

Editorial

Allmählich wird's erdrückend: Vorbei die frühen *Quartl*-Tage, als die Sottisen-Nahrung in einsamer, gemütlicher Jagd erlegt wurde. Inzwischen weiß man gar nicht mehr, wo man anfangen soll: Berater, Raffgier, Eliten, Kollekten, und kein Ende in Sicht; aber ganz ruhig, einmal tief durchatmen und der Reihe nach.

Erstens: Berater. Nein, es soll hier nicht um Sinn oder Unsinn dieser schmucken Branche geben. Nur darum, was eines Menschen Job ist und wofür man Berater brauchen darf. Als naiver Mensch vermute ich einfach mal, dass der gute Red Adair selbst ausrückt, wenn ein Feuer zu löschen ist, und nicht McKinsey schickt („McKinsey kommt!“); ich gehe auch davon aus, dass Ottmar H. den FC Bayern trainiert und sich nicht von Roland B. einsagen lässt, wie denn das mit der Viererkette nun sei (OK, von Franz B. vielleicht schon); Christian Thielemann überlegt sich bestimmt ebenfalls selbst, wie laut die Tuba zu blasen hat. Und wenn der Herr Bundesagentur sich zur Umgestaltung derselben umwerben lässt, könnte er da nicht entweder eigene Ideen entwickeln oder im Vorfeld mangels Kompetenz absagen? Ach ja, dann gab's ja noch den PR-Beratervertrag – um das „Vermittlungsproblem“ zu lösen. Wie sagte einst Friedrich Nowotny: „Ich kann einen Rossapfel nehmen, in Goldpapier einwickeln und als Golden Delicious anpreisen – es ist und bleibt ein Rossapfel“. Aber vergessen wir nicht: Inzwischen ist ja geklärt, dass alles nur eine böse Intrige war. Gibt es eigentlich Lehrstuhlberater?

Zweitens: Raffgier. Finger-Symbolik kommt wieder in Mode. 1994, bei der Fußball WM in den USA, wurde Profi und Werteschaffer Stefan E. wegen seines Fingerzeigs von den Verantwortlichen zumindest vorübergehend in die Wüste geschickt. Das zugegeben weniger anrühige, aber im Grunde nicht weniger obszöne Fingerspiel des Profis und Werteschaffers Josef A. blieb allerdings ohne Konsequenzen für diesen. Warum auch Konsequenzen? Man schiebt sich unter Freunden eine Abfindung hart an der Peanuts-Grenze zu – für „außergewöhnliche Leistungen“. Honni soit qui mal y pense! Und überhaupt: Alles nur der blanke Neid der



Flaschen auf die Erfolgreichen im Lande – die Deutschland schließlich mehr denn je braucht. Szenenwechsel von Düsseldorf nach Kalifornien: Da wollen zwei Angestellte eines großen deutschen Medienkonzerns (denen ihr unermüdlicher Einsatz schon am intensiv braunen Teint anzusehen ist) über hundert Millionen Dollar von ihrem Arbeitgeber, weil sie für diesen einen Einkauf getätigt haben. Und wie nicht anders zu erwarten, bekommen sie in erster Instanz im Land der unbegrenzten Möglichkeiten Recht. Am Ende glauben die Jungs noch wirklich, ihr Tun sei das wert. Ja du lieber Himmel – soll etwa der Herr Verheugen zwanzig Prozent von Polen als Privatbesitz kriegen, weil er die EU-Osterweiterung so toll vorangetrieben hat? Oder die Grundschullehrerin von George Double-U eine nette Ölquelle? Vor kurzem wurde Kants zweihundertsten Todestags gedacht – viel vom kategorischen Imperativ scheint nicht mehr übrig zu sein.

Drittens: Eliten. Wenn es denn einen Sinn hätte, auf die Bulmahnsche Weise selbige aufzuspüren und zu fördern, dann könnte man trotzdem alles wieder einstampfen – mangels Kandidaten. Denn wie sich die diversen Möchtegernelitären nach der Ankündigung aufgeführt haben (lautstark schimpfen, Gerüchte aufsaugen und streuen, sich – und nur sich – als Elite angesprochen fühlen, eifrig auf das Hochschul-Ranking im Kleingärtner-Magazin verweisen (weil man dort vorne gelandet war) und hastig gegen die Konkurrenten in Stellung gehen), ist nicht so wahnsinnig elitär (im edlen Sinne des Wortes), oder?

Viertens: Kollekten. Auch wenn das Thema Toll Collect im Fasching schon hinreichend strapaziert wurde – so ganz ohne Stellungnahme des **Quartls** geht's dann doch nicht. Darum hier unser Rettungs-

vorschlag: Ach Edelgard, beglücke uns mit deinen Eliten – besser heute als morgen! Am besten eine Vorhut zum guten Stern auf unseren Straßen, eine zum rosa T, und eine besonderes große Abordnung natürlich zur Kollekte ins Tollhaus. Lass' die Eliten über die Schalthebel der Macht ziehen und ein paar Schalthebelbetätiger einziehen (sowie gleich rückstandsfrei entsorgen, um ein Wort aus den Gründertagen der Bayerischen Forschungsstiftung aufzugreifen). Und wenn es deine Eliten dann viribus unitis geschafft haben sollten, dass guter Stern, rosa T & Co. nur halbwegs das Niveau der erbärmlichsten aller deutschen Unis erreichen, dann werden die Herzen (und, für dich sicher wichtiger, die Wählerstimmen) der Deutschen dir zufliegen!

Zum Abschluss des Rundumschlags noch ein Wort zu Pisa – es nervt zunehmend, wenn die Altvorderen (die oft noch erstaunlich jung sind) den Pisa-Zeigefinger erheben. Wer verbockt denn momentan so viel? Unsere des Schreibens und Rechnens persistent unkundigen Nichtsnutze an den Schulen? Von wegen! Die, die seinerzeit angeblich noch die Wurzel aus 379 im Kopf berechnen konnten, setzen den Transrapid in Brand; die, die seinerzeit angeblich noch Goethes Faust rückwärts auswendig aufsaugen konnten, vermurksen ein Gesetz nach dem anderen; die „seinerzeit-in-Vietnam-war-noch-Leistung-gefragt“-Typen, denen damals (als letzte gerade noch) ein hammerhartes Abitur abverlangt wurde, schaffen nicht mal mehr das, was bisher hierzulande immer ganz gut geklappt hat – Gebühren einzutreiben. Und eine solche Auflistung hat fürwahr nichts mit einer angeblich zunehmenden Katastrophensehnsucht zu tun, die die Psycho-Beratertruppe eines großen Nachrichtenmagazins in Deutschland ausgemacht ha-

ben will – das sind bloß Fakten, Fakten, Fakten! Darum der herzliche Aufruf an alle Pisaner: die vermeintlichen Vorbilder ignorieren und einen eigenen Weg gehen – es kann eigentlich nur besser werden (wenn wir nicht wüssten, dass nichts so dumm ist, dass es nicht noch an Dummheit übertroffen werden könnte ...). In diesem Sinne Frohe Ostern und ein erfolgreiches Egg Collect überall!

Doch halt – es gibt auch noch KONWIHR-Internes zu kommentieren. Zu den zentralen Aufgaben des KONWIHR zählt bekanntlich die Förderung der Zusammenarbeit zwischen beteiligten Hochschulen und Rechenzentren. Bleibt etwas davon, oder endet auch diese mit der letzten Förderrate (sozusagen eine weitere rückstandsfreie Entsorgung)? Eine geradezu vorbildliche Kooperation zwischen TUM und LRZ kam uns zu Ohren, die allen Geldgebern als Ansatzpunkt für neue Anreizsysteme zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses dienen könnte. Seit knapp zwei Jahren arbeiten P.H. (Lehrstuhl für Bauinformatik) und O.W. (LRZ) am Projekt VISIMLAB (Details dazu – inklusive des *Golden Spike Award* – in der letzten Ausgabe). Die Intensität der Zusammenarbeit hat nun dazu geführt, dass die Autorenliste (eben P.H. und O.W.) im *Quartl* zu P.W. verdichtet wurde – obwohl auch das H und das O ihr Teil zum

Projekterfolg beigetragen haben. Schuld daran trägt natürlich der Projektleiter, der sich offenbar nicht hinreichend um die Schlussredaktion gekümmert hat. Überhaupt – diese Person (Name der Redaktion bekannt), die alleine schon aufgrund ihrer herausgehobenen Amtsstellung an der TUM gehalten wäre, Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu fördern statt auszubuten, hat den beiden auch in anderer Weise übel mitgespielt. Man hört, dass immer neue Forderungen nach Effizienz und Beispielen den beiden monatelang den Schlaf geraubt haben. Nächtlanges Debuggen konnte nur ertragen werden, weil P.H. und O.W. in aufopfernder Art jedes Privatleben hintanstellten und nicht aufhörten, zusammen zu arbeiten, zusammen zu programmieren, zu dokumentieren und zu schimpfen, zusammen zu essen und zu trinken und schließlich – ein Leben lang zusammenzubleiben. Petra (geborene Hardt) und Oliver Wenisch haben geheiratet, P.W. gibt's als bessere Hälfte nun also tatsächlich. Herzlichen Glückwunsch zu diesem besonders erfreulichen, nachhaltigen KONWIHR-Resultat – und brav gefördert und gekuppelt, Herr VP!

