

## KONWIHR Gäste

• **Santhanu Jana** Santhanu Jana befindet sich seit Oktober 2002 am LSTM-Erlangen um in den nächsten zwei Jahren auf dem Gebiet der numerischen Simulation von turbulenten Strömungen in Metallschmelzen zu arbeiten. Gleichzeitig wird er den M.Sc. in Computational Engineering absolvieren.

• **Dr. Amitava Gupta** (Jadavpur University, Calcutta, India) ist seit 1.1.2002 Mitarbeiter am LRR der TUM und wird voraussichtlich bis Mitte 2003 für das KONWIHR Projekt **Methwerk** arbeiten.

• **Prof. Dr. C. Popa** (Ovidius University, Constanta, Romania) ist seit dem 1.10.2002 KONWIHR/DAAD-Gastprofessor am Lehrstuhl für Systemsimulation der FAU Erlangen. Er arbeitet an den KONWIHR Projekten gridlib, ParExpDE, FreeWiHR und Flow-Noise mit.

## Quartl gratuliert ...

• Herrn **Dipl. Phys. Ansgar Dorneich**, zur Promotion an der Universität Würzburg. Titel der Dissertationsschrift: "New Computational Techniques for Strongly Correlated Electron Systems".

• den Herren **Dipl.-Ing. Junmei Shi** und **Dipl.-Ing. Markus Selder**, die am Lehrstuhl für Strömungsmechanik in Erlangen ihre Promotion erfolgreich abgeschlossen haben und

• Herrn **Dr.-Ing. Gunther Brenner** (LSTM-Erlangen), zum Abschluss seiner Habilitation und der Erteilung eines Rufes auf die Professur für Strömungsmechanik am Institut für Mechanik der TU-Clausthal.

## Bitte notieren:

**Neue Anträge und Verlängerungsanträge** für KONWIHR Projekte können bis **1.3.2003** bei einer der Geschäftsstellen eingereicht werden.

Die nächste **Sitzung des KONWIHR-Beirates** findet am **4.4.2003 in München** statt. Bei dieser Gelegenheit findet die Begutachtung der abgelaufenen Projekte sowie der Neu- und Verlängerungsanträge statt. Nähere Informationen werden schriftlich versandt.

## Impressum

### KONWIHR Quartl\*

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

### Herausgeber:

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

### Redaktion:

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

Tel./Fax: ++49-9131-85 28279 / 29503

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

Dipl.-Inf. A. Schmidt, Institut für Informatik, TU München, D-85748 Garching bei München, Tel./Fax: ++49-89-289 17680 / 17662

**e-mail:** konwihr@in.tum.de

**WWW:** konwihr.in.tum.de

### Druck:

Druckhaus Mayer Erlangen

Inh. M. Haspel

### Redaktionsschluss

für die nächste Ausgabe: **1.2.2003**

### \* Quartel:

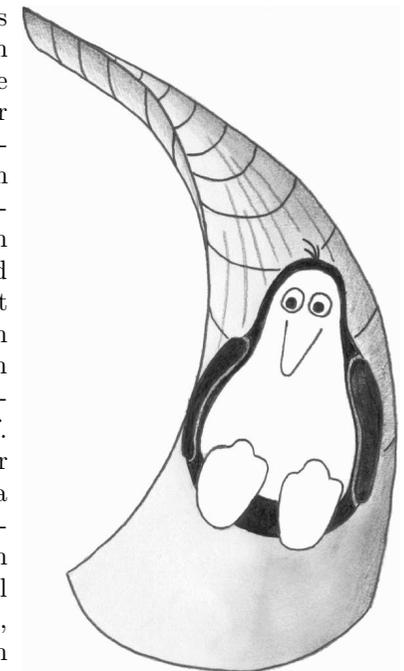
früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,  
→ das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l  
(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

# KONWIHR Quartl

(33. Ausgabe) 2/2002

## Editorial

Die Informatik im Baufieber: Während man sich in Tübingen mit einer renovierten ehemaligen Kaserne (bezeichnenderweise auf den „Sand“ gebaut) begnügen musste, gab's bzw. gibt's in München und Stuttgart Neubauten. Die Bayern haben dabei das Vergnügen des Umzugs schon hinter sich. Wir wollen uns aber heute nicht mit logistischen Kunststücken, sondern mit „echter“ Kunst befassen – genauer mit der „Kunst am Bau“. Eingeweihte Augen beginnen bei diesem Terminus zu rollen, denkt man (d.h. in diesem Fall der kulturlose Homo technicus) doch sofort an allerlei Absurditäten wie vor sich hin rostende T-Träger oder über den Campus verstreut liegende Kugeln, die vornehmlich als Stolper- und Fahrradfallen fungieren. In München war die Entscheidung für zwei sich über die gesamte Gebäudehöhe erstreckende halbe Parabelbögen gefallen (Spiegel Online berichtete über die imposanten Kenngrößen Höhe, Länge und Gewicht), durch die gerutscht werden kann und – nach pflichtgemäßem Hinzuziehen von Experten des TÜV – überraschenderweise sogar darf. Die Parabel im Garching Bau, den die Informatik ja bekanntlich mit der Mathematik teilt, ist schon allein deshalb als gelungenes Beispiel für Kunst am Bau einzustufen, weil sie an Interaktivität kaum zu überbieten ist.



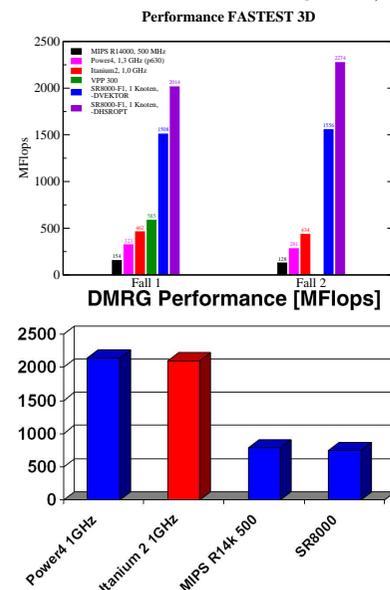
Das beginnt mit hitzig geführten Debatten, wem denn nun das „ius primae rutschis“ zustehe, führt sodann zu heftigen strömungsmechanischen und thermodynamischen Fachsimpeleien über erreichbare Maximalgeschwindigkeiten sowie durch Reibungswärme verdampfende Beinkleider, und endet schließlich in allgemeinem fröhlichem Gerutsche. Und so finden sich an den beiden Einstiegen denn auch die unterschiedlichsten Charaktere ein: der Behutsame, der die Sache derart bedächtig angeht, dass er tatsächlich in der Röhre stecken bleibt; der noch Vorsichtiger, der lieber erst die Frau Gemahlin vorausschicken möchte; der Wiederholungstäter, der fast eine gewisse Sucht entwickelt; oder der Mannschaftssportler, für den nur das gemeinsame Rutscherlebnis im Team zählt.

