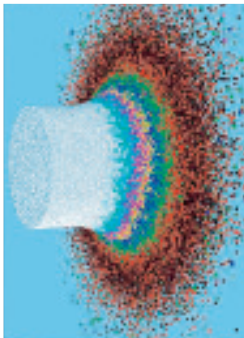
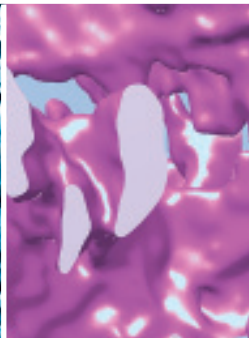
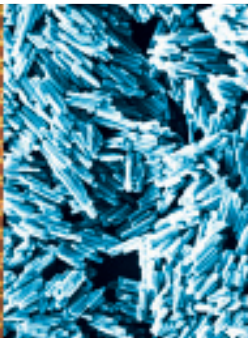
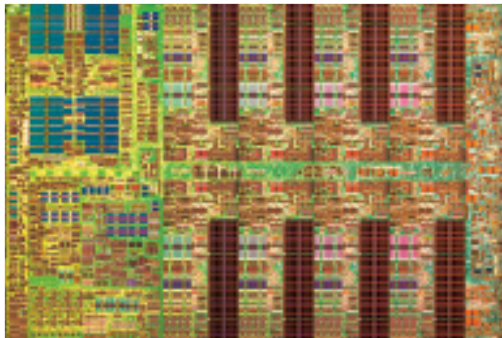
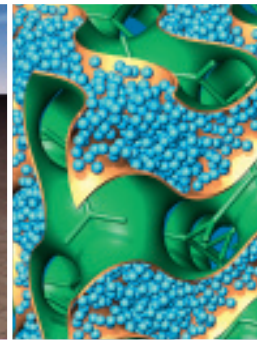
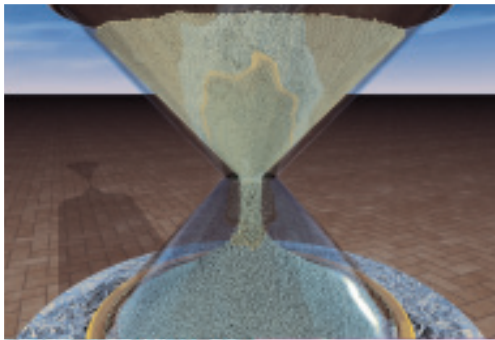
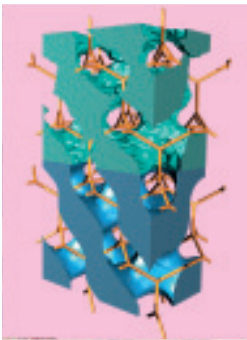
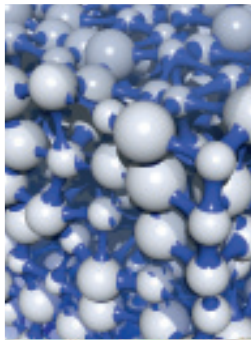


JAHRESBERICHT 2011

Zentralinstitut für Scientific Computing zisc



**ENGINEERING
OF ADVANCED
MATERIALS**

INHALT

S. 3 EDITORIAL

- S. 4 Vorstellung der kollegialen Leitung
- S. 5 Vorstellung des ZISC-Beirats

DAS ZISC

- S. 6 Warum braucht die FAU ein ZISC?
...und was ist eigentlich Scientific Computing?
- S. 8 Gebäudeübergabe und Einweihung
- S. 9 Einweihung des ZISC auf dem 7. Erlanger
International High-End-Computing-Symposium

PROJEKTE

- S.10 SKALB
- S.12 hpCADD
- S.14 AiF: Proteinschäume
- S.16 FastEBM
- S.18 Myokard-Perfusion

WORKSHOPS

- S.20 1. ZISC GPU-Workshop
- S.21 1. ZISC Multicore-Technologie-Briefing

BESUCHER

- S.22 Besuch von Shiu-Wu Chau
- S.23 Besuch von Constantin Popa

MITGLIEDER

- S.24 Liste der ZISC-Mitglieder



EDITORIAL**Liebe Leser,**

das Zentralinstitut für Scientific Computing (ZISC) an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg hat 2011 seine Arbeit aufgenommen. Nach einem Jahr ist es nun Zeit für eine erste Zwischenbilanz.

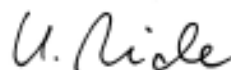
Das erste Jahr war in erster Linie durch die Aufbauarbeit gekennzeichnet, den Bezug der neuen Räume in der „Casa Huber“, die Wahl der kollegialen Leitung und der Sprecher, die Einrichtung und Besetzung der Geschäftsstelle sowie den Start erster Projekte und Aktivitäten.

Das ZISC selbst verfügt als Querschnittsinstitut nur über geringe eigene Mittel und lebt damit vom Engagement seiner Mitglieder aus den Fakultäten. Als Sprecher des Zentralinstituts freut es mich deshalb besonders, dass das ZISC bereits jetzt 52 Forscher aus allen Fakultäten der FAU einbinden konnte und dass dadurch das weitgefächerte Interesse am Scientific Computing innerhalb der FAU zum Ausdruck kommt. Das ZISC fördert damit die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen den verschiedenen Fachrichtungen und schafft so eine Plattform für die wissenschaftliche Kooperation im Bereich des Scientific Computing. Auf diese Weise kann die Methodenzustand der FAU in der Modellierung, Simulation und Optimierung für ein möglichst weites Feld von Forschungsthemen aus allen Disziplinen zum Einsatz gebracht werden.

Im folgenden Bericht werden die ersten Projekte am ZISC vorgestellt. Darunter ist bereits jetzt ein weites Fächerspektrum, das von biomedizinischen Themen bis hin zu Fragen des Hoch- und Höchstleistungsrechnens reicht. Allen gemeinsam ist, dass eine interdisziplinäre Kooperation erforderlich ist, die durch das ZISC mit seinen Ressourcen bestmöglich gefördert und unterstützt wird.

Als Sprecher und Geschäftsführer des ZISC möchten wir uns bei allen KollegInnen und MitarbeiterInnen bedanken, die so viel zum erfolgreichen Start des ZISC beigetragen haben und wünschen Ihnen nun viel Spaß beim Lesen.

Mit freundlichen Grüßen



Ulrich Rude

Sprecher des Zentralinstituts für Scientific Computing



Klaus Iglberger

Geschäftsführer des Zentralinstituts für Scientific Computing



Ulrich Rude



Klaus Iglberger

VORSTELLUNG DER KOLLEGIALEN LEITUNG



Prof. Dr. Ulrich Rüde



Prof. Dr. Günter Leugering



Prof. Dr. Tim Clark



Prof. Dr. Gerhard Wellein



Prof. Dr. Andreas Görling



Prof. Dr. Klaus Mecke



Prof. Dr. Peter Knabner



Prof. Dr. Antonio Delgado

Die fachliche Leitung des ZISC unterliegt der kollegialen Leitung.

Die Zusammensetzung der kollegialen Leitung spiegelt den kooperativen und interdisziplinären Charakter des ZISC wider.

PROF. DR. ULRICH RÜDE

Sprecher des Zentralinstituts für Scientific Computing
Lehrstuhlinhaber Informatik 10 – Systemsimulation
Department für Informatik

- Mitglied im Exzellenzcluster EAM
- Vorsitz der Studienkommission CE

PROF. DR. GÜNTER LEUGERING

Lehrstuhlinhaber Angewandte Mathematik II
Department Mathematik

- Mitglied der kollegialen Leitung des Exzellenzclusters EAM
- Sprecher des Departments Mathematik
- Prodekan für Mathematik
- Fakultätsvorstand der Naturwissenschaftlichen Fakultät
- Mitglied im Zentralinstitut für Medizintechnik

PROF. DR. TIM CLARK

Technischer Direktor Computer-Chemie-Centrum (CCC)
Department Chemie und Pharmazie

- Mitglied der kollegialen Leitung des Exzellenzclusters EAM
- Mitglied des interdisziplinären Zentrums für Molekulare Materialien (ICMM)

PROF. DR. GERHARD WELLEIN

Professur für Höchstleistungsrechnen
Regionales Rechenzentrum Erlangen (RRZE)

- Mitglied der kollegialen Leitung des Departments Informatik

PROF. DR. ANDREAS GÖRLING

Lehrstuhlinhaber Theoretische Chemie
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
Department Chemie und Pharmazie

- Mitglied der kollegialen Leitung des Computer-Chemie-Centrums (CCC)
- Mitglied im Exzellenzcluster EAM

PROF. DR. KLAUS MECKE

Lehrstuhlinhaber Theoretische Physik
Department Physik

- Mitglied im Exzellenzcluster EAM

PROF. DR. PETER KNABNER

Lehrstuhlinhaber Angewandte Mathematik I
Department Mathematik

- Departmentsrat Mathematik

PROF. DR. ANTONIO DELGADO

Lehrstuhlinhaber Strömungsmechanik (LSTM)
Department für Chemie- und Bioingenieurwesen

- Vorstand des Department Chemie- und Bioingenieurwesen
- Mitglied im Exzellenzcluster EAM

VORSTELLUNG DES ZISC-BEIRATS

Der Beirat des ZISC berät und überwacht die kollegiale Leitung bei der Wahrnehmung ihrer Aufgaben. Er nimmt insbesondere zum jährlichen Arbeitsprogramm einschließlich Kosten- und Finanzierungsplan und zum jährlichen Tätigkeitsbericht Stellung. Laut der Satzung des ZISC gehören dem Beirat drei international renommierte, externe WissenschaftlerInnen aus dem Bereich des Scientific Computing und zwei international anerkannte Persönlichkeiten aus Wirtschaft, Industrie oder Verwaltung an.

PROF. DR. DR. H.C. FRANZ DURST

Geschäftsführender Gesellschafter
der FMP Technology GmbH

- Ehem. Lehrstuhlinhaber des Lehrstuhls für Strömungsmechanik
- Mitglied der National Academy of Sciences (Indien)
- Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften
- Akademischer Leiter der Bayerischen EliteAkademie



Prof. Dr. Dr. h.c. Franz Durst



Prof. Dr. Dr. h.c. Klaus Wucherer

PROF. DR. DR. H.C. KLAUS WUCHERER

Innovations- und Technologie-Beratungs GmbH

- Bis Februar 2011 Aufsichtsratsvorsitzender bei Infineon
- Bis Herbst 2007 Mitglied im Zentralvorstand der Siemens AG
- 2004: Ehrendoktorwürde der Ingenieurwissenschaften der Universität Erlangen-Nürnberg
- Mitglied im Hochschulrat der Universität Erlangen-Nürnberg
- Honorarprofessor an der TU Chemnitz und der FH Osnabrück
- Seit 2004 Mitglied in der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften (acatech)



Prof. Dr. Barbara Wohlmuth



Prof. Dr. Dr. h.c. Rolf Rannacher

PROF. DR. BARBARA WOHLMUTH

Lehrstuhl für Numerische Mathematik
Technische Universität München

- Leibniz-Preisträgerin 2011
- Mitglied im Vorstand der Gesellschaft für Angewandte Mathematik (GAMM)
- Vorsitzende des Verwaltungsrats des Weierstraß-Instituts für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)

PROF. DR. DR. H.C. ROLF RANNACHER

Lehrstuhl Angewandte Mathematik
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

- Ehrendoktorwürde der naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg



Dr. Karl-Heinz Baringhaus

DR. KARL-HEINZ BARINGHAUS

Sanofi-Aventis Deutschland GmbH

- Head of Structure, Design & Informatics in Frankfurt bei Sanofi Aventis Deutschland GmbH
- Bis April 2010 Director Drug Design bei Sanofi-Aventis Deutschland GmbH

Warum braucht die FAU ein ZISC?

