catalysis. *Chem. Phys. Chem.*, 2020, submitted for publication.
26. S. K. SAHOO, J. HESKE, M. ANTONIETTI, Q. QIN, M. OSCHATZ, and T. D. KÜHNE. Mechanistic Insights into the Electrochemical N₂ Reduction to Ammonia using Au/Fe-Supported on Nitrogen Doped Porous Carbon. *Molecules*, 2020, submitted for publication.
27. N. K. KALIANNAN, A. HENAO ARISTIZABAL, H. WIEBELER, F. ZYSK, T. OHTO, Y. NAGATA, and T. D. KÜHNE. Impact of intermolecular vibrational coupling effects on the sum-frequency generation spectra of the water/air interface. *Molecular Physics*, 0(0):1–10, 2019.
28. M. ECKHOFF, P. E. BLÖCHL, and J. BEHLER. Hybrid density functional theory benchmark study on lithium manganese oxides. *Physical Review B*, 2020.

29. G. GUEVARA-CARRION, S. ANCHERBAK, A. MIALDUN, J. VRABEC, and V. SHEVTSOVA. Diffusion of Methane in Supercritical Carbon Dioxide Across the Widom Line. *Scientific Reports*, 9(8466), 2019.
30. M. HEINEN and J. VRABEC. Evaporation sampled by stationary molecular dynamics simulation. *The Journal of Chemical Physics*, (044704), 2019.
31. R. S. CHATWELL and J. VRABEC. Bulk viscosity of liquid noble gases. *The Journal of Chemical Physics*, (094503), 2020.
32. M. A. FODOR, Z. HATÓ, T. KRISTÓF, and M. PÓSFAL. The role of clay surfaces in the heterogeneous nucleation of calcite: Molecular dynamics simulations of cluster formation and attachment. *Chemical Geology*, (119497), 2020.
33. R. FINGERHUT, G. HERRES, and J. VRABEC. Thermodynamic factor of quaternary mixtures from Kirkwood–Buff integration. *Molecular Physics*, (e1643046), 2019.
34. P. GORLANI, T. KENTER, and C. PLESSL. OpenCL Implementation of Cannon’s Matrix Multiplication Algorithm on Intel Stratix 10 FPGAs. In *Proceedings of the International Conference on Field-Programmable Technology (FPT)*. IEEE, 2019.
35. X. XU, A. PORT, C. WIEBELER, K.-H. ZHAO, I. SCHAPIRO, and W. GÄRTNER. Structural Elements Regulating the Photochromicity in a Cyanobacteriochrome. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, (201910208), 2020.
36. A. FERRERI, K. H. LUO, H. HERRMANN, C. SILBERHORN, and P. SHARAPOVA. Integrated multimode SU (1,1) interferometer. 2019. Quantum 2019, Torino.
37. L. DRUDE, D. HASENKLEVER, and R. HAEB-UMBACH. Unsupervised Training of a Deep Clustering Model for Multichannel Blind Source Separation. In *ICASSP 2019 - 2019 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 695–699. May 2019. ISSN 2379-190X.
38. L. DRUDE, J. HEYMAN, and R. HAEB-UMBACH. Unsupervised Training of Neural Mask-Based Beamforming. In *Proc. Interspeech 2019*, pages 1253–1257. 2019. URL <http://dx.doi.org/10.21437/Interspeech.2019-2549>.
39. L. DRUDE, J. HEITKAEMPER, C. BOEDDEKER, and R. HAEB-UMBACH. SMS-WSJ: Database, performance measures, and baseline recipe for multi-channel source separation and recognition. 2019. arXiv:1910.13934 [cs.SD].
40. J. EBBERS and R. HAEB-UMBACH. Convolutional Recurrent Neural Network and Data Augmentation for Audio Tagging with Noisy Labels and Minimal Supervision. In *DCASE2019 Workshop, New York, USA*. 2019.
41. J. EBBERS, L. DRUDE, R. HAEB-UMBACH, A. BRENDEL, and W. KELLERMANN. Weakly Supervised Sound Activity Detection and Event Classification in Acoustic Sensor Networks. In *2019 IEEE 8th International Workshop on Computational Advances in Multi-Sensor Adaptive Processing (CAMSAP)*, pages 301–305. Dec 2019.
