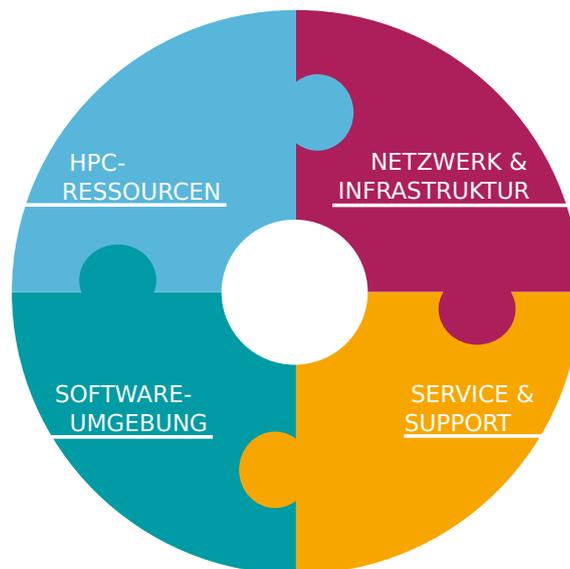


# Öffentlicher ausführlicher Bericht über Beratung, Schulung, Tutorials, Workshops

HPC.NRW\*

Oktober 2020 bis September 2021



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Deliverables</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Ausbau des flächendeckenden HPC-Helpdesks</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>HPC-Kurse, Tutorials und Dokumentation</b>	<b>5</b>
4.1	Schulungsunterlagen und Online-Tutorials . . . . .	5
4.2	Liste der HPC-Kurse/Tutorials/Workshops . . . . .	6
4.3	HPC-Dokumentation . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Community-spezifische Intensivberatung</b>	<b>8</b>
5.1	Success Stories . . . . .	8
5.2	Standortspezifische und HPC.NRW-übergreifende Maßnahmen . . . . .	11
5.3	Implizite und dynamische Bildung fachspezifischer Kompetenzcluster . . . . .	15
<b>6</b>	<b>Qualifizierte Unterstützung in der Performanceanalyse</b>	<b>15</b>
<b>7</b>	<b>Bereitstellung von integrierten Profiling- und Performance-Monitoring-Tools</b>	<b>17</b>
<b>8</b>	<b>Heranführung von neuen Nutzendenkreisen an HPC-Nutzung in Ebene 3</b>	<b>18</b>
<b>9</b>	<b>NRW-weite Nutzendenbefragung</b>	<b>19</b>
<b>A</b>	<b>Referenzen</b>	<b>20</b>
<b>B</b>	<b>Veröffentlichungen mit Unterstützung von HPC.NRW</b>	<b>21</b>
B.1	Erfassungsmodus . . . . .	21
B.2	RWTH Aachen University . . . . .	21
B.3	Universität Bielefeld . . . . .	28
B.4	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn . . . . .	30
B.5	Technische Universität Dortmund . . . . .	31
B.6	Universität Duisburg-Essen . . . . .	33
B.7	Universität Düsseldorf . . . . .	36
B.8	Universität zu Köln . . . . .	39
B.9	Westfälische Wilhelms-Universität Münster . . . . .	42
B.10	Universität Paderborn . . . . .	46
B.11	Universität Siegen . . . . .	51
B.12	Bergische Universität Wuppertal . . . . .	52

## 1 Einleitung

Im Rahmen des Projekts *HPC.NRW*, in welchem ein landesweites Kompetenznetzwerk für High Performance Computing (HPC) zwischen 12 Universitäten etabliert wird, wurden vier verschiedene Arbeitspakete definiert. Das Arbeitspaket 2 (AP2), um welches es in diesem Bericht geht, 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 Berichts. Dieser Bericht stellt den zweiten Jahresbericht im Rahmen der getroffenen Zielvereinbarungen dar und umfasst die Phase des Projekts von **Oktober 2020 bis September 2021**.

Zu Beginn wird eine kurze Übersicht über die bislang erfüllten Deliverables gegeben. Anschließend wird ausführlicher über die 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. Ein weiterer wesentlicher Punkt stellt die Bildung fachspezifischer Kompetenz-Cluster dar, deren Entstehung ebenfalls in diesem Bericht beschrieben wird. Darüber hinaus wird berichtet, wie man Nutzende qualifiziert bei der Performanceanalyse unterstützen kann. Außerdem werden Maßnahmen zur Bereitstellung von Profiling- und Performance-Monitoring-Tools geschildert. Weiter wird die Heranführung neuer Nutzendengruppen an den Tier-3 Standorten dargelegt. Abschließend beinhaltet der Bericht in Anhang **B** eine Aufstellung der mit Hilfe des Kompetenznetzwerks entstandenen Veröffentlichungen.

## 2 Deliverables

Im Folgenden wird eine Übersicht sowie der aktuelle Stand über die *Deliverables* gegeben, welche bis zum Frühjahr 2022 fertigzustellen sind.

1. **Die Maßnahmen des Arbeitspaketes werden dokumentiert und in einem jährlichen Bericht auf der [Projektwebseite HPC.NRW](#)<sup>1</sup> 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 Oktober 2020 bis September 2021 zusammen und wird öffentlich zur Verfügung gestellt.

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

Hier werden die Veröffentlichungen aller Standorte, welche mit Unterstützung des Kompetenznetzwerks entstanden sind, aufgeführt. Die 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 ein solch umfangreiches Arbeitspaket ausreichen, weshalb die Meetings bis Dezember 2020 wöchentlich stattfanden. Seit Januar 2021 werden die Treffen im 14-tägigen Rhythmus durchgeführt. Im Berichtszeitraum wurden insgesamt 29 Videokonferenzen abgehalten und im internen Gitlab-Wiki protokolliert.

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

Zusätzlich zu den bereits bestehenden Tutorials *Introduction to Linux in HPC*, *Gprof Tutorial* und *OpenMP in Small Bites* wurden die folgenden Tutorials erstellt:

- [Benchmarking & Scaling Tutorial](#)<sup>2</sup>
- [GPU Tutorial](#)<sup>3</sup>
- [Scaling tutorial](#)<sup>4</sup>

Das GPU Tutorial 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. Bei dem Scaling Tutorial handelt es sich um ein Handbuch zum Thema 'Skalierung'.

5. **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.

---

<sup>1</sup><https://hpc.dh.nrw/>

<sup>2</sup>[https://hpc-wiki.info/hpc/Benchmarking\\_%26\\_Scaling\\_Tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/Benchmarking_%26_Scaling_Tutorial)

<sup>3</sup>[https://hpc-wiki.info/hpc/GPU\\_Tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/GPU_Tutorial)

<sup>4</sup>[https://hpc-wiki.info/hpc/Scaling\\_tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/Scaling_tutorial)

#### 6. 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 wurden Best-Practices entwickelt, welche im Rahmen der Ausgestaltung der in Abschnitt 5.2 beschriebenen standortspezifischen und standortübergreifenden Verbesserungsmaßnahmen konkretisiert wurden. Diese Best-Practices können zukünftig zu Rate gezogen werden, um erfolgreiche Konzepte bei weiteren Fragestellungen anzuwenden.

#### 7. 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 22.10.2020 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 fand am 1. und 2. Dezember 2020 statt. Diese Schulung wurde zuerst den HPC.NRW Mitarbeitenden angeboten und danach auch allgemein für Nutzende dieser HPC-Infrastrukturen zugänglich gemacht. Außerdem hat eine Vortragsreihe zu ausgewählten HPC-Tools stattgefunden, in denen HPC.NRW-Mitarbeitenden ein Einstieg in eine Vielzahl von Performanceanalyse-Programmen gewährt wurde. Eine konkrete Übersicht der Vorträge ist in Abschnitt 7 zu finden. 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.

#### 8. 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](#)<sup>5</sup>. 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 Ausbau des flächendeckenden HPC-Helpdesks

Nachdem in der ersten Projektphase ein flächendeckendes 3<sup>rd</sup>-Level-Support HPC-Helpdesk über das OTRS-Ticketsystem der Gauss-Allianz aufgebaut wurde, galt es dies im weiteren Projektverlauf auszubauen und zu etablieren. Hierzu wurde im April 2021 allen HPC.NRW-Mitarbeitenden eine umfangreiche Einführung in die Nutzung des OTRS-Ticketsystems gegeben. Für alle, die an der Veranstaltung nicht teilnehmen konnten, steht die Präsentation mit allen relevanten Themen rund um das OTRS weiterhin online zur Verfügung. Das eingeführte Partner-on-Duty-System, bei dem jeder Standort an einem Monat im Jahr stellvertretend die Koordinatorenrolle übernimmt, hat sich etabliert, die Aufgaben sind klarer und transparenter geworden und auch die Übergabe zwischen den einzelnen Standorten am Monatsende funktioniert immer reibungsloser. Das OTRS fungiert unabhängig vom 3<sup>rd</sup>-Level-Support sogar immer öfter auch als Austauschplattform innerhalb HPC.NRWs, wenn es z.B. um die Konsultation von Expertenwissen der anderen Standorte geht.

<sup>5</sup><https://hpc.dh.nrw/de/support/nutzendenbefragung>

## 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 innerhalb des letzten Jahres alle zu Projektbeginn erstellten und mittlerweile etablierten Lehrmaterialien regelmäßig gewartet und upgedated, damit sichergestellt ist, dass die HPC-Nutzenden jederzeit mit den neuesten Informationen versorgt sind.

Zusätzlich zu den existierenden Linux-, Gprof- und OpenMP-Tutorials, können bereits Ergebnisse zu drei weiteren Tutorials eingesehen werden. Wie auch bei den vorherigen Tutorials wurde hier 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.

Um die Qualität der Videos nochmals zu erhöhen, wurde ein Austausch mit dem Projekt ORCA.NRW organisiert. In diesem Meeting wurden alle bereits bestehenden Tutorials auf ihre Durchführung und Vortragsweise analysiert und es wurden gemeinschaftlich Verbesserungsvorschläge bzgl. Didaktik, Sprechweise etc. erarbeitet.

Es wurden Tutorials zu den folgenden Themen erstellt:

- **Introduction to GPU Computing:**

[https://hpc-wiki.info/hpc/GPU\\_Tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/GPU_Tutorial)

Dieses Tutorial richtet sich an Anfänger, die gerade erst mit der Verwendung eines Supercomputers beginnen oder anderweitig daran interessiert sind, das Schreiben von GPU-Code zu erlernen. Das Tutorial besteht aus fünf Abschnitten. Jeder behandelt ein separates eigenständiges Thema. Es gibt eine Einführung, die den Einstieg in das Thema erleichtert, alle anderen Einträge können aber unabhängig voneinander bearbeitet werden. Jedes Tutorial besteht aus einem kurzen Video, gefolgt von einigen Quizfragen und praktischen Übungen.

- **Scaling tutorial:**

[https://hpc-wiki.info/hpc/Scaling\\_tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/Scaling_tutorial)

In diesem Handbuch zum Thema *Skalierung* wird erklärt, was Skalierbarkeit ist und wofür Skalierungen verwendet werden. Es werden Skalierungstests vorgestellt, der Unterschied zwischen starker und schwacher Skalierung erläutert und es wird geschildert, wie man Leistung bei paralleler Skalierung messen kann. Außerdem werden Richtlinien für Skalierungsmessungen vorgestellt und Regeln für die Darstellung von Leistungsergebnissen erklärt.

- **Benchmarking & Scaling Tutorial:**

[https://hpc-wiki.info/hpc/Benchmarking\\_%26\\_Scaling\\_Tutorial](https://hpc-wiki.info/hpc/Benchmarking_%26_Scaling_Tutorial)

Dieses Tutorial soll helfen, eine Anwendung in einer HPC-Clusterumgebung zu vergleichen und die Nutzung der verfügbaren Ressourcen zu optimieren. Es wird erläutert, warum eine Software, die auf einem Cluster ausgeführt wird, vor produktiven Berechnungen geprüft werden sollte und was Skalierbarkeit überhaupt bedeutet. Es informiert außerdem über potenzielle Engpässe und verweist auf erweiterte Toolkits, die den Prozess automatisieren können.

Weitere Tutorials zu MPI und Intel VTune sind bereits in Arbeit. Die entstandenen Schulungsunterlagen wurden über das HPC-Wiki [1] sowie den  [YouTube-Kanal des Kompetenznetzwerks<sup>6</sup>](#) bereitgestellt. Die Schulungsunterlagen, die in HPC.NRW erstellt werden, werden unter der Creative Commons Lizenz CC-BY-SA [2] 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.

---

<sup>6</sup><https://www.youtube.com/HPCNRW>

## 4.2 Liste der HPC-Kurse/Tutorials/Workshops

Standort	Kurs/Tutorial/Workshop	Datum	Link
Aachen	PPCES Online 2020	02.12.2020 – 03.12.2020	<a href="#">↗</a>
	Introduction to High-Performance Computing 2021	12.03.2021	<a href="#">↗</a>
	PPCES 2021	22.03.2021 – 26.03.2021	<a href="#">↗</a>
	Introduction to Computing Time Application Process	01.09.2021	<a href="#">↗</a>
	Fortran Online Kurs (weekly)	07.10.2021 – 21.01.2022	<a href="#">↗</a>
	Programming for the NEC SX-Aurora TSUBASA	24.11.2021	<a href="#">↗</a>
Bielefeld	Python and numpy	26.04.2021	
	Introduction to OOP using Python	21.07.2021	
	Introduction to scientific computing on GPUs	04.10.2021 – 15.10.2021	<a href="#">↗</a>
Dortmund	Parallel Computing with MATLAB and Scaling to LiD03	19.04.2021, 27.04.2021	
	Ringvorlesung: Einführung in CFD HPC Simulationen	03.11.2020 – 04.02.2021	
	Clusterintroduction Workshop	28.09.2021 25.10.2021	
		05.11.2021	
Duisburg-Essen	Parallel Computing with MATLAB and Scaling to HPC	20.05.2021, 27.05.2021	
	Introduction to Julia	16.09.2021	
Düsseldorf	Introduction to HPC @ HHU	24.03.2021	
	HPC introduction for Advanced Natural Language Processing	14.07.2021	
	Snakemake-Workshop für Anfänger und Fortgeschrittene	15.06.2021 & 17.06.2021	
	Globus course	16.09.2021	
	HPC Fortgeschrittenenkurs mit Gruppe Plag	07.10.2021	
HPC introduction	14.10.2021		
Münster	Vorlesung High Performance Computing	15.03.2021- 19.03.2021	<a href="#">↗</a>
	Introduction to scientific computing at NWZ	14.06.2021	
	Vorlesung High Performance Computing	23.08.2021- 27.08.2021	<a href="#">↗</a>
Paderborn	Linux Introduction Course	14.10.2020	<a href="#">↗</a>
		19.01.2021	<a href="#">↗</a>
		09.03.2021	<a href="#">↗</a>
		13.04.2021	<a href="#">↗</a>
		22.06.2021	<a href="#">↗</a>
		10.08.2021	<a href="#">↗</a>
		05.10.2021	<a href="#">↗</a>
		30.11.2021	<a href="#">↗</a>
		27.10.2020	<a href="#">↗</a>
		02.02.2021	<a href="#">↗</a>
	23.03.2021	<a href="#">↗</a>	
	27.04.2021	<a href="#">↗</a>	
	06.07.2021	<a href="#">↗</a>	
	24.08.2021	<a href="#">↗</a>	
	19.10.2021	<a href="#">↗</a>	
14.12.2021	<a href="#">↗</a>		
Advanced Topics of HPC Course	17.11.2020	<a href="#">↗</a>	
	11.05.2021	<a href="#">↗</a>	
	20.07.2021	<a href="#">↗</a>	

Fortsetzung auf nächster Seite

Fortsetzung von vorheriger Seite

Standort	Kurs/Tutorial/Workshop	Datum	Link
	Advanced Topics of HPC Course	07.09.2021	<a href="#">↗</a>
		02.11.2021	<a href="#">↗</a>
	Performance Engineering Course	25.05.2021-	<a href="#">↗</a>
		26.05.2021	
		21.09.2021-	<a href="#">↗</a>
		22.09.2021	
		16.11.2021-	<a href="#">↗</a>
		17.11.2021	
	Software Development Practices Applied to Computational Research	06.10.2020-	<a href="#">↗</a>
		09.10.2020	
	Intel Software Tools Training Workshop	01.12.2020-	<a href="#">↗</a>
		02.12.2020	
	Julia Workshop	01.03.2021-	<a href="#">↗</a>
		04.04.2021	
	Julia Workshop	22.06.2021-	<a href="#">↗</a>
		24.06.2021	
	Introduction to Python Programming	19.08.2021-	<a href="#">↗</a>
		20.08.2021	
	oneAPI for CPUs, GPUs and FPGAs	02.12.2021	<a href="#">↗</a>
	Julia in One Day	08.12.2021	<a href="#">↗</a>
	Git and GitLab	07.12.2021	<a href="#">↗</a>
	Solutions for Data Transfer between HPC Centers	27.07.2021	<a href="#">↗</a>
Siegen	Cluster Introduction Course English	05.11.2020	<a href="#">↗</a>
	MATLAB - Parallelization, Performance, Debugging English	03.12.2020	<a href="#">↗</a>
	Linux-Einführungskurs Deutsch (mit HPC-Fokus)	21.01.2021	<a href="#">↗</a>
	Cluster-Einführungskurs Deutsch	22.04.2021	<a href="#">↗</a>
	MATLAB - Parallelization, Performance, Debugging Deutsch	18.05.2021	<a href="#">↗</a>
	Linux Introduction Course (with HPC Focus)	15.07.2021	<a href="#">↗</a>
	Workshop OMNI - New Features and Changes	30.09.2021	<a href="#">↗</a>
HPC.NRW-weit	Totalview Training	22.10.2020	<a href="#">↗</a>
		06.11.2020	<a href="#">↗</a>
	Training Modern C++ Software Design	15.06.2021-	<a href="#">↗</a>
		19.06.2021	
	Introduction to NVIDIA HPC SDK	29.04.2021	<a href="#">↗</a>

### 4.3 HPC-Dokumentation

Innerhalb des ProPE-Projektes wurde das HPC-Wiki [1] 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. Während des Berichtszeitraums wurde diese Dokumentation mit den neuesten Inhalten gepflegt und weiter ausgebaut. Darüber hinaus wurde Dokumentation in den Bereichen *HPC-User* und *HPC-Developer* zusätzlich aufgebaut. Auch alle unter Abschnitt 4.1 genannten Online-Tutorials sind hier aufgeführt und können von den Nutzenden jederzeit eingesehen werden.

## 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 verfügten, oder solche, die erst durch HPC.NRW eine ausreichende personelle Aufstellung erreicht hatten, etablierten in der ersten Arbeitsphase die notwendige Infrastruktur, um den, auch aus der ersten Nutzendumfrage hervorgehenden, Bedarf an Intensivberatung zu decken.

Anhand von expliziten Beispielen lässt sich zeigen, dass besonders enge Zusammenarbeit mit Nutzenden zu fachspezifischen Themen einen wesentlichen wissenschaftlichen Mehrwert bringt, der ohne die Bereitstellung von Personal sowie Technik- und Methodenkompetenz durch HPC.NRW nicht oder nur schwer zu erreichen wäre. Dies soll im nächsten Kapitel genauer betrachtet werden.

### 5.1 Success Stories

Die Aktivitäten der einzelnen Standorte in der Intensivberatung heterogener Nutzendengruppen werden (ab einem bestimmten Mindestaufwand) innerhalb HPC.NRWs 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.

**RWTH Aachen University** Unsere Kooperation bei der Optimierung des *juKKR* Projektes wurde weitergeführt (s. Jahresbericht 2020). Insbesondere wurde hier das Programm *KKRhost* einer weiteren tiefgehenden Performance-Analyse unterzogen. Dabei wurde eine ineffiziente Parallelisierung kleinteiliger Matrix-Operationen als Skalierbarkeitsproblem identifiziert. Um die parallele Effizienz zu erhöhen, wurde hier die Parallelisierung von den eigentlichen Matrix-Berechnungen auf eine höherliegende Ebene der Auswahl der zu berechnenden Matrizen verschoben. Dies führte zu erheblich geringerem Overhead und erhöhter Skalierbarkeit durch bessere Cache-Ausnutzung.

Des Weiteren wurde eine neue Kooperation mit dem Institut für Technische Verbrennung der RWTH Aachen University begonnen, bei der ein traditioneller Simulationscode mit einem Machine-Learning (ML) Modell gekoppelt werden soll. Der ML Teil ersetzt hierbei die Software-Komponente einer Large-Eddy Simulation (LES), welche klein-skalige Strömungseffekte, die nicht von der LES erfasst werden können, beschreibt. Im Berichtszeitraum konnte eine parallele Kopplung der Simulation mit dem trainierten ML Modell durchgeführt werden. Die gekoppelte Simulation wird aktuell auf Stabilität und Leistung untersucht.

**Universität Bielefeld** In der Fakultät für Wirtschaftswissenschaften wurde im Rahmen einer Promotion ein ML-basiertes Verfahren zur Lösung von Optimierungsproblemen entwickelt. Dieses wurde mit bekannten Optimierungsproblemen (z.B. dem travelling-salesman-Problem) verglichen und ist performanter als einige etablierte Methoden. HPC.NRW konnte hier durch enge Zusammenarbeit und Hilfestellung bei der

Nutzung der lokalen HPC-Ressourcen die fristgerechte Fertigstellung von Meilensteinen ermöglichen; das Projekt begann 2019 und läuft derzeit noch.

Weiterhin hat die AG Computersimulationen und Gitterfeldtheorie das Softwarepaket SIMULATEQCD weiter entwickelt und auf GitHub veröffentlicht. Dieses Paket dient zur Durchführung von Gitter-QCD Rechnungen auf GPUs und ist durch Unterstützung von HPC.NRW entwickelt und optimiert worden. Es wird allen zukünftigen Projekten der AG zugutekommen und als open source für die Community bereitgestellt. Eines der aktuellen Beispiele eines Forschungsprojektes, das diese Software auf dem Bielefelder GPU-Cluster benutzt hat, ist die Bestimmung der chiralen Phasenübergangstemperatur in der QCD mit drei entarteten Quark-Flavours. Eine Publikation wurde gerade bei der Zeitschrift Physical Review D eingereicht.

**Technische Universität Dortmund** Aus dem Bioingenieurwesen erreichte uns die Anfrage, warum die Ansys Fluent Simulation einer Gruppe immer wieder von Slurm abgeschossen wird. Der offensichtliche Grund war das reißen der Arbeitsspeicherlimits. Durch Beobachten der Applikation wurde schnell klar, dass ein Speicherleck vorliegt. Nach einiger Analyse wurden die selbstgeschriebenen Quellterme der zeitabhängigen Euler-Gleichungen als Verursacher identifiziert. Jegliche Versuche die Terme ohne Speicherleck zu formulieren blieben auch nach Hinzuziehen des Ansys Supports erfolglos. Letztlich scheint ein Bug im Fluent Parser vorzuliegen. Um nun trotzdem in Hinblick auf nahende Deadlines Ergebnisse produzieren zu können, wurden spezielle Rechenknoten mit sehr viel Arbeitsspeicher (>1TB) kurzfristig für die Arbeitsgruppe auf dem Cluster freigeschaltet. Auf diesen ist es möglich zumindest einige Stunden zu rechnen. Ergänzend wurde ein Restartmechanismus gescripted um innerhalb eines Slurm Jobs kurz vor Erreichen der Speicherlimits die Simulation zu unterbrechen und im nächsten Jobstep wieder neuzustarten. Alles in allem ermöglicht diese Krücke ein unterbrechungsfreies Arbeiten und Umschiffen der Speicherlecks bis zur etwaigen Behebung derselbigen.

**Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf** Unterstützt durch das Job-Monitoring *myJAM* und die Expertise bei der Überwachung konnten am Standort Düsseldorf mehrere Anwendungen lokalisiert werden, deren Effizienz auf mögliche Optimierungspotenziale hinweisen. Die dazugehörigen HPC-Nutzenden wurden daraufhin angeschrieben und meist zusammen mit dem Betreuenden zu einem ersten Videokonferenz-Meeting eingeladen. Darin wurde dann sowohl fachlich diskutiert als auch die technische Umsetzung besprochen. In den meisten Fällen fanden sich dadurch tatsächlich Optimierungsmöglichkeiten, die einiges an Einsparungen an HPC-Ressourcen vermuten ließen. Je nach Umfang der geplanten HPC Jobs wurden dann genauere Performanzanalysen angefertigt und die vielversprechendsten Wege für Optimierungen verfolgt. Als ein besonderes Beispiel ist dabei eine Anwendung aus der Bioinformatik mit insgesamt 2500 rechenintensiven Jobs zu erwähnen, durch deren Optimierungen - in Hardware umgerechnet - letztendlich fast eine viertel-Million Euro "eingespart" wurde. Es konnten also mit deutlich weniger HPC Ressourcen die gleichen Ergebnisse erzielt werden und durch die freigewordenen Ressourcen andere HPC Anwendungen bedient werden. Da solche Beispiele keine Einzelfälle sind, wird die Wichtigkeit solcher Intensivberatungen regelmäßig unter Beweis gestellt.

**Universität zu Köln** An der Universität zu Köln wurden diverse Kund:innen Projekte betreut. Unter anderem wurde an zwei Werkzeugen einer genomischen Pipeline aus dem Bereich der single cell RNA-seq gearbeitet, welche kommenden Jahr veröffentlicht werden sollen. Die beiden Tools führen initiale Analysen von genetischen single-cell Datensätzen durch und benutzen neuartige Methoden um präzisere Ergebnisse in kürzerer Zeit zu generieren. Zwar waren die Methoden deutlich performanter als die in vergleichbaren Werkzeugen genutzten Methoden, der serielle Charakter der Verarbeitung stellte jedoch ein Problem dar. In Zusammenarbeit wurde eines der Werkzeuge im Rahmen der Intensivberatung optimiert und parallelisiert, sodass sie auf einem einzelnen Kern schneller ablaufen und nun auch auf den getesteten Rechenknoten (12 Rechenkerne, Westmere Architektur) linear mit der Anzahl der Kerne skalieren. Weitere Tests auf Knoten mit deutlich mehr Kernen folgen im kommenden Jahr. Erreicht wurde dies durch eine intensive Hotspot Analyse, Optimierung der Speicherzugriffe (strided memory access, Reduktion von Programmsprüngen,

Reduktion von Kopiervorgängen, etc.), Nutzung der Intel Threading Building Blocks zur Optimierung von indizierten Speicherzugriffen per map/hash und multithreaded Zugriff auf diese Datenstrukturen und einer Reorganisation des Programmcodes. Die Reorganisation des Codes war notwendig um die vorher beschriebenen Änderungen zu ermöglichen und gut parallelisierbare Phasen von anderen (e.g. Disk-IO) zu trennen. Der zweite Code wurde bereits in gleicher Weise vorbereitet und soll im kommenden Jahr finalisiert werden. Es ist auch geplant einen zusätzlichen Assembly-Schritt mit einzufügen, der eine Präzisierung der Suche nach speziellen Plasmazellen ermöglicht und auf einer Entwicklung beruht, die im Rahmen früherer Projekte optimiert wurde.

**Westfälische Wilhelms-Universität Münster** Anfang 2021 trat die Arbeitsgruppe *CryoEM* an uns heran mit der Bitte sie bei dem Aufbau einer Auswertungs-Pipeline für hochauflösende Bilder der Kryo-Elektronenmikroskopie zu unterstützen. Hierfür wurden unter anderem diverse Softwarekomponenten (EMAN2/Sphere, Cryolo, Relion) mit GPU-Unterstützung auf dem HPC Cluster bereitgestellt. Die besonders großen Datenmengen machten zudem eine Schnittstelle zum CEPH Dateisystem der WWU Cloud notwendig. Weiterhin wurden die Zugriffszeiten auf die Daten durch die Nutzung der zusammengeschalteten, lokalen SSD Speicher mit Hilfe des BeeOND Dateisystems deutlich verringert.

Einen weiteren Erfolg konnte das Team HPC bei der optimierten Nutzung der Simulations-Software Gromacs verzeichnen. Hier viel bei mehreren Nutzerinnen und Nutzern immer wieder auf, dass diese die Software sehr ineffizient einsetzten. Nach der Durchführung eigener Benchmarks stellte sich vor allem die ineffiziente Nutzung des Hyperthreadings heraus, welche die Ausführung des Codes massiv verlangsamte. Betroffene Nutzerinnen und Nutzer wurden daraufhin gezielt angesprochen und beraten und konnten so ihre Simulationen deutlich optimieren.

**Universität Paderborn** Ein Beispiel für die Intensivberatung durch das PC<sup>2</sup> in Paderborn ist die Weiterentwicklung von linear-skalierenden massiv-parallelen Methoden für Elektronenstruktur-basierte Molekulardynamiksimulationen für Professor Thomas D. Kühne (Dynamics of Condensed Matter, Universität Paderborn). Dabei wurde eine neuartige nicht-orthogonalisierte lokale Submatrixmethode für die elektronische strukturbasierte Moleküldynamik auf massiv paralleler heterogener Architektur entwickelt [3]. Diese neue Methode erweitert die Grenze der Ab-initio Moleküldynamik-Simulation auf über 100 Millionen Atome und Berechnungen wurden für einige wichtige biologische Systeme durchgeführt. Auf 1536 NVIDIA A100 GPUs wurde eine Rechenleistung von 324 PFLOP/s in FP16/FP32 gemischter Genauigkeit erreicht, was etwa 68 % der Peak-Leistung in dieser Genauigkeit entspricht. Diese Fortschritte wurden auf der ISC21 und der PASC21 vorgestellt<sup>7</sup>.

**Universität Siegen** Im Bereich *Numerische Mechanik* an der Uni Siegen laufen derzeit Rechnungen, bei denen makroskopische und mikroskopische Strukturen im Material mit Finite-Elemente-Verfahren gleichzeitig berechnet werden, wobei ein selbst entwickelter MATLAB- bzw. C++-Code zum Einsatz kommt.

Die Nutzenden baten um Unterstützung bei der Abschätzung des Rechenaufwands, da die komplexe Anordnung der einzelnen Rechnungen besondere Aufmerksamkeit auf die Einstellungen des Job Schedulers erforderte. Außerdem gab es ein Problem, dass der Lizenzserver der Uni bei vielen parallelen Rechnungen abstürzte.

Gemeinsam mit den Nutzenden wurde eine effiziente, lastbalancierte und fehlertolerante Anordnung der Jobs gefunden. Den Nutzenden wurden Techniken an die Hand gegeben, um den Rechenaufwand mit möglichst wenigen Tests selbst abschätzen zu können. Außerdem wurde in Zusammenarbeit mit dem Administrator des Lizenzservers die Ursache für die Abstürze gefunden und das Problem behoben. Die Nutzenden haben die Empfehlungen anschließend selbst umgesetzt.

Die Durchführung der Rechnungen wurde durch die Beratungsleistung überhaupt erst ermöglicht, weiterhin konnte durch die Beratung eine gute Effizienz sichergestellt werden.

<sup>7</sup><https://hpc.dh.nrw/de/research/videos>

**Bergische Universität Wuppertal** Der neue PLEIADES Cluster an der Bergischen Universität Wuppertal wird seit Juni 2021 eingesetzt. Deshalb fiel die meiste Beratungsaktivität auf die Heranführung von Forschungsgruppen an die neue Hardware und eingesetzte Technologien.

Erstmalig wird dabei auch ein mit EasyBuild umgesetztes zentrales Software-Angebot bereit gestellt. Zuvor waren die Forschungsgruppen ausschließlich für ihre Software-Umgebung selbst verantwortlich. Mit der zentral zur Verfügung gestellten Software konnten bereits einige Gruppen, vor allem bei der Verwendung von MPI auf dem Batchsystem Slurm, unterstützt werden. Als Beispiel wäre hier zum Beispiel die Simulationssoftware CORSIKA aus der Gruppe der Teilchen- Astrophysiker zu erwähnen, die auf diese Weise auf dem neuen Cluster zum Einsatz kommen kann.

## 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, die folgenden Maßnahmen ergriffen. Mittelfristig werden anhand der dokumentierten Erkenntnisse Best-Practices definiert, um die Vermittlung zielführender Intensivberatung zu unterstützen.

**RWTH Aachen University** In 2021 hat das IT Center der RWTH Aachen University eine regelmäßige *HPC Sprechstunde* eingerichtet. Diese wird aktuell einmal pro Monat online angeboten und wurde von den Nutzer gut angenommen. Um ein breites Spektrum möglicher Fragen zu ermöglichen, sind in diesen Sprechstunden Experten zu verschiedenen Themengebieten, wie z.B. Performance Analyse, Job Scheduling, und Rechenzeitbeantragung. Fragen mit generellem Informationswert werden öffentlich mit allen Teilnehmern diskutiert und Fragen speziell zu konkreten Nutzern werden im Einzelgespräch erläutert. Hier kann auch längerfristige Unterstützung verabredet werden, die dann von der *HPC Sprechstunde* entkoppelt weitergeführt wird.

Des Weiteren führt das IT Center der RWTH Aachen University regelmäßig Schulungen zu verschiedenen Themen durch. Hierzu gehören *Introduction to HPC*, welche an neue HPC Nutzer gerichtet ist, *Parallel Programming for Engineering Sciences*, welche an Entwickler von wissenschaftlichen Simulationen gerichtet ist, *aiXcelerate*, welche sich auf Performance Optimierung von Anwendungen fokussiert, sowie Workshops zur Programmierung von NEC SX-Aurora Beschleunigerkarten. Um die HPC Nutzer:Innen Beratung zu verbessern, wurde die Beratung restrukturiert, so dass auf eine breitere Expertise zurückgegriffen werden kann. Letzlich wurde auch im Rahmen von NHR die Begutachtungsprozesse angepasst und auch das Technische Review von Rechenzeitanträgen breiter aufgestellt, welches auch Auswirkungen auf Anträge aus NRW hat.

**Universität Bielefeld** An der Universität Bielefeld findet fast ausschließlich individuell zugeschnittene Intensivberatung statt, da die Nutzenden sehr unterschiedlich viel Vorwissen mitbringen, und zu unregelmäßig Rechenzeit beantragt wird, als dass regelmäßige Einführungsveranstaltungen praktikabel wären. Hierfür sind insbesondere das *HPC.NRW Introduction to Linux*-Tutorial sowie die aktuell erarbeiteten GPU Tutorials von Nutzen, die ergänzend zur Einführung eingesetzt werden. Der Zugang zur HPC-Beratung wird über eine Mailingliste und ein Ticketsystem gewährleistet; zudem gibt es ein Wiki, in das strukturiert Antworten zu häufig gestellten Fragen eingepflegt werden, die bei der Beratung aufkommenden. Um Kontakte zwischen den Nutzenden und zum Support zu stärken, ist für 2022 ein Nutzendentag angedacht.

**Ruhr Universität Bochum** Da der zentrale HPC-Rechner der RUB erst 2022 beschafft werden wird, beschränkt sich der momentane Beratungsaufwand auf Machbarkeitsstudien bzw. auf Prüfung der Eignung von Projekten für HPC. Seitdem die HPC.NRW-Stellen (Projektstelle und Eigenanteil) an der zentralen Betriebseinheit etabliert sind, ist die Nachfrage nach HPC-Ressourcen und Zugangsmöglichkeiten stetig angestiegen. Die Anfragen stammen aus einer Vielzahl von Fakultäten und Einrichtungen, wie z. B. Wirtschaftswissenschaften, Bau- und Umweltingenieurwissenschaften, Sozialwissenschaft, Psychologie, Neuroinformatik, Medizinische Informatik, sowie assoziierte Institute, wie das Universitätsklinikum der RUB, die den

Bedarf an HPC-Ressourcen und eine kompetente Beratung an der gesamten RUB widerspiegeln. Es befinden sich auch viele neue HPC-Nutzende darunter, die bereits vom HPC-Team unterstützt werden konnten. Oft geht es um eine Beratung bei der Beschaffung von Hardware oder die Beantragung von Rechenzeit auf verschiedenen Ebenen der HPC-Pyramide, insbesondere Tier-2, da die RUB noch nicht über einen zentralen Rechencluster verfügt. Der Zugang zur HPC-Beratung wird über eine Mailingliste und ein Ticketsystem gewährleistet, ergänzt durch eine auf die persönlichen Bedarfe zugeschnittene Intensivberatung durch die IT.SERVICES Mitarbeiter mittels Videokonferenz.

Die zu beschaffende HPC-Ressource soll langfristig zu einer Serviceleistung innerhalb von IT.SERVICES etabliert werden und damit auch ein Ebene 3 HPC-Zentrum mit lokaler HPC-Beratungsstelle aufgebaut werden. Zusätzlich soll die Webseite ausgebaut und das System beworben werden, wenn es installiert ist. Die Heranführung neuer Nutzende an die HPC-Ressource wie auch die Intensivberatung wird in Zukunft durch eine feste Sprechstunde ergänzt werden. Die durch HPC.NRW organisierten Schulungen und Workshops werden von HPC-Nutzenden an der RUB bereits in Anspruch genommen. Die Tutorials sind unerlässlich für den Aufbau der lokalen HPC-Beratung.

**Rheinische Friedrichs-Wilhelms Universität Bonn** In dieser Projektphase konnte an der Universität Bonn besonders die Integration verschiedener Institute und Einrichtungen in die Gesamtstrategie vorangetrieben werden. Zunächst wurde das in der vorherigen Projektphase eingeführte einrichtungsübergreifende Ticketsystem um einige fachspezifische Queues erweitert und der Zugriff für Mitarbeitende einiger weiterer Institute ermöglicht, um eine schnelle und zielgerichtete Bearbeitung von Anfragen zu begünstigen. Auch die Eskalation an den HPC.NRW-Support sowie die Nutzung des SchedMD-Supports werden durch das Ticketsystem allen beteiligten HPC-aktiven Einrichtungen der Universität ermöglicht.

Im Rahmen der HPC-Beratungskompetenzclusterung wird die Koordination der Cluster “Medizin/Genetik/Bioinformatik” und “Geowissenschaften” durch die Institute für Geodäsie und Geoinformation (IGG), für Genomische Statistik und Bioinformatik (IGSB), für Medizinische Biometrie, Informatik und Epidemiologie (IMBIE) und für Nutzpflanzenwissenschaften und Ressourcenschutz (INRES) tatkräftig unterstützt. Bei der Analyse des *Flye* Simulationscodes zusammen mit der RWTH Aachen konnten Fachwissenschaftler\*innen der Universität Bonn zum Beispiel wichtige Einsichten in die praktische Nutzung des Codes liefern und konstruktive Änderungsvorschläge im Bereich der Eingangsdaten zusteuern. Diese Beiträge zur Beratungsclusterung werden durch die Ausschreibung und baldige Besetzung einer unbefristeten Stelle im High Performance Computing & Analytics Lab (HPC/A-Lab) mit Fokus auf Lebenswissenschaften weiter geschärft werden.

Die zielgerichtete und proaktive Beratung von Nutzenden, insbesondere bei der Performance- und Auslastungsoptimierung ihrer Jobs, soll durch die Bereitstellung eines Job-spezifischen Monitorings unterstützt werden. Hierfür wird der Einsatz von ClusterCockpit (CC) gerade erprobt und die Installation und Inbetriebnahme auf dem Bonna-Rechencluster zusammen mit dem CC-Entwicklungsteam durchgeführt. Die Einsichten aus diesem Prozess fließen wiederum direkt in die Entwicklung von CC und können hoffentlich dabei helfen die Installation und Inbetriebnahme für andere Ebene-3-Zentren zu erleichtern.

Die erfolgreiche Ausschreibung und Besetzung einer HPC-Betriebsleitung am Hochschulrechenzentrum sowie die Besetzung einer Technikstelle schaffen, zusammen mit der baldigen Ausschreibung weiterer Stellen, auch auf dieser Ebene die notwendigen Rahmenbedingungen für den Betrieb des in der Beschaffung für 2022 geplanten großen hybriden Bonna-2-Rechenclusters. Zur Unterstützung von Lehrvorhaben, insbesondere Abschlussarbeiten, wurde zudem die Beschaffung eines kleinen dedizierten GPU-Clusters beschlossen, dessen Inbetriebnahme für das erste Quartal 2022 geplant ist.

Darüber hinaus wird perspektivisch eine weiter als bisher gehende universitätsweite Öffnung dezentraler Rechenkapazitäten angestrebt. Dies geschieht einerseits zusammen mit den Bestrebungen des Physikalischen Instituts zur Nutzung von HPC-Ressourcen durch Overlay-Batchsysteme und andererseits durch Beteiligung am EESSI-Projekt. Erstere ermöglichen es, dynamisch verschiedene Ressourcen in einem Metascheduler zu bedienen und letzteres stellt eine HPC-Nutzenden vertraute und vor allem *überall konsistente* Softwareumgebung zur Verfügung, die durch ihre leichte Installierbarkeit (im Vergleich zu einer eigenhändig konfigurierten EasyBuild-Umgebung) auch auf kleineren dezentralen Systemen durch lokale Admins umsetzbar ist. Dieser Ansatz soll es ermöglichen, die effiziente Auslastung aller Systeme zu erhöhen und insbesondere die niederschwellige Bearbeitung vielzähliger kleinerer Jobs zu begünstigen, wie sie zum Bei-

spiel in der Hochenergiephysik, den Lebenswissenschaften oder den Wirtschaftswissenschaften auftreten, ohne dabei große Jobs zu beeinträchtigen.

**Technische Universität Dortmund** Die zuvor geplante proaktive Intensivberatung für neue Arbeitsgruppen und alteingesessene „Poweruser“ wurde umgesetzt und hat gerade bei sehr informatikfremden Instituten zu einem deutlich flüssigeren Einstieg in die Nutzung der HPC Systeme geführt. Die Dokumentation des LiDO3 Clusters wurde um eine umfangreiche How-To Sammlung zu den verbreitetsten Anwendungssoftwares ergänzt um den Einstieg für Nutzer mit Erfahrung in der jeweiligen Software in die Nutzung des Clusters und insbesondere des Slurm-Batchsystems zu erleichtern. Viele Routineaufgaben wie das Verlängern von Accounts, das Tauschen von SSH Schlüsseln oder ganz generell die Verwaltung von Studentenaccounts wurden maßgeblich automatisiert um den Nutzern eine gewissen Eigenständigkeit zu gewähren und die Beratungskompetenzen stärker auf fachliche Fragestellungen konzentrieren zu können.

**Universität Duisburg-Essen** Mit der Besetzung der HPC.NRW Stellen in 2021 konnte das HPC-Supportteam soweit anwachsen, dass erstmals HPC-spezifische Workshops angeboten werden konnten. Dieses Angebot soll 2022 noch stark ausgebaut werden. Damit weitere Kapazitäten für Workshops und Beratungsaktivitäten geschaffen werden können, ist geplant, das aktuelle Antragsverfahren durch JARDS zu ersetzen, um das HPC-Supportteam zu entlasten.

Des Weiteren ist eine Sprechstunde für Nutzende und alle Interessierten in Planung. Diese soll zunächst als Videokonferenz angeboten werden und zu gegebener Zeit in einen HPC-Stammtisch überführt werden, um einen engeren Kontakt zu den Nutzenden herzustellen und zu pflegen.

**Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf** Die bestehende HPC Sprechstunde wurde weiter ausgebaut: Diese finden wöchentlich statt und dauern dann immer mindestens zwei Stunden, bei starker Nachfrage wurde aber auch oft überzogen oder separate Zusatztermine angeboten. Wegen der andauernden Corona-Situation wurde diese HPC Sprechstunde immer auch als Videokonferenz angeboten - dies macht es für Nutzende besonders einfach, weil sie lediglich auf einen Link klicken müssen, um direkt mit einem HPC Experten sprechen zu können. Da wir die Sprechstunde nun auch besser (über mehrerer Kanäle, wie Antragsbestätigungen, Vorlesungen und Nachrichtendienst) und regelmäßig bewerben, wird sie sehr gut angenommen. Manche, zumeist einfache Fragen können Dank der Online-Tutorials von HPC.NRW schneller und trotzdem präziser beantwortet werden, indem gezielt auf das entsprechende Tutorial verwiesen wird. An der HHU gibt es zunehmend mehr Vorlesungen mit HPC Bezug. Oft wurden Einladungen angenommen und diese besucht, um auch da je nach Wunsch z. B. Einführungsvorlesungen ins HPC zu geben. Der HPC Dienst an der HHU soll strategisch in einen Basisdienst umgewandelt werden. Dies ist mittlerweile schon zu einem großen Teil erfolgt: so wurde bspw. ein zweiter Standort in Betrieb genommen, insbesondere um da das Backup-System für den HPC Storage, aber auch zusätzliche Rechenhardware zur Verfügung zu stellen. Dadurch kann selbst bei einem Totalausfall des HPC Hauptstandortes ein gewisser Mindestbetrieb aufrechterhalten werden und bei einer Katastrophe (Wasser, Feuer, ...) die Datensicherheit gewährleistet werden. Die Kühlleistung im Serverraum wurde erhöht und ebenfalls redundanter aufgestellt, um Ausfälle wie in den letzten heißen Sommermonaten zu verhindern. Viele Dienste (Batchsystem, Lizenzserver, ...) wurden zu einem HA-Setup ausgebaut, damit auch deren Verfügbarkeit erhöht wird. So hat sich schon dieses Jahr die Verfügbarkeit sichtbar verbessert. Insgesamt sind am Standort Düsseldorf in diesem Jahr 58% mehr neue HPC Nutzende hinzubekommen, als im gleichen Vorjahreszeitraum. Es gab sehr viele Einführungsveranstaltungen, auch mit jeweils mehr HPC Nutzenden, und zudem einige Fortgeschrittenenkurse. Auch für die vom HPC.NRW ISV-Softwarebudget beschaffte und verlängerte Datentransferlösung *Globus Connect* wurde speziell ein Globus-Workshop angeboten, der auch sehr gut von den Anwendern angenommen wurde. Da HPC Nutzende an der HHU aus allen Fakultäten kommen, sind die Anforderungen bzgl. HPC sehr heterogen. Dies hat aber auch zur Folge, dass es konkrete Nachfragen zu sehr speziellen Themen gibt. Da dies dann aber meist nur sehr wenige Anwender betrifft, wären Standort-eigene Kurse unpraktikabel; Dank der vielen Kurse und Schulungen über HPC.NRW können aber nun auch solche Nachfragen bedienen werden. Dies wird sehr wohlwollend und dankend von den Nutzenden angenommen. Mithilfe der HHU-eigenen

Job-Monitoring- und Analyselösung *myJAM* und der Expertise konnten mehrere potenziell ineffiziente HPC Anwendungen aufgespürt werden. Daraufhin wurde mit diesen Anwendern aktiv der Kontakt gesucht und je nach geschätztem Gesamtressourcenverbrauch Arbeit in die genauere Analyse und Optimierung dieser Anwendungen investiert. Dadurch sind am Standort Düsseldorf in den letzten zwei Jahren umgerechnet HPC Rechenressourcen im sechsstelligen Euro-Bereich eingespart wurden, die damit anderen HPC Nutzenden mehr zur Verfügung stehen. Dabei wurde eine konkrete Anwendung - der De-novo Genom assembler *Flye* - als erster Kandidat für eine ausführlichere Performance-Analyse im Rahmen der HPC.NRW Beratungsclustering auf mehrere Standorte ausgeweitet. Dabei geht es allerdings in erster Linie nicht nur um Einsparung von Rechenzeit, sondern überhaupt erst um die Ermöglichung dieser Art von Forschung, da diese Anwendung die maximal vorhandenen Speicherkapazitäten und maximalen Joblaufzeiten teilweise überschreiten würde.

**Universität Paderborn** Die Schwerpunkte des Paderborn Center for Parallel Computing der Universität Paderborn sind die atomistischen Simulationen, Optoelektronik und Quantenphotonik sowie maschinelles Lernen für intelligente Systeme. Das PC<sup>2</sup> koordiniert außerdem die Beratung im Kompetenznetzwerk in den Bereichen Chemie, Physik, Data science & machine learning sowie Acceleratorbetrieb<sup>8</sup>.