Und im Schwabenlande? Da wurde dem Verfasser dieser Zeilen die hohe Ehre zuteil, die Stuttgarter Informatik, also den zukünftigen Nutzer des im kommenden März zu beziehenden Baus, in der Auswahlkommission zur Kunst am Bau vertreten zu dürfen. Verschiedene Kunstexperten – vom freischaffenden Künstler über den Professor an der Kunstakademie bis hin zur Staatsgaleristin – sollten hier gemeinsam mit den Architekten, der Oberfinanzdirektion (OFD) als Hüter der Interessen des Geldgebers sowie eben den Nutzern zu einer Reihung der vier eingegangenen Entwürfe gelangen. Mit der patriarchalischen Großzügigkeit des allmächtigen Monarchen erteilte seine OFD-Herrlichkeit zunächst dem Nutzer das Wort – und das Unheil nahm seinen Lauf. Anstatt demütig die eigene Inkompetenz zu bekunden und das Wort unbe-nutzt artig weiterzugeben, wagte es dieser aufmüpfige Nutzer doch tatsächlich, eine eigene, vorher abgestimmte Meinung zu artikulieren und zu begründen. Eine

derartige Insubordination (ich sah mich schon in Stammheim...) wurde natürlich sofort mit einer deftigen Schmähere auf den Favoriten der Informatik (große monochrome Flächen in den Fluren, versehen mit reliefartig angebrachten Farb-Hexcodes aus Holzbuchstaben) und auf die Ignoranz der Informatiker beantwortet: „Es ist unglaublich – da sitzen diese Menschen den ganzen Tag vor dem Rechner, starren auf den Bildschirm und sehen Zahlen, nichts als Zahlen; und was wollen sie sehen, wenn sie um 17 Uhr (!) das Büro verlassen? Wieder Zahlen. So eine geistige Verarmung, so etwas Unsinnliches, so etwas Derbes – das hat doch mit Kunst nichts zu tun.“ Und was überhaupt dieser inhaltliche Bezug zwischen Kunstwerk und Gebäudezweck solle (natürlich hatte ich die Münchener Parabel als leuchtendes Beispiel verkauft) – vielleicht gebe es ja in zehn Jahren keine Informatik mehr, und eine Großbäckerei (sic!) nutze das Gebäude. Wie wolle ich dann Brezeln und Farbcodes in Einklang bringen?

Als ich daraufhin erschrocken zur Mäßigung aufrief, näherte sich der Zustand der Ereiferung des armen Mannes gar bedrohlich der Infarktgrenze: „So hat noch nie jemand mit mir gesprochen!“, woraufhin ich mir ein „Erstaunlich“ dann allerdings doch nicht mehr verkneifen konnte. Bevor jedoch Polizei oder Notarzt alarmiert werden mussten, meldeten sich die Fachleute zu Wort. Salomonisch stellten sie unseren und der OFD Lieblinge als die beiden klar besten Konzepte heraus, unterstrichen die höhere künstlerische Qualität des letzteren, bekundeten jedoch auch Sympathie mit unserer Wahl. Als sie sich in einer Testabstimmung bereit erklärten, sich uns anzuschließen, nahm seine Herrlichkeit diese Entscheidung nolens volens hin – zerknirschter konnte Napole-

Die RRZE Systeme stehen allen interessierten KONWIHR Projekte für Tests zur Verfügung, wobei das KONWIHR Projekt cxHPC hilfreich bei Portierung und Optimierung zur Seite steht (Kontakt: hpc@rrze.uni-erlangen.de).



Vergleich der Leistungsdaten zweier Anwendercodes auf verschiedenen Rechnern. HPC Gruppe am RRZE (Dr. Wellein) und Abteilung Höchstleistungsrechner am LRZ (Dr. Brehm)

### Besuch aus den USA Vorträge zum Thema HPC

Am 26.8.2002 konnten Harvey J. Wasserman und Darren J. Kerbyson vom Los Alamos National Laboratory (LANL) am LRZ München als Gäste begrüßt werden. Herr Wassermann und Herr Kerbyson arbeiten in der “Modeling, Algorithms and Informatics” Group (CCS3, A. Hoisie) an Performancevorhersagen für die nächste Generation von ASCI-Supercomputern am LANL. Ziel ihrer Arbeiten ist es, basierend auf einer genauen Kenntnis der

Anwenderprogramme die Systemkomponenten (Netzwerk, Größe der SMP Knoten, Cache-Größen,...) der nächsten Supercomputergeneration zu optimieren.

In ihrem Vortrag “Recent Performance Modelling Activities at Los Alamos National Laboratory” zeigten die beiden Wissenschaftler eindrucksvoll, wie ihre Voraussagen über die Performance der Los Alamos Codes auf dem ASCI-Q dann auch nach der Installation des Systems erreicht wurden.

Natürlich stellt die Konfiguration des Systems an Hand der vorhandenen Anwenderprogramme die optimale Lösung bei einer Beschaffung dar. Dies ist jedoch nur in Ausnahmefällen wie etwa dem LANL ASCI Projekt möglich, wo der zukünftige Rechner nur im Hinblick auf eine Hand voll Applikationen optimiert werden muß und ein aus unserer Sicht unerschöpfliches Budget zur Verfügung steht.

Für die weiteren Beschaffungen am LRZ und RRZE wird daher auch weiterhin das auf Benchmarkzusagen basierte Verfahren verwendet, was aber ebenfalls eine tiefe Kenntnis um Struktur und Algorithmen der Anwenderprogramme erfordert.



Harvey Wasserman und Darren Kerbyson und die HPC Gruppe am RRZE

WEB: [http://www.c3.lanl.gov/par\\_arch/](http://www.c3.lanl.gov/par_arch/)  
G. Wellein, KONWIHR Projekt cxHPC

den beiden Konkurrenten zeigt der Blick auf den Instruction Set. Während IBM weiterhin auf die RISC Technologie setzt, verwendet Intel das EPIC Konzept: Hier werden vom Compiler drei Anweisungen in einem "Very Long Instruction Word" (VLIW) zusammengefaßt und mit einem "Tag" versehen das angibt welche der Instruktionen unabhängig ausgeführt werden können.

Natürlich stellt diese Konzept höhere Anforderungen an den Compiler als bei den klassischen RISC Systemen. Und hier lag in den letzten Jahren ein großer Schwachpunkt der Systeme. Erst die Compiler in der Version 6.0 und insbesondere in der Beta-Release der Version 7.0 zeigen Stabilität und Optimierungspotentiale die zumindest den Mindestanforderungen entsprechen. Betrachtet man jedoch die rasante Entwicklung bei Intel sowohl im Bereich der Hardware als auch beim Compiler innerhalb des letzten Jahr, so darf man hoffen, dass die Itanium Reihe zu einem ernsthaften Konkurrenten für die IBM Power Linie heranwächst.