Jetzt aber wirklich – viel Spaß mit der neuen Ausgabe!

Hans-Joachim Bungartz

Neuer Rechner – neues Haus ... Grundsteinlegung in Garching: das neue Leibniz-Rechenzentrum

Die Baugrube ist schon ausgehoben, aber am 26. März ist es nun auch offiziell so weit. Der Grundstein für das neue Gebäude des Leibniz-Rechenzentrums auf dem Campus Garching wird in Anwesenheit von Wissenschaftsminister Gop-

pel gelegt. Wesentliche Teile des neuen Gebäudes sollen bis Ende 2005 fertig gestellt sein und dann soll auch der neue Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB II) in den neuen Rechnerräumen installiert werden.

Bestehende Platz- und technische Infrastrukturprobleme machen einen Neubau für das LRZ unverzichtbar. Seit Jahren kann das Leibniz-Rechenzentrum nur mit Mühe neue Mitarbeiter unterbringen. Solche werden dringend für die wachsende Zahl von neuen Diensten und für die verzahnte Kooperation mit den Münchner Hochschulen gebraucht. Die Suche nach Ersatz- bzw. Erweiterungsstandorten in der Münchner Innenstadt verlief über Jahre hinweg ergebnislos. Der Wegzug von Fakultäten der TU München aus der Innenstadt, zuletzt der Mathematik und Informatik, hat das bisherige Gelände einer Neunutzung nahe gebracht, die das LRZ nur als Relikt übrig lassen würde.

Nicht zuletzt die Perspektive als Zentrum für Höchstleistungsrechnen, das bundesweit Dienste bereit stellt, macht eine bedeutende Erweiterung der Rechenraumgröße für eine neue Generation von Höchstleistungsrechnern unabdingbar. Der neue Höchstleistungsrechner könnte ohne den Neubau gar nicht installiert werden.

Die wissenschaftliche Einbettung legt als Standort den Campus Garching geradezu nahe. Unter Beachtung des in den Funktionsräumen zu erwartenden Publikumsverkehrs und erhöhter Sicherheits-

anforderungen entstand für den LRZ-Neubau das Konzept eines dreiteiligen Baukörpers, bestehend aus Rechner-, Instituts- und Seminartrakt. Das neue Gebäude liegt unmittelbar südlich der Fakultät für Mathematik und Informatik der TUM an der Ludwig-Prandtl-Straße. Der Entwurf stammt vom Architekturbüro Herzog und Partner in München, er gestaltet ca. 6.000 m² Hauptnutzflächen und ca. 3.000 m² Funktionsflächen.

Der Rechnertrakt ist ein Würfel von 36 m Kantenlänge und ist im Normalfall nur über eine Brücke im dritten Obergeschoss aus zugänglich. Der Kern des Rechnerwürfels besteht aus drei Nutz- und zwei Versorgungsgeschossen. Das oberste Geschoss ist säulenfrei, daher wird dort der neue Höchstleistungsrechner stehen. Es ist eine Luftkühlung eingeplant, die es ermöglicht, bis zu 400.000 m³ Luft pro Stunde durch das Rechnersystem zu blasen. Der Rechner steht auf einem begehbaren Doppelboden; er wird mehrere hundert Quadratmeter Stellfläche und eine Bodenbelastbarkeit von maximal 2 Tonnen/m² bieten, bei einem Stromverbrauch von bis zu 2,4 MW. Im nächsten Geschoss von oben werden der Landeshochleistungsrechner, das Linux-Cluster, die Serverfarmen und die zen-



Ansicht des neuen Leibniz-Rechenzentrum aus Norden:
Hörsaal/Seminarräume – Mitarbeiter-/Funktionsräume – Brück – Rechnerkubus

tralen Netzkomponenten untergebracht, im Geschoss darunter die Platten- und Bandspeichersysteme. Die zwei unteren Stockwerke dienen der Elektro- und Klimaversorgung. Der Institutstrakt ist viergeschossig, ca. 12 m breit und 100 m lang. Er bietet den Mitarbeitern Platz und enthält Labor- und Testräume. Der Hörsaaltrakt beherbergt Hörsäle und Seminarräume.

Der LRZ-Neubau ist eine technische Herausforderung. Dies betrifft z.B. die Stromversorgung mit einer Anschlussleistung von insgesamt 4,7 MW. Um den Kern der Nutzfunktionalität aufrechtzuerhalten (wichtigste Netz- und Serverkomponenten, an denen das Funktionieren des gesamten Münchner Wissen-

schaftsnetzes hängt), muss eine Stromversorgung von 100 KW auf Dauer unterbrechungsfrei garantiert werden. Das Sicherheitskonzept für Gebäude und Betrieb einschließlich Brandschutzkonzept ist sehr aufwändig. Auch auf Erweiterbarkeit wurde geachtet. Schließlich verlangte auch der Institutstrakt Aufmerksamkeit in Bezug auf Belüftung, Temperierung, Blendfreiheit etc.

Mit diesen technischen Vorkehrungen ist das LRZ zuversichtlich, auch am neuen Standort die Erwartungen seiner Kunden als modernes Dienstleistungszentrum zu erfüllen und seine Kompetenz als Forschungs- und Entwicklungszentrum zukunftsorientiert gestalten zu können.

matthias.brehm@lrz-muenchen.de

Ein neuer Rechner — diesmal aber ohne neues Haus ... Einweihung des SGI-Altix3700 Superclusters am RRZE

Immer öfter scheint es ja inzwischen so zu sein, dass für neue Rechner auch neue Häuser nötig sind. Man denke nur an Jülich, Stuttgart oder München ...

Im Februar wurde am RRZE der SGI-Altix3700 Superclusters (28 Itanium2 CPUs, schnelles NumaLink-Netzwerk und 112 GByte Shared Memory — alles auf geringer Stellfläche) eingeweiht.

In einer kleinen Feierstunde wurden die Technik des Rechners* (*“NumaLink meets Itanium”*, Georg Hager, RRZE) sowie einige Beispiele aus dem FAU-Alltag für die Anwendung von Hochleistungsrechnern vorgestellt: *“Turbulenzsimulation oder das schwarze Loch des High Performance Computing”* (PD Michael Breuer, LSTM-Erlangen), *“Moleküldynamiksimulationen zur Un-*

tersuchung von Stabilität und Funktion von Proteinen” (Prof. Sticht, Emil-Fischer-Zentrum, FAU), *“Atome im Gefängnis: Stickstoff im Fulleren-Käfig?”* (Prof. Clark, Computer-Chemie-Centrum, FAU).

Abgerundet wurden die Kurzvorträge mit Beiträgen aus den Häusern Intel und SGI über das, was wir in den nächsten Jahren erwarten dürfen, sowie den Grußworten des Kanzlers, Herrn Schöck, die nachfolgend zusammengefasst sind:

“Die Einweihung der Silicon Graphics Altix3700 hat es ein weiteres Mal gezeigt: Die FAU ist auch im High Performance Computing Spitze! Ob Strömungsmechanik, Bioinformatik oder Computerchemie, eine breite Palette von

*Quartl-Leser konnten die Details ja bereits in der letzten Quartl-Ausgabe lesen

Wissenschaftsgebieten nutzt die am Rechenzentrum installierte Rechnerkapazität, um innovative Lösungen für komplexe Aufgaben zu finden: Von der Verbesserung des Verbrennungsverhaltens im Motorraum bis zum Bewegungsverhalten von Proteinen in Molekülen des AIDS-Virus; mit den Rechnern des Rechenzentrums werden hochaktuelle Problemstellungen angegangen.

Notwendig dafür ist nicht nur ein Höchstleistungsrechner, sondern auch ein Team, das in der Lage ist, die Aufgaben für diese Maschine zusammen mit den Fachwissenschaftlern so aufzubereiten, dass sie die Potentiale der modernen Rechensysteme optimal nutzen können. Unter Leitung von Dr. Gerhard Wellein bietet die HPC-Gruppe des Rechenzentrums nicht nur Service nach innen, sie dokumentiert auch nach außen die Fähigkeit unserer Universität, auf dem Gebiet des High Performance Computing Spitzenleistungen zu erbringen. Staatsministerium und Hochschulleitung war dies immerhin je 1 Stelle wert — in Zeiten massiven Stelleneinzugs ein deutliches Signal für die Wertschätzung der Arbeit der HPC-Gruppe am RRZE.

Damit die FAU im Konzert der HPC-Aktiven erfolgreich mitspielen kann, muss bereits jetzt über Ersatzinvestitionen in noch leistungsfähigere und komplexere Rechner nachgedacht werden.”

Herr Kanzler, wir nehmen Sie gerne beim Wort (und hoffen natürlich auch, dass es nicht nur beim Nachdenken bleiben muss ...). Dankbare Abnehmer für die Rechenleistung gibt es auf jeden Fall in ausreichendem Maße — im KONWIHR und auch außerhalb.

