

KONWIHR Gäste

9.7.2001 **Dr. Li-Shi Luo**, (NASA ICA-SE, Langley, USA): Einen kurzen Aufenthalt verbrachte Dr. Li-Shi Luo am LSTM-Erlangen, um über neuere Erkenntnisse und Ergebnisse auf dem Gebiet der Lattice-Boltzmann-Verfahren vorzutragen.

Prof. Dr. G. Biswas, (University Kanpur, India) ist sein 14.12.2001 als Gastdozent an der Universität Erlangen-Nürnberg und der TU-München, um auf dem Gebiet der Turbulenzsimulation in Forschung und Lehre zu arbeiten. Der Aufenthalt wird gemeinsam von DAAD und KONWIHR finanziert.

Bitte notieren:

Neue Anträge und Verlängerungsanträge für KONWIHR Projekte können bis **1.3.2002** bei einer der Geschäftsstellen eingereicht werden.

Die nächste **Sitzung des KONWIHR-Beirates** findet am **19.4.2002 in Erlangen** statt. Bei dieser Gelegenheit findet die Begutachtung der abgelaufenen Projekte sowie der Neu- und Verlängerungsanträge statt. Nähere Informationen werden schriftlich versandt.

Vom 25. bis 28. März 2002 findet in KONWIHR-Landen, genauer an der Universität Augsburg, die Jahrestagung 2002 der **Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)** statt. Nähere Informationen gibt's unter gamm2002.uni-augsburg.de.

Übrigens...

Zitat des Quartals: „**Once you step in, you realize that the water is deeper than expected.**“ (Li-Shi Luo anlässlich seines Aufenthaltes in Erlangen über die „Vorzüge“ der Lattice-Boltzmann Verfahren).

Impressum

KONWIHR Quartl*

– das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für technisch-wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen (KONWIHR) – erscheint jeweils zum Quartalende.

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Sprecher, Prof. Dr. Dr. h.c. F. Durst, stellv. Sprecher des KONWIHR

Redaktion:

Dr. G. Brenner, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Cauerstraße 4, D-91058 Erlangen,

Tel./Fax: ++49-9131-85 23005 / 23002

e-mail: brenner@lstm.uni-erlangen.de

Dipl.-Inf. A. Schmidt, Institut für Informatik, TU München, D-80290 München, Tel./Fax: ++49-89-289 22018 / 22022

e-mail: konwihr@in.tum.de

WWW: konwihr.in.tum.de

Druck:

Druckhaus Mayer Erlangen

Inh. M. Haspel

Redaktionsschluss

für die nächste Ausgabe: **15.3.2002**

Nächste Ausgabe des Quartls: **1.4.2002**

* Quartel:

früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

KONWIHR Quartl

(31. Ausgabe) 3/2001

Editorial

Von Verbrechern weiß der oft zitierte Volksmund, dass sie immer wieder an den Ort ihrer Untaten zurückzukommen pflegen. Ähnliches scheint für den Editorial-Schreiberling des Quartls zu gelten – insbesondere, wenn aus der Ex-Heimat sanfter Druck ausgeübt wird. Da trifft es sich gut, dass sich das Ländle in puncto Sottisen-Quell als Bayern durchaus ebenbürtig erweist. Diesmal ist die wohlwollende Aufmerksamkeit des Editorials der Deutschen Telekom gewidmet. Wen das im KONWIHR-Organ verblüfft, der sehe in der TOP 500-Liste der weltweit leistungsstärksten Rechner nach und vergewissere sich anhand der aktuellen Ausgabe, dass wir uns sehr wohl in HPSC-Gefilden bewegen^a.

In unseren modernen Zeiten bringt ein Umzug neben allerlei anderem Vergnüglichem auch den Gang zur Telekom mit sich. Zweck meines Besuchs am 22.9.2001 in Böblingen: ein Antrag auf Freischaltung eines bereits vorhandenen Festnetz-Telefonanschlusses. Was mit einem freundlich geflöteten und ur-schwäbischen „Hallöchen“ beginnt, endet nach neun durchaus konstruktiven Minuten mit „*So mit etwa acht Arbeitstagen müssen Sie aber rechnen*“. Am 4.10. trifft dann ein Brief ein, betreffend „*Ihren Antrag vom 28.(!) 9. 2001*“.



^aauf Platz 194 (die Red.)

Darin wird der Besuch eines Telekom-Monteurs „am 17. 10. ab 12 Uhr“ avisiert (also so grob acht Arbeitstage nach Antragstellung). Nur wenn der Termin ganz und gar unmöglich sei, solle man sich melden. Komisch – der Anschluss ist doch schon da? Ein 19-minütiger Anruf bei der Service-Hotline bringt die niederschmetternde Erkenntnis, dass der Vormieter kein Telefon hatte und der freizuschaltende Anschluss somit nicht zu identifizieren ist – ein klarer Fall für den Monteur! Also rasch die Nachbarin um Wahrung der aufoktroierten Präsenzpflicht gebeten (so leicht könnte man sich nicht mal als „DiMiDo“ an einem Mittwoch „ab 12 Uhr“ wegstehlen) und hinreichend Zettel an die Tür geklebt. Dann der 17. 10., ein durchaus ereignisreicher Tag. Ein Ereignis allerdings trat nicht ein – der Besuch des Telekom-Monteurs.

Wie hieß es doch in dem Schreiben: „Um Ihren Auftrag pünktlich ausführen zu können, bitten wir Sie, diesen vereinbarten Termin unbedingt einzuhalten. Dafür schon jetzt herzlichen Dank. – Bitte sehr! Also die Nachbarin dreimal um Entschuldigung gebeten und wieder zum Hörer gegriffen; am 22. 10. endlich gelingt die Kontaktaufnahme zur Service-Hotline. Auf meine kurz zusammengefasste Leidensgeschichte folgt zunächst ein „Ja, der Vorgang ist noch offen – komisch“, dann ein „Moment, ich versuche das schnell für Sie zu klären, bleiben Sie bitte dran“ und schließlich – nach einigem Geknackse – das Freizeichen. Na gut, zweiter Anlauf. Scheint wenig los zu sein heute, ich komme auf Anhieb durch. Leidensgeschichte die 2.; dummerweise hatte ich den Namen meiner ersten Gesprächspartnerin nicht verstanden, er war eben-

so rasend schnell abgespult worden wie der des jetzigen Hotliners. Raten Sie mal, was folgt – richtig! Erstens ein „Ja, der Vorgang ist noch offen – merkwürdig“, zweitens ein „Moment, ich versuche das schnell für Sie zu klären, bleiben Sie bitte dran“ und drittens Geknackse sowie Freizeichen.