42. J. HEITKAEMPER, T. FEHÉR, M. FREITAG, and R. HAEB-UMBACH. A Study on Online Source Extraction in the Presence of Changing Speaker Positions. In C. MARTÍN-VIDE, M. PURVER, and S. POLLAK, editors, *Statistical Language and Speech Processing*, pages 198–209. Springer International Publishing, Cham, 2019. ISBN 978-3-030-31372-2.

43. J. HEYMAN, L. DRUDE, R. HAEB-UMBACH, K. KINOSHITA, and T. NAKATANI. Joint Optimization of Neural Network-based WPE Dereverberation and Acoustic Model for Robust Online ASR. In *ICASSP 2019 - 2019 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 6655–6659. May 2019. ISSN 2379-190X.
44. N. KANDA, C. BOEDDEKER, J. HEITKAEMPER, Y. FUJITA, S. HORIGUCHI, K. NAGAMATSU, and R. HAEB-UMBACH. Guided Source Separation Meets a Strong ASR Backend: Hitachi/Paderborn University Joint Investigation for Dinner Party ASR. In *Proc. Interspeech 2019*, pages 1248–1252. 2019. URL <http://dx.doi.org/10.21437/Interspeech.2019-1167>.
45. J. M. MARTÍN-DOÑAS, J. HEITKAEMPER, R. HAEB-UMBACH, A. M. GOMEZ, and A. M. PEINADO. Multi-Channel Block-Online Source Extraction Based on Utterance Adaptation. In *Proc. Interspeech 2019*, pages 96–100. 2019. URL <http://dx.doi.org/10.21437/Interspeech.2019-2244>.
46. T. V. NEUMANN, K. KINOSHITA, M. DELCROIX, S. ARAKI, T. NAKATANI, and R. HAEB-UMBACH. All-neural Online Source Separation, Counting, and Diarization for Meeting Analysis. In *ICASSP 2019 - 2019 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 91–95. May 2019. ISSN 2379-190X.
47. C. ZORILA, C. BOEDDEKER, R. DODDIPATLA, and R. HAEB-UMBACH. An Investigation Into the Effectiveness of Enhancement in ASR Training and Test for Chime-5 Dinner Party Transcription. In *ASRU 2019, Sentosa, Singapore*. 2019.
48. J.-O. JOSWIG, J. ANDERS, H. ZHANG, C. RADEMACHER, and B. G. KELLER. Molecular Mechanism of the pH-Dependent Calcium Affinity in Langerin. *bioRxiv*, 2020.
49. C. PARREÑO-TORRES, R. ALVAREZ-VALDES, R. RUIZ, and K. TIERNEY. Minimizing crane times in pre-marshalling problems. *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, (101917), 2020.
50. S. KUHLEMANN, M. SELLMANN, and K. TIERNEY. *Exploiting Counterfactuals for Scalable Stochastic Optimization*. 2019.
51. A. EL MESAUDI-PAUL, D. WEISS, V. BENGIS, E. HÜLLERMEIER, and K. TIERNEY. *Pool-Based Realtime Algorithm Configuration: A Preselection Bandit Approach*, volume 12096 of *Lecture Notes in Computer Science*, page 216–232. Springer, 2020.
52. M. SELLMANN and K. TIERNEY. *Hyper-parameterized Dialectic Search for Non-linear Box-Constrained Optimization with Heterogenous Variable Types*. 2020.
53. S. KUHLEMANN and K. TIERNEY. A genetic algorithm for finding realistic sea routes considering the weather. *Journal of Heuristics*, 2020.
54. K. TIERNEY and D. WETZEL. Integrating fleet deployment into liner shipping vessel repositioning. 2019, submitted to *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation*.
55. A. HOTTUNG and K. TIERNEY. Neural Large Neighborhood Search for the Capacitated Vehicle Routing Problem. In *ECAI*. 2020.
56. A. TORNEDE, M. D. WEVER, and E. HÜLLERMEIER. Extreme Algorithm Selection with Dyadic Feature Representation. In *Discovery Science*. 2020.