Quartl-TZ



Das Imperium schlägt ...

... noch nicht zurück

Supercomputing 2003 in Phoenix/AZ

Im Land der dicken Stoßstangen ist man um Superlative niemals verlegen, was auch der USA-Neuling angesichts einer Konferenz wie der “Supercomputing” anerkennen muss. Mit einer Rekord-Teilnehmerzahl von über 7500 Besuchern aus 43 Ländern war es die bestbesuchte Supercomputing aller Zeiten.

Eines der Hauptevents stellte natürlich wieder die Präsentation der aktuellen Top500-Liste dar [1]. An der Spitze hat sich indes nicht allzu viel getan — einsam steht dort immer noch der “Earth Simulator”, der durch sein schieres Funktionieren Mitte 2002 dem amerikanischen ASCI/RISC-Establishment einen gehörigen Dämpfer verpasste. Am NEC-Booth — bezeichnenderweise in direkter Nachbarschaft zu CRAY — konnte man sich dann auch im Studentakt die Segnungen der Vektor-Technologie vergegenwärtigen lassen.

Apropos CRAY: Man sagt ja, dass Totgesagte länger leben. Wenn man bedenkt, dass noch vor gut einem Jahr die kleine Vektor- und MPP-Schmiede von vielen Experten lapidar zum Alteisen gezählt wurde, muss man ob der neu gewonnenen Agilität schon den Hut ziehen. Das neue Vektorsystem X1 kann sich



Teil des “European Village” der SC2003 mit den Ständen den HLRS (links) und des NIC (rechts)

performancemäßig durchaus mit der japanischen Konkurrenz messen und verkauft sich offenbar sehr gut. Dass es dabei um andere Preisregionen geht als bei Linux-Clustern, dürfte klar sein – aber Durchsatz hatte schon immer seinen Preis. Die alten Zeiten, in denen CRAY-Vektormaschinen auch wegen ihrer hervorragenden Skalarperformance gekauft wurden, sind allerdings endgültig vorbei: die X1 ist in ihren Charakteristika ein reinrassiger Vektorrechner. “Unter der Haube” lauern indes einige Überraschungen wie z.B. ein interessantes Mischkonzept aus Vektor- und Shared-Memory-Eigenschaften [2]. Mit dem Heraufdämmern der neuen Vektorlinie wittert natürlich einer der traditionellen CRAY-Großkunden, nämlich der Defense-Sektor, Morgenluft. Nach jahrelanger politischer Blockade japanischer Vektorrechner und dem halbherzigen

Versuch, über die CRAY-Vertriebsrechte für die NEC-SX-Linie doch noch konkurrenzfähige Technologie in den amerikanischen Markt zu bekommen, hat das DoD nun wieder heimische Produkte auf dem Teller, z.B. mit einer 128-CPU X1 am Army High Performance Computing Research Center (AHPCRC) [3]. Über die dort laufenden Anwendungen konnte man sich dann ebenfalls auf dem CRAY-Booth eingehend informieren. Und zum wiederholten Mal unbehaglich staunen, wie unverkrampft man in den USA mit militärischen Applikationen umgeht.

Nach dem Tod der legendären T3E-Linie hatte CRAY bis vor kurzem auch kein vernünftiges MPP-Konzept in Petto. Das Cluster-Intermezzo, mit dem die Firma seit 2001 versuchte, das “T3E-Look and Feel” mit Commodity-Komponenten (Alpha-Knoten mit Myrinet) in die neue Zeit zu retten, verlief ja (zum Glück?)

Platz	Standort	#CPUs / Prozessor / Interconnect	Rmax / Rpeak
1	Earth Simulator Center	5120 / NEC SX	35860 / 40960
2	Los Alamos National Lab	8192 / Alpha / Quadrics	13880 / 20480
3	Virginia Tech	2200 / G5 / Infiniband	10280 / 17600
4	NCSA	2500 / Xeon 3.06 / Myrinet	9819 / 15300
5	PNNL	1936 / Itanium 2 / Quadrics	8633 / 11616
6	LANL	2816 / Opteron / Myrinet	8051 / 11264
7	LLNL	2304 / Xeon 2.4 / Quadrics	7634 / 11060
8	LLNL	8192 / Power3 / SP	7304 / 12288
9	NERSC/LBNL	6656 / Power3 / SP	7304 / 9984
10	LLNL	1920 / Xeon 2.4 / Quadrics	6586 / 9216

im Sande. Im Oktober 2002 jedoch vergab das Sandia National Lab einen 90-Mio.-\$ Auftrag an Cray für die Errichtung eines massiv parallelen Systems auf Basis des AMD Opteron. Die Eckdaten: 10386 Prozessoren, 40 TFlops Peak Performance, 10 TByte verteilter Hauptspeicher, MPI-Latenz maximal $5\text{ }\mu\text{s}$ [4]. Wenn die Maschine im August dieses Jahres den Produktionsbetrieb aufnimmt, kann sie trotzdem den Earth Simulator höchstwahrscheinlich noch nicht vom Sockel stoßen. Neuesten Meldungen zufolge wird CRAY das System - Codename “Red Storm” – auch als Produkt vertreiben und damit ihrer T3E eine würdige Nachfolge verschaffen. Wie man munkeln hört, sogar zu einem sehr interessanten Preis.

Doch zurück zur “Liste”. Bemerkenswert ist die nun unübersehbare Durchsetzung mit Commodity-Clustern, von denen allein sechs den Sprung in die Top10 geschafft haben. Die deutsche HPC-Landschaft befindet sich dort allerdings in breiter Front auf dem Rückzug. Die Anzahl der deutschen Systeme sank seit Juni 2003 von 54 auf 36, allein im akademischen Bereich gingen 5 von 11 Systemen verloren. Das schnellste deutsche System ist momentan der IBM p690-Komplex in Garching (Platz 31). Auch das IA32-Cluster am RRZE hat es “erwischt” – die Einstiegsplatte von gut 400 GFlops haben wir mit dem unveränderten LINPACK-Wert von 365 GFlops sauber gerissen. Glücklicherweise schimmern diverse Silberstreifen am Horizont: Das HLRS in Stuttgart hat den Vertrag für ein 512-CPU Vektorsystem von NEC unterzeichnet, und der IBM-Komplex in Jülich mit 8,9 TFlops Peak Performance (und endlich dem neuen Federation-Switch) ist im Februar in Betrieb gegangen. Aber bis

Deutschland wieder einen Rechner in den Top10 hat, wird wohl noch einige Zeit ins Land gehen.

Natürlich hält eine “Supercomputing” noch viel mehr bereit als Top500. Erfreulich ist, dass auch abseits der Mainstream-Events Platz für interessante Innovationen ist, wie z.B. bei dem kleinen Startup OctigaBay, das mit Opteron-Knoten und einem proprietären Hochgeschwindigkeits-Interconnect (Latenzen unter $2\text{ }\mu\text{s}$ und Bandbreiten im GB/s Bereich) von sich reden machte. Oder bei Streamline Computing, das einen eigenen parallelen Debugger als echte Alternative zu TotalView auf den Markt gebracht hat. Oder auch bei der jungen Firma PathScale, die das Open64-Projekt – ehemals der SGI-eigene Itanium-Compiler – als Grundlage für einen neuen, hochoptimierenden Opteron-Compiler verwendet. Überhaupt war AMDs neues Flaggschiff einer der Stars bei vielen Präsentationen. Und auch wenn er performancemäßig seinem Widersacher Itanium 2 oft (noch) nicht das Wasser reichen kann – die Verkaufszahlen sprechen eine deutliche Sprache.

Insgesamt war es wirklich eine Konferenz der Innovationen, die den Untertitel “Igniting Innovation” sicher zu Recht verdiente. Bleibt zu hoffen, dass im November 2004 in Pittsburgh einiges davon in leistungsfähige, stabile und auch preiswerte Produkte eingeflossen sein wird.

- [1] <http://www.top500.org/>
- [2] <http://www.cray.com/products/systems/x1/>
- [3] <http://www.lanl.gov/orgs/ccn/salishan2003/pdf/camp.pdf>
- [4] <http://www.ahpcrc.org/>

georg.hager@rrze.uni-erlangen.de

Verbessertes Job-Scheduling MAUI Scheduler am IA32-Cluster des RRZE

Nach den eher enttäuschenden Erfahrungen mit dem Job-Scheduling während der ersten acht Betriebsmonate des IA32-Clusters wurde beim Benutzertreffen am 25.11.2003 beschlossen, dem alternativen Batch-Scheduler MAUI eine Chance zu geben. MAUI hat einige Features, die ihn als wirkliche Alternative zu etablierten kommerziellen Lösungen wie LSF oder PBSPRO erscheinen lassen. Am 15. Dezember 2003 wurde der neue Scheduler in Betrieb genommen und ersetzte den alten FIFO-Scheduler von OpenPBS.

