Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin

Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

PETER DEUFLHARD RUPERT KLEIN
ALEXANDER REINEFELD HINNERK STÜBEN
(HRSG.)

Power-User und Supercomputer

Workshop, 19.–20. Mai 1999

Abstract-Sammlung

Preprint SC 99–19 (Juni 1999)

Vorwort

Die sechs norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein haben die in Deutschland einzigartige Initiative zur Einrichtung eines gemeinsamen *Höchstleistungsrechners Nord (HLRN)* gestartet. Dieser Zusammenschluß ist vom Wissenschaftsrat als „wissenschaftspolitisch beispielhaftes Vorgehen" gewürdigt worden, das „längerfristig Bestand haben sollte" (Drs. 3852/99 vom 22.01.99, S. 50).

Heute stehen den Wissenschaftlern immer leistungsfähigere Systeme direkt am Arbeitsplatz zur Verfügung. In der Folge haben sich deshalb die Methoden derart verfeinert, daß immer realistischere Modelle gerechnet werden sollen, wozu wiederum Rechner der höchsten Leistungsklasse erforderlich sind. Ein solches System soll mit dem HLRN im norddeutschen Raum bereitgestellt werden.

Mit dem Bedarf nach höherer Rechenleistung wachsen die Anforderungen an die einzusetzende Anwendungssoftware. Diese ergeben sich aus dem Bestreben, die Natur immer genauer zu modellieren, was beispielsweise die Kopplung von Programmen nach sich zieht, die bisher isolierte Teilprobleme behandelt haben. Der Einsatz moderner numerischer Algorithmen stellt eine weitere Herausforderung dar, insbesondere im Hinblick auf die effiziente Parallelisierung.

Ein wichtiger Bestandteil der HLRN-Initiative sind regelmäßige Veranstaltungen, die den Gedankenaustausch der Anwendergruppen des *High Performance Computing* fördern sowie gemeinsame Aktivitäten anregen und koordinieren sollen.

Als erstes Treffen dieser Art veranstaltete das ZIB am 19. und 20. Mai 1999 den Workshop *Power-User und Supercomputer*. Die Ziele dieses Workshops waren: (a) die potentiellen Nutzer des geplanten HLRN zusammenzubringen, (b) bestehende und neue Anwendungsbereiche zu identifizieren und (c) die Anforderungen der zukünftigen Nutzerschaft des HLRN an Hardware und Infrastruktur zu erfassen.

Mit ca. 80 Teilnehmern und 29 Vorträgen aus dem gesamten norddeutschen Raum stieß der Workshop auf erfreulich hohe Resonanz. In den Präsentationen ist noch einmal sichtbar geworden, daß es eine große aktive Anwenderschaft für den HLRN gibt, die sich den Herausforderungen des Höchstleistungsrechnens stellt, um mit dem Instrument *Supercomputer* Forschung mit norddeutschem Profil zu betreiben.

Dieser Report enthält die Kurzfassungen der Vorträge in der Reihenfolge der Sitzungen. Sie umfassen die zentralen natur- und ingenieurwissenschaftlichen Themen des Höchstleistungsrechnens:

- Klima- und Geowissenschaften
- Strömungsmechanik und Turbulenz
- Astrophysik
- Chemie
- Materialwissenschaften und Molekülphysik
- Gitterfeldtheorie

Am Ende jedes Veranstaltungstages haben Plenumsdiskussionen stattgefunden. Die Ergebnisse dieser Diskussionen sind im letzten Beitrag zusammengefaßt.

Berlin, im Juni 1999

Peter Deuflhard
Rupert Klein
Alexander Reinefeld
Hinnerk Stüben

Inhalt

Klima- und Geowissenschaften I

Klimamodellierung am Institut für Meteorologie – eine Übersicht 1
P. Braesicke, U. Langematz*

Klimasystemmodellierung 3
*M. Claussen**

LLM – ein hochauflösendes Modell in der bodennahen Atmosphäre 5
H.-J. Herzog, U. Schubert, G. Vogel*

Numerische Modellierung der Zirkulation des Atlantischen Ozeans 7
J. Dengg, R. Redler, C.W. Böning*

Probleme der statistischen Mustererkennung 9
F.-W. Gerstengarbe, P.C. Werner*

Klima- und Geowissenschaften II

Ozean–Eis–Atmosphäre–Modellierung im Südozean 11
A. Beckmann, N. Rakowsky, W. Hiller*

Hochauflösende Simulation der atmosphärischen Variabilität mit einem gekoppelten Atmosphäre-Ozean-Meereismodell der Arktis 14
W. Hiller, K. Dethloff, T. Kandlbinder, B. Fritzsch, A. Rinke, R. Gerdes, C. Köberle, D. Olbers, J. Behrens, S. Frickenhaus*

SPRINT-S: Eine parallele Simulationsumgebung 17
*M. Flechsig**

Morphodynamik der Küstenregion 19
*D.P. Eppel**

Ein LES-Modell für Massivparallelrechner mit verteiltem Speicher – Modellstruktur und erste Tests 20
*S. Raasch**

Strömungsmechanik und Turbulenz

Rechnerbedarf bei der hochauflösenden Simulation 22
*H.-J. Kaltenbach**

Numerische Untersuchungen zum qualitativen Lösungsverhalten in dreidimensionalen Konvektionsströmungen 24
A. Demircan, F. Feudel, S. Rüdiger, N. Seehafer*

Berechnung turbulenter aerodynamischer Strömungen auf massiv parallelen Rechnern 26
M. Franke, T. Rung, H. Lübcke, J. Beutner, F. Thiele*

Simulation der Selbstentzündung von Brennstofftropfen in einer Reihe 28
T. Coordes, S. Schnaubelt, A. Bobsin, J.C. Dittmer, C. Eigenbrod, H.J. Rath*

Astrophysik

Die zeitliche Entwicklung stellarer Instabilitäten 30
S. Chernigovskij, W. Glatzel, K.J. Fricke*

Prozesse im interstellaren Medium auf unterschiedlichen Skalen 32
*G. Hensler**

Computing Gravitational Waves, Neutron Stars, and Black Hole Collisions on Large Scale Computers 34
*E. Seidel**

N-Körper-Simulation zur Galaxienentwicklung 36
*C. Theis**

Staubbildung in langperiodisch Veränderlichen 38
J.M. Winters, E. Sedlmayr*

Chemie

Theoretische Untersuchungen zu Struktur und Reaktivität von Übergangsmetall-π-Komplexen mit den Übergangsmetallen Chrom, Eisen und Cobalt 40
A. Pfletschinger, Wolfram Koch, H.-G. Schmalz*

Problemstellungen bei Rechnungen an Übergangsmetall-vermittelten Reaktionen am Beispiel des $[Fe,S,H_2]^+$-Systems 41
S. Bärsch, I. Kretzschmar, D. Schröder, H. Schwarz*

Molekulare Wellenpaketdynamik auf dem Parallelrechner 42
I. Andrianov, J. Manz, M. Oppel, K. Sundermann*

Materialwissenschaften und Molekülphysik

Vielteilcheneffekte und Spektroskopie an Festkörperoberflächen 44
*W. Schattke**

MD Modellierungen in der Materialphysik, speziell zu den metallenen Gläsern 46
B. Böddeker, H. Teichler*

Gitterfeldtheorie

Struktur der Materie – über die fundamentale Bedeutung von Quantenfeldtheorien und die Schwierigkeit ihrer Bearbeitung 48
*V. Linke**

Bericht zum „ECFA Panel on the Future of Lattice QCD in Europe“ 49
*F. Jegerlehner**

Compact QED with Wilson fermions 50
*A. Hoferichter**

Die Kraft zwischen statischen Ladungen: „string breaking“ 52
*F. Knechtli, R. Sommer**

Untersuchungen der QCD mit verbesserten Wirkungen – Erfahrungen mit der T3E-Architektur 53
S. Capitani, M. Göckeler, R. Horsley, B. Klaus, W. Kürzinger, V. Linke, D. Petters, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson*

Diskussion

Ergebnisse der Diskussionen 55
A. Reinefeld, W. Baumann, T. Steinke, H. Stüben

*Vortragende

Klimamodellierung am Institut für Meteorologie - eine Übersicht über aktuelle und zukünftige Projekte

Peter Braesicke und Ulrike Langematz
Institut für Meteorologie, FU Berlin
Carl-Heinrich-Becker-Weg 6-10, D-12165 Berlin
brae@strat01.met.fu-berlin.de bzw. lang@strat01.met.fu-berlin.de

4. Mai 1999

Grundlagen der Klimamodellierung

Die physikalischen Grundlagen der Klimamodellierung werden durch die bekannten Erhaltungssätze gegeben:

- Impulserhaltung $\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -2\Omega \times \mathbf{v} - \rho^{-1}\nabla p + \mathbf{g} + \mathbf{F}\right)$,
- Massenerhaltung $\left(\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v} + C - E\right)$,
- Energieerhaltung $\left(\frac{DI}{Dt} = -p\frac{d\rho^{-1}}{dt} + Q\right)$ und dem
- idealen Gasgesetz $(p = \rho RT)$.

Die Formulierung dieser Erhaltungssätze beinhaltet bereits das rotierende, sphärische Koordinatensystem der Erde. Da in der Atmosphäre viele unterschiedliche Prozesse ablaufen, die nicht immer geschlossen darstellbar sind (z.B. kleinskalige Turbulenz), werden Parametrisierungen bestimmter Vorgänge benötigt, die dann mit in die Erhaltungssätze eingehen ($\mathbf{F}, C, E$ und Q).

Initialisierung („startup data“, Ergebnis vorhergegangener Integrationen)		
↓		
$*$ Transformation der spektralen Felder auf Gitterpunkte		
↓		
Berechnung der „Gitterpunktsphysik“		
↓		
Rücktransformation in die spektrale Darstellung	$\longrightarrow$	Ausgaben zur Analyse
↓		
ein Zeitintervall integrieren (und zurück zu $*$)	$\longrightarrow$	Ausgaben zur Analyse bzw. für neue Integrationen

Tabelle 1: Flußdiagramm eines spektralen Klimamodells.

Tabelle 1 zeigt eine schematische Übersicht der numerischen Integration eines *spektralen* Klimamodells. Für diese numerische Behandlungsweise wird die Impulserhaltung in Divergenz- und Vorticityform formuliert. Die Zeitintegration wird mit den spektralen Koeffizienten durchgeführt, und die Parametrisierungen werden auf Gitterpunkten berechnet. Das in Berlin verwendete Klimamodell, ein sogenanntes Climate-Middle Atmosphere Model (CMAM), entspricht im wesentlichen diesem Schema.

Aktuelle Projekte

Das Berliner CMAM wird im Rahmen unterschiedlicher Drittmittel geförderter Projekte eingesetzt: Im Rahmen des BMBF geförderten Schwerpunkts Ozonforschung wird es im Projekt MOVIES (Modellierung der Ozonvariabilität und ihres Einflusses auf die Struktur der Troposphäre und Stratosphäre) eingesetzt. Hierbei wird besonders der

Einfluß geänderter Ozonverteilungen auf die troposphärische und stratosphärische Dynamik betrachtet. Im Rahmen des EU geförderten Projekts PVC (Polar Vortex Change) liegt das Hauptaugenmerk auf der Variabilität des polaren Wirbels im Winter auf der Nordhemisphäre. Ein Verständinis dieser Variabilität ist wichtig, um z.B. die Auswirkungen des Ozonabbaus und des Treibhauseffekts auf die mittlere Atmosphäre beurteilen zu können.

Modellbeschreibung

Tabelle 2 faßt die wesentlichen Eigenschaften und Parametrisierungen des Berliner CMAMs zusammen, welches in seinem prinzipiellen Ablauf der Tabelle 1 entspricht.

based on	:	ECMWF/ECHAM T21-L19 in Berlin: extensions for the middle atmosphere (MA) (Langematz, 1991) (see also: Langematz and Pawson, 1997; Pawson et al., 1998)
versions in use	:	T21 ($5.6^\circ \times 5.6^\circ$) - L19 / L34 / L70
vertical coordinate	:	hybrid, orographic σ-coordinate (troposphere) / *p*-coordinate (MA)
vertical resolution in the MA	:	$\sim$ 3.5 km (L34) or $\sim$ 1 km (L70) with model top in 0.0068 hPa ($\sim$ 84 km)
radiation	:	Morcrette-scheme for O_3, CO_2 and H_2O (Morcrette, 1991) absorption of solar radiation due to O_3 and O_2 above 70 hPa (Shine and Rickaby, 1989; Strobel, 1978) Newtonian-cooling for IR above 60 km
ozone	:	climatology (Fortuin and Langematz, 1994; Kubitz, 1996)
vertical diffusion	:	Louis (1979), with low wind correction
horizontal diffusion	:	enhanced scale-selectivity (Laursen and Eliasen, 1989)
gravity wave drag	:	Rayleigh-friction (upper mesosphere)
clouds	:	stratiform - prognostic scheme (Roeckner and Schlese, 1985) deep convection - Kuo scheme (Kuo, 1974) shallow convection - Tiedtke scheme (Tiedtke et al., 1988)
ocean	:	SST climatologies (Reynolds, 1988 or AMIP)
sea ice	:	climatology (Alexander and Mobley, 1976)
soil	:	5-layer model for heat-flux and bucket model for moisture exchange (Dümenil and Todini, 1992) vegetation model (Blondin, 1989)
tracer transport	:	semi-Lagrangian transport scheme (Böttcher, 1996; Braesicke and Langematz, 1998)

Tabelle 2: Modellbeschreibung des Berliner CMAMs.

Gegenwärtige Anforderungen

Tabelle 3 zeigt die auf einer CPU der Cray J932/16-8192 des ZIB benötigten Ressourcen für eine zweitägige Simulation des Modells in unterschiedlichen vertikalen Erstreckungen und Auflösungen. Die verwendeten Parametrisierung, sind aus Tabelle 2 zu entnehmen

Modell	CPU Time (s)	rel. CPU Time
19-Flächen	737	1.00
34-Flächen	1195	1.62
70-Flächen	3445	4.67

Modell	Mem. (MWords)	rel. Mem.
19-Flächen	4.8008	1.000
34-Flächen	6.2832	1.309
70-Flächen	10.7969	2.259

Tabelle 3: Gegenwärtige Anforderungen an Rechenzeit und Speicher.

Aus diesen Werten resultiert ein Bedarf von ca. 1200 CPU Stunden für eine Klimasimulation von 20 Jahren mit dem 34-Flächen Modell in T21 Auflösung. An Archivierungsressourcen werden ca. 50 GB benötigt.

Zukünftige Anforderungen

Zukünftige Projekte werden eine Erhöhung des Rechenzeitbedarfs mit sich bringen, da die Kopplung des dynamischen Modells mit einem (stratosphärischen) Chemiemodul geplant ist. Hierzu werden mehrere Spurengase im Transportmodul behandelt werden müssen und auch für die Berechnung der Chemie wird Rechenzeit benötigt. Da diese Arbeiten gerade erst begonnen werden, ist leider noch keine endgültige Abschätzung der Bedürfnisse möglich. Auch der Bedarf an Archivierungsplatz wird sich durch die berücksichtigte Chemie vergrößern, da es eventuell wünschenswert ist, bestimmte Spurengasverteilungen für eine spätere Interpretation aufzubewahren.

Fazit

Das Berliner CMAM stellt ein leistungsfähiges und gut erprobtes Werkzeug für die Simulation des globalen Klimas dar. Durch die geplante Erweiterung um ein Chemiemodul werden zusätzliche Perspektiven eröffnet. In seiner bisherigen und erweiterten Form ist es Gegenstand zahlreicher neuer Anträge (EU, BMBF), die wichtige Erkenntnisse für das Verständnis des globalen Klimas erwarten lassen.

Klimasystemmodellierung

Martin Claussen

Postdam-Institut für Klimafolgenforschung und
Institut für Meteorologie, FU-Berlin

Klima wird oft als "Gesamtheit der meteorologischen Erscheinungen definiert, die den mittle- ren Zustand der Atmosphäre an irgend einer Stelle der Erdoberfläche kennzeichnen" (Hann, 1908). Diese Definition ist unzureichend, da der Zustand der Atmosphäre nicht allein durch Prozesse bestimmt wird, die sich in der Atmosphäre abspielen, sondern auch durch die Wech- selwirkung der Atmosphäre mit den anderen Komponenten des Klimasystems. Neben der At- mosphäre umfasst das Klimasystem den Ozean (die Hauptkomponente der Hydrosphäre), die terrestrische und marine Biosphäre, die obere Erdschicht (die Pedosphäre), die Eismassen (die Hauptmasse der Kryosphäre) sowie, wenn man über die vielen Jahrtausende und Jahrmillionen der Ko-evolution von Geosphäre und Biosphäre blickt, den Erdmantel. Sämtliche Klimaunter- systeme sind über den Energiekreislauf, den Wasserkreislauf, den Stoffkreisläufen und den Im- pulskreislauf verbunden. Daher muss das Klima über den Zustand des Klimasystems definiert werden und zwar als Ensemble unendlich vieler Realisationen des Systems und dessen statisti- scher Momente in einem vorgegebenen Zeitraum unter Berücksichtigung der dort herrschenden Randbedingungen (z.B. Bahn der Erde um die Sonne).

Klimasystemmodelle müssen über lange Zeiträume integriert werden können, da die einzelnen Untersysteme des Klimas unterschiedlich träge sind. Die Atmosphäre hat einen einmal ange- nommenen Zustand meist schon nach etwa (größenordnungsmäßig) 10 Tagen vergessen. Be- trachtet man allerdings auch die Wasserspeicherung im oberen Erdreich, so wächst das Gedächtnis des Systems Atmosphäre-Pedosphäre auf gut 1 Jahr. Die obere, einige hundert Me- ter mächtige Schicht des Ozeans, die sogenannte Mischungsschicht, reagiert auf Änderungen im Bereich von Wochen und Monaten, während es einige 103 Jahre dauert, den tiefen Ozean umzuwälzen. Inlandeis und Gletscher haben ein noch längeres Gedächtnis von einigen 104 bis 105 Jahren. Die Vegetation ist eine besonders komplexe Größe im Klimasystem. Die physiolo- gischen Prozesse wie Respiration und Assimilation reagieren auf meteorologische Änderungen innerhalb von Minuten. Pflanzengemeinschaften können ihre Struktur im Laufe von 30 bis 150 Jahren ändern, während das Einwandern von anderen Pflanzengemeinschaften sich

in einem Zeitrahmen von etwa 300 bis 1500 Jahren abspielt. Die Entwicklung des Kohlenstoffkreislauf hängt unter anderem von der Verwitterung des Gesteins und tektonischer Aktivität ab, betrifft also Zeitskalen von 106- 108 Jahren.

Aus dem oben Gesagten wird deutlich, dass Klimasystemmodellierung als Ensemblemodellie- rung komplexer Systeme bezüglich Rechenzeit- und Datenspeicherplatzanforderungen außer- ordentlich aufwendig ist. Am PIK wird zur Zeit geprüft, ob sich ein solches Klimasystemmodell sinnvoll massiv parallelisieren lässt. Ferner wird die neue Modellstruktur so konzipiert, dass Programmmodule beliebig austauschbar sind.

Hann, J., 1908: Handbuch der Klimatologie, Band I., 3. Auflage, 394 pp.