... und was ist eigentlich Scientific Computing?

Was ist eigentlich „Scientific Computing“, und warum braucht eine moderne Hochschule ein Zentralinstitut dafür? Dies ist gar nicht so einfach zu beantworten, denn auch unter Fachkollegen ist die Definition des Scientific Computing nicht eindeutig. Deshalb gehen auch die Vorstellungen auseinander, ob und wie das Fach in einer universitären Struktur zu organisieren ist. Die Voraussetzungen an der FAU legten dem Gründungsgremium sozusagen eine „Arbeits-Definition“ in die Wiege: Im Exzellenzcluster Engineering of Advanced Materials EAM und dort insbesondere im Querschnittsbereich (A3) Multiskalenmodellierung und Simulation arbeiten Mathematiker, Informatiker, Theoretische Chemiker, Theoretische Physiker, Strömungsmechaniker, Kontinuumsmechaniker und Partikelingenieure seit der Gründung im Jahre 2007 eng zusammen. Es hat sich mittlerweile eine Diskussionskultur entwickelt, die bundesweit und auch weltweit ihresgleichen sucht. Im Unterschied zu der sonst üblichen meist trockenen „Definition“ des „Wissenschaftlichen Rechnens“ konnte man von einer „gelebten Definition“ ausgehen, die eine neue, ortsspezifische Ausprägung des Wissenschaftlichen Rechnens fundiert und damit konkreter und anwendungsorientierter geprägt und über die Grenzen der Mathematik und Informatik hinaus vermittelbar ist.

Aus der Perspektive der Mathematik steht im Scientific Computing (SC) z. B. die numerische Analysis im Mittelpunkt. Naturwissenschaftler interessieren sich primär für die mit Simulationstechniken gewinnbaren Einsichten in die Physik oder Chemie. Ingenieure nutzen die Computersimulationen, um Maschinen oder Anlagen zu optimieren. Für Informatiker stehen im Scientific Computing z. B. parallele Algorithmen und Visualisierungstechniken im Vordergrund. Somit ist das jeweilige Bild des Fachs durch die spezifische Perspektive geprägt. Allen Disziplinen gemeinsam ist aber, dass sie das Scientific Computing im Zweifelsfall als das Gebiet „der anderen“ sehen. Das gilt speziell dann, wenn es darum geht, personelle oder finanzielle Ressourcen aus den eigenen Beständen bereit zu stellen. Andererseits wird gerne mit dem Scientific Computing hausiert, wenn für einen Forschungsantrag eine interdisziplinäre Komponente kreiert werden muss. Dabei besteht immer die Gefahr, dass es bei einem freundlichen Nebeneinander der klassischen Disziplinen bleibt und das grundlegende Potential des Gebiets SC nicht genutzt wird. Diese Gefahr besteht immer dann, wenn man „von oben“ kommend Synergien erzeugen möchte. Nicht so an der FAU, hier bestehen die Synergien und suchen einen übergeordneten Rahmen: ein Zentralinstitut für Wissenschaftliches Rechnen – das ZISC!

Historisch gesehen ist das Gebiet „Scientific Computing“ nicht neu. Die Anfänge sind so alt wie die der modernen Informatik, da die frühen Computer in den 1950er Jahren primär für physikalisch oder technisch motivierte Berechnungsaufgaben, also für SC-Probleme, entwickelt und genutzt wurden. Rückblickend kann man in den 80er Jahren des vorigen Jahrhunderts eine gewisse Aufbruchsstimmung erkennen, als der Begriff „Scientific Computing“ und seine deutsche Übersetzung „Wissenschaftliches Rechnen“ geprägt wurden. Aber erst in jüngerer Zeit ist das Scientific Computing in den Fokus der Wissenschaft gerückt. Der derzeitige Boom des Fachs ist auch mit dem Begriff „Computational Science and Engineering“ verbunden, der eine moderne, anwendungsorientierte Ausprägung des „Scientific Computing“ bezeichnet.

Nach diesen Vorbemerkungen versucht der folgende Teil der Ausführungen eine weiterführende Begriffsdefinition und versteht sich damit auch als ein Programm für die Aufgaben, die das ZISC an der FAU und darüber hinaus wahrnehmen soll. Der Autor lehnt sich dabei an ein kürzlich veröffentlichtes Dokument des Wissenschaftsrates¹ an, an dem er mitgewirkt hat.

Unter dem Begriff Scientific Computing (SC) oder Computational Science and Engineering (CSE) sind in einem umfassenden Sinn die Simulationswissenschaften zu verstehen, bei denen eine enge Verzahnung der Entwicklung von Modellen, numerischen Approximationen, Algorithmen und Software gegeben ist. Damit wird SC in einer steigenden Anzahl von Anwendungsfeldern zu einem unverzichtbaren Fundament des wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns. Hierfür wird vielfach das Bild einer „dritten Säule“ der Wissenschaft verwendet, die gleichberechtigt neben Theorie und Experiment tritt. Durch die rasche Steigerung der Rechenleistung in den vergangenen

Jahrzehnten und das damit wachsende Nutzungspotential ist das Gebiet Scientific Computing zu einer der wichtigsten Antriebskräfte des wissenschaftlichen Fortschritts geworden.

Die Anwendungsfelder, in denen SC-Methodik Verwendung findet, sind vielfältig und ihre Zahl wächst beständig. Sie reichen von naturwissenschaftlicher Grundlagenforschung in Physik und Chemie über finanzwissenschaftliche Simulationen bis hin zu Anwendungen in der Medizin und in den Ingenieurwissenschaften. Simulationsmodelle beruhen dabei auf fundierten theoretischen Grundlagen der jeweiligen Anwendungsdisziplin und auf den daraus entwickelten mathematischen Modellen. Verfahren der numerischen Mathematik sind die Grundlage, um die Modellgleichungen zu diskretisieren und um Lösungen und Vorhersagen zu berechnen. Oft werden Verfahren der Datenanalyse benötigt, mit denen die Eingabedaten für Simulationen aufbereitet werden müssen, und ebenso sind die Visualisierung der Daten und die Validierung der Simulationsergebnisse als integraler Bestandteil des SC anzusehen. Da komplexe Simulationen zu den leistungshungrigsten Computeranwendungen zählen, ist das Gebiet SC auch eng mit dem Hoch- und Höchstleistungsrechnen verbunden. Moderne Simulationsanwendungen erfordern hochkomplexe Softwarestrukturen und nutzen oft innovative parallele Rechensysteme. Sie erfordern deshalb eine speziell auf die Erfordernisse wissenschaftlicher Anwendungen angepasste Softwaretechnologie.

Wenn SC erstmals für ein Problem eingesetzt wird, geht es zunächst darum, die grundlegenden Modelle zu entwickeln und dazu die richtigen Abstraktionen und Vereinfachungen zu finden, mit denen das Systemverhalten zunächst qualitativ in einer Computersimulation reproduziert werden kann. Für viele Aufgaben muss das Simulationsmodell in zusätzlich folgenden Schritten so weiter entwickelt werden, dass es auch quantitative Vorhersagen erlaubt. Ist die prädiktive Genauigkeit schließlich ausreichend, kann das Modell im Kontext einer mathematischen Optimierung genutzt oder auch im Sinne einer inversen Modellierung eingesetzt werden, um z. B. physikalische Parameter des Modells zu bestimmen. Diese integrierende Phase der SC-Forschung kann so weit gehen, dass die Computersimulationen in technische Geräte eingebettet werden, wie es etwa bei den bildgebenden Verfahren der Medizintechnik bereits heute Standard ist.

Das Fach SC liegt in einem Dreieck zwischen der Mathematik, der Informatik und den Disziplinen, in denen die Modelle und Methoden entwickelt und genutzt werden. In Forschung und Lehre erfordert das Fach SC somit eine neuartige, integrierende Verknüpfung des Wissens zwischen den Disziplinen, die weit über das bloße Nebeneinander dieser Fächer hinausgeht. Nur durch die Nutzung der Synergien und die Verbindung der Forschung zwischen den Disziplinen kann das volle Potential des SC genutzt werden, wie die laufende Forschung am EAM eindrucksvoll zeigt.

An der FAU hat nun das ZISC die Aufgabe übernommen, diese fachliche Brücke auch in einem weiteren Rahmen herzustellen. Die ersten ZISC-Projekte auch außerhalb des EAM sind gestartet und können bereits schöne Erfolge vorweisen, die ohne die interdisziplinäre Konstellation am ZISC nicht möglich wären.

Es liegt jedoch noch viel Arbeit vor uns, um das ZISC noch fester in der Forschungslandschaft der FAU zu verankern.

Autoren: Prof. Dr. Günter Leugering und Prof. Dr. Ulrich Rüdte

¹ <http://www.siam.org/activity/cse/>

² <http://www.wissenschaftsrat.de/aktuelles-presse/pressemitteilungen/2012/nummer-02-vom-30-januar-2012/#c5983>



DAS ZISC

Gebäudeübergabe und Einweihung

Der geplante Startschuss für das ZISC war der Beginn des Jahres 2011. Um den Kooperationscharakter des ZISC zu unterstreichen und es Forschern von verschiedenen Institutionen zu erlauben, in einem Arbeitsraum an einem gemeinsamen Projekt zu arbeiten, wurden noch Räumlichkeiten für das ZISC gesucht. Im Rahmen der Baumaßnahmen des neuen Dekanats in der Martensstraße konnte mit der Universitätsleitung vereinbart werden, dem ZISC in diesem neuen Gebäude einige Räume zur Verfügung zu stellen. Um möglichst viel Arbeitsfläche für das verfügbare Budget zu erhalten, engagierte sich der Alt-Dekan der Technischen Fakultät, Prof. Dr. Johannes Huber, dafür, das Gebäude über das Architekturbüro Schlosser & Keller errichten zu lassen. Für ein Budget von einer Million Euro konnte so in nur zehn Monaten (März bis Dezember 2010) eine neue Arbeitsstätte für das Dekanat und Arbeitsfläche für das ZISC geschaffen werden. Prof. Hubers Engagement ist schon beim Betreten des Gebäudes ersichtlich: Das Schild im Eingangsbereich trägt ihm zu Ehren die Inschrift „Casa Huber“.

Die Schlüsselübergabe an die Universität und damit der Startschuss für die Arbeit im ZISC fand am 22. Dezember 2010 statt. Somit konnte das ZISC mit dem Beginn des Jahres 2011 seine Arbeit aufnehmen. Die ersten Mitarbeiter des ZISC konnten nach der kompletten Einrichtung des ZISC ab März 2011 gemeinsam an komplexen Simulationsaufgaben arbeiten. Damit wurde zum ersten Mal die dedizierte Möglichkeit geschaffen, dass Doktoranden und Doktorandinnen von verschiedenen Lehrstühlen im Rahmen von fachübergreifenden Projekten an einem Institut zusammenarbeiten können.

Autor: Dr. Klaus Iglberger



Schlüsselübergabe an die Universität Erlangen. Die Personen von links: Prof. German, zu diesem Zeitpunkt noch Dekan der Technischen Fakultät, der Architekt des Gebäudes, Herr Clemens Keller, Alt-Dekan Prof. Huber, der Kanzler der Universität, Herr Schöck, und der Präsident der Universität, Prof. Gröske.