Die Community-spezifische Intensivberatung durch das PC<sup>2</sup> in diesen Bereichen umfasst unter anderem die Algorithmenentwicklung- und Optimierung, Portierung auf Beschleuniger, Unterstützung der Communities bei der Codeentwicklung, z.B. durch die Veranstaltung von Entwicklertreffen, und Workfloworganisation aber auch direkte Unterstützung bei fachlichen Problemen zum Beispiel bei der Konvergenz von Elektronenstrukturechnungen. Die Intensivberatung im Rahmen der Kompetenznetzwerks HPC.NRW kann dabei stark von Synergien mit der NHR-Fachberatung am PC<sup>2</sup> profitieren.

Das PC<sup>2</sup> stellt sein Indico-basiertes Veranstaltungsmanagementsystem für Veranstaltungen des Kompetenznetzwerks zur Verfügung<sup>9</sup>.

Neben der Intensivberatung baut das PC<sup>2</sup> die schon umfangreichen Beratungs- und Lehrangebote durch gezielte Maßnahmen aus. Es wird bereits regelmäßig eine Serie von HPC-Kursen (HPC-Kurs Leiter/HPC course ladder) angeboten, damit neue Mitarbeitende insbesondere in den wissenschaftlichen Bereichen, die viel Rechenleistung benötigen, schnell und problemlos mit der Nutzung der HPC-Systeme und Softwareumgebungen im PC<sup>2</sup> beginnen können. Das Intervall zwischen den Kursen beträgt etwa zwei Wochen, wodurch die Teilnehmer ihre HPC-Kenntnisse rasch aufbauen können. Neben den regulären HPC-Kursen werden auch andere spezielle HPC-orientierte Themen in Workshops oder durch Mini-Tutorials vertieft.

**Universität Siegen** An der Universität Siegen hat die Installation des neuen HPC-Clusters Ende 2020 eine größere und vielfältigere Nutzendenschaft angezogen. Insbesondere Forschende aus dem Bereich Data Science nutzen den neuen Cluster nun in einem größerem Ausmaß.

Die wöchentliche Sprechstunde ist mittlerweile unter den Nutzenden als wichtiger Anlaufpunkt etabliert. Der persönliche Kontakt erlaubt es, Probleme sowie Bedarf für intensivere Beratung früher zu erkennen. Die lokalen Schulungen (Cluster-Einführung und Linux-Einführung) verbessern als Nebeneffekt ebenfalls den persönlichen Kontakt. Forschende, die eine Intensivberatung benötigen, können so frühzeitig identifiziert werden und werden gezielt angesprochen.

Schließlich sollen es die im Aufbau befindlichen verbesserten Monitoring- und Analysetools ermöglichen, Unterstützungsbedarf noch besser zu erkennen. Hier profitiert der Standort besonders von HPC.NRW, wo derartige Tools bereits entwickelt werden.

**Bergische Universität Wuppertal** Mit der Inbetriebnahme des neuen PLEIADES Clusters im Juni 2021, wurde auch die User-Dokumentation modernisiert. Hierbei liegt der Fokus vor allem auf den Umgang mit den neuen Technologien des Clusters, darunter z.B. Slurm, NVidia A100 GPUs, MPI und BeeGFS. Außerdem wurden in bestimmten Situationen Nutzende kontaktiert und geschult, wenn eine ineffiziente Verwendung

<sup>8</sup>siehe <https://hpc.dh.nrw/de/support/thematische-clusterung>. Acceleratorbetrieb und Physik in Zusammenarbeit mit der Universität Bielefeld.

<sup>9</sup><https://events.uni-paderborn.de/>, z.B für HPC.NRW Tools Workshops <https://events.uni-paderborn.de/category/11/>

der Ressourcen festgestellt wurde. Zukünftig soll die Beratung weiter formalisiert werden, indem z.B. eine Queue im Ticketsystem für Fragen bzgl. des HPC Systems eingerichtet wird. Des Weiteren soll es eine explizit kommunizierte Möglichkeit für Sprechstunden geben. Die User-Dokumentation wird weiter ausgebaut, was stellenweise auch durch den Aufbau von KnowHow bei den entsprechenden Themen bedingt ist.

### 5.3 Implizite und dynamische Bildung fachspezifischer Kompetenzcluster

Für eine gezielte und bedarfsorientierte Vermittlung fachspezifischer Beratungsangebote im Rahmen des *Leitfaden für Intensivberatungen* wurde eine Clusterung der Kompetenzen an den HPC.NRW-Standorten durchgeführt. Diese Cluster stellen anwendungsorientierte Gruppen von jeweils wenigen Partnern dar, welche herausfordernde und langfristige Forschungsvorhaben bei HPC-Themen unterstützen und beraten. Dabei ist auch die Heranführung an die Nutzung von HPC-Kapazitäten der nächsthöheren Ebene zur Deckung von notwendigen Ressourcen-Anforderungen ein Aufgabenbereich. Die Clusterbildung war im ursprünglichen Arbeitsplan direkt im Arbeitspaket 2 verortet, wurde aber aufgrund der zentralen Bedeutung innerhalb von HPC.NRW und die umfangreichen Abstimmungen zwischen den Standorten in eine eigene Taskforce ausgelagert. Deren Koordination übernimmt dabei das Zentrum für Informations- und Mediendienste der Universität Duisburg-Essen zusammen mit der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn als Stellvertreter. Die Abstimmung der Aufgaben wird in regelmäßigen Videokonferenzen durchgeführt.

In einem mehrstufigen Prozess wurde, basierend auf den individuellen Beratungskompetenzen der HPC.NRW Standorte, eine Clusterung durchgeführt. Dazu wurden die Kompetenzbereiche hinsichtlich ihrer methoden-, betriebs-, und fächerorientierten Ausrichtungen gruppiert. Kommt nun z. B. im Rahmen der Intensivberatung eine konkrete Beratungsanfrage über den HPC.NRW-Helpdesk, wird der zuständige Bereich ermittelt. Zur Unterstützung bei der Zuordnung ist jeder Kompetenzbereich mit Keywords versehen. Für jeden Bereich sind Standorte als Koordinatoren festgelegt, welche dann die Aufgabe haben, eine bedarfsorientierte Arbeitsgruppe zu bilden. Diese Arbeitsgruppe wird abhängig von den individuellen Kompetenzen aus den Mitgliedern der HPC.NRW Standorte gebildet und bearbeitet dann die Anfrage des Forschungsvorhabens. Ein erstes Beispiel für eine gestartete Intensivberatung unter Nutzung dieser erfolgten Beratungscluster ist *Flye*, Details siehe Abschnitt 6.

## 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.

Im April 2021 organisierte HPC.NRW einen speziellen GPU-Kurs mit Fokus auf die Programmierung mit dem NVIDIA HPC SDK, der es Softwareentwicklern ermöglicht, GPUs in Standard-C++-Code mit einem neuen C++17 std: :par Framework zu programmieren. Ein kurzer Überblick über Performance-Analyse-Tools für GPUs, z.B. NSight Systems und NSight Compute, wurde ebenfalls in diesem Kurs behandelt. Die Veranstaltung stieß auf großes Interesse der Teilnehmer, die nicht nur aus Nordrhein-Westfalen, sondern auch aus anderen Universitäten in Deutschland kamen. Dieser eintägige Workshop erweiterte die Möglichkeiten

für HPC-Entwickler die hohe Rechenleistung von GPUs effizient zu nutzen. Aufgrund des großen Interesses wird Anfang 2022 ein weiterer zweitägiger GPU Kurs geplant.

Der von HPC.NRW und der Universität Siegen organisierte und von einem sehr erfahrenen externen Vortragenden gestaltete 5-tägige C++-Kurs für Fortgeschrittene, richtete sich an erfahrene Programmierer, die Einblicke in das Thema *Modern C++ Software Design* gewinnen wollten. Es ging insbesondere darum, modernes C++ zu lehren, wie es heute üblicherweise in der Praxis genutzt wird. Der Kurs war als zweiter einer Vortragsreihe von drei Kursen gehalten worden und baute auf den Anfängerkurs aus dem Frühjahr 2020 auf. Der Expertenkurs, der sich an diesen Kurs anschließen wird, ist für den Sommer 2022 geplant. Neben dem hohen Wert für die Nutzenden, war dieser Kurs 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.

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 weiterhin 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, wurde hierfür weiterentwickelt, so dass auch dies online durchgeführt werden kann. 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. Es 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 Problembehandlungen 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 [4] 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.

Ein weiteres Beispiel für die qualifizierte Unterstützung bei der Performanceanalyse ist die laufende Intensivberatung für Nutzenden aus dem Life-Sciences Bereich an der Universität Düsseldorf. Hier haben wir mit der Analyse und Optimierung des *Flye* Simulationscodes begonnen. Ziel ist eine Evaluierung des Optimierungspotential der zeit- und speicherintensiven Simulationsläufe aus der Anwendersicht. Entsprechend der Beratungsclusterung (s. Kap. 5.3) hat die RWTH Aachen University die Koordination dieser Aktivität übernommen und wird insbesondere von Fachwissenschaftler\*innen der Universität Bonn unterstützt, die über eine entsprechend langjährige Erfahrung in diesem Fachgebiet und auch mit der Verwendung des Codes verfügen. Durch diese enge Kooperation konnten insbesondere konstruktive Änderungsvorschläge im Bereich der Eingabedaten gemacht, die von dem Nutzenden aktuell evaluiert werden. Weitere beteiligte HPC.NRW Standorte sind Düsseldorf als Heimatinstitution des anfragenden Nutzenden und Wuppertal im Bereich der Performance Analyse. Es haben bereits mehrere Treffen (online) stattgefunden, bei denen verschiedene Aspekte der Anwendung mit dem Nutzer besprochen wurden. Es wurden verschiedene Analysen durchgeführt, um das Verhalten des Codes zu untersuchen. Erste Messungen ergaben eine limitierte Skalierbarkeit bis 24 Cores mit dem gegebenen Datensatz. Des Weiteren ergab eine NUMA Analyse, dass der Speicherverbrauch über die NUMA-Domains hinweg nicht balanciert ist. Abbildung 1 zeigt einen exempla-

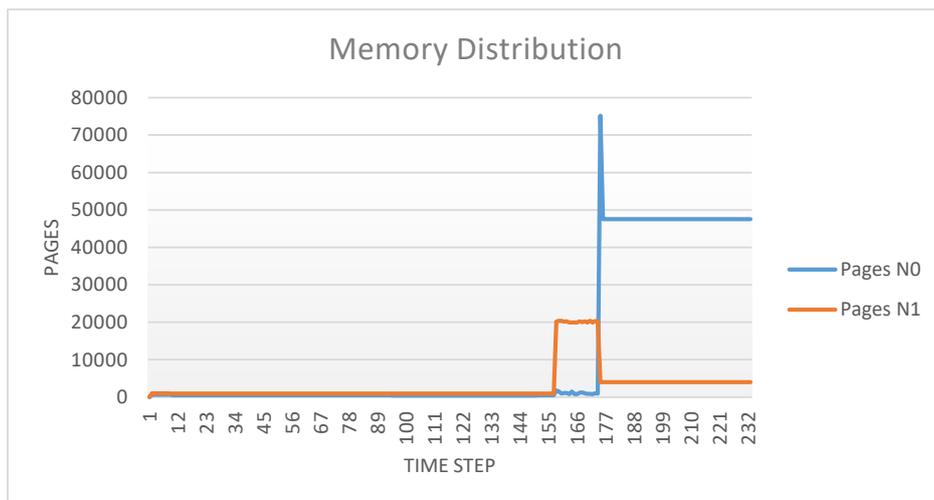


Abbildung 1: Verteilung Speicherseiten im *Flye* Simulationcode über die beiden NUMA-Domains.

rischen Verlauf auf einem Zwei-Sockel-System in Aachen. Man sieht, dass der Großteil der Speicherseiten auf NUMA-Knoten *N1* angelegt werden. Durch den Remote-Zugriff im weiteren Verlauf der Anwendung ist hier mit entsprechenden Leistungseinbußen zu rechnen, was durch die Tatsache, dass die Nutzenden häufig auch auf Systemen mit vier NUMA-Domains rechnen, noch verstärkt wird. Hier sind weitere Aktivitäten wie eine Optimierung des Speicherzugriffverhaltens geplant, welche im Erfolgsfall auch an die Entwickler des Codes zurück gespielt werden sollen, sodass weitere Anwender\*innen profitieren können. Darüber hinaus wurde eine Detailanalyse mit Intel VTune durchgeführt, welche Hotspots in der Analyse identifiziert hat, welche aber nur mit Hilfe der *Flye* Entwickler (und nicht dem Nutzer) optimiert werden können.

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

Im allgemeinen HPC-Support, der Intensivberatung und insbesondere für die Performanceoptimierung sind Werkzeuge für das Profiling und die Performanceuntersuchung notwendig. Auf der einen Seite sind dies Profiling- und Debugging-Tools, die anlassbezogen und für einen begrenzten Zeitraum verwendet werden. Auf der anderen Seite zählen dazu auch Monitoring-Mechanismen, zum Beispiel im Sinne eines jobspezifischen Monitorings, die auf einem Cluster-System kontinuierlich Daten sammeln. Langfristig wäre eine zielgerichtete, flächendeckende Etablierung eines jobspezifischen Monitoring-Systems an möglichst vielen Standorten in NRW wünschenswert. In Vorbereitung dessen wurden bereits die Anforderungen an ein solches System formuliert. Danach wurden die existierenden Lösungen mehrerer Standorte in Bezug auf diese Anforderungen, insbesondere die Integrierbarkeit in existierende HPC-Umgebungen, analysiert. Die bislang vorhandenen Lösungen stellten sich jedoch als sehr unterschiedlich in ihrem Konzept, technischer Umsetzung und Leistungsfähigkeit heraus.

Im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem NHR-Monitoring-Projekt wurde *ClusterCockpit* (CC) als mögliche Lösung identifiziert, die auf existierenden Komponenten beruht, erweiterbare und an lokale Bedürfnisse anpassbare Module und Metriken bietet und insbesondere eine einfache Installier- und Wartbarkeit zum Ziel hat. Ein Tier-2-Standort hat CC schon im Einsatz und beteiligt sich aktiv an der Weiterentwicklung und ein weiterer Standort trägt insbesondere bei der Gestaltung der automatischen Detektion von Optimierungspotential bei. Auch auf Ebene 3 erprobt bereits ein Standort zusammen mit dem CC-Entwicklungsteam die Installation und erwägt einen baldigen produktiven Einsatz. Dabei fließen die Erkenntnisse aus diesem Prozess direkt zurück in das NHR-Projekt. Innerhalb der Roadmap hin zu einer Lösung für ein Job-spezifisches Monitoring liegt das Projekt somit sehr gut im Zeitplan.

Um das allgemeine Know-how zum Thema *Profiling- und Performance-Monitoring* innerhalb des Kompetenznetzwerks zu steigern, wurde im Herbst 2021 eine umfangreiche Serie von Veranstaltungen durchge-

führt. Hier hatten sowohl fortgeschrittene Nutzende als auch *HPC.NRW*-Mitarbeitende die Möglichkeit, sich in elf verschiedenen Vorträgen weiterbilden zu lassen. Inhaltlich ging es um Tools zur Performanceanalyse, die im Rahmen von *HPC.NRW* über Landeslizenzen beschafft wurden, als freie Software grundsätzlich jedem Partner zur Verfügung stehen, oder durch Standort-spezifische Lizenzierung bei einigen Partner verfügbar sind. Dabei wurden beispielsweise Themen wie “Score-P”, “Scalasca”, “Vampir” und “VTune” behandelt. Alle Vorträge wurden aufgezeichnet und werden online auf unserem *YouTube*-Kanal zur Verfügung gestellt, wodurch sie nicht nur zukünftigen Mitarbeitenden im Projekt, sondern auch der Allgemeinheit langfristig zur Verfügung stehen. Konkret wurden folgende Veranstaltungen durchgeführt:

Datum	Thema	Vortragende	Link
24.08.2021	JUBE by Example	RWTH Aachen University	<a href="#">↗</a>
31.08.2021	LIKWID	Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg	<a href="#">↗</a>
07.09.2021	Score-P and Cube	Forschungszentrum Jülich	<a href="#">↗</a>
14.09.2021	Scalasca	Forschungszentrum Jülich	<a href="#">↗</a>
21.09.2021	Vampir	Technische Universität Dresden	<a href="#">↗</a>
28.09.2021	MAQAO	Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines	<a href="#">↗</a>
05.10.2021	TAU	University of Oregon	<a href="#">↗</a>
12.10.2021	ARM Forge	ARM	<a href="#">↗</a>
19.10.2021	Extra-P	Technische Universität Darmstadt	<a href="#">↗</a>
26.10.2021	Paraver, Extrae and Dimemas	Barcelona Supercomputing Center	<a href="#">↗</a>
02.11.2021	Intel VTune	Bergische Universität Wuppertal	<a href="#">↗</a>

Außerdem befinden sich mit Intel und TotalView zwei wichtige Tools bei nahezu allen Standsorten im Einsatz, die auch umfangreich durch Unterstützung der Universität Paderborn *HPC.NRW*-weit geschult wurden (siehe Abschnitt 4.2).

## 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. Allen voran sei hier natürlich die Ausweitung des Angebots an den in Abschnitt 4.1 aufgeführten *Online-Tutorials* erwähnt. Besonders für Neulinge stellt diese Form der Wissensvermittlung ein geeignetes Medium mit niederschwelligem Zugang und angemessenem Schwierigkeitsgrad dar, sodass Einstiegshürden deutlich reduziert werden.

Auch das *HPC-Wiki* ist in diesem Kontext als wichtiger Faktor zu nennen, wo nicht nur die Tutorials mit samt ihren Übungen und Quizfragen veröffentlicht sind, sondern auch sonstige grundlegende Fragen zum Thema HPC beantwortet werden und spezielle Artikel, getrennt nach Kundenkreis (Anwender/ Entwickler/ Administrator), einsehbar sind. Ferner wurde das *HPC.NRW*-Schulungsangebot ausgebaut, indem immer mehr lokale *HPC-Schulungen und -Workshops*, welche offen für externe Besucher waren, an allen beteiligten Hochschulen publik gemacht und Nutzende aller Standorte dazu eingeladen wurden.

Weiterhin ist es gelungen, neue Nutzende durch die mittlerweile bereits etablierten offenen *HPC-Sprechstunden und HPC-Einführungsveranstaltungen* (vor Ort und digital) zu gewinnen und kompetent zu beraten. Anfangs, aufgrund des Bekanntheitsgrades, nur gering besuchte Veranstaltungen werden mittlerweile durch die aktive Bewerbung und die für sich sprechenden hervorragenden Serviceleistungen von so vielen Nutzenden aufgesucht, dass an einzelnen Standorten sogar mehr als 16 Nutzende innerhalb einer Sprechstunde vertreten sind.

Auch der Zugang zu HPC-Ressourcen für Nutzende *ohne* lokales HPC-System unter der E-Mail-Adresse [helpdesk@hpc.nrw](mailto:helpdesk@hpc.nrw) wurde weiter promoted. So wurde unter der Leitung des Arbeitspakets 4 im Frühjahr

2021 beispielsweise ein FH-Workshop ausgerichtet, in welchem die Teilnehmer auch explizit in die Nutzung des Helpdesks eingewiesen wurden.

Als einheitlicher Anlaufpunkt für die Beantragung von Rechenzeit auf den verschiedenen Systemen wurden die bereits erstellten *Quick-Reference-Cards* (QRCs) für viele Standorte weiter entwickelt. Diese Informationsblätter geben Auskunft über die jeweiligen Antragsprozesse 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.

Die Universität Paderborn und die RWTH Aachen University haben im Rahmen der NHR Initiative des Bundes angefangen das Kompetenznetzwerk HPC.NRW in Kooperationen mit anderen NHR Zentren und Landeskompetenznetzwerken zu vertreten. Ziel ist es hier, sowohl die Erfahrungen aus HPC.NRW in NHR und andere Landeskompetenzzentren einzubringen und gleichzeitig Erfahrungen der bundesweiten Kooperationspartner in HPC.NRW einfließen zu lassen.

## 9 NRW-weite Nutzendenbefragung

High-Performance Computing (HPC) gewinnt im Bereich Forschung und Entwicklung immer mehr an Bedeutung. Im Rahmen des Projektes HPC.NRW soll deshalb bis April 2022 eine NRW-weite Nutzendenbefragung durchgeführt werden. Diese Umfrage wurde bereits im Sommer 2020 durchgeführt, die ausführlichen Ergebnisse wurden im Bericht von 2020 geschildert. Aufgrund der Wichtigkeit des Themas ist die nächste Umfrage für 2022 bereits in Planung.

## A Referenzen

- [1] PROPE PROJEKT. HPC-Wik: The source for site-independent HPC information. URL <https://hpc-wiki.info/>.
- [2] CREATIVE COMMONS. CC-BY-SA: Attribution-ShareAlike 4.0 International. URL <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>.
- [3] R. SCHADE, T. KENTER, H. ELGABARTY, M. LASS, O. SCHÜTT, A. LAZZARO, H. PABST, S. MOHR, J. HUTTER, T. D. KÜHNE, and C. PLESSL. Enabling Electronic Structure-Based Ab-Initio Molecular Dynamics Simulations with Hundreds of Millions of Atoms, 2021. [arXiv:2104.08245](https://arxiv.org/abs/2104.08245) [physics.comp-ph].
- [4] VI-HPS. VI-HPS Tuning Workshops. URL <https://www.vi-hps.org/training/tws>.

## 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)

Bitte nur die neuen Publikationen erfassen - sprich, die seit Oktober 2020 veröffentlicht wurden!

### B.2 RWTH Aachen University

1. H. CUI, L. ELTOUKHY, L. ZHANG, U. MARKEL, K.-E. JAEGER, M. D. DAVARI, and U. SCHWANEBERG. Less Unfavorable Salt Bridges on the Enzyme Surface Result in More Organic Cosolvent Resistance. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(20):11,448–11,456, April 2021. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202101642>.
2. H. CUI, L. ZHANG, L. ELTOUKHY, Q. JIANG, S. K. KORKUNÇ, K.-E. JAEGER, U. SCHWANEBERG, and M. D. DAVARI. Enzyme Hydration Determines Resistance in Organic Cosolvents. *ACS Catalysis*, 10(24):14,847–14,856, December 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c03233>.
3. H. CUI, T. H. J. STADTMÜLLER, Q. JIANG, K.-E. JAEGER, U. SCHWANEBERG, and M. D. DAVARI. How to Engineer Organic Solvent Resistant Enzymes: Insights from Combined Molecular Dynamics and Directed Evolution Study. *ChemCatChem*, 12(16):4073–4083, June 2020. URL <https://doi.org/10.1002/cctc.202000422>.
4. H. CUI, M. VEDDER, U. SCHWANEBERG, and M. D. DAVARI. Using Molecular Simulation to Guide Protein Engineering for Biocatalysis in Organic Solvents. In *Methods in Molecular Biology*, pages 179–202. Springer US, November 2021. URL [https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1826-4\\_10](https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1826-4_10).
5. H. CUI, K.-E. JAEGER, M. D. DAVARI, and U. SCHWANEBERG. CompassR Yields Highly Organic-Solvent-Tolerant Enzymes through Recombination of Compatible Substitutions. *Chemistry – A European Journal*, 27(8):2789–2797, January 2021. URL <https://doi.org/10.1002/chem.202004471>.
6. 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>.
7. S. BOUAYAD-GERVAIS, T. SCATTOLIN, and F. SCHOENEBECK. N -Trifluoromethyl Hydrazines, Indoles and Their Derivatives. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(29):11,908–11,912, May 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202004321>.
8. I. A. SANHUEZA, F. J. R. KLAUCK, E. SENOL, S. T. KEAVENEY, T. SPERGER, and F. SCHOENEBECK. Base-Free Cross-Couplings of Aryl Diazonium Salts in Methanol: Pd II -Alkoxy as Reactivity-Controlling Intermediate. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(13):7007–7012, February 2021. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202014842>.