Das "Look and Feel" des Queueing-Systems OpenPBS hat sich aus Anwendersicht durch diese Maßnahme nicht verändert, es wurde ja nur eine Komponente "unter der Haube" ausgetauscht. Was allerdings die Verteilung und Priorisierung von Jobs angeht, hat sich einiges getan:

- MAUI beherrscht Backfilling, d.h. in die durch das Leerschauen von Knoten zwecks Starten großer Paralleljobs entstehenden Lücken können Kurzläufer einsortiert werden, was die Auslastung deutlich verbessert.
- Fairshare funktioniert jetzt zuverlässig und ist die Hauptkomponente bei der Priorisierung von Jobs. Wenn ein Nutzer innerhalb einer gewissen Zeitspanne mehr (weniger) als einen gewissen "Share" der Ressourcen genutzt hat, wird er in seiner Priorität zurückgestuft (hochgestuft).
- Auch die Wartezeit eines Jobs geht ein – je länger gewartet werden musste, desto höher ist die Priorität. Das stellt sicher, dass ein Job auf jeden Fall irgendwann zum Zuge kommt, wenn er nur lange genug gewartet hat.

- MAUI hat vielfältige "Drosselmechanismen", die eine sehr feinkörnige Ressourcenverteilung erlauben und verhindern können, dass einzelne User das System für sich priorisieren.

Durch Aktivierung des MAUI Schedulers konnte sofort eine sehr viel gerechtere Ressourcenverteilung erreicht werden. Kein Anwender hat - vorausgesetzt es werden von anderer Seite genügend Jobs submittiert - über einen längeren Zeitraum mehr als 15-20% der Gesamtresourcen auf sich vereint. Der alte FIFO-Scheduler ließ sich hier sehr einfach dazu bewegen, 50% oder mehr auf einen einzigen User zu vergeben, auch wenn noch viele andere Jobs auf Ausführung warteten.

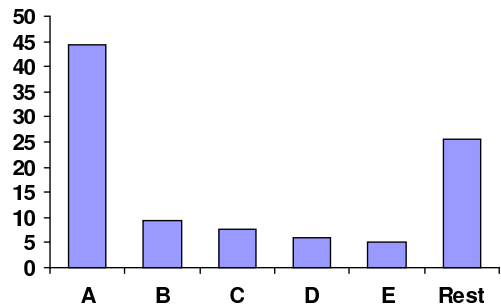


Abbildung 1: Abgegebene Rechenzeit in Prozent für die größten Verbraucher von Juli bis Mitte Dezember 2003

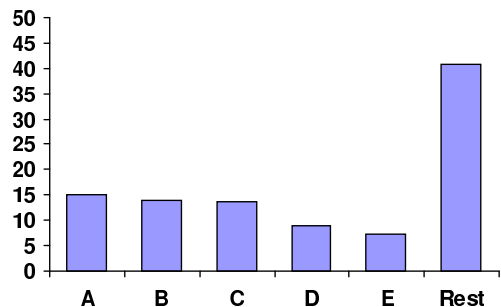


Abbildung 2: Abgegebene Rechenzeit in Prozent für die größten Verbraucher seit Aktivierung des MAUI Schedulers

Abgesehen von diesen offensichtlichen Verbesserungen kann MAUI auch administrativ mit Highlights aufwarten: Beispielsweise ist es nun sehr einfach, Wartungsfenster durch eine “administrative Reservierung” anzusetzen. MAUI startet Jobs dann automatisch so, dass sie mit dem Wartungsfenster nicht kollidieren können. Ein frühes “Abdrehen” der Queues ist also hinfällig. Auch die Freistellung von Knoten für Tests oder Spezialanforderungen ist ohne weiteres möglich.

Angesichts all dieser Vorteile ist MAUI für das IA32-Cluster sicher eine akzeptable Lösung. Kleinere Hakeleien – wie z.B. das Verhalten nach dem Crash von Knoten – sind dabei ohne weiteres zu verschmerzen. Andere Alternativen wurden selbstverständlich geprüft, allen voran die mögliche Migration zum kommerziellen PBSPro. Abgesehen davon, dass damit ein nicht unerheblicher finanzieller Aufwand verbunden wäre, ist der in PBSPro verwendete Scheduler der MAUI-Software in vielen Aspekten deutlich unterlegen. Bei der Art von Workload, wie sie im Moment auf dem Cluster zu verwalten ist, hätte PBSPro ähnliche, wenn auch nicht so gravierende Probleme wie OpenPBS mit FIFO-Scheduler. Die leichten Vorteile in der Betriebsstabilität und beim Handling kommerzieller Applikationen wiegen diese Nachteile nicht auf.

georg.hager@rrze.uni-erlangen.de

Links zum Thema:

<http://www.openpbs.org/>

<http://www.supercluster.org/maui/>

Neues aus dem Bereich “computational seismology” SPICE-Projekt gestartet

Das Ende des letzten Jahres im Rahmen des 6. Rahmenprogramms der EU bewilligte Marie-Curie Research Training Netzwerk SPICE (Seismic wave Propagation and Imaging in Complex media: a European network) im Bereich “computational seismology” ist am 1.1.2004 angelaufen. Das Netzwerk mit 14 Partnern (darunter Institutionen in Paris, Rom, Oxford, Utrecht, etc.) wird vom Bereich Geophysik des Departments für Geo- und Umweltwissenschaften der LMU München koordiniert.

Im Januar fand im Seminarhotel Sudelfeld das “Kick-off Meeting” des Projekts statt, bei dem die wissenschaftlichen und technischen Ziele des Netzes detailliert wurden. Diese Ziele sind: (1) die Entwicklung einer digitalen Bibliothek mit verifizierten Programmen zur Berechnung seismischer Wellenausbreitung in allen Skalenbereichen (Labor bis Planetenskala), (2) die Entwicklung standardisierter Formate zur langfristigen Speicherung von Simulationsdaten (z.B. synthetischer Seismogramme) in enger Zusammenarbeit mit der experimentellen Seismologie (weltweite Seismometernetze), (3) das Erstellen von online Kursmaterial, welches die numerischen Verfahren erklärt, sowie (4) Weiterentwicklung der Verfahren zur seismischen Wellenausbreitung in den Bereichen globaler Seismologie, Erdbebenbruchprozesse und ihrer Relevanz für seismische Gefährdung, Vulkanseismologie und Explorationsseismik.

Im Bereich “computational seismology” setzt sich die Einsicht durch, dass in nächster Zukunft die Simulationsdaten ähnlichen Stellenwert haben werden wie Beobachtungen. Während für die Beob-

achtungsdaten (permanente Beobachtungen der Bodenbewegungen im weltweiten Seismometernetz) eine gut funktionierende Infrastruktur und globale Standards existieren, ist dies für den Simulations-Bereich überhaupt nicht der Fall. SPICE soll hier zur Entwicklung von standardisierten Formaten sowie Software und Hardware Infrastruktur beitragen. Dazu ist eigens ein Meeting im Juni 2004 mit Wissenschaftlern der europäischen und amerikanischen Datentzentren vorgesehen.

Diese Entwicklungsarbeit wird ergänzt durch jährliche Research and Training Workshops, die vor allem auf die Ausbildung der am Netz beteiligten Doktoranden abzielt, aber für interessierte Wissenschaftler offen sind. Der erste Workshop, bei dem ein Rundumschlag aller numerischer Verfahren präsentiert werden soll, wird Ende September an der Internationalen Universität in Venedig stattfinden.

Weitere Information finden Sie unter <http://www.spice-rtn.org/>.

Prof. Dr. Heiner Igel, Sektion Geophysik, Department für Geo- und Umweltwissenschaften, LMU München

Internationales Graduiertenkolleg THESIS mit Schwerpunkt Simulation von Geoprozessen bewilligt

Die Bayerische Staatsregierung hat am Di, 9.3.2004, die ersten fünf "Elite-Studiengänge" bekannt gegeben, die im Rahmen des Projekts "Elitenetzwerk Bayern" bewilligt wurden. Dieses Programm besteht aus sog. Elitestudiengängen (Master) und Internationalen Graduiertenkollegs. Den Zuschlag erhalten hat auch das von der Sektion Geophysik des Departments für Geo-

und Umweltwissenschaften zu koordinierende Graduiertenkolleg THESIS (Dynamic processes in the Earth: Theory, Experiment, SimulationS). An THESIS beteiligt sind die Bereiche Seismology, Geodynamik und Vulkanologie der Sektion Geophysik der LMU, die Bereiche Geologie und Geodäsie der TUM, und die Münchner Rückversicherung. Internationale Partner sind die Universitäten Berkeley, Tokyo, Paris und Vancouver. Ziel ist in interdisziplinären Projekten eine engere Verknüpfung von experimentellen und theoretisch/numerischen Bereichen in den Geowissenschaften zu erreichen. Dabei wird ein Schwerpunkt sein, Deformationsprozesse, die durch GPS gemessen werden, mit der damit verknüpften Seismizität zu verbinden. Weitere Projekte sind in der Vulkanologie und der Geodynamik vorgesehen. Das Beobachten der Deformationsprozessen an der Oberfläche und der damit assoziierte Spannungsaufbau in der Erdkruste und die zeitliche Veränderung der seismischen Gefährdung ist eine der spannendsten Fragestellungen in der Geodynamik. Offensichtlich spielen hier 3-D numerische Verfahren zur Berechnung der Deformation und der Wellenausbreitung eine zentrale Rolle.