Aber man weiß ja, dass aller guten Dinge drei sind. Diesmal eine neue Strategie: Vor meiner Leidensgeschichte bitte ich meine jetzige Rettung in spe, mich diesmal nicht aus der Leitung zu werfen. Obwohl ich ihre Frage nach den Namen meiner bisherigen Gesprächspartner wieder nicht beantworten kann, schlägt Frau Kurkewitz (man lernt ja dazu!) vor, mich nach Klärung des Falles zurückzurufen. Als naiver Mensch glaube ich ihr – eine Woche lang passiert nichts. Dann versucht Ende Oktober eine um drei Ecken Bekannte, bei der Telekom tätig, ihr Glück. Auch sie hat Probleme mit der Identifikation des Anschlusses und bittet um weitere Namen von Vormietern.

Der Dame kann geholfen werden. Unter Zuhilfenahme eines dicken Ordners organisiert meine Vermieterin zwei weitere Namen – „Die haben beide einen Telefonanschluss gehabt, das weiß ich bestimmt“. Nur weiß dummerweise der Telekom-Computer (Nr. soundso in der Welt-rangliste) absolut nichts davon. Dafür weiß meine hilfsbereite Bekannte am 14. 11., dass mein Auftrag seitens der Telekom zwischenzeitlich storniert worden ist – „Kunde hat auf Schreiben trotz Aufforderung nicht reagiert“, so lautet der Eintrag. Womit alles wieder von vorne beginnen würde, inklusive der 8-Arbeitstage-Regel. „Wir begrüßen Sie

sierungsschemata im Detail beschrieben. Ergänzend zur Erläuterung der Grundgleichungen der Strömungsmechanik wird die Modellierung und numerische Implementierung typischer Phänomene wie Turbulenz oder Wärme- und Stoffübertragung dargestellt. Neu aufgenommen wurden zusätzlich zwei Vorlesungen über gekoppelte Probleme (Fluid-Struktur-Wechselwirkung und Aeroakustik).

Der Kurzlehrgang wendet sich an all diejenigen, die selbst Rechenprogramme für Strömungssimulationen entwickeln oder aber kommerzielle Softwarepakete anwenden. Programmentwickler finden durch die detaillierte Behandlung aller Einzelschritte, die zur Programmerstellung notwendig sind, wertvolle Hilfestellung. Anwender haben die Gelegenheit, die wesentlichen Bestandteile eines kompletten Berechnungsverfahrens und dessen Funktionsweise kennenzulernen; dies ist sowohl für die Anwendung als auch für die kritische Interpretation der Ergebnisse von Softwarepaketen unverzichtbar. Besonders nützlich und reizvoll für alle Teilnehmer sollte nicht zuletzt die Möglichkeit sein, durch Diskussionen mit den Vortragenden Informationen über die neuesten Entwicklungen auf dem Gebiet der Numerischen Strömungsmechanik aus erster Hand zu bekommen. Weitere Infos und Anmeldeformulare finden Sie auf der unten angegebenen WEB-Page.

Termin 18.–21. März 2002
 Ort LSTM Erlangen
 Anmeldung ab sofort
 (bis 1.2.2002 Preisnachlaß)
 Leitung Dr.–Ing. M. Breuer
 Dipl.–Ing. D. Stojkovic
 email: numet2002@lstm.uni-erlangen.de
 URL: www.lstm.uni-erlangen.de/numet2002

... und noch'n Lehrgang:
**Numerische Methoden zur
 Lösung von
 Ingenieurproblemen in der
 Strömungs- und
 Strukturmechanik**

Unterstützt durch KONWIHR und den DAAD findet an der Technischen Universität München von 18.-21. Februar 2002 ein Workshop statt, der zum Ziel hat, das Basiswissen zu verstärken, um numerische Verfahren in der Strömungs- und Strukturmechanik zu verstehen und anzuwenden. Dieser Lehrgang wendet sich vornehmlich an Studenten und Graduierte, die selbst numerische Verfahren entwickeln oder als kommerzielle Programme nutzen. Programmentwickler finden durch die detaillierte Darstellung der wesentlichen Elemente eines Simulationsverfahrens wertvolle Hilfestellungen. Anwender erhalten Gelegenheit, die wesentlichen Bestandteile eines Berechnungsverfahrens und dessen Funktionsweise kennen zu lernen. Neben Vorlesungen wird der Lehrgang durch Demonstrationen und Vorstellungen von kommerziellen Programmpaketen ergänzt. Weitere Infos finden sich im WWW.

Termin: 18.-21.2.2002
 Ort: TU-München
 Anmeldung: ab sofort
 Leitung: Dr. M. Emans
 email: emans@in.tum.de
 URL: www.zenger.in.tum.de/info/kurzl

Ankündigung: Kurzlehrgang NUMET 2002 18.–21. März 2002

falls eine Forschergruppe etabliert, deren Arbeiten vor allem die Hochleistungsrechneraspekte berücksichtigen soll.

Um innerhalb der DFG-Forschergruppe und in KONWIHR das bestehende Wissen auf dem Gebiet der Lattice Boltzmann-Automaten einfließen zu lassen, wurde in der Zeit vom 26. bis 28. März 2001 ein internationaler Workshop an der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg durchgeführt. Durch einführende Vorlesungen wurde die Theorie der numerischen Berechnungen auf Basis der Lattice-Boltzmann Gleichung präsentiert, so dass auch unerfahrene Interessenten von dem Programm profitierten. Die von international anerkannten Experten präsentierten Beiträge zum Stand der Entwicklungen von Lattice Boltzmann-Methoden für numerische Strömungsberechnungen, erlaubten den methodisch orientierten Teilnehmern, eigene Fachkenntnisse zu vertiefen und Anregungen für weitere Arbeiten zu erhalten.