9. C. FRICKE, T. SPERGER, M. MENDEL, and F. SCHOENEBECK. Catalysis with Palladium(I) Dimers. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(7):3355–3366, December 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.202011825>.
10. J. J. ARAYAMPARAMBIL, K. CHEN, A. IADECOLA, M. MANN, X. QIAO, B. FRAISSE, R. DRONSKOWSKI, L. STIEVANO, and M. T. SOUGRATI. Reversible High Capacity and Reaction Mechanism of Cr<sup>2</sup>(NCN)<sub>3</sub> Negative Electrodes for Li-Ion Batteries. *Energy Technology*, 8(3):1901,260, January 2020. URL <https://doi.org/10.1002/ente.201901260>.
11. K. CHEN, M. FEHSE, A. LAURITA, J. J. ARAYAMPARAMBIL, M. T. SOUGRATI, L. STIEVANO, and R. DRONSKOWSKI. Quantum-Chemical Study of the FeNCN Conversion-Reaction Mechanism in Lithium- and Sodium-Ion Batteries. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(9):3718–3723, January 2020. URL <https://doi.org/10.1002/anie.201914760>.
12. A. J. CORKETT, K. CHEN, and R. DRONSKOWSKI. It's All in the (Cyanamide) Tilt: Synthesis and Structure of NaSc(NCN)<sub>2</sub>. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2020(27):2596–2602, July 2020. URL <https://doi.org/10.1002/ejic.202000244>.
13. A. KOSMA, P. RÜSSMANN, S. BLÜGEL, and P. MAVROPOULOS. Strong spin-orbit torque effect on magnetic defects due to topological surface state electrons in Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. *Physical Review B*, 102(14), October 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.102.144424>.
14. T. R. F. PEIXOTO, H. BENTMANN, P. RÜSSMANN, A.-V. TCAKAEV, M. WINNERLEIN, S. SCHREYECK, S. SCHATZ, R. C. VIDAL, F. STIER, V. ZABOLOTNY, R. J. GREEN, C. H. MIN, C. I. FORNARI, H. MAASS, H. B. VASIL, 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. Author Correction: Non-local effect of impurity states on the exchange coupling mechanism in magnetic topological insulators. *npj Quantum Materials*, 6(1), February 2021. URL <https://doi.org/10.1038/s41535-021-00314-9>.
15. A. TCAKAEV, V. B. ZABOLOTNY, C. I. FORNARI, P. RÜSSMANN, T. R. F. PEIXOTO, F. STIER, M. DETTBARN, P. KAGERER, 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 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. *Phys. Rev. B*, 102:184,401, Nov 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.184401>.
16. 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>.
17. Y. XU, X. WANG, W. ZHANG, L. SCHÄFER, J. REINDL, F. VOM BRUCH, Y. ZHOU, V. EVANG, J.-J. WANG, V. L. DERINGER, E. MA, M. WUTTIG, and R. MAZZARELLO. Materials Screening for Disorder-Controlled Chalcogenide Crystals for Phase-Change Memory Applications. *Advanced Materials*, 33(9):2006,221, January 2021. URL <https://doi.org/10.1002/adma.202006221>.
18. M. WUTTIG, C.-F. SCHOEN, M. SCHUMACHER, J. ROBERTSON, P. GOLUB, E. BOUSQUET, and J.-Y. RATY. Halide perovskites: third generation photovoltaic materials empowered by metavalent bonding, 2020. [arXiv:2012.03794](https://arxiv.org/abs/2012.03794) [cond-mat.mtrl-sci].
19. Y. CHENG, S. WAHL, and M. WUTTIG. Metavalent Bonding in Solids: Characteristic Representatives, Their Properties, and Design Options. *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 15(3):2000,482, December 2020. URL <https://doi.org/10.1002/pssr.202000482>.
20. S. MAIER, S. STEINBERG, Y. CHENG, C.-F. SCHÖN, M. SCHUMACHER, R. MAZZARELLO, P. GOLUB, R. NELSON, O. COJOCARU-MIRÉDIN, J.-Y. RATY, and M. WUTTIG. Discovering Electron-Transfer-Driven Changes in Chemical Bonding in Lead Chalcogenides (PbX, where X = Te, Se, S, O). *Advanced Materials*, 32(49):2005,533, November 2020. URL <https://doi.org/10.1002/adma.202005533>.

21. 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>.
22. D. LEE, S. BOGNER, B. A. BROWN, S. ELHATISARI, E. EPELBAUM, H. HERGERT, M. HJORTH-JENSEN, H. KREBS, N. LI, B.-N. LU, and U.-G. MEISSNER. Hidden Spin-Isospin Exchange Symmetry. *Physical Review Letters*, 127(6), August 2021. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.127.062501>.
23. D. FRAME, T. A. LÄHDE, D. LEE, and U.-G. MEISSNER. Impurity lattice Monte Carlo for hypernuclei. *The European Physical Journal A*, 56(10), October 2020. URL <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00257-y>.
24. G. STELLIN and U.-G. MEISSNER. P-wave two-particle bound and scattering states in a finite volume including QED. *The European Physical Journal A*, 57(1), January 2021. URL <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00319-1>.
25. D. LEE, U.-G. MEISSNER, K. A. OLIVE, M. SHIFMAN, and T. VONK.  $\theta$ -dependence of light nuclei and nucleosynthesis. *Physical Review Research*, 2(3), September 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevresearch.2.033392>.
26. A. SARKAR and D. LEE. Convergence of Eigenvector Continuation. *Physical Review Letters*, 126(3), January 2021. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.126.032501>.
27. U.-G. MEISSNER. Precision Predictions. *Nuclear Physics News*, 30(2):17–20, April 2020. URL <https://doi.org/10.1080/10619127.2020.1752092>.
28. B.-N. LU, N. LI, S. ELHATISARI, D. LEE, J. E. DRUT, T. A. LÄHDE, E. EPELBAUM, and U.-G. MEISSNER. Ab Initio Nuclear Thermodynamics. *Physical Review Letters*, 125(19), November 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.125.192502>.
29. T. LUU and U.-G. MEISSNER. Misconceptions on Effective Field Theories and Spontaneous Symmetry Breaking: Response to Ellis' Article. *Foundations of Physics*, 50(10):1140–1151, August 2020. URL <https://doi.org/10.1007/s10701-020-00368-y>.
30. R. HE, N. LI, B.-N. LU, and D. LEE. Superfluid condensate fraction and pairing wave function of the unitary Fermi gas. *Physical Review A*, 101(6), June 2020. URL <https://doi.org/10.1103/physreva.101.063615>.
31. T. A. LÄHDE, U.-G. MEISSNER, and E. EPELBAUM. An update on fine-tunings in the triple-alpha process. *The European Physical Journal A*, 56(3), March 2020. URL <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00093-0>.
32. G. BEVILACQUA, H. HARTANTO, M. KRAUS, T. WEBER, and M. WOREK. Off-shell vs on-shell modelling of top quarks in photon associated production. *Journal of High Energy Physics*, 2020(3), March 2020. URL [https://doi.org/10.1007/jhep03\(2020\)154](https://doi.org/10.1007/jhep03(2020)154).
33. T. BÜSCHER, A. L. DIEZ, G. GOMPPER, and J. ELGETI. Instability and fingering of interfaces in growing tissue. *New Journal of Physics*, 22(8):083,005, August 2020. URL <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ab9e88>.
34. T. BÜSCHER, N. GANAI, G. GOMPPER, and J. ELGETI. Tissue evolution: mechanical interplay of adhesion, pressure, and heterogeneity. *New Journal of Physics*, 22(3):033,048, March 2020. URL <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ab74a5>.
35. M. A. ET AL. The Alpha Magnetic Spectrometer (AMS) on the international space station: Part II — Results from the first seven years. *Physics Reports*, 894:1–116, February 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2020.09.003>.

36. 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>.
37. 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, 2020. ISSN 0045-7825. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782520304047>.
38. OBERLACK, HOYAS, KRAHEBERGER, and ALCÁNTARA-ÁVILA. Turbulence Statistics of Arbitrary Moments of Wall-Bounded Shear Flows - a Symmetry Approach (to be submitted to Nature. *Nature[accepted]*.
39. S. ZHANG, S. BEALE, U. REIMER, M. ANDERSSON, and W. LEHNERT. Polymer electrolyte fuel cell modeling - A comparison of two models with different levels of complexity. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(38):19,761–19,777, July 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.060>.
40. S. ZHANG, S. B. BEALE, Y. SHI, H. JANSSEN, U. REIMER, and W. LEHNERT. Development of an Open-Source Solver for Polymer Electrolyte Fuel Cells. *ECS Transactions*, 98(9):317–329, September 2020. URL <https://doi.org/10.1149/09809.0317ecst>.
41. S. B. BEALE, M. ANDERSSON, N. WEBER, H. MARSCHALL, and W. LEHNERT. Combined Two-phase Co-flow and Counter-flow in a Gas Channel/Porous Transport Layer Assembly. *ECS Transactions*, 98(9):305–315, September 2020. URL <https://doi.org/10.1149/09809.0305ecst>.
42. J. HELMIG, F. KEY, M. BEHR, and S. ELGETI. Combining boundary-conforming finite element meshes on moving domains using a sliding mesh approach. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 93(4):1053–1073, October 2020. URL <https://doi.org/10.1002/flid.4919>.
43. M. FRINGS, N. HOSTERS, C. MÜLLER, M. SPAHN, C. SUSEN, K. KEY, and S. ELGETI. SplineLib: A modern multi-purpose C++ spline library. *Advances in Engineering Software*, 146:102,826, August 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2020.102826>.
44. F. ZWICKE. *Inverses Design in Spritzgussverfahren basierend auf der Finite-Elemente-Methode*. Ph.D. thesis, 2020. URL <https://publications.rwth-aachen.de/record/794781>.
45. S. HASSLER, A. M. RANNO, and M. BEHR. Finite-element formulation for advection–reaction equations with change of variable and discontinuity capturing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 369:113,171, September 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113171>.
46. F. GUGLIETTA, M. BEHR, L. BIFERALE, G. FALCUCCI, and M. SBRAGAGLIA. On the effects of membrane viscosity on transient red blood cell dynamics. *Soft Matter*, 16(26):6191–6205, 2020. URL <https://doi.org/10.1039/d0sm00587h>.
47. L. GESENHUES. *Fortgeschrittene Methoden der Finite Elemente Simulation rheologischer Modelle für geophysikalische Strömungen*. Ph.D. thesis, 2020. URL <https://publications.rwth-aachen.de/record/789683>.
48. T. SPENKE, N. HOSTERS, and M. BEHR. A multi-vector interface quasi-Newton method with linear complexity for partitioned fluid–structure interaction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 361:112,810, April 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112810>.
49. J. HINZ, J. HELMIG, M. MÖLLER, and S. ELGETI. Boundary-conforming finite element methods for twin-screw extruders using spline-based parameterization techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 361:112,740, April 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112740>.

50. M. MAKE, N. HOSTERS, M. BEHR, and S. ELGETI. Space-Time NURBS-Enhanced Finite Elements for Solving the Compressible Navier–Stokes Equations. In *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 97–107. Springer International Publishing, 2020. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-030-30705-9\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-030-30705-9_9).
51. S. BERGER, T. WEGMANN, M. MEINKE, and W. SCHRÖDER. Large-Eddy Simulation Study of Biofuel Injection in an Optical Direct Injection Engine. In *SAE Technical Paper Series*. SAE International, September 2020. URL <https://doi.org/10.4271/2020-01-2121>.
52. S. P. PATIL. Enhanced mechanical properties of double-walled carbon nanotubes reinforced silica aerogels: An all-atom simulation study. *Scripta Materialia*, 196:113,757, April 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.113757>.
53. S. P. PATIL, V. G. PARALE, H.-H. PARK, and B. MARKERT. Mechanical modeling and simulation of aerogels: A review. *Ceramics International*, 47(3):2981–2998, February 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.09.181>.
54. S. P. PATIL, A. KULKARNI, and B. MARKERT. Shockwave response of graphene aerogels: An all-atom simulation study. *Computational Materials Science*, 189:110,252, March 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110252>.
55. J. HERMAN, M. GOVEDNIK, S. P. PATIL, and B. MARKERT. Molecular Dynamics Simulation Study of the Mechanical Properties of Nanocrystalline Body-Centered Cubic Iron. *Surfaces*, 3(3):381–391, August 2020. URL <https://doi.org/10.3390/surfaces3030028>.
56. S. P. PATIL, P. SHENDYE, and B. MARKERT. Molecular Investigation of Mechanical Properties and Fracture Behavior of Graphene Aerogel. *The Journal of Physical Chemistry B*, 124(28):6132–6139, June 2020. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.0c03977>.
57. A. REGE and S. P. PATIL. On the Molecular to Continuum Modeling of Fiber-Reinforced Composites. *Advanced Theory and Simulations*, 3(4):1900,211, January 2020. URL <https://doi.org/10.1002/adts.201900211>.
58. S. P. PATIL, P. SHENDYE, and B. MARKERT. Mechanical properties and behavior of glass fiber-reinforced silica aerogel nanocomposites: Insights from all-atom simulations. *Scripta Materialia*, 177:65–68, March 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.10.010>.
59. P. KEUTER, A. L. RAVENSBURG, M. HANS, S. K. AGHDA, D. M. HOLZAPFEL, D. PRIMETZHOFFER, and J. M. SCHNEIDER. A Proposal for a Composite with Temperature-Independent Thermophysical Properties: HfV2–HfV2O7. *Materials*, 13(21):5021, November 2020. URL <https://doi.org/10.3390/ma13215021>.
60. S. EVERTZ and J. M. SCHNEIDER. Effect of the Free Volume on the Electronic Structure of Cu70Zr30 Metallic Glasses. *Materials*, 13(21):4911, October 2020. URL <https://doi.org/10.3390/ma13214911>.
61. A. SAKSENA, D. BOGDANOVSKI, H. SAHASRABUDDHE, D. MUSIC, and J. M. SCHNEIDER. Kinetically Limited Phase Formation of Pt-Ir Based Compositionally Complex Thin Films. *Materials*, 13(10):2298, May 2020. URL <https://doi.org/10.3390/ma13102298>.
62. A. L. RAVENSBURG, P. KEUTER, D. MUSIC, D. J. MILJANOVIC, and J. M. SCHNEIDER. Experimental and Theoretical Investigation of the Elastic Properties of HfV2O7. *Crystals*, 10(3):172, March 2020. URL <https://doi.org/10.3390/cryst10030172>.
63. S. EVERTZ, S. PRÜNTE, L. PATTERER, A. MARSHAL, D. M. HOLZAPFEL, A. SCHÖKEL, M. HANS, D. PRIMETZHOFFER, and J. M. SCHNEIDER. Boron Concentration Induced Co-Ta-B Composite Formation Observed in the Transition from Metallic to Covalent Glasses. *Condensed Matter*, 5(1):18, March 2020. URL <https://doi.org/10.3390/condmat5010018>.

64. S. EVERTZ, I. KIRCHLECHNER, R. SOLER, C. KIRCHLECHNER, P. KONTIS, J. BEDNARCIK, B. GAULT, G. DEHM, D. RAA-BE, and J. M. SCHNEIDER. Electronic structure based design of thin film metallic glasses with superior fracture toughness. *Materials & Design*, 186:108,327, January 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108327>.
65. D. MUSIC, S. PRÜNTE, P. KEUTER, and A. SAKSENA. On thermal conductivity of amorphous niobium mon-oxide. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 53(28):285,303, may 2020. URL <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab8517>.
66. S. LIU, K. CHANG, D. MUSIC, X. CHEN, S. MRÁZ, D. BOGDANOVSKI, M. HANS, D. PRIMETZHOFFER, and J. M. SCHNEIDER. Stress-dependent prediction of metastable phase formation for magnetron-sputtered V<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N and Ti<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N thin films. *Acta Materialia*, 196:313–324, September 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.06.044>.
67. D. MUSIC, H. RUESS, and J. M. SCHNEIDER. Quantum-mechanical study of interaction between polycar-bonate and MO.5AlO.5N(0 0 1) surfaces (M = Ti, V, Cr). *Applied Surface Science*, 520:146,306, August 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.146306>.
68. M. HANS, H. RUESS, Z. CZIGÁNY, J. KRAUSE, P. ONDRAČKA, D. MUSIC, S. EVERTZ, D. M. HOLZAPFEL, D. PRIMETZ-HOFER, and J. M. SCHNEIDER. Spinodal decomposition of reactively sputtered (V<sub>0.64</sub>Al<sub>0.36</sub>)<sub>0.49</sub>N<sub>0.51</sub> thin films. *Surface and Coatings Technology*, 389:125,641, May 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125641>.
69. C. PERSCH, M. J. MÜLLER, A. YADAV, J. PRIES, N. HONNÉ, P. KERRES, S. WEI, H. TANAKA, P. FANTINI, E. VARESI, F. PELLIZZER, and M. WUTTIG. The potential of chemical bonding to design crystallization and vitrification kinetics. *Nature Communications*, 12(1), August 2021. URL <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25258-3>.
70. R. SAHU, D. BOGDANOVSKI, J.-O. ACHENBACH, S. ZHANG, M. HANS, D. PRIMETZHOFFER, J. M. SCHNEIDER, and C. SCHEU. Direct MoB MBene domain formation in magnetron sputtered MoAlB thin films. *Nanoscale*, 13(43):18,077–18,083, 2021. URL <https://doi.org/10.1039/d1nr05712j>.
71. M. RÜTTGERS, S.-R. KOH, J. JITSEV, W. SCHRÖDER, and A. LINTERMANN. Prediction of Acoustic Fields Using a Lattice-Boltzmann Method and Deep Learning. In *Lecture Notes in Computer Science*, pages 81–101. Springer International Publishing, 2020. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-030-59851-8\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-030-59851-8_6).
72. H. ALJAWAD, M. RÜTTGERS, A. LINTERMANN, W. SCHROÖDER, and K. C. LEE. Effects of the Nasal Cavity Com-plexity on the Pharyngeal Airway Fluid Mechanics: A Computational Study. *Journal of Digital Imaging*, 34(5):1120–1133, September 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s10278-021-00501-x>.
73. M. KORSMEIER and A. CUOCO. Implications of lithium to oxygen AMS-02 spectra on our understanding of cosmic-ray diffusion. *Physical Review D*, 103(10), May 2021. URL <https://doi.org/10.1103/physrevd.103.103016>.
74. B. EIDEL, A. FISCHER, and A. GOTE. From image data towards microstructure information – Accuracy analysis at the digital core of materials. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 101(6), December 2020. URL <https://doi.org/10.1002/zamm.202000245>.
75. A. L. SCHLEPER, K. GOUSHI, C. BANNWARTH, B. HAEHNLE, P. J. WELSCHER, C. ADACHI, and A. J. C. KUEHNE. Hot exciplexes in U-shaped TADF molecules with emission from locally excited states. *Nature Commu-nications*, 12(1), October 2021. URL <https://doi.org/10.1038/s41467-021-26439-w>.
76. M. BREUER, U. MEYER, S. WETZEL, and A. MÜHLFELD. A Privacy-Preserving Protocol for the Kidney Exchan-ge Problem. In *Proceedings of the 19th Workshop on Privacy in the Electronic Society*. ACM, November 2020. URL <https://doi.org/10.1145/3411497.3420213>.

77. F. BECKER, A. DRICHEL, C. MULLER, and T. ERTL. Interpretable Visualizations of Deep Neural Networks for Domain Generation Algorithm Detection. In *2020 IEEE Symposium on Visualization for Cyber Security (VizSec)*. IEEE, October 2020. URL <https://doi.org/10.1109/vizsec51108.2020.00010>.
78. A. DRICHEL, V. DRURY, J. VON BRANDT, and U. MEYER. Finding Phish in a Haystack: A Pipeline for Phishing Classification on Certificate Transparency Logs. In *The 16th International Conference on Availability, Reliability and Security*. ACM, August 2021. URL <https://doi.org/10.1145/3465481.3470111>.
79. A. DRICHEL, N. FAERBER, and U. MEYER. First Step Towards EXPLAINable DGA Multiclass Classification. In *The 16th International Conference on Availability, Reliability and Security*. ACM, August 2021. URL <https://doi.org/10.1145/3465481.3465749>.
80. M. HUNDSHAGEN, K. RAVE, M. MANSOUR, D. THÉVENIN, and R. SKODA. Assessment of multi-phase CFD methods for gas-laden liquid flows in centrifugal pumps with particular emphasis on the change of flow morphology. In *14th European Conference on Turbomachinery Fluid Dynamics and Thermodynamics*. European Turbomachinery Society, 2021. URL <https://doi.org/10.29008/etc2021-529>.
81. K. BOBZIN, W. WIETHEGER, H. HEINEMANN, and F. WOLF. Simulation of thermally sprayed coating properties considering the splat boundaries. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1147(1):012,026, May 2021. URL <https://doi.org/10.1088/1757-899x/1147/1/012026>.

### B.3 Universität Bielefeld

1. B. B. BRANDT, F. CUTERI, and G. ENDRODI. QCD thermodynamics at non-zero isospin asymmetry, 2021. [arXiv:2110.14750 \[hep-lat\]](#).
2. A. CHABANE and G. ENDRÖDI. Roberge-Weiss transitions at imaginary isospin chemical potential, 2021. [arXiv:2110.13536 \[hep-lat\]](#).
3. G. ENDRODI and G. MARKO. Thermal QCD with external imaginary electric fields on the lattice, 2021. [arXiv:2110.12189 \[hep-lat\]](#).
4. V. VOVCHEK, B. B. BRANDT, F. CUTERI, G. ENDRÖDI, F. HAJKARIM, and J. SCHAFFNER-BIELICH. Pion Condensation in the Early Universe at Nonvanishing Lepton Flavor Asymmetry and Its Gravitational Wave Signatures. *Physical Review Letters*, 126(1), Jan 2021. ISSN 1079-7114. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.012701>.
5. L. ALTENKORT, A. M. ELLER, O. KACZMAREK, L. MAZUR, G. D. MOORE, and H.-T. SHU. Spectral reconstruction details of a gradient-flowed color-electric correlator, 2021. [arXiv:2109.11303 \[hep-lat\]](#).
6. D. BOLLWEG, J. GOSWAMI, O. KACZMAREK, F. KARSCH, S. MUKHERJEE, P. PETRECZKY, C. SCHMIDT, and P. SCIOR. Second order cumulants of conserved charge fluctuations revisited: Vanishing chemical potentials. *Physical Review D*, 104(7), Oct 2021. ISSN 2470-0029. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.104.074512>.
7. O. KACZMAREK, L. MAZUR, and S. SHARMA. Eigenvalue spectra of QCD and the fate of  $U_A(1)$  breaking towards the chiral limit, 2021. [arXiv:2102.06136 \[hep-lat\]](#).
8. L. ALTENKORT, A. M. ELLER, O. KACZMAREK, L. MAZUR, G. D. MOORE, and H.-T. SHU. Sphaleron rate from Euclidean lattice correlators: An exploration. *Physical Review D*, 103(11), Jun 2021. ISSN 2470-0029. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.103.114513>.
9. 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. *Physical Review D*, 103(1), Jan 2021. ISSN 2470-0029. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.103.014511>.
10. H.-T. DING, O. KACZMAREK, A.-L. LORENZ, H. OHNO, H. SANDMEYER, and H.-T. SHU. Charm and beauty in the deconfined plasma from quenched lattice QCD, 2021. [arXiv:2108.13693 \[hep-lat\]](#).
11. S. DENTINGER, O. KACZMAREK, and A. LAHIRI. Screening Masses Towards Chiral Limit. *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement*, 14(2):321, 2021. ISSN 2082-7865. URL <http://dx.doi.org/10.5506/APHYSPOLBSUPP.14.321>.
12. M. SARKAR, O. KACZMAREK, F. KARSCH, A. LAHIRI, and C. SCHMIDT. Conserved Charge Fluctuations in the Chiral Limit. *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement*, 14(2):383, 2021. ISSN 2082-7865. URL <http://dx.doi.org/10.5506/APHYSPOLBSUPP.14.383>.
13. D. CLARKE, O. KACZMAREK, A. LAHIRI, and M. SARKAR. Sensitivity of the Polyakov Loop to Chiral Symmetry Restoration. *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement*, 14(2):311, 2021. ISSN 2082-7865. URL <http://dx.doi.org/10.5506/APHYSPOLBSUPP.14.311>.
14. O. KACZMAREK, F. KARSCH, A. LAHIRI, and C. SCHMIDT. Universal Scaling Properties of QCD Close to the Chiral Limit. *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement*, 14(2):291, 2021. ISSN 2082-7865. URL <http://dx.doi.org/10.5506/APHYSPOLBSUPP.14.291>.
15. D. CLARKE, O. KACZMAREK, F. KARSCH, A. LAHIRI, and M. SARKAR. Sensitivity of the Polyakov loop and related observables to chiral symmetry restoration. *Physical Review D*, 103(1), Jan 2021. ISSN 2470-0029. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.103.L011501>.