Prof. Dr. Heiner Igel und Prof. Hans-Peter Bunge, Sektion Geophysik, Department für Geo- und Umweltwissenschaften, LMU München.

Erfolgreicher Studiengang "Computational Engineering" an der FAU-Erlangen

In Erlangen haben wiederum 40 meist ausländische Studentinnen und Studenten ihre Ausbildung im Bereich des *Computational Engineering* begonnen. Sie absolvieren zunächst ein "Orientierungsse-

mester”, in dessen Rahmen angestrebt wird, alle Studentinnen und Studenten auf den selben Wissensstand zu bringen, so dass anschließend ein geordnetes Masterstudium möglich ist. In dieser Ausbildung engagieren sich Lehrstühle der angewandten Mathematik, der Informatik und der Ingenieurwissenschaften. Viele der Masterstudentinnen und Studenten werden später, durch ihre Masterarbeiten, in Konwihr-Projekte eingebunden.

Damit hat das Internationale Master-Programm *Computational Engineering* seit seiner Einrichtung an der FAU im Jahre 1997 insgesamt ca. 250 Studentinnen und Studenten, von denen mittlerweile 83 ihr Studium erfolgreich abgeschlossen haben.

NUMET 2004 ...

Die Fortsetzung einer Erfolgsgeschichte

Alle 2 Jahre im Frühjahr, das ist traditionell NUMET-Time. So auch in diesem Jahr: Vom 8.–11. März fand in Erlangen der Kurzlehrgang NUMET 2004 („*Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen*“) statt. Veranstaltet wurde der Lehrgang vom Lehrstuhl für Strömungsmechanik Erlangen unter Mitwirkung von aktiven und ehemaligen FORTWIHR- und KONWIHR-Mitgliedern sowie Software-Firmen. Innerhalb von vier Tagen wurde den Teilnehmern eine Einführung in die Grundlagen der Strömungs-Simulationsverfahren anhand zahlreicher Beispiele eindrucksvoll demonstriert. Zusätzlich wurde den drei erfolgreichsten kommerziellen CFD-Anbietern die Chance geboten, Ihre Produkte dem interessierten Publikum zu präsentieren.

Mit weit über 80 Teilnehmern (62 Externe, 24 Interne) aus der Industrie und dem Hochschulbereich war die Resonanz wiederum enorm. Spötter und Kritiker der Branche, die das Ende der goldenen Zeiten der Simulation heraufzubeschwören versuchten, wurden dadurch zum wiederholten Male eines Besseren belehrt. Die Simulation von Strömungs- und Transportphänomenen spielt nicht nur in der Forschung, sondern auch in der industriellen Praxis eine immer wichtigere Rolle. Dieser Trend ist ungebrochen, was bedeutet, daß man nicht nur geeignete Software und Hardware für derartige Simulationen braucht, sondern vor allem auch geschulte und hoch qualifizierte Mitarbeiter(innen), die mit diesen Werkzeugen umgehen können. Dazu beizutragen, das war und ist seit nunmehr zehn Kurzlehrgängen das Anliegen von NUMET. Ich hoffe sehr, wir konnten hier unseren Beitrag leisten.



Kaffepause — Wer hart lernt, braucht auch etwas Stärkung und eine zwanglose Umgebung für weiterführende Diskussionen ...

Gemäß dem Motto „*Wenn es am besten ist, soll man aufhören!*“ darf ich persönlich mich aus dem NUMET-Organisationsteam abmelden und meinen Nachfolgern alles Gute für den nächsten Kurs im Frühjahr 2006 wünschen.

michael.breuer@lstm.uni-erlangen.de

Computation of Flow Induced Noise on Hitachi SR8000-F1

M. Escobar, I. Ali, F. Hülsemann,
M. Kaltenbacher, S. Becker
LSE, LSS, LSTM-Erlangen

1 Introduction

Significant advances in aeroacoustics and better computational resources are providing tools for simulating basic phenomena and mechanisms of noise generation and emission and thereby develop strategies to reduce aerodynamic noise. Our objective is to understand the mechanism of flow induced noise around a square cylinder by making use of the computational advantages of the Hitachi SR8000-F1, optimizing for this machine the numerical tools developed at the Institute of Fluid Mechanics (LSTM) and the Dept. of Sensor Technology (LSE). A hybrid approach is used, where Lighthill's acoustic analogy in its extended formulation as given by Ffowcs and Hawkings is employed for the acoustic computation. MpCCI 2.0.4 is used as coupling interface to perform the data transfer of the fluid field quantities to the computational acoustic code.

2 Porting of CFS++ and its Parallelization

The experience at the LSS achieved from other C++ projects on the SR8000 and the actual structure of the program allows a fast and almost trouble-free compilation to obtain a running version of the sequential code. The initial matrix-storage format (CRS: Compressed Row Storage) resulted in a floating point performance of a matrix-vector multiplication of about 30 MFLOP/s on a single processor, almost independent from the size of the problem. This low value is not to be ascribed to the usage of C++, since a FORTRAN77 implementation did not

bring better results. The substitution of the CRS with a jagged diagonal Format (JDF) yielded a five times better performance to about 150 MFLOP/s for the same operation storing the matrix transposed. A significant improvement of the performance of the single processor is only reachable through a extensive change to the existing program. However, this would not mean any time reduction in the total computation time of the coupled problem since the fluid mechanics simulation takes much longer to be completed.

Concerning parallelization, the discretization of the acoustic wave equation yields an elliptic problem which needs to be solved at each time step. The system matrix resulting from this discretization is symmetric and positive definite, therefore the CG-method is applicable. The parallelization of the CG-method at matrix/vector level is possible through the preparation of matrix- and vector storage format and with constructive operations in relatively easy way. In contrast, the choice of an appropriate and effective preconditioner is more difficult. For the selection of a preconditioning strategy, required number of iterations for a series of different formulations, considering as example the Laplace problem, were compared. This resulted in the AMG outperforming the other approaches. Since the efficient parallelization of the AMG method itself is relatively complex, we currently work on a MPI-based parallelization by means of an overlapping domain decomposition.

3 Coupling of FASTEST-3D and CFS++ via MpCCI

For the coupling of the two codes we employ the *Mesh-based parallel Code Coupling Interface* (MpCCI) [1]. This library has been developed by the *Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing*. Data exchange for three-

dimensional coupled problems is possible with the latest version, MpCCI 2.0.4.

The data exchange process carried out with MpCCI is based on MPI communication [2]. On both sides, a grid definition is carried out in the initialization. The main difference between both simulation domains is that FASTEST-3D uses a structured grid, whereas on the CFS++ side it is possible to use an unstructured or even a mixed mesh.

During the actual simulations, the velocity field and the pressure distribution from FASTEST are transferred to CFS++. The values are exchanged at the nodal positions of the grids by means of internal interpolation in MpCCI. Subsequently, with these values it is possible to carry out the acoustic computation.

4 Flow Induced Noise Computation

4.1 Fluid Computation

Numerical flow simulations are carried out with FASTEST-3D [3], developed at LSTM. For time discretisation an implicit second-order scheme is employed, while a non-linear multigrid scheme, in which the pressure correction method acts as a smoother on the different grid levels, is used for convergence acceleration. For the LES simulation Smagorinsky-Model is used as implemented by Glück [5].

4.2 Acoustic Computation

The computation of flow induced noise is carried out using the finite element implementation of the inhomogeneous wave equation coming from Lighthill's acoustic analogy in its extended formulation derived by Ffowcs and Hawkins [4]. This formulation accounts for the inclusion of solid surfaces in the unsteady flow. Time discretization is performed by a predictor-corrector method of the Newmark family. The model has been implemented in the in-house simulation packa-

ge CFS++ [6]. In the acoustic computation we simulate the far-field acoustic pressure from the unsteady flow. Therefore, we use an acoustic domain having a sufficiently large size, so that at regions far from the domain of turbulence, the isentropic relationship $p' = c^2 \rho'$ is fulfilled. At the moment, a set of first order absorbing boundary conditions derived from Padé approximations are implemented to account for free field radiation. A linear damping scheme has also been used to perform boundary correction at the fluid boundary, where the hydrodynamic field computation is truncated.

4.3 Results

Figure 1 represents the three-dimensional computational domains for the fluid and acoustic simulations. For the two-dimensional case a corresponding geometry has been selected, where the square cylinder has a side length of 20 mm and the length and width of the fluid computational domain has been taken to be 800 mm and 100 mm respectively. As for the acoustic computation, for current simulations we have chosen a round domain in order to reduce reflection of non orthogonal waves impinging on the boundary. Such a domain has been used in the computation of Fig. 3.