57. M. WEVER, A. TORNEDE, F. MOHR, and E. HÜLLERMEIER. LiBR: Label-Wise Selection of Base Learners in Binary Relevance for Multi-label Classification. In M. R. BERTHOLD, A. FEELDERS, and G. KREMPL, editors, *Advances in Intelligent Data Analysis XVIII*, pages 561–573. Springer International Publishing, Cham, 2020. ISBN 978-3-030-44584-3.

58. A. TORNEDE, M. D. WEVER, and E. HÜLLERMEIER. Algorithm Selection as Recommendation: From Collaborative Filtering to Dyad Ranking. In F. HOFFMANN, E. HÜLLERMEIER, and R. MIKUT, editors, *Proceedings - 29. Workshop Computational Intelligence, Dortmund, 28. - 29. November 2019*, page 135–146. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 2019.
59. F. MOHR, M. WEVER, A. TORNEDE, and E. HÜLLERMEIER. From Automated to On-The-Fly Machine Learning. In K. DAVID, K. GEIHS, M. LANGE, and G. STUMME, editors, *INFORMATIK 2019: 50 Jahre Gesellschaft für Informatik – Informatik für Gesellschaft*, pages 273–274. Gesellschaft für Informatik e.V., Bonn, 2019.
60. M. D. WEVER, F. MOHR, A. TORNEDE, and E. HÜLLERMEIER. Automating Multi-Label Classification Extending ML-Plan. 2019.
61. E. HÜLLERMEIER ET AL. Runtime prediction of machine learning pipelines in the context of automated machine learning. submitted to IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.
62. E. HÜLLERMEIER ET AL. Fuzzylets for time series classification. submitted to IEEE Transactions on Fuzzy Systems.
63. E. HÜLLERMEIER ET AL. Single player Monte-Carlo tree search based on the Plackett-Luce model. submitted.

B.11 Universität Siegen

1. A. FISCHER and B. EIDEL. Error analysis for quadtree-type mesh coarsening algorithms adapted to pixelized heterogeneous microstructures. *Computational Mechanics*, 65(6):1467–1491, March 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s00466-020-01830-4>.
2. P. NEFF, B. EIDEL, M. V. D’AGOSTINO, and A. MADEO. Identification of Scale-Independent Material Parameters in the Relaxed Micromorphic Model Through Model-Adapted First Order Homogenization. *Journal of Elasticity*, 139(2):269–298, October 2019. URL <https://doi.org/10.1007/s10659-019-09752-w>.
3. M. V. D’AGOSTINO, G. BARBAGALLO, I.-D. GHIBA, B. EIDEL, P. NEFF, and A. MADEO. Effective Description of Anisotropic Wave Dispersion in Mechanical Band-Gap Metamaterials via the Relaxed Micromorphic Model. *Journal of Elasticity*, 139(2):299–329, October 2019. URL <https://doi.org/10.1007/s10659-019-09753-9>.
4. B. EIDEL, A. GOTE, C.-P. FRITZEN, A. OHRNDORF, and H.-J. CHRIST. Towards physiological conditions in total knee arthroplasty by a bionics-inspired tibial implant design. *PAMM*, 19(1), November 2019. URL <https://doi.org/10.1002/pamm.201900027>.
5. V. MICHEL and N. SCHNEIDER. A first approach to learning a best basis for gravitational field modelling. *GEM - International Journal on Geomathematics*, 11(1), February 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s13137-020-0143-5>.
6. C. BILGEN, A. KOPANICAKOVA, R. KRAUSE, and K. WEINBERG. A detailed investigation of the model influencing parameters of the phase-field fracture approach. *GAMM-Mitteilungen*, 43(2), August 2019. URL <https://doi.org/10.1002/gamm.202000005>.
7. M. THOMAS, C. BILGEN, and K. WEINBERG. Analysis and simulations for a phase-field fracture model at finite strains based on modified invariants. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift fuer Angewandte Mathematik und Mechanik*, July 2020. URL <https://doi.org/10.1002/zamm.201900288>.
8. J. WEBER. Predicting Chemical Shifts in Solids - Full tensor information on magnetic shielding and EFG. Why is it useful?, 06 2019. Hirschegg-Seminar Festkörperchemie.