Interdisziplinäre Zusammenarbeit der ZISC-Mitarbeiter

Einweihung des ZISC auf dem 7. Erlanger International High-End-Computing-Symposium

Am 24.6.2011 fand zum siebten Mal das Erlangen International High-End-Computing-Symposium (EIHECS) statt. Diese jährliche, von Intel gesponserte Veranstaltung wird von Experten des High-End-Computing genutzt, um sich über die neuesten Entwicklungen in diesem Bereich auszutauschen. Als besonderes Highlight wurde dieses Jahr zusätzlich im Rahmen des EIHECS das Zentralinstitut für Scientific Computing (ZISC) eingeweiht.

Mit 62 Registrierungen war das Symposium trotz Brückentag diesmal wieder gut besucht. Dies mag auch auf die Liste der Sprecher zurückzuführen sein, denn wie jedes Jahr waren auch dieses Jahr wieder vier hochkarätige Sprecher eingeladen. Der erste Sprecher, Prof. Dr. Rolf Rannacher von der Universität Heidelberg, war als Vertreter des ZISC-Beirats anwesend. In seinem Vortrag „Self-Adaptivity: Mathematics' Contribution to Scientific Computing“ gab er den Zuhörern einen Eindruck von der Rolle der Mathematik im Scientific Computing. Der zweite Sprecher, Prof. Dr. Manfred Krafczyk von der TU Braunschweig, nutzte seine 45 Minuten für einen detaillierten Überblick über Strömungssimulation mittels der Lattice-Boltzmann-Methode. In seinem Vortrag „Towards Multi-Level Parallelization of coupled Flow Problems utilizing heterogeneous CPU-GPU hardware“ schuf er bei den Zuhörern ein Verständnis für die Lattice-Boltzmann-Methode und demonstrierte verschiedene, komplexe Anwendungen in hochparallelen, heterogenen Rechenumgebungen. Als dritte Sprecherin gab Prof. Dr. Ana-Suncana Smith von der Universität Erlangen-Nürnberg in ihrem Vortrag „Applications of High End Computing in Studies of Soft Matter and Biophysics“ einen Überblick über aktuelle Forschungsthemen im Exzellenzcluster EAM. Ihr Vortrag war sehr anwendungsorientiert und führte den Zuhörern vor Augen, welche Möglichkeiten der Forschung durch modernes High-End Computing heute zur Verfügung stehen. Als vierter Sprecher war Prof. Dr. Thomas Sterling von der Louisiana State University eingeladen. In gewohnt unterhaltsamer Art stellte er in seinem Vortrag „Advanced Execution Models for Extreme Scale Computing“ ein neues Ausführungsmodell mit dem Namen ParalleX vor, das eine effiziente Nutzung von hoch-parallelen Maschinen jenseits der eine Million Rechenkerne ermöglichen soll.

Rückblickend kann das 7. EIHEC-Symposium wieder als Erfolg gewertet werden. Eine hohe Teilnehmerzahl, interessante Vorträge und angeregte Diskussionen erzeugten wieder einen produktiven Mix aus Lernen und Austauschen. Zusätzlich hat mit dieser Veranstaltung das ZISC offiziell seine Arbeit aufgenommen.



Gespannte Aufmerksamkeit bei den Teilnehmern des EIHEC-Symposiums



Rege Diskussionen in der Kaffeepause

SKALB

Effiziente Lattice-Boltzmann-Löser für neue Rechnerarchitekturen

„Die Gelegenheit beim Schopf packen“ lautete das Motto, als im Januar 2009 das vom BMBF geförderte Projekt SKALB (Lattice-Boltzmann-Methoden für skalierbare Multi-Physik-Anwendungen) seine Arbeit aufnahm. Nach drei Jahren intensiver und sehr erfolgreicher Arbeit können die beteiligten Partner aus Erlangen (Prof. Rüde, Prof. Wellein), Braunschweig (Prof. Krafczyk) und Dortmund (Prof. Turek, IANUS GmbH) zu Recht sagen, dass diese Gelegenheit genutzt wurde.

Ziel von SKALB war die effiziente Implementierung und Weiterentwicklung von Lattice-Boltzmann-basierten Strömungslösern zur Simulation komplexer Multi-Physik-Anwendungen auf Rechnern der Petascale-Klasse. Dabei wurden methodisch-thematische Weiterentwicklungen des Lattice-Boltzmann-Verfahrens ebenso adressiert wie rechnernahe Informatikspezifische Fragestellungen. Bei den beiden Erlanger Teilprojekten standen die Skalierbarkeit und Codeeffizienz der eigenen Lattice-Boltzmann-Löser (ILBDC und waLBerla) für homogene und heterogene (GPGPU-beschleunigte) massiv-parallele Rechner im Vordergrund. So konnte in der AG Wellein ein skalierbarer CPU-basierter Löser implementiert werden, dessen Performance nahezu unabhängig von der Geometrie des Strömungsgebiets ist und der im Rahmen der gewählten Lattice-Boltzmann-Methode als optimal anzusehen ist. Der Performancevorteil von 4-5x gegenüber zugegebenermaßen breiter einsetzbaren Open-Source-Codes wurde maßgeblich durch strukturiertes und gezieltes „Performance-Engineering“ erreicht. Zum Einsatz kommt der hocheffiziente Code zur Simulation von Strömungen in komplexen Geometrien wie etwa chemischen Reaktoren oder Katalysatoren.

Bei den Arbeiten am flexibel einsetzbaren Lattice-Boltzmann-Framework „waLBerla“ des Lehrstuhls für Systemsimulation (LSS) stand unter anderem die effiziente Implementierung für hochparallele GPGPU-Cluster im Vordergrund. Dabei arbeiteten Projektmitarbeiter des LSS und der AG Wellein gemeinsam am ZISC und können nun stolz von sich behaupten, eine der wenigen effizienten und skalierbaren GPGPU-Anwendungen weltweit zu besitzen. So wird derzeit etwa der Tsubame 2.0 Rechner (Nummer 5 in der aktuellen TOP500-Liste) für Rechnungen mit Hunderten von GPGPUs eingesetzt. Abbildung 2 zeigt eine Skalierungsstudie auf dem Rechner und unterstreicht die Notwendigkeit, auf GPGPU-Rechnern Kommunikation und Rechnung zu überlappen, was oftmals nur durch tiefe Eingriffe in die Applikationen möglich ist.

Die hier kurz angesprochenen Beispiele sind nur ein kleiner Ausschnitt aus den Aktivitäten in SKALB. Mehr als 40 Publikationen und mehrere Preise für Arbeiten im Rahmen des Projektes sind der wissenschaftliche Beleg dafür, dass die Gelegenheit in den vergangenen drei Jahren wirklich „beim Schopf gepackt“ wurde. Nähere Informationen zum Projekt sind unter www.skalb.de zu finden.

Autor: Prof. Dr. Gerhard Wellein

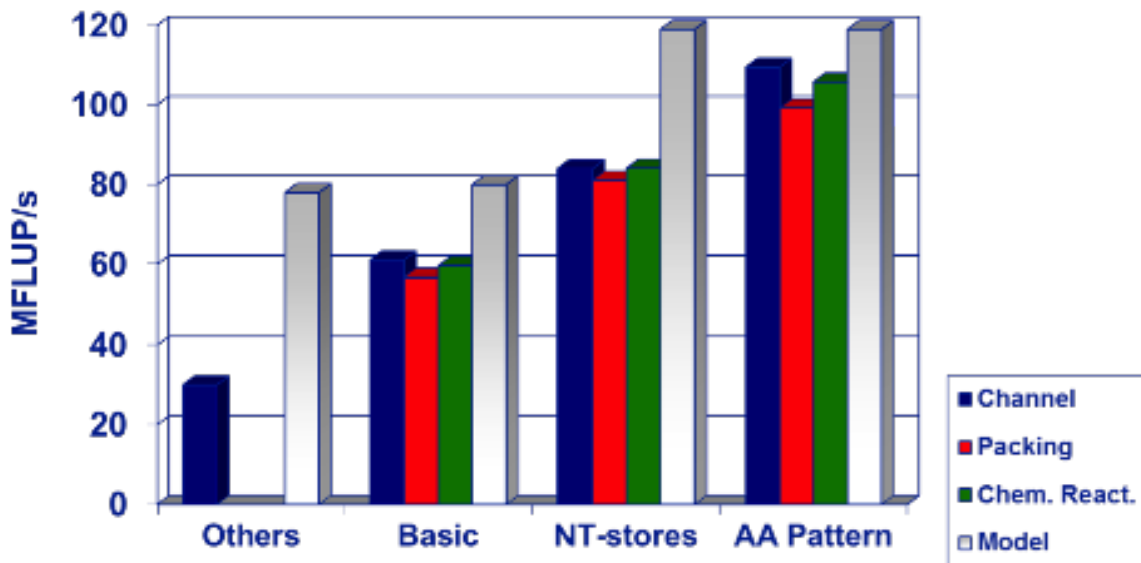


ABBILDUNG 1 Performance in „Million Fluid Lattice Site Updates per second“ (MFLUP/s) für den ILBDC-Löser in verschiedenen Geometrien. Angegeben ist die Leistung eines Intel Westmere EP Knotens aus dem LiMa-Cluster des RRZE für verschiedene Optimierungsansätze von ILBDC und einen Open-Source Lattice-Boltzmann-Löser. Die Vorhersage des Performancemodells für die jeweiligen ILBDC-Implementierungsansätze („Model“) stellt die theoretisch maximal erzielbare Leistung dar. Die Geometrie der drei Testfälle ist ebenfalls dargestellt.

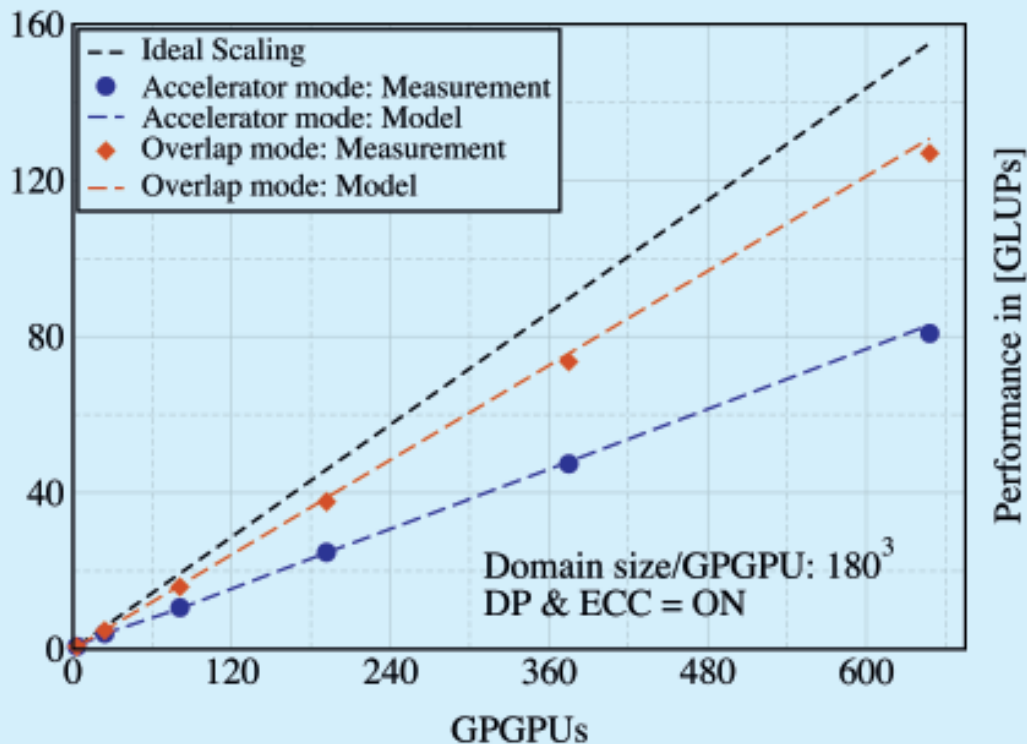


ABBILDUNG 2 Rechenleistung von waLBerla auf dem TSUBAME 2.0 Rechner am Tokyo Institute of Technology, angegeben in „Billion Fluid Lattice Site Updates per second“. Die GPGPU-Berechnung auf den NVIDIA M2070 („Fermi“) GPGPUs wurden in doppelter Genauigkeit und mit aktiviertem ECC-Schutz durchgeführt. Verglichen wird der klassische Akzelerator-Ansatz mit der Strategie, wie sie in waLBerla implementiert ist („Overlap mode“), Rechnung und Kommunikation zu überlappen. Die schwarze, durchbrochene Gerade gibt die maximal erzielbare Rechenleistung als linear hochskalierte Einzel-GPGPU-Leistung an.