Aus diesem Grund werden sich das RRZE (im Rahmen des KONWIHR Projektes cxHPC) und das LRZ intensiv mit den beiden Konkurrenten beschäftigen. Erste sehr positive Erfahrungen konnten dabei auf einem "Pre-Production" 4-Wege Itanium2 System (Prozessor: 1 GHz; 4 MB On-Chip L3 Cache) am HLK Stuttgart sowie an einem 4-Wege IBM p630 (Prozessor: 1 GHz; MB Off-Chip L3 Cache pro CPU) System (Leihgabe der Firma IBM an das LRZ) gesammelt werden. Neben grundlegenden Kernel-Routinen wie etwa dem STREAMS Benchmark oder der Vektortriade gelang die Portierung erster umfangreicherer Anwenderpakete die zum allgemeinen Erstaunen auf dem Intel Itanium2 Performancewerte zeigen,

die oft das IBM Niveau erreichen und gelegentlich sogar übertreffen.

Als Beispiel seien hier das DMRG Programmpaket des KONWIHR Projektes cxHPC sowie das CFD Programm FASTEST (Lehrstuhl für Strömungsmechanik FAU, KONWIHR Projekt FLUSIB) angeführt:

1. Das DMRG Paket basiert im Wesentlichen auf Matrix-Matrix Multiplikation (DGEMM) und kann daher sehr hohe Leistungswerte erzielen. Da die DGEMM Teile jedoch von einem komplexen C++ Gerüst verwaltet werden kann sich wie bei der Hitachi ein schlecht implementierter C++ Compiler negativ auf die Gesamtperformance auswirken.

2. Das CFD Programm FASTEST wurde bisher vor allem auf Vektorrechnern wie der VPP oder aber der Hitachi im COMPAS Modus (automat. Parallelisierung innerhalb des Knoten) eingesetzt. Angegeben ist die reale Leistung für zwei typische Benchmarkfälle mit 1 GB (Fall 1) bzw. 3 GB (Fall 2) Speicherbedarf. Für die Hitachi sind die Zahlen für die ursprüngliche von den Vektorrechnern kommende Version (-DVECTOR) sowie die durch cxHPC optimierte Version (-DHSROPT) angegeben. Bemerkenswert ist, dass eine Itanium2 CPU in der nicht-optimierten Programmversion bereits 80% der Leistung eines Fujitsu VPP300 Vektorprozessors (Baujahr 1997) erreicht. An einer Optimierung und Shared-Memory Parallelisierung für Itanium2 und Power4 Systemen wird derzeit gearbeitet.

Da die bisherigen Erfahrungen mit dem Intel System positiv sind, hat das RRZE zwei Dual-Workstations (HP zx6000) mit großem Speicher- und Plattenausbau für Portierungs- und Optimierungsarbeiten beschafft.

on nach Waterloo auch nicht dreinschauen. Er schloss die Sitzung und verließ, ein lautes „Aber sagt nachher nicht, ich hätte Euch nicht gewarnt!“ ausstoßend, den Raum. Und tatsächlich – als boshafter Mensch sah sich „der Nutzer“ im Geiste schon beim Verfassen eines deftigen Leserbriefs zur unsäglichen Entscheidung dieser unsäglichen Kommission...

Nun aber genug der Kunst und zurück zu dem, womit wir uns von früh bis spät auseinandersetzen – den Zahlen. In diesem Sinne viel Spaß bei der Lektüre der neuen Ausgabe des Quartls. Und nicht vergessen – um 17 Uhr heimgehen!

Hans-Joachim Bungartz

## Conditions near the Interface During Liquid-Vapor Phase Transitions

**Evaporation and condensation are very important phenomena in our environment and in industrial processes. Thus, it is important to have a thorough understanding of them at the molecular level. However, the classical kinetic theory approach is brought into question by various experimental results. At the LSTM-Erlangen, a cooperative, international study has begun that has as its objective a more thorough investigation of the conditions existing at the interface during phase change processes than has been possible to date. The study is both experimentally and theoretically based.**

On the basis of recent experimental results, questions have been raised regarding the conditions that exist at the interface during liquid-vapor phase change. The standard assumption is that the in-

terfacial liquid temperature is equal to that in the vapor. However, in a series of evaporation experiments with three different liquids, it was found in each case that the interfacial liquid temperature was less than that in the vapor. The direction of the interfacial temperature discontinuity was always the same, but the magnitude varied with the evaporation rate and the liquid. Of the three-liquids (octane, methylcyclo-hexane, and water), the maximum temperature discontinuity occurred during the evaporation of water and was 7.8°C. A temperature discontinuity has also been measured during the condensation of water. The direction of the discontinuity was the same as that during evaporation, but the magnitude was less. The experimental measurements also indicated there is a complex sequence of events occurring in the fluids near the interface. For example, since water expands on cooling below 4°C, the conditions could be chosen so that the lightest liquid was at the top of the liquid during both evaporation and condensation processes. Thus, under this condition there would be no buoyancy-driven convection, but surface tension-driven convection could be present. In both types of phase change processes, there was evidence that convection was affecting the temperature profile near the interface. As indicated in Fig. 1, the measured temperature was uniform in a thin liquid layer, suggesting a mixing-type fluid motion. Below the uniform temperature layer, the temperature profile was approximately linear, indicating the energy transport mechanism there was conduction. Since evaporation and condensation are so important in our environment and in industrial processes, it is important to have a thorough understanding of them at the molecular level. Traditionally, the theoretical

approach to such issues has been based on classical mechanics as applied in kinetic theory. However, the classical kinetic theory approach is brought into question by the experimental results reported in Refs. 1-4. Beginning in the early 1970's and extending through the 1980's, several *theoretical* studies were conducted that had as their objective the prediction of the evaporation and condensation rates. These predictions were based on classical kinetic theory (e.g. see Refs. 5 and 6).

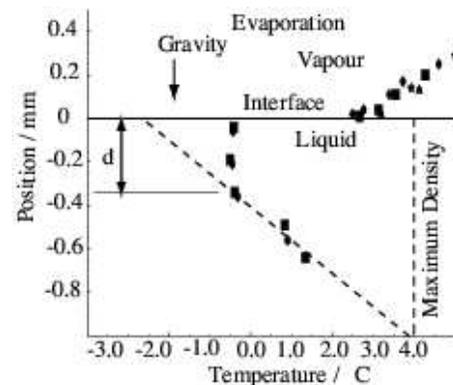


Figure 1: The temperature measured near the interface during steady state water evaporation (Ref. 4).