Mit 83 Teilnehmern war der Workshop überaus gut besucht. Aus dem Ausland kamen insgesamt 16 Teilnehmer. Eine Statistik der Teilnehmer des Workshops zeigt auf, dass Lattice-Boltzmann Methoden nicht nur an Hochschulen an Interesse gewonnen haben bzw. weiterhin gewinnen, sondern dass auch die Industrie daran interessiert ist, diese Verfahren für numerische Strömungsberechnungen einzusetzen. Die Teilnehmer aus der Industrie kamen vorrangig aus den Bereichen Automobilbau und Chemie bzw. Anlagenbau.

G. Brenner, LSTM-Erlangen

Nach dem großen Erfolg in den Jahren 1998 und 2000 wird der Kurzlehrgang NUMET auch 2002 wieder in Erlangen stattfinden. Der Lehrstuhl für Strömungsmechanik an der Universität Erlangen-Nürnberg, führt diesen Kurs nun bereits zum neunten Mal durch. Auch für NUMET 2002 konnten international anerkannte Experten auf dem Gebiet der Numerischen Strömungsmechanik für die Vorlesungen gewonnen werden. Die Vortragenden besitzen Erfahrung sowohl in der Grundlagenforschung zur Entwicklung von Berechnungsverfahren als auch in der Erstellung und Anwendung von Software für die industrielle Praxis. Zwei der Vortragenden sind Leiter der Entwicklungsabteilungen führender CFD-Software-Anbieter.

Der Kurzlehrgang gibt eine Einführung in die numerische Lösung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen. In 22 einstündigen Einzelvorlesungen und zusätzlichen Computerdemonstrationen werden die Grundlagen der Finite-Volumen-, der Finite-Differenzen-, der Finite-Elemente- und der Lattice-Boltzmann-Berechnungsverfahren vermittelt und verschiedene Anwendungsmöglichkeiten vorgestellt. In den Vorträgen werden alle Schritte von der Diskretisierung über den Einbau der Randbedingungen bis zur gekoppelten Lösung der Erhaltungsgleichungen behandelt. Neben den zugrundeliegenden Ideen werden die gebräuchlichen Approximationsmethoden und Diskreti-

herzlich als Kunden und freuen uns auf eine langjährige, erfolgreiche Geschäftsbeziehung“, so hatte es im Brief der Telekom vom 1. 10. geheißen. Oh Ron, lass Sommer werden! Ich verzichte auf derartige Beziehungen und beschließe, in meinem Böblinger Interimsquartier bis April 2002 ohne Festnetzanschluss auszukommen – bestimmt zur Freude von T-Mobil! Übrigens, damit keine Missverständnisse entstehen: Einen treueren Telekom-Fan als mich kann ich mir kaum vorstellen. Kleinaktionär der ersten Stunde, noch immer im Besitz der Papiere und trotz aller Erlebnisse nicht an ein Überlaufen zur Konkurrenz denkend – in Stunden der Not ist eben uneingeschränkte Solidarität gefragt! Auch oder gerade, wenn’s verdammt schwer fällt.

Hans-Joachim Bungartz

Numerische Simulationen von Wellenausbreitung in seismisch aktiven Zonen

Die Erforschung von Erdbeben profitiert von der steigenden Dichte und Qualität globaler Datensätze und der Möglichkeit, realistische Erdbebenszenarien numerisch zu simulieren. Letzterer Ansatz, die Vorwärtsmodellierung, kann helfen, die verschiedenen Teilbereiche der seismischen Wellenausbreitung getrennt zu betrachten und zu analysieren sowie wertvolle Information für seismische Gefährdungsabschätzung zu gewinnen. Da deterministische Erdbebenvorhersage nach momentaner Kenntnislage nicht möglich ist, hat sich der Schwerpunkt zunehmend auf die

Betrachtung von möglichen Erbebenszenarien und die Abschätzung der davon zu erwartenden Bodenbewegung und des resultierenden Schadens verlagert. Aus den Aufzeichnungen von früheren Erdbeben lassen sich die Parameter und die Untergrundstrukturen der zu untersuchenden Region ableiten. Durch Simulationen vieler verschiedener Beben können besonders gefährdete Gebiete bestimmt werden. Ziel unseres Projektes ist es, eine Methode zur Modellierung realistischer Erdbebenszenarien zu entwickeln und anzuwenden.

Die elastische Wellengleichung wird mit einem Finite-Differenzen-Schema höherer Ordnung auf einem versetzten Gitter gelöst. Das entwickelte FORTRAN-Programm wurde mit Hilfe von 'Message Passing (MPI)' parallelisiert und für die Verwendung auf der Hitachi SR8000 am LRZ München optimiert. Die verwendeten Algorithmen wurden durch den Vergleich mit analytischen Lösungen für verschiedene einfache Modelle verifiziert. Da für grössere Entfernungen die Erdkrümmung berücksichtigt werden muss, lösen wir die Gleichungen in Kugelkoordinaten. Dabei erfordert der Erdbebenherd besondere Beachtung. Die Versetzung setzt abrupt ein, wenn sich der Bruch aufgrund von Reibungsinstabilitäten dynamisch über der Scherfläche ausbreitet. Diese Bruchausbreitung wird gesteuert durch das komplexe Zusammenspiel von Spannungsverteilung, Reibungsgesetzen, Inhomogenitäten und kann zu signifikanter Fokussierung von Energie auf bestimmte Standorte an der Erdoberfläche führen.

Modelldimension (θ, φ, r)	12°, 22°, 808 km
Modellgrösse (θ, φ, r)	721 x 1221 x 401
Zeitschritte	4200
Länge der Seismogramme	340 s
Arbeitsspeicher	70 GByte
Knoten (Hitachi SR8000)	13
Rechenzeit	10.5 h
Min. dominante Periode der Wellen	4 s
Min. dominante Wellenlänge	10 km

Tab. 1: Simulationsparameter eines Subduktionszonenmodells.