LLM – ein hochauflösendes Simulationsmodell in der bodennahen Atmosphäre

H.-J. Herzog, U. Schubert, G. Vogel

DWD, Meteorol. Obs. Potsdam

Im Deutschen Wetterdienst (DWD) wird Ende dieses Jahres ein neues hochauflösendes Wettervorhersagemodell (Lokal-Modell = LM) mit einer horizontalen Maschenweite von 7km zum Einsatz kommen. Auf der Grundlage der identischen Modellgleichungen wird zugleich eine LES-Version entwickelt, die im Forschungsmodus turbulente Flüsse in Bodennähe explizit zu berechnen erlaubt und damit verbesserte Parametrisierungsansätze für diese Flüsse über realistischen heterogenen Landoberflächen für gröberauflösende Modelle (z.B. LM) liefert. Dieses LLM (LITFASS-Lokal-Modell - die Aufgabe ist in dem DWD-Projekt LITFASS eingebettet) verwendet die ungefilterten, nichthydrostatischen und kompressiblen thermo-hydrodynamischen Gleichungen. Folgende Spezifika sind hervorzuheben: Das Integrationsgebiet überdeckt in der Horizontalen ein 14×14 - bzw. $20 \times 20 km^2$ - Gebiet, und die vertikale Erstreckung reicht vom Erdboden bis in 3km Höhe. Das Gitterpunktmodell bezieht sich dabei auf ein $145 \times 145 \times 39$ bzw. $199 \times 199 \times 39$ - Punktgitter mit einer horizontalen Maschenweite von 96.5m. In der Vertikalen nimmt die Maschenweite von 4m unmittelbar in Bodennähe nach oben hin zu bis auf 150m nahe dem Oberrand. Das Zeitintegrationsverfahren ist eine 'time-splitting'-Technik. Die 'langsamen' Moden erfordern einen Zeitschritt von $\Delta t = 2s$, die 'schnellen' Moden benötigen $\Delta ts = 0.18s$. Das CFL-Kriterium ist unabhängig von der vertikalen Modellstruktur aufgrund zeit-impliziter Teilbehandlungen. Entscheidendes Merkmal des LLM ist seine Steuerung ausschließlich durch Messungen, die am Meteorologischen Observatorium Lindenberg in einmaliger Weise zunehmend vorliegen. Mit anderen Worten: die Anfangswerte als auch der instationäre Randantrieb über eine laterale und obere Randrelaxationszone werden aus vertikalen Meßprofilen (Windprofiler, RASS-SODAR, Radiosondierung) in zeitlich hoher Auflösung abgeleitet, wobei insbesondere die großskalige instationäre atmosphärische Struktur dem Modell extern mitgeteilt wird. Darüberhinaus muß das LLM physikalisch entscheidend von der unteren Berandung her angetrieben werden. Neben einer hochdetaillierten physiographischen Beschreibung der Unterlage wird gleichsfalls aus Messungen der Strahlungskomponenten am Boden und des Niederschlages deren flächenhafte Verteilung (auch unter Nutzung lückenloser Satelliteninformation) bestimmt. Das entbindet uns von der grundsätzlich für diese Aufgabenstellung unbefriedigend gelösten Modellierung der komplex wechselwirkenden Strahlungs-Bewölkungs-Niederschlagsproblematik. Wir glauben, daß bei derart konsequenter Modellsteuerung durch Messungen zur Bestim-

mung turbulenter Flüsse in Bodennähe das LLM am engsten an der "Wahrheit" geführt wird, wie auch die unbedingte Modellvalidation ohne die vorhandene und geplante Meßtechnik nicht auskommt. Diese unvollständige Kurzbeschreibung soll vor allem verdeutlichen, daß die derzeitigen Entwicklungsarbeiten und erst recht ein später geplanter Dauerbetrieb rechen- und datenintensiv sind. Eine 24h-Integration für eine LLM-Version mit $145 \times 145 \times 39$ Gitterpunkten benötigt auf einer CRAY T3E im Parallelbetrieb mit 121 Prozessoren eine CPU-Zeit von ca. 8.5h per Prozessor, auf einer FUJITSU VPP 700 mit 16 Vektorprozessoren ca. 8h.

Numerische Modellierung der Zirkulation des Atlantischen Ozeans

J. Dengg (1), R. Redler (2), C.W. Böning (1)

jdengg@ifm.uni-kiel.de

(1) Institut für Meereskunde, Kiel
(2) GMD/SCAI, Sankt Augustin

Numerische Ozeanmodelle überdecken einen weiten Bereich, angefangen bei der isolierten Betrachtung lokaler Prozesse bis hin zu hochauflösenden Ozeansimulationen unter Berücksichtigung einer Vielzahl von Einzelaspekten. Ein Weg, diesen unterschiedlichen Anforderungen innerhalb eines einzelnen Projektes Rechnung zu tragen, ist die Entwicklung einer Hierarchie aufeinander abgestimmter Modellkonfigurationen. Für Untersuchungen physikalischer und biogeochemischer Mechanismen in der Zirkulation des Atlantischen Ozeans wurde eine entsprechende "Family of Linked Atlantic Model Experiments" (FLAME) in Zusammenarbeit zwischen Arbeitsgruppen am IfM Kiel und AWI Bremerhaven realisiert.

Grundlage für FLAME ist ein numerisches Zirkulationsmodell des Atlantischen Ozeans in 2 Versionen mit a) niedriger horizontaler Auflösung (4/3 Grad, 150 km am Äquator, 50 km bei 70 Grad N) und b) höherer Auflösung (1/3 Grad, 37 km bis 12.5 km). Vertikal ist das Modell in 45 Tiefenstufen unterteilt, mit Schichtdicken von 10 m an der Meeresoberfläche bis zu 250 m im tiefen Ozean. Dies entspricht einer Gesamtzahl von 8,316,000 bzw. 533,250 Gitterpunkten. Ergänzt werden diese Modelle durch regionale Konfigurationen für den Nordatlantischen Ozean, sowie den äquatorialen und subpolaren Atlantik, welche gezielte Experimente in diesen Regionen erlauben. Der numerische Code ist das am Geophysical Fluid Dynamics Laboratory (GFDL) in Princeton, New Jersey entwickelte Modular Ocean Model (MOM), welches für die Rechnungen auf MPP-Systemen mit Unterstützung der Firma SGI parallelisiert wurde. Während am IfM Kiel der Modellcode vor allem im Bereich physikalischer Parameterisierungen verbessert wird, flossen die Parallelisierungserfahrungen in die numerische Weiterentwicklung der nächsten Modellversion (MOM3) am GFDL ein.

Zu den Fragestellungen, welche mit den FLAME-Modellen im Rahmen internationaler Großprojekte wie z.B. CLIVAR oder auch deutschen Vorhaben wie TIEFBIT und dem Kieler SfB460 untersucht werden, gehören u.a.: Variabilität der Zirkulation und Tiefenwasser-Bildungsraten im subpolaren Nordatlantik als Folge dekadischer atmosphärischer Fluktuationen (North Atlantic Oscillation "NAO"), Einfluß des Overflows über den Grönland-Island-Schottland Rücken auf die großräumige Dynamik des subpolaren Nordatlantik, CO_2-Aufnahme und Transport im gesamten Atlantischen Ozean, Mechanismen der Tiefenwasserausbreitung im äquatorialen Atlantik. Zur Untersuchung dieser Fragen werden verschiedene diagnostische Hilfsmittel wie künstliche Alterstracer zur Markierung von Wassermassen, Freon-Simulationen und die Berechnung von Driftertrajektorien benutzt.

Räumlich hochauflösenden Kurzzeitsimulationen (20-50 Jahre) stehen grobauflösende Langzeit-Klimarechnungen (200 Jahre und mehr) mit sehr unterschiedlichen Rechenanforderungen gegenüber. Während letztere durch Memory-

und Plattenplatzbedarf nur wenig limitiert sind, spielen diese Faktoren für hochauflösende Modelle eine entscheidende Rolle. Der Datensatz eines Momentanzustands des 1/3 Grad Atlantikmodells in der Grundversion (keine zusätzliche Tracerdiagnostik) erfordert derzeit 170 Mbyte Plattenplatz, bei Einbeziehung von Freonen und zwei Alterstracern erhöht sich dies auf 252 Mbyte. Bei typischen Integrationsintervallen von 180 Tagen und 3-tägigem Sampling ergeben sich somit temporäre Plattenplatzanforderungen von ca. 15 Gbyte. Der Rechenzeitbedarf pro Modelljahr beträgt 10 Stunden auf 120 PEs der T3E. Geplant sind darüber hinaus Versionen unter Einbeziehung biologischer Submodelle, welche die derzeit national verfügbaren Rechenkapazitäten aber übersteigen.

Zukünftige Vorhaben werden sich auch am internationalen Vergleich (Rechnungen in Los Alamos, USA, und im Rahmen des Mercator-Projekts in Frankreich) orientieren müssen. Dies erfordert eine Erhöhung der Auflösung um den Faktor 3 oder mehr, ohne die eine realistische Darstellung kritischer Strömungsregionen nicht erzielt werden kann. Dies entspricht einer um mindestens den Faktor 10 vergrösserten Anforderung an Rechnerleistung und Speicherressourcen.

Probleme der statistischen Mustererkennung

F.-W. Gerstengarbe, P.C. Werner

Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung e.V.

1 Problemstellung

Für viele Fragestellungen in der Klimaanalyse und Klimamodellvalidierung reicht die Untersuchung nur einzelner Parameter mit herkömmlichen statistischen Verfahren nicht aus, um zu verwertbaren Ergebnissen zu kommen. In der Regel müssen komplexe Strukturen und Vorgänge beschrieben werden. Dies läßt sich nur durch die Anwendung entsprechender multivariater Verfahren wie zum Beispiel Kanonische Korrelationsanalyse, multiple Regressionsanalyse, Diskriminanzanalyse, neuronale Netze oder Clusteranalyse realisieren. Der bei der Anwendung dieser Verfahren zu betreibende Rechneraufwand steigt mit zunehmender Variablenanzahl und zunehmendem Stichprobenumfang stark an. Im folgenden wird diese Problematik am Beispiel des Einsatzes der Clusteranalyse näher erläutert.

2 Grundgedanke der Clusteranalyse

Mit Hilfe der Clusteranalyse werden Muster (Cluster) in einem n-dimensionalen Parameterraum bestimmt. Bei den nicht-hierarchischen Verfahren werden die minimalen Distanzen eines jeden Punktes im Parameterraum zu einem für jedes Cluster definierten Mittelpunkt (Zentroid) bestimmt. Diesem iterativen Vorgang liegt eine Zielfunktion, die minimiert wird, zugrunde. Der Iterationsvorgang ist beendet, wenn die Zielfunktion ein Minimum erreicht. Nachteile dieses Verfahrens sind die subjektiv festzulegende Anzahl von Clustern, der Abbruch des Iterationsvorganges bei Erreichen eines sekundären Minimums sowie die Unkenntnis über die Güte der Clustertrennung.

3 Die erweiterte Clusteranalyse

Das Ziel der erweiterten Clusteranalyse ist es, die genannten Nachteile zu beseitigen. Schwerpunkt ist dabei die Einführung eines statistischen Testverfahrens (X2-Test) zur Bestimmung der Trenngüte der Cluster unter Betrachtung der Überlappungen zwischen den Clustern im n-dimensionalen Raum.

Durch den iterativen Vorgang der Aussonderung signifikant voneinander getrennter Cluster und der erneuten Clusterung mit dem verbleibenden Rest der Stichprobe erhält man gleichzeitig die optimale Clusteranzahl. Für jede Iteration muß allerdings wiederum subjektiv eine sogenannte Startclusteranzahl vorgegeben werden. Die Vorgabe dieser Startclusteranzahl kann ebenfalls optimiert werden, indem mit der ursprünglichen (nicht erweiterten) Clusterung für aufsteigende Clusteranzahlen die Minima der Zielfunktion vor jeder Iteration bestimmt werden. Die Clusteranzahl, ab der sich die Werte der Zielfunktionsminima nicht mehr signifikant ändern, stellt die optimale Startclusteranzahl für eben diesen Iterationsschritt dar. Die Separierung der Cluster bezieht sich immer auf eine vorgegebene statistische Sicherheit (z.B. 95% oder 99%). Damit können aber in der Praxis einzelne wenige fehlerhafte Clusterzuordnungen auftreten. Um dies zu vermeiden, muß nach Abschluß der iterativen Clusterung noch überprüft werden, ob solche Fehlbelegungen nicht einem anderen Cluster zugeordnet werden können, was durch die Minimierung der euklidischen Distanz geschieht. Zusätzlich ist vor Beginn der Clusterung zu testen, ob die zu clusternden Elemente statistisch unabhängig voneinander sind (Bedingung für jedes statistische Verfahren). Ist das nicht der Fall, muß die Stichprobe entsprechend aufbereitet werden (z.B. durch zufällige Umsortierung).

4 Rechentechnisches Problem

Das Problem ist der hohe Rechenzeitbedarf. Er ergibt sich aus der Vielzahl der Schleifen für die Iterationen. Da alle Iterationsschritte aufeinander Aufbauen und es sich um skalare Operationen handelt, ist es nicht möglich, eine Parallelisierung und/oder eine Vektoriesierung einzuführen. Ebenfalls viel Rechenzeit wird für die Minimierung der Zielfunktion benötigt. Der Austausch der Elemente zwischen den Clustern, bis die beste Zuordnung gefunden wird (Minimum der Zielfunktion), muß nach einem Zufallsprinzip erfolgen. Algorithmen, die den Zuordnungsvorgang durch andere Techniken, wie es bisher üblich war, verkürzen, führen zu Fehlern in den Clusteranalyse-Ergebnissen. Gemildert werden kann das Rechenzeitproblem durch einen genügend großen Hauptspeicher (Vermeidung von „pageing“) und entsprechend schnelle Prozessoren. Es sollte überprüft werden, ob im Programmablauf Teilalgorithmen effektiver gestaltet bzw. durch vorhandene effektivere Software ersetzt werden können.

Ozean–Eis–Atmosphäre–Modellierung im Südozean

A. Beckmann, N. Rakowsky, W. Hiller
Alfred–Wegener–Institut für Polar- und Meeresforschung
Postfach 120161, 27515 Bremerhaven

1 Einführung

Wassermassenbildung und -modifikation in den Ozeanen der hohen Breiten sind wesentliche Prozesse im Klimasystem: das Absinken von dichtem Boden- und Tiefenwasser treibt die globale thermohaline Zirkulation an, die für den meridionalen Wärmetransport verantwortlich ist.
Ein Verständnis der beteiligten Mechamismen, der natürlichen Variabilitäten und der Stabilität der Zirkulation setzt ein Studium des Gesamtsystems voraus, unter Berücksichtigung des Ozeans, des Meereises, der Schelfeisgebiete sowie der polaren Atmosphäre.

2 Stand der Forschung

Im Rahmen von BRIOS (Bremerhaven Regional Ice Ocean Simulations) wurde begonnen, numerische Untersuchungen der Physik des Klimasystems im Bereich des Antarktischen Wasserings durchzuführen. Die existierenden Komponenten sind ein hydrostatisches Ozeanmodell (SPEM, Haidvogel et al., 1991), ein dynamisch–thermodynamisches Meereismodell (Hibler, 1979) sowie ein Schelfeismodell (Hellmer et al., 1998). Erste Simulationen der Zirkulation und Wassermassenverteilung im Weddellmeer haben die vorhandenen Beobachtungen bestätigt und unsere Kenntnisse über den Jahresgang wesentlich erweitert (Beckmann et al., 1999).

3 Geplante Arbeiten

Kurz- und mittelfristige Ziele sind

- die Bestimmung möglicher Ursachen für die in den letzten Jahren beobachtete *kontinuierliche Erwärmung des Tiefen- und Bodenwassers* im Weddellmeer;
- die Untersuchung der Ursachen und Auswirkungen der *großen Weddell–Polynja* in den 70er Jahren, sowie der Vorhersage derartiger Phänomene;
- die Untersuchung der sog. *Antarktische Zirkumpolarwelle*, einem kürzlich entdeckten Phänomen zwischenjährlicher Variabilität;
- die Simulation von *Eisberg–Trajektoren*; und
- die Simulation der *Gezeitenströmung* im Weddellmeer.

Dazu ist zum einen die Erweiterung des existierenden Modellsystems durch Ankopplung eines *state–of–the–art*–Atmosphärenmodells erforderlich (REMO, Jacob und Podzun, 1997). Das Gezeitenmodell muß zeitlich und räumlich sehr viel kleinere Skalen auflösen als die Modelle der BRIOS–Familie und soll daher seperat gerechnet werden, wobei die Ergebnisse als Parametrisierung der gezeitenbedingten Vermischung in das BRIOS–Modellsystem eingehen.

4 Rechenzeit- und Speicheranforderungen

Momentan kann auf der T3E 600 des AWI ein Ozean–Meereis–Schelfeis–Modell mit einer mittleren horizontalen Auflösung von ca. 30 km und 30 Schichten in der Vertikalen möglich. Eine Integration für einen Zeitraum von 50 Jahren erfordert auf 32 PEs 1 Monat Rechenzeit. Angestrebt ist hier mindestens eine Verdopplung der Auflösung, damit küstennahe Prozesse, mesoskalige Variabilität und die Einflüsse der Bodentopographie besser erfaßt werden können. Zu Analyse und Diagnosezwecken sind zusätzliche Tracer und dreidimensionale Partikeltrajekorien zu berechnen, was die Rechenzeit und Speicheranforderungen nochmals nennenswert erhöht. Allein für das existierende Modellsystem ist also mindenstens eine Versechzehnfachung der Rechnerressourcen notwendig. Läufe dieser Größenordnung erfordern Höchstleistungsrechner, wie sie nur im Rahmen eines nationalen Höchstleistungsrechenzentrums wie dem HLRN zur Verfügung gestellt werden können.
Die Ankopplung eines regionalen atmosphärischen Zirklulationsmodells bringt nochmals eine Verdopplung der Rechenzeit mit sich, so daß Sensitivitätsuntersuchungen (eine Reihe von numerischen Experimenten mit unterschiedlichen physikalischen und numerischen Parametern) nur auf einem Höchstleistungsrechner durchgeführt werden können.
Die Entwicklungsarbeiten zum Gezeitenmodell werden zunächst mit grober Auflösung auf einer Workstation erfolgen. Angestrebt ist eine lokale Maschenweite von bis zu 5–10 km im Weddellmeer, außerhalb kann mit sehr groben Maschenweiten von 200–500 km gearbeitet werden. Es liegt in der Natur adaptiver Verfahren, daß der Speicherbedarf nicht exakt vorherbestimmt werden kann, aber als erste Näherung kann von etwa 4 000 Elementen der gröbsten und 20 000–30 000 der feinsten Verfeinerungsstufe im Gitter ausgegangen werden. Realistische Anwendungen mit vielen Tracern setzen voraus, daß eine parallele Version auf einem Höchstleistungsrechner implementiert wird.

5 Numerik und Parallelisierung

Das BRIOS–Modellsystem approximiert die physikalischen Gleichungen auf einem regelmäßigen finite–Differenzen–Gitter. Die hohe Datenlokalität erlaubt eine effiziente Parallelisierung eines Großteils der Rechenarbeit. Als Flaschenhals erwies sich zunächst der elliptische Löser im Ozeanmodell, mit dem in jedem Modellzeitschritt die barotrope Stromfunktion berechnet wird. Der ursprüngliche Mehrgitterlöser skaliert nur schlecht und wurde durch ein inhärent paralleles Gebietszerlegungsverfahren (direktes Schur–Komplement–Verfahren) ausgetauscht, so daß das Ozeanmodell nun linear skaliert (Rakowsky, 1999).
Eine große Herausforderung stellt die Kopplung der Modellkomponenten dar. Um den enormen Speicher- und Rechenzeitbedarf in den Griff zu bekommen, wird im Rahmen des Gigabit–Testbeds West (GMD, FZJ, AWI) eine externe Kopplung vom Eis–Ozean- sowie dem Atmosphärenmodell mit dem *CSM–Flux–Couppler* (NCAR) unter MetaMPI (Pallas GmbH) implementiert und untersucht.
Das Gezeitenmodell wird mit adaptiven finiten Elementen diskretisiert, um für die Gezeitenströmung wichtige kleinskalige Prozesse erfassen zu können. Der Randantrieb kann dank der adaptiven finite–Elemente–Diskretisierung einfach bestimmt werden, indem das kleinskalige Modell des Weddellmeeres in ein grobskaliges globales Modell übergeht. Die Parallelisierungsstrategien sind von BRIOS übertragbar, aber aufgrund der komplizierteren Datenstruktur aufwendiger zu implementieren. Die Vorteile von Fortran 90 mit dynamischer Speicherverwaltung und der Strukturierung mit benutzerdefinierten Typen und Modulen kommen voll zum Tragen. Zur Parallelisierung wird MPI eingesetzt.
Grundlage ist ein paralleles adaptives Flachwassermodell (Behrens, 1999), das in Kooperation mit J. Behrens (TU München) und E. Bänsch (Uni Bremen) ausgebaut werden soll. Insbesondere muß das

Programm auf unregelmäßig berandete Gebiete und Kugelkoordinaten erweitert werden; der Gittergenerator ist noch zu parallelisieren; das Modell soll anhand der Modellprobleme der NCAR Testsuite validiert werden; im implementierten CG–Verfahren soll der Jacobi–Vorkonditionierer durch einen effizienteren Algorithmus, z.B. ein Schwarz–Gebietszerlegungsverfahren, ersetzt werden.