For liquid evaporation, the classical kinetic theory approach predicted that a temperature discontinuity would exist at the liquid-vapor interface, but that the temperature in the vapor would be *less* than that in the liquid. Such a discontinuity would be in the *opposite* direction to that measured. Also, the kinetic theory approach indicated that if a liquid were evaporating from one horizontal plate and condensing on a second horizontal plate that the gradient in the temperature between the plates would be in the *opposite* direction to the imposed temperature profile! Such temperature profiles were labelled “inverted from what would be physically reasonable” and “paradoxical” (Ref. 7).

The paradox was recently explained to some degree. In the kinetic theory approach the evaporation coefficient was taken as its maximum possible value, unity (Ref. 5-7). If the value of this coefficient is reduced to a fraction of its maximum value, then the inverted temperature profiles are no longer predicted. The implication of this is that classical kinetic theory does not lead to a prediction of the evaporation or condensation rate, but defines an empirical coefficient that must be measured. The difficulty with the latter view is that a survey of the measured values of the evaporation coefficients that have been reported in the literature has shown that at nominally the same conditions, the reported values vary by four orders of magnitude (Ref. 8). This suggests that the kinetic theory expression for the evaporation rate is inconsistent or incomplete in some as yet undefined way.

Statistical rate theory was applied in Refs. 2 and 3 to predict the conditions at the interface during steady state evaporation and the predictions were compared with the conditions measured for three liquids. In Ref. 4, statistical rate theory was used to predict the conditions at the interface during water condensation. For both evaporation and condensation, it was found that the predictions from statistical rate theory were in close agreement with the measurements over a wide range of conditions and in a number of different circumstances. The statistical rate theory approach differs fundamentally from classical kinetic theory because it is based on the transition probability concept of quantum mechanics. As a result, the prediction of the uni-directional evaporation rate obtained from statistical rate theory depends on the conditions in both the liquid and vapor phases be-

Vorsprung im Grundlagenverständnis der Hochtemperatur-Supraleitung halten zu können, ist es ganz entscheidend, dass auch in absehbarer Zeit in München eine neue Generation eines Höchstleistungsrechners installiert wird. Es sollte hier auch erwähnt werden, dass z. B. in den USA dieses theoretische Verständnis der Hochtemperatur-Supraleitung zu einem sog. „Grand Challenge“ erklärt wurde. Die Würzburger Gruppe ist voll in diese internationale Aktivität, aber auch Konkurrenz eingebunden. Sie wird z. B. dokumentiert durch intensivste Wechselwirkungen mit der University of California (Santa Barbara), der führenden Stanford University, sowie der Universität von Tokio in Japan.

Um diesen Fragestellungen nachgehen zu können, wurden dem Lehrstuhl für Theoretische Physik I in dem Forschungsverband („FORSUPRA“), der von mehreren bayerischen Hochschulen im Wechselspiel mit Industriefirmen (z. B. Siemens, Erlangen) ins Leben gerufen wurde und der vom Bayerischen Staatsministerium unter Mithilfe der Industrie finanziert wurde, insgesamt Personalmittel und Sachmittel von rund 600.000 Euro zuerkannt. Die numerischen Simulationen unterstützen maßgeblich das KONWIHR-Programm, Drittmittelprojekte der DFG, des BMBF und vor allem auch internationale Kooperationen mit den USA (Santa Barbara, Stanford) und Japan (Tokio).

W. Hanke, M. Jöstingmeier, Theoretische Physik, Uni-Würzburg, KONWIHR Projekte CUHE und OOPCV

Prozessorgeflüster ...

## Trends im High-Performance-Computing

Vor gut einem Jahr schien die Zukunft im Bereich der 64-Bit Prozessoren mit hoher theoretischer und realer Anwenderleistung von IBM mit seinen neuen Power4 Systemen dominiert zu werden:

Mitwettbewerber wie HP und Compaq, deren Name lange Zeit für leistungsstarke Number-Crunching Systeme stand hatten angekündigt, ihre eigenen Prozessorreihen aufzugeben. Nischen-Player wie SUN UltraSparc oder die MIPS Reihen konnten bei den wichtigsten Kennzahlen wie etwa Spitzenleistung oder Speicherbandbreite nicht mithalten. Die von Intel mit großem Aufwand angekündigte und eingeführte eigene 64-Bit Reihe (IA64) hatte mit ihrer ersten Inkarnation dem Itanium1/Merced eine Bruchlandung besonderen Ausmasses erlitten.

Ungeachtet dieses Rückschlages blies nun Intel mit dem Itanium2/McKinley Prozessor im Spätsommer 2002 erneut zum Angriff auf den Klassenprimus und hat im Hinblick auf seinen Vorgänger bei vielen wichtigen Prozessorspezifikationen deutlich zugelegt:

- Die Bandbreite des Speicherinterfaces wurde mehr als verdreifacht (von 2.1 GBS/s auf 6.4 GB/s).
- Der L3 Cache wanderte auf den Chip was zu deutlichen Reduktion der Latenzen und erhöhten Bandbreiten führte.
- Bei den Taktraten (900 MHz / 1 GHz) und Spitzenleistungen (3.6 GFlop/s / 4 GFlop/s) besitzt der Itanium2 Werte die sich mit den heute verfügbaren Power4 Systemen (max. 1.3 GHz / 5.2 GFlop/s) durchaus vergleichen lassen.

Der grundlegendste Unterschied zwischen

besteht aber aus der unvorstellbar großen Zahl von  $10^{23}$  solchen "Einheitszellen": Wenn das Elektron (2) auf das Elektron (1) in der Abb. 1 zuläuft, so hat diese Bewegung - da alle Teilchen geladen sind - auch einen Einfluss auf alle anderen, auch weit davon entfernten Elektronen und Ionen. Das heißt aber, wir müssen ein unvorstellbar kompliziertes, wie wir sagen "Vielteilchenproblem" mit - im Idealfall -  $10^{23}$  Teilchen lösen. Die Idee der numerischen Simulation besteht dann darin, das  $10^{23}$ -Teilchen-Problem auf ein sog. Cluster-Modell zu reduzieren, das "nur" noch z. B. 500 "Einheitszellen" enthält. Aber selbst dieses stark reduzierte Problem ist wegen der Wechselwirkung der geladenen Teilchen nur mit modernsten numerischen Methoden - z. B. Monte-Carlo-Verfahren - auf einem Supercomputer der neuesten Generation zu lösen und muss dann zur Kontrolle dem Experiment gegenübergestellt werden. Der Supercomputer selektiert dann mit Hilfe eines "raffinierten Würfelverfahrens" (daher der Name "Monte-Carlo") aus der mit der großen Zahl von Elektronen verbundenen, ebenfalls unvorstellbar großen Zahl von möglichen Realisierungen (insbesondere den nicht-supraleitenden Zuständen) die physikalisch relevanten Zustände, d. h. den Supraleiter. Bereits jetzt konnten durch die in München durchgeführten Computersimulationen auf dem Hitachi-Großrechner eine Vielzahl von Materialeigenschaften zum ersten Mal theoretisch erklärt werden. Wie oben dargelegt, konnte insbesondere zum ersten Mal der "Klebstoff", d. h. die Paarbildung, die zur Supraleitung führt, in einem mikroskopischen elektronischen Bild verstanden werden. Der Erfolg dieser Computersimulationen beruht insbesondere darauf, dass mit der momentan zur Verfügung stehenden Su-

percomputerkapazität in München Simulationen mit etwa 500 bis 1000 Atomen und Elektronen im Festkörper, d. h. hier im Supraleiter, möglich werden. Diese Zahl genügt, um die Paarbildung zu verstehen, die im Wesentlichen "lokal" abläuft, d. h. in einer "Einheitszelle".