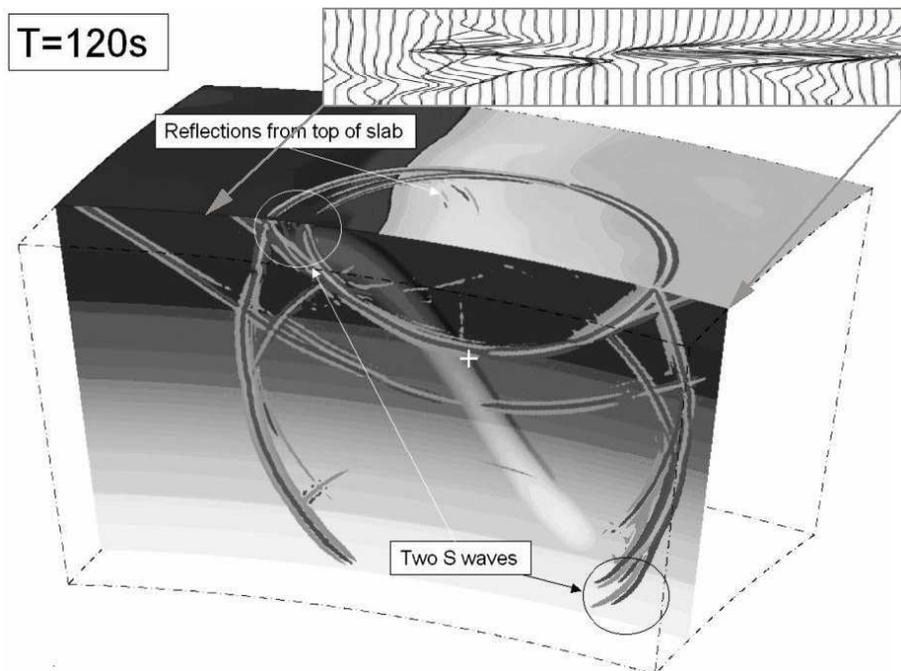


Abb. 1: Rotationsanteil seismischer Geschwindigkeit orthogonal zur jeweiligen Fläche für eine dominante Periode von 7s. Das Hintergrundmodell zeigt seismische Geschwindigkeiten, die abtauchende Platte ist oberhalb durch eine Niedriggeschwindigkeitsschicht begrenzt. Die Beschriftung bezieht sich auf Unterschiede zu dem Modell ohne diese dünne Schicht, S steht für Scher-/Transversalwellen. Oben: Seismogramme vertikaler Bodengeschwindigkeiten der Scherwelle (dominante Periode: 6s) entlang des durch graue Pfeile indizierten Bereiches.

Wendet man die Methode der Finiten Differenzen an, so kann man die Bruchausbreitung und die dadurch verursachte Abstrahlung von seismischen Wellen dreidimensional simulieren und die Wechselwirkungen zwischen dem Bruchprozess und dem abgestrahlten Wellenfeld studieren.

stellte. Sowohl Hitachi als auch Siemens-Fujitsu hatten bedauerlicherweise ihre Teilnahme abgesagt.

Schließlich waren auch noch Besuche bei den Herstellern von Tools und Compilern angesagt, da wir ja wissen wollten, ab wann wir jetzt endlich auch das letzte Tröpfchen an Performance aus unseren neuen Pentium 4 Prozessoren herausquetschen können.

Für das LRZ war die SuperComputing 2001 ein schöner Erfolg; schon wegen des Nichterscheinens der Firma Hitachi war der eigene Messestand sehr notwendig, um zu zeigen, dass das Hochleistungsrechnen auch in Europa weiterhin intensiv vorangetrieben wird. Und das nicht nur als Nische für Spezialisten, sondern eben auch mit längerfristigem Blick auf die Einbettung in eine Grid-Infrastruktur.

R. Bader, LRZ-München

DFG and KONWIHR-Workshop - Lattice Boltzmann Methods - Theory and Applications in Fluid Mechanics

Überaus gut besucht war der Workshop über Theorie und Anwendungen der Lattice Boltzmann Methode in der Strömungsmechanik, der zwischen dem 26. und 28. März 2001 in Erlangen abgehalten wurde. Zahlreiche Teilnehmer aus dem In- und Ausland, aus Hochschulen und Industrie nutzen die Gelegenheit, sich über den

neuesten Stand der Möglichkeiten von Lattice-Boltzmann Methoden in der Strömungsmechanik zu informieren und um Kontakte zu hiesigen Forschergruppen zu knüpfen.

Entwicklungen in der Numerischen Strömungsmechanik haben sich in der Vergangenheit verstärkt auf Berechnungsverfahren konzentriert, die auf einer Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichungen mit finiten Volumen und finiten Elementen basieren. Diese Methoden sind heute, nicht zuletzt durch die steten Entwicklungen im Rahmen von FORTWIHR, auf einem sehr hohen Niveau und werden in verschiedenen industriellen und grundlagenorientierten Anwendungen eingesetzt.

Trotz dieser Erfolge gibt es Strömungsprobleme, in denen der Einsatz von numerischen Berechnungsverfahren auf der Basis finiter Volumen, finiter Element- oder Spektralverfahren, Nachteile mit sich bringen. Eines dieser Gebiete ist beispielsweise die Durchströmung von extrem komplexen Geometrien, wie etwa Strömungen durch poröse Medien. In solchen Anwendungen haben sich Lattice Boltzmann-Verfahren als vorteilhaft erwiesen, die in den letzten Jahren verstärkt entwickelt und für numerische Strömungsberechnungen zur Anwendung gebracht wurden. Um Entwicklungen in Deutschland zu verstärken, wurde seitens der Deutschen Forschungsgemeinschaft eine überregionale Forschergruppe eingerichtet, in der sechs Forschergruppen zusammenarbeiten, um die Entwicklung und Anwendung von Lattice Boltzmann-Verfahren für numerische Strömungsberechnungen voranzutreiben. Innerhalb des KONWIHR wurde gleich-



A. Schmidt (l.) und R. Bader (r.) am nahezu fertig aufgebauten LRZ-Stand



Noch mehr Supercomputing Impressionen



reift jetzt zusehends für den Produktionseinsatz heran.