16. S. SINGH, P. DIMOPOULOS, L. DINI, F. D. RENZO, J. GOSWAMI, G. NICOTRA, C. SCHMIDT, K. ZAMBELLO, and F. ZIESCHE. Lee-Yang edge singularities in lattice QCD : A systematic study of singularities in the complex  $\mu_B$  plane using rational approximations, 2021. [arXiv:2111.06241](https://arxiv.org/abs/2111.06241) [hep-lat].
17. G. NICOTRA, P. DIMOPOULOS, L. DINI, F. D. RENZO, J. GOSWAMI, C. SCHMIDT, S. SINGH, K. ZAMBELLO, and F. ZIESCHE. Lee-Yang edge singularities in 2+1 flavor QCD with imaginary chemical potential, 2021. [arXiv:2111.05630](https://arxiv.org/abs/2111.05630) [hep-lat].
18. P. DIMOPOULOS, L. DINI, F. D. RENZO, J. GOSWAMI, G. NICOTRA, C. SCHMIDT, S. SINGH, K. ZAMBELLO, and F. ZIESCHÉ. A contribution to understanding the phase structure of strong interaction matter: Lee-Yang edge singularities from lattice QCD, 2021. [arXiv:2110.15933](https://arxiv.org/abs/2110.15933) [hep-lat].
19. A. HOTTUNG, Y.-D. KWON, and K. TIERNEY. Efficient Active Search for Combinatorial Optimization Problems, 2021. [arXiv:2106.05126](https://arxiv.org/abs/2106.05126) [cs.LG].
20. A. HOTTUNG, B. BHANDARI, and K. TIERNEY. Learning a Latent Search Space for Routing Problems using Variational Autoencoders. In *International Conference on Learning Representations*. 2021. URL <https://openreview.net/forum?id=90JprVrJB0>.
21. H. ROCH and N. BORGHINI. Fluctuations of anisotropic flow from the finite number of rescatterings in a two-dimensional massless transport model. *The European Physical Journal C*, 81(5), May 2021. ISSN 1434-6052. URL <http://dx.doi.org/10.1140/epjc/s10052-021-09147-z>.
22. D. SCHWEITZER, S. SCHLICHTING, and L. VON SMEKAL. Critical dynamics of relativistic diffusion, 2021. [arXiv:2110.01696](https://arxiv.org/abs/2110.01696) [hep-lat].
23. L. KÜNKEL, R. M. THOMAS, and J. P. W. VERBIEST. Detecting pulsars with neural networks: a proof of concept. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 506(1):1111–1127, Jun 2021. ISSN 1365-2966. URL <http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stab1628>.
24. L. MAZUR. *Topological Aspects in Lattice QCD*. Ph.D. thesis, 2021. URL <https://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:0070-pub-29564937>, <https://pub.uni-bielefeld.de/record/2956493>.
25. A.-L. LORENZ. *Insights into Thermal Modifications of Charmonium and Bottomonium from a Comparison of Lattice QCD and Perturbative Spectral Functions*. Ph.D. thesis, 2021. URL <https://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:0070-pub-29559567>, <https://pub.uni-bielefeld.de/record/2955956>.
26. G. GAGLIARDI. *The QCD Phase Diagram from Strong Coupling Expansion*. Ph.D. thesis, 2020. URL <https://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:0070-pub-29436638>, <https://pub.uni-bielefeld.de/record/2943663>.
27. S. CHAGDAA, B. PUREV, and E. GALSANDORJ. Flux tubes in full QCD at high temperature. 48(12):125,001, oct 2021. URL <https://doi.org/10.1088/1361-6471/ac2679>.

#### B.4 Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. C. ALEXANDROU, S. BACCHIO, G. BERGNER, M. CONSTANTINO, M. DI CARLO, P. DIMOPOULOS, J. FINKENRATH, E. FIORENZA, R. FREZZOTTI, M. GAROFALO, K. HADJIYIANNAKOU, B. KOSTRZEWA, G. KOUTSOU, K. JANSEN, V. LUBICZ, M. MANGIN-BRINET, F. MANIGRASSO, G. MARTINELLI, E. PAPADIOFANTOUS, F. PITTLER, G. C. ROSSI, F. SANFILIPPO, S. SIMULA, C. TARANTINO, A. TODARO, C. URBACH, and U. WENGER. Quark masses using twisted-mass fermion gauge ensembles. *Phys. Rev. D*, 104:074,515, Oct 2021. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.104.074515>.
2. P. DIMOPOULOS, R. FREZZOTTI, M. GAROFALO, and S. SIMULA.  $K^-$  and  $D_{(s)}$ -meson leptonic decay constants with physical light, strange and charm quarks by ETMC. *PoS, LATTICE2021:472*, 2021. [arXiv:2110.01294](https://arxiv.org/abs/2110.01294) [hep-lat].
3. C. ALEXANDROU, S. BACCHIO, G. BERGNER, M. CONSTANTINO, M. DI CARLO, P. DIMOPOULOS, J. FINKENRATH, E. FIORENZA, R. FREZZOTTI, M. GAROFALO, K. HADJIYIANNAKOU, B. KOSTRZEWA, G. KOUTSOU, K. JANSEN, V. LUBICZ, M. MANGIN-BRINET, F. MANIGRASSO, G. MARTINELLI, F. PITTLER, G. ROSSI, F. SANFILIPPO, S. SIMULA, C. TARANTINO, A. TODARO, C. URBACH, and U. WENGER. Determination of the light, strange and charm quark masses using twisted mass fermions. *PoS, LATTICE2021:171*, 2021. [arXiv:2110.04588](https://arxiv.org/abs/2110.04588) [hep-lat].
4. C. ALEXANDROU, S. BACCHIO, G. BERGNER, P. DIMOPOULOS, J. FINKENRATH, R. FREZZOTTI, M. GAROFALO, G. KOUTSOU, B. KOSTRZEWA, P. LABUS, F. SANFILIPPO, S. SIMULA, M. UEDING, C. URBACH, and U. WENGER. Gradient flow scale-setting with  $N_f = 2 + 1 + 1$  Wilson-clover twisted-mass fermions. *PoS, LATTICE2021:131*, 2021. [arXiv:2111.14710](https://arxiv.org/abs/2111.14710) [hep-lat].
5. B. KIRCHNER, J. BLASIUS, L. ESSER, and W. RECKIEN. Predicting Vibrational Spectroscopy for Flexible Molecules and Molecules with Non-Idle Environments. *Adv. Theory Simul.*, 4(4):2000,223, 2021.
6. M. HAEFNER and T. BREDOW. F and M centers in alkali halides: A theoretical study applying self-consistent dielectric-dependent hybrid density functional theory. *PHYSICAL REVIEW B*, 102(18), NOV 13 2020. ISSN 2469-9950.
7. M. HAEFNER and T. BREDOW. Mobility of F Centers in Alkali Halides. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 125(17, SI):9085–9095, MAY 6 2021. ISSN 1932-7447.
8. K. C. L. BAUERFEIND, R. ROSS, and T. BREDOW. Theoretical Study of Polar Spinel Surfaces: Effect of Termination and Cation Inversion on Structure and Stability. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 124(52):28,520–28,530, DEC 31 2020. ISSN 1932-7447.
9. M. CURTI, C. B. MENDIVE, T. BREDOW, and D. W. BAHNEMANN. Importance of Surfaces and Many-Body Absorption Spectra for C-Doped TiO<sub>2</sub> Photocatalysts. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 125(43):24,263–24,272, NOV 4 2021. ISSN 1932-7447.
10. K. C. L. BAUERFEIND, R. ROSS, and T. BREDOW. Theoretical Study of Polar Spinel Surfaces: Effect of Termination and Cation Inversion on Structure and Stability. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(52):28,520–28,530, 2020.
11. B. STAHL and T. BREDOW. Surfaces of VO<sub>2</sub>-Polymorphs: Structure, Stability and the Effect of Doping. *CHEMPHYSICHEM*, 22(10):1018–1026, MAY 17 2021.
12. BÖHLER, MICHAEL, CASPART, RENÉ, FISCHER, MAX, FREYERMUTH, OLIVER, GIFFELS, MANUEL, KROBOTH, STEFAN, KUEHN, EILEEN, SCHNEPF, MATTHIAS, VON CUBE, FLORIAN, and WIENEMANN, PETER. Transparent Integration of Opportunistic Resources into the WLCG Compute Infrastructure. *EPJ Web Conf.*, 251:02,039, 2021. URL <https://doi.org/10.1051/epjconf/202125102039>.

## B.5 Technische Universität Dortmund

1. R. MÜNSTER, O. MIERKA, S. TUREK, T. WEIGEL, and A. OSTENDORF. Benchmarking and validation of a combined CFD-optics solver for micro-scale problems. *OSA Continuum*, 3(11):3070–3081, Nov 2020. URL <http://www.osapublishing.org/osac/abstract.cfm?URI=osac-3-11-3070>.
2. J. DÜNNEBACKE, S. TUREK, C. LOHMANN, A. SOKOLOV, and P. ZAJAC. Increased space-parallelism via time-simultaneous Newton-multigrid methods for nonstationary nonlinear PDE problems. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 35(3):211–225, 2021. URL <https://doi.org/10.1177/10943420211001940>.
3. J. DÜNNEBACKE, S. TUREK, P. ZAJAC, and A. SOKOLOV. A Time-Simultaneous Multigrid Method for Parabolic Evolution Equations. In F. J. VERMOLEN and C. VUIK, editors, *Numerical Mathematics and Advanced Applications ENUMATH 2019*, pages 333–342. Springer International Publishing, Cham, 2021. ISBN 978-3-030-55874-1.
4. S. TUREK, D. RUDA, D. RIBBROCK, and P. ZAJAC. Eine Machbarkeitsstudie zu schnellen FEM–Poisson–Lösern auf Beschleunigerhardware als Beispiel für Hardware–orientierte Numerik. *Rundbrief GAMM*, pages 4–12, 2021. Rundbrief 1/2021.
5. D. RUDA, S. TUREK, D. RIBBROCK, and P. ZAJAC. A Proof of Concept for Very Fast Finite Element Poisson Solvers on Accelerator Hardware. *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics - PAMM2021*, 2021.
6. D. RUDA, S. TUREK, D. RIBBROCK, and P. ZAJAC. Very Fast Finite Element Poisson Solvers on Lower Precision Accelerator Hardware – A Proof-of-Concept Study for NVIDIA Tesla V100. Technical report, Fakultät für Mathematik, TU Dortmund, July 2021. Ergebnisberichte des Instituts für Angewandte Mathematik, Nummer 647.
7. G. POTTBROCK. Vergleich stetiger und unstetiger Galerkin-Ansätze zur Zeitdiskretisierung bei Orts-Zeit-Methoden, 2021. Bachelorarbeit, TU Dortmund.
8. O. MIERKA and S. TUREK. *Numerical Simulation Techniques for the Efficient and Accurate Treatment of Local Fluidic Transport Processes Together with Chemical Reactions*, pages 413–439. Springer International Publishing, Cham, 2021. ISBN 978-3-030-72361-3. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-030-72361-3\\_17](https://doi.org/10.1007/978-3-030-72361-3_17).
9. S. TUREK and O. MIERKA. Chapter 7 - Numerical simulation and benchmarking of drops and bubbles. In A. BONITO and R. H. NOCHETTO, editors, *Geometric Partial Differential Equations - Part II*, volume 22 of *Handbook of Numerical Analysis*, pages 419–465. Elsevier, 2021. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570865919300262>.
10. M. SCHLÜTER, F. KEXEL, A. VON KAMEKE, M. HOFFMANN, S. HERRES-PAWLIS, P. KLÜFERS, M. OSSBERGER, S. TUREK, O. MIERKA, N. KOCKMANN, and W. KRIEGER. *Visualization and Quantitative Analysis of Consecutive Reactions in Taylor Bubble Flows*, pages 507–543. Springer International Publishing, Cham, 2021. ISBN 978-3-030-72361-3. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-030-72361-3\\_21](https://doi.org/10.1007/978-3-030-72361-3_21).
11. J. SONNENSCHNEIN, P. FRIEDRICH, M. AGHAYARZADEH, O. MIERKA, S. TUREK, and K. WOHLGEMUTH. Flow Map for Hydrodynamics and Suspension Behavior in a Continuous Archimedes Tube Crystallizer. *Crystals*, 11(12), 2021. ISSN 2073-4352. URL <https://www.mdpi.com/2073-4352/11/12/1466>.
12. J. ZENTGRAF and S. RAHMANN. Fast lightweight accurate xenograft sorting. *Algorithms for Molecular Biology*, 16:2, 12 2021. ISSN 1748-7188.
13. K. WU, B. ZHANG, C. DRECHSLER, J. J. HOLSTEIN, and G. H. CLEVER. Backbone-Bridging Promotes Diversity in Heteroleptic Cages. *Angewandte Chemie International Edition*, 60:6403–6407, 3 2021. ISSN 1433-7851.

14. S. HASEGAWA, S. L. MEICHSNER, J. J. HOLSTEIN, A. BAKSI, M. KASANMASCHEFF, and G. H. CLEVER. Long-Lived C<sub>60</sub> Radical Anion Stabilized Inside an Electron-Deficient Coordination Cage. *Journal of the American Chemical Society*, 143:9718–9723, 7 2021. ISSN 0002-7863.
15. A. BÜCHER, J. LILIENTHAL, P. KINSVATER, and R. FRIED. Penalized quasi-maximum likelihood estimation for extreme value models with application to flood frequency analysis. *Extremes*, 24:325–348, 6 2021. ISSN 1386-1999.
16. M. SCHEWE, H. WILBUER, and A. MENZEL. Simulation of wear and effective friction properties of microstructured surfaces. *Wear*, 464-465:203,491, 1 2021. ISSN 00431648.
17. T. A. FREDE, M. DIETZ, and N. KOCKMANN. Software-guided microscale flow calorimeter for efficient acquisition of thermokinetic data. *Journal of Flow Chemistry*, 11:321–332, 9 2021. ISSN 2062-249X.
18. A. BARTELS, P. KURZEJA, and J. MOSLER. Cahn–Hilliard phase field theory coupled to mechanics: Fundamentals, numerical implementation and application to topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 383:113,918, 9 2021. ISSN 00457825.
19. F. OTTE, J. KLEINHEIDER, W. HILLER, R. WANG, U. ENGLERT, and C. STROHMANN. Weak yet Decisive: Molecular Halogen Bond and Competing Weak Interactions of Iodobenzene and Quinuclidine. *Journal of the American Chemical Society*, 143:4133–4137, 3 2021. ISSN 0002-7863.
20. A. SEYEMEN, A. MÜNCH, S. A. ORR, R. HERBST-IRMER, R. E. MULVEY, C. STROHMANN, and D. STALKE. When Electrons Step in: Polarizing Effects Explored with Triisobutylaluminum. *Inorganic Chemistry*, 60:2872–2877, 3 2021. ISSN 0020-1669.
21. P. SCHERING, E. EVERS, V. NEDELEA, D. S. SMIRNOV, E. A. ZHUKOV, D. R. YAKOVLEV, M. BAYER, G. S. UHRIG, and A. GREILICH. Resonant spin amplification in Faraday geometry. *Physical Review B*, 103:L201,301, 5 2021. ISSN 2469-9950.
22. H. PLESKUN, T. JÜNEMANN, T. BODE, and A. BRÜMMER. Modelling of inhomogeneous chamber states in rotary positive displacement vacuum pumps. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1180:012,009, 9 2021. ISSN 1757-8981.
23. M. POTOWSKI, V. B. K. KUNIG, L. EBERLEIN, A. VAKALOPOULOS, S. M. KAST, and A. BRUNSCHWEIGER. Chemically Stabilized DNA Barcodes for DNA-Encoded Chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, 60:19,744–19,749, 9 2021. ISSN 1433-7851.
24. N. TIELKER, L. EBERLEIN, G. HESSLER, K. F. SCHMIDT, S. GÜSSREGEN, and S. M. KAST. Quantum–mechanical property prediction of solvated drug molecules: what have we learned from a decade of SAMPL blind prediction challenges? *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 35:453–472, 4 2021. ISSN 0920-654X.
25. B. SHARMA, V. A. TRAN, T. PONGRATZ, L. GALAZZO, I. ZHURKO, E. BORDIGNON, S. M. KAST, F. NEESE, and D. MARX. A Joint Venture of Ab Initio Molecular Dynamics, Coupled Cluster Electronic Structure Methods, and Liquid-State Theory to Compute Accurate Isotropic Hyperfine Constants of Nitroxide Probes in Water. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 17:6366–6386, 10 2021. ISSN 1549-9618.
26. T. S. GABRIEL, U.-P. HANSEN, M. URBAN, N. DREXLER, T. WINTERSTEIN, O. RAUH, G. THIEL, S. M. KAST, and I. SCHROEDER. Asymmetric Interplay Between K<sup>+</sup> and Blocker and Atomistic Parameters From Physiological Experiments Quantify K<sup>+</sup> Channel Blocker Release. *Frontiers in Physiology*, 12, 10 2021. ISSN 1664-042X.

## B.6 Universität Duisburg-Essen

1. V. BEGUM, M. E. GRUNER, C. VORWERK, C. DRAXL, and R. PENTCHEVA. Theoretical description of optical and x-ray absorption spectra of MgO including many-body effects. *Phys. Rev. B*, 103:195,128, May 2021. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.195128>.
2. L. CIFUENTES, J. SELLMANN, I. WLOKAS, and A. KEMPF. Direct numerical simulations of nanoparticle formation in premixed and non-premixed flame–vortex interactions. *Physics of Fluids*, 32(9):093,605, September 2020. URL <https://doi.org/10.1063/5.0020979>.
3. 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, February 2020. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X19302048>.
4. L. ENGELMANN, M. KLEIN, and A. KEMPF. A-posteriori LES assessment of subgrid-scale closures for bounded passive scalars. *Computers & Fluids*, 218:104,840, March 2021. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793021000062>.
5. J. HASSLBERGER, L. ENGELMANN, A. KEMPF, and M. KLEIN. Robust dynamic adaptation of the Smagorinsky model based on a sub-grid activity sensor. *Physics of Fluids*, 33(1):015,117, January.
6. S. ZHANG, H. HAJIYANI, A. G. HUFNAGEL, J. KAMPMANN, B. BREITBACH, T. BEIN, D. FATTAKHOVA-ROHLFING, R. PENTCHEVA, and C. SCHEU. Sn-Doped Hematite for Photoelectrochemical Water Splitting: The Effect of Sn Concentration. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 234(4):683–698, 2020. URL <https://doi.org/10.1515/zpch-2019-1482>.
7. H. HAJIYANI and R. PENTCHEVA. Influence of 3d, 4d, and 5d dopants on the oxygen evolution reaction at  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) under dark and illumination conditions. *The Journal of Chemical Physics*, 152(12):124,709, March 2020. URL <https://doi.org/10.1063/1.5143236>.
8. J. KAMPMANN, S. BETZLER, H. HAJIYANI, S. HÄRINGER, M. BEETZ, T. HARZER, J. KRAUS, B. V. LOTSCH, C. SCHEU, R. PENTCHEVA, D. FATTAKHOVA-ROHLFING, and T. BEIN. How photocorrosion can trick you: a detailed study on low-bandgap Li doped CuO photocathodes for solar hydrogen production. *Nanoscale*, 12:7766–7775, 2020. URL <http://dx.doi.org/10.1039/C9NR10250G>.
9. T. FALK, S. ANKE, H. HAJIYANI, S. SADDELER, S. SCHULZ, R. PENTCHEVA, B. PENG, and M. MUHLER. Influence of the particle size on selective 2-propanol gas-phase oxidation over Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanospheres. *Catal. Sci. Technol.*, 11:7552–7562, 2021. URL <http://dx.doi.org/10.1039/D1CY00944>.
10. 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(6):1101–1119, 2020. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.6258>.
11. 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/>.
12. C. JIANG, O. EL MOCTAR, and T. E. SCHELLIN. Mooring-Configurations Induced Decay Motions of a Buoy. *Journal of Marine Science and Engineering*, 9(3):350, Mar 2021. URL <http://dx.doi.org/10.3390/jmse9030350>.
13. T. KOX, E. SPOHR, and S. KENMOE. Impact of Solvation on the Structure and Reactivity of the Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001)/H<sub>2</sub>O Interface: Insights From Molecular Dynamics Simulations. *Frontiers in Energy Research*, 8:312, 2020. URL <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fenrg.2020.604799>.

14. E. BUDIYANTO, S. ZEREBECKI, C. WEIDENTHALER, T. KOX, S. KENMOE, E. SPOHR, S. DEBEER, O. RÜDIGER, S. REICHENBERGER, S. BARCIKOWSKI, and H. TÜYSÜZ. Impact of Single-Pulse, Low-Intensity Laser Post-Processing on Structure and Activity of Mesoporous Cobalt Oxide for the Oxygen Evolution Reaction. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13(44):51,962–51,973, 2021. URL <https://doi.org/10.1021/acscami.1c08034>.
15. V. V. SOKOLOVSKIY, O. N. MIROSHKINA, V. D. BUCHELNIKOV, and M. E. GRUNER. Impact of local arrangement of Fe and Ni on the phase stability and magnetocrystalline anisotropy in Fe-Ni-Al Heusler alloys, 2021. [arXiv:2109.12005](https://arxiv.org/abs/2109.12005) [cond-mat.mtrl-sci].
16. S. SULEIMAN, M. NANJIAH, I. SKENDEROVIC, T. ROSENBERGER, F. KUNZE, I. WLOKAS, F. E. KRUIS, H. WIGGERS, and C. SCHULZ. Atmospheric-pressure particle mass spectrometer for investigating particle growth in spray flames. *Journal of Aerosol Science*, 158:105,827, 2021. ISSN 0021-8502. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850221005589>.
17. I. RAHINOV, J. SELLMANN, M. R. LALANNE, M. NANJIAH, T. DREIER, S. CHESKIS, and I. WLOKAS. Insights into the Mechanism of Combustion Synthesis of Iron Oxide Nanoparticles Gained by Laser Diagnostics, Mass Spectrometry, and Numerical Simulations: A Mini-Review. *Energy & Fuels*, 35(1):137–160, 2021. URL <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c03561>.
18. M. R. LALANNE, A. PILIPODI-BEST, O. BLUMER, P. WOLLNY, M. NANJIAH, I. WLOKAS, S. CHESKIS, and I. RAHINOV. Absolute concentration imaging using self-calibrating laser-induced fluorescence: application to atomic iron in a nanoparticle flame-synthesis reactor. *Applied Physics B*, 127(9):126, Aug 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s00340-021-07672-z>.
19. 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.
20. J. STORM, M. PISE, D. BRANDS, J. SCHRÖDER, and M. KALISKE. A comparative study of micro-mechanical models for fiber pullout behavior of reinforced high performance concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 243:107,506, 2021. ISSN 0013-7944. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001379442031064X>.
21. M. PISE, D. BRANDS, J. SCHRÖDER, G. GEBUHR, and S. ANDERS. On the application of representative volume elements for steel fiber reinforced high performance concrete - a numerical study. *PAMM*, 20(1):e202000,323, 2021. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pamm.202000323>.
22. M. THOME, J. NEUGEBAUER, O. E. MOCTAR, and T. E. SCHELLIN. Assessment of Methods for Calculating Liquefied Natural Gas Pump Tower Loads. *Journal of Offshore Mechanics and Arctic Engineering*, 143(6), 05 2021. ISSN 0892-7219. URL <https://doi.org/10.1115/1.4050964>. 061402.
23. S. UEBING, D. BRANDS, L. SCHEUNEMANN, and J. SCHRÖDER. Residual stresses in hot bulk formed parts: two-scale approach for austenite-to-martensite phase transformation. *Archive of Applied Mechanics*, 91(2):545–562, Feb 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s00419-020-01836-7>.
24. B.-A. BEHRENS, J. SCHRÖDER, D. BRANDS, K. BRUNOTTE, H. WESTER, L. SCHEUNEMANN, S. UEBING, and C. KOCK. Numerische Prozessauslegung zur gezielten Eigenspannungseinstellung in warmmassivumgeformten Bauteilen unter Berücksichtigung von Makro- und Mikroskala. *Forschung im Ingenieurwesen*, 85(3):757–771, Sep 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s10010-021-00482-x>.
25. Y. WANG, H.-C. CHEN, G. VAZ, and S. BURMESTER. CFD Simulation of Semi-Submersible Floating Offshore Wind Turbine Under Regular Waves. volume All Days of *International Ocean and Polar Engineering Conference*. 10 2020. URL <https://onepetro.org/ISOPEIOPEC/proceedings-pdf/ISOPE20/All-ISOPE20/ISOPE-I-20-1166/2265149/isope-i-20-1166.pdf>. ISOPE-I-20-1166.