PROJEKTE

hpCADD

High-Performance Computer-Aided Drug Design

„Computer-Aided Drug Design“ (CADD) stellt eine wesentliche Säule im Entwicklungsprozess neuer Medikamente dar und ist aus der Pharmaindustrie nicht mehr wegzudenken. Durch geeignete Modellierungen können computergestützte Vorhersagen zur biologischen Aktivität und von medizinischen Parametern auf der Basis molekularer Eigenschaften getroffen werden. Der Erfolg dieses theoretischen Ansatzes wird hauptsächlich durch zwei Faktoren bestimmt: (1) die Genauigkeit der Vorhersage von relevanten Größen im Rahmen der zur Verfügung stehenden Rechnerressourcen und (2) die Qualität und Reproduzierbarkeit experimenteller Referenzdaten. Beide Aspekte unterliegen der äußerst hohen Komplexität biologischer Systeme sowohl in der Beschreibung der zugrundeliegenden molekularen Wechselwirkungen als auch in der experimentellen Präparation und Charakterisierung medizinisch relevanter Modelle.

Das hpCADD-Projekt stellt diesen Herausforderungen einen innovativen und integrativen Ansatz entgegen, welcher stark von den Fähigkeiten aktueller Hochleistungsrechner profitiert. Hochgenaue Rechenmethoden benötigen im Regelfall außerordentlich lange (serielle) Rechenzeiten, so dass sich der prinzipielle Wettbewerbsvorteil der computergestützten Verfahren nur entfalten kann, wenn innovative Algorithmen und theoretische Methodik speziell auf HPC-Architekturen zugeschnitten werden. Neben diesem zentralen Projektziel ergibt sich die informatische Anforderung, die sehr heterogenen Daten und

Verfahren der einzelnen theoretischen Schritte zu integrieren und zu visualisieren, um so eine homogene Benutzerschnittstelle zur Steuerung zu erarbeiten. Durch die enge Interaktion zwischen akademischen und industriellen Partnern ist es möglich, die Methoden mit verlässlichen Referenzdaten zu kalibrieren und gleichzeitig die Software-Umgebung unter den realistischen Rahmenbedingungen eines forschenden Pharmaunternehmens zu erproben und zu optimieren.

Dieses Projekt wird vom BMBF gefördert und stellt einen Verbund von drei Erlanger Forschergruppen, einer Dortmunder Gruppe und der Sanofi-Aventis dar. Das Projekt hpCADD (High-Performance Computer-Aided Drug Design) wird von Prof. Clark (CCC) koordiniert und soll mit einem Gesamtvolumen von 1,5 Millionen Euro innerhalb von drei Jahren zur Entwicklung von einer neuen Generation von sehr genauen Methoden zur Computer-gestützten Vorhersage der biologischen und physikalischen Eigenschaften von Wirkstoffmolekülen führen. Alle drei beteiligten Gruppen aus Erlangen (Clark: neue Wechselwirkungsmodelle, Wellein: Parallel Computing und Zahn: Konformationssuche) sind Mitglieder des Zentralinstituts für Scientific Computing (ZISC).

Autor: Prof. Dr. Dirk Zahn · Kontakt: www.ccc.uni-erlangen.de

FÖRDERER

BMBF

LAUFZEIT

September 2011 bis August 2014

BETEILIGTE

Computer-Chemie-Centrum (CCC)
Prof. Clark · Prof. Zahn
RRZE Prof. Wellein

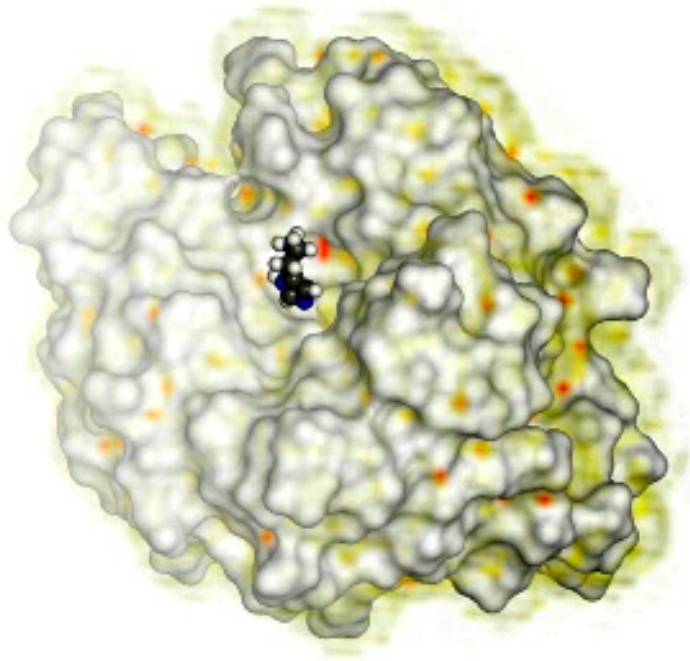


ABBILDUNG 1 Suche nach geeigneten Wirkstoffmolekülen zum optimalen Andocken an die Oberfläche eines Proteins. Die enorme Vielfalt der strukturellen Anordnungsmöglichkeiten, der beteiligten Wechselwirkungen und der Bandbreite denkbarer Wirkstoffe macht den Einsatz hochmoderner Computer unumgänglich.

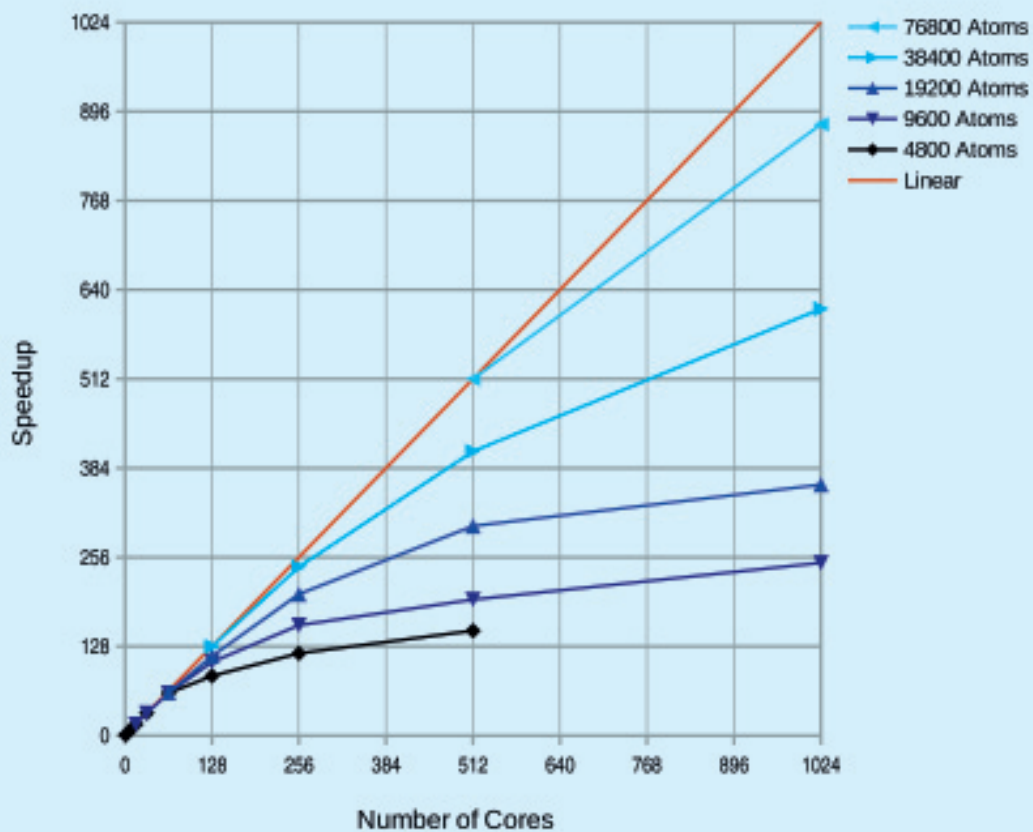


ABBILDUNG 2 Skalierung von AM1-SCF-Rechnungen auf HLRB II mit EMPIRE. Dank moderner Simulationenmethoden und Programmcodes können die Stärken hoch-paralleler Rechner effizient ausgeschöpft werden.

PROJEKTE

AiF:

Proteinschäume

Der Forschungskreis der Ernährungsindustrie (FEI) fördert für die nächsten drei Jahre ein großes Clustervorhaben bestehend aus sechs einzelnen Projekten, die sowohl von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) als auch der Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF) finanziert werden. Das Ziel des Verbundprojekts ist die Mechanismenaufklärung, Modellierung und Simulation von Proteinschäumen in der Lebensmittelproduktion. Am Zentralinstitut für Scientific Computing (ZISC) wird dabei das Teilprojekt 6 verwaltet, welches gemeinschaftlich vom Lehrstuhl für Strömungsmechanik und dem Lehrstuhl für Systemsimulation bearbeitet wird und neben der Erstellung hochleistungsfähiger Simulationswerkzeuge auch die Koordination des Clusters übernimmt.

In der Produktion von Lebensmitteln kommen zahlreiche stoffliche Systeme vor, bei denen ein Gas in dispergierter Form vorliegt. Vielfach erweist sich der Gaseinschluss als erwünscht. Mit ihm lassen sich beispielsweise die Eigenschaften so beeinflussen, dass das Produkt eine geringere Dichte annimmt, einen angenehmen sensorischen Eindruck macht oder sogar bis zu einem gewissen Grad einen verbesserten ernährungsphysiologischen Nutzen bewirkt. Diese Produkteigenschaften werden von den Endverbrauchern der Gegenwart ohne Weiteres mit dem Attribut „leicht“ assoziiert, was eine hohe Kundenakzeptanz nach sich zieht. Die Cluster-Initiative wird durch die Problemstellung motiviert, durch neuartige Impulse aus engverzahnter Grundlagen- und anwendungsorientierter Forschung zum verbesserten Verständnis der wesentlichen Phänomene beizutragen und der Wirtschaft die Ausschöpfung von produkt- und prozesstechnischen sowie von ökonomischen Potentialen zu erleichtern.

Gasdispersionen in Lebensmitteln können positive wie negative Effekte auslösen. So können z. B. mikrobiologische Aktivitäten in Fermentern verstärkt werden, jedoch auch starke Prozessinhomogenitäten auftreten. Da Schäume inhärent instabil sind, stellt sich die zentrale Frage nach den stabilisierenden und destabilisierenden Effekten, um etwa Voraussagen für die Dauer des stabilen Verhaltens treffen zu können, welche im Bereich einiger Minuten (z. B. Schlagsahne) oder für mehrere Wochen (ready-to-eat Desserts) wünschenswert ist.