9. C. BILGEN. *Numerical Investigation of Fracture with the Phase-Field Approach in Linear and Finite Elasticity - Modeling, Evaluation and Simulation*. Ph.D. thesis, Universität Siegen, 2020.
10. C. SCHMIDT. *Untersuchung der Rissausbreitung in einem 3D Benchmark-Problem mittels der Phasenfeldmethode*. Master’s thesis, Universität Siegen, 2020.
11. Y. DAHBOUR. *Untersuchung der Rissausbreitung in Schäumen mit Hilfe der Phasenfeldmethode*. Master’s thesis, Universität Siegen, 2020.
12. M. SCHOLZ, C. HOFFMANN, J. R. KLEIN, M. WIRTZ, G. JUNG, and K. OUM. Exploring Differences in Excited-State Properties of Styryl-BODIPY Chromophores upon Change from α - to β - Substitution. *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie*, August 2019. URL <https://doi.org/10.1515/zpch-2019-1374>.
13. R. JAQUET and M. LESIUK. Analysis of QED and non-adiabaticity effects on the rovibrational spectrum of H₃⁺ using geometry-dependent effective nuclear masses. *The Journal of Chemical Physics*, 152(10), March 2020. URL <https://doi.org/10.1063/1.5144293>.
14. M. SCHOLZ. *Spectroscopy of energy conversion processes in materials for optoelectronic applications*. Ph.D. thesis, Universität Siegen, 2020.

15. F. WOLLING. PulSync: A Novel Synchronization Method for Wearable Devices Based on the Human Heartbeat, 2020. URL <http://iswc.net>. International Symposium on Wearable Computers.
16. F. VOGEL, H. HAMANN, and I. GAUER. *Computer Assisted Legal Linguistics Laboratory - Eine rechtslinguistische Forschungs- und Experimentierplattform zur quantifizierenden Analyse juristischer Fachsprache und Begriffssystematik*. Ph.D. thesis, 2020.
17. F. VOGEL, B. BÄUMER, F. DEUS, J. O. RÜDIGER, and F. TRIPPS. Die Bedeutung des Adjektivs geschäftsmäßig im juristischen Fach- und massenmedialen Gemeinsprachgebrauch. *LeGes 30 (2019) 3*, 2019.
18. T. MÜNKER, G. KAMPMANN, M. SCHÜSSLER, and O. NELLES. System Identification and Control of a Polymer Reactor. In *21st IFAC World Congress*. 2020.
19. M. SCHÜSSLER, T. MÜNKER, and O. NELLES. Local Model Networks for the Identification of Nonlinear State Space Models. In *2019 IEEE 58th Conference on Decision and Control (CDC)*, pages 6437–6442. IEEE, 2019.
20. M. SCHÜSSLER and O. NELLES. Comparison of Extrapolation Behavior between Different State Space Models. In *Proceedings - 29th Workshop Computational Intelligence*. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 2019.
21. M. SCHÜSSLER, T. MÜNKER, and O. NELLES. Deep Recurrent Neural Networks for Nonlinear System Identification. In *2019 IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI)*, pages 448–454. IEEE, 12 2019.
22. F. MANEGAR. *Aero-acoustic noise reduction measures for wind turbine blade sections - a comparative numerical and experimental study*. Ph.D. thesis, Universität Siegen, 2020.
23. K. VOLKMER. *Minderung des strömungsinduzierten Schalls bei axialen Kleinwindturbinen - Methoden und experimentelle Validierung*. Ph.D. thesis, Universität Siegen, 2020. Shaker Verlag 2020, ISBN 978-3-8440-7314-0.
24. N. KAUFMANN. *Small Horizontal Axis Free-Flow Turbines for Tidal Currents*. Ph.D. thesis, Universität Siegen, 2019. Shaker Verlag 2019, 978-3-8440-6705-7.
25. F. MANEGAR, K. STAHL, CAROLUS, and THOMAS. Noise Reduction Mechanism of Trailing Edge Blowing Using the Lattice-Boltzmann Method: Numerical and Experimental Analysis. 06 2019.
26. N. KAUFMANN, T. CAROLUS, and R. STARZMANN. Turbines for modular tidal current energy converters. *Renewable Energy*, 142:451–460, November 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.04.120>.