Literatur

[1] A. Beckmann, H. H. Hellmer und R. Timmermann. A numerical model of the Weddell Sea: Large scale circulation and water mass distribution. *J. Geophys. Res.*, Im Druck.

[2] J. Behrens. Atmospheric and ocean modelling with an adaptive finite element solver for the shallow-water equations. *Applied Numerical Mathematics*, 26:217–226, 1998.

[3] D. B. Haidvogel, J. L. Wilkin und R. Young. A semi–spectral primitive equation ocean model using vertical sigma and orthogonal curvilinear coordinates. *J. Comput. Phys.*, 94:151–184, 1991.

[4] H. H. Hellmer, S. S. Jacobs und A. Jenkins. Oceanic erosion of a floating Antarctic glacier in the Amundsen sea. In S. S. Jacobs und R. Weiss, Hrsg., *Ocean, Ice, Atmosphere: Interactions at the Antarctic Continental Margin*, Nr. 75. American Geophysical Union, Washington D.C., 1998.

[5] W. D. Hibler, III. A dynamic thermodynamic sea ice model. *J. Phys. Oceanogr.*, 9:815–846, 1979.

[6] D. Jacob und R. Podzun. Sensitivity studies with the regional climate model REMO. *Meteorol. Atmos. Phys.*, 63:119–129, 1997.

[7] N. Rakowsky. Effiziente parallele Lösungsverfahren für elliptische partielle Differentialgleichungen in der numerischen Ozeanmodellierung. Berichte zur Polarforschung 318, Alfred–Wegener–Intitut, Bremerhaven, Erscheinungsdatum Sommer 1999. Dissertation, Universität Bremen.

Hochauflösende Simulation der atmosphärischen Variabilität mit einem gekoppelten Atmosphäre-Ozean-Meereismodell der Arktis

W. Hiller*, K. Dethloff†, T. Kandlbinder† , B. Fritzsch* , A. Rinke† ,
R. Gerdes* , C. Köberle* , D. Olbers* , J. Behrens ‡, S. Frickenhaus*

Zusammenfassung

Vorhersagen der atmosphärischen Zirkulation werden auf räumlichen Skalen benötigt, die viel kleiner sind als die durch die gegenwärtige Generation der globalen Zirkulationsmodelle berechenbaren Skalen. Dieses Problem des dynamischen Downscaling erfordert sowohl genestete hochauflösende regionale Modelle wie auch globale Modelle mit adaptiver lokaler Gitterverfeinerung.

1 Hochauflösendes Zirkulationsmodell der Arktis

Ein hochauflösendes Modell der arktischen Atmosphäre wurde in Dethloff u. a. [1] und Rinke u. a. [2] entwickelt. Das Modell HIRHAM basiert auf den dynamischen Gleichungen des High Resolution Limited Area Model der skandinavischen Länder und den physikalischen Parametrisierungen des globalen Zirkulationsmodells des MPI Hamburg und des Deutschen Klimarechenzentrums, beschrieben in Christensen u. a. [3]. An den seitlichen Rändern wird HIRHAM alle 6 Stunden mit den Analysedaten des Europäischen Zentrums für Mittelfristprognose (ECMWF) und am unteren Rand durch tägliche Meeresoberflächentemperaturen und Meereisbedeckung angetrieben. Die Simulationen erfolgen mit einer horizontalen Auflösung von 50 km und in 19 vertikalen Schichten vom Erdboden bis in die untere Stratosphäre, begrenzt bei 10 hPa. Die physikalischen Parametrisierungen beinhalten Strahlungsprozesse, Cumuluskonvektion, Wolken- und Feuchteprozesse, Landoberflächen- und Grenzschichtprozesse. Bedingt durch die hohe horizontale Auflösung des Modells können mesoskalige Prozesse infolge der Anregung durch verbesserte Orographie, Gletscherbedeckung und Küstenlinien untersucht werden. Die so erfasste nichtlineare Wechselwirkung zwischen dem großskaligen Randantrieb und den mesoskaligen Prozessen im Modellgebiet verbessert die Simulation des arktischen Klimas und erlaubt es, die dynamischen und physikalischen Schlüsselmechanismen aufzudecken, die das arktische Klima bestimmen. Die Validierung des Atmosphärenmodells gegen Stations- und Satellitendaten war so gut, dass im nächsten Schritt die Kopplung des Atmosphärenmodells mit dem hochauflösenden Arktis-Ozean- Meereismodell (MOM) erfolgen kann [4]. Die Kopplung erfolgt über Oberflächenflüsse von Wärme und Feuchte. Das Ziel besteht zunächst darin, stabile Integrationen über einige Monate durchzuführen und das gekoppelte Modell gegen Daten zu validieren. Um die geplanten Langzeitintegrationen über einige Jahre bis zu Jahrzehnten zu ermöglichen, ist der Einsatz einer parallelisierten HIRHAM Modellversion erforderlich. Dies würde zukünftig eine höhere horizontale und vertikale Auflösung, längere Integrationszeiten und die Implementierung verbesserter Parametrisierungspakete z. B. für wirbelauflösende Grenzschichtprozesse erlauben.

*Alfred-Wegener Institut für Polar- und Meeresforschung Bremerhaven
†Alfred-Wegener Institut für Polar- und Meeresforschung, FS Potsdam
‡Technische Universität München, Fakultät für Mathematik

2 Adaptives Tracermodell mit lokaler Gitterverfeinerung

Die gestörte Chemie innerhalb des stratosphärischen Polar-Vortex hängt nicht nur mit den chemischen Quellen und Senken zusammen, sondern auch mit den Tracertransporten infolge dynamischer Prozesse auf unterschiedlichen horizontalen Skalen. Die horizontale Dispersion eines passiven Tracers auf synoptischen Zeitskalen erfolgt durch die Ausbildung sehr feiner räumlicher Strukturen, die sog. Filamentierung. Die gegenwärtigen Zirkulationsmodelle haben keine ausreichende horizontale Auflösung, um diese Filamentstrukturen zu reproduzieren. Behrens [5, 6] entwickelte ein adaptives Verfahren mit lokaler Gitterverfeinerung auf der Basis finiter Elemente, das in einem ersten Schritt auf die horizontale Durchmischung eines stratosphärischen Tracers angewendet wurde. Die stratosphärischen Winddaten zur Lösung der zweidimensionalen horizontalen Advektionsgleichung stammen aus dem oben beschriebenen hochauflösenden arktischen Klimamodell. Erste Ergebnisse wurden in Behrens u. a. [7] analysiert. Es wurde gezeigt, dass eine minimale horizontale Auflösung von 15 km erforderlich ist, um die feinen dynamischen Strukturen aufzulösen. Die Umsetzung auf ein globales barotropes Modell der stratosphärischen Dynamik mit Ozonchemie ist beabsichtigt.

3 Erforderliche Rechnerarchitektur

3.1 Das gekoppelte Arktismodell

Die derzeitigen Modelle arbeiten auf einem horizontalen Gitter von 243 x 170 (MOM) über 60 vertikale Schichten bzw. 110 x 100 Punkten über 19 vertikale Schichten (HIRHAM). Höhere Auflösungen sind geplant, erfordern jedoch ausreichende Höchstleistungsrechnerkapazität. Die MOM-Version behandelt als Tracer Wärme und Salz. Die Impulsgleichung für das Meereis wird implizit gelöst.

Variante 1, interne Kopplung der Teilmodelle: Im intern gekoppelten Modell werden in einem Programm alternierend die Teilmodelle Ozean und Atmosphäre berechnet. Dementsprechend addieren sich die Arbeitsspeicheranforderungen der Teilprogramme. Die intern gekoppelten Modelle fordern in der jetzigen Auflösung zusammen 480 MB Arbeitsspeicher. Eine Simulation über einen Modellzeitraum von einem Monat kostete auf der C90 (DKRZ, Hamburg) ca. 10h CPU Zeit, was in etwa 2.5-3 h auf einer T90 entspricht. Auf den angestrebten Modellzeitraum von 10 Jahren umgerechnet entspricht das in der jetzigen Auflösung einem Bedarf von bis zu 360 T90-CPU-Stunden. 90% der CPU-Zeit wird für das Atmosphärenmodell benötigt. Dieses Missverhältnis ist vorallem durch die Modellzeitschritte (MOM: 1h, HIRHAM: 5min) bedingt. Wachsende Ansprüche an die Auflösung (Vervierfachung) und Integrationszeiten verlangen nach einer Umsetzung auf massiv parallele Höchstleistungsrechner. Zur Kopplung parallelisierter Teilmodelle bietet sich die folgende Variante an.

Variante 2, externe Kopplung der Teilmodelle: Mittels einer Kommunikationsschnittstelle, dem Koppler, werden die Teilmodelle parallel eventuell auf unterschiedlichen Architekturen gerechnet. Sind die Modelle in sich parallelilsiert, so kann jeder Teil mit verschieden großen Prozessorzahlen gerechnet werden. Der Koppler (CSM-Flux-Coupler, NCAR) stellt einen zusätzlichen Prozess dar, in dem auch die auszutauschenden Daten (hier Wärme- und Feuchteflüsse) aufbereitet werden: z.B. Interpolation bei unterschiedlichen Auflösungen der Teilmodelle, zeitliche Mittelwertbildung etc. Die Kommunikation der Modelle mit dem Koppler lässt sich über MetaMPI (Pallas GmbH, Brühl) betreiben. Die modellinterne Kommunikation der SHMEM-parallelisierten Versionen von MOM (MOM2, AWI-Bremerhaven Version) und HIRHAM (PARHIRHAM, DNMI Norwegen) bleibt davon unberührt. Die Speicheranforderung an den einzelnen Prozessor nimmt durch die Parallelität der Teilmodellrechnungen und die externe Kopplung drastisch ab. Die gestiegenen Anforderungen an Modellauflösung und -integrationszeit lassen sich nur auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen mit großen Prozessorzahlen realisieren. Im Gigabit-Testbed-West [8] (GMD-St. Augustin, FZ-Jülich, AWI-Bremerhaven, DKRZ-Hamburg) wurden bereits erste Erfahrungen mit extern gekoppelten Modellen gemacht. Eine externe MetaMPI-Kopplung SHMEM- und MPI-parallelisierter Anwendungen wurde dabei erfolgreich getestet. Gegenüber der intern gekoppelten Variante ergibt

sich in der externen Kopplung ein Mehraufwand an Kommunikation, jedoch erlaubt die Wahl der Prozessorzahlen der Teilmodelle eine bessere Synchronizität in den Berechnungen der Zeitschritte der Teilmodelle. Es ist zu untersuchen, in welchem Maße der zusätzliche Kommunikationsaufwand von einem Performancegewinn durch die Parallelität der Teilmodelle kompensiert werden kann. Bestimmender Faktor ist neben der Skalierbarkeit der Teilmodelle die Häufigkeit des Datenaustausches, welche starken Einfluss auf Stabilität und physikalische Aussagekraft der Simulationen hat.

3.2 Adaptives Tracermodell

Bei adaptiven Verfahren sind die Anforderungen an Rechnerresourcen schwer vorherzusagen, da sich Speicher- und Rechenaufwand dynamisch den physikalischen Gegebenheiten anpassen. Bisherige Rechnungen konnten noch auf üblichen Workstations durchgeführt werden (SGI Indigo, SGI Origin200 Einzelprozessor, Sun Ultra 10, SGI O2). Für das Modellproblem des geschlitzten Zylinders wurden für einen Lauf auf einem R10000 Prozessor mit 225MHz (Origin200) folgende Anforderungen gestellt: bei maximal 17 lokalen Verfeinerungen auf insgesamt 12000 Elemente: 18.0 MB Speicher; 8.6 s pro Modellzeitschritt (30 min). Dabei sind ca. 4% der Gesamtflche des Rechengebietes hochaufgelöst (lokal verfeinert bis zur feinsten Stufe). Bei den Tracersimulationen dagegen wurde ein Gitter mit maximal 19 Verfeinerungsstufen verwendet (entspr. ca. 5 km horizontale Auflösung). Die einfache Simulation eines anfänglich kreisflächig verteilten Tracers benötigte bei maximal 5 Km Auflösung für einen Monat Modellzeit 6-8 h CPU-Zeit (SGI Indigo), wobei die Windfelder alle sechs Modellstunden eingelesen wurden. Die Gittergenerierung benötigte dabei noch 30% Rechenzeit. Künftige Modelle sollen dynamisch mit mindestens 30% lokal verfeimerter Fläche arbeiten. Dabei wird die Gittergenerierung gegenüber der stark gestiegenen Rechenanforderunmg nur noch 5% einnehmen. Darüberhinaus wird eine maximale Gitterverfeinerung auf 2.5 Km angestrebt. Eine MPI-parallelisierte, dynamisch lastbalancierte Version des Gittergenerators ist in der Debug-Phase.

Literatur

[1] Dethloff, K., A. Rinke, R. Lehmann, J. H. Christensen, M. Botzet, B. Machenhauer, Regional climate model of the Arctic atmosphere, J. Geophys. Res., 101, 23401-23422, 1996.

[2] Rinke, A. K. Dethloff, J. H. Christensen, M. Botzet, B. Machenhauer, Simulation and validation of Arctic radiation and clouds in a regional climate model, J. Geophys. Res., 102, 29833-29847, 1997.

[3] Christensen, J. H., O. B. Christensen, P. Lopez, E. van Meijgaard, M. Botzet, The HIRHAM4 regional atmospheric climate model, DMI Scientific Report 96-4, Copenhagen, 51 pp, 1996.

[4] Gerdes, R., M. Karcher, C. Köberle, B. Fritzsch, J. Brauch, Propagation of Atlantic Water into the Nordic Seas and the Arctic Ocean in high-resolution coupled sea ice-ocean simulations, in preparation, 1999.

[5] Behrens, J., An Adaptive Semi-Lagrangian Advection Scheme and its Parallelization, Mon. Wea. Rev., 10, 2386–2395, 1996.

[6] Behrens, J., Atmospheric and ocean modeling with an adaptive finite element solver for the shallow-water equations, Appl. Numer. Math., 26, 217-226, 1998.

[7] Behrens, J., K. Dethloff, W. Hiller, A. Rinke, Evolution of small-scale filaments in an adaptive advection model for idealised tracer transport, in preparation, 1999.

[8] Eickermann, T.,P. Wunderling, R. Niederberger, R. Völpel, Aufbruch ins Jahr 2000 - Start des Gigabit Testbed West, In: DFN-Mitteilungen, 45, 13-15, Nov. 1997.

SPRINT-S: Eine parallele Simulationsumgebung

Michael Flechsig

Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung
Telegrafenberg, 14473 Potsdam
flechsig@pik-potsdam.de

SPRINT-S (**S**trictly **P**arallelized **R**egional **I**ntegrated **N**umeric **T**ool for **S**imulation, http://www.pik-potsdam.de/reports/pr.47/pr47.pdf) ist eine parallele Simulationsumgebung für beliebige Modelle auf dem skalierbaren parallelen System IBM SP2. Validierung und extensive Nutzung von Simulationsmodellen führen letztendlich eben so wie die Simulation lateral ungekoppelter Modelle über geographischen Räumen zu einer großen Anzahl von Simulationsläufen, die normalerweise voneinander unabhängig sind. Methodisch lassen sich solche multi-run Experimente nach ihrer Aufgabenstellung klassifizieren und somit Experimenttypen vordefinieren.

SPRINT-S bietet für den Modellierer und den Modellnutzer die Möglichkeit, die Vor teile paralleler Rechnerarchitekturen auf der Experimentebene zu nutzen, ohne das Modell an sich zu parallelisieren. Das System unterstützt die Definition von Experimenten, verteilt automatisch die Simulationslast und gestattet ein Result-Postprocessing der Modell-Outputdaten.

Der Nutzer muß sein Modell in eine Routine einbetten. Zusätzlich werden in dieser Routine die Experimentstruktur auf die Parameter und Anfangswerte des Simulationsmodells abgebildet und ein Ergebnisvektor für SPRINT-S bereitgestellt.

Folgende Experimente können genutzt werden:

- Verhaltensanalyse: Diskretwertige Durchmusterung von mehrdimensionalen Parameter- und Anfangswerträumen.
- Sensitivitätsanalyse: Finite Parameter- und Anfangswertsensitivität des Modells und Bestimmung verschiedener Sensitivitätsmaße während der Resultatsverarbeitung.
- Monte-Carlo Analyse: Modellparameter und -anfangswerte werden als Realisierung von Zufallsvariablen mit verschiedenen Verteilungsfunk-

tionen vor jedem Simulationslauf bestimmt. Berechnung von Extrema, Momenten, Konfidenzintervallen und heuristischen Verteilungsfunktionen für jede Komponente des Resultatsvektors während der Resultatsverarbeitung.

- Stochastische Analyse: Modellparameter und additive Störterme werden als Realisierung von Zufallsvariablen mit verschiedenen Verteilungsfunktionen für jeden Zeitschritt eines zeitdynamischen Modells bestimmt. Auswertung der Resultatsvektoren wie bei der Monte-Carlo Analyse.

- Räumliches Experiment: Simulation von Modellen mit raumbezogenen Standortparametern und -anfangswerten auf einer modellseitig lateral ungekoppelten Raumstruktur.

- Komplexe Experimente: Kombination des räumlichen Experiments mit den oben beschriebenen Analysetechniken, z.B. um über einem Raum lokale oder globale Konfidenzintervalle für Modellzustandsgrößen zu bestimmen.

Die Resultatsverarbeitung erlaubt die Navigation durch den Ergebnisraum und ermöglicht die Bestimmung von Extrema und Momenten über Teilen des Resultatvek tors. Ein ASCII-Interface gestattet den Export von Ergebnissen z.B. in Visualisierungssysteme oder für räumliche Experimente in geographische Informationssysteme.

SPRINT-S basiert auf der Nutzung der Message Passing Library MPL von IBM. Eine Umstellung auf das Message Passing Interface MPI ist leicht möglich.

Morphodynamik der Küstenregion

Dieter P. Eppel
Institut für Gewässerphysik
GKSS-Forschungszentrum

Vor dem Hintergrund eines ansteigenden Meeresspiegels und sich ändernder Sturmhäufigkeiten und Intensitäten gewinnt der an der deutschen Nordseeküste mit erheblichem finanziellem und personellem Aufwand betriebene Küstenschutz weiter an Bedeutung. Verfügbare Verfahren zur mittelfristigen Prognose von natürlichen und durch Baumaßnahmen hervorgerufenen Küstenveränderungen sind bisher wenig erfolgreich gewesen.

Ziel eines neu eingerichteten Forschungsprojekts ist die Vorhersage von morphologischen Veränderungen im Norddeutschen Küstenbereich auf Zeitskalen von Jahren und Dekaden. Dabei sollen Aussagen erarbeitet werden zur Vorhersagbarkeit morphologischer Veränderungen im allgemeinen, als auch sollen spezifische Problemzonen mit starken Erosionen untersucht werden.

Um eine realistische Darstellung des Energietransports vom regionalen Antrieb durch die Strömung des Schelfmeeres und durch großräumige Windfelder zu erreichen, wird ein integriertes Modell konstruiert, das aus genesteten Modulen zur Berechnung des lokalen Windfeldes, des Seegangs, der Strömung und des Sedimenttransports besteht.

Morphologische Änderungen laufen auf Zeitskalen ab, die weit außerhalb des deterministischen Bereichs der hydrodynamischen Modelle liegt. Stochastische Aspekte des Problems gewinnen dadurch große Bedeutung.

Es wird das Lösungskonzept diskutiert. Da eine direkte Lösung der Fokker-Planck Gleichung auf absehbare Zeit unmöglich sein wird, soll die Verteilungsdichte von Lösungstrajektorien durch direktes "Sampling" bestimmt werden. Es werden Abschätzungen zur benötigten Hardware und zu CPU-Zeiten zur Diskussion gestellt.