Die Struktur des Projektclusters ist in experimentelle und modellbildende Projekte entlang der verschiedenen Längenskalen unterteilt: Prof. Peukert (Universität Erlangen, Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik) und Dr. Miller (Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung) erforschen im Teilprojekt 1 den Einfluss von Proteinen auf die Schaumbildung

FÖRDERER

AiF · DFG

LAUFZEIT

Mai 2011 bis April 2014

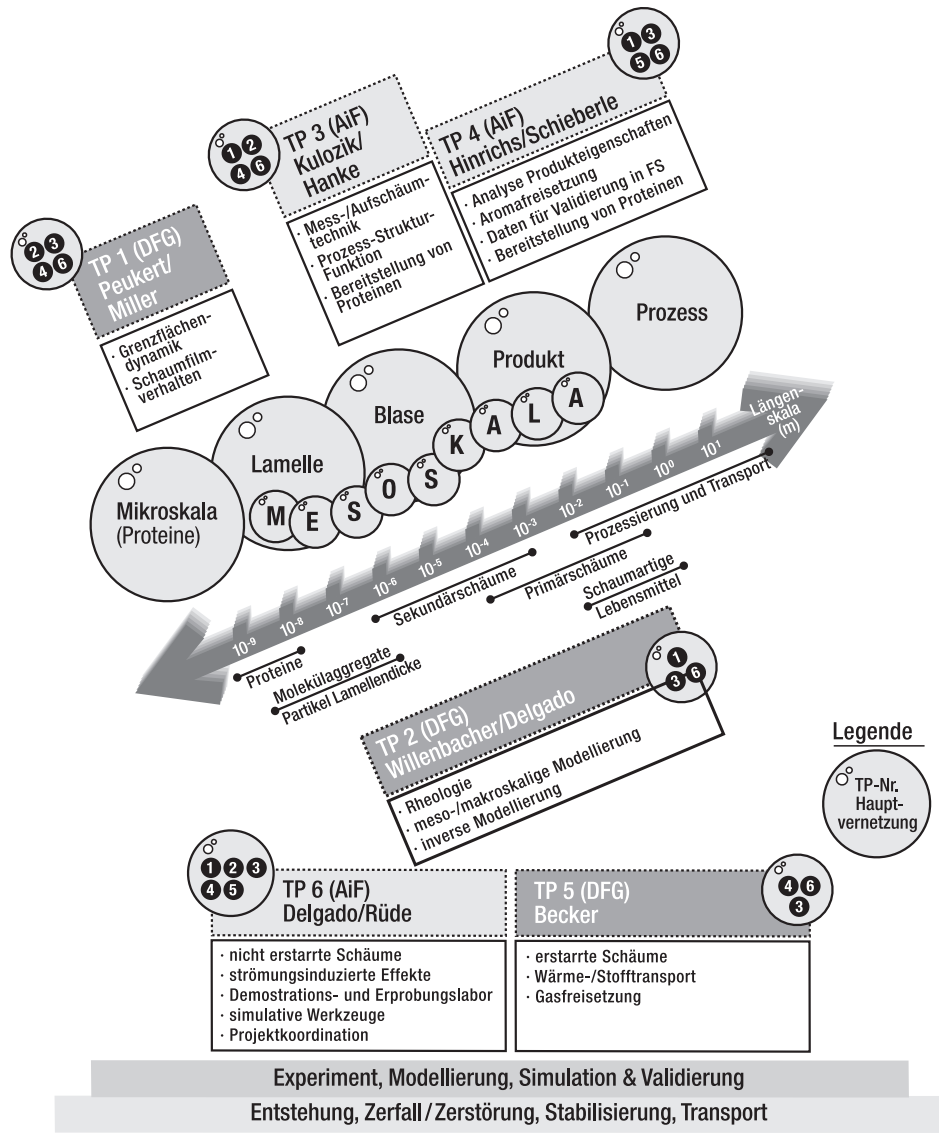
BETEILIGTE

Lehrstuhl für Strömungsmechanik
Prof. DelgadoLehrstuhl für Systemsimulation
Prof. Rüde

und Schaumstabilität. Teilprojekt 3 (Prof. Kulozik, TU München, Zentralinstitut für Ernährungs- und Lebensmittelforschung, und Dr. Hanke, Fraunhofer Institut für Integrierte Schaltungen) betrachtet Schäume unterschiedlicher kompositorischer Zusammensetzung im Hinblick auf ihre Stabilität. Teilprojekt 2 (Prof. Willenbacher, Karlsruher Institut für Technologie, Angewandte Mechanik, und Prof. Delgado, Universität Erlangen, Lehrstuhl für Strömungsmechanik) fokussiert sich auf die Charakterisierung rheologischer Eigenschaften und sucht nach Ansätzen zwischen den verschiedenen Skalen: vom Protein zur Lamelle, von der Lamelle zur Blase und von der Blase zum Modellprodukt und Prozess. Das Teilprojekt 4 (Prof. Hinrichs, Universität Hohenheim, Forschungsgruppe Lebensmittel tierischer Herkunft, und Prof. Schieberle, Deutsche Forschungsanstalt für Lebensmittelchemie) positioniert sich zwischen der Schaumstruktur und der Produktkomposition und geht der für die Produktakzeptanz sehr wichtigen Fragestellung der Aromafreisetzung aus einer schaumartigen, erstarrten Struktur nach. In enger fachlicher Nähe lässt sich das Teilprojekt 5 (Prof. Becker, TU München, Lehrstuhl für Brau- und Getränketechnologie) einordnen, welches sich Wärme- und Stofftransportphänomenen innerhalb von Schäumen widmet.

Das Teilprojekt 6 (Prof. Delgado und Prof. Rüde, Universität Erlangen, Lehrstuhl für Systemsimulation) hat als zentrales Projekt verschiedene Aufgaben. Hierzu zählt zunächst die Erarbeitung von Modellen und numerischen Algorithmen für nicht-erstarrte, d. h. fließfähige Grenzflächen unter besonderer Berücksichtigung der strömungsinduzierten Effekte auf sporadisch und mechanisch forciert zerfallende Schäume. Eine weitere Aufgabe besteht in der Bereitstellung von zentralen Simulationswerkzeugen und eines Demonstrations- und Erprobungslabors. Ferner gehört zum Projekt die Aufgabe, Methoden zur Modell- und Datenreduktion zu entwickeln, um die Übertragung der Ergebnisse des Clusters in die Praxis zu forcieren. Schließlich wird im Rahmen dieses Teilvorhabens die Aufgabe der Organisation der Forschungstätigkeiten im Cluster wahrgenommen. Für diese Arbeiten steht beiden Lehrstühlen jeweils ein Mitarbeiter zur Verfügung, die sich am ZISC koordinieren. Da gerade dieses zentrale Teilprojekt ein hohes Maß an Interaktion mit anderen Projektpartnern erfordert, bietet das ZISC eine nützliche Plattform zum wissenschaftlichen Informationsaustausch und genügend Platz und Möglichkeit zum Empfang und zur engen Zusammenarbeit mit externen Gästen.

Autor: Dr. Stefan Donath



Erste Computersimulationen zur Untersuchung der Entstehung von Schäumen.

PROJEKTE

High Productivity Electron Beam Melting Additive Manufacturing Development for the Part Production Systems Market

FÖRDERER

Europäische Union

LAUFZEIT

Dezember 2011 bis November 2013

PROJEKTVOLUMEN

ca. 380.000 Euro

BETEILIGTELehrstuhl für Werkstoffkunde
und Technologie der Metalle
Prof. KörnerLehrstuhl für Systemsimulation
Prof. Rüde

Ziel des durch die EU geförderten Projektes ist es, die Produktivität der Additiven Fertigung durch selektives Pulverschmelzen mit dem Elektronenstrahl (SEBM selective electron beam melting) deutlich zu steigern. Es soll ein SEBM-System entwickelt werden, das die Herstellung von Bauteilen für die Luft- und Raumfahrt zu konkurrenzfähigen Kosten erlaubt. Dazu muss zum einen die Geschwindigkeit des Materialauftrags durch Erhöhung der Strahlleistung gesteigert werden. Zum anderen muss der zur Verfügung stehende Bauraum vergrößert werden.

Das Konsortium besteht aus sieben Partnern, wobei die Hauptaufgaben des Projektes von drei zentralen Partnern getragen werden:

- 1 ARCAM AB: Realisierung der SEBM-Anlage mit höherer Produktivität
- 2 TWI: Auslegung und Bau einer Elektronenstrahlkanone mit erhöhter Leistung
- 3 Uni Erlangen WTM (Prof. Körner) und LSS/ZISC (Prof. Rüde):
Simulation der Strahl-Pulver-Wechselwirkung in 3D

Ziel der in Erlangen durchzuführenden numerischen Arbeiten ist es, die Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit dem Pulverbett besser verstehen zu lernen. Die Erkenntnisse sollen dazu genutzt werden, sowohl die Elektronenstrahlkanone auszuliegen als auch geeignete Prozessfenster für die Elektronenstrahlparameter im Prozess zu finden. Die Arbeiten basieren auf umfangreichen numerischen Vorarbeiten des Lehrstuhl WTM (Prof. Körner, Dr. Attar) zum selektiven Strahlschmelzen. Dabei wird die Lattice-Boltzmann-Methode eingesetzt, um den sehr heftigen Schmelz- und Erstarrungsprozess in 2D zu simulieren (Abbildung 1). Aus den 2D-Simulationen kann man zwar bereits heute wichtige Erkenntnisse zum Prozess ableiten (Abbildung 2), jedoch können echte 3D-Effekte nicht abgebildet werden. Um realistische Simulationen in 3D sinnvoll durchführen zu können, ist die Verwendung von Höchstleistungsrechnern praktisch unumgänglich. Die Verknüpfung der Werkstoffwissenschaften (WTM), welche die Kompetenz auf dem Gebiet der physikalischen Modellierung des Wechselwirkungsprozesses einbringt, und der Informatik (LSS, ZISC), spezialisiert auf High-Performance-Computing, ist hier der Schlüssel zum Erfolg.

Autor: Prof. Dr. Carolin Körner

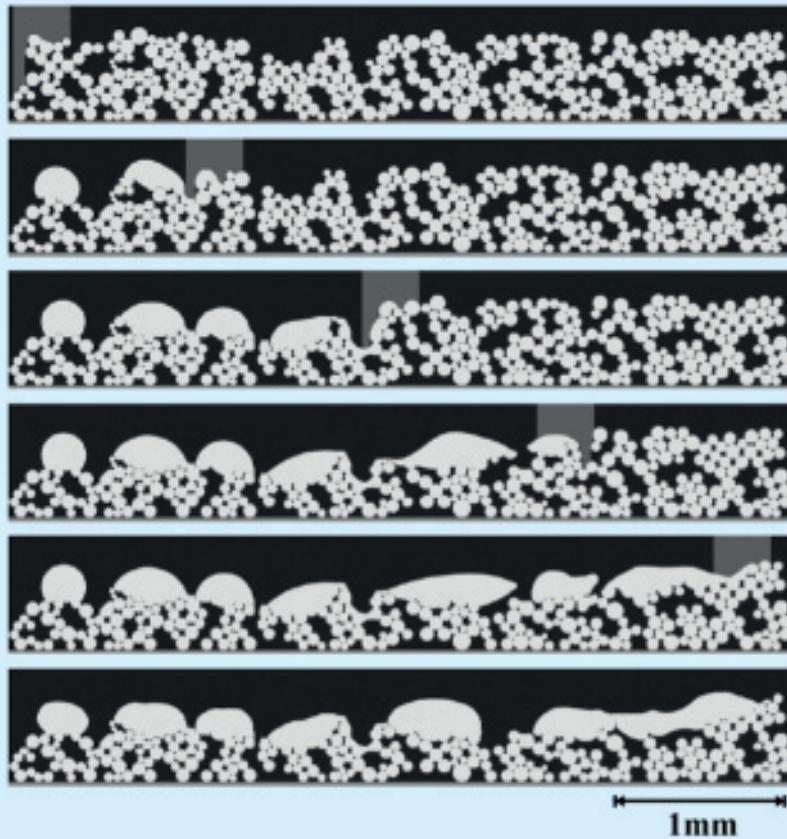


ABBILDUNG 1 Schmelzen einer Pulverschicht mit dem Elektronenstrahl. Zu sehen sind die heftige Bewegung der Schmelze, Benetzungseffekte und das Einformen von Tropfen aufgrund von Kapillarkräften.