27. N. KAUFMANN, S. CAROLUS, and R. On the Effect of Elastic Blade Deformation on the Performance of a Horizontal Axis Tidal Current Turbine. In *Proc. EWTEC 2019*. <https://proceedings.ewtec.org/>, 09 2019. EWTEC 2019, Neapel.
28. F. MANEGAR, C. TERUNA, F. AVALLONE, W. C. P. VAN DER VELDEN, D. CASALINO, T. CAROLUS, D. RAGNI, R. CARPIO, and A. Numerical Investigation of the Porous Trailing Edge Noise Reduction Mechanism using the Lattice-Boltzmann Method. In *8th International Conference on Wind Turbine Noise (INCEEUROPE)*. 06 2019. Lissabon.
29. T. HUBER, T. HURTH, E. LUNGI, J. JENKINS, Q. QIN, and K. VOS. Long distance effects in inclusive rare B decays and phenomenology of $\bar{B} \rightarrow X_d \ell^+ \ell^-$, 08 2019.

-
30. N. ANAND, N. EBRAHIMI POUR, H. KLIMACH, and S. ROLLER. Utilization of the Brinkman Penalization to Represent Geometries in a High-Order Discontinuous Galerkin Scheme on Octree Meshes. *Symmetry*, 11(9), 2019. ISSN 2073-8994. URL <https://www.mdpi.com/2073-8994/11/9/1126>.
 31. N. EBRAHIMI POUR, V. KRUPP, H. KLIMACH, and S. ROLLER. Load Balancing for Immersed Boundaries in Coupled Simulations. In M. M. RESCH, Y. KOVALENKO, W. BEZ, E. FOCHT, and H. KOBAYASHI, editors, *Sustained Simulation Performance 2018 and 2019*, pages 185–201. Springer International Publishing, 2019.
 32. H. KLIMACH and S. ROLLER. Using the NEC Aurora TSUBASA for High-Order Discontinuous Galerkin in Ateles. In M. M. RESCH, Y. KOVALENKO, W. BEZ, E. FOCHT, and H. KOBAYASHI, editors, *Sustained Simulation Performance 2018 and 2019*, pages 57–68. Springer International Publishing, 2019.

B.12 Bergische Universität Wuppertal

1. M.-L. HENKEL, F. KASOLIS, and M. CLEMENS. Parallel-in-Time Simulation of Transient Electro-Quasistatic Time-Harmonic Nonlinear Field Problems. In *2019 22nd International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (COMPUMAG)*. IEEE, July 2019. URL <https://doi.org/10.1109/compumag45669.2019.9032822>.
2. M. ALSAYEGH, M. CLEMENS, and B. SCHMUELLING. Misalignment Influence on Resonance Shielding in Wireless Power Transfer for Electric Vehicles. In *2019 IEEE PELS Workshop on Emerging Technologies: Wireless Power Transfer (WoW)*. IEEE, June 2019. URL <https://doi.org/10.1109/wow45936.2019.9030670>.
3. M. CLEMENS and S. SCHOPS. Quasistatic Darwin Model Field Formulations in Time Domain. In *2019 International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA)*. IEEE, September 2019. URL <https://doi.org/10.1109/iceaa.2019.8879040>.
4. M. CLEMENS, B. KÄHNE, and S. SCHÖPS. A Darwin Time Domain Scheme for the Simulation of Transient Quasistatic Electromagnetic Fields Including Resistive, Capacitive and Inductive Effects. In *2019 Kleinheubach Conference*, pages 1–4. 2019.
5. S. BÖHMELT, N. KIELIAN, M. HAGEL, M. STIEMER, M.-L. HENKEL, and M. CLEMENS. Electro-quasistatic field-simulation of biological cells using balanced domain-decomposition. *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering*, 39(3):739–755, April 2020. URL <https://doi.org/10.1108/compel-10-2019-0414>.
6. M. GOTTOWIK. Measurements of Inclined Air Showers with the Auger Engineering Radio Array at the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2019:274*, 2019.
7. M. SCHIMP. Ultra-high energy neutrino searches and GW follow-up with the Pierre Auger Observatory. *Nuclear and Particle Physics Proceedings*, 306-308:146–153, September 2019. URL <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysbps.2019.07.021>.