Ein LES-Modell für Massivparallelrechner mit verteiltem Speicher - Modellstruktur und erste Tests

Dr. Siegfried Raasch
Institut für Meteorologie und Klimatologie
Universität Hannover

1. Wissenschaftlicher Hintergrund

Grobstruktursimulationsmodelle bzw. LES-Modelle (LES: large eddy simulation) werden in der Meteorologie seit Anfang der siebziger Jahre zur Untersuchung turbulenter atmosphärischer Strömungen entwickelt und eingesetzt. Haupteinsatzgebiet war und ist die Erforschung der sogenannten konvektiven Grenzschicht. Diese reicht von der Erdoberfläche bis in ca. 1-2 km Höhe und ist durch Auf- und Abwinde geprägt, welche durch Erwärmung der Oberfläche, z.B. durch Sonneneinstrahlung, ausgelöst werden. Dabei interessiert man sich z.B. dafür, wie Wärme durch die Grenzschicht hindurch in die frei Atmosphäre transportiert wird oder wie sich Wolken am oberen Rand der Grenzschicht bilden und unter welchen Bedingungen sie sich wieder auflösen. Die an unserem Institut durchgeführten Projekte behandeln so unterschiedliche Probleme wie Fragen nach den Ursachen organisierter Strömungen (Konvektionsrollen und -zellen), dem Einfluß inhomogener Oberflächenstrukturen auf Struktur und Entwicklung der Grenzschicht oder der Lebensdauer sogenannter Wirbelschleppen, die sich von den Tragflügelspitzen landender Flugzeuge ablösen und eine Gefahr für nachfolgende Maschinen darstellen können. Gemeinsames Charakteristikum dieser Vorhaben ist die Untersuchung der Wechselwirkung turbulenter atmosphärischer Phänomene unterschiedlicher Größenordnung.

2. LES-Modelle

Wie auch in anderen meteorologischen Strömungsmodellen, werden in LES-Modellen die dreidimensionalen, zeitabhängigen Gleichungen für Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen) sowie Bilanzgleichungen für Temperatur (1. Hauptsatz), spezifische Feuchte und andere skalare Größen auf numerischem Wege nach der Methode finiter Differenzen (wie z.B. in unserem Modell) oder mittels spektraler Verfahren berechnet. Die Strömung wird dabei als inkompressibel angenommen. Zur Erfüllung dieser Bedingung muß neben den prognostischen Gleichungen noch eine Poisson-Gleichung für den sogenannten Störddruck gelöst werden. Die wesentliche Besonderheit von LES-Modellen besteht darin, daß die energietragenden, größeren Wirbel einer turbulenten Strömung direkt berechnet werden und nur die kleineren Turbulenzstrukturen, die durch das numerische Gitter des Modells nicht aufgelöst werden können, parametrisiert

werden. Für LES-Modelle verwendete numerische Verfahren sind in der Regel sehr einfach gehalten. Wir verwenden für unser Modell ein kartesisches Gitter. Differentialquotienten werden durch zentrale Differenzen approximiert. Das Zeitschrittverfahrn ist expliziter Natur. Die Lösung der Poisson-Gleichung erfolgt mittels Fouriertransformation und anschließender Lösung eines tridiagonalen Gleichungssystems.

3. Parallelisierungsmethode

LES-Modelle zeichnen sich durch einen sehr großen Kerspeicher- und CPU-Zeit-Bedarf aus. Wir planen für die nahe Zukunft Rechnungen mit bis zu 4×10^8 Gitterpunkten bei einem Gesamtspeicherbedarf von ca. 100 - 150 GByte und typischen Rechenzeiten von ca. 100 Stunden auf 512 PE's. Vor diesem Hintergrund wurde von uns eine parallelisierte Version des bisher eingesetzten LES-Modells für Massivparallelrechner mit verteiltem Speicher entwickelt und getestet. Die Parallelisierung dieses neuen Modells (PALM-1, s. http://www.muk.uni-hannover.de/institut/people/raasch/PALM-1/intro.html) geschieht über die Methode der Gebietszerlegung. Das Gesamtmodellgebiet wird in beide horizontalen Richtungen in einzelne, senkrecht stehende Quader zerlegt, wobei die Modellgleichungen auf den so entstehenden Teilgebieten von jeweils einem PE berechnet werden. Probleme mit lokalen Datenabhängigkeiten, die dadurch entstehen, daß für die Randgitterpunkte der Teilgebiete zentrale Differenzenquotienten berechnet werden müssen, werden durch die Einführung zusätzlicher, sogenannter Geisterränder gelöst, auf denen benötigte Daten entsprechend benachbarter PE's abgelegt werden. Für die Lösung der Poisson-Gleichung werden herkömmliche, nicht parallelisierte FFT's eingesetzt. Zu diesem Zweck muß das Felder der jeweils zu transformierenden Größe in die jeweilige Transformationsrichtung transponiert werden, damit die Gitterpunkte des Gesamtgebietes in der entsprechenden Richtung geschlossen auf einem PE vorliegen. PALM-1 ist in FORTRAN90 geschrieben, die Implementierung der Prozessorkommunikation erfolgte unter Verwendung des Message-Passing-Standards MPI.

4. Erste Erfahrungen / Skalierungstests

Das Modell wurde bisher auf den SGI/Cray-T3E Maschinen des RRZN, des ZIB und des NIC mit Gitterpunktszahlen bis zu 2×10^8 getestet und läuft seit ca. einem Jahr im Routinebetrieb. Dank der sehr schnellen Prozessorverbindungen auf den T3E-Rechnern benötigt die Prozessorkomunikation weniger als 5% der Gesamtrechenzeit. Das Modell skaliert hervorragend: selbst für große Prozessorzahlen halbiert sich die Rechenzeit bei Verdoppelung der Anzahl der eingesetzten PE's. Auf 400 PE's liegt die Rechengeschwindigkeit bei ca. 12 GFlops (30 MFlops/PE). Durch skalare Optimierung könnten dabei noch Geschwindigkeitssteigerungen erreicht werden.

Rechnerbedarf bei der hochauflösenden Simulation turbulenter Strömungen

Hans-Jakob Kaltenbach, *Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Sekr. HF1, Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, D-10623 Berlin*

Hintergrund

Die hochauflösende Simulation gewinnt zunehmend an Bedeutung bei der Untersuchung von Strömungsproblemen wie bei der Entwicklung von Methoden zur Strömungsbeeinflussung. Dabei werden die Navier-Stokes'schen Gleichungen in Raum (3D) und Zeit auf hochfeinen Gittern numerisch gelöst. Bei der „Direkten Numerischen Simulation" (DNS) werden alle Skalen der Bewegung bis hin zum Dissipationsbereich numerisch aufgelöst. Da die Zahl der Freiheitsgrade einer turbulenten Strömung mit der Reynoldszahl nach dem Potenzgesetz $Re^{9/4}$ anwächst, können mit dieser Methode lediglich Strömungen bei niedrigen Reynoldszahlen simuliert werden, wie sie zum Teil in Laborexperimenten auftreten. Mit dem Verfahren der Grobstruktursimulation (Large-eddy simulation, LES) wird der Reynoldszahlbereich technischer Anwendungen – vorwiegend aus den Sparten Turbomaschinen, Verfahrenstechnik und Fahrzeugbau und mit Einschränkungen für Luft- und Raumfahrt – für die hochauflösende Simulation zugänglich. Anders als bei DNS, die ohne Modellannahmen auskommt, beruht die LES-Methodik auf Modellansätzen zur Beschreibung der nichtaufgelösten Feinstruktur. Da jedoch der großskalige und energiereiche Anteil der turbulenten Bewegung numerisch erfaßt wird, genügen bei LES oft einfache Modellansätze vom Wirbelviskositätstyp.

Verwendete Navier-Stokes-Löser

Zur Lösung der inkompressiblen, instationären, drei-dimensionalen Navier-Stokes'schen Gleichungen wird ein Finite-Volumen-Verfahren mit versetzter Variablenanordnung eingesetzt. Die räumliche Diskretisierung mit zentralen Differenzen ist von 2. Ordnung, soll aber mittelfristig auf 4. Ordnung und durch Fourier-Methoden erhöht werden. Bei der zeitlichen Diskretisierung wird ein halbimplizites Verfahren verwendet, und zwar Runge-Kutta 3. Ordnung für explizit behandelte Terme und Crank-Nicholson für implizite Terme. Die Effizienz des Verfahrens hängt entscheidend vom Löser für die Poisson-Gleichung für den Druck ab. Dabei kommt ein Hybrid-Verfahren zum Einsatz, das neben Fourier-Zerlegung auf direkter Lösung (Schur-Komplement Verfahren unter Verwendung von speicherresidenten LU-Zerlegungen) und iterativer Lösung von 2D-Helmholtz-Problemen basiert[1]. Die in Zusammenarbeit mit dem *Center for Turbulence Research, Stanford University/NASA Ames Research Center* entwickelten Navier-Stokes-Löser sind für einfache kartesische Geometrien ausgelegt und für den Einsatz auf Vektorrechnern und Parallelrechner optimiert. Bei einer Problemgröße mit $560 \times 128 \times 128$ finiten Volumen erzielen wir gute Skalierbarkeit der Rechenzeiten bei Verwendung von $16, 32$ und 64 PEs auf T3E. Pro Zelle und Zeitschritt werden mit 62 PEs auf T3E ca. $1.7\mu s$ benötigt, wobei in jedem RK3-Unterschritt die Poisson-Gleichung gelöst wird. Wir erwarten ähnliche Durchschnittswerte bei simultaner Vergrößerung von Problemgröße und Prozessorzahl. Auf dem Vektorrechner Cray-J90 erreicht das Verfahren bei Autoparallelisierung unter Verwendung von 4 Prozessoren immerhin einen Speedup von 3.

Laufende und künftige Projekte

Im Rahmen des 1999 gegründeten Sonderforschungsbereichs 557 **Beeinflussung komplexer turbulenter Scherschichten** werden in den Teilprojekten *„TP3: Beeinflussung einer ablösenden turbulenten Grenzschicht durch kontrolliertes Einblasen und Absaugen an der Wand“* sowie *„TP6: Numerische Simulation, Beeinflussung und Eigenmoden-Analyse einer abgelösten Strömung mit Querkomponente“* turbulente Strömungen hinsichtlich der Frage untersucht, wie ihr Verhalten durch geeignete Manipulation mit Spoilern und Membranen, permeablen Oberflächen, Wirbelgeneratoren sowie mittels Einblasen und Absaugen verändert werden kann. Ziele der Beeinflussung durch aktive Methoden sind Reduktion der Rückströmung in einem Ablösegebiet und des damit verbundenen Druck- und Energieverlusts sowie Verminderung der Instationarität des Ablöseprozesses. Die Ergebnisse sollen letztendlich bei der Vermeidung unerwünschter Nebeneffekte wie verringertem Wirkungsgrad, Strömungslärm oder Bauteilschwingungen helfen.

Dabei wird unter anderem versucht, mit Hilfe des Verfahren der *Proper orthogonal decomposition* (Karhunen-Loéve- oder Eigenmode-Zerlegung) sogenannte niedrig-dimensionale Modelle zu gewinnen, mit denen sich das dynamische Verhalten beschreiben läßt. Von einer Strömungkonfiguration müssen dazu ca. 2000 Realisationen der Momentanfelder von Geschwindigkeit und Druck aufbewahrt und mit statistischen Verfahren analysiert werden. Bisher wurden vorwiegend Strömungen mit laminar-turbulentem Umschlag (Transition) untersucht. Künftig liegt der Schwerpunkt bei den technisch relevanten turbulenten Strömungen, wobei angestrebt wird, den labornahen Reynoldszahlbereich mit DNS zu simulieren.

Rechneranforderungen

Die verwendeten Algorithmen erzielen auf Vektor-, Vektorparallel- und Massivparallelrechnern eine hohe Performance. Als Kernstück des Algorithmus kommt dem hybriden Poisson-Löser eine besondere Bedeutung zu. Hier erweist sich die derzeitige Beschränkung des prozessor-lokalen Speichers auf 128 MB als Haupthindernis für weitere Performance-Steigerungen. Wüschenswert ist ein Speicherausbau einer begrenzten Zahl von PEs auf 512 MB.

Die geplante Erhöhung der untersuchten Reynoldszahlen auf labornahe Werte (wegen der damit gegebenen besseren Vergleichbarkeit von Rechnung und Experiment) führt wegen der oben genannten mehr als quadratischen Zunahme der Zahl der Freiheitsgrade zu einer Steigerung des Jahresbedarfs um eine Größenordung, d.h. auf Kontingente von mehreren 10000 ZPL.

Für die Durchführung umfangreicher Nachuntersuchung und statistischer Auswertung der erzeugten Datenbasen (jeweils einige zig GByte pro Simulation) hat sich in der Vergangenheit die Verfügbarkeit über den Vektorrechner Cray-C90 mit großem Arbeitsspeicher sowie schneller Anbindung an die Platten des T3E als sehr vorteilhaft erwiesen. Bei einer eventuellen Ersatzbeschaffung sollte dies berücksichtigt werden.

Literatur

[1] Kaltenbach, H.-J. & Jäkel, A. 1999 Simultaneous iterative and direct solution of Poisson's equation on massively parallel computers. *Submitted to Int. J. Numerical Methods in Fluids*

Numerische Untersuchungen zum qualitativen Lösungsverhalten in dreidimensionalen Konvektionsströmungen

A. Demircan, F. Feudel, S. Rüdiger, N. Seehafer
Institut für Physik, Universität Potsdam

Das Projekt befaßt sich mit qualitativen Untersuchungen des Lösungsverhaltens der dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen sowie der Bewegungsgleichungen der Magnetohydrodynamik. Es besteht aus zwei Teilkomponenten, die sich tangieren und gegenseitig ergänzen.

Zum einen geht es um das Problem, unter welchen Umständen ein Zustand mit einem durch Konvektion erzeugten Magnetfeld (Dynamoeffekt) im zeitasymptotischen Limes auftreten kann. Es ist unmittelbar mit der Frage nach dem Ursprung kosmischer Magnetfelder verbunden und daher von zentraler Bedeutung für die Astrophysik. Die grundlegenden Gleichungen sind die Boussinesq-Gleichungen der thermischen Konvektion, die durch die Induktionsgleichungen zu den magnetohydrodynamischen-Gleichungen (MHD-Gleichungen) ergänzt werden. Das Problem soll in drei Dimensionen in ebener Geometrie unter der Annahme periodischer Randbedingungen in horizontaler und *stress-free* Randbedingungen in vertikaler Richtung mit Hilfe eines Pseudo-Spektralverfahrens untersucht werden. Im ersten Schritt soll zunächst der Einfluß der Rotation in Form der Coriolis Kraft auf die rein hydrodynamische Problemstellung, d.h. Rayleigh-Bénard-Konvektion ohne Magnetfeld, studiert und programmtechnisch realisiert werden. Im zweiten Schritt soll das Problem durch Ankopplung des Magnetfeldes auf die MHD-Gleichungen ausgedehnt werden.

Im zweiten Teil geht es darum, allgemeine Strukturbildungsphänomene in der reinen Hydrodynamik mit Hilfe von Simulationen und Methoden der Bifurkationsanalyse zu untersuchen. Einen inhaltlichen Schwerpunkt bildet dabei die theoretische Beschreibung und Modellierung kürzlich durchgeführter hydrodynamischer Experimente zum Wärmetransport in dünnen Schichten, in denen komplizierte Spiralmuster mit chaotischer Dynamik bereits kurz oberhalb der Rayleigh-Instabiliät beobachtet wurden. Dazu sollen die hydrodynamischen Gleichungen der Rayleigh-Bénard-Konvektion in der Boussinesq-Approximation im hier relevanten Fall zylindrischer Geometrie mit festen Rändern *no-slip*, für die ein Pseudospektral-Code auf der Basis von Chebyshev-Polynomen bereits entwickelt wurde, untersucht werden. Um das Entstehen der Spiralmuster zu verstehen, sollen zum einen die Phasenübergänge des Systems bei Variation der Kontrollparameter sowie zum anderen die Dynamik von Defekten untersucht werden. Die Erweiterung der Untersuchungen auf andere hydrodynamische Systeme, in denen ähnliche Musterbildungen bzw. das unmittelbare Auftreten irregulärer Strukturen in Form chaotischer Lösungen beobachtet wurden, soll helfen, allgemeingültige Gesetzmäßigkeiten dieser Phänomene abzuleiten.

Die Dynamik dieser Systeme wird durch das hohe Aspektverhältnis (Verhältnis von Breite und Tiefe der Schicht) erzeugt. Das bedeutet, daß die Rechnungen mit hoher Auflösung durchgeführt werden müssen, was hohe Anforderungen an die Rechnerkapazität stellt. Im ersten halben Jahr sollen dreidimensionale Probleme mit einer Auflösung von 32x32x16 Gitterpunkten gerechnet werden. Für beide Teilprojekte zusammen wird eine CPU-Zeit von annähernd 600 CPU-Stunden abgeschätzt. Diese Abschätzung beruht auf ersten Testrechnungen, die auf Crassus durchgeführt wurden. In der zweiten Phase soll das Aspektverhältnis der Schicht bzw. des Zylinders auf das Vierfache vergrößert werden, so daß auch die Zahl der Gitterpunkte auf 128x128x16 Gitterpunkte vergrößert werden muß. Das erhöht sowohl den Bedarf an Speicher als auch an Rechenzeit. Im Programm für die zylindrische Rayleigh-Bénard-Konvektion wird für die Zeitintegration ein implizites Verfahren verwendet, bei der die Inverse der Jakobideterminante zu bilden ist, so daß diese im Hauptspeicher permanent gespeichert werden sollte. Dazu wird grob ein permanenter Speicherbedarf von etwa 600 Mbyte abgeschätzt. Die größten Einzeldateien bilden die Speicherung der dreidimensionalen räumlichen Struktur der physikalischen Felder (Geschwindikeits-, Temperatur- und Magnetfeld) in ihrer zeitlichen Evolution, um daraus Videotapes zusammenstellen zu können. Die abgeschätzte Größe der Datei liegt bei ungefähr 300 Mbyte.

Berechnung turbulenter aerodynamischer Strömungen auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen

M. Franke, T. Rung, H. Lübcke, J. Beutner, F. Thiele

TU Berlin, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik,
Müller-Breslau-Str. 8, D-10623 Berlin

Zukünftige Verkehrs- und Transportflugzeuge stellen besonders hohe Anforderungen an die aerodynamische Leistungsfähigkeit von Tragflügeln sowohl im Hochauftriebsbereich als auch im Reiseflug. Für die Hochauftriebsphase bei Start und Landung eines Flugzeugs werden Tragflügel üblicherweise mit speziellen Klappensystemen ausgerüstet, die sich durch eine außerordentlich komplexe Strömungsphysik mit ausgeprägten Wechselwirkungen zwischen Vorflügel, Hauptprofil und Hinterkantenklappen auszeichnen. Im Reiseflug bei hohen Unterschallgeschwindigkeiten ist für transsonische Tragflügel charakteristisch, daß auf der Saugseite ein Überschallgebiet entsteht, welches stromab durch einen Verdichtungsstoß abgeschlossen ist. Von besonderer Bedeutung ist hier die Kenntnis der Stoß/Grenzschicht-Wechselwirkung, um auftretende Strömungsablösungen vorhersagen zu können. Nur mit genauer und detaillierter Kenntnis dieser Strömungsvorgänge kann eine optimale Auslegung erfolgen, was mit höchsten Anforderungen an die Güte der im Entwurfsprozeß verwendeten numerischen Simulationsverfahren und auch deren geometrischer Flexibilität verbunden ist. Dies schließt insbesondere eine angemessene Darstellung turbulenter Effekte ein.