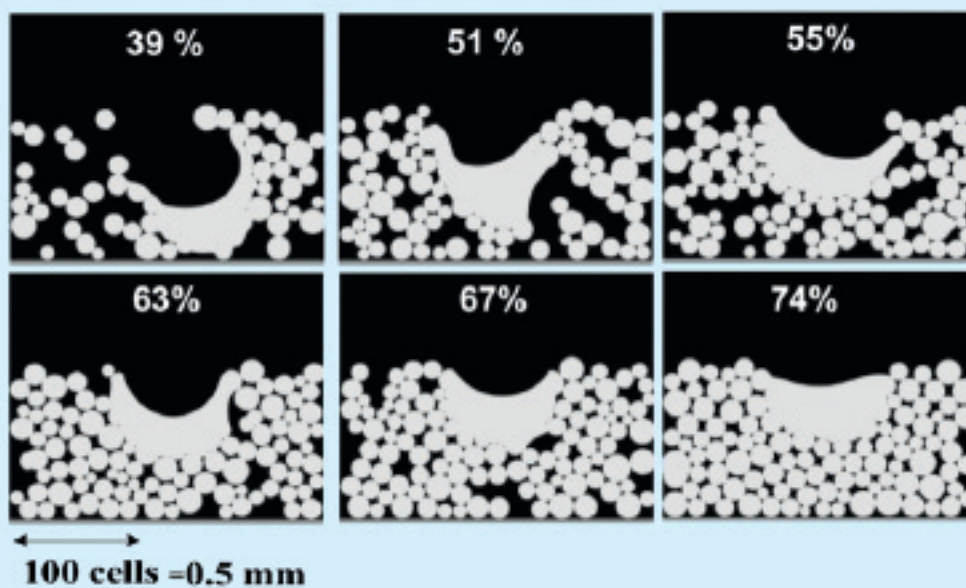


ABBILDUNG 2 Einfluss der Pulverschüttdichte auf die Ausbildung des Schmelzepools.

PROJEKTE

Simulation der Myokard- perfusion

INDUSTRIEPARTNER

Siemens

LAUFZEIT

Mai 2011 bis April 2013

BETEILIGTE

Lehrstuhl für Systemsimulation
Prof. Rüde

Die koronare Herzkrankheit stellt in den westlichen Industrienationen eine der häufigsten Todesursachen dar. Eine Abnahme des Querschnitts der Koronararterien führt zur Myokardischämie, einer Unterversorgung des Herzmuskels mit Sauerstoff, oder im schlimmeren Fall auch zum Myokardinfarkt, dem Absterben von Herzmuskelzellen. Moderne CT-Scanner erlauben die hochauflösende Vermessung der Koronararterien und die Detektion von Stenosen in den Koronararterien; die Beurteilung der hämodynamischen Auswirkungen einer solchen Engstelle im Gefäßverlauf erfordert jedoch viel Erfahrung auf Seiten der diagnostizierenden Radiologen.

Am ZISC werden deshalb in einer Kooperation des Lehrstuhls für Systemsimulation (LSS) und der Siemens AG Methoden zur Simulation der Myokardperfusion erforscht. Dabei soll die Hämodynamik innerhalb der Koronararterien mittels der Lattice-Boltzmann-Methode simuliert werden. Daran gekoppelt wird eine Simulation der Perfusion des Blutes durch das Herzmuskelgewebe, die mit einem Mehrgitterverfahren realisiert werden soll. Für beide Simulationskomponenten kommt waLBerla, ein Framework für massiv-parallele Simulationen, zum Einsatz, welches am LSS fortwährend entwickelt wird. Die Siemens AG bringt neben der finanziellen Unterstützung ihr Wissen im Bereich der medizinischen Bildverarbeitung in das Projekt mit ein.

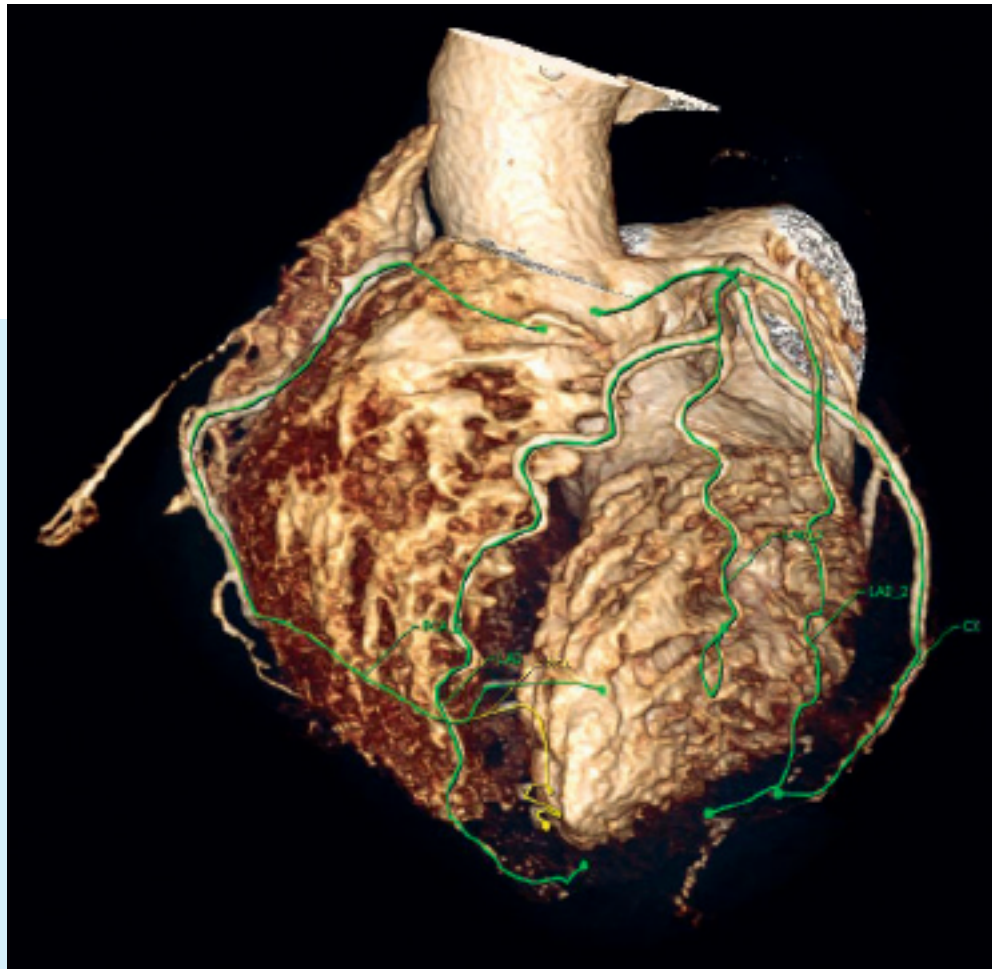
Die Ergebnisse der Kooperation sollen es ermöglichen, dem Radiologen eine bessere Datengrundlage für die Diagnose zur Verfügung zu stellen. Durch genauere Diagnosen könnte in der Folge die Zahl der überflüssigen und versäumten Behandlungen verringert werden.

Autor: Christian Godenschwager

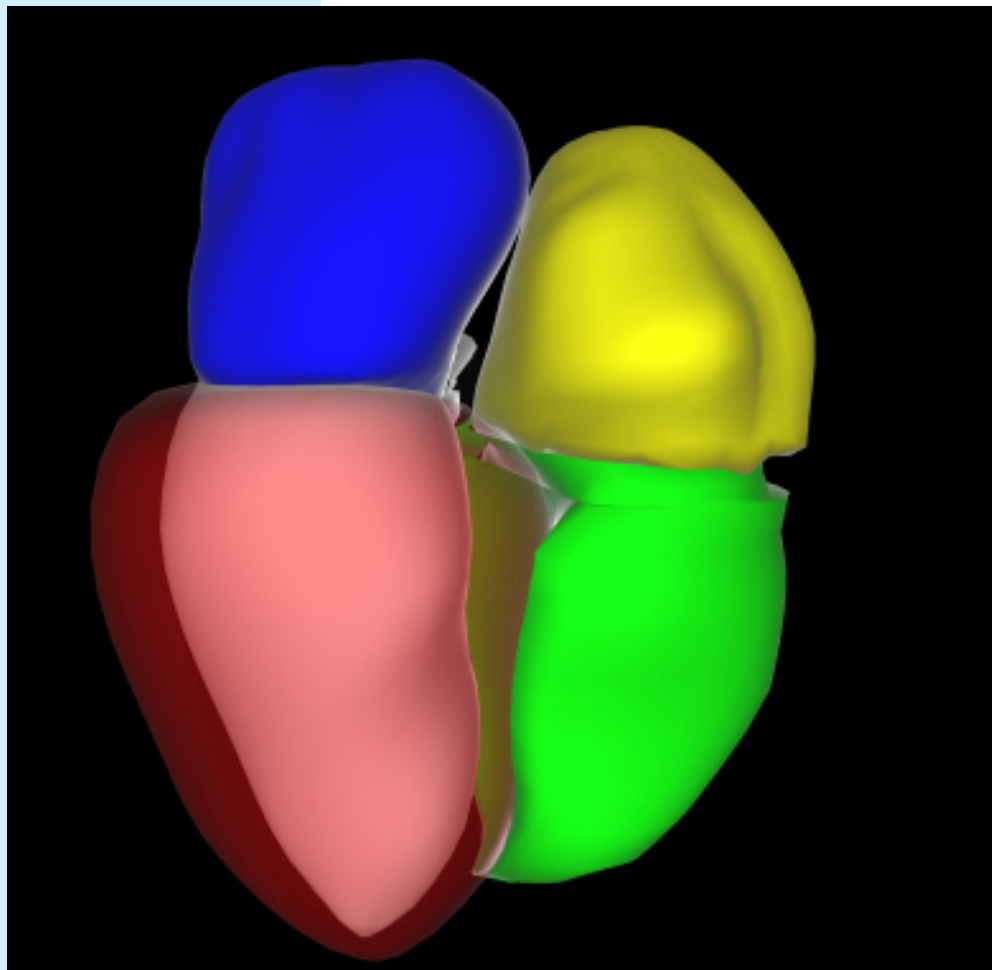


Patient im CT-Scanner © Siemens AG

3D-Volumenrendering einer CT-Aufnahme des Herzens mit den enthaltenen Koronararterien



Segmentierte Herzkammern



WORKSHOPS

GPU-Computing Workshop

Ein wesentlicher Aspekt für die Gründung des Zentralinstituts für Scientific Computing der Universität Erlangen-Nürnberg war es, die Kooperation der Lehrstühle und Institute innerhalb der Universität zu fördern. Am 6. April 2011 fand in diesem Sinne der erste interne Workshop statt. Das Thema des Workshops war „GPU-Computing“.