Von den japanischen Herstellern von

Hochleistungsrechnern war im Übrigen leider nur die Firma NEC angetreten, die ihren neuen Vektor-Rechner SX-6 vor-

In einer ersten Studie analysieren wir den Einfluss von starken lateralen Heterogenitäten wie Subduktionszonen, d.h. die Regionen der stärksten Erdbeben der Erde. Diese abtauchenden Platten gibt es zum Beispiel in Südamerika, Japan, Alaska, Nordkalifornien, oder Neuseeland. Ein vereinfachtes, generiertes Hintergrundmodell beschreibt allgemeine Eigenschaften und gleichzeitig typische Szenarien eines starken Erdbebens. Simulationsparameter sind in Tabelle 1 aufgelistet. Abb. 1 zeigt die Wellenausbreitung durch den gesamten Modellraum. Im oberen Teil der Abbildung beschreiben Seismogramme der vertikalen Bodengeschwindigkeit die Amplitudeneffekte entlang des Profils (graue Pfeile). Die Implementierung der Niedriggeschwindigkeitsschicht oberhalb der subduzierten Platte hoher Geschwindigkeiten induziert sekundäre Scherwellenenergie, die entlang der dünnen Schicht geführt wird und etliche Sekunden nach der direkten, langwelligeren Scherwelle die Oberfläche erreicht. Eine zweite Welle breitet sich ostwärts (rechts) aus, nachdem sie am oberen Ende der Platte reflektiert wurde. Derartige Effekte wurden in realen Daten ebenfalls beobachtet und sind wichtige Indikatoren, um den Erdbebenherd zu lokalisieren und analysieren. Geführte Energien und starke Oberflächenwellen sind Faktoren, denen bei der Gefährdungsabschätzung zentrale Bedeutung zukommt, da diese die stärksten Bodenbewegungen und daher Schäden hervorrufen.

Eine weitere Untersuchung bezieht sich auf den Bruchprozess selbst. Abbildung 2 zeigt die Verteilung der Versetzungsgeschwindigkeit zu verschiedenen Zeit-

punkten eines sich ausbreitenden Bruches. Er propagiert in diesem Beispiel auf einer quadratischen, ebenen Schwächezone und stößt nach einiger Zeit an einen nicht nachgebenden Rand. Ausgelöst wurde der Bruchprozess durch eine kleine Spannungsspitze. Das hier verwendete Reibungsgesetz ist eine Funktion der Versetzung und der Versetzungsgeschwindigkeit. Der Abfall der Scherspannung auf der Bruchfläche (Abb. 3) folgt auf eine leichte Spannungserhöhung, die im betrachteten Punkt die weitere Ausbreitung erst ermöglicht.

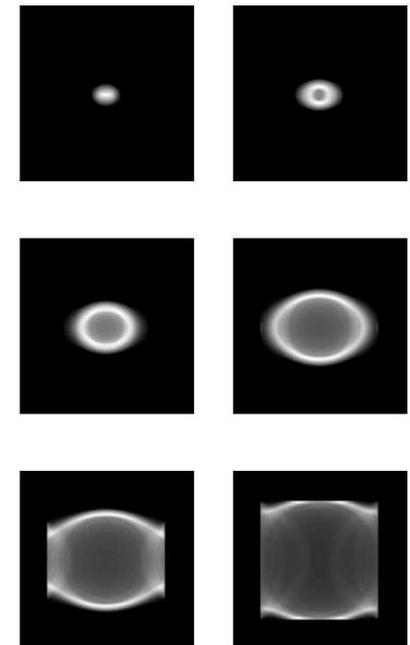


Abb. 2: Verteilung der Versetzungsgeschwindigkeit eines sich auf einer quadratischen Schwächezone ausbreitenden Bruches zu verschiedenen Zeitpunkten.

Zukünftige Arbeit wird die Implementierung von Störzonen in Kugelkoordinaten, visko-elastische Wellenausbreitung und

Simulation verschiedener möglicher Erdbebenszenarien in seismisch aktiven Regionen enthalten. Die Ergebnisse können lokalen Behörden, Firmen im Bereich des Bauwesens und Versicherungen bei ihren Planungen hilfreich sein.

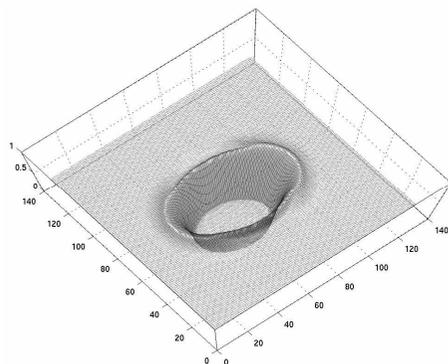


Abb. 3: Abfall der Scherspannung auf der Bruchfläche eines sich ausbreitenden Bruches.

T. Nissen-Meyer, G. Brietzke, H. Igel, Geophysik, Universität München, Projekt NBW

Mit statistischer DNS-Datenanalyse der Entstehung von Turbulenz auf der Spur

Eine Verzögerung des Einsetzens von Turbulenz ist für viele Bereiche der angewandten Strömungsmechanik, allen voran die Aerodynamik, von großem Interesse. Ebenso ist auch der umgekehrte Prozess der kontrollierten Entstehung von Turbulenz z. B. im Chemieingenieurwesen von Relevanz. Am Lehrstuhl für Strömungsmechanik Erlangen (Prof. Dr. Dr. h. c. F. Durst) arbeitet eine Forschergruppe um R. Hillerbrand und M.