In der Vergangenheit konzentrierte sich die numerische Simulation aerodynamischer Strömungen in der Regel auf strömungsphysikalisch vergleichsweise einfache Fälle, weswegen die Turbulenzmodellierung zumeist auf relativ einfache Ansätze beschränkt blieb. Ungeachtet ihrer simplen Formulierung und der numerischen Vorteile ist eine solche Vorgehensweise mit einer Reihe von Problemen in Bezug auf die physikalisch korrekte Darstellung einfachster praxisrelevanter Strömungsphänomene behaftet. Die Unzulänglichkeiten herkömmlicher linearer Wirbelzähigkeitsmodelle (EVM) bei der Vorhersage komplexer Interaktionsmechanismen zwischen verschiedenartigen, vom Gleichgewichtszustand abweichenden Deformationsgeschwindigkeitsfeldern und den dazugehörigen Reynoldsspannungen motiviert die Entwicklung höherwertiger Modellierungsansätze.
Der Einsatz komplexer nichtlinearer impliziter Reynoldsspannungsmodelle (RSM) ist im industriellen Kontext sicherlich gegenwärtig noch wenig verbreitet. Es wird daher angestrebt, die Vorhersagequalität durch die Übertragung wichtiger Erkenntnisse, welche im Rahmen einer praxisfernen, aufwendigen Modellierung (z.B. RSM) gewonnen werden, auf eine praxisnahe, weniger aufwendige Modellbildung (z.B. EVM) signifikant zu steigern. Das Gesamtziel ist die Entwicklung einer hierarchischen Modellfamilie aus linearen Eingleichungs-, linearen/nichtlinearen Zweiparameter- und Reynoldsspannungsmodellen zur verbesserten Strömungsvorhersage. Für die Turbulenzmodellvalidierung und zum besseren Verständnis der komplexen Strömungsvorgänge werden auch die Di-

rekte Numerische Simulation (DNS) und die Large-Eddy Simulation (LES) eingesetzt.

Als numerische Simulationsprogramme kommen die beiden Finite-Volumen-Verfahren FLOWer und ELAN3D zum Einsatz. Das Programm FLOWer ist im Rahmen des Verbundvorhabens MEGAFLOW durch DASA Airbus, DLR und verschiedene Hochschulen weiterentwickelt worden. Da FLOWer als Entwurfswerkzeug für industrielle Anwendungen konzipiert ist, ist die Fähigkeit des Lösers zur Anwendung auf Parallelrechnern unabdingbar, was sich sowohl durch die Anforderungen an Rechengeschwindigkeit als auch an Hauptspeicher ergibt. Das Verfahren ist auf verschiedensten skalaren, Vektor- und Parallelrechnern lauffähig und erfolgreich auf die CRAY T3E-900 portiert worden. Auch das Entwicklungsverfahren ELAN3D ist sowohl für skalare und parallele Architekturen konzipiert und kommt auf der T3E zum Einsatz. Eine speicherplatztechnisch reduzierte parallele Version wird vorwiegend zur DNS und LES eingesetzt.
Das Preprocessing stützt sich auf die graphische Arbeitsumgebung MUPPET, die der einfachen Übernahme von Rohnetzen in verschiedenen Formaten und der schnellen Aufbereitung von Simulationsverfahren dient. Zur Visualisierung werden das MIT-Programm pV3 sowie das kommerzielle Tool TECPLOT verwendet.

Die implementierten Modelle werden – neben der Basisvalidierung an verschiedensten akademischen Testfällen – insbesondere auch an vorwiegend industrienahen, anwendungsrelevanten Fällen (Flügel, generische Flügel/Rumpf-Verbindung sowie komplette Flügel/Rumpf-Konfigurationen) getestet. Dabei kommen Netze mit bis zu 6,8 Millionen Punkten zum Einsatz, auf denen – bei Verwendung von 128 T3E-Knoten – eine Performance von bis zu 7,5 GFLOPS erreicht wird. Eine Steigerung der Vorhersagequalität durch den Einsatz höherwertiger Modelle kann dabei in allen Fällen nachgewiesen werden. Eine Quantifizierung des Mehraufwandes an Rechnerressourcen für den Einsatz linearer höherwertiger Modelle wird an einer ausgewählten Konfiguration durchgeführt, wobei sich eine Steigerung der benötigten Rechenzeit um unter 25% bei nahezu gleichbleibender Speicheranforderung ergibt.

Vor dem Hintergrund der gestiegenen industriellen Anforderungen an die Qualität numerischer Simulationen läßt die verbesserte Ergebnisqualität bei gleichzeitig tolerablem Overhead den Einsatz höherwertiger Modelle im industriellen Entwurfsbereich als empfehlenswert erscheinen. Die Frage des Mehraufwands ist aus Anwendersicht von besonderer Bedeutung, da in Zukunft für komplexere Konfigurationen (Flügel/Rumpf/Leitwerk oder Flügel/Rumpf/Pylon/Triebwerk) mit einer erheblichen Steigerung der Netzpunktzahlen zu rechnen ist. Diese Entwicklung wird zum einen nur durch den Einsatz modernster Supercomputer, zum anderen aber auch nur mit effizienten numerischen Verfahren zu bewältigen sein. Weiterführende Arbeiten werden daher sowohl die Verbesserung der Vorhersagequalität der numerischen Simulationen durch höherwertige Turbulenzmodellierung als auch die Umsetzung in der Anwendung auf komplexe aerodynamische Geometrien umfassen.

Simulation der Selbstzündung von Brennstofftropfen in einer Reihe

Th. Coordes, S. Schnaubelt, A. Bobsin, J.C. Dittmer, Chr. Eigenbrod, H.J. Rath

ZARM - Universität Bremen

Im DROP-COS (Development and Research-Program on Pollutant-Reduced COmbustion Systems) Projekt [1] wird die Aufheizung, Verdampfung, Selbstzündung und Verbrennung von Brennstofftropfen (Diesel, Kerosin bzw. entsprechende Modellbrennstoffe) experimentell und numerisch untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Verdampfungs- und Selbstzündverhalten von Tropfen unter Bedingungen, wie sie in realen Brennkammern (Fluggasturbinen, Kraftwerksturbinen und Verbrennungsmotoren) vorkommen. Die gewählten Umgebungsbedingungen für Druck und Temperatur liegen zwischen 3 und 20bar bzw. zwischen 600 und 1100K. In diesen Bereichen tritt das Phänomen der Zweistufenzündung mit einer kalten (cool flame) und einer heißen (hot flame) Zündung auf. Als Modellbrennstoffe werden deshalb zunächst die einkomponentigen Brennstoffe n-Heptan und n-Dekan verwendet, da hier bereits evaluierte Kinetiken aus dem DROP-COS Projekt vorliegen. Später soll mit Hilfe von Kinetiken für neu entwickelte zweikomponentige Modellbrennstoffe die Zündung von Kerosin und Diesel simuliert werden.

Die Experimente werden am Fallturm Bremen, der eine kompensierte Schwerkraft (10-6g) für die Dauer von 4,74s bietet, unter Schwerelosigkeitsbedingungen durchgeführt. In einen elektrisch beheizten Ofen, der in einer Druckkammer eingebaut ist, werden die Tropfen möglichst schnell eingefahren. Das Experiment wird dabei in eine Fallkapsel integriert. Mittels LIF-Spektroskopie (Laser Induced Fluorescence) über einen Excimer-Laser werden die bei den chemischen Reaktionen entstehenden (Zwischen-)Produkte mit einer bildverstärkten Hochgeschwindigkeitskamera (250Hz) aufgenommen, so daß Zündzeitpunkte und Spezieskonzentrationen bestimmt werden können.

In den numerischen Simulationen (1D, 2D) werden die instationären Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Spezies für Flüssig- und Gasphase mit Hilfe finiter Differenzen gelöst. Alle Stoffwerte und physikalischen Transporteigenschaften werden dabei temperatur- und druckabhängig berechnet. Weiterhin wird die Regression des Tropfens aufgrund des Verdampfungsprozesses berücksichtigt und das Gitter nach jedem Zeitschritt an die neue Phasengrenze angepaßt, um die Phasengrenzbedingungen möglichst genau aufzulösen. Zusätzlich wird in der Gasphase eine detaillierte reduzierte Reaktionskinetik für den jeweils gewählten Brennstoff gelöst, um das Phänomen der cool flame berechnen zu können. Die einfachste Kinetik für n-Heptan umfaßt 16 Spezies und 50 Reaktionen und die detaillierteste Kinetik für n-Dekan 68 Spezies und 567 Reaktionen. Entscheidend für eine erfolgreiche Simulation ist eine ausgewogene Balance zwischen den Nieder-

und Hochtemperaturreaktionen in den mittleren Temperaturbereichen. Zur Lösung des algebraischen Gleichungssystems wird das BDM (Backward Differentiation Method) Verfahren eingesetzt, um im Bereich der Zündung das steife lineare Gleichungsystem und die auf verschiendenen Zeitskalen ablaufenden Prozesse stabil zu lösen. Eine 1D-Simulation [2] benötigt dabei auf einer aktuellen Workstation (HP V-Class 2250) je nach eingestellten Umgebungsbedingungen zwischen 8-24 Stunden, so daß das neu entwickelte 2D-Programm mit Hilfe der Multi-Block Methode parallelisiert wurde.

Die zeitliche Entwicklung stellarer Instabilitäten

S. Chernigovskij[1], W. Glatzel[2], K.J. Fricke[2]
[1]Institute of Mathematics, Academy of Sciences of Moldova, Kishinev
[2]Universitäts - Sternwarte Göttingen

Theoretische Untersuchungen der Stabilität stellarer Hüllen, die in den letzten Jahren in der Abteilung II der Universitäts - Sternwarte Göttingen durchgeführt wurden, ergaben für nahezu alle leuchtkräftigen Objekte, insbesondere für massereiche Sterne und Wolf - Rayet Sterne, extrem starke Instabilitäten mit Anwachsraten im dynamischen Bereich. Sie sind mit dem Auftreten zusätzlicher Moden verbunden und werden daher als "Strange - Mode - Instabilitäten" bezeichnet. Sowohl der klassische κ- als auch der ε- Mechanismus scheidet als Ursache der Instabilitäten aus. Erste Ansätze zu einem physikalischen Verständnis des Phänomens zeigen, daß kurze thermische Zeitskalen sowie dominanter Strahlungsdruck dabei eine entscheidende Rolle spielen.

Die lineare Stabilitätsanalyse ergab bisher eine bemerkenswerte Übereinstimmung eines Teils der theoretisch bestimmten Instabilitätsgrenzen im Hertzsprung - Russell - Diagramm (HRD) mit dem aus Beobachtungsbefunden bekannten Humphreys - Davidson - Limit. Auch das Gebiet im HRD, in dem Variabilität bei massereichen Sternen beobachtet wird, stimmt mit dem theoretisch bestimmten Instabilitätsgebiet überein.

Mit dem Ziel einer Bestimmung des Resultats der in der linearen Analyse entdeckten Instabilitäten werden zur Zeit numerische Simulationen von deren zeitlicher Entwicklung bis in den nichtlinearen Bereich unternommen. Es ergeben sich Geschwindigkeiten mit Amplituden von bis zu einigen 10^2 km/sec, die bei massereichen Sternen oberhalb der Entweichgeschwindigkeit liegen und daher pulsationsgetriebenen Massenverlust beinhalten. Die mittleren Massenverlustraten können dabei Werte von $10^{-3} M_\odot/a$ erreichen. Letzteres weist darauf hin, daß hier ein Schlüssel zum Verständnis starken stellaren Massenverlusts liegen könnte, der nicht nur für die Stellarphysik fundamentale Bedeutung besitzt.

In Ermangelung eines entsprechenden numerischen Codes waren die Simulationen der nichtlinearen Entwicklung von Strange - Mode - Instabilitäten bis jetzt

auf sphärische Geometrie beschränkt, was angesichts der Tatsache, daß Strange - Mode - Instabilitäten auch im Spektrum nichtradialer Störungen auftreten und ihre maximale Anwachsrate oft bei endlichem harmonischem Grad erreichen, äußerst unbefriedigend ist. Hinzu kommt, daß die betrachteten Objekte hohe Rotationsraten aufweisen, was eine Untersuchung des Einflusses von Rotation auf Strange - Mode - Instabilitäten notwendig macht und damit eine mehrdimensionale Behandlung des Problems erfordert.

In Richtung einer Lösung dieses Problems wurde deshalb in interdisziplinär - internationaler Zusammenarbeit mit dem Institut für Mathematik der Moldawischen Akademie der Wissenschaften — im ersten und bisher einzigen Versuch — ein Verfahren zur mehrdimensionalen Simulation nichtlinearer nichtradialer Pulsationen entwickelt, wobei an Genauigkeit und Verläßlichkeit besondere Anforderungen gestellt wurden. Es beruht auf einem impliziten, voll konservativen, Lagrange'schen finiten Differenzenschema über einem Dreiecksgitter, das – falls erforderlich – zwischen den Zeitschritten rekonstruiert wird.

Über die erfolgreiche Absolvierung der gängigen Tests der Strahlungshydrodynamik hinaus besteht ein wesentliches Merkmal des entwickelten Codes darin, daß die Simulationen ohne zusätzliche externe Störung das unabhängig bestimmte lineare Stabilitätsverhalten (Frequenzen, Anwachsraten) reproduzieren. Diese Eigenschaft ist unabdingbar, da andernfalls nicht entschieden werden kann, ob Entwicklung und Resultat einer physikalischen Instabilität oder einer externen Störung simuliert werden. (Selbst die meisten eindimensionalen Schemata genügen diesen Anforderungen nicht.)

Eine vollständige Simulation sollte ca. 10^5 Zeitschritte umfassen, für die bei Verwendung von 100x100 Gitterpunkten und einem Prozessor im Mittel je 5 min CPU - Zeit benötigt werden. Wegen der extremen Bedingungen hinsichtlich Genauigkeit sowie räumlicher und zeitlicher Auflösung (angestrebte Gittergröße: 300x300 Punkte, wünschenswert wären 1000x1000 Punkte) ist das Problem nur durch den Einsatz von Höchstleistungs - Parallelrechnern zu lösen. Der zeitaufwendigste Schritt der Berechnung von Zustandsgleichung und Materialfunktionen ist bereits parallelisiert, eine vollständige Parallelisierung des Programms steht allerdings noch aus. Hier geht es im wesentlichen noch um die parallelisierte Invertierung von schwach besetzten, wegen des Gitters unstrukturierten Matrizen.

Das Projekt wurde bzw. wird von der VW - Stiftung und von der DFG finanziell gefördert.

Prozesse im Interstellaren Medium auf unterschiedlichen Skalen

Gerhard Hensler
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Kiel

1 Astrophysikalische Mehr-Skalen-Probleme

Neben den Sternen stellt das aus Gas und Staub bestehende interstellare Medium (ISM) die zweite wichtige Komponente der Galaxien dar. Die Wechselwirkungen zwischen diesen beiden Komponenten sind vielschichtig. Zum einen kühlt das ISM und ist in seiner kühlsten Phase für die Sternentstehung verantwortlich, zum anderen wird es durch Sternstrahlung und –winde aufgeheizt sowie durch Materie, die die Sterne während und am Ende ihres „Lebens“ an das ISM zurückliefern, „gefüttert“ und mit schwereren Elementen angereichert. Die Fusion leichter Elemente dient als Energiequelle der Sterne.

Sterne schwerer als rd. 10 Sonnenmassen explodieren als Supernovae und werfen dabei zig Mio. Grad heißes Gas aus, das heftig expandiert, solange es sich gegenüber seiner Umgebung im Überdruck befindet. Dabei entstehen kleinskalige Stoßfronten hoher Verdichtung, die wiederum durch Instabilitäten aufbrechen und klumpen. Ähnliches geschieht, wenn ein massereicher Stern im Laufe seines „Lebens“ durch Strahlungsdruck getrieben seine äußere Hülle als Wind abstreift. Auch hier bildet sich eine heiße, expandierende Blase, deren Stoßfront zusätzlich noch durch die ionisierende Sternstrahlung beeinflußt wird.

Innerhalb einer Galaxie können, durch deren Gravitationsenergie bestimmt, drei Gasphasen koexistieren, die sich durch Heizprozesse und radiative Kühlung des Gases im Quasi-Gleichgewicht befinden: kühles, dichtes molekulares Gas, „warmes“ (8000 K) Gas mit neutralem Wasserstoff (häufigstes Element im Universum) und Mio. Grad heißes, sehr dünnes Gas. Da diese „Gasphasen“ nicht getrennt voneinander auftreten, sondern einander umgeben und sich dynamisch durchdringen, müssen sich Grenzflächen bilden, die im Übergang zwischen den Phasen nicht im Gleichgewicht verbleiben. Aufgrund der geringen Dichten im ISM können Strahlung und Teilchen von einer Gaskomponente in die andere eindringen und koppeln auf diese Weise die „Gasphasen“ energetisch und materiell.

Im Verhältnis zu den immensen Ausdehnungen z.B. der Gasblasen von bis zu mehreren Kilolichtjahren stellen die Übergangszonen sehr schmale Gebiete dar, fast dünnen Häutchen gleich. Andererseits sind sie die wichtigsten, aber bisher am wenigsten verstandenen Zonen für den Energiehaushalt des ISM und das Mischen verschiedener Elemente und damit für die beobachtbare Entwicklung von Galaxien. Diese Entwicklung spielt sich hauptsächlich dynamisch auf den großen Galaxienskalen ab und kann dort simuliert werden. Von seiten der Astrophysik besteht daher vitales Interesse und gilt es als die dominierende Herausforderung an numerische Simulationen, den Materie- und Energietransport in Grenzschichten zwischen „Gasphasen“ des ISM auf kleinen Längenskalen simultan mit großskaligen Strömungen und Effekten behandeln zu können.

Die in der Kieler Arbeitsgruppe untersuchten Phänomene der Entwicklung des ISM umfassen großskalige Simulationen a) von heißen Gasblasen lokal und zeitlich akkumulierender Supernova-Explosionen mit kleinskaligen Stoßfronten und Turbulenz, b) von expandierenden heißen Sternwindblasen mit durch Sternstrahlung verstärkten kleinskaligen Effekten, c) der strukturellen Entwicklung kühler, in strömendes heißes Gas eingebetteter interstellarer Wolken und d) der dynamischen und chemischen Entwicklung von Galaxien als Ganzen mit ihren Unterstrukturen des ISM, soweit sie numerisch auflösbar sind.

2 Die Gleichungen und das numerische Verfahren

Die zur Behandlung erforderlichen hydrodynamischen Gleichungen werden durch finite Differenzen auf einem Eulerschen (raumfesten) Gitter diskretisiert. Es wird Zylindersymmetrie verwendet, so daß die auftretenden Symmetriebedingungen an der Rotationsachse und der Äquatorebene es erlauben, nur einen Quadranten der Meridionalebene berechnen zu müssen.

Als Advektionsverfahren wird „monotonic transport“ von van Leer (1977) angewandt, ein Verfahren, das von 2. Ordnung akkurat im Raum ist. Durch die Anwendung von Operator-Splitting wird Genauigkeit quasi-zweiter Ordnung in der Zeit erreicht. Es wird künstliche Viskosität benutzt, um Schocks aufzulösen. Die meisten Gesichtspunkte dieser Verfahren werden ausführlich diskutiert bei Stone & Norman (1992a,b). Das vorhandene Gravitationspotential wird durch die Poisson-Gleichung beschrieben und mit Hilfe eines ADI-Verfahrens berechnet (Black & Bodenheimer 1975). In den Studien, in denen Strahlungstransport wichtig ist, wird dieser mittels der grauen, flußlimitierten Diffusionsnäherung durchgeführt (Levermore & Pomraning 1981, Yorke & Kaisig 1995). In jedem hydrodynamischen Zeitschritt wird in den einen Studien die Ionisationsstruktur von Wasserstoff und der Transport der wasserstoff-ionisierenden Photonen berechnet, in anderen die Wärmeleitung durch Elektronen, in einem impliziten Unterschritt berücksichtigt (gemäß dem Schema von Crank & Nicolson (1947) und Juncosa & Young (1957), wobei für die Kopplung der beiden Raumrichtungen die Zwischenschrittmethode von Yanenko (1971) benutzt wird). In Simulationen zur Galaxienentwicklung werden sämtliche Wechselwirkungsprozesse zwischen Sternen und Gas wie Sternentstehung und -tod, -strahlung und -winde sowie unter den Gasphasen wie z.B. Heizung und Kühlung in jedem Zeitschritt und an jedem Gitterpunkt berechnet. Für einige Probleme werden zur Verbesserung der räumlichen Auflösung bereits mehrere ineinander geschachtelte, feinere Untergitter benutzt.