### **Konsequenter Ausbau des Höchstleistungsrechnens: Warum benötigen wir noch „schnellere“, noch „größere“ Supercomputer?**

Das nächste entscheidende Ziel besteht darin, durch entsprechende Höchstleistungscomputersimulationen die bisher allein empirisch durchgeführte Suche nach höheren Übergangstemperaturen in den supraleitenden Zustand, d. h. die Suche nach einem modernen "Stein der Weisen" durch eine systematische Suche zu ersetzen. Um dieses Ziel zu erreichen, ist jedoch eine bisher noch nicht vorhandene neue Generation von Supercomputern erforderlich. Wenn wir den supraleitenden Strom erklären wollen, dann müssen, wie eben erwähnt, eine unvorstellbar große Zahl von Cooper-Paaren "im Gleichschritt" durch z. B. einen Metalldraht "marschieren". Um dieses Phänomen nachzuweisen, müssen wir eine weitaus größere Zahl von Atomen und Elektronen und deren korrelierten Bewegungen auf dem Supercomputer simulieren. Entsprechende Rechnungen sind nur mit zukünftigen Generationen von Höchstleistungsrechner zu bewerkstelligen.

Mittlerweile wurden die weltweit größten Anlagen in Japan und USA installiert. Diese Anlagen haben eine Leistung, die etwa um einen Faktor 10 bis 20 über der des Bundeshöchstleistungsrechners in München liegt. Um unseren jetzigen

cause the transition probability concept can only be applied by saying both where the molecule is coming from and where it is going. By contrast, the expression for the uni-directional evaporation rate obtained from classical kinetic theory only depends on the properties of the liquid. The development of quantum mechanics in the early part of the last century was largely ignored by the fluid physics community. They persisted with continuum mechanics in bulk phases and either assumed the boundary condition or possibly used classical kinetic theory to obtain a boundary condition. The experimental results in Refs. 1-4 suggest that this approach may no longer be adequate. At a phase boundary where the density undergoes a change of several orders of magnitude over a distance comparable to a molecular diameter, it may be necessary to use quantum mechanics to predict the rate of molecular transport across the boundary.

A cooperative, international study has begun at LSTM that has as its objective a more thorough investigation of the conditions existing at the interface during phase change processes than has been possible to date. The study is both experimentally and theoretically based. For example, although the temperature profile in the liquid phase has characteristics that could be accounted for by fluid motion, no fluid motion has yet been measured. Further, there have been no previous reports of surface tension-driven convection of water, although there have been attempts to observe it experimentally. Thus, one of the studies at LSTM has as its objective the measurement of the fluid velocity near the interface with laser doppler anemometry. A computational-fluid-dynamics (CFD) study is being initiated with the objective of predicting the

temperature discontinuity from flow characteristics and temperature of the vessel containing the liquid. In the quantum mechanics based study, the temperature discontinuity was not predicted. The measured values of the interfacial temperatures were used in the statistical rate theory expressions for the evaporation rate and the vapor phase pressure was predicted. The predictions were within error bars of the measured pressure, but the expression for the rate is so sensitive to pressure that one can not conclude the quantum mechanical approach is valid. The objective of the CFD study is to investigate other mechanisms by which the temperature discontinuity might arise.

1. G. Fang and C. A. Ward, Temperature Measured Close to the Interface of an Evaporating Liquid, *Physical Review E*, 59, 417-428 (1999).
2. G. Fang and C. A. Ward, Examination of the Statistical Rate Theory Expression for Liquid Evaporation Rates, *Physical Review E*, 59, 441-453 (1999).
3. C. A. Ward and G. Fang, Expression for Predicting Liquid Evaporation Flux: Statistical Rate Theory Approach, *Physical Review E*, 59, 429-440 (1999).
4. C. A. Ward and D. Stanga, Interfacial Temperature Conditions During Evaporation or Condensation of Water, *Physical Review E*, 64, 051509 (2001).
5. T-P. Pao, Application of Kinetic Theory to the Problem of Evaporation and Condensation, *Phys. Fluids*, 14, 306-312 (1971).
6. C. Cercignani, W. Fiszdon and A. Frezzotti, The Paradox of the Inverted Temperature Profiles Between an Evaporating and a Condensing Surface, *Phys. Fluids*, 28, 3237-3240 (1985).
7. L. D. Koffman, M. S. Plesset and L. Lees, Theory of Evaporation and Condensation, *Phys. Fluids*, 27, 876-880 (1984).
8. R. Marek and J. Straub, Analysis of the

Evaporation and Condensation Coefficients of water I. J. Ht. Mass Transfer, 44, 39-53, (2001).

9. C. A. Ward, R. D. Findlay, and M. Rizk, J. Chem. Phys. 76, 5599 (1982).

10. H. K. Cammenga et al. On Marangoni Convection during Evaporation of Water, J. Colloid Interface Sci., 98, 585-586 (1984).

Charles A. Ward Guest Professor, Lehrstuhl für Strömungsmechanik Permanent Address: Department of Mechanical & Industrial Engineering University of Toronto, Toronto, Canada

## First Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop

**Am 10. und 11. Oktober fand der erste "Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop" am gerade frisch eingeweihten neuen Institutsgebäude für Informatik der Technischen Universität München in Garching statt. In 32 Präsentationen wurde aus den verschiedenen Fachgebieten der am HLRB und in KONWIHR vertretenen Projekte vorgetragen und so der Stand der Forschungstätigkeit im Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern und Deutschland dokumentiert. Etwa 100 Teilnehmer aus mehreren europäischen Ländern und den USA nahmen an dem Workshop teil.**

In dem Workshop wurden verschiedene wissenschaftliche Fachgebiete abgedeckt. Den Anfang machten die Bio- und Astrophysiker mit vier Vorträgen. Im Gebiet der numerischen Strömungsmechanik wurden die Themen Lattice Boltz-

mann Methoden, Fluid-Struktur Wechselwirkung, Turbulenzmodellierung und Turbulenzsimulation mit DNS und LES vertieft, wovon drei Projekte aus KONWIHR Reihen stammten (BESTWihr, Flusib und DiSiVGT). Im Bereich der Festkörperphysik waren die KONWIHR Projekte OOPCV, CUHE und HQSHPC vertreten und im Bereich der Chemie das Projekt PARAGAUSS. Die Informatik und angewandte Mathematik haben die Projekte gridlib, Par-EXPDE, cxHPC, ParBaum und Methwerk vorgestellt. Im Bereich der Geowissenschaften, der Hoch-Energie- und Nuklear-Physik waren fünf Projekte vertreten, darunter das KONWIHR Projekt NBW zum Thema Erdbebensimulation. Am Nachmittag des zweiten Tages hielt M. Parinello, CSCS Manno, den keynote Vortrag zum Thema "The Role of Supercomputing in Ab-Initio Molecular Dynamics".