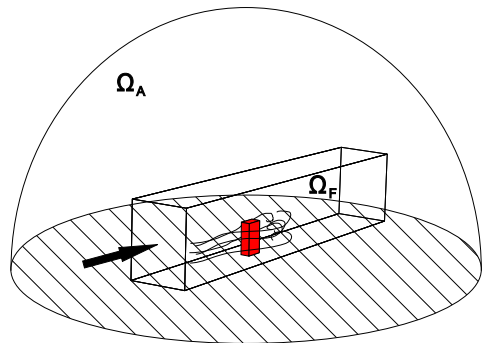


Fig. 1: Setup: Flow around a square cylinder. The computed CFD field data for $Re = 10000$ as depicted in Fig. 2 is used to cal-

culate the acoustic pressure around the square cylinder.

Figure 3 represents the acoustic far field pressure result for both dipole and quadrupole contributions computed from the pressure and velocity values. Regarding the validation of results, at the moment the corresponding measurements for the three-dimensional case are being carried out in the aeroacoustic wind tunnel integrated into an anechoic chamber at the Dept. of Sensor Technology.



Fig. 2: Fluid pressure distribution for $Re = 10000$.

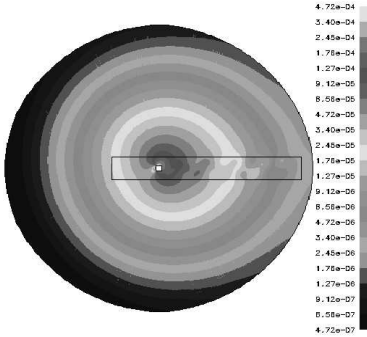


Fig. 3: Far field instantaneous acoustic pressure visualization (logarithmic representation).

4.4 Computational Aspects

The fluid dynamics code FASTEST 3D is already a parallel multigrid solver. The parallel implementation is based on grid partitioning with automatic load balancing and follows the message-passing concept, ensuring a high degree of portability. The final job with 8 million nodes is run using the PARALLEL partition of the SR8000 with 16 nodes. Element parallel program with 8 IP's per node is used. Other queues have also been tested with varying number of blocks.

CFS++ was ported to the Hitachi SR8000-F1 and compiled using the KCC compiler. Initially, two-dimensional simulations were done using MpCCI 1.2.0. Recently MpCCI 2.0.4 which allows exchange of volume data has been acquired and ported to the Hitachi. At the moment CFS++ has again been compiled using this new version and initial tests for a coupled three-dimensional simulation are being carried out. For these volume problems it is convenient to employ a suitable parallelization scheme for the linear system obtained by spatial and time discretization. On this aspect the Dept. of System Simulation (LSS) has modified the current code by implementing an overlapping additive Schwarz method to the conjugate gradient solver. The domain decomposition itself is done on the discrete level (matrix graph partitioning). As a next step, performance tests of CFS++ will be done replacing its current linear algebraic system library LAS with the new in-house object oriented library OLAS, which takes into account the aforementioned parallel aspects.

- [1] <http://www.mpccl.org/>, 2003.
- [2] <http://www.mpi-forum.org/>, 2003.
- [3] F. Durst & M. Schäfer, *A Parallel Block-Structured Multigrid Method for the Prediction of Incompressible Flows*, Int. J. Num. Meth. Fluids 22 (1996), 549–565.
- [4] J.E. Ffowcs-Williams & D.L. Hawkings, *Sound radiation from turbulence and surfaces in arbitrary motion*, Phil. Trans. Roy. Soc. A 264 (1969), 321–342.
- [5] M. Glück, *Ein Beitrag zur numerischen Simulation von Fluid-Struktur-Interaktionen*, Ph.D. thesis, LSTM-Erlangen, 2003.
- [6] M. Kaltenbacher & E. Zhelezina, *CFS++ Coupled Field Simulation.*, Department of Sensor Technology (LSE), Uni-Erlangen, 2003.

Berechnung von Strömung und Reaktionen in porösen Medien unter Verwendung eines Homogenisierungsansatzes

M. Steven und D. Trimis, LSTM-Erlangen

Die Berechnung von Strömungen in porösen Medien, wie Festbetten, Metall- oder Keramikschäumen stellt aufgrund der sehr komplexen Geometrie eine schwierige Aufgabe dar. Mit CT- oder MR-Aufnahmen ist es möglich, diese komplexen Geometrien vollständig aufzulösen und in ein Rechengitter zu transferieren. Die Strömung kann anschließend mit Lattice-Boltzmann-Verfahren berechnet werden. Für die Berechnung der reinen Strömung sind die Rechenzeiten mit diesem Verfahren gering. Sollen jedoch zusätzlich die Energiegleichung und die Erhaltungsgleichungen mehrerer Spezies (bei der Methanverbrennung unter Verwendung des Mechanismus GRI-Mech 1.2 [1] beispielsweise 20 Spezies) gerechnet werden, ist der Rechenzeitbedarf noch zu hoch. Deshalb wird in der Gruppe "Strömungen mit chemischen Reaktionen" des LSTM-Erlangen bei der Berechnung von Strömungen in porösen Medien ein Homogenisierungsansatz verwendet, d. h. es wird angenommen, dass der Feststoffanteil homogen im porösen Medium verteilt ist und das Medium somit nur eine homogene Porosität besitzt. Nachteil dieses Ansatzes ist natürlich, dass lokale Phänomene, wie beispielsweise die Randgängigkeit in Festbetten, nicht wiedergegeben werden können, da durch die Homogenisierung nicht lokal aufgelöst wird. Die globalen Werte wie beispielsweise der Druckverlust oder der Umsatz bei der Berechnung mit chemischen Reaktionen werden jedoch korrekt vorausgesagt. Ein weiteres Problem beim Homogenisierungsansatz sind die Stoff-

daten, denn es kann nicht mehr die reine Feststoff- oder Fluidwärmeleitfähigkeit verwendet werden, sondern es muss nun eine effektive Wärmeleitfähigkeit angewandt werden. Die Modellierung dieser effektiven Wärmeleitfähigkeit ist an die der effektiven Wärmeleitfähigkeit von Schüttungen [2] angelehnt und setzt sich aus der Wärmeleitfähigkeit ohne Strömung und der Wärmeleitfähigkeit durch dissipative Quervermischungseffekte durch Anwesenheit des Feststoffs zusammen. Für Festbettschüttungen existieren schon ausreichend genaue Korrelationen. Für Schäume gibt es hierüber noch keine allgemeinen Korrelationen, sondern nur Korrelationen für einzelne Schäume, da die Stoffeigenschaften der Schäume von Hersteller zu Hersteller noch stark variieren. So ist die Angabe der Porosität, der Zellweite und des Materials des Schaums noch nicht ausreichend, um die effektive Wärmeleitfähigkeit zu bestimmen. Die effektive Wärmeleitfähigkeit muss also nach wie vor experimentell bestimmt werden. Des Weiteren bewirkt das poröse Medium einen zusätzlichen Druckverlust, der mittels der Forchheimer-Erweiterung des Darcy-Gesetzes beschrieben werden kann. Für die Verbrennungsrechnung wird ein Finite-Rate-Chemistry-Modell verwendet, da die Strömung in porösen Medien i. d. R. laminar ist. Bei diesem Modell sind die Reaktionsraten direkte Funktionen der lokalen Konzentration und Temperatur.

Das beschriebene Wärmetransportmodell der effektiven Wärmeleitfähigkeit in Kombination mit Verbrennungsmodellierung stand bislang nur in der zweidimensionalen Version des Finite-Volumen-Codes FASTEST des LSTM-Erlangen zur Verfügung [3]. Dieser Code ist sowohl für die Simulation von Verbrennung

in freien Flammen als auch in porösen Medien bereits ausreichend validiert und wird bereits seit mehreren Jahren erfolgreich für die numerische Simulation von Verbrennung ohne und mit porösem Medium angewandt. Er diene hier zudem als Referenz für Validierungsrechnungen. Die beiden beschriebenen Modelle wurden nun auch in die dreidimensionale Version FASTEST-3D portiert. Zwei erste Validierungsrechnungen (Abbildung 1), in denen ein 1-Schritt Mechanismus und ein Mehrschrittmekanismus (GRI-Mech 1.2 [1]) für Methanverbrennung bei $\lambda=1$ verwendet wurden, konnten bereits erfolgreich abgeschlossen werden.

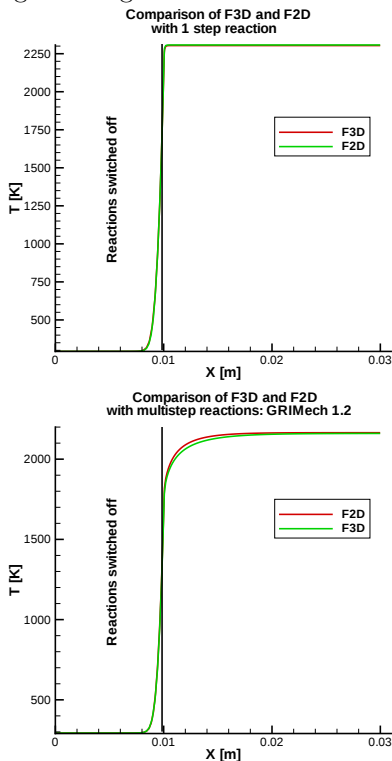


Abbildung 1: Vergleich zwischen der zweidimensionalen (F2D) und dreidimensionalen (F3D) Version des FV-Codes FASTEST für die Methanverbrennung unter Verwendung zwei verschiedener Mechanismen

Die Berechnungen waren eindimensional, so dass die Ergebnisse der Berechnungen der beiden Codes gut verglichen werden konnten. Unter Verwendung des 1-Schritt-Mechanismus sind die Ergebnisse nahezu identisch, für den Mehrschrittmekanismus beträgt die maximale Abweichung 1%, was für Verbrennungsrechnungen ausreichend genau ist.