26. L. CIFUENTES, I. WLOKAS, and A. KEMPF. Direct numerical simulations of particle forming flames. HPC-COMB2021 - 3<sup>rd</sup> HPC Spanish Combustion Workshop, Barcelona, Spain, 2021.
27. L. CIFUENTES, I. WLOKAS, and A. KEMPF. A-priori investigation of the coagulation rate for nanoparticle-forming flames. Biannual meeting of the German Section of the Combustion Institute 'Deutscher Flammentag', Hannover, Germany, 2021.
28. L. CIFUENTES, I. WLOKAS, and A. KEMPF. Direct numerical simulations of particle forming flames. 1-minute talk - CENIDE-Jahresfeier, Duisburg, Germany, 2021.
29. L. CIFUENTES, J. SELLMANN, I. WLOKAS, and A. KEMPF. Nanoparticle formation in premixed and non-premixed flame-vortex interactions. 2<sup>nd</sup> CENIDE Conference, Duisburg, Germany, 2020.
30. L. CIFUENTES, J. SELLMANN, I. WLOKAS, and A. KEMPF. Nanoparticle formation in premixed and non-premixed flame-vortex interactions. 4<sup>th</sup> International Symposium on Gas-Phase Synthesis of Functional Nanomaterials, Duisburg, Germany, 2020.
31. J. EIGEMANN, C. BECK, and A. KEMPF. Influence of Numerical Parameters on the Prediction Efficiency of High-Frequency Thermoacoustics. Symposium on Thermoacoustics in Combustion: Industry meets Academia, September 2021.
32. N. NANJIAH, S. APAZELLER, M. GONCHIKZHAPOV, S. C. WIGGERS, H., T. KASPER, A. KEMPF, and I. WLOKAS. Simulation of Laminar Spray Combustion in a Novel Matrix Burner. Flammentag 2021, 2021.
33. M. RENTSCHLER, P. CHANDRAMOULI, G. VAZ, A. VIRÉ, and R. GONÇALVES. CFD code comparison, verification and validation for a FOWT semi-submersible floater (OC4 Phase II). Ocean Engineering, 2021.
34. G. VAZ and M. RENTSCHLER. High-fidelity modelling of floating offshore wind turbines. 5<sup>th</sup> International Conference on Offshore Renewable Energy, August 2021.
35. G. VAZ and A. MAXIMIANO. Assessment of Heave Damping of a Corrugated Plate for a Floating Offshore Wind Platform. 41<sup>st</sup> International Conference on Ocean, Offshore & Arctic Engineering, June 2022.

## B.7 Universität Düsseldorf

1. F. HEISS, S. HETZENECKER, and M. OSTERHAUS. Nonparametric estimation of the random coefficients model: An elastic net approach. *Journal of Econometrics*, 2021. ISSN 0304-4076. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304407621000178>.
2. J. HAUCAP, U. HEIMESHOF, G. J. KLEIN, D. RICKERT, and C. WEY. Vertical relations, pass-through, and market definition: Evidence from grocery retailing. *International Journal of Industrial Organization*, 74:102,693, 2021. ISSN 0167-7187. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167718720301168>.
3. D. RICKERT, J. BARTL, D. PICARD, F. BERNARDI, N. QIN, M. LOVINO, S. PUGET, F.-D. MEYER, I. M. KOUMBA, T. BEEZ, P. VARLET, C. DUFOUR, U. FISCHER, A. BORKHARDT, G. REIFENBERGER, O. AYRAULT, and M. REMKE. Circular RNA profiling distinguishes medulloblastoma groups and shows aberrant RMST overexpression in WNT medulloblastoma. *Acta Neuropathologica*, 141(6):975–978, April 2021. URL <https://doi.org/10.1007/s00401-021-02306-2>.
4. M. KNOPP, S. STOCKHORST, M. VAN DER GIEZEN, S. G. GARG, and S. B. GOULD. The Asgard Archaeal-Unique Contribution to Protein Families of the Eukaryotic Common Ancestor Was 0.3%. *Genome Biology and Evolution*, 13(6), April 2021. URL <https://doi.org/10.1093/gbe/evab085>.
5. P. EBERT, P. A. AUDANO, Q. ZHU, B. RODRIGUEZ-MARTIN, D. PORUBSKY, M. J. BONDER, A. SULOVARI, J. EBLER, W. ZHOU, R. S. MARI, F. YILMAZ, X. ZHAO, P. HSIEH, J. LEE, S. KUMAR, J. LIN, T. RAUSCH, Y. CHEN, J. REN, M. SANTAMARINA, W. HÖPS, H. ASHRAF, N. T. CHUANG, X. YANG, K. M. MUNSON, A. P. LEWIS, S. FAIRLEY, L. J. TALLON, W. E. CLARKE, A. O. BASILE, M. BYRSKA-BISHOP, A. CORVELO, U. S. EVANI, T.-Y. LU, M. J. P. CHAISSON, J. CHEN, C. LI, H. BRAND, A. M. WENGER, M. GHAREGHANI, W. T. HARVEY, B. RAEDER, P. HASENFELD, A. A. REGIER, H. J. ABEL, I. M. HALL, P. FLICEK, O. STEGLE, M. B. GERSTEIN, J. M. C. TUBIO, Z. MU, Y. I. LI, X. SHI, A. R. HASTIE, K. YE, Z. CHONG, A. D. SANDERS, M. C. ZODY, M. E. TALKOWSKI, R. E. MILLS, S. E. DEVINE, C. LEE, J. O. KORBEL, T. MARSCHALL, and E. E. EICHLER. Haplotype-resolved diverse human genomes and integrated analysis of structural variation. *Science*, 372(6537), April 2021. URL <https://doi.org/10.1126/science.abf7117>.
6. D. PORUBSKY, P. EBERT, P. A. AUDANO, M. R. VOLLGER, W. T. HARVEY, P. MARIJON, J. EBLER, K. M. MUNSON, M. SORENSEN, A. SULOVARI, M. HAUKNES, M. GHAREGHANI, P. M. LANSDORP, B. PATEN, S. E. DEVINE, A. D. SANDERS, C. LEE, M. J. P. CHAISSON, J. O. KORBEL, E. E. EICHLER, and T. MARSCHALL. Fully phased human genome assembly without parental data using single-cell strand sequencing and long reads. *Nature Biotechnology*, 39(3):302–308, December 2020. URL <https://doi.org/10.1038/s41587-020-0719-5>.
7. J. ZHONG, G. W. VAN ESSE, X. BI, T. LAN, A. WALLA, Q. SANG, R. FRANZEN, and M. VON KORFF. INTERMEDIUM encodes an HvAP2L-H5 ortholog and is required for inflorescence indeterminacy and spikelet determinacy in barley. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(8):e2011779,118, February 2021. URL <https://doi.org/10.1073/pnas.2011779118>.
8. R. PIEPER, F. TOMÉ, A. PANKIN, and M. VON KORFF. FLOWERING LOCUS T4 delays flowering and decreases floret fertility in barley. *Journal of Experimental Botany*, 72(1):107–121, October 2020. URL <https://doi.org/10.1093/jxb/eraa466>.
9. J. HESSE, C. OWENIER, T. LAUTWEIN, R. ZALFEN, J. F. WEBER, Z. DING, C. ALTER, A. LANG, M. GRANDOCH, N. GERDES, J. W. FISCHER, G. W. KLAU, C. DIETERICH, K. KÖHRER, and J. SCHRADER. Single-cell transcriptomics defines heterogeneity of epicardial cells and fibroblasts within the infarcted murine heart. *eLife*, 10, June 2021. URL <https://doi.org/10.7554/eLife.65921>.
10. J. LOSCHWITZ, A. JÄCKERING, M. KEUTMANN, M. OLAGUNJU, R. J. EBERLE, M. A. CORONADO, O. O. OLUBIYI, and B. STRODEL. Novel inhibitors of the main protease enzyme of SARS-CoV-2 identified via molecular dynamics simulation-guided in vitro assay. *Bioorganic Chemistry*, 111:104,862, June 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2021.104862>.

11. G. GORANCI-BUZHALA, A. MARIAPPAN, L. RICCI-VITIANI, N. JOSIPOVIC, S. PACIONI, M. GOTTARDO, J. PTOK, H. SCHAAL, G. CALLAINI, K. RAJALINGAM, B. DYNLACHT, K. HADIAN, A. PAPANTONIS, R. PALLINI, and J. GOPALAKRISHNAN. Cilium induction triggers differentiation of glioma stem cells. *Cell Reports*, 36(10):109,656, September 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.celrep.2021.109656>.
12. D. MERK, J. PTOK, P. JAKOBS, F. VON AMELN, J. GREULICH, P. KLUGE, K. SEMPEROWITSCH, O. ECKERMANN, H. SCHAAL, N. ALE-AGHA, J. ALTSCHMIED, and J. HAENDELER. Selenoprotein T Protects Endothelial Cells against Lipopolysaccharide-Induced Activation and Apoptosis. *Antioxidants*, 10(9):1427, September 2021. URL <https://doi.org/10.3390/antiox10091427>.
13. J. PTOK, L. MÜLLER, P. N. OSTERMANN, A. RITCHIE, A. T. DILTHEY, S. THEISS, and H. SCHAAL. Modifying splice site usage with ModCon: Maintaining the genetic code while changing the underlying mRNP code. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 19:3069–3076, 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.csbj.2021.05.033>.
14. R. FREIRE, M. WEISWEILER, R. GUERREIRO, N. BAIG, B. HÜTTEL, E. OBENG-HINNEH, J. RENNER, S. HARTJE, K. MUDERS, B. TRUBERG, A. ROSEN, V. PRIGGE, J. BRUCKMÜLLER, J. LÜBECK, and B. STICH. Chromosome-scale reference genome assembly of a diploid potato clone derived from an elite variety. *G3 Genes|Genomes|Genetics*, 11(12), September 2021. URL <https://doi.org/10.1093/g3journal/jkab330>.
15. A. KROLL, M. K. M. ENGQVIST, D. HECKMANN, and M. J. LERCHER. Deep learning allows genome-scale prediction of Michaelis constants from structural features. *PLOS Biology*, 19(10):e3001,402, October 2021. URL <https://doi.org/10.1371/journal.pbio.3001402>.
16. J. WERNER, R. M. KRONBERG, P. STACHURA, P. N. OSTERMANN, L. MÜLLER, H. SCHAAL, S. BHATIA, J. N. KATHER, A. BORKHARDT, A. A. PANDYRA, K. S. LANG, and P. A. LANG. Deep Transfer Learning Approach for Automatic Recognition of Drug Toxicity and Inhibition of SARS-CoV-2. *Viruses*, 13(4), 2021. ISSN 1999-4915. URL <https://www.mdpi.com/1999-4915/13/4/610>.
17. J. DUNKELAU and L. BALDUS. Ranking Model Checking Backends for Automated Selection via Classification and Regression Learning. In *3rd Workshop on Artificial Intelligence and Formal Verification*, volume 2987 of *CEUR Workshop Proceedings*, pages 83–89. September 2021.
18. A. SHARMA, D. VIDAURRE, J. VESPER, A. SCHNITZLER, and E. FLORIN. Differential dopaminergic modulation of spontaneous cortico–subthalamic activity in Parkinson’s disease. *eLife*, 10, June 2021. URL <https://doi.org/10.7554/elife.66057>.
19. P. JÄGER, S. GEYH, S. TWAROCK, R.-P. CADEDDU, P. RABES, A. KOCH, U. MAUS, T. HESPER, C. ZILKENS, C. RAUTENBERG, F. BORMANN, K. KÖHRER, P. PETZSCH, D. WIECZOREK, B. BETZ, H. SUROWY, B. HILDEBRANDT, U. GERMING, G. KOBBE, R. HAAS, and T. SCHROEDER. Acute myeloid leukemia-induced functional inhibition of healthy CD34 + hematopoietic stem and progenitor cells. *STEM CELLS*, 39(9):1270–1284, May 2021. URL <https://doi.org/10.1002/stem.3387>.
20. U. R. SORG, N. KÜPPER, J. MOCK, A. TERSTEEGEN, P. PETZSCH, K. KÖHRER, T. HEHLGANS, and K. PFEFFER. Lymphotoxin- $\beta$ -receptor (LT $\beta$ R) signaling on hepatocytes is required for liver regeneration after partial hepatectomy. *Biological Chemistry*, 402(9):1147–1154, June 2021. URL <https://doi.org/10.1515/hsz-2021-0152>.
21. A. TERSTEEGEN, U. R. SORG, R. VIRGEN-SLANE, M. HELLE, P. PETZSCH, I. R. DUNAY, K. KÖHRER, D. DEGRANDI, C. F. WARE, and K. PFEFFER. Lymphotoxin  $\beta$  Receptor: a Crucial Role in Innate and Adaptive Immune Responses against *Toxoplasma gondii*. *Infection and Immunity*, 89(6), May 2021. URL <https://doi.org/10.1128/iai.00026-21>.

22. I. YILDIZ, M. MANTZ, M. HARTMANN, T. ZEIER, J. KESSEL, C. THUROW, C. GATZ, P. PETZSCH, K. KÖHRER, and J. ZEIER. The mobile SAR signal N-hydroxy-pipecolic acid induces NPR1-dependent transcriptional reprogramming and immune priming. *Plant Physiology*, 186(3):1679–1705, April 2021. URL <https://doi.org/10.1093/plphys/kiab166>.
23. R. MANN-NÜTTEL, S. ALI, P. PETZSCH, K. KÖHRER, J. ALFERINK, and S. SCHEU. The transcription factor reservoir and chromatin landscape in activated plasmacytoid dendritic cells. April 2021. URL <https://doi.org/10.1101/2021.04.14.439791>.
24. R. WAGENER, J. TAEUBNER, C. WALTER, L. YASIN, D. ALZOUBI, C. BARTENHAGEN, A. ATTARBASCHI, C.-F. CLASSEN, U. KONTNY, J. HAUER, U. FISCHER, M. DUGAS, M. KUHLEN, A. BORKHARDT, and T. BROZOU. Comprehensive germline-genomic and clinical profiling in 160 unselected children and adolescents with cancer. *European Journal of Human Genetics*, 29(8):1301–1311, April 2021. URL <https://doi.org/10.1038/s41431-021-00878-x>.
25. C. VICENTE-DUEÑAS, S. JANSSEN, M. OLDENBURG, F. AUER, I. GONZÁLEZ-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. GARCÍA-CRIADO, M. B. GARCÍA-CENADOR, A. P. M. WEBER, K. KÖHRER, J. HAUER, U. FISCHER, I. SÁNCHEZ-GARCÍA, and A. BORKHARDT. An intact gut microbiome protects genetically predisposed mice against leukemia. *Blood*, 136(18):2003–2017, October 2020. URL <https://doi.org/10.1182/blood.2019004381>.
26. O. O. OLUBIYI, M. OLAGUNJU, M. KEUTMANN, J. LOSCHWITZ, and B. STRODEL. High Throughput Virtual Screening to Discover Inhibitors of the Main Protease of the Coronavirus SARS-CoV-2. *Molecules*, 25(14), 2020. ISSN 1420-3049. URL <https://www.mdpi.com/1420-3049/25/14/3193>.

## B.8 Universität zu Köln

1. J. ATTIG, J. PARK, M. M. SCHERER, S. TREBST, A. ALTLAND, and A. ROSCH. Universal principles of moiré band structures. *2D Mater.*, 8(4):044,007, sep 2021. URL <https://doi.org/10.1088/2F2053-1583%2Fac1cf0>.
2. F. ELEKES and E. J. R. PARTELI. An expression for the angle of repose of dry cohesive granular materials on Earth and in planetary environments. *Proc Natl Acad Sci USA*, 118(38):e2107965,118, sep 2021. URL <https://doi.org/10.1073%2Fpnas.2107965118>.
3. S. SABER and A. A. SABERI. Universal scaling and criticality of extremes in random matrix theory. Sep 2021. URL <http://arxiv.org/abs/2109.02348v1>. arXiv:2109.02348v1 [cond-mat.stat-mech].
4. L. KLETSCH, R. JORDAN, A. S. KÖCHER, S. BUSS, C. A. STRASERT, and A. KLEIN. Photoluminescence of Ni(II), Pd(II), and Pt(II) Complexes [M(Me2dpb)Cl] Obtained from C–H Activation of 1,5-Di(2-pyridyl)-2,4-dimethylbenzene (Me2dpbH). *Molecules*, 26(16):5051, aug 2021. URL <https://doi.org/10.3390%2Fmolecules26165051>.
5. J. SATTLER, A. BRUNKE, and A. HAMPRECHT. Systematic Comparison of Three Commercially Available Combination Disc Tests and the Zinc-Supplemented Carbapenem Inactivation Method (zCIM) for Carbapenemase Detection in Enterobacterales Isolates. *J Clin Microbiol*, 59(9), aug 2021. URL <https://doi.org/10.1128%2Fjcm.03140-20>.
6. A. HOU, B. GOLDFUSS, and J. S. DICKSCHAT. Functional Switch and Ethyl Group Formation in the Bacterial Polytrichastrene Synthase from *Chryseobacterium polytrichastri*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 60(38):20,781–20,785, aug 2021. URL <https://doi.org/10.1002%2Fanie.202109465>.
7. G. RICCI, S. CANOLA, Y. DAI, D. FAZZI, and F. NEGRI. Impact of Fluoroalkylation on the n-Type Charge Transport of Two Naphthodithiophene Diimide Derivatives. *Molecules*, 26(14):4119, jul 2021. URL <https://doi.org/10.3390%2Fmolecules26144119>.
8. N. DEL SER, L. HEINEN, and A. ROSCH. Archimedean screw in driven chiral magnets. *SciPost Phys.*, 11(1), jul 2021. URL <https://doi.org/10.21468%2Fscipostphys.11.1.009>.
9. G. DRISKELL, S. LEDERER, C. BAUER, S. TREBST, and E.-A. KIM. Identification of Non-Fermi Liquid Physics in a Quantum Critical Metal via Quantum Loop Topography. *Phys. Rev. Lett.*, 127(4), jul 2021. URL <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.127.046601>.
10. S. HOFMANN, P. FRITZSCHE, T. DORGE, G. MIEHE, and M. NOTHNAGEL. What Makes a Hot-Spring Habitat “Hot” for the Hot-Spring Snake: Distributional Data and Niche Modelling for the Genus *Thermophis* (Serpentes, Colubridae). *Diversity*, 13(7):325, jul 2021. URL <https://doi.org/10.3390%2Fd13070325>.
11. H. LUEPSEN. ANOVA with binary variables: the F-test and some alternatives. *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, pages 1–25, jun 2021. URL <https://doi.org/10.1080%2F03610918.2020.1869983>.
12. N. GILDEMEISTER, G. RICCI, L. BÖHNER, J. M. NEUDÖRFL, D. HERTEL, F. WÜRTHNER, F. NEGRI, K. MEERHOLZ, and D. FAZZI. Understanding the structural and charge transport property relationships for a variety of merocyanine single-crystals: a bottom up computational investigation. *J. Mater. Chem. C*, 9(33):10,851–10,864, jun 2021. URL <https://doi.org/10.1039%2Fd1tc01511g>.
13. M. NIAZI and A. KLEIN. DFT Investigation of the Molecular Properties of the Dimethylglyoximato Complexes [M(Hdmg)<sub>2</sub>] (M = Ni, Pd, Pt). *Inorganics*, 9(6):47, jun 2021. URL <https://doi.org/10.3390%2Finorganics9060047>.

14. Y. V. VISHNEVSKIY and N. W. MITZEL. Reply to a Comment on “The Nature of Chalcogen-Bonding-Type Tellurium–Nitrogen Interactions”. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 60(24):13,150–13,157, may 2021. URL <https://doi.org/10.1002%2Fanie.202104899>.
15. T. ARNDT, P. K. WAGNER, J. J. KOENIG, and M. BREUGST. Iodine-Catalyzed Diels-Alder Reactions. *Chem-CatChem*, 13(12):2922–2930, may 2021. URL <https://doi.org/10.1002%2Fcctc.202100342>.
16. T. KUTZKER, N. KLEIN, and D. WIED. Flexible Specification Testing in Semi-Parametric Quantile Regression Models. May 2021. URL <http://arxiv.org/abs/2105.09003v2>. arXiv:2105.09003v2 [stat.ME].
17. H. XU, B. GOLDFUSS, and J. S. DICKSCHAT. 1,2- or 1,3-Hydride Shifts: What Controls Guaiane Biosynthesis? *Chem. Eur. J.*, 27(38):9758–9762, may 2021. URL <https://doi.org/10.1002%2Fchem.202101371>.
18. P. VILLAESCUSA, M. SEIDEL, M. NOTHNAGEL, T. PINOTTI, F. GONZÁLEZ-ANDRADE, O. ALVAREZ-GILA, M. M. DE PANCORBO, and L. ROEWER. A Y-chromosomal survey of Ecuador’s multi-ethnic population reveals new insights into the tri-partite population structure and supports an early Holocene age of the rare Native American founder lineage C3-MPB373. *Forensic Science International: Genetics*, 51:102,427, mar 2021. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.fsigen.2020.102427>.
19. M. PECHMANN, N. J. KENNY, L. POTT, P. HEGER, Y.-T. CHEN, T. BUCHTA, O. ÖZÜAK, J. LYNCH, and S. ROTH. Striking parallels between dorsoventral patterning in *Drosophila* and *Gryllus* reveal a complex evolutionary history behind a model gene regulatory network. *eLife*, 10, mar 2021. URL <https://doi.org/10.7554%2Felife.68287>.
20. H. S. P. MÜLLER, A. B. M., J.-C. GUILLEMIN, F. LEWEN, and S. SCHLEMMER. Rotational spectroscopy of isotopic cyclopropanone, c-H<sub>2</sub>C<sub>3</sub>O, and determination of its equilibrium structure. *A&A Astrophysics*, 647:A179, mar 2021. URL <https://doi.org/10.1051%2F0004-6361%2F202040088>.
21. D. ORI, L. VON TERZI, M. KARRER, and S. KNEIFEL. snowScatt 1.0: consistent model of microphysical and scattering properties of rimed and unrimed snowflakes based on the self-similar Rayleigh–Gans approximation. *Geosci. Model Dev.*, 14(3):1511–1531, mar 2021. URL <https://doi.org/10.5194%2Fgmd-14-1511-2021>.
22. P. S. WEISS, D. HARDT, and A. ROSCH. Entropy production for quasiadiabatic parameter changes dominated by hydrodynamics. *Phys. Rev. A*, 103(3), mar 2021. URL <https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.103.033309>.
23. F. RATSCH, J. P. STRACHE, W. SCHLUNDT, J.-M. NEUDÖRFL, A. ADLER, S. AZIZ, B. GOLDFUSS, and H.-G. SCHMALZ. Enantioselective Cleavage of Cyclobutanols Through Ir-Catalyzed C-C Bond Activation: Mechanistic and Synthetic Aspects. *Chem. Eur. J.*, 27(14):4640–4652, feb 2021. URL <https://doi.org/10.1002%2Fchem.202004843>.
24. C. HEYDT, C. B. WÖLWER, O. V. CAMACHO, S. WAGENER-RYCZEK, R. PAPPESCH, J. SIEMANOWSKI, J. REHKER, F. HALLER, A. AGAIMY, K. WORM, T. HEROLD, N. PFARR, W. WEICHERT, T. KIRCHNER, A. JUNG, J. KUMBRINK, W. GOERING, I. ESPOSITO, R. BUETTNER, A. M. HILLMER, and S. MERKELBACH-BRUSE. Detection of gene fusions using targeted next-generation sequencing: a comparative evaluation. *BMC Med Genomics*, 14(1), feb 2021. URL <https://doi.org/10.1186%2Fs12920-021-00909-y>.
25. C. HICKEY, M. GOHLKE, C. BERKE, and S. TREBST. Generic field-driven phenomena in Kitaev spin liquids: Canted magnetism and proximate spin liquid physics. *Phys. Rev. B*, 103(6), feb 2021. URL <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.103.064417>.
26. J. H. J. TAN, S. L. KONG, J. A. TAI, H. M. POH, F. YAO, Y. Y. SIA, E. K. H. LIM, A. M. TAKANO, D. S.-W. TAN, A. JAVED, and A. M. HILLMER. Experimental and bioinformatics considerations in cancer application of single cell genomics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 19:343–354, jan 2021. URL <https://doi.org/10.1016%2Fj.csbj.2020.12.021>.