3 Benötigte Betriebsmittel für das Forschungsvorhaben

Die hier angewandten Verfahren sind vektorisiert und werden bereits an Vektorrechnern in Kiel, Berlin und Jülich eingesetzt. Ihre Geschwindigkeit erreicht bereits 600 MFlop/s je T90-Prozessor bzw. 80 MFlop/s je J90-Prozessor. Aufgrund der Struktur der verwendeten Algorithmen eignen sich die Programme ebenfalls zur Parallelisierung. Eine an Parallelrechner angepaßte Programmversion existiert zur Zeit noch nicht, weil die Projektförderung wissenschaftlich begründet und zur Promotion zeitlich eingeschränkt ist. Dieses soll aber in naher Zukunft in Angriff genommen werden. Der Bedarf ist mit mindestens 16 Prozessoren und mindestens 1 GByte gemeinsamem Speicher zu beziffern. Ein Plattenplatz pro Modell von 10 GBytes wäre erforderlich, ebenso ein Archivspeicher in der Größe von 1-2 TBytes. An Rechenleistung sollten den z.Zt. laufenden und von der DFG unterstützten 3 Projekten zur Thematik „ISM in Galaxien“ rd. 100 CPU-kh zur Verfügung stehen.

Für die Datenübertragung zwischen Höchstleistungsrechenzentrum und lokalem Hochleistungsrechner (bzw. dem Arbeitsplatzrechner) sind Netzgeschwindigkeiten von deutlich über 100 Mbit/s erforderlich.

Computing Gravitational Waves, Neutron Stars, and Black Hole Collisions on Large Scale Computers

Ed Seidel

Max-Planck-Institut-für-Gravitationsphysik, Potsdam

I will give an overview of recent developments in solving Einstein's equations for the gravitational field on large supercomputers. These equations describe the dominant and fundamental force in the universe—gravity—and govern the behavior of such exotic objects as black holes, neutron stars, and Universe itself. Although the equations were written down near the beginning of this century, they are a set of dozens of nonlinear, coupled, elliptic-hyperbolic equations containing thousands of terms. Hence, it is impossible to obtain detailed 3D solutions only with powerful computers. However, only during this decade has computer power advanced to the point where crude solutions are possible on the largest machines available.

I will review recent simulations performed by the group at the Max-Planck-Institut-fuer-Gravitationsphysik, in collaboration with other groups (notably Washington University in St. Louis, NCSA, and the University of the Balearic Islands). These include astrophysically motivated simulations of black hole collisions, collisions of neutron stars, and simulations of pure theoretical interest including the dynamics of strongly gravitating pure wave systems that may collapse to black holes. Movies of simulations will be shown.

This project is rather large enterprise, requiring expertise from a number of different areas of research in physics, mathematics, astronomy, and computational science. In order to foster the collaboration between the different groups needed to make this project successful, we are also developing a system for collaborative research and development for a distributed group of researchers at different institutions around the world. In a new paradigm for *collaborative* computational science, the computer code and supporting infrastructure itself becomes the collaborating instrument, just as an accelerator becomes the collaborating tool for large numbers of distributed researchers in particle physics. The design of this "Collaboratory" allows many users, with very different areas of expertise, to work coherently together, on distributed computers around the world. Different supercomputers may be used separately, or for problems exceeding the capacity of any single system, multiple supercomputers may be networked together through high speed gigabit networks.

Central to this Collaboratory is a new type of community simulation code, called "Cactus". The scientific driving force behind this project is the simulation of Einstein's equations for studying black holes, gravitational waves, and neutron stars, which has brought together researchers in very different fields from many groups around the world to make advances in the study of relativity and astrophysics. But the system is also being developed to provide scientists and engineers, without expert knowledge of parallel or distributed computing, mesh refinement, and so on, with a simple framework for solving any system of partial differential equations on many parallel computer systems, from traditional supercomputers to networks of workstations. I will give a brief overview of the concepts behind the Cactus code, and the distributed application we are currently building to solve large problems using high speed networks.

N–Körper–Simulationen zur Entwicklung von Galaxien

Christian Theis
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Univ. Kiel, 24098 Kiel, Germany

Vergleicht man Aufnahmen von alten Galaxien in der Umgebung der Milchstraße mit Beobachtungen von Galaxien im jungen Universum, so wird deutlich, daß Galaxien keine stationären Gebilde sind, sondern vielmehr Objekte, die sowohl durch eine kurze, aber heftige Kollapsphase als auch eine langfristige säkulare Entwicklung gekennzeichnet sind. Generell bestehen Galaxien (bei einer typischen Masse von etwa $10^{11} - 10^{12} M_\odot$) aus mehreren unterschiedlichen Komponenten: Einem nur gravitativ in Erscheinung tretenden Halo aus sog. Dunkler Materie sowie den baryonischen Komponenten, also den Sternen und dem Gas. Während sich Dunkle Materie und Sterne in Galaxien dynamisch gleich – als stoßfreie, rein gravitative N–Körper–Systeme – betrachten lassen, muß das Gas aufgrund des möglicherweise unterschiedlichen dynamischen Verhaltens ihrer Komponenten noch weiter differenziert werden, und zwar in zumindest eine diffuse ausgedehnte Gasphase und eine klumpige Wolkenkomponente. (Beispielsweise können die Wolken Einfall in die Galaxie zeigen, während das diffuse Gas nach außen strömt oder als galaktischer Wind sogar verloren gehen kann.) Weiterhin ist zu berücksichtigen, daß in den Wolken Sternentstehung auftreten kann. Die Sterne wiederum beeinflussen das Gas durch Energieeintrag und Massenrücklieferung aufgrund von Strahlung, Winden und Sterntod.

Will man die Frühphase der Galaxienentwicklung modellieren, so kommt den Gaswolken eine besondere Bedeutung zu, da Sterne noch kaum gebildet sind und ein großer Anteil der baryonischen Materie in Form von Wolken mit einer typischen Masse von $10^4 - 10^6\ M_\odot$ vorliegt. Diese Wolken können über inelastische Stöße Energie dissipieren und damit einen Kollaps der Protogalaxie einleiten bzw. verstärken. Weiterhin kann in diesen Molekülwolken Sternentstehung stattfinden, wodurch die Wolkenmaterie teilweise in eine stoßfreie, und daher nicht–dissipative Sternkomponente übergeführt wird. Auch kann Aufheizung durch Sternstrahlung und *Supernovae* das Wolkengas in ein diffuses warmes bzw. heißes Gas umwandeln. Ein konsistentes Bild der frühen Galaxienentwicklung muß daher diese drei baryonischen Komponenten (Wolken, Sterne und diffuses Gas) berücksichtigen. Da der Hauptteil der baryonischen Materie aus Gaswolken und Sternen besteht, ist deren korrekte dynamische Behandlung besonders wichtig.

Betrachtet man die Langzeitentwicklung von Spiralgalaxien, so sind die Rollen von Gas und Sternen vertauscht. Bei Galaxien wie der Milchstraße sind die Sterne die dominante baryonische Komponente, während das Gas etwa 10% der Masse beträgt. Trotzdem ist die Gaskomponente auch hier von besonderer Bedeutung, da Sternentstehung nach wie vor in den Wolken stattfindet, die Stabilität einer dünnen galaktischen Scheibe stark vom Verhalten des Gases abhängt, oder auch Materietransport zum galaktischen Zentrum durch das Vorhandensein von Gas erheblich beeinflußt wird. Ebenso ist die Reaktion der Gaskomponente in wechselwirkenden Systemen (Vorbeigänge oder Verschmelzung großer Galaxien, Einfang kleinerer Satellitengalaxien) insbesondere im Hinblick auf Verteilung der Sternentstehungsgebiete und Morphologie wesentlich.

Im Vordergrund dieses Forschungsvorhabens steht daher die Modellierung eines gekoppelten Stern–Gas–Systems zur Simulation von Galaxien in unterschiedlichen Entwicklungsphasen. Insbesondere soll am Beispiel von Scheibengalaxien untersucht werden, wie die unterschiedliche Natur der Gasphasen die galaktische Entwicklung beeinflußt und inwieweit die Ergebnisse von der jeweiligen numerischen Modellierung der Gasphasen (diffus, klumpig) abhängen.

In unserem Programm wird im Moment die Gravitation hauptsächlich mittels eines TREE–Codes behandelt, während das diffuse Gas nach der *smoothed particle hydrodynamics*–Methode

(SPH) beschrieben und die Wolken als *sticky particles* berücksichtigt werden. Um zu einem realistischeren Modell zu gelangen, sind vor allem Erweiterungen der Gasdynamik nötig: Im Bereich der *sticky particles* muß die Bildung kleiner Fragmente von $10^3 - 10^4\ M_\odot$ ermöglicht werden. Zum anderen sollte die Anfangswolkenmasse im Bereich von 10^3 bis 10^5 statt der jetzt erreichbaren $10^5 - 10^6\ M_\odot$ liegen. Diese würde zum einen eine konsistente Energiedissipationsrate zulassen und zum anderen Aussagen über das entstehende Wolkenmassenspektrum gestatten. Beide Verbesserungen können nur durch Simulationen von etwa 10^6 bis 10^8 Teilchen berücksichtigt werden. Im Bereich des SPH–Verfahrens ist vor allem die räumliche Auflösung zu erhöhen, um lokale Prozesse wie Massenrücklieferung oder Wolkenbildung bzw. die Bildung einer dünnen Gasscheibe adäquat erfassen zu können bzw. die Genauigkeit des Verfahrens selbst zu verbessern. Auch hierfür wäre eine signifikante Erhöhung der Teilchenzahl auf 10^6 bis einige 10^6 SPH–Teilchen nötig. Schließlich müssen die stoßfreie Komponente und insbesondere die die Dunkle Materie beschreibenden Teilchen eine Masse haben, die der der Gaswolken entspricht, um künstliche Relaxation aufgrund von niedrigen Teilchenzahlen zu verhindern. Dies erfordert auch für die stoßfreie Komponente eine Teilchenzahl in der Größenordnung 10^7 bis 10^8.

Numerisch besteht das Hauptproblem in der Lösung des nicht–lokalen, gravitativen N–Körper–Problems, insbesondere der Potential– bzw. Kraftbestimmung. Eine direkte Lösung gemäß einer Summation über die einzelnen Beiträge nach dem Newtonschen Gravitationsgesetz verbietet sich bereits bei moderaten Teilchenzahlen von $10^3 - 10^4$ aufgrund des mit N^2 ansteigendem numerischen Aufwands. Andererseits ist eine solche exakte Potentialbestimmung aufgrund der langen Zwei–Körper–Relaxationszeiten galaktischer Sternsysteme ($> 10^{15}$ Jahre) meist nicht nötig, so daß auf effiziente Näherungsverfahren zurückgegriffen werden kann. Erlaubt das Problem eine Reduzierung der Potentialbestimmung auf einfache analytische, gegebenenfalls zeitabhängige Beschreibungen (sog. *restricted Nbody*), dann zerfällt das Problem in N 1–Körper–Probleme eines Testteilchensystems, was eine schnelle numerische Lösung ($O(N)$) und eine triviale Parallelisierung gestattet. Die meisten Anwendungen benötigen jedoch eine selbst–konsistente Potentialbestimmung, wofür bei uns zwei Verfahren benutzt werden: Das TREE–Verfahren teilt das Teilchensystem so ein, daß weit entfernte Teilchen zu einer Gruppe zusammengefaßt werden, und nur deren gemeinsamer Potentialbeitrag berücksichtigt wird. Damit steigt der numerische Aufwand nur noch mit $N \log N$. Noch effizienter ist die *self–consistent field*–Methode (SCF), die ein Potential–Dichte–Paar basierend auf einem vollständigen bi–orthogonalen Funktionensatz benutzt. Die Teilchenverteilung wird dann gemäß dem Funktionensatz für die Dichte entwickelt, woraus über die Poisson–Gleichung unmittelbar das Potential für jeden Ort bestimmt werden kann. Der numerische Aufwand des Verfahrens steigt sogar nur linear mit N. Nachteil des SCF–Verfahrens ist allerdings seine geringe Flexibilität bei zeitabhängigen Problemen und bei stark fragmentierten Konfigurationen.

Für beide Verfahren stehen uns vektorisierte Versionen zur Verfügung. In Zusammenarbeit mit Dr. R. Spurzem (ARI Heidelberg) steht eine parallele Implementation des SCF–Codes zur Verfügung. Eine parallesierte Version des TREE–Verfahrens ist aufgrund der langreichweitigen Natur der Gravitation nicht trivial, wurde aber bereits über geeignete *domain decomposition* erreicht (Dubinski, New Astronomy 1, 133 (1996)). Die Kernspeicheranforderungen hängen im wesentlichen von der Teilchenzahl und in geringerem Umfang vom benutzten Verfahren ab: Für etwa $N = 10^7$ Teilchen wird man insgesamt etwa 500–1000 MWorte benötigen. Für einen parallelen TREE-Code zeigte Dubinski (1996), daß die *load balance* bei 256 PEs bei etwa 70% (128: 80%; 64: 92%) liegt, während die Kommunikationszeit etwa 20% beträgt (128: 10%). Der Plattenplatzbedarf pro Modellauf liegt bei etwa 20 GB, wobei 80–100 GB (4–5 Modelle) permanent zur Verfügung stehen sollten. Der Archivspeicherbedarf liegt bei etwa 500 GB.

Staubbildung in langperiodisch veränderlichen Sternen

Jan Martin Winters und Erwin Sedlmayr
Institut für Astronomie & Astrophysik, TU-Berlin

1 Einleitung

Das übergeordnete Ziel dieses Projekts ist die umfassende theoretische Beschreibung der expandierenden zirkumstellaren Staubhüllen von veränderlichen Sternen auf dem Asymptotischen Riesenast (AGB), um einerseits die Physik dieser Systeme zu verstehen, und andererseits eine zuverlässige theoretische Grundlage für die Interpretation vorliegender und in naher Zukunft zu erwartender Beobachtungen dieser Objekte zu schaffen.

Zirkumstellare Staubhüllen um LPVs sind nichtlineare dynamische Systeme, deren lokale Physik und globale Struktur nur durch das Zusammenwirken von Hydrodynamik, Thermodynamik, Strahlungstransport, Chemie und Staubbildung angemessen beschrieben werden können. Die Modellierung dieser Staubhüllen erfordert daher die simultane Lösung des Systems gekoppelter partieller Differentialgleichungen zur konsistenten Beschreibung des Gesamtproblems (e.g. Sedlmayr & Winters 1997).

Verglichen mit den entsprechenden Arbeiten anderer Autoren, in denen die Staubbildung selbst nicht betrachtet, sondern nur die dynamische Wirkung des Staubes in parametrisierter Form vorgegeben wird, wird die Physik des Staubkomplexes im Rahmen unserer Arbeiten wesentlich detaillierter behandelt. Damit ist erstmals eine Untersuchung der Wechselwirkung zwischen den zeitabhängigen lokalen Bedingungen in der Atmosphäre, den Prozessen von Staubbildung und –vernichtung, und der dynamischen Wirkung des Staubes auf die Struktur der Hülle anhand detaillierter Modellrechnungen möglich (Fleischer et al. 1992, 1995).

Das Auftreten von Staub in seiner Hülle hat erhebliche Konsequenzen für den staubbildenden Stern selbst: Aufgrund des hohen Wirkungsquerschnittes der Festkörperpartikel gegenüber dem stellaren Strahlungsfeld prägt die Wechselwirkung zwischen Staub und Strahlungsfeld entscheidend sowohl die Dynamik der zirkumstellaren Hülle, als auch das optische Erscheinungsbild dieser Objekte:

i) Staubteilchen absorbieren effektiv **Impuls** aus dem stellaren Strahlungsfeld, welcher durch Reibungskopplung an das umgebende Gas weitergegeben wird und treiben damit den langsamen, massiven Wind dieser Objekte an.

ii) Staubteilchen absorbieren die **Energie** insbesondere der kurzwelligen Photonen des stellaren Strahlungsfeldes, welche nach einem internen Relaxationsprozeß bei längeren Wellenlängen wieder abgestrahlt wird und führen damit zu dem für die Spektren dieser Objekte typischen Infrarot–Exzeß.

2 Gegenwärtige Modellrechnungen

Voraussetzung einer zuverlässigen Modellierung dieser Systeme ist daher die detaillierte Berücksichtigung der Energie– und Impulsbilanz zwischen der Materie und dem Strahlungsfeld ohne die üblicherweise aus Rechenzeitgründen notwendigen vereinfachenden Näherungen (frequenzunabhängige Transportkoeffizienten, Annahme kleiner Teilchen, Vernachlässigung von Lichtstreuung an den Staubteilchen) machen zu müssen. Daß diese Näherungen aufgrund der Eigenschaften der resultierenden Staubteilchen-Größenverteilungsfunktionen physikalisch nicht

gerechtfertigt sind, wurde in Winters et al. (1997, 1999) detailliert diskutiert. Das Fallenlassen dieser Näherungen bedeutet allerdings einen erheblichen rechnerischen Mehraufwand, der nur auf einem Höchstleistungs-Computer in akzeptabler CPU Zeit zu bewältigen ist.

Die erforderlichen Berechnungen werden in zwei getrennten Codes ('Hydrodynamik' und 'Strahlungstransport') durchgführt, wobei im Hydrodynamik-Teil auch die Chemie und der Staubkomplex sowie die Berechnung der Transportkoeffizienten für die Strahlungstransportrechnung enthalten sind. Im Strahlungstransport-Teil wird die sphärische Strahlungstransportgleichung für einen Satz von Frequenzstützpunkten gelöst, welcher das gesamte Spektrum des Sterns abdeckt. Da die Rechnungen für die verschiedenen Frequenzen voneinander unabhängig sind, ist die Strahlungstransportrechnung hervorragend zur Parallelisierung geeignet. Durch die erfolgte Kopplung beider Programme ist es erstmals möglich, dynamische Strukturen für staubbildende zirkumstellare Hüllen von langperiodisch veränderlichen Sternen **konsistent** zu modellieren. Der Code *rad_hydro* (kombinierte Anwendung aus Strahlungstransport und Hydrodynamik) wird bereits unter Produktionsbedingungen auf dem **T3E** am ZIB eingesetzt. Durch die Gruppierung der beiden Komponenten in ein paralleles **T3E** Programm wird eine gute Performance (ca. 100 MFLOPS pro PE) und, in der gegenwärtigen Ausbaustufe, eine Skalierung bis zu 256 Prozessoren erreicht.

3 Geplante Erweiterungen

Die Transportkoeffizienten der Gaskomponente werden bisher durch den frequenzunabhängigen Rosseland'schen Mittelwert approximiert, welcher allerdings nur in optisch dicken Situationen sinnvoll anwendbar, um dort die Erhaltung der Strahlungsenergie zu garantieren. In den hier betrachteten zirkumstellaren Hüllen, die in weiten Bereichen optisch dünn sind, ist hingegen die Verwendung der frequenzabhängigen Opazitäten erstrebenswert, um den Energie– und Impulsaustausch zwischen Gas und Strahlung angemessen zu beschreiben. Derzeit integrieren wir entsprechende Gasopazitäten, um auch den für die Molekülabsorption interessanten Spektralbereich frequenzabhängig zu modellieren. Da das Gas über spektrale Banden mit der Strahlung wechselwirkt, während der Staub aufgrund seiner Festkörper-Eigenschaft ein kontinuierliches Extinktionsverhalten zeigt, ist zur Beschreibung der Gasextinktion eine wesentlich höhere Frequenzauflösung erforderlich, als dies zur Beschreibung der Staubkomponente allein notwendig ist. Aufgrund der bereits erzielten hervorragenden Performance und dem Skalierungsverhalten von *rad_hydro* auf dem **T3E** planen wir eine Erweiterung auf mindestens etwa 200 Frequenzstützpunkte, was gegenüber dem derzeitigen Stand etwa zu einer Verdreifachung des Rechenaufwandes führen wird.

Literatur

Fleischer A. J., Gauger A., Sedlmayr E., 1992, A&A 266, 321

Fleischer A. J., Gauger A., Sedlmayr E., 1995, A&A 297, 543

Sedlmayr E., Winters J. M., 1997, *Stellar Atmospheres: Theory and Observations* volume 497 of *Lecture Notes in Physics*, chapter Cool star winds and mass loss: Theory, p. 89–131, Springer

Winters J. M., Fleischer A. J., Le Bertre T., Sedlmayr E., 1997, A&A 326, 305

Winters J. M., Le Bertre T., Keady J. J., 1999, In Le Bertre T., Lèbre A., Waelkens C., *Asymptotic Giant Branch Stars. I.A.U. Symp. 191*, p. 261–266. Kluwer

Theoretische Untersuchungen zu Struktur und Reaktivität von Übergangsmetall-π-Komplexen mit den Übergangsmetallen Chrom, Eisen und Cobalt

Anja Pfletschinger, Wolfram Koch und H.-G. Schmalz

Technische Universität Berlin,
Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

Übergangsmetall-π-Komplexe spielen in der organischen Synthese eine wichtige Rolle, da durch die Anwesenheit eines Metallfragments und der damit verbundenen Änderungen der elektronischen und sterischen Verhältnisse im Molekül eine Vielzahl von Reaktionen erst möglich wird.