GPU-Computing hat sich in den letzten Jahren zu einem Modebegriff entwickelt. Es findet keine Konferenz mehr ohne zumindest einen Vortrag zu GPU-Computing statt, und kein Paper, das Performance-Optimierung thematisiert, darf GPU-Computing unerwähnt lassen. Allerdings liegen Licht und Schatten oft sehr dicht beieinander. Während einige Gruppen versuchen, seriöse Beiträge auf diesem Gebiet zu leisten, werden an anderer Stelle oft utopische Performance-Steigerungen gegenüber herkömmlichen CPU-Implementierungen vermeldet. Aufgrund dessen hat sich allgemein die falsche Meinung durchgesetzt, dass GPUs CPUs praktisch immer überlegen sind und Performance-Steigerungen um den Faktor 100 leisten können. Neben der Förderung der Kooperationen der Lehrstühle untereinander war es deshalb ein weiteres Ziel des Workshops, die Fakten von den Mythen um GPUs trennen zu können.

Mit mehr als 30 Teilnehmern, die vor allem aus der Informatik, aber auch z. B. aus der Chemie und der Medizin kamen, kann der Workshop als Erfolg bezeichnet werden. Alle Forschungsgruppen innerhalb des ZISC, die sich mit GPU-Computing im Bereich des HPC beschäftigen, konnten am Workshop teilnehmen und sich so an einem regen Erfahrungsaustausch in angenehmer Atmosphäre beteiligen. Die angesprochenen Themengebiete waren dabei sehr breit gestreut: Von einem Überblick und Vergleich der Architekturen über Erfahrungsberichte von gängigen Lösungsverfahren für z. B. Gleichungssysteme bis hin zu Multi-GPU-Anwendungen war alles vertreten. Profitiert haben die einzelnen Forscher nicht nur dadurch, dass sie bei diesem Workshop Werbung für die eigene Arbeit machen konnten, sondern auch, indem sie einen Überblick über weitere GPU-Projekte innerhalb des ZISC bekommen haben. Es konnten neue Kooperationen geschmiedet und gemeinsame Forschungsvorhaben vereinbart werden.

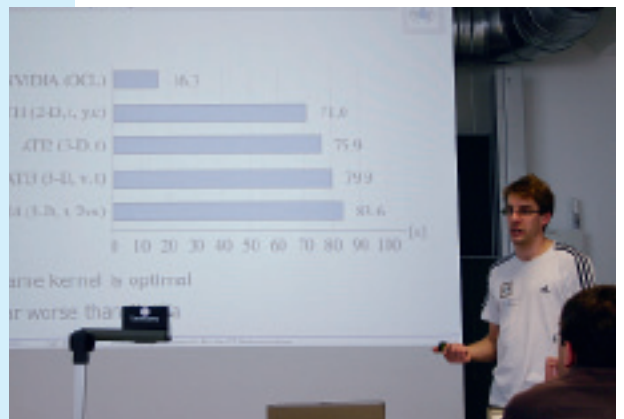
Autor: Dr. Klaus Iglberger



Der Kursraum für den GPU-Computing Workshop am Lehrstuhl für Systemsimulation



Rege Diskussionen während der Kaffeepausen



Hannes Hofmann bei seinem Vortrag „Evaluation von OpenCL für die CT-Rekonstruktion“

WORKSHOPS

1. ZISC Multicore- Technologie- Briefing

Der Trend in Richtung Multicore-Architektur hat die Entwicklung der Standardprozessoren in den letzten Jahren dominiert. Programmierer können sich nicht mehr wie noch vor zehn Jahren auf eine automatische Steigerung der Performance des Einzelkerns verlassen. Um bei technisch-wissenschaftlichen Simulationen nicht einen Großteil des Potenzials der Hardware zu verschwenden, bedarf es nun der gezielten Entwicklung paralleler Software. Diese Trendwende wirft allerdings einige Fragen auf: Was sind die relevanten Eigenschaften von Multicore-Chips? Wie sind GPGPUs zu bewerten? Wie wird die Software-Entwicklung beeinflusst? Was sind die Grenzen der Parallelität? Gibt es Tools, die mich bei der Parallelisierung unterstützen können?

Diese und weitere Fragen rund um das Thema Multicore-Software-Entwicklung wurden auf dem 1. ZISC Multicore-Technologie-Briefing am 13. Oktober 2011 beantwortet. Die eintägige Erlanger Veranstaltung sollte das Verständnis für die Trendwende in der Architekturentwicklung schaffen sowie das notwendige Grundwissen zur Entwicklung skalierender, paralleler Software vermitteln. Zudem wurden einige Mythen, insbesondere bezüglich der Verwendung und Leistungsfähigkeit von GPGPUs, aus der Welt geschafft.

Mit mehr als 30 Teilnehmern aus Industrie und Hochschulen kann das Briefing als voller Erfolg gewertet werden. Die hohe Zahl industrieller Teilnehmer (20) unterstreicht die hohe wirtschaftliche Bedeutung des Themas. Zunächst wurden die technischen Hintergründe für die momentane Entwicklung beleuchtet: Moore's Law ist zwar weiterhin gültig, aber die Rechenleistung einzelner Kerne kann nicht mehr durch immer höhere Taktfrequenzen gesteigert werden. Basierend auf diesen Erkenntnissen konnte dann im nächsten Vortrag „Neue Prozessoren – neue Software?“ der Bogen zur Software-Entwicklung gespannt werden. Dort wurde auch erklärt, wie die immer weiter steigende Parallelität der Hardware am besten

genutzt werden kann. Der dritte Vortrag fasste dann die momentan verfügbare Software zur Parallelisierung zusammen. Kurz wurden prinzipielle Vor- und Nachteile von OpenMP, MPI, CUDA und OpenCL diskutiert.

Nach dem Mittagessen wurde das Thema GPGPUs diskutiert. Es wurden deutlich die Anwendungsgebiete und die tatsächlichen Möglichkeiten des Grafikkartenprogrammierens aufgezeigt und mit allerlei falschen Erwartungen und Vorurteilen aufgeräumt. Im nächsten Vortrag wurde das Thema Programmiersprache/Programmierstil aufgegriffen. Anhand einiger Beispiele aus bekannten Anwendungen wurde die Frage diskutiert, welcher Programmierstil für performante HPC-Anwendungen bevorzugt werden sollte. Im letzten Vortrag wurde den Teilnehmern anhand zweier Fallbeispiele die Bedeutung des Performance-Engineering erläutert.

Als besonderes Highlight des Multicore-Technologie-Briefings waren die „Breakout Sessions“ angekündigt. Im Anschluss an die Vorträge hatten die Vertreter der Industrie die Gelegenheit, in persönlichen Gesprächen mit den Multicore-Experten der HPC-Gruppe des RRZE ihre Probleme zu diskutieren. Die Industrievertreter zeigten sich begeistert, denn in diesem Rahmen konnten Fragestellungen vertieft und Problemlösungen im Detail erörtert werden.

Nach dem Briefing zeigten sich die Veranstalter zufrieden mit der Veranstaltung. Die erfreulich hohe Teilnehmerzahl und die interessanten, regen Diskussionen lassen vermuten, dass dem 1. ZISC Multicore-Technologie-Briefing in ein paar Monaten eine zweite Auflage folgen wird.

Autor: Dr. Klaus Iglberger



Dr. Georg Hager am Anfang seines Vortrags
„Parallel code for multicore systems“

BESUCH AUS TAIWAN

Besuch von Shiu-Wu Chau



Shiu-Wu Chau genießt das gute Erlanger Kellerbier!

Im Spätsommer konnte das ZISC einen besonderen Gast begrüßen: Shiu-Wu Chau, Professor an der National Taiwan University of Science and Technology, nutzte die Gelegenheit, einen Forschungsaufenthalt in Prag um einen Besuch in Erlangen zu erweitern. Prof. Chau beschäftigt sich mit Strömungssimulationen für wissenschaftliche und industrielle Anwendungen und deckt dabei ein weites Feld ab. In seinem Gastvortrag, den er am 2. September 2011 am ZISC hielt, diskutierte er Methoden zur Simulation von Strömungen in drei seiner vielen Anwendungsgebiete: In der Mikrofluidik geht es ihm speziell um Musterbildung von DNA-Strängen auf mikrostrukturierten Substratoberflächen. Bei der Herstellung mechanisch belastbarer Teile mittels Spritzgussverfahren ist die korrekte Modellierung des rheologischen Verhaltens der Polymere von außerordentlicher Wichtigkeit. Als drittes Thema wurde die Modellierung der elektrischen und magnetischen Effekte im thermalen Plasma-Fluss diskutiert. Da Prof. Chau vor acht Jahren in Hamburg promoviert hat, sah er sich motiviert, den Vortrag auf Deutsch zu halten, was ihm recht gut gelang.

Dr. Stefan Donath, der Prof. Chau 2010 auf der Parallel CFD Conference in Kaohsiung, Taiwan, kennenlernte und ihn auch 2011 als Teilnehmer bei seinem Mikrofluidik-Minisymposium auf der SIAM CSE Conference 2011 in Reno begrüßen durfte, freute sich besonders über den Besuch. So konnte er die Gelegenheit nutzen, seinem Gast die Vorzüge des fränkischen Bieres und die Schönheit der eigenen Heimat vorzuführen: Ein kurzer Tagesausflug führte in das UNESCO-Weltkulturerbe der Bamberger Innenstadt und gab dem Burgenfan Chau die Chance, die Altenburg zu besichtigen. Natürlich wurde auch keine Gelegenheit ausgelassen, sich bei einem kühlen Bier in einem Biergarten niederzulassen.

BESUCH AUS RUMÄNIEN

Besuch von Constantin Popa

Im August 2011 besuchte Prof. Dr. Constantin Popa, Leiter des Departments für Informatik und angewandte Mathematik der Ovidius Universität in Konstanza (Rumänien) das ZISC. Prof. Popa besucht die Universität Erlangen regelmäßig seit etwa zehn Jahren und arbeitet zusammen mit Doktoranden an vielen Mathematik-lastigen Problemen, welche sich oftmals während Doktorarbeiten ergeben.

Bei den letzten Besuchen arbeitete Prof. Popa an der Regularisierung von Kontaktproblemen in der starren Mehrkörperdynamik mit. Kontakte werden hierbei typischerweise als nachgiebig betrachtet. Diese Deformierbarkeit ist jedoch in der Regel sehr geringfügig und führt daher zu Problemen mit der Steifigkeit. Anstatt die Nachgiebigkeit tatsächlich in Simulationen aufzulösen, kann man das Problem vereinfachen, indem man die Kontakte als idealisiert starr annimmt. Dieser Grenzübergang führt zu einer Unterbestimmtheit des Systems. Bei früheren Besuchen wurde der Grenzübergang im zeitdiskreten Problem eingehend analysiert.² Es wurde geschlussfolgert, dass die Lösung des nachgiebigen Systems beim Grenzübergang gegen die (eindeutig bestimmte) Lösung mit gewichteter minimaler Norm des starren Systems konvergiert. Aufgrund der Eigenheiten von Kontakten ergeben sich keine Gleichungsbedingungen, sondern Komplementaritätsbedingungen, welche im linearen Fall zu linearen Komplementaritätsproblemen (LCP)

führen.