8. M. SCHIMP. Follow-up searches for ultra-high energy neutrinos from transient astrophysical sources with the Pierre Auger Observatory. In *36th International Cosmic Ray Conference (ICRC2019)*, volume 36 of *International Cosmic Ray Conference*, page 415. July 2019.
9. J. RAUTENBERG. Limits on ultra-high energy photons with the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2019:398*, 2019.
10. A. AAB, P. ABREU, M. AGLIETTA, I. ALBUQUERQUE, J. ALBURY, I. ALLEKOTTE, A. ALMELA, J. A. CASTILLO, J. ALVAREZ-MUÑIZ, G. ANASTASI, L. ANCHORDOQUI, B. ANDRADA, S. ANDRINGA, C. ARAMO, H. ASOREY, P. ASSIS, G. AVILA, A. BADESCU, A. BAKALOVA, A. BALACEANU, F. BARBATO, R. B. LUZ, S. BAUR, K. BECKER, J. BELLIDO, C. BERAT, M. BERTAINA, X. BERTOU, P. BIERMANN, J. BITEAU, A. BLANCO, J. BLAZEK, C. BLEVE, M. BOHÁČOVÁ, D. BONCIOLI, C. BONIFAZI, N. BORODAI, A. BOTTI, J. BRACK, T. BRETZ, A. BRIDGEMAN, F. BRIECHLE, P. BUCHHOLZ, A. BUENO, S. BUITINK, M. BUSCEMI, K. CABALLERO-MORA, L. CACCIANIGA, L. CALCAGNI, A. CANCIO, F. CANFORA, I. CARACAS, J. CARCELLER, R. CARUSO, A. CASTELLINA, F. CATALANI, G. CATALDI, L. CAZON, M. CERDA, J. CHINELLATO, K. CHOI, J. CHUDOBA, L. CHYTKA, R. CLAY, A. C. CERUTTI, R. COLALILLO, A. COLEMAN, M. COLUCCIA, R. CONCEIÇÃO, A. CONDORELLI, G. CONSOLATI, F. CONTRERAS, F. CONVENGA, M. COOPER, S. COUTU, C. COVAULT, B. DANIEL, S. DASSO, K. DAUMILLER, B. DAWSON, J. DAY, R. DE ALMEIDA, S. DE JONG, G. D. MAURO, J. DE MELLO NETO, I. D. MITRI, J. DE OLIVEIRA, V. DE SOUZA, J. DEBATIN, M. DEL RÍO, O. DELIGNY, N. DHITAL, A. D. MATTEO, M. D. CASTRO, C. DOBRIGKEIT, J. DÓLIVO,

- Q. DOROSTI, R. DOS ANJOS, M. DOVA, A. DUNDOVIC, J. EBR, R. ENGEL, M. ERDMANN, C. ESCOBAR, A. ETCHEGOYEN, H. FALCKE, J. FARMER, G. FARRAR, A. FAUTH, N. FAZZINI, F. FELDBUSCH, F. FENU, L. FERREYRO, J. FIGUEIRA, A. FILIPČIČ, M. FREIRE, T. FUJII, A. FUSTER, B. GARCÍA, H. GEMMEKE, F. GESUALDI, A. GHERGHEL-LASCU, P. GHIA, U. GIACCARI, M. GIAMMARCHI, M. GILLER, D. GLAS, J. GLOMBITZA, F. GOBI, G. GOLUP, M. G. BERISSO, P. G. VITALE, J. GONGORA, N. GONZÁLEZ, I. GOOS, D. GÓRA, A. GORGI, M. GOTTOWIK, T. GRUBB, F. GUARINO, G. GUEDES, E. GUIDO, S. HAHN, R. HALLIDAY, M. HAMPPEL, P. HANSEN, D. HARARI, T. HARRISON, V. HARVEY, A. HAUNGS, T. HEBBEKER, D. HECK, P. HEIMANN, G. HILL, C. HOJVAT, E. HOLT, P. HOMOLA, J. HÖRANDEL, P. HORVATH, M. HRABOVSKÝ, T. HUEGE, J. HULSMAN, A. INSOLIA, P. ISAR, J. JOHNSEN, J. JURYSEK, A. KÄÄPÄ, K. KAMPERT, B. KEILHAUER, N. KEMMERICH, J. KEMP, H. KLAGES, M. KLEIFGES, J. KLEINFELLER, D. KUEMPEL, G. K. MEZEK, A. K. AWAD, B. LAGO, D. LAHURD, R. LANG, R. LEGUMINA, M. L. DE