27. M. PAUL, K. PECKELSEN, T. THOMULKA, J. MARTENS, G. BERDEN, J. OOMENS, J.-M. NEUDÖRFL, M. BREUGST, A. J. H. M. MEIJER, M. SCHÄFER, and A. BERKESSEL. Breslow Intermediates (Amino Enols) and Their Keto Tautomers: First Gas-Phase Characterization by IR Ion Spectroscopy. *Chem. Eur. J.*, 27(8):2662–2669, dec 2020. URL <https://doi.org/10.1002%2Fchem.202003454>.
28. N. DEL SER, L. HEINEN, and A. ROSCH. Archimedean Screw in Driven Chiral Magnets. Dec 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2012.11548v4>. *SciPost Phys.* 11, 009 (2021), [arXiv:2012.11548v4](https://arxiv.org/abs/2012.11548v4) [[cond-mat.mes-hall](#)].
29. D. FAZZI and F. NEGRI. Addressing the Elusive Polaronic Nature of Multiple Redox States in a  $\pi$ -Conjugated Ladder-Type Polymer. *Adv. Electron. Mater.*, 7(1):2000,786, dec 2020. URL <https://doi.org/10.1002%2Faelm.202000786>.
30. C. BERKE, E. VARVELIS, S. TREBST, A. ALTLAND, and D. P. DIVINCENZO. Transmon platform for quantum computing challenged by chaotic fluctuations. Dec 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2012.05923v1>. [arXiv:2012.05923v1](https://arxiv.org/abs/2012.05923v1) [[quant-ph](#)].
31. R. FLÜMANN, T. REHKÄMPER, P. NIEPER, P. PFEIFFER, A. HOLZEM, S. KLEIN, S. BHATIA, M. KOCHANEK, I. KISS, B. W. PELZER, H. AHLERT, J. HAUER, A. DA PALMA GUERREIRO, J. A. RYAN, M. REIMANN, A. RIABINSKA, J. WIEDERSTEIN, M. KRÜGER, M. DECKERT, J. ALTMÜLLER, A. R. KLATT, L. P. FRENZEL, L. PASQUALUCI, W. BÉGUELIN, A. M. MELNICK, S. SANDER, M. MONTESINOS-RONGEN, A. BRUNN, P. LOHNEIS, R. BÜTTNER, H. KASHKAR, A. BORKHARDT, A. LETAI, T. PERSIGHEHL, M. PEIFER, C. A. SCHMITT, H. C. REINHARDT, and G. KNITTEL. An Autochthonous Mouse Model of Myd88- and BCL2-Driven Diffuse Large B-cell Lymphoma Reveals Actionable Molecular Vulnerabilities. *Blood Cancer Discov*, 2(1):70–91, nov 2020. URL <https://doi.org/10.1158%2F2643-3230.bcd-19-0059>.
32. J. MARKERT, G. GASSNER, and S. WALCH. A Sub-Element Adaptive Shock Capturing Approach for Discontinuous Galerkin Methods. Nov 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2011.03338v3>. [arXiv:2011.03338v3](https://arxiv.org/abs/2011.03338v3) [[math.NA](#)].
33. D. KIESE, T. MUELLER, Y. IQBAL, R. THOMALE, and S. TREBST. Multiloop functional renormalization group approach to quantum spin systems. Nov 2020. URL <http://arxiv.org/abs/2011.01269v2>. [arXiv:2011.01269v2](https://arxiv.org/abs/2011.01269v2) [[cond-mat.str-el](#)].
34. F. LANGE and A. ROSCH. Bistabilities and domain walls in weakly open quantum systems. *SciPost Phys.*, 9(4), oct 2020. URL <https://doi.org/10.21468%2Fscipostphys.9.4.057>.
35. J.-H. WEDDELING, Y. V. VISHNEVSKIY, B. NEUMANN, H.-G. STAMMLER, and N. W. MITZEL. Inter- and Intramolecular Aryl–Aryl Interactions in Partially Fluorinated Ethylenedioxy-bridged Bisarenes\*\*. *Chem. Eur. J.*, 26(68):16,111–16,121, oct 2020. URL <https://doi.org/10.1002%2Fchem.202003259>.
36. A. REVELLI, M. M. SALA, G. MONACO, C. HICKEY, P. BECKER, F. FREUND, A. JESCHE, P. GEGENWART, T. ESCHMANN, F. L. BUESSEN, S. TREBST, P. H. M. VAN LOOSDRECHT, J. VAN DEN BRINK, and M. GRÜNINGER. Fingerprints of Kitaev physics in the magnetic excitations of honeycomb iridates. *Phys. Rev. Research*, 2(4), oct 2020. URL <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevresearch.2.043094>.

## B.9 Westfälische Wilhelms-Universität Münster

1. M. ABADEER and S. GORLATCH. Simulating infection transmission: A case study of COVID-19. In *Modelling and Simulation 2020 - The European Simulation and Modelling Conference, ESM 2020*, pages 310–317. 2020.
2. M. ABADEER, S. MAGHARIOUS, and S. GORLATCH. Introducing Interactivity in Disaster Recovery Simulations. *New Trends in Intelligent Software Methodologies, Tools and Techniques*, 337:267–280, 2021. ISSN 09226389, 18798314.
3. L. F. DE ARAUJO PESSOA, B. HELLINGRATH, and F. B. DE LIMA NETO. On the sensitivity analysis of cartesian genetic programming hyper-heuristic. In *Proceedings of the 2020 Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*. ACM, 2020.
4. L. F. DE ARAUJO PESSOA, B. HELLINGRATH, and F. B. DE LIMA NETO. Cartesian Genetic Programming Hyper-Heuristic with Parameter Configuration for Production Lot-Sizing. In *2020 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. IEEE, 2020.
5. J. ATIK, D. DIDDENS, J. H. THIENENKAMP, G. BRUNKLAUS, M. WINTER, and E. PAILLARD. Cation-Assisted Lithium-Ion Transport for High-Performance PEO-based Ternary Solid Polymer Electrolytes. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(21):11,919–11,927, 2021.
6. P. BASTIAN, M. BLATT, A. DEDNER, N.-A. DREIER, C. ENGWER, R. FRITZE, C. GRÄSER, C. GRÜNINGER, D. KEMPF, R. KLÖFKORN, M. OHLBERGER, and O. SANDER. The Dune framework: Basic concepts and recent developments. *Computers & Mathematics with Applications*, 81:75–112, 2021.
7. M. BIEDERMANN, D. DIDDENS, and A. HEUER. rs@md: Introducing Reactive Steps at the Molecular Dynamics Simulation Level. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 17(2):1074–1085, 2021.
8. M. BIEDERMANN, D. DIDDENS, and A. HEUER. Connecting the quantum and classical mechanics simulation world: Applications of reactive step molecular dynamics simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 154(19):194,105, 2021.
9. M. T. BOHL, N. BRANGER, and M. TREDE. Measurement errors in index trader positions data: Is the price pressure hypothesis still invalid? *Applied Economic Perspectives and Policy*, 2021.
10. M. BONIN, L. HAMELEERS, L. HEMBACH, T. RORET, S. CORD-LANDWEHR, G. MICHEL, and B. M. MOERSCHBACHER. In silico and in vitro analysis of an *Aspergillus niger* chitin deacetylase to decipher its subsite sugar preferences. *Journal of Biological Chemistry*, 297(4):101,129, 2021.
11. A. BORISENKO and S. GORLATCH. Efficient GPU-parallelization of batch plants design using metaheuristics with parameter tuning. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 154:74–81, 2021.
12. J. BRUNK, J. STOTTMEISTER, S. WEINZIERL, M. MATZNER, and J. BECKER. Exploring the effect of context information on deep learning business process predictions. *Journal of Decision Systems*, pages 1–16, 2020.
13. J. BRUNK, M. STIERLE, L. PAPKE, K. REVOREDO, M. MATZNER, and J. BECKER. Cause vs. effect in context-sensitive prediction of business process instances. *Information Systems*, 95:101,635, 2021.
14. B. FORTHMANN and M. A. RUNCO. An Empirical Test of the Inter-Relationships between Various Bibliometric Creative Scholarship Indicators. *Publications*, 8(2):34, 2020.
15. G. GARDAM. A counterexample to the unit conjecture for group rings. *Annals of Mathematics*, 194(3):967–979, 2021.
16. P. HENZLER, C. TRAUM, M. HOLTKEMPER, D. NABBEN, M. ERBE, D. REITER, T. KUHN, S. MAHAPATRA, K. BRUNNER, D. SELETSKIY, and A. LEITENSTORFER. Femtosecond Transfer and Manipulation of Persistent Hot-Trion Coherence in a Single CdSe/ZnSe Quantum Dot. *Physical Review Letters*, 126(6):067,402, 2021.

17. M. HOLTKEMPER, G. F. QUINTEIRO, D. E. REITER, and T. KUHN. Selection rules for the excitation of quantum dots by spatially structured light beams: Application to the reconstruction of higher excited exciton wave functions. *Physical Review B*, 102(16):165,315, 2020.
18. M. HOLTKEMPER, G. F. QUINTEIRO, D. E. REITER, and T. KUHN. Dark exciton preparation in a quantum dot by a longitudinal light field tuned to higher exciton states. *Physical Review Research*, 3(1):013,024, 2021.
19. T. KEIL and S. RAVE. An Online Efficient Two-Scale Reduced Basis Approach for the Localized Orthogonal Decomposition. 2021. [arXiv:2111.08643](https://arxiv.org/abs/2111.08643) [math.NA].
20. I. KHOLOD, A. RUKAVITSYN, A. PAZNIKOV, and S. GORLATCH. Parallelization of the self-organized maps algorithm for federated learning on distributed sources. *The Journal of Supercomputing*, 77(6):6197–6213, 2020.
21. J. KOPPE and M. R. HANSEN. Minimizing Lineshape Distortions in Static Ultra-wideline Nuclear Magnetic Resonance of Half-Integer Spin Quadrupolar Nuclei. *The Journal of Physical Chemistry A*, 124(21):4314–4321, 2020.
22. J. KRUKAR, P. MAVROS, and C. HOELSCHER. Towards capturing focal/ambient attention during dynamic wayfinding. In *Symposium on Eye Tracking Research and Applications*. ACM, 2020.
23. V. KUCHER and S. GORLATCH. Implicit Data Layout Optimization for Portable Parallel Programming in C++. In *Lecture Notes in Computer Science*, pages 223–234. Springer International Publishing, 2021.
24. M. G. P. DE LACERDA, L. F. DE ARAUJO PESSOA, F. B. DE LIMA NETO, T. B. LUDERMIR, and H. KUCHEN. A systematic literature review on general parameter control for evolutionary and swarm-based algorithms. *Swarm and Evolutionary Computation*, 60:100,777, 2021.
25. T. LEIBNER, M. MATIS, M. OHLBERGER, and S. RAVE. Distributed model order reduction of a model for microtubule-based cell polarization using HAPOD. 2021. [arXiv:2111.00129](https://arxiv.org/abs/2111.00129) [math.NA].
26. S. LEISTIKOW, A. NAHARDANI, V. HOERR, and L. LINSEN. Interactive Visual Similarity Analysis of Measured and Simulated Multi-field Tubular Flow Ensembles. *Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine*, 2020.
27. F. LENGERS, T. KUHN, and D. E. REITER. Theory of the absorption line shape in monolayers of transition metal dichalcogenides. *Physical Review B*, 101(15):155,304, 2020.
28. L. LIU, H. KLAASEN, M. C. WITTELER, B. S. LAMMERS, A. TIMMER, H. KONG, H. MÖNIG, H.-Y. GAO, J. NEUGEBAUER, H. FUCHS, and A. STUDER. Polymerization of silanes through dehydrogenative Si–Si bond formation on metal surfaces. *Nature Chemistry*, 13(4):350–357, 2021.
29. N. M. LÜPKEN, M. TIMMERKAMP, R. SCHEIBINGER, K. SCHAARSCHMIDT, M. A. SCHMIDT, K.-J. BOLLER, and C. FALLNICH. Numerical and Experimental Demonstration of Intermodal Dispersive Wave Generation. *Laser & Photonics Reviews*, 15(9):2100,125, 2021.
30. C. MAAS, L. MANSKE, K. WÜNNEMANN, and U. HANSEN. On the fate of impact-delivered metal in a terrestrial magma ocean. *Earth and Planetary Science Letters*, 554:116,680, 2021.
31. B. A. DE MELO MENEZES, N. HERRMANN, H. KUCHEN, and F. B. DE LIMA NETO. High-Level Parallel Ant Colony Optimization with Algorithmic Skeletons. *International Journal of Parallel Programming*, 49(6):776–801, 2021.
32. X. MENG, H. KLAASEN, L. VIERGUTZ, B. S. LAMMERS, M. C. WITTELER, H. MÖNIG, S. AMIRJALAYER, L. LIU, J. NEUGEBAUER, H.-Y. GAO, A. STUDER, and H. FUCHS. Azo bond formation on metal surfaces. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(3):1458–1464, 2020.

33. H. MEYER and E. PEBESMA. Predicting into unknown space? Estimating the area of applicability of spatial prediction models. *Methods in Ecology and Evolution*, 12(9):1620–1633, 2021.
34. J. OLTHAUS, P. P. J. SCHRINNER, D. E. REITER, and C. SCHUCK. Optimal Photonic Crystal Cavities for Coupling Nanoemitters to Photonic Integrated Circuits. *Advanced Quantum Technologies*, 3(2):1900,084, 2019.
35. J. M. OTERO-MATO, A. RIVERA-POUSA, H. MONTES-CAMPOS, O. CABEZA, A. HEUER, D. DIDDENS, and L. M. VARELA. Computational study of the structure of ternary ionic liquid/salt/polymer electrolytes based on protic ionic liquids. *Journal of Molecular Liquids*, 333:115,883, 2021.
36. V. PERNER, D. DIDDENS, F. OTTENY, V. KÜPERS, P. BIEKER, B. ESSER, M. WINTER, and M. KOLEK. Insights into the Solubility of Poly(vinylphenothiazine) in Carbonate-Based Battery Electrolytes. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13(10):12,442–12,453, 2021.
37. A. RASCH, R. SCHULZE, and S. GORLATCH. md\_poly: A Performance-Portable Polyhedral Compiler Based on Multi-Dimensional Homomorphisms. In *Contributed to the 10th International Workshop on Polyhedral Compilation Techniques, Bologna, Italy*. 2020.
38. A. RASCH, R. SCHULZE, M. STEUWER, and S. GORLATCH. Efficient Auto-Tuning of Parallel Programs with Interdependent Tuning Parameters via Auto-Tuning Framework (ATF). *ACM Transactions on Architecture and Code Optimization*, 18(1):1–26, 2021.
39. M. TIMMERKAMP, N. M. LUPKEN, R. SCHEIBINGER, K. SCHAARSCHMIDT, M. A. SCHMIDT, K.-J. BOLLER, and C. FALLNICH. Generation of Dispersive Waves via Intermodal Cross-phase Modulation. In *2021 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe & European Quantum Electronics Conference (CLEO/Europe-EQEC)*. IEEE, 2021.
40. M. TIMMERKAMP, N. M. LÜPKEN, R. SCHEIBINGER, K. SCHAARSCHMIDT, M. A. SCHMIDT, K.-J. BOLLER, and C. FALLNICH. Frequency Conversion by Intermodal Dispersive Wave Generation. In *OSA Advanced Photonics Congress 2021*. OSA, 2021.
41. M. TIMMERKAMP, N. M. LÜPKEN, R. SCHEIBINGER, K. SCHAARSCHMIDT, M. A. SCHMIDT, K.-J. BOLLER, and C. FALLNICH. Dispersive Wave Generation via Intermodal Cross-phase Modulation. In *Conference on Lasers and Electro-Optics*. OSA, 2021.
42. J. VOSS and R. WITTKOWSKI. On the shape-dependent propulsion of nano- and microparticles by traveling ultrasound waves. *Nanoscale Advances*, 2(9):3890–3899, 2020.
43. M. TE VRUGT, J. BICKMANN, and R. WITTKOWSKI. Containing a pandemic: nonpharmaceutical interventions and the ‘second wave’. *Journal of Physics Communications*, 5(5):055,008, may 2021.
44. R. WALLAUER, P. MARAUHN, J. REIMANN, S. ZOERB, F. KRAUS, J. GÜDDE, M. ROHLFING, and U. HÖFER. Momentum-resolved observation of ultrafast interlayer charge transfer between the topmost layers of MoS<sub>2</sub>. *Physical Review B*, 102(12):125,417, 2020.
45. A. WETTSTEIN, D. DIDDENS, and A. HEUER. Polymer Electrolytes in Strong External Electric Fields: Modification of Structure and Dynamics. *Macromolecules*, 54(5):2256–2265, 2021.
46. C. WÖLKE, D. DIDDENS, B. HEIDRICH, M. WINTER, and I. CEKIC-LASKOVIC. Understanding the Effectiveness of Phospholane Electrolyte Additives in Lithium-Ion Batteries under High-Voltage Conditions. *ChemElectroChem*, 8(5):972–982, 2021.
47. F. WREDE, C. RIEGER, and H. KUCHEN. Generation of high-performance code based on a domain-specific language for algorithmic skeletons. *The Journal of Supercomputing*, 76(7):5098–5116, 2019.
48. F. WREDE and H. KUCHEN. Towards High-Performance Code Generation for Multi-GPU Clusters Based on a Domain-Specific Language for Algorithmic Skeletons. *International Journal of Parallel Programming*, 48(4):713–728, 2020.

49. G. WÜRTHWEIN, , C. LANVERS-KAMINSKY, C. SIEBEL, J. GERSS, A. MÖRICKE, M. ZIMMERMANN, J. STARY, P. SMISEK, M. SCHRAPPE, C. RIZZARI, M. ZUCCHETTI, G. HEMPEL, S. G. WICHA, and J. BOOS. Population Pharmacokinetics of PEGylated Asparaginase in Children with Acute Lymphoblastic Leukemia: Treatment Phase Dependency and Predictivity in Case of Missing Data. *European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics*, 46(2):289–300, 2021.

## B.10 Universität Paderborn

1. M. ECKHOFF, K. N. LAUSCH, P. E. BLÖCHL, and J. BEHLER. Predicting oxidation and spin states by high-dimensional neural networks: Applications to lithium manganese oxide spinels. *The Journal of Chemical Physics*, 153(16):164,107, Oct 2020. ISSN 1089-7690. URL <http://dx.doi.org/10.1063/5.0021452>.
2. R. BERTLING, M. HACK, I. AUSNER, B. HORSCHITZ, and E. KENIG. CFD-basierte Untersuchung von Zweiphasenströmungen in strukturierten Packungen. 2021.
3. C. WECKER, A. HOPPE, A. SCHULZ, J. HEINE, H.-J. BART, and E. KENIG. Numerische Untersuchungen des Stofftransports in Flüssig-Flüssig-Systemen unter Berücksichtigung der Marangoni-Konvektion. Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Wärme- und Stofftransport, 2020.
4. J. HEINE, C. WECKER, E. KENIG, and H.-J. BART. Stofftransportmessung am ruhenden und bewegten Einzeltropfen. Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Extraktion, 2020.
5. C. WECKER, A. HOPPE, A. SCHULZ, J. HEINE, H.-J. BART, and E. KENIG. Numerische Untersuchungen zu Fluidmechanik und Stofftransport binärer Tropfeninteraktion unter Berücksichtigung von Marangoni-Konvektion. Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Wärme- und Stofftransport, 2021.
6. A. SCHULZ, C. WECKER, and E. KENIG. Mehrkomponenten-Stofftransport an bewegten Phasengrenzflächen unter Berücksichtigung von Diffusionskroseffekten. Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Mehrphasenströmung, 2021.
7. R. BERTLING, M. HACK, I. AUSNER, and E. KENIG. CFD-basierte Untersuchung von Zweiphasenströmungen in strukturierten Packungen. 2020.
8. F. SCHMIDT, A. L. KOZUB, T. BIKTAGIROV, C. EIGNER, C. SILBERHORN, A. SCHINDLMAYR, W. G. SCHMIDT, and U. GERSTMANN. Free and defect-bound (bi)polarons in LiNbO<sub>3</sub>: Atomic structure and spectroscopic signatures from ab initio calculations. *Physical Review Research*, 2(4043002), 2020.
9. A. BOCCHINI, C. EIGNER, C. SILBERHORN, W. SCHMIDT, and U. GERSTMANN. Understanding gray track formation in KTP: Ti<sup>3+</sup> centers studied from first principles. *Physical Review Materials*, 4, 12 2020.
10. M. ROSENTHAL, J. K. N. LINDNER, U. GERSTMANN, A. MEIER, W. G. SCHMIDT, and R. WILHELM. A photoredox catalysed Heck reaction via hole transfer from a Ru(II)-bis(terpyridine) complex to graphene oxide. *Royal Society of Chemistry*, 10(42930–42937), 2020.
11. M. U. ZHAO B. Eight-Dimensional Wave Packet Dynamics Within the Quantum Transition-State Framework: State-to-State Reactive Scattering for H<sub>2</sub> + CH<sub>3</sub> ⇌ H + CH<sub>4</sub>. *Phys Chem A.*, (9400-9412), 2020.
12. T. NICKCHEN, S. HEINDORF, and G. ENGELS. Generating Physically Sound Training Data for Image Recognition of Additively Manufactured Parts. In *Proceedings of the IEEE/CVF Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV)*, pages 1994–2002. January 2021.
13. S. HOMES, M. HEINEN, J. VRABEC, and J. FISCHER. Evaporation driven by conductive heat transport. *Molecular Physics*, 119(15-16):e1836,410, 2021. URL <https://doi.org/10.1080/00268976.2020.1836410>. <https://doi.org/10.1080/00268976.2020.1836410>.
14. R. S. CHATWELL, G. GUEVARA-CARRION, Y. GAPONENKO, V. SHEVTSOVA, and J. VRABEC. Diffusion of the carbon dioxide–ethanol mixture in the extended critical region. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23:3106–3115, 2021. URL <http://dx.doi.org/10.1039/D0CP04985A>.
15. Z. HATÓ, J. VRABEC, and T. KRISTÓF. Molecular simulation study of the curling behavior of the finite free-standing kaolinite layer. *Computational Materials Science*, 186:110,037, 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110037>. Available Open Access publishedVersion at <https://depositonce.tu-berlin.de/handle/11303/12049>.