Algorithmen zur Bestimmung von Minimum-Norm-Lösungen von LCPs sind allerdings rar. Ein scheinbar passender Kandidat fand sich im Gebiet der maximal monotonen Operatoren: der Regularized Proximal Point Algorithm (reg. PPA). Mit Hilfe von Prof. Popa konnte ein einfacher Zusammenhang zwischen den speziellen LCPs und den maximal monotonen Operatoren gezeigt werden. Jedoch musste sich der Algorithmus noch in der Praxis etablieren: Numerische Ergebnisse fehlten in den ursprünglichen Veröffentlichungen des Algorithmus komplett.³ Daher wurde die Methode mit verschiedenen Kontaktproblemen der starren Mehrkörperdynamik implementiert und getestet. Die numerischen Ergebnisse haben aufgedeckt, dass die theoretischen Überlegungen an sehr strenge Bedingungen des Fehlerterms geknüpft sind.¹ Die Tests weisen darauf hin, dass diese Bedingungen in der Praxis zu strikt sind, um verlässliche Ergebnisse zu erhalten. Diese Schlussfolgerung konnte nur gezogen werden, da sowohl Theorie als auch Numerik untersucht wurden. Dies wiederum war nur durch das Zusammenführen von Expertisen aus verschiedenen Gebieten möglich.

Autor: Tobias Preclik

LITERATUR

- 1 C. Popa, T. Preclik, and U. Råde. Iterative Regularized Solution of Symmetric and Positive Semi-Definite Linear Complementarity Problems. Technical report, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nuremberg, November 2011.
- 2 T. Preclik, U. Råde, and C. Popa. Resolving Ill-posedness of Rigid Multibody Dynamics. Technical report, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nuremberg, December 2010.
- 3 H.-K. Xu. A Regularization Method for the Proximal Point Algorithm. *J. of Global Optimization*, 36(1):115–125, September 2006.

ZISC-MITGLIEDER

Liste der ZISC-Mitglieder A–H

Prof. Dr. Wolfgang Achtziger

Professur für Angewandte Mathematik
Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-6 71 31 · E-Mail: achtziger@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Gisela Anton

Lehrstuhl für Experimentalphysik (Teilchen- und Astroteilchenphysik)
Department Physik

Erwin-Rommel-Straße 1 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 71 51 · E-Mail: gisela.anton@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Eberhard Bänsch

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik III
Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-6 72 02 · E-Mail: baensch@am.uni-erlangen.de

PD Dr. Stefan Becker

Lehrstuhl für Prozessmaschinen und Anlagentechnik
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Cauerstraße 4 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 94 55 · E-Mail: sb@ipat.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Erik Bitzek

Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaften (Allgemeine Werkstoffeigenschaften)
Department Werkstoffwissenschaften

Martensstraße 5 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 75 07 · E-Mail: erik.bitzek@ww.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Rainer Böckmann

Professur für Computational Biology
Department Biologie

Stadtstraße 5 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 54 09 · E-Mail: rboeckma@biologie.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Wolfgang Borchers

Professur für Angewandte Mathematik I
Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-6 72 09 · E-Mail: wolfgang.borchers@am.uni-erlangen.de

apl. Prof. Dr. Tim Clark

Computer-Chemie-Centrum (CCC)
Department Chemie und Pharmazie

Nägelsbachstraße 25 · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 29 48 · E-Mail: clark@chemie.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Antonio Delgado

Lehrstuhl für Strömungsmechanik
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Cauerstraße 4 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 95 00 · E-Mail: antonio.delgado@Istm.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Michael Döllinger

Phoniatische & Pädaudiologische · Abteilung in der Hals-Nasen-Ohren-Klinik
Medizinische Fakultät

Bohlenplatz 21 · 91054 Erlangen
Telefon: 091 31/85-3 38 14 · E-Mail: michael.doellinger@uk-erlangen.de

Prof. Dr. Ben Fabry

Lehrstuhl für Physikalisch-Medizinische Technik
Department Physik

Helmut-Anzeneder-Straße 26 · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 56 10 · E-Mail: bfabry@biomed.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Dietmar Fey

Lehrstuhl für Informatik 3 (Rechnerarchitektur)
Department Informatik

Martensstraße 3 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 70 03 · E-Mail: dietmar.fey@informatik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Reinhard German

Lehrstuhl für Informatik 7 (Rechnernetze und Kommunikationssysteme)
Department Informatik

Martensstraße 3 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 79 16 · E-Mail: reinhard.german@informatik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Andreas Görling

Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Department Chemie und Pharmazie

Egerlandstraße 3 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 77 66 · E-Mail: goerling@chemie.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Günther Greiner

Lehrstuhl für Informatik 9 (Graphische Datenverarbeitung)
Department Informatik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 99 19 · E-Mail: greiner@informatik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Günther Grün

Professur für Angewandte Mathematik I
Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-6 72 20 · E-Mail: gruen@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Bernhard Hensel

Professur für Physik in der Medizin
Department Physik

Henkestraße 91 · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 56 32 · E-Mail: bernhard.hensel@biomed.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Joachim Hornegger

Lehrstuhl für Informatik 5 (Mustererkennung) · Department Informatik

Martensstraße 3 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 78 83
E-Mail: joachim.hornegger@informatik.uni-erlangen.de

ZISC-MITGLIEDER**Liste der ZISC-Mitglieder I–N****Dr. Klaus Iglberger**

Zentralinstitut für Scientific Computing

Martensstraße 5a · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 07 81

E-Mail: klaus.iglberger@zisc.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Johannes Jahn

Professur für Angewandte Mathematik

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 71 32 · E-Mail: jahn@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Peter Knabner

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik I

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 72 26 · E-Mail: peter.knabner@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Carolin Körner

Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaften (Werkstoffkunde u. Technologie d. Metalle)

Department Werkstoffwissenschaften

Martensstraße 5 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 75 28 · E-Mail: carolin.koerner@ww.uni-erlangen.de

Dr. Harald Köstler

Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation)

Department Informatik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 83 59 · E-Mail: harald.koestler@informatik.uni-erlangen.de

PD Dr. Serge Kräutle

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik I

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 72 13 · E-Mail: serge.kraeutle@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Dmitri Kuzmin

Professur für Angewandte Mathematik III (Wissenschaftliches Rechnen)

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 71 95 · E-Mail: kuzmin@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Reinhard Lerch

Lehrstuhl für Sensorik

Department Elektrotechnik, Elektronik und Informationstechnik

Paul-Gordan-Straße 3/5 · 91052 Erlangen

Telefon: 091 31/85-23131 · E-Mail: reinhard.lerch@lse.eei.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Günter Leugering

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 71 35 · E-Mail: leugering@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Sigrid Leyendecker

Lehrstuhl für Technische Dynamik

Department Maschinenbau

Konrad-Zuse-Straße 3/5 · 91052 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 10 01 · E-Mail: sigrid.leyendecker@ltd.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Nicole Marheineke

Professur für Angewandte Mathematik I (Mathematische Modellierung)

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 72 14 · E-Mail: nicole.marheineke@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Alexander Martin

Lehrstuhl für Wirtschaftsmathematik

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 71 63 · E-Mail: alexander.martin@math.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Klaus Mecke

Lehrstuhl für Theoretische Physik

Department Physik

Staudtstraße 7/B3 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 84 41 · E-Mail: klaus.mecke@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Julia Mergheim

Professur Computational Mechanics

Department Maschinenbau

Egerlandstraße 5 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 85 21 · E-Mail: julia.mergheim@itm.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Marion Merklein

Lehrstuhl für Fertigungstechnologie

Department Maschinenbau

Egerlandstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 71 40 · E-Mail: m.merklein@lft.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Bernd Meyer

Professur für Computational Chemistry

Department Chemie und Pharmazie

Nägelsbachstraße 25 · 91052 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 65 97 · E-Mail: bernd.meyer@chemie.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Yves Muller

Lehrstuhl für Biotechnik (Proteinstruktur und -design)

Department Biologie

Henkestraße 91 · 91052 Erlangen

Telefon: 091 31/85-2 30 82 · E-Mail: ymuller@biologie.uni-erlangen.de

PD Dr. Nicolas Neuß

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik III

Department Mathematik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen

Telefon: 091 31/85-6 72 08 · E-Mail: neuss@am.uni-erlangen.de

ZISC-MITGLIEDER

Liste der ZISC-Mitglieder P – Z

Prof. Dr. Oleg Pankratov

Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik
Department Physik

Staudtstraße 7/B2 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 88 24 · E-Mail: oleg.pankratov@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Wolfgang Peukert

Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Cauerstraße 4 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 94 00 · E-Mail: w.peukert@lfg.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Christoph Pflaum

Professur für Informatik (Numerische Simulation mit Höchstleistungsrechnern)
Department Informatik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 86 92 · E-Mail: pflaum@informatik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Thorsten Pöschel

Lehrstuhl für Multiscale Simulation of Particulate Systems
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Nägelsbachstraße 49b · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 08 65 · E-Mail: thorsten.poeschel@eam.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Ulrich Rüde

Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation)
Department Informatik

Cauerstraße 11 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 89 24 · E-Mail: ulrich.ruede@informatik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Eberhard Schlücker

Lehrstuhl für Prozessmaschinen und Anlagentechnik
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Cauerstraße 4 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 94 50 · E-Mail: sl@ipat.uni-erlangen.de

Dr. Gerd Schröder-Turk

Lehrstuhl für Theoretische Physik
Department Physik

Staudtstraße 7/B3 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 84 48 · E-Mail: gerd.schroeder-turk@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Ana-Suncana Smith

Professur für Theoretische Physik
Department Physik

Nägelsbachstraße 49b · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 08 42 · E-Mail: smith@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Uwe Sonnewald

Lehrstuhl für Biochemie
Department Biologie

Staudtstraße 5 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 82 55 · E-Mail: usonne@biologie.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Paul Steinmann

Lehrstuhl für Technische Mechanik
Department Maschinenbau

Egerlandstraße 5 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 85 01 · E-Mail: steinmann@ltm.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Heinrich Sticht

Professur für Bioinformatik · Institut für Biochemie
Medizinische Fakultät

Fahrstraße 17 · 91054 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 46 14 · E-Mail: h.sticht@biochem.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Michael Stingl

Professur für Mathematische Optimierung
Department Mathematik

Nägelsbachstraße 49b · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 08 55 · E-Mail: stingl@am.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Michael Thoss

Professur für Theoretische Physik · Department Physik
(Schwerpunkt Elektronentransport in Molekülen)

Staudtstraße 7 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 88 34 · E-Mail: michael.thoss@physik.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Gerhard Wellein

Professur für Höchstleistungsrechnen
Department Informatik

Martensstraße 1 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 81 36 · E-Mail: gerhard.wellein@rrze.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Karl-Ernst Wirth

Lehrstuhl für Feststoff- und Grenzflächenverfahrenstechnik
Department Chemie- und Bioingenieurwesen

Cauerstraße 4 · 91058 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 94 03 · E-Mail: k.e.wirth@lfg.uni-erlangen.de

Prof. Dr. Dirk Zahn

Professur für Theoretische Chemie
Department Chemie und Pharmazie

Nägelsbachstraße 25 · 91052 Erlangen
Telefon: 091 31/85-2 69 38 · E-Mail: dirk.zahn@chemie.uni-erlangen.de



Impressum

Zentralinstitut für Scientific Computing **ZISC**
Martensstraße 5a · 91058 Erlangen
www.zisc.uni-erlangen.de

Geschäftsführer: Dr. Klaus Iglberger
Telefon: 0 91 31/85 - 2 07 81
E-Mail: klaus.iglberger@zisc.uni-erlangen.de

Sekretariat: Elzbieta Beetz
Telefon: 0 91 31/85 - 20780
Fax: 0 91 31/85 - 20785
E-Mail: elzbieta.beetz@zisc.uni-erlangen.de

Redaktion: Dr. Klaus Iglberger
Gestaltung: Gerd Beck

Zentralinstitut für Scientific Computing ZISC
JAHRESBERICHT 2011