OLIVEIRA, V. LENOK, A. LETESSIER-SELVON, I. LHENRY-YVON, O. LIPPMANN, D. L. PRESTI, L. LOPES, R. LÓPEZ, A. L. CASADO, R. LOREK, Q. LUCE, A. LUCERO, M. MALACARI, G. MANCARELLA, D. MANDAT, B. MANNING, J. MANSHANDEN, P. MANTSCH, A. MARIAZZI, I. MARIŞ, G. MARSELLA, D. MARTELLO, H. MARTINEZ, O. M. BRAVO, M. MASTRODICASA, H. MATHES, S. MATHYS, J. MATTHEWS, G. MATTHIAE, E. MAYOTTE, P. MAZUR, G. MEDINA-TANCO, D. MELO, A. MENSNIKOV, K.-D. MERENDA, S. MICHAL, M. MICHELETTI, L. MIRAMONTI, D. MOCKLER, S. MOLLERACH, F. MONTANET, C. MORELLO, G. MORLINO, M. MOSTAFÁ, A. MÜLLER, M. MULLER, S. MÜLLER, R. MUSSA, W. NAMASAKA, L. NELLEN, M. NICULESCU-OGLINZANU, M. NIECHCIOL, D. NITZ, D. NOSEK, V. NOVOTNY, L. NOŽKA, A. NUCITA, L. NÚÑEZ, A. OLINTO, M. PALATKA, J. PALLOTTA, M. PANETTA, P. PAPPENBREER, G. PARENTE, A. PARRA, M. PECH, F. PEDREIRA, J. PEKALA, R. PELAYO, J. PEÑARODRIGUEZ, L. PEREIRA, M. PERLIN, L. PERRONE, C. PETERS, S. PETRERA, J. PHUNTSOK, T. PIEROG, M. PIMENTA, V. PIRRONELLO, M. PLATINO, J. POH, B. PONT, C. POROWSKI, M. POTHAST, R. PRADO, P. PRIVITERA, M. PROUZA, A. PUYLEART, S. QUERCHFELD, S. QUINN, R. RAMOS-POLLAN, J. RAUTENBERG, D. RAVIGNANI, M. REININGHAUS, J. RIDKY, F. RIEHN, M. RISSE, P. RISTORI, V. RIZI, W. R. DE CARVALHO, J. R. ROJO, M. RONCORONI, M. ROTH, E. ROULET, A. ROVERO, P. RUEHL, S. SAFFI, A. SAFTOIU, F. SALAMIDA, H. SALAZAR, G. SALINA, J. S. GOMEZ, F. SÁNCHEZ, E. SANTOS, E. SANTOS, F. SARAZIN, R. SARMENTO, C. SARMIENTO-CANO, R. SATO, P. SAVINA, M. SCHAUER, V. SCHERINI, H. SCHIELER, M. SCHIMASSEK, M. SCHIMP, F. SCHLÜTER, D. SCHMIDT, O. SCHOLTEN, P. SCHOVÁNEK, F. SCHRÖDER, S. SCHRÖDER, J. SCHUMACHER, S. SCIUTTO, M. SCORNAVACCHE, R. SHELLARD, G. SIGL, G. SILLI, O. SIMA, R. ŠMÍDA, G. SNOW, P. SOMMERS, J. SORIANO, J. SOUCHARD, R. SQUARTINI, M. STADELMAIER, D. STANCA, S. STANIČ, J. STASIELAK, P. STASSI, M. STOLPOVSKIY, A. STREICH, M. SUÁREZ-DURÁN, T. SUDHOLZ, T. SUOMIJÄRVI, A. SUPANITSKY, J. ŠUPÍK, Z. SZADKOWSKI, A. TABOADA, O. TABORDA, A. TAPIA, C. TIMMERMANS, P. TOBISKA, C. T. PEIXOTO, B. TOMÉ, G. T. ELIPE, A. TRAVAINI, P. TRAVNICEK, M. TRINI, M. TUEROS, R. ULRICH, M. UNGER, M. URBAN, J. V. GALICIA, I. VALIÑO, L. VALORE, P. VAN BODEGOM, A. VAN DEN BERG, A. VAN VLIET, E. VARELA, B. V. CÁRDENAS, A. VÁSQUEZ-RAMÍREZ, D. VEBERIČ, C. VENTURA, I. V. QUISPE, V. VERZI, J. VICHA, L. VILLASEÑOR, J. VINK, S. VOROBIOV, H. WAHLBERG, A. WATSON, M. WEBER, A. WEINDL, M. WIEDEŃSKI, L. WIENCKE, H. WILCZYŃSKI, T. WINCHEN, M. WIRTZ, D. WITTKOWSKI, B. WUNDHEILER, L. YANG, A. YUSHKOV, E. ZAS, D. ZAVRTANIK, M. ZAVRTANIK, L. ZEHRER, A. ZEPEDA, B. ZIMMERMANN, M. ZIOLKOWSKI, and F. ZUCARELLO. Probing the origin of ultra-high-energy cosmic rays with neutrinos in the EeV energy range using the Pierre Auger Observatory. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, 2019(10):022–022, October 2019. URL <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2019/10/022>.