Gegenstand der Untersuchungen unserer Arbeit sind Aren-$Cr(CO)_3$-Komplexe, 1,4-Dien-$Fe(CO)_3$-Komplexe und Alkin-$Co_2(CO)_6$-Komplexe, wobei das besondere Augenmerk auf die theoretische Untersuchung von reaktiven Zwischenstufen gerichtet wird, die im Laufe von Deprotonierungsreaktionen, nukleophilen Additionen und Substitutionen und bei radikalischen Reaktionen auftreten. Über diese Intermediate sind auf experimentellem Wege nur sehr selten Informationen zugänglich.

Zur Berechnung der Strukturen von kationischen, anionischen und radikalischen Zwischenstufen sowie der neutralen Komplexe werden hauptsächlich die Hybrid-Dichtefunktionalmethode Becke3LYP und die Dichtefunktionalmethode nach Vosko, Wilk und Nusair (VWN) angewendet. Bei den Berechnungen mit Becke3LYP wird für das Metall-Atom ein All-Elektronen-Basissatz von Wachters (für Chrom z.B. $(14s11p6d3f) \rightarrow [8s6p4d2f]$) verwendet und für C, H und O der Split-Valence Basissatz D95, der für Kohlenstoff und Sauerstoff durch Polarisationsfunktionen erweitert ist.

Zur Durchführung der Rechnungen kommen die Programme *Gaussian94/98*, *DGauss* und *Turbomole* zur Anwendung.

Problemstellungen bei Rechnungen an Übergangsmetall-vermittelten Reaktionen am Beispiel des $[Fe,S,H_2]^+$-Systems

Susanne Bärsch, Ilona Kretzschmar, Detlef Schröder, Helmut Schwarz

Institut für Organische Chemie der TU Berlin,
Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

Komplementär zu einer experimentellen Gasphasen-Studie wurde die Potentialhyperfläche für das System $[Fe,S,H_2]^+$ untersucht. Der experimentelle Teil der Studie untersuchte die Reaktion von FeS^+ mit Wasserstoff, wobei als geladene Produkte Fe^+, $FeSH^+$ und FeH^+ beobachtet wurden. Diese Reaktionspfade wurden im folgenden auch theoretisch untersucht. Dabei wurde das in Gaussian94 implementierte Dichtefunktional B3LYP zusammen mit einer generischen *Valence Double Zeta* Basis für Eisen, Schwefel und Wasserstoff eingesetzt.

Obwohl das System aus "nur" 4 Atomen (davon 2 Schweratome) besteht, ist der zeitliche Aufwand der Rechnungen beträchtlich. Zum einen erfordert die energetisch dichte Lage der Sextett- und Quartett-Spinzustände des Eisens eine erhebliche Anzahl von Rechnungen, da alle Strukturen für beide Spinzustände gerechnet werden müssen. Zum anderen erwies sich die Lokalisierung der Minima- und Übergangsstrukturen aufgrund der Flexibilität und Mobilität der Wasserstoffatome entlang der FeS^+ Bindung als schwierig. Für die Charakterisierung der Minima ist im Allgemeinen ein Rechenzeitaufwand von 20 bis 30 Stunden Rechenzeit erforderlich. Für Übergangszuständen verdoppelt sich dieser zeitliche Aufwand in etwa, da dort die strukturelle Flexibilität größer ist und es sich wesentlich schwieriger darstellt, eine vernünftige *Input*-Struktur zu entwerfen.

Als problematisch erweist es sich bei den oben erwähnten Rechnungen, daß aufgrund der hohen Anzahl ungepaarter Elektronen häufig Multi-Konfigurations-Probleme auftauchen. Dichtefunktionaltheorie liefert hier zwar gute Ergebnisse bezüglich der geometrischen Strukturen, die relative Lage der Extrempunkte wird aber nicht immer zuverlässig beschrieben. Hier wäre die Nutzung von *high-level* Multi-Konfigurationsmethoden angezeigt, die aber noch größere technische Resourcen als die vorgestellten Rechnungen erfordern.

Molekulare Wellenpaketdynamik auf dem Parallelrechner

I. Andrianov, J. Manz, M. Oppel, K. Sundermann

In unserem theoretisch-chemischen Projekt geht es um die quantendynamische Simulation der molekularen Reaktionsdynamik auf der Zeitskala von Femtosekunden bis Picosekunden. Diese Simulationen dienen der Vorhersage bzw. der Interpretation entsprechender Experimente zur sogenannten *Femtosekunden-Chemie*. Für geeignete molekulare Systeme wird dazu zunächst ein Modell erstellt, dass die entscheidenden Freiheitsgrade der jeweiligen chemischen Reaktion enthält, also insbesondere die Bindungen, die bei der Reaktion gebrochen oder neu gebildet werden oder die sich sonstwie signifikant ändern. Für diese Freiheitsgrade wird dann der zugehörige Modell-Hamilton-Operator formuliert, der neben den Anteilen der kinetischen Energie der Kernbewegungen auch die zugehörigen Potentialenergieflächen für den elektronischen Grundzustand sowie für wichtige angeregte Zustände sowie ggf. auch zusätzliche Kopplungen enthält, insbesondere auch die Dipolkopplungen des jeweilgen Moleküls an externe Laserfelder. Weiter werden für die chemischen Reaktanden und Produkte zugehörige Anfangs- und Ziel-Zustände in Form von repräsentativen quantenmechanischen Wellenpaketen berechnet. Schliesslich wird die jeweilige chemische Reaktion simuliert, indem diese Wellenpakete vom Anfangszustand zum Zielzustand zeitlich propagiert werden, ggf. auch unter dem Einfluss eines externen Laserfeldes, welches so optimiert wird, dass der Zielzustand gerade erreicht wird.

Die zugehörigen theoretisch-chemischen Methoden schliessen quantenchemische ab initio Verfahren zur Berechnung der Potentialenergieflächen und (Dipol-) Kopplungen ebenso ein wie Verfahren zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für die Anfangs-und Zielzustände. Hinzu kommen moderne quantendynamische Verfahren der molekularen Reaktionsdynamik, insbesondere zur zeitabhängigen Propagation der repräsentativen Wellenpakete durch Lösung der zugehörigen zeitabhängigen Schrödingergleichung für die Kernbewegung. Schliesslich werden noch neue Methoden zur Optimierung geeigneter Laserpulse zur Kontrolle dieser Wellenpakete eingesetzt.

Alle diese Verfahren sind numerisch anspruchsvoll, und sie erfordern daher den Einsatz von Höchstleistungsrechnern. Dies gilt für die quantenchemischen ab initio Verfahren, z.B. für das von uns eingesetzte Programmpaket

MOLPRO ebenso wie für die o.a. numerischen Lösungen der zeitunabhängigen und zeitabhängigen Schrödingergleichung. Für die Propagation der repräsentativen Wellenpakete setzen wir insbesondere moderne Fouriertransformationstechniken ein, die aufwändige Gitterrepräsentationen der Wellenpakete sowohl im Orts- als auch im Impulsraum zielgerecht transformieren. Die numerisch effiziente Lösung dieser Verfahren ist Voraussetzung dafür, dass die letztlich eingesetzten Optimisierungsverfahren für die Laserkontrollierte Reaktionsdynamik zum Erfolg führen.

Unser Beitrag stellt die Durchführung dieser Techniken für zwei aktuelle Beispiele dar, nämlich für die Simulation der Schwingungsdynamik von Ag_3, so wie sie in sogenannten *NeNePo*-Experimenten der Femtosekundenchemie beobachtet wird, sowie für die laserpulskontrollierte Isomerisierung von $Li()_2Na$. Insbesondere berichten wir über die Implementierung der o.a. Fouriertransformationstechniken für die Propagation dreidimensionaler Wellenpakete auf dem Parallelrechner T3E, welche solche Simulationen für Systeme mit schweren Kernen wie Ag_3 erstmals ermöglicht.

Unsere Untersuchungen werden in Kooperation mit experimentellen und theoretischen Partnergruppen des neugegründeten Berliner Sonderforschungsbereichs 450 *Analyse und Kontrolle ultraschneller photoinduzierter Reaktionen* durchgeführt, gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft. Hinzu kommen weitere Kooperationen im Rahmen von zwei Schwerpunktprogrammen der Deutschen Forschungsgemeinschaft (*Zeitabhängige Phänomene in Quantensystemen der Physik und Chemie* sowie *Femtosekundenspektroskopie*, sowie weitere internationale Kooperationen. Der Einsatz moderner Höchstleistungsrechner ist für den Erfolg all dieser Forschungsvorhaben unverzichtbar.

Vielteilcheneffekte und Spektroskopie an Festkörperoberflächen

W. Schattke, CAU Kiel

Workshop am ZIB im Mai 1999

Die Physik des wechselwirkenden Vielteilchensystems Festkörper ist durch die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung festgelegt: $H\Psi_N = E\Psi_N$. **Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen (QMC)** nehmen die Lösung dieser Gleichung für größenordnungsmäßig $N = 500$ (anstelle von phantastischen 10^{23}) Elektronen im Festkörper direkt in Angriff. Das Ziel dieses Beitrages ist u.a., die Durchführbarkeit dieser Aufgabe unter Rückgriff auf Supercomputer darzulegen. Nach der Einleitung und der Vorstellung der Methode werden Ergebnisse für das Volumen präsentiert. Danach werden die wesentlichen Aspekte bei der Simulation von Festkörperoberflächen diskutiert und neueste Ergebnisse vorgestellt. Dabei wird auch auf Aspekte der Rechnerplattform und der Programmierung sowie zukünftige Anforderungen eingegangen. Höchste Rechnerleistung wird weiterhin in Bandstrukturverfahren und in der numerischen Umsetzung von analytischen Konzepten der Vielteilchentheorie benötigt, insbesondere da der Vergleich mit experimentellen Daten der Photoelektronenspektroskopie letztlich die Entscheidung über deren Brauchbarkeit bei der elektronischen Strukturaufklärung liefert. Hierzu werden Ergebnisse auf der Basis von **ab-initio**-Rechnungen, also ohne Rückgriff auf experimentelle Daten außer der Kernladungszahl, vorgestellt.

Quanten-Monte-Carlo-Methoden simulieren ein System von vielen, wechselwirkenden Festkörperelektronen. Bei **Variations**-Quanten-Monte-Carlo (VQMC) wird die Grundzustandsenergie als der Erwartungswert des vollen HAMILTON-Operators in einem parametrisierten Grundzustand durch stochastische Integration eines hochdimensionalen Integrals über die Elektronenkoordinaten im Ortsraum berechnet. Die größenordnungsmäßig 10 Parameter in dem Ansatz für die Grundzustandswellenfunktion werden bzgl. minimaler Energie variiert. Nach erfolgter Minimierung ist die erzielte Energie E_0^* eine strenge obere Schranke für die wahre Grundzustandsenergie E_0. Am Beispiel des Verbindungshalbleiters Galliumarsenid zeigt der Vergleich von abgeleiteten Grundzustandsgrößen wie Gitterkonstante, Kompressionsmodul und Bindungsenergie mit dem Experiment und anderen theoretischen Rechnungen, daß VQMC mit den besten anderen ab-initio-Methoden konkurrieren kann.

Quanten-Monte-Carlo-Methoden erfahren ihre praktische Einschränkung in der notwendigen Rechenzeit, um die statistische Auflösung ausreichend zu gewährleisten. Am Beispiel der recht einfach rekonstruierten, aber technologisch enorm wichtigen (110)-Oberfläche von GaAs wird die Leistungsfähigkeit der Methode bei der Analyse von Oberflächen demonstriert.

Bei der Simulation der Oberfläche erhöht sich die variationelle Freiheit enorm, so daß auf der Seite der verwendeten Computerkapazitäten ein Sprung vom Workstationcluster und Großrechner zum Supercomputer notwendig war, um die Rechnungen in akzeptabler Zeit durchführen zu können. Dazu wird der Parameterraum in Gebiete zerlegt und diese den Knoten zugewiesen, so daß der parallelisierte Code von grobgranularer Struktur ist. Die wesentliche Einschränkung in den Ressourcen

liegt in dem zur Verfügung stehenden Hauptspeicher je Knoten, so daß nur für Systeme mit maximal ca. 500 Elektronen Simulationen durchgeführt werden können. Zur Berechnung von Systemen mit großen Rekonstruktionen, wie sie bei anderen ab-initio-Methoden Stand der Kunst sind, ist für unsere Zwecke ein Hauptspeicher von zwei Gigabyte je Knoten notwendig.

Alternative Zugänge, die Materialeigenschaften konkreter Substanzen durch ab-initio-Rechnungen vorherzusagen, gibt es in vielfältiger Form. Sie werden auch überwiegend genutzt. QMC ist zwar nur unwesentlich älter, kann sich aber erst jetzt durch die vorhandene Rechnerleistung entfalten. All diesen Alternativmethoden ist gemeinsam, daß sie das komplizierte, wechselwirkende Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem ohne Wechselwirkung zurückführen wollen. Obwohl z.B. die Dichtefunktionaltheorie (DFT) unzählige praktische Erfolge zu verzeichnen hat, leidet sie an dem prinzipiellen Problem der fehlenden Kenntnis des exakten Funktionals selbst. QMC ist in der Lage, die Korrektheit des dort gewählten Funtionals abzuschätzen.

Moderne hochgenaue Bandstrukturverfahren basieren auf der DFT, geraten aber durch die Komplexität der Einheitszelle in Bezug auf die Anzahl der Freiheitsgrade an ihre Grenzen. Insbesondere stellt der Vergleich mit Daten experimenteller Untersuchungsmethoden hohe Anforderungen an die Genauigkeit der Basisrechnungen, aus denen schließlich die Wirkungsquerschnitte und andere spektroskopischen Messgrößen numerisch bestimmt werden. Einheitszellen mit ca. 100 Atomen bedeuten für solche Rechnungen bereits das Maximum, an das sich die Natur „leider“ nicht gehalten hat. Untersuchungen an Zeolith-ähnlichen Substanzen mit Gasteinlagerungen, die hier vorgestellt werden, überschreiten z.B. diese Grenze. Gerade für dieses Beispiel wird weit über ein Gigabyte Speicher benötigt, was bei dem T3E in der gegenwärtigen Architektur bereits eine Verteilung der Felder auf die Knoten erfordert.

Projektbeteiligte: R. Bahnsen, S. Brodersen, A. Kistner, Dr. E. E. Krasovskii, Prof. Dr. W. Schattke, D. Schulz, C. Solterbeck, F. Starrost, T. Strasser, O. Tiedje.

MD Simulationen in der Materialphysik, speziell zu den metallenen Gläsern

B. Böddeker *
H. Teichler †
Institut für Materialphysik and Sonderforschungsbereich 345,
Universität Göttingen, D-37073 Göttingen, Germany

22. Juni 1999

Glasbildung, d.h. "Verglasung" einer Schmelze, ist ein in vielen Materialklassen beobachtetes Phänomen und wird z.B. bei den üblichen Silikatgläsern gefunden, bei Polymeren, organischen Molekülschmelzen (Glykol, Glyzerin, ...) und, weit verbreitet, bei metallischen Legierungsschmelzen. Wegen der außergewöhnlich guten Eigenschaften der 'metallischen' Gläser bezüglich Korrosionsbeständigkeit, Abriebfestigkeit, Zugfestigkeit sowie elastischem und magnetischem Verhalten wird von mancher Seite hier ein großes innovatives Potential gesehen, was der Untersuchung der metallenen Gläser im Rahmen der Grundlagenforschung stark förderlich ist.

Die Untersuchungen der letzten Jahre zum Glasübergang haben gezeigt, daß die entscheidenden Prozesse auf einer Längenskala zwischen atomarem und mesoskopischem Bereich, d.h. zwischen 0,1 und etwa 10 nm, und auf einer Zeitskala im Bereich von 10^{-14} bis 10^{-7} s ablaufen. Dieser Bereich ist bei Einsatz von Parallelrechnern heutigen MD Simulationen zugänglich. Dies ermöglicht, die Prozesse mit der notwendigen zeitlichen und räumlichen Auflösung zu studieren, die von den Experimenten gegenwärtig nicht generell geleistet werden kann. Hier sind insbesondere die Struktur der unterkühlten Schmelzen und Gläser, die Änderungen der Struktur um Bereich des Glasübergangs sowie Kopplungen zwischen Struktur und Eigenschaften der Gläser von Interesse.

*email: bboedde@gwdg.de
†email: teichler@umpa06.gwdg.de

Unsere laufenden und für die Zukunft geplanten Untersuchungen betreffen sowohl MD-Simulationen zu Fragen der homogenen Strukturen, z.B. Simulationen des Materialtransports in Gläsern oder deren homogene plastische Verformung, als auch zu Fragen heterogener Strukturen, wie Paketen aus amorphen und kristallinen Bereichen [1], freitragenden amorphen Filmen [2], amorphen Filmen auf kristallinen Trägern oder heterogener plastischer Verformung. Vergleich von Computermodellen und ihren Voraussagen für konventionelle metallische Gläser mit solchen für die neuartigen 'massiven' Gläser stehen ebenfalls auf dem Programm.

Die Untersuchungen erfordern Durchführung von Langzeit-MD-Simulationen und Analyse der Daten, wobei der erste Teil der limitierende Faktor ist. Bei den MD Simulationen sind $6N$ gekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen für $n_{\max}$ Zeitschritte numerisch zu integrieren, mit $n_{\max} \propto 10^9$ und N bis 100.000. Spezielle Anforderungen an den Parallelrechner ergeben sich aus den kurzen typischen Vektorlängen bei, durch veränderliche Nachbarschaftslisten beschriebenen, Kopplungen zwischen den Differentialgleichungen mit hohem Kommunikationsbedarf. Im einzelnen sind dies: Unterstützung einer 3-dimensionalen, torodial abgeschlossenen Verbindungsstruktur der Knoten mit Datentransferraten möglichst im Bereich der Transferraten zum lokalen Speicher, kurze Latenzzeiten bei der Kommunikation zwischen den Knoten, sowie eine hohe Rechenleistung der einzelnen Knoten. Langfristig ist eine Darstellung besonders rechenintensiver Kernschleifen auf hardwareprogrammierbaren (Co-)Prozessoren erwünscht, sobald die Entwicklung auf diesem Gebiet es zuläßt.

Literatur

[1] H. Teichler. Melting transition in molecular-dynamics simulations of the $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ intermatallic compound. *Phys. Rev. B*, 59(13):8473–8480, 1999.

[2] B. Böddeker and H. Teichler. Dynamics near free surfaces of molecular dynamics simulated $Ni_{0.5}Zr_{0.5}$ metallic glass films. *Phys. Rev. E*, 59(2):1948–1956, 1999.

Struktur der Materie – über die fundamentale Bedeutung von Quantenfeldtheorien und die Schwierigkeit ihrer Bearbeitung

Volkard Linke
Freie Universität Berlin

Unser Wissen über den innersten Aufbau der Materie hat in den letzten Jahrzehnten erhebliche Fortschritte gemacht. Vom Experiment her verdanken wir diese Fortschritte den Größtbeschleunigern und -detektoren weltweit, auf Seiten der Theorie hingegen haben sich inzwischen die Supercomputer zum wesentlichen Werkzeug entwickelt, ohne das man in Zukunft für eine ernsthafte quantitative Beschreibung der Struktur der Materie wohl kaum mehr auskommen wird. Der Vortrag ist als Einführung in das Gebiet der Gittereichtheorien gedacht. Er wird versuchen, in der knappen zur Verfügung stehenden Zeit eine Brücke von den klassischen Feldtheorien wie der Maxwellschen Elektrodynamik zu den quantisierten Eichtheorien, insbesondere der Quantenelektrodynamik und der Quantenchromodynamik, zu schlagen. Er wird sodann die grundsätzlichen Schwierigkeiten aufzeigen, derartige Theorien mit den herkömmlichen mathematischen Mitteln (das sind im wesentlichen Entwicklungen in Potenzreihen) zu behandeln, und er wird in großen Zügen die Möglichkeiten schildern, die das Vorhandensein von Höchstleistungsrechnern in Verbindung mit stochastischen Methoden dann doch noch eröffnet. Er wird zum Abschluß einen Überblick darüber geben, welche wesentlichen Fragestellungen aus diesem Gebiet in der Wissenschaftslandschaft Berlin-Brandenburg im Laufe der letzten fünf Jahre angegangen werden konnten. Er leitet damit über auf die vier nachfolgenden Vorträge, in denen anhand einzelner herausgegriffener Teilaspekte die algorithmischen und informationstechnologischen Probleme dieser Rechentechniken aufgezeigt und die daraus resultierenden Bedürfnisse an die Konzeption einer zukünftigen Landschaft von Höchstleistungsrechnern formuliert werden sollen.