Parallel zu den Vortragsveranstaltungen fand die Herbstsitzung des Beirates von KONWIHR und die Begutachtung der Neu- und Verlängerungsanträge statt.

## Kooperation mit IIT Kanpur im Bereich des Hochleistungsrechnens

Prof. Gautam Biswas vom Department of Mechanical Engineering des IIT Kanpur hielt sich in der Zeit von Dezember 2001 bis Oktober 2002 am LSTM-Erlangen auf, um hier die Ausbildung von Studenten im Bereich des technisch-wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens zu unterstützen. Darüber hinaus war Prof. Biswas im Bereich der Forschung tätig und hat an drei Themen mitgearbeitet, die als wichtige Teilthemen von Gruppen am LSTM-Erlangen

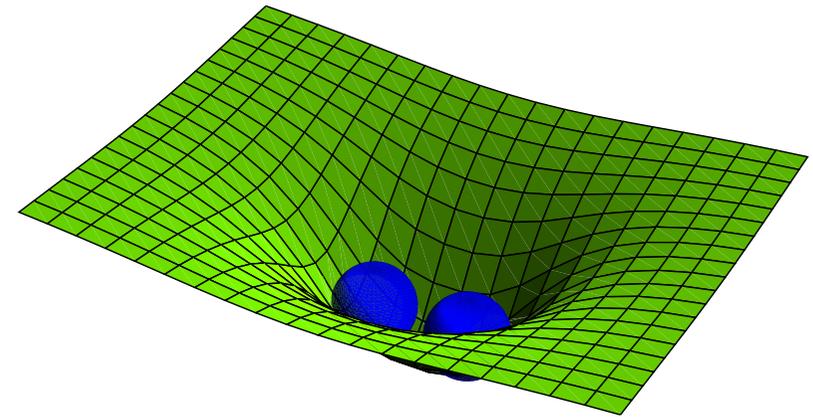


Abb 2: "Matratzen-Effekt": Eine Kugel bzw. ein Elektron bewirkt eine Mulde im Gitter, in die eine zweite Kugel bzw. ein zweites Elektron hineinfällt.

Diese Erkenntnis, die maßgeblich durch Supercomputer-Simulationen erlangt wurde, stellt einen Durchbruch dar: Da Elektronen etwa um einen Faktor 10.000 leichter sind als Ionen, die ja in den "traditionellen" Supraleitern (Abb. 1) bewegt werden müssen, um eine Paarung zu bewerkstelligen, wird die Paarung "viel leichter" durch die leicht beweglichen, mit den Elektronen verknüpften Elektromagneten (Spins) induziert. Das ist der tiefere Grund, warum in den Hochtemperatur-Supraleitern die Supraleitung "viel leichter" als in den traditionellen Supraleitern eintritt, und das Material nicht auf so extrem tiefen Temperaturen abgekühlt werden muss. Das ist natürlich nur ein grob vereinfachtes Argument, da quantenmechanische Effekte eine wesentliche Rolle spielen, die nicht in diesem klassischen Bild erfasst werden, die jedoch in den Computersimulationen berücksichtigt werden. Durch Computersimulationen auf dem HLRB wurde und wird also bereits jetzt zum Materialverständnis entscheidend beigetragen.

Nach diesem Erfolg wird es in der nächsten Zukunft darum gehen, wenn möglich, auch den zweiten entscheidenden Aspekt der Hochtemperatur-Supraleitung zu verstehen. Es ist momentan nämlich noch völlig unklar, wie die so gepaarten Elektronen den eigentlichen Supraleitungsstrom hervorrufen. Dazu müssen, grob vereinfacht dargestellt, alle Paare im Supraleiter (eine unvorstellbar große Zahl von  $10^{23}$  im Kubikzentimeter) im "Gleichschritt marschieren", d. h. sich "kohärent" verhalten, also additiv zum Strom beitragen und sich nicht gegenseitig stören.

Wieso benötigt man für diese Untersuchungen den Bundeshöchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum in München? In der theoretischen Physik wird zunächst - in einem ersten Schritt - ein vereinfachtes Modell, wie z. B. das Paarungsmodell der Abb. 1 vorgeschlagen. In Abb.1 betrachten wir aber nur zwei willkürlich herausgegriffene Elektronen und die vier sie umgebenden Ionen. Ein Kubikzentimeter eines Festkörpers

Supraleiter eine anziehende Wechselwirkung, die zur "Paarung" führt, zu finden. Die Schwierigkeiten, aber auch die Faszination, lagen unter anderem darin begründet, dass experimentelle Befunde den bisherigen, traditionellen Mechanismus (Abb. 1) praktisch ausschlossen. In den Würzburger-Münchener Untersuchungen konnte nun eindeutig belegt werden, dass ein theoretisches Modell, das mit einem breiten Spektrum von Experimenten quantitativ übereinstimmt, einen rein elektronischen Paarungsmechanismus voraussetzt:

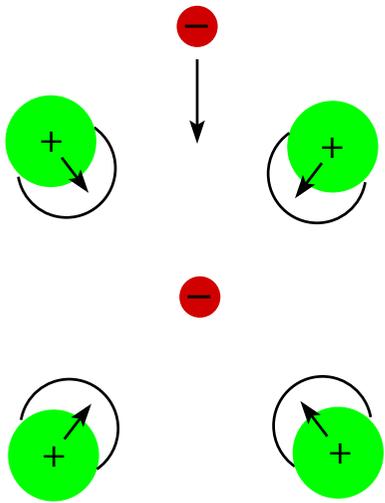
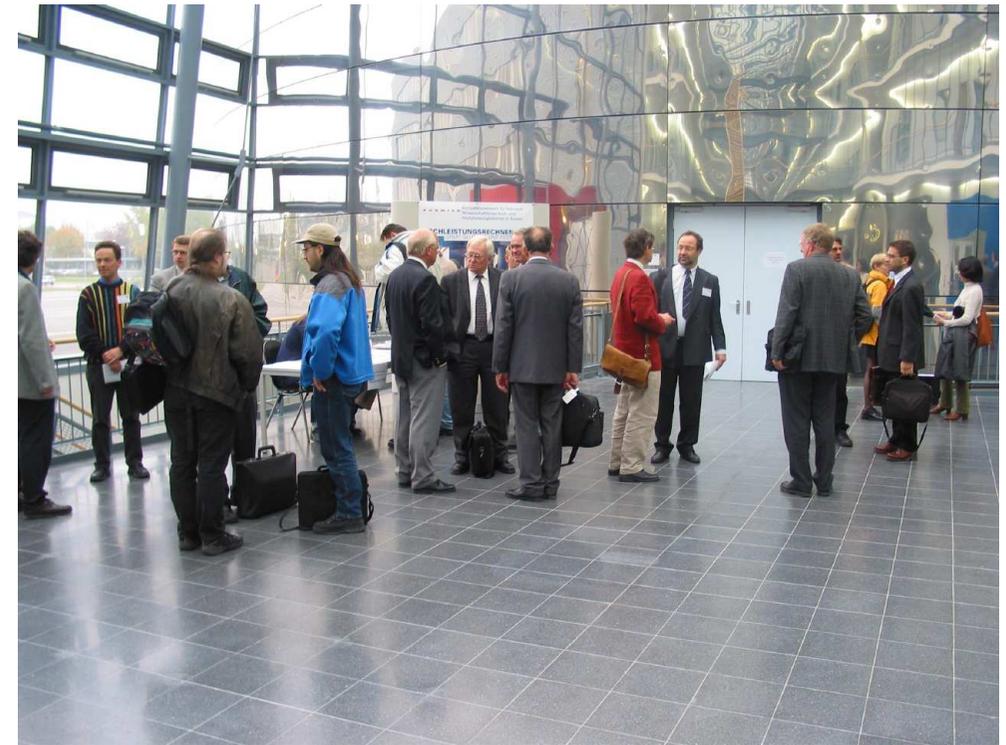


Abb. 1: Paarung in einem "traditionellen", d. h. in einem Tieftemperatur-Supraleiter: Ein herausgegriffenes Elektron (1), umgeben von mehreren Ionen im Festkörper, zieht diese an und erzeugt so eine Deformation (schwarze Radien) und damit verknüpft eine Anhäufung von positiver Ladung, die ein zweites Elektron (2) anzieht.

Betrachten wir zum Verständnis wieder Abb. 1. Die für die Paarung relevanten Ionen in den Hochtemperatur-Supraleitern, die - im Gegensatz zu den Tieftemperatursupraleitern - alle Kupferoxide sind, sind hier Kupferio-

nen. Diese Kupferionen bestehen aus einem positiv geladenen Kern und sog. "Rumpfelektronen", die man sich mehr oder weniger fest verbunden mit dem jeweiligen Ion vorstellen kann. Die Rumpfelektronen des Kupferions führen, ähnlich wie ein Kreisel, eine Präzisionsbewegung um eine feste Achse aus. Diese Drehung führt dazu, dass man sich die Rumpfelektronen wie einen kleinen Elementarmagnet (Spin) vorstellen kann; er besitzt eine (Nord-Pol, Süd-Pol) Vorzugsrichtung, die der Drehachse entspricht und eine Richtung wie ein gerichteter Vektor, die dem Drehsinn (z. B. im Uhrzeigersinn) entspricht.

Wie kommt hier nun die Paarung der Elektronen zustande? Das Elektron (1) deformiert hier auch ein Gitter, allerdings nicht das Ionengitter, sondern das Gitter der regelmäßig angeordneten Elementarmagneten. Das heißt, die Verschiebung der Ionen, wie im traditionellen Mechanismus der Abb. 1 ist nicht der entscheidende Effekt. Was deformiert wird, ist nicht das positive Ladungsgitter der sehr schweren Ionen (10.000 mal schwerer als ein Elektron). Deformiert wird stattdessen das zunächst regelmäßig angeordnete "Gitter" der mit jedem Kupferion verbundenen kleinen Elementarmagneten. Die Paarbildung kann man sich dann wie in Abb. 2 angedeutet vorstellen. Wie bei einer schweren Kugel, die auf ein elastisches Medium (das die Rolle des deformierbaren Gitters übernimmt) gelegt wird, bildet sich in der Nachbarschaft eine Mulde, eine Verzerrung, aus. Kommt nun ein zweites Elektron in die Nähe - oder auf der Matratze eine zweite Kugel - so fällt sie ebenfalls in diese Mulde. Auf diese Weise lässt sich - natürlich wieder in grober Vereinfachung - die von der Würzburger Gruppe vorausgesagte, rein elektronische Paarung verstehen.



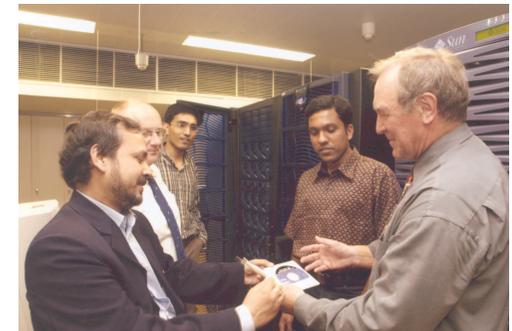
"Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop" in Garching.

bearbeitet werden, die sich mit technisch-wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen befassen. Es sind dies:

- Die Struktur der Strömung hinter der ebenen zurückspringenden Stufe
- Die Entstehung von Blasen an Düsen bei der Begasung von Flüssigkeiten
- Die Entstehung von Blasen beim Blasensieden in ebenen Kanälen mit endlichen Seitenverhältnissen

Die Zeit von Prof. Biswas am LSTM-Erlangen wurde auch genutzt, um Möglichkeiten der zukünftigen Kooperation zu planen und entsprechende Vorarbeiten durchzuführen. Es wurden Kooperationen vereinbart, die sicherstellen sollen, dass Entwicklungen am Department

of Mechanical Engineering des IIT Kanpur im Softwarebereich mit den Computermöglichkeiten in Erlangen zusammengeführt werden können.



Prof. Biswas (links) und indische Studenten informieren sich über Rechner und Rechenmöglichkeiten am Regionalen Rechenzentrum in Erlangen.

Höchstleistungsrechnen in der  
Materialforschung:

## Verlustfreier Stromtransport im Höchstleistungsrechnen im „Traumbereich Zimmertemperatur“

Bei extremen Minustemperaturen noch unterhalb von -120 Grad Celsius werden sog. Hochtemperatursupraleiter (HTSL) supraleitend, d. h. sie leiten den elektrischen Strom ohne jeden Widerstand. Seit der Entdeckung dieses faszinierenden Phänomens vor etwa 100 Jahren träumen unzählige Forscher davon, Stoffe zu finden, bei denen Supraleitung bei Zimmertemperatur auftritt. Die Vielzahl möglicher Anwendungen reicht vom extrem schnellen supraleitenden Chip bis hin zum verlustfreien Stromtransport und der Speicherung der elektrischen Energie in zukünftigen Kraftwerksgenerationen. Durch Computersimulationen auf Höchstleistungsrechnern der jetzigen Generation konnten bereits wichtige Bausteine des Supraleitungsmechanismus theoretisch erklärt werden. Mit Hilfe der zukünftigen Rechnergeneration soll die bisher empirisch durchgeführte Suche nach möglichst hohen Übergangstemperaturen durch Systematik und theoretische Voraussagen abgelöst werden.