11. M. CLEMENS, M. ZANG, N. HAUSSMANN, R. MEASE, B. SCHMÜLLING, A. BURKERT,

- A. POPP, and M. TIEMANN. Personenschutz bei induktivem Laden von Fahrzeugbatterien - numerische Simulationsverfahren zur Bestimmung der elektromagnetischen K. *Wissenschaftsforum Mobilität, Duisburg, 23.05.2020 Abstract, submitted. Full paper in preparation*, 2020.
12. C. JÖRGENS and M. CLEMENS. Thermo-elektroquasistationäres Modell zur umgebungsabhängigen Berechnung von Feldbelastungen in Hochspannungs-Gleichstromkabeln. *VDE-Fachtagung Hochspannungstechnik, Berlin, Germany, November 2020, Abstract accepted for publication.*, 2020.
 13. B. KÄHNE and M. CLEMENS. Transient Magneto-Quasistatic Simulations Using Semi-Explicit Time Integration with Higher Order Schemes. *XXVI Symposium Electromagnetic Phenomena in Nonlinear Circuits (EPNC 2020), 30.06.-03.07.2020, Torino, Italy. Two page digest*, 2020.
 14. I. CORTES, M. CLEMENS, and S. SCHÖPS. Parallel-in-time Solution of Eddy Current Problems Using Implicit and Explicit Time-stepping Methods. *Nineteenth Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020), 18.-22.04.2020, Pisa, Italy. One page digest.*, 4 2020.
 15. B. KÄHNE, M. CLEMENS, and S. SCHÖPS. Magnetic Field Simulations Using Explicit Time Integration With Higher Order Schemes. *17th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering (IGTE 2020), Graz, Austria, 20.-23.09.2020. One page digest.*, 7 2020.
 16. N. HAUSSMANN, M. ZANG, M. BOLTEN, B. SCHMUELLING, and M. CLEMENS. Towards Real-Time Magnetic Dosimetry Simulations for Inductive Charging Systems. *17th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering (IGTE 2020), Graz, Austria, 20.-23.09.2020. One page digest, submitted.*, 7 2020.
 17. N. HAUSSMANN, M. ZANG, M. CLEMENS, and B. SCHMUELLING. Echtzeitnahe numerische Simulation der menschlichen Exposition durch magneto-quasistatische Felder beim induktiven Laden von Fahrzeugen. *URSI e.V. Deutschland 2020 Kleinheubacher Tagung (KHB 2020), Miltenberg, Germany, 28.-30.09.2020. One page digest, submitted.*, 7 2020.
 18. H. GESELL, V. NANDANA, and U. JANOSKE. Numerical study on the heat transfer performance and efficiency in a rectangular duct with new winglet shapes in turbulent flow. *Thermal Science and Engineering Progress*, 17:100,490, June 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2020.100490>.