Pashtrapanska unter der Leitung von Dr. J. Jovanović an der Bestimmung der kritischen Reynoldszahl des laminar-turbulenten Umschlags bei wandgebundenen Strömungen. Von zentraler Bedeutung sind bei diesen Untersuchungen, neben den durch direkte numerische Simulation (DNS) erzeugte Datenbanken, die analytischen Hilfsmittel der Zwei-Punkt-Korrelations-technik und der Invariantentheorie. Mit ihrer Hilfe sollen verbesserte Möglichkeiten zur Turbulenzmodellierung entwickelt werden, die den zentralen Einfluss der Anisotropie berücksichtigen.

Das analysierte Datenmaterial umfasst neben wandgebundenen Strömungen, homogene Turbulenzfelder, abgelöste Strömungen, Strömungen mit schwacher und starker Rotation, Strömungen mit Wärmetransport sowie Strömungen wandgebundener nicht-newtonscher Medien. Die durch DNS gewonnenen Ergebnisse liefern wichtige Einblicke in die physikalische Natur turbulenter Strömungen und der Entstehung von Turbulenz.

Da ein strenger mathematischer Beweis nach wie vor aussteht, konnte erst mit Hilfe der DNS gezeigt werden, dass alle Zustände turbulenter Strömungen innerhalb des „Dreiecks“ aus Abb. 1 liegen. In der Graphik sind die skalaren Invarianten des Anisotropie-Tensors $a_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{\overline{u_k u_k}} - \frac{1}{3} \delta_{ij}$, $II_a = a_{ij} a_{ji}$ und $III_a = a_{ik} a_{kj} a_{jk}$, aufgetragen. \mathbf{u} ist hierbei die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit, wie sie bei der Reynoldsmittelung auftritt, $\overline{u_i u_j}$ ist der Reynoldsspannungstensor, wobei der Querstrich die zeitliche Mittelung der lokalen Korrelation andeu-

Schnelle Rechner und Grids auf der SC2001 in Denver

Trotz der Ereignisse des 11. September 2001 und Anthrax-Panik haben das Leibniz-Rechenzentrum - vertreten durch die Herren Reinhold Bader und Frank Wagner - und KONWIHR - vertreten durch Herrn Andreas Schmidt - daran festgehalten, die diesjährige SuperComputing 2001 in Denver, Colorado das erste Mal mit einem eigenen Stand zu besuchen. Die Ausrüstung konnte so dicht gepackt werden, dass alles innerhalb der für Flugreisen üblichen Kontingente (2 Gepäckstücke + 1 Handgepäck) blieb; so brachen wir am Donnerstag, den 8. November in aller Frühe zum Transatlantik-Flug auf, die 22-stündige Reise verlief bei gutem Flugwetter sehr ruhig. Zu unserem Glück war in Denver trotz der 1600 Meter Seehöhe - die Stadt heißt deswegen auch „Mile High City“ - das Wetter während des gesamten Aufenthalts außerordentlich schön, mit Temperaturen von bis zu 20 Grad tagsüber.

Freitag und Samstag nutzten wir dazu, nach einigen Besorgungen - so musste etwa für die Projektion von Demos und Präsentationen eine Leinwand besorgt werden - den mitgebrachten Messestand aufzubauen sowie die Netzwerkverbindung nach Europa einzurichten. Schließlich wollte das LRZ ja auch zeigen, dass es nicht nur Hochleistungsrechnen betreibt, sondern auch in der Lage ist, den von ihm betriebenen schnellsten Rechner Europas als Grid-Komponente zu verwenden! Zu diesem Zweck wurden auf den LRZ-Rechnern die Software-Pakete Globus und UNICORE installiert, und es gelang uns, vom Laptop am LRZ-Stand eine graphische Demonstration zu star-

ten, die auf der Hitachi erzeugte Daten in Live-Bilder umsetzte. Der Messestand selbst illustrierte die am LRZ betriebene Hitachi SR8000-F1 sowie Bilder von auf ihr gewonnenen Forschungsergebnissen und die Aktivitäten von KONWIHR. Ausserdem beteiligte sich auch die Universität Dresden, vertreten durch Herrn Stephan Seidl am LRZ-Stand mit einem Poster zur Performance-Messung mit der VAMPIR Tracing- und Visualisierungs-Software.

Montag abend war das LRZ+KONWIHR-Team dann bereit: Das große Ereignis konnte beginnen! Da der LRZ-Stand - der übrigens mit 9 qm doch etwas zu knapp bemessen war - in der European Village stand, waren wir leider doch ein wenig abseits von den Besucherströmen, die sich meistens doch bei den großen Herstellern konzentrierten. Dennoch fanden sich zahlreiche Interessenten bei uns ein, um mehr über den Stand des Hochleistungsrechnens in Bayern zu erfahren.

Neben der Messe gab es viele interessante Vorträge, jedoch zeigte sich bald, dass man als Betreiber eines Standes nicht allzuviel Zeit hat, noch andere Dinge zu tun. Immerhin bekamen wir mit, dass das große Thema dieser Konferenz das Grid-Computing war - allerorten gab es Globus/Cactus-Demonstrationen zu sehen - , und viele Hersteller versuchen jetzt, ihre Hardware als Infrastruktur-Komponente in einem Grid an den Mann zu bringen.

Daneben war nach wie vor Linux im Hochleistungsrechnen ein Thema: Immer mehr Hersteller bieten jetzt unter Linux laufende Cluster an, und auch Entwicklungs- und Management-Software für solche Cluster-Lösungen

System	#Prozessoren	T [s]	Speed-Up
CRAY T3E	128	17.7	1.0
HLRB (Schritt I)	128	13.5	1.3
HLRB (Schritt II)	128 (=16 Knoten)	19.4	0.9
HLRB (Schritt III)	112 (=14 Knoten)	5.3	3.3

Tab. 1: Produktionsbenchmark für PARPHON. Als Maß für die Rechenzeit wurde die Zeit für einen Matrix-Vektor Multiplikationsschritt (MVM) mit einer Matixdimension von $D \sim 10^9$ angegeben. Typischerweise werden etwa 1000 MVMs pro Datenpunkt benötigt.