### Supercomputing: Neue Erkenntnisse über die Hochtemperatur-Supraleitung

Seit 1911 das Phänomen der Supraleitung entdeckt wurde, träumen unzählige Forscher davon, Stoffe zu finden, die einen elektrischen Strom bei möglichst hohen Temperaturen ohne Widerstand, das heißt ohne Verluste, transportieren können. Bis 1986 mussten sie sich jedoch damit zufrieden geben, dass Supraleitung nur bei den extremen Mi-

nustemperaturen von weniger als 240 Grad Celsius unter Null möglich seien. Mit der Entdeckung der keramischen Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL) wurde jedoch das gesamte Forschungsgebiet radikal aus dem Dornröschenschlaf aufgeschreckt, in den es beinahe gefallen wäre: Mit einem Mal war die Supraleitung wieder in aller Munde, die Temperaturrekorde purzelten beinahe täglich, Tausende von Patenten wurden angemeldet und bereits ein Jahr später erhielten die beiden Entdecker, Georg Bednorz und Alexander Müller, den Nobelpreis für Physik.

Inzwischen ist die Euphorie etwas realistischeren Einschätzungen gewichen, was jedoch nicht bedeutet, dass nicht überall auf der Welt eifrig an der Verbesserung und dem Verständnis der neuen Stoffe gearbeitet wird. Entsprechende Anwendungen zeichnen sich unter anderem ab bei dem verlustfreien Stromtransport und seiner ebenfalls verlustfreien Speicherung (ein möglicherweise entscheidender Vorteil bei zukünftigen Kraftwerksgenerationen), bei sehr starken oder auch sehr empfindlichen Magneten (z.B. sog. „SQUIDS“, d. h. supraleitenden Metallringe als Sensoren für extrem schwache elektromagnetische Felder, wie sie unter anderem in der medizinischen Forschung benötigt werden) und vor allem auch in der Mikroelektronik.

Was kann nun die theoretische Physik zur Erforschung des Phänomens der Supraleitung beitragen? Mit einem in der Festkörperphysik insgesamt noch nie da gewesenen finanziellen und personellen Aufwand wird seit 1987 weltweit nach der mikroskopischen Ursache geforscht, d.h. nach einer Erklärung, ableitbar aus den Kräften und entsprechenden Bewegungen der mikroskopischen Bausteine, also der Elektronen und Ionen in einem

Festkörper. Idee und Hoffnung ist hier, dass durch ein entsprechendes Grundlagenvverständnis die bisher rein empirisch durchgeführte Suche nach verbesserten Supraleiter-Materialeigenschaften (z. B. höheren Sprungtemperaturen) durch eine systematische, logisch deduzierte Suche abgelöst wird.

In Verbindung mit einem der bisher größten in der Festkörperphysik je durchgeführten Computereinsätze konnte das Forscherteam des Würzburger Lehrstuhls für Theoretische Physik I am Bundeshöchstleistungsrechner (HLRB) in München wichtige Bausteine zu einem Mosaik zusammenfügen, das Hinweise auf einen neuartigen, rein elektronischen Paarungsmechanismus bei der Hochtemperatur-Supraleitung gibt. Dabei waren viele tausend Stunden Rechenzeit des Hitachi SR 8000 Großrechners am HLRB einem einzigen Projekt gewidmet: der Modellierung von Hochtemperatur-Supraleitern und der Simulation ihrer physikalischen Eigenschaften mit modernsten numerischen Techniken, sog. Quanten-Monte-Carlo-Verfahren. Dieses Projekt der Würzburger Arbeitsgruppe unter Leitung von Prof. W. Hanke hat zu wesentlichen, neuen Erkenntnissen über Hochtemperatur-Supraleitung geführt. Der Würzburger Arbeitsgruppe gelang mit Hilfe der oben erwähnten Computersimulationen ein entscheidender Durchbruch: Durch Simulation von theoretischen Modellen, die die wesentlichen mikroskopischen Bausteine und ihre Wechselwirkungen enthalten und deren Relevanz eben durch exakte Lösungen auf dem Computer und anschließendem Vergleich mit dem Experiment überprüft wird, konnten klare Hinweise auf einen neuartigen Supraleitungsmechanismus gegeben werden.

Der elektrische Strom wird im Festkörper

durch die negativ geladenen Elektronen transportiert, die sich an den in einem Gitter angeordneten positiven Ionen vorbeibewegen. Das Zustandekommen des Widerstands hat man sich - stark vereinfacht - so vorzustellen, dass die Elektronen auf ihrem Weg durch den Festkörper immer wieder Hindernissen, eben den Ionen begegnen und an ihnen gestreut werden. Schon seit den ebenfalls mit dem Nobelpreis ausgezeichneten Arbeiten von Bardeen, Cooper und Schrieffer Mitte der fünfziger Jahre ist bekannt, dass im Supraleiter der Ladungstransport nicht auf einzelne, sondern auf „gepaarte“ Elektronen zurückzuführen ist. Man kann zeigen, dass die gepaarten Elektronen an den Gitter-Ionen nicht mehr gestreut werden und deshalb der Widerstand verschwindet.

Normalerweise stoßen sich die gleichgeladenen Elektronen ab. Wie kommt also die „Paarung“ zustande? In den herkömmlichen Supraleitern, d.h. in den Tieftemperatur-Supraleitern, wird diese sog. „Paarung“, d. h. die anziehende Wechselwirkung zwischen den negativen geladenen Elektronen dadurch erklärt, dass ein Elektron bei seiner Wanderung durch das Material die positiv geladenen Ionen anzieht; ein zweites Elektron spürt die Deformation und die damit verknüpfte Anhäufung von positiver Ladung und wird deshalb zum ersten Elektron hingezogen, d. h. mit ihm gepaart (siehe Abb. 1). Für solche Elektronen ergibt sich trotz ihrer negativen Ladung netto eine anziehende Kraft: Aus solchen Paaren von Elektronen, den sog. Cooper-Paaren, bestehen also die Ladungsträger in Supraleitern, die sich dann ohne Widerstand durch den Festkörper bewegen. Bis vor kurzem war es jedoch den Physikern nicht gelungen, auch für die neuen Supraleitern, d.h. die Hochtemperatur-