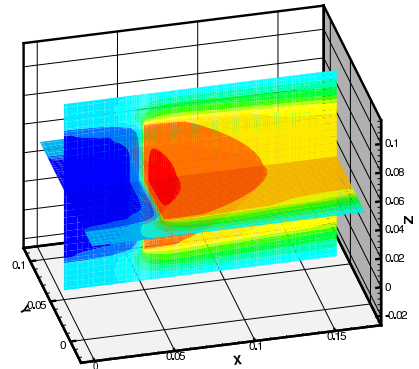


Abbildung 2: Temperaturverteilung im Porenbrenner bei einer Leistung von 5 kW, $\lambda=1,2$ und CO_2 -Massenanteil von 27,5% im Brenngas

Abbildung 2 zeigt das erste Ergebnis für die Berechnung eines Porenbrenners mit Berücksichtigung des Fluid-Feststoff-Wärmeübergangs zur Isolierung. Diese Berechnung wird in der nächsten Zeit noch mit der zweidimensionalen Version und mit experimentellen Daten validiert werden.

Literatur

- [1] Frenklach M. et al. GRI-Mech 1.2, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [2] Schlünder, E.-U. & Tsotsas, E., Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten, Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 1988
- [3] Weber, Th., Die numerische Simulation reaktiver Strömungen als Basis zukünftiger Reaktormodellierungen, Dissertation, FAU Erlangen-Nürnberg, 1999

Numerical Study of the Nature of Flows Through Porous Media

N. Boukhezar, F. Durst & G. Brenner,
LSTM-Erlangen

Introduction

The properties of fluid flows through porous media are often presented in terms of correlations, e.g. the Blake-Kozeny equation and the Burke-Plummer equation for the low and high Reynolds number limits or the Ergun equation for the intermediate range. When order of magnitude considerations are applied and similarity assumptions are introduced, non-dimensional equations result with constants that need to be adjusted according to the employed structure of the porous medium. It has been claimed in the literature that this adjustment of the constants in the correlations is due to pressure losses of the flow by elongational and shear caused energy dissipation. Detailed numerical investigations have been carried out for different porous media to assess the contributions of elongational and shear caused dissipations to the pressure losses.

Flows through porous media represent a class of flows that received considerable attention in fluid mechanics and in various fields of chemical and process engineering. Darcy's law has been the starting point for numerous publications that deal with porous media flows both experimentally and numerically and detailed reviews have been written that deal with the outcome of the various investigations, e.g. see [1]–[9].

A good summary of the essential papers is given in the book by Bird, Stuart and Lightfoot [10] summarising the outcome of investigations of pressure losses of flows through a packed bed of spheres.

For such packed beds, similarity considerations can be applied yielding generally applicable correlations of the kind $f = F(Re)$ where:

$$f = \frac{1}{4} \left(\frac{D_P}{L} \right) \left(\frac{\Delta P}{1/2 \rho U_0^2} \right) \quad \text{and} \quad Re = \frac{D_P U_0}{\nu} \left(\frac{1}{1 - \epsilon} \right) \quad (1)$$

In these equations the following nomenclature is used:

f	friction factor
D_P	particle diameter
L	length of the packed column
ΔP	pressure drop over column length
Re	Reynolds number
ν	kinematic viscosity
U_0	superficial velocity
ϵ	void fraction

Introducing the hydraulic radius for a sphere, permits the pressure drop to be expressed as

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \left(\frac{\mu U_0}{D_P^2} \right) \frac{(1 - \epsilon)^2}{\epsilon^3}. \quad (2)$$

This results in the Blake-Kozeny correlation that shows to be valid for small Reynolds number flows through packed beds of spheres. In the theoretical derivation a coefficient of 72 emerges instead of 150. This correction is done in order to account for the tortuous path the fluid particles undergo. Recent experimental measurements give a coefficient of approximately 180 (see McDonald [5] or Durst *et al.* [7]).

For higher Reynolds number, the Burke-Plummer equation shows to be valid:

$$\frac{\Delta P}{L} = 1,75 \left(\frac{\rho U_0^2}{D_P} \right) \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3}. \quad (3)$$

In the intermediate Reynolds number range, the Ergun equation (Ergun [4])

looks promising. It describes the existing data well.

$$\Lambda = fRe = 150 + 1,75Re. \quad (4)$$

Mc Donald *et al.* revisited Ergun's equation and modified it by adapting the content of the second term on the RHS of equation (4)

$$\Lambda = fRe = 180 + 1,8Re. \quad (5)$$

By carrying out experimental measurements for different packed beds of spheres, Durst *et al.* [7] found almost the same relationship between the friction factor and the Reynolds number for smooth particles.

$$\Lambda = fRe = 182 + 1,75Re. \quad (6)$$

The discrepancy found between the theoretical analysis and the experimental data, which involves a factor of 2 or more, is attributed to neglecting the dissipation (caused by the elongational strain) when considering the theoretical derivation of the Blake-Kozeny equation for the pressure drop. With regard to this discrepancy, a simple attempt is made, in which a factor (tortuosity factor τ) is introduced to correct this difference. This factor is assumed to represent the effect of the tortuous fluid paths.

$$\Lambda = 72\tau^2. \quad (7)$$

Therefore, the main aim of the present work is to carry out detailed numerical simulations, in order to assess the contributions of the elongational and shear caused dissipations to the pressure losses in real porous probes.

Computational Approach

The problem to be solved is the computation of the velocity and pressure fields at the void space level of the porous media. The flow variables are obtained from transport equations derived from basic

conservation principles, i.e. the Navier-Stokes equations. The closed set of equations constitutes the mathematical model governing the motion of a Newtonian, incompressible fluid. There is no analytical solution to such a problem, at least not for realistic boundary conditions and complex geometries. In such a case recourse is usually made to numerical methods in view of their ability to find some approximate solution. Among the large number of methods used, the finite volume method (FVM) is selected in the present work.

To obtain the pressure field by using the FVM, the SIMPLE algorithm of Patankar for collocated variables is employed in conjunction with the deferred correction discretization scheme. The marker-and-cell (MAC) approach is selected to discretize the geometry at the void space level. A collocated variable arrangement, in which all variables are stored on the same central node, is used. Each volume element or voxel, a unit square representing either void or solid, is centered on a node.

Geometry Representation

In general, the grid generation is a crucial phase in solving fluid flow problems and may be much more time consuming than the solution process itself, specifically for very complex geometries. Porous media configurations, unless some simple representative models are used, belong to this category of geometries. Nevertheless, some recent techniques that emerged recently can be successfully applied for complex geometries, even for porous media. Computed-Tomography (CT) is nowadays more and more often applied for generating any complex geometry with different levels of accuracy. The advantage offered by this technique is that the problem of generating a three-

dimensional grid is a quasi-automatic process. Besides this, simple computer programs may also be used to generate synthetic geometries to represent porous media. Figure 1 and 2 represent two kinds of porous media, where both CT and a simple computer program have been used to generate an SiC porous foam and a simple cubic unit cell representing a packed bed of spheres, respectively.

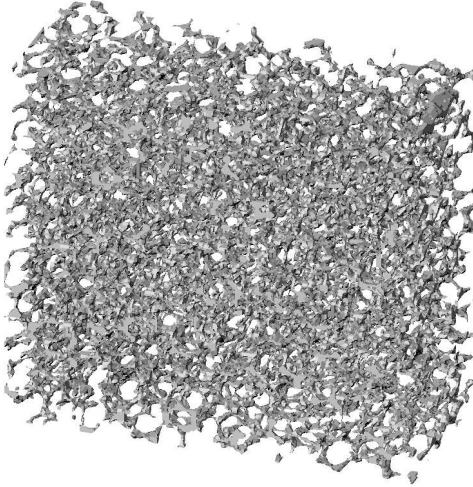


Fig. 1: SiC porous foam scanned by CT.

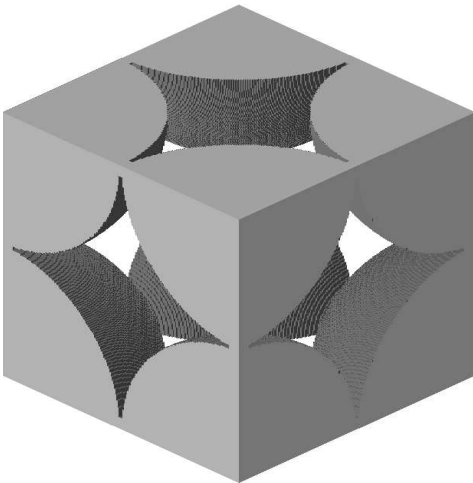


Fig. 2: Unit cell of a simple cubic packing of spheres.