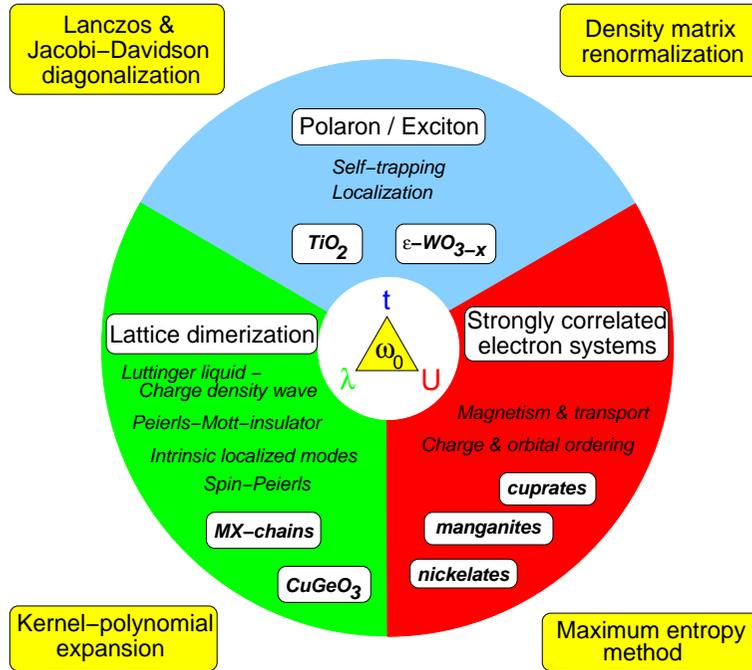


Abb. 1: Überblick über die verschiedenen Arbeitsgebiete der Arbeitsgruppe Fehske. Dargestellt sind die physikalischen Fragestellungen sowie die zum Einsatz kommenden numerischen Algorithmen.

des HLRB ist eine nochmalige Verdoppelung der Matrixdimension zu erwarten.

G. Wellein, RRZE-Erlangen, Projekt BAU-WIHR

tet. Aus der funktionalen Abhängigkeit der Invarianten II_a und III_a für kleine und mittlere Reynoldszahlen Re , dargestellt in Abb. 1 für verschiedene Simulationen, lassen sich qualitative Aussagen darüber ableiten, ob und wie Fluktuationen kleiner Amplitude in einer anfangs laminaren Grenzschicht angefacht werden. Durch Interpolation des Schließungsansatzes der Reynoldsspannungsgleichungen von den Rändern des „Invariantendreiecks“ aus Abb. 1 lässt sich vorhersagen, wie die Transition in Abhängigkeit von der Anisotropie der Fluktuationen an der Wand und der mittleren Strömung verzögert oder beschleunigt werden kann.

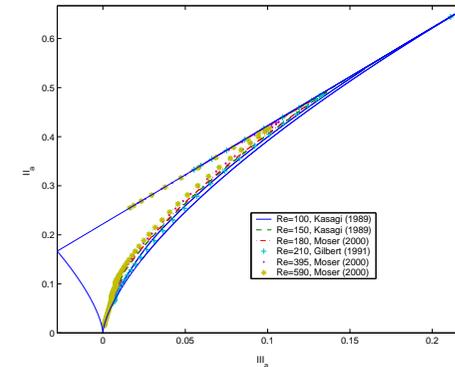


Abb. 1: Graphische Darstellung der Invarianten des Anisotropie-Tensors a_{ij} von in DNS erhaltenen Daten wandgebundener Strömungen

Ein erstes Experiment zur Bestätigung dieser Berechnungen wurde mit Unterstützung von E. Škaljić, Universität Tuzla, Bosnien-Herzegovina, im großen Windkanal des LSTM Erlangen durchgeführt. Abb. 2 zeigt die Versuchsstrecke des Windkanals mit einer vertikal befestigten ebenen Platte entlang der sich eine laminare Grenzschicht ausbildet. Der laminar-turbulente Umschlag wurde mit

Hilfe einer Hitzdrahtmesssonde beobachtet, die nah an der Plattenoberfläche, aber in 1m Entfernung von der Anströmkannte angebracht wurde.



Abb. 2: Experimentierstrecke des Windkanals mit ebener Platte zur Untersuchung des Transitionsprozesses in der anfangs laminaren Grenzschicht der Platte.

Die in der Grenzschicht nachgewiesenen Geschwindigkeitsfluktuationen, siehe Abb. 3, zeigen, dass Transition bei einer Reynoldszahl von $Re_T \approx 3.7 \times 10^6$ beginnt. Hierbei ist $Re_T = \frac{U_\infty L}{\nu}$, wobei L die Lauflänge und ν die Viskosität von Luft bezeichnet. Weiterhin zeigen die experimentellen Ergebnisse deutlich, dass das Einsetzen von Turbulenz nicht wellenförmig geschieht, sondern in Form von lokalisierten Turbulenzflecken, was sich mit der klassischen hydrodynamischen Stabilitätstheorie nicht erklären lässt. Die Ursache der in Abb. 3 zu sehenden kleinen Oszillationen, die auch bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten auftreten, sind Vibrationen der Experimentierstrecke. Diese kleinen Fluktuationen sind folglich mit keinem Strömungsphänomen verbunden.

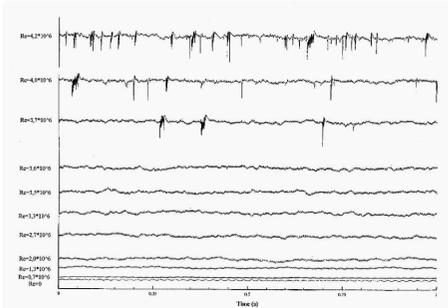


Abb. 3: Geschwindigkeitsfluktuationen in der laminaren Grenzschicht in 1 m Entfernung von der Anströmkannte der Platte.