16. V. BENGIS and E. HÜLLERMEIER. Multi-Armed Bandits with Censored Consumption of Resources. *CoRR*, abs/2011.00813, 2020. URL <https://arxiv.org/abs/2011.00813>. 2011.00813.
17. L. DABELOW, S. BO, and R. EICHHORN. How irreversible are steady-state trajectories of a trapped active particle? *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2021(3):033,216, Mar 2021. ISSN 1742-5468. URL <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/abe6fd>.
18. R. SCHADE, T. KENTER, H. ELGABARTY, M. LASS, O. SCHÜTT, A. LAZZARO, H. PABST, S. MOHR, J. HUTTER, T. D. KÜHNE, and C. PLESSL. Enabling Electronic Structure-Based Ab-Initio Molecular Dynamics Simulations with Hundreds of Millions of Atoms. 2021. [arXiv:2104.08245](https://arxiv.org/abs/2104.08245) [[physics.comp-ph](https://arxiv.org/abs/2104.08245)].
19. S. ALHADDAD, J. FÖRSTNER, S. GROTH, D. GRÜNEWALD, Y. GRYNKO, F. HANNIG, T. KENTER, F.-J. PFREUNDT, C. PLESSL, M. SCHOTTE, and ET AL. *HighPerMeshes – A Domain-Specific Language for Numerical Algorithms on Unstructured Grids*. 2021.
20. M. MEYER, T. KENTER, and C. PLESSL. In-depth FPGA Accelerator Performance Evaluation with Single Node Benchmarks from the HPC Challenge Benchmark Suite for Intel and Xilinx FPGAs using OpenCL. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 2021.
21. M. MEYER. Towards Performance Characterization of FPGAs in Context of HPC using OpenCL Benchmarks. In *Proceedings of the 11th International Symposium on Highly Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies*. 2021.
22. M. RIABININ, P. SHARAPOVA, T. BARTLEY, and T. MEIER. Generating two-mode squeezing with multimode measurement-induced nonlinearity. *Journal of Physics Communications*, 2021.
23. L. M. WITSCHEN, T. WIERSEMA, M. RAEISI NAFCHI, A. BOCKHORN, and M. PLATZNER. Timing Optimization for Virtual FPGA Configurations. In F. HANNIG, S. DERRIEN, P. DINIZ, and D. CHILLET, editors, *Proceedings of International Symposium on Applied Reconfigurable Computing (ARC'21)*, Reconfigurable Computing: Architectures, Tools, and Applications. Springer Lecture Notes in Computer Science.
24. T. T. N. NGUYEN, T. SOLLFRANK, C. TEGENKAMP, E. RAULS, and U. GERSTMANN. Impact of screening and relaxation on weakly coupled two-dimensional heterostructures. *Physical Review B*, 2021.
25. L. CLAES, R. S. CHATWELL, E. BAUMHÖGGER, T. HETKÄMPER, H. ZEIPERT, J. VRABEC, and B. HENNING. Measurement procedure for acoustic absorption and bulk viscosity of liquids. *Measurement*, (109919), 2021.
26. F. SCHMIDT, A. L. KOZUB, U. GERSTMANN, W. G. SCHMIDT, and A. SCHINDLMAYR. Electron polarons in lithium niobate: Charge localization, lattice deformation, and optical response. *Crystals*, 11(5542), 2021.
27. M. D. WEVER, A. TORNEDE, F. MOHR, and E. HÜLLERMEIER. AutoML for Multi-Label Classification: Overview and Empirical Evaluation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, page 1–1, 2021.
28. F. MOHR, M. D. WEVER, A. TORNEDE, and E. HÜLLERMEIER. Predicting Machine Learning Pipeline Runtimes in the Context of Automated Machine Learning. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*.
29. J. M. HANSELLE, A. TORNEDE, M. D. WEVER, and E. HÜLLERMEIER. Algorithm Selection as Superset Learning: Constructing Algorithm Selectors from Imprecise Performance Data. 2021.
30. S. R. TINKLOH, T. WU, T. TRÖSTER, and T. NIENDORF. Development of a submodel technique for FFT-based solvers in micromechanical analysis. 2021.
31. C. WECKER, A. SCHULZ, J. HEINE, H.-J. BART, and E. KENIG. Numerische Untersuchung der Marangonikonvektion in Flüssig-Flüssig-Systemen: Von der Tropfenbildung bis zur Tropfeninteraktion. Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Extraktion, 2021.

32. H. ALDAHAK, C. HOGAN, S. LINDNER, S. APPELFELLER, H. EISELE, W. G. SCHMIDT, M. DÄHNE, U. GERSTMANN, and M. FRANZ. Electronic structure of the  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ -B surface from theory and photoemission spectroscopy. *Physical Review B*, 2021.
33. D. BAUCH, D. F. HEINZE, J. FÖRSTNER, K. D. JÖNS, and S. SCHUMACHER. Ultrafast electric control of cavity mediated single-photon and photon-pair generation with semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 104:085,308, 2021.
34. F. BARKHAUSEN, M. PUKROP, S. SCHUMACHER, and X. MA. Structuring coflowing and counterflowing currents of polariton condensates in concentric ring-shaped and elliptical potentials. *Physical Review B*, 103(7), 2021.
35. I. A. RUIZ ALVARADO, M. KARMO, E. RUNGE, and W. G. SCHMIDT. InP and AlInP(001)( $2 \times 4$ ) Surface Oxidation from Density Functional Theory. *ACS Omega*, page 6297–6304, 2021.
36. H. ROSE, J. PAUL, J. K. WAHLSTRAND, A. D. BRISTOW, and T. MEIER. Theoretical analysis and simulations of two-dimensional Fourier transform spectroscopy performed on exciton-polaritons of a quantum-well microcavity system. In M. BETZ and A. Y. ELEZZABI, editors, *Ultrafast Phenomena and Nanophotonics XXV*. 2021.
37. X. WANG, R. KORMATH MADAM RAGHUPATHY, C. J. QUEREBILLO, Z. LIAO, D. LI, K. LIN, M. HANTUSCH, Z. SOFER, B. LI, E. ZSCHECH, and ET AL. Interfacial Covalent Bonds Regulated Electron-Deficient 2D Black Phosphorus for Electrocatalytic Oxygen Reactions. *Advanced Materials*, 33(20):2008,752, 2021.
38. H. FARHEEN, T. LEUTERITZ, S. LINDEN, V. MYROSHNYCHENKO, and J. FÖRSTNER. Optimization of optical waveguide antennas for directive emission of light. *arXiv:2106.02468*, 2021.
39. T. TORNEDE, A. TORNEDE, M. D. WEVER, and E. HÜLLERMEIER. Coevolution of Remaining Useful Lifetime Estimation Pipelines for Automated Predictive Maintenance. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*. 2021.
40. A. L. KOZUB, A. SCHINDLMAYR, U. GERSTMANN, and W. G. SCHMIDT. Polaronic enhancement of second-harmonic generation in lithium niobate. *Physical Review B*.
41. A. A. CAMBERG, T. TRÖSTER, and C. LATUSKE. Development of a hybrid crash-relevant car body component with load-adapted thickness properties: Design, manufacturing and testing. Springer, 2021.
42. L. CLAES. *Messverfahren für die akustische Absorption in reinen Fluiden zur Bestimmung der Volumenviskosität*. Universität Paderborn, 2021.
43. S. LANGE, D. SCHRÖDER, C. HEDAYAT, H. KUHN, and U. HILLERINGMANN. Development of Methods for Coil-Based Localization by Magnetic Fields of Miniaturized Sensor Platforms in Bioprocesses. In *22nd IEEE International Conference on Industrial Technology (ICIT)*. IEEE, 2021.
44. M. RIABININ, P. SHARAPOVA, and T. MEIER. Bright correlated twin-beam generation and radiation shaping in high-gain parametric down-conversion with anisotropy. *Optics Express*, (21876).
45. K. J. ROHLFING, P. CIMIANO, I. SCHARLAU, T. MATZNER, H. M. BUHL, H. BUSCHMEIER, E. ESPOSITO, A. GRIMMINGER, B. HAMMER, R. HAEB-UMBACH, and ET AL. Explanation as a Social Practice: Toward a Conceptual Framework for the Social Design of AI Systems. *IEEE Transactions on Cognitive and Development Systems*, 13(3):717–728, 2021.
46. S. OBER-BLÖBAUM and S. PEITZ. Explicit multiobjective model predictive control for nonlinear systems with symmetries. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 31(2):380–403, 2021.
47. H. MIRHOSSEINI, R. KORMATH MADAM RAGHUPATHY, S. K. SAHOO, H. WIEBELER, M. CHUGH, and T. D. KÜHNE. In silico investigation of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-based solar cells. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 22:26,682–26,701, 2020. URL <http://dx.doi.org/10.1039/DOCP04712K>.

48. L. KRAUSS-KODYTEK, W.-R. HANNES, T. MEIER, C. RUPPERT, and M. BETZ. Nondegenerate two-photon absorption in ZnSe: Experiment and theory. *Physical Review B*, 2021.
49. M. FRANZ, S. CHANDOLA, M. KOY, R. ZIELINSKI, H. ALDAHAK, M. DAS, M. FREITAG, U. GERSTMANN, D. LIEBIG, A. K. HOFFMANN, and ET AL. Controlled growth of ordered monolayers of N-heterocyclic carbenes on silicon. *Nature Chemistry*, page 828–835, 2021.
50. A. WIDHALM, S. KREHS, D. SIEBERT, N. L. SHARMA, T. LANGER, B. JONAS, D. REUTER, A. THIEDE, J. FÖRSTNER, and A. ZRENNER. Optoelectronic sampling of ultrafast electric transients with single quantum dots. *Applied Physics Letters*, 119:181,109, 2021.
51. C. BOEDEKER, T. NAKATANI, K. KINOSHITA, and R. HAEB-UMBACH. Jointly Optimal Dereverberation and Beamforming. In *ICASSP 2020 - 2020 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. 2020.
52. M. GRABO, C. STAGGENBORG, K. A. PHILIPPI, and E. KENIG. Modeling and Optimization of Rectangular Latent Heat Storage Elements in an Air-Guided Heat Storage System. *Frontiers in Energy Research*, 8(571787), 2020.
53. A. ZIBART and E. KENIG. Numerical investigation of conjugate heat transfer in a pillow-plate heat exchanger. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (120567), 2020.
54. S. HEINDORF, Y. SCHOLTEN, H. WACHSMUTH, A.-C. NGONGA NGOMO, and M. POTTHAST. CauseNet: Towards a Causality Graph Extracted from the Web. In *Proceedings of the 28th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2020)*, page 3023–3030. 2020.
55. M. YU, N. CHANDRASEKHAR, R. KORMATH MADAM RAGHUPATHY, K. H. LY, H. ZHANG, E. DMITRIEVA, C. LIANG, X. LU, T. KÜHNE, S. H. MIRHOSSEINI, and ET AL. A High-Rate Two-Dimensional Polyarylimide Covalent Organic Framework Anode for Aqueous Zn-Ion Energy Storage Devices. *Journal of the American Chemical Society*, 142(46):19,570–19,578, 2020.
56. M. LASS, R. SCHADE, T. KÜHNE, and C. PLESSL. A Submatrix-Based Method for Approximate Matrix Function Evaluation in the Quantum Chemistry Code CP2K. In *Proc. International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)*, page 1127–1140. IEEE Computer Society, 2020.
57. Y. GRYNKO, Y. SHKURATOV, and J. FÖRSTNER. Light backscattering from large clusters of densely packed irregular particles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 255:107,234, 2020.
58. A. A. CAMBERG, T. ERHART, and T. TRÖSTER. Predicting fracture at non-isothermal forming conditions: A temperature dependent extension of the LS-DYNA GISSMO fracture indicator framework. 2020.
59. A. ELIZABETH, H. CONRADI, S. K. SAHOO, T. KODALLE, C. A. KAUFMANN, T. KÜHNE, H. MIRHOSSEINI, D. ABOURAS, and H. MÖNIG. Correlating facet orientation, defect-level density and dipole layer formation at the surface of polycrystalline CuInSe<sub>2</sub> thin films. *Acta Materialia*, 200, 2020.
60. L. MEIER, C. BRAUN, T. HANNAPPEL, and W. G. SCHMIDT. Band Alignment at Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>P/Al<sub>y</sub>In<sub>1-y</sub>P Alloy Interfaces from Hybrid Density Functional Theory Calculations. *physica status solidi (b)*, (2000463), 2020.
61. A. TORNEDE, M. D. WEVER, and E. HÜLLERMEIER. Towards Meta-Algorithm Selection. In *Workshop MetaLearn 2020 @ NeurIPS 2020*. 2020.
62. V. MYROSHNYCHENKO, S. SMIRNOV, P. M. M. JOSE, C. BROSSEAU, and J. FÖRSTNER. Nonlinear dielectric properties of random paraelectric-dielectric composites. *Acta Materialia*, 203:116,432, 2020.
63. L. EBERS, M. HAMMER, and J. FÖRSTNER. Light diffraction in slab waveguide lenses simulated with the stepwise angular spectrum method. *Optics Express*, 28(24):36,361, 2020.

64. T. C. VON NEUMANN, C. BOEDDEKER, L. DRUDE, K. KINOSHITA, M. DELCROIX, T. NAKATANI, R. HAEB-UMBACH, and T. VON NEUANN. Multi-Talker ASR for an Unknown Number of Sources: Joint Training of Source Counting, Separation and ASR. In *Proc. Interspeech 2020*, page 3097–3101. 2020.

## B.11 Universität Siegen

1. P. FROHN-SÖRENSEN, J. REUTER, and B. ENGEL. Influencing the forming zone by altering the contact pressure in a bending process. April 2021. URL <https://doi.org/10.25518/esaform21.1870>.
2. R. KELTER. Bayesian Hodges-Lehmann tests for statistical equivalence in the two-sample setting: Power analysis, type I error rates and equivalence boundary selection in biomedical research. 21(1), August 2021. URL <https://doi.org/10.1186/s12874-021-01341-7>.
3. R. KELTER. Bayesian model selection in the M-open setting — Approximate posterior inference and subsampling for efficient large-scale leave-one-out cross-validation via the difference estimator. 100:102,474, February 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.jmp.2020.102474>.
4. R. KELTER. Type I and II error rates of Bayesian two-sample tests under preliminary assessment of normality in balanced and unbalanced designs and its influence on the reproducibility of medical research. 91(15):3184–3206, May 2021. URL <https://doi.org/10.1080/00949655.2021.1925278>.
5. M. SCHÜSSLER and O. NELLES. Extrapolation Behavior Comparison of Nonlinear State Space Models. *IFAC-PapersOnLine*, 54(7):487–492, 2021. ISSN 2405-8963. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405896321011812>. 19th IFAC Symposium on System Identification SYSID 2021.
6. M. BOCK, A. HÖLZEMANN, M. MOELLER, and K. VAN LAERHOVEN. Improving deep learning for HAR with shallow LSTMs. In *2021 International Symposium on Wearable Computers*. ACM, New York, NY, USA, September 2021.
7. N. SCHNEIDER. Learning dictionaries for inverse problems on the sphere, 2020.
8. N. SCHNEIDER and V. MICHEL. A dictionary learning add-on for spherical downward continuation, 2020. [arXiv:2012.05560](https://arxiv.org/abs/2012.05560) [math.NA].
9. A. GOTE, A. FISCHER, C. ZHANG, and B. EIDEL. Computational homogenization of concrete in the cyber Size-Resolution-Discretization (SRD) parameter space. *Finite Elements in Analysis and Design*, 198:103,653, 2022. ISSN 0168-874X. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168874X21001335>.
10. Z.-P. XU, M. KLEINMANN, and X.-D. YU. State-independent quantum contextuality with projectors of nonunit rank. *New J. Phys.*, February 2021.
11. O. ATKINSON, M. BLACK, A. LENZ, A. RUSOV, and J. WYNNE. Cornering the Two Higgs Doublet Model Type II, 2021. [arXiv:2107.05650](https://arxiv.org/abs/2107.05650) [hep-ph].
12. G. DAS, M. C. KUMAR, and K. SAMANTA. Precision QCD phenomenology of exotic spin-2 search at the LHC. *Journal of High Energy Physics*, 2021(4), Apr 2021. ISSN 1029-8479. URL [http://dx.doi.org/10.1007/JHEP04\(2021\)111](http://dx.doi.org/10.1007/JHEP04(2021)111).
13. J. GEIPING, M. GOLDBLUM, P. E. POPE, M. MOELLER, and T. GOLDSTEIN. Stochastic Training is Not Necessary for Generalization, 2021. [arXiv:2109.14119](https://arxiv.org/abs/2109.14119) [cs.LG].

## B.12 Bergische Universität Wuppertal

1. R. ALVES BATISTA ET AL. CRPropa 3.2: a framework for high-energy astroparticle propagation. *PoS, ICRC2021:978*, 2021. [arXiv:2107.01631](#) [[astro-ph.HE](#)].
2. H. DEMBINSKI ET AL. The Muon Puzzle in air showers and its connection to the LHC. *PoS, ICRC2021:037*, 2021. [arXiv:2105.06148](#) [[astro-ph.HE](#)].
3. A. AAB ET AL. Extraction of the muon signals recorded with the surface detector of the Pierre Auger Observatory using recurrent neural networks. *JINST*, 16(07):P07,016, 2021. [arXiv:2103.11983](#) [[hep-ex](#)].
4. A. AAB ET AL. Measurement of the Fluctuations in the Number of Muons in Extensive Air Showers with the Pierre Auger Observatory. *Phys. Rev. Lett.*, 126(15):152,002, 2021. [arXiv:2102.07797](#) [[hep-ex](#)].
5. A. AAB ET AL. Deep-learning based reconstruction of the shower maximum  $X_{max}$  using the water-Cherenkov detectors of the Pierre Auger Observatory. *JINST*, 16(07):P07,019, 2021. [arXiv:2101.02946](#) [[astro-ph.IM](#)].
6. P. ABREU ET AL. Monte Carlo simulations for the Pierre Auger Observatory using the VO auger grid resources. *PoS, ICRC2021:232*, 2021.
7. P. ABREU ET AL. Search for upward-going showers with the Fluorescence Detector of the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2021:1140*, 2021.
8. P. ABREU ET AL. Expected performance of the AugerPrime Radio Detector. *PoS, ICRC2021:262*, 2021.
9. A. A. A. ALVES ET AL. Hadron cascades in CORSIKA 8. *PoS, ICRC2021:474*, 2021.
10. M. REININGHAUS ET AL. GPU Accelerated optical light propagation in CORSIKA 8. *PoS, ICRC2021:705*, 2021.
11. M. SCHIMP ET AL. Combined Search for UHE Neutrinos from Binary Black Hole Mergers with the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2021:968*, 2021.
12. A. A. ALVES JUNIOR ET AL. Status of the novel CORSIKA 8 air shower simulation framework. *PoS, ICRC2021:284*, 2021.
13. I. A. CARACAS ET AL. A tau scenario application to a search for upward-going showers with the Fluorescence Detector of the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2021:1145*, 2021.
14. J.-M. ALAMEDDINE ET AL. Electromagnetic Shower Simulation for CORSIKA 8. *PoS, ICRC2021:428*, 2021.
15. A. AAB ET AL. A Search for Ultra-high-energy Neutrinos from TXS 0506+056 Using the Pierre Auger Observatory. *Astrophys. J.*, 902(2):105, 2020. [arXiv:2010.10953](#) [[astro-ph.HE](#)].
16. L. A. ANCHORDOQUI ET AL. Hunting super-heavy dark matter with ultra-high energy photons. *Astropart. Phys.*, 132:102,614, 2021. [arXiv:2105.12895](#) [[hep-ph](#)].
17. M. GOTTOWIK, F. SCHLÜTER, T. HUEGE, and J. RAUTENBERG. CoREAS simulations of inclined air showers predict refractive displacement of the radio-emission footprint. *PoS, ICRC2021:277*, 2021.
18. J. RAUTENBERG. Limits on ultra-high energy photons with the Pierre Auger Observatory. *PoS, ICRC2019:398*, 2021.
19. F. SCHLÜTER, M. GOTTOWIK, T. HUEGE, and J. RAUTENBERG. Refractive displacement of the radio-emission footprint of inclined air showers simulated with CoREAS. *Eur. Phys. J. C*, 80(7):643, 2020. [arXiv:2005.06775](#) [[astro-ph.IM](#)].

20. Towards a Common  $t\bar{t}$  Monte-Carlo Sample for ATLAS and CMS. Technical report, CERN, Geneva, Jun 2021. URL <http://cds.cern.ch/record/2771088>. All figures including auxiliary figures are available at <https://atlas.web.cern.ch/Atlas/GROUPS/PHYSICS/PUBNOTES/ATL-PHYS-PUB-2021-016>.
21. 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>.
22. A. ZARGARAN and U. JANOSKE. Development of an algorithm for reconstruction of droplet history based on deposition pattern using computational fluid dynamics and convolutional neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 372:113,442, December 2020. URL <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113442>.
23. K. BRASCHKE, J. ZOLLER, A. ZARGARAN, A. DITTLER, and U. JANOSKE. Analytical and numerical calculation of the detachment of particle structures from fibers. *Aerosol Science and Technology*, pages 1–11, September 2021. URL <https://doi.org/10.1080/02786826.2021.1972085>.
24. V. KRÄMER, B. BARWARI, S. BURGMANN, M. ROHDE, S. RENTSCHLER, C. HOLZKNECHT, C. GMELIN, and U. JANOSKE. Numerical analysis of an adhering droplet applying an adapted feedback deceleration technique. *International Journal of Multiphase Flow*, 145:103,808, December 2021. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103808>.
25. H. GESELL, R. GUTT, N. JANSSEN, and U. JANOSKE. Modeling of the Aluminium Electrolysis Process: Feeding and Dissolution of Alumina Particles. presented at NAFEMS World Congress 2022, Oct. 25.-28. 2021.
26. N. JANSSEN, H. GESELL, R. GUTT, and U. JANOSKE. Adaption of the Aluminium Electrolysis to Volatile Power Supply: Development of a Predictive Model to Investigate the Thermal Behavior of a Cell. presented at NAFEMS World Congress 2022, Oct. 25.-29. 2021.
27. N. HAUSSMANN, M. ZANG, R. MEASE, B. SCHMUELLING, M. CLEMENS, and M. BOLTEN. Towards Real-Time Magnetic Dosimetry Simulations for Inductive Charging Systems. *COMPEL, Vol. ahead-of-print, No. ahead-of-print, October 2021*, 9 2020. Presented at: 17th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering (IGTE 2020), Graz, Austria, 20.-23.09.2020. On page digest. Book of Abstracts.
28. N. HAUSSMANN, M. ZANG, M. CLEMENS, and S. B. Bestimmung der Exposition des menschlichen Körpers durch niederfrequente Magnetfelder in der Umgebung induktiv geladener Elektrotaxis – ein Überblick am Beispiel des TALAKO-Projekts. Abstract at URSI e.V. Deutschland 2020 Kleinheubacher Tagung (KHB 2021), Sept. 28.-30. 2021.
29. N. HAUSSMANN, M. ZANG, S. STROKA, R. MEASE, B. SCHMUELLING, and M. CLEMENS. Efficient Assessment of the Human Exposure to Low-Frequency Magnetic Fields Based on Free Space Field Measurements. *23rd International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (COMPUMAG 2021), Cancun, Mexico, Online Conference, 16.-21.01.2022. Two-page digest submitted., 2021.*
30. M. ZANG, N. HAUSSMANN, S. STROKA, R. MEASE, M. CLEMENS, A. BURKERT, A. POPP, and B. SCHMUELLING. Personenschutz bei induktivem Laden von Fahrzeugbatterien – Ansätze zur praktikablen Echtzeitbestimmung der magneto-quasistatischen Körperexposition. *Wissenschaftsforum Mobilität, Duisburg, 17.06.2021. Full paper submitted, 2021., 6 2021.*
31. B. KÄHNE and M. CLEMENS. Semi-Explicit Time Integration of a Reduced Magnetic Vector Potential Magneto-Quasistatic Field Formulation. *The 12th International Symposium on Electric and Magnetic Fields (EMF 2021), Online Conference, 06.-08.07.2021. Abstract accepted., 2021.*
32. M. ZANG, N. HAUSSMANN, R. MEASE, M. CLEMENS, and B. SCHMUELLING. Magnetic Field Exposure Simulations of Human Bodies close by a Wireless Power Transfer System of an Electrically Powered Taxi.

- The 12th International Symposium on Electric and Magnetic Fields (EMF 2021), Online Conference, 06.-08.07.2021. Abstract accepted., 2021.*
33. N. HAUSSMANN, M. ZANG, R. MEASE, M. CLEMENS, and B. SCHMUELLING. Magnetic Dosimetry Simulations of Wireless Power Transfer Systems with High Resolution Voxel Models Utilizing the Co-Simulation Scalar Potential Finite Difference Scheme. *The 12th International Symposium on Electric and Magnetic Fields (EMF 2021), Online Conference, 06.-08.07.2021. Abstract accepted., 2021.*
  34. M. TIEMANN, M. CLEMENS, and B. SCHMUELLING. Comparison of Conventional and Magnetizable Concrete Core Designs in Wireless Power Transfer for Electric Vehicles. In *2020 IEEE PELS Workshop on Emerging Technologies: Wireless Power Transfer (WoW)*. IEEE, November 2020. URL <https://doi.org/10.1109/wow47795.2020.9291283>.
  35. 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, accepted, 9 2020.*
  36. 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. Book of Abstracts, 9 2020. Full paper submitted, preprint on arXiv:submit/3453993 [cs.CE] 5 Nov 2020.*