Bericht zum "ECFA Panel on the Future of Lattice QCD in Europe"

F. Jegerlehner
DESY Zeuthen

Die Entwicklung der Gitter–Quantenfeldtheorie, zusammen mit der Verfügbarkeit leistungsfähiger Supercomputer, gestattet es den Teilchenphysikern eine breite Palette fundamentaler Probleme anzugehen, welche früher nicht behandelt werden konnten. Eine besonders wichtige Klasse von Problemen betrifft das Verhalten der Quantenchromodynamik (die moderne Theorie der Kräfte welche die Quarks in Nukleonen einschliessen und auch die Atomkerne zusammenhalten) bei "grossen" Abständen, welches nicht durch die sonst in der Quantenfeldtheorie übliche Störungsentwicklung bei schwacher Kopplung, verstanden werden kann. Der Zweck der ECFA (European Committee for Future Accelerators) Studiengruppe ist es, die Entwicklung und den Bedarf an Resourcen bei Hochleistungsrechnern für die kommenden Jahre einzuschätzen und die damit möglichen wissenschaftlichen Fortschritte aufzuzeigen.

Compact QED with Wilson fermions

A. Hoferichter

DESY and NIC Zeuthen

Abstract

We summarize the results extracted from calculations essentially carried out on supercomputers at ZIB in collaboration with JINR Dubna and HU Berlin [1] concerning the phase structure of compact QED with Wilson fermions in four dimensions.

Introduction

Quantum electrodynamics (QED) in the continuum is the prototype of a local relativistic quantum field theory. The theoretical predictions, based on perturbative analysis, are in excellent agreement with the experimental results, which constitutes the success of QED. This theory can be viewed as the basis of our present day knowledge about the laws of the micro-world. Indeed, the standard model of elementary particles, which describes phenomena of matter at least up to 100GeV[1] in energy scale, can be regarded as a generalization of QED construction principles.
Despite of the good agreement between theory and experiment in QED, the properties at small distances (large energies) posed a conceptual problem since 1954. The so-called *Landau-Zero* problem suggested, that the theory is non interacting, which is in contradiction with the physical reality. There are basically two ways to proceed in order to resolve the puzzle:

— QED has to be regarded as an effective theory, defined at finite cutoff.

— Non perturbative effects render the Landau-Zero problem irrelevant; in order to demonstrate this, further information from direct non perturbative treatment is required.

Non perturbative information can be provided by lattice gauge theory[2]. Investigations of the Landau-Zero problem in the so-called *non-compact*[3] QED with staggered fermions have been extensively carried out at ZIB by another group and culminated in [2]. The lattice formulation, however, is not unique. For instance, a *compact* formulation is suggested from a point of view of a grand unification. This implies the existence of topological obstructions, called monopoles, which induce a new phase of the lattice theory. This *confinement* phase, characterized by monopole condensation and a massive mediator particle[4], makes compact lattice QED a valuable test model for non-Abelian theories like Quantum Chromodynamics (QCD), since it requires less computational resources. For instance, it has proven useful for the study of algorithmic issues and for the investigation of the *chiral limit* for matter fields, implemented as Wilson fermions.
Lattice QED is used to investigate a lot more topics like the Gribov gauge fixing problem, mechanisms of dynamical mass generation and possible relation to supersymmetric Yang-Mills theory (see, e.g., [3]), and will remain an interesting subject in the future.

[1] 1eV= 1.602×10^{-19} J

[2] For an introduction to lattice gauge theory, see V. Linke, this volume.

[3] this refers to the symmetry-group manifold

[4] analog of the photon

The Phase diagram of compact QED with Wilson Fermions

In order to extract physical information from lattice gauge theory it is necessary to control the effects of discretization. Points in the parameter space (phase diagram) of the theory where discretization effects become irrelevant, are of special interest and correspond to higher order phase transitions. In the talk we will focus on the phase diagram of compact QED with Wilson fermions, as displayed in Fig.1, the knowledge of which is crucial for the understanding of physical information carried by the lattice system.

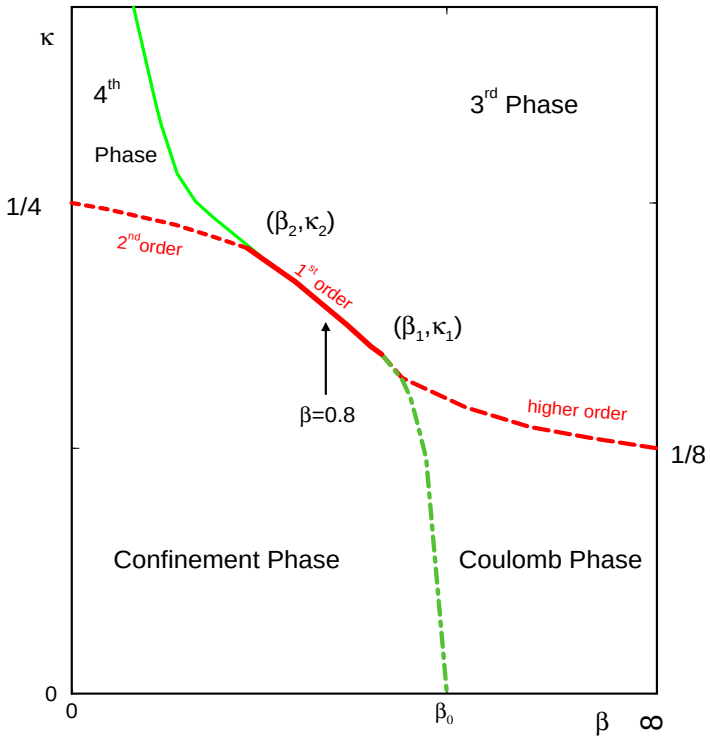

Figure 1: Phase diagram in the parameters (β, κ) of compact QED with Wilson fermions. With $\beta = 1/g_0^2$, where g_0^2 represents the bare gauge coupling and κ is related to the inverse bare fermion mass.

References

[1] A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, H. Stüben, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63**, 454 (1998); Phys. Rev. **D58**, 114505 (1998); A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, T. Neuhaus, H. Stüben, Nucl. Phys. **B434**, 358 (1995); A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin and M. Müller-Preussker, Z. Phys. **C74**, 541 (1997).

[2] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz and H. Stüben, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63**, 694 (1998); Phys. Rev. Lett. **80**, 4119 (1998).

[3] J. Cox, W. Franzki, J. Jersák, C.B. Lang, T. Neuhaus, Nucl.Phys. **B532**, 315 (1998);
J. Ambjørn, D. Espriu and N. Sasakura, Mod. Phys. Lett. **A12**, 2665 (1997);
I.L. Bogolubsky, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, P. Peter, hep-lat/9904001.

Die Kraft zwischen statischen Quarks: "string breaking"

Francesco Knechtli und Rainer Sommer, DESY-Zeuthen

Im Standardmodell der Elementarteilchenphysik wird die starke Wechselwirkung durch eine nichtabelsche Eichtheorie beschrieben. Bereits in den ersten Tagen der numerischen Untersuchungen solcher Theorien auf Raumzeitgittern war das Verständnis der Kraft zwischen externen Ladungen (Quarks) von zentralem Interesse. Creutz beobachtete Anzeichen für ein lineares Potential bei großen Abständen in der SU(2) Yang-Mills Theorie. Heute ist die Existenz dieses linearen Confinement-Potentials für Eichgruppen SU(2) und SU(3) (ohne Materiefelder) bestens etabliert.

Die Berechnungen des Potentials in der Theorie mit Quarks, der QCD, ist numerisch sehr aufwendig aufgrund des fermionischen Charakters der Quarkfelder und haben daher bei weitem noch nicht den Stand der entsprechenden Rechnungen in den Yang-Mills Theorien erreicht. Im Bereich großer Abstände erwartet man, daß sich durch Paarerzeugung leichter Quarks farbneutrale Mesonen bilden, die nur einer schwachen Anziehung unterliegen. Dieses, in numerischen Simulationen der QCD noch nicht beobachtete Phänomen wird als "string breaking" bezeichnet. Neben der Frage, ob man bisher genügend nahe am Kontinuum und bei hinreichend kleinen Quarkmassen simulierte, gab es auch Zweifel, ob geeignete Methoden bekannt waren um das Potential im Großabstandsbereich zu berechnen.

Neue Methoden zu entwickeln, zu testen und in einem einfacheren Modell anzuwenden war das vorwiegende Ziel unseres Projekts. Wir wählten für unsere Studie das SU(2) Higgsmodell, d.h. die fermionischen Materiefelder der QCD sind durch bosonische ersetzt. In der Confinementphase weist das Higgsmodell Ähnlichkeiten mit der QCD auf und man erwartet, daß der Einfluß der Skalarfelder auf das Potential zumindest qualitativ demjenigen der Quarkfelder entspricht.

Die entwickelte Methode erlaubt es in der Tat, das Potential im Großabstandsbereich zu berechnen und das erwartete Phänomen "string breaking" numerisch zu verifizieren. Die Simulation auf Raumzeitgittern der Größe $32 \times 32 \times 32 \times 32$ erforderte die geometrische Parallelisierung auf 64 Knoten der T3E des ZIB.

Untersuchungen der QCD mit verbesserten Wirkungen – Erfahrungen mit der T3E-Architektur

S. Capitani, M. Göckeler, R. Horsley, B. Klaus, W. Kürzinger, V. Linke, D. Petters, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson

Für mehrere Jahre hat sich die QCDSF Kollaboration intensiv um die Berechnung von Hadronmassen, Zerfallskonstanten und der Strukturfunktionen des Nukleons bemüht. Die dazu erforderlichen Simulationen der QCD wurden in der „quenched approximation“ durchgeführt. Um die Fehler, die durch die Rechnung mit endlichem Gitterabstand a bedingt sind, zu reduzieren, wurde der größte Teil der Rechnungen mit einer verbesserten Wirkung und verbesserten Operatoren durchgeführt. Dadurch konnten die Diskretisierungsfehler von $O(a)$ auf $O(a^2)$ reduziert werden.

Die kleinsten Quarkmassen, die bei diesen Simulationen verwendet werden können, entsprechen etwa der halben Masse des „strange quark“. Um Aussagen über das leichte Hadronspektrum zu machen, müssen die Rechnungen für verschiedene Quarkmassen durchgeführt und in den Bereich verschwindender Quarkmassen (chiraler Limes) extrapoliert werden. Wegen den verbleibenden $O(a^2)$ Diskretisierungsfehlern muß schließlich eine Extrapolation in den Kontinuumslimes durchgeführt werden. Dazu sind Simulationen bei verschiedenen Gitterabständen erforderlich. Die QCDSF Kollaboration verfügt mittlerweile über Ergebnisse bei 30 Quarkmassen und drei verschiedenen Gitterabständen.

Diese Ergebnisse wurden dazu genutzt, um Aussagen über das leichte Hadronmassenspektrum, die leichten Quarkmassen sowie diverse Mesonzerfallskonstanten zu machen [1, 2]. Außerdem wurden Ergebnisse für verschiedene Strukturfunktionen und Formfaktoren des Nukleons veröffentlicht, wie etwa der Axialvektorkopplungskonstante g_A [3, 4, 5, 6].

Im Rahmen von diesem Workshop soll insbesondere auf die Erfahrungen mit der T3E Architektur eingegangen werden, die wir bei der Implementierung sowie Optimierung unseres Simulationsprogramms und den seit Inbetriebnahme der T3E am ZIB (Anfang 1997) laufenden Rechnungen gemacht haben. Auch bei den in Zukunft zu behandelnden Problemstellungen der QCD wird der rechenintensive Kern der dabei verwendeten Programme ähnliche Operationen zu bewältigen

haben. Eine Analyse der Vor- und Nachteile der aktuellen T3E-Architektur gibt daher auch Aufschluß über die Anforderungen an eine für diese Art von Rechnungen besonders geeignete zukünftige Architektur. Basierend auf den bisherigen Erfahrungen mit der Simulation der QCD ist ferner eine Bedarfsabschätzung für zukünftige Rechnungen möglich. Die daraus sich ergebenden Anforderungen an die Hardware sollen diskutiert werden.

Literatur

[1] M. Göckeler, R. Horsley, H. Perlt, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller und P. Stephenson, Phys. Rev. D57 (1998) 5562-5580.

[2] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson und H. Stüben, (`hep-lat/9810006`), erscheint in Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.).

[3] M. Göckeler, R. Horsley, E.-M. Ilgenfritz, H. Oelrich, H. Perlt, P.E.L. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller und P. Stephenson, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 53 (1997) 315.

[4] S. Capitani, M. Göckeler, R. Horsley, H. Oelrich, H. Perlt, D. Pleiter, P.E.L. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller und P. Stephenson, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998) 233.

[5] S. Capitani, M. Goeckeler, R. Horsley, B. Klaus, H. Oelrich, H. Perlt, D. Petters, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson, Ahrenshoop Symposium, Buckow, Germany (Wiley-VCH 1998).

[6] S. Capitani, M. Göckeler, R. Horsley, B. Klaus, H. Oelrich, H. Perlt, D. Petters, D. Pleiter, P. E. L. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson, (`hep-lat/9809172`), erscheint in Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.).

Ergebnisse der Diskussionen

A. Reinefeld, W. Baumann, T. Steinke, H. Stüben

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

An beiden Veranstaltungstagen ist im Anschluß an die Vorträge eine separate Diskussionssitzung durchgeführt worden, in der die Teilnehmer des Workshops ihre Wünsche und Anforderungen an den geplanten *Höchstleistungsrechner Nord (HLRN)* diskutiert haben. Dabei ist einmal mehr deutlich geworden, daß im norddeutschen Raum erheblicher Bedarf an Höchstleistungsrechnerkapazität besteht, der durch die vorhandenen Systeme nicht adäquat abgedeckt wird.

Ergänzend zu früher durchgeführten Umfragen haben Vorträge und Diskussionen gezeigt, daß es im norddeutschen Raum eine sehr aktive Nutzerschaft gibt, die zur Durchführung ihrer Forschungsprojekte weit über die bereitgestellte Kapazität hinausgehende Rechneranforderungen hat. Tendenziell werden immer komplexere, höher auflösende Modelle aus dem Bereich der sog. *Grand Challenges* bearbeitet, die noch vor wenigen Jahren einer Simulation unzugänglich waren.

Im Gegensatz zu früheren Diskussionen haben die Nutzer nicht nur eine hohe Spitzenleistung des geplanten Systems im Auge (Ziel: 2 bis 3 TFlop/s), sondern sie legen auch großen Wert auf die Ausgewogenheit der Rechnerarchitektur in Bezug auf Hauptspeichergröße (mindestens 1 TByte), Kommunikationsleistung und Ein-/Ausgabeleistung.

Fast alle Nutzer mit großem Rechenbedarf haben den wichtigen Schritt vom sequentiellen oder moderat parallelen Rechnen zum massiv parallelen Höchstleistungsrechnen vollzogen. Dieser Tendenz soll mit der geplanten Beschaffung eines massiv parallelen Höchstleistungsrechners Rechnung getragen werden. Vorrangiges Ziel der Rechnerplanung muß es sein, die immensen Investitionen, die die Wissenschaftler in Form von Programmentwicklungen speziell für die derzeit in Norddeutschland betriebenen parallelen SGI/Cray-Systeme geleistet haben, langfristig zu sichern, indem eine ähnliche aber leistungsfähigere Rechnerarchitektur installiert wird.

Folgende konkrete Wünsche bzw. Anregungen wurden vorgetragen:

- *Programmbibliotheken.* Von mehreren Seiten ist der Wunsch nach verstärkter Bereitstellung paralleler Programmbibliotheken geäußert worden. Insbesondere wurden parallele Gleichungslöser gefordert.

- *Ein- und Ausgabe.* Bei der Simulation größerer Modelle auf einer entsprechend leistungsfähigeren Hardware besteht die Befürchtung, daß die Ein- und Ausgabe unter Beibehaltung der derzeitigen Methoden zu einem Flaschenhals werden könnte. Daher sollte bei der Konzeption des HLRN-Systems unbedingt auf eine ausreichend dimensionierte parallele Ein- und Ausgabe geachtet werden.

- *Rechnerzugang und -management.* Das auf den derzeitigen T3E-Systemen des Herstellers SGI/Cray eingesetzte Ressourcen-Managementsystem wird als verbesserungswürdig angesehen. Von modernen Managementsystemen wird eine größere Flexibilität gefordert. Die Nutzer erwarten insbesondere eine bessere Unterstützung des interaktiven Zugriffs mit verschiedenen Schedulern (z.B. auch Deadline-Scheduling).

- *Wissenschaftliche Visualisierung.* Aufgrund hoher Rechenzeitanforderungen und großer Datenmengen wird die Bildgenerierung in Zukunft häufig direkt auf den Höchstleistungsrechnern durchgeführt werden müssen. Dies erfordert die Bereitstellung entsprechend parallelisierter Visualisierungssoftware. Auch das Anbieten von Visualisierungsdienstleistungen sowie spezieller Fachberatung in diesem Bereich wurde angeregt.

- *Kompetenzverbünde.* Insbesondere aus dem Gebiet der Klimaforschung kam der Vorschlag, die Programmentwicklung in Zukunft kooperativ in größeren Verbünden zu betreiben. Um Simulationsprogramme der angestrebten Komplexität schreiben zu können, sind Modularisierung und Parallelisierung unabdingbare Voraussetzungen.

- *Diskussionsforum.* Es wurde angeregt, ein Diskussionsforum für die Nutzerschaft des HLRN zu schaffen. Dies soll zunächst in Form einer Mailing-Liste geschehen[1].

Das geplante Konzept zum Betrieb eines virtuellen Höchstleistungsrechners an zwei Standorten (Berlin und Hannover) wurde kontrovers diskutiert. Einerseits wurden die Vorteile einer monolithischen Systeminstallation an einem Ort hervorgehoben, andererseits ist aber auch auf moderne Simulationsumgebungen (insbesondere im Klimabereich) hingewiesen worden, deren einzelne Modelle gleichzeitig an geographisch verschiedenen Orten ablaufen. Ein Vorteil der verteilten Installation wird in der Möglichkeit der dezentralen Programmentwicklung und Höherskalierung gesehen. Zudem bietet das Konzept die Möglichkeit der lokalen Kopplung mit speziellen Ein-

[1] Eine entsprechende Mailing-Liste ist inzwischen mit der Adresse `<hlrn-user@zib.de>` eingerichtet worden. Anfragen zur Teilnahme können an `<owner-hlrn-user@zib.de>` gerichtet werden.

und Ausgabekomponenten, z.B. zur interaktiven Visualisierung rechenzeitaufwendiger Simulationen.

Im Verlauf des Workshops wurde an mehreren Stellen deutlich, daß die Anforderungen der Nutzer über die bloße Bereitstellung von Hard- und Software hinausgehen. Aufgrund der Komplexität der modernen Höchstleistungsrechner erfährt die Beratung und interdisziplinäre Zusammenarbeit wachsende Bedeutung. Das im norddeutschen Raum eingeführte Fachberaterkonzept („HLR-Lotsen“) wurde nicht nur explizit gewürdigt, sondern es wurde ein deutlicher Wunsch nach Ausweitung der Beratung vorgebracht. Mehrfach wurde betont, daß die Nutzer ihre Projekte ohne Hinzuziehung von Fachberatern gar nicht oder zumindest nicht im gegebenen Zeitrahmen hätten durchführen können. Erst dieses Konzept ermöglicht es den Nutzern, sich auf ihre fachspezifischen Probleme zu konzentrieren.