Die in diesem Experiment am LSTM Erlangen gemessene kritische Reynoldszahl des laminar-turbulenten Übergangs liegt über dem Wert $Re_T \approx 2.8 \times 10^6$, den Schubauer und Skramstad in ihrem klassischen Experiment von 1948 erzielten. Das hier gewonnene Resultat ist vergleichbar mit den Ergebnissen der besten bis heute durchgeführten Messungen ($Re_T \approx 3.4 \times 10^6$ NASA-Langley; $Re_T \approx 4.3 \times 10^6$ Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Novosibirsk). Es ist das Ziel zukünftiger Forschung, noch höhere Werte der Reynoldszahl für den laminar-turbulenten Übergang zu erreichen, die über dem bisher besten Ergebnis $Re_T \approx 5.25 \times 10^6$, gemessen 1968 von Spangler und Wells, liegen. Dabei wird insbesondere eine praktische Lösung für die Kontrolle der Erhaltung einer laminaren Grenzschicht angestrebt.

Mit diesen Untersuchungen werden technische Lösungen fundamentaler Strömungsprobleme angestrebt. Neben experimentellen und analytischen Untersuchungen besteht ein weiteres wichtiges Hilfsmittel in der Verwendung von Datenbanken, die durch Strömungsrechnungen mit Hilfe von Supercom-

putern erzeugt werden, wie sie durch das KONWIHR-Projekt “DiSiVGT” gefördert werden. So werden in einem gemeinsamen Projekt von Prof. Dr. R. Friedrich, TU München, und Dr. J. Jovanović, FAU Erlangen, durch DNS erzeugte, hochauflösende Datenbanken verwendet, um ein Vier-Gleichungsturbulenzmodell zu entwickeln, das Turbulenz durch die turbulente kinetische Energie k , die Dissipationsrate ϵ sowie die Invarianten II_a und III_a des Anisotropie-Tensors parametrisiert. Damit wird durch die Berücksichtigung des zentralen Einflusses der Anisotropie turbulenter Strömungen eine Verbesserung bisheriger Turbulenzmodelle erreicht.

J. Jovanović, R. Hillerbrand, M. Paschtrapska, LSTM Erlangen, Projekt DiSiVGT

10.000.000.000 und mehr - Exakte Diagonalisierung riesiger Matrizen auf dem HLRB - ein cxHPC Beratungsprojekt

Die Unterstützung von Wissenschaftlern bei der Programmierung von Höchstleistungsrechnern ist eine grundlegende Voraussetzung für die effiziente Nutzung moderner Supercomputer. In der Errichtung einer umfassenden HPC Benutzerberatung liegt daher die Hauptaufgabe des KONWIHR Projektes cxHPC. Schwerpunkt der cxHPC Aktivitäten im vergangenen Jahr waren Portierung und Optimierung bestehender Programmpakete für den HLRB. Exemplarisch für die

zahlreichen Projekte sollen im Folgenden die Arbeiten für das Programmpaket PARPHON der Arbeitsgruppe von PD Dr. Fehske (Theoretische Physik, Universität Bayreuth) kurz skizziert werden.

Thematisch beschäftigt sich die Arbeitsgruppe Fehske mit dem Wechselspiel von Ladungs-, Spin- und Gitterfreiheitsgraden in Festkörpern. Grundlegende Bedeutung besitzt diese Fragestellung beim Verständnis physikalischer Eigenschaften neuer, auch technisch interessanter Materialklassen, wie zum Beispiel den kollosalmagneto-resistiven (CMR) Mangantenen. Der Zugang zur physikalischen Problemstellung erfolgt dabei über einfache mikroskopische Modelle. Die exakte Diagonalisierung (ED) der zugrundeliegenden Hamiltonmatrizen für endliche Systeme stellt derzeit die einzige näherungsweise Lösungsmethode dar. Dabei wird die Qualität der Ergebnisse im Wesentlichen durch die Dimension der dünn besetzten Hamiltonmatrix bestimmt, was zu hohen Anforderungen sowohl an die Rechenleistung als auch an den verfügbaren Speicher führt und damit den effizienten Einsatz der jeweils leistungsfähigsten Höchstleistungsrechner erfordert.

Die Arbeitsgruppe setzte in den vergangenen Jahren ihr eigenentwickeltes Programmpaket PARPHON vor allem auf den CRAY T3E Systemen am NIC Jülich ein. Nicht selten wurden hier Produktionsläufe auf 200 oder mehr Prozessoren durchgeführt. Performancekritische Programmteile waren daher speziell auf die CRAY Architektur zugeschnitten. In einem ersten Schritt (I) wurden diese Routinen an die HLRB Architektur angepasst, was vor allem durch Pseudo-

Vektorisierung innerer Schleifen erfolgte und zu einer deutlichen Erhöhung der Einzelprozessorleistung (Faktor 3-4) führte. Bei Verwendung größerer Prozessorzahlen traten jedoch im Gegensatz zu den CRAY Systemen Skalierungsprobleme auf. Diese konnten durch den Einsatz des hybriden Vektormodus des HLRB, das heißt Parallelisierung mittlerer Schleifenebenen (Schritt II), zunächst nicht reduziert werden. Eine deutliche Verbesserung der Performance wurde durch Kombination des Vektormodus mit einer Modifikation des Kommunikationschemas und den Einsatz von Kommunikationspuffern erzielt (Schritt III). Da der zusätzliche Speicherbedarf sich hier negativ auf die Größe der diagonalisierbaren Hamiltonmatrix auswirkt kann diese performanceoptimierte Version zur Zeit nicht bei allen Produktionsläufen eingesetzt werden.

Nach dem vorläufigen Abschluß der Arbeiten ist die Arbeitsgruppe Fehske mit Hilfe des HLRB in der Lage, die Dimension der Hamiltonmatrizen um einen Faktor 5 erhöhen. **Die Schallmauer von 10.000.000.000 in der Matrixdimension konnte auf 70 HLRB Knoten erstmals durchbrochen werden!** Aktuell werden mit bayerischen (Augsburg) und internationalen (Los Alamos) Kooperationspartnern mehrere wissenschaftliche Publikationen vorbereitet, deren Grundlage die auf dem HLRB bisher gewonnen Erkenntnisse bilden.

Ziel der im Jahr 2002 geplanten Arbeiten ist es, den Speicherbedarf der performanceoptimierten Version durch den dedizierten Einsatz eines Kommunikationsprozesses pro Knoten zu minimieren. Mit der dann abgeschlossenen Erweiterung