Pressure Drop

The concept of tortuosity helps much in matching the theory with the experimental findings, however, it can not represent a physical answer to the discrepancy found between theory and experiments (see Boukhezar [12]).

In the second explanation, the additional momentum loss is explained by the neglect of some dissipation terms (i.e. mainly the elongation/contraction strain forces) in the theoretical derivations. Obviously, the whole dissipation term Φ (see Eq. 8) is evaluated in the computations. In order to be able to discern the effect or contribution of the elongation/contraction strain on the pressure drop, the dissipation term is cut into two distinct parts. The first term expresses the dissipation caused by elongation/contraction strain (Φ_e) and the second one represents that part of the dissipation, which is due to shear forces (Φ_s).

$$\begin{aligned}\Phi &= -\tau_{ij} \frac{\partial U_j}{\partial x_i} = \mu \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial U_j}{\partial x_i} = \\ &= \Phi_e + \Phi_s,\end{aligned}\quad (8)$$

For steady, incompressible, laminar flows, theoretical derivations lead to the equivalence between the non-dimensional pressure loss f and the energy E_v^* dissipated through the considered medium (see Durst *et al.* [7] or Brenner [11]).

For comparison purpose, the integral form of the dissipation rate is defined in the present work (in the same way as for the friction factor f) as follows

$$\begin{aligned}E_v^* &= \frac{\Delta E_v'}{\dot{Q}L} = \frac{\epsilon^3/(\rho U_0^2)}{U_0 AL(1-\epsilon)/\epsilon d_P} \int_V \Phi dV \\ &= E_v^*(\Phi_e) + E_v^*(\Phi_s).\end{aligned}\quad (9)$$

Where $\dot{Q}$ denotes the volumetric flow rate through a cross section A of the (porous) medium, and $E_v^*(\Phi_e)$ and $E_v^*(\Phi_s)$ represent the elongational and shear contributions of the total dissipation.

Results

A selection of the obtained results is presented and discussed in the following. Figure 3 represents the iso-surfaces of the velocity magnitude in the packed bed at $Re_P = 5$. The results related with the foam structure are illustrated in Figure 4 in form of streamlines.

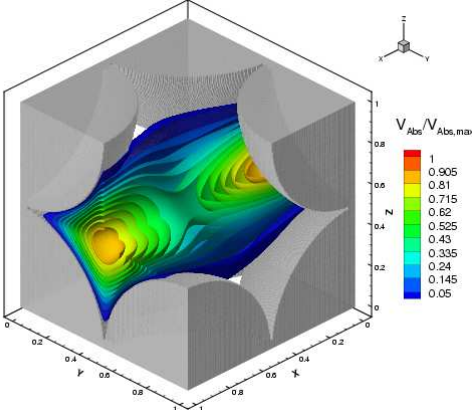


Fig. 3: Simulated velocity isosurfaces.

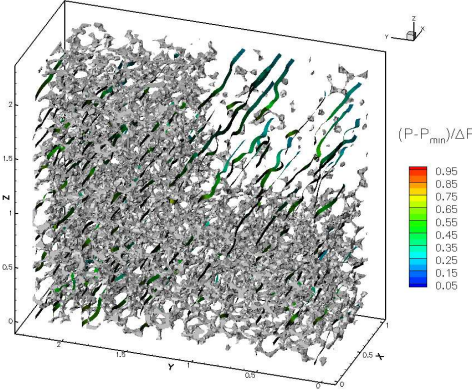


Fig. 4: Streamlines through the porous foam.

The comparison between the obtained friction factor with the Ergun equation (i.e. its modified form) is shown in Figure 5 for the simple cubic packing and two different porous SiC structures. Indeed, the friction coefficient Λ approaches the experimental value of $\Lambda = 180$ and the evolution of the pressure loss reproduces the real trend found in the experiments.

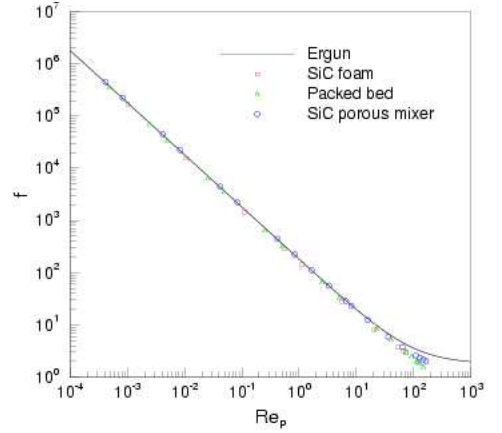


Fig. 5: Dimensionless pressure drop as function of the Re number for different porous media.

Additionally, all computations carried out so far confirm the afore mentioned theoretical balance between the pressure loss and the dissipated energy, irrespective of the employed structure of the porous medium. Figure 6 illustrates the evolution of the non-dimensionalized energy dissipation vs the friction factor, for the selected 3D porous media. A slope of value 1 is found for all these configurations.

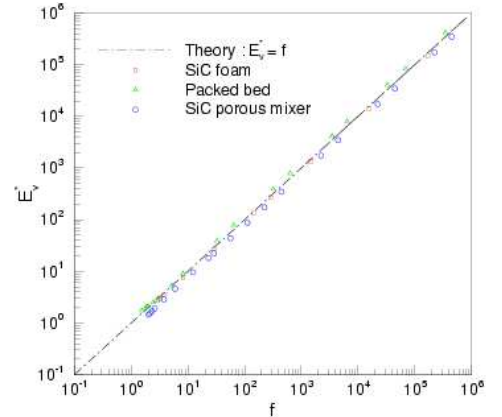


Fig. 6: Comparison of the energy dissipation with the friction factor.

A closer look at the contributing parts of the dissipation function is illustrated in Figure 7. Here, the shear forces seem to prevail over the elongation/contraction

strain in affecting the extent of the pressure drop (52% for the foam structure, 73% for the packed bed and 61% for the porous mixer). Based on the obtained numerical estimates, the neglect of the elongational strain results effectively into an under-prediction of the pressure drop. However, as long as incompressible, Newtonian flows are concerned, the elongational contribution to the pressure drop seems to be, in the best case, as high as that due to the shear forces.

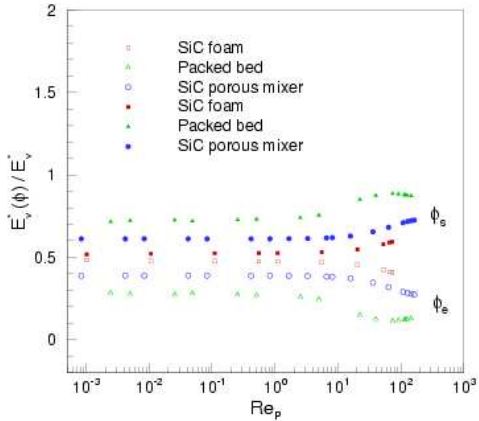


Fig. 7: Contributions to the total dissipation.

Conclusion

Pressure drop predictions in real 3D porous media have been carried out via the finite volume method. A very good agreement between numerical estimates of the pressure loss and experimental data was achieved. Furthermore, the equivalence between pressure drop and dissipated energy is confirmed, irrespective of the employed structure of the porous medium. Hence, neglecting the elongational term in the theoretical derivations results into an under-prediction of the pressure drop. However, the numerical investigations with respect to the contribution of the elongational and shear caused energy dissipation, shows the shear forces to play generally a more important role in the pressure loss through porous media.

Acknowledgements

This work was supported through a DAAD scholarship to N. Boukhezar.

Literature

- [1] H. Darcy, *Les Fontaines Publiques de la ville de Dijon*, Dalmont, Paris, 1856.
- [2] H.C. Brinkmann, *On the permeability of media consisting of closely packed porous particles*, Appl. sci. Res., Vol. A1, 81–86, 1947.
- [3] H.C. Brinkmann, *A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles*, Appl. sci. Res., Vol. A1, 27–34, 1947.
- [4] S. Ergun, *Fluid flow through packed beds*, Chem. Eng. Progr., 48, 89–94, 1952.
- [5] I.F. McDonald, M.S. El-Sayed and F.A.L. Dullien, *Flow through porous media - The Ergun Equation Revisited*, Ind. Eng. Chem. Fundamentals, Vol. 18, pp. 199–208, 1979.
- [6] R. Haas, F. Durst, *Viscoelastic Flow of Dilute Polymer Solutions in Regularly Packed Beds*, Rheologica Acta, 21:566–571, 1982.
- [7] F. Durst, R. Maas, W. Interthal, *The Nature of Flows in Porous Media*, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 22, 169, 1987.
- [8] J. Rubinstein, S. Torquato, *Flow in random porous media: mathematical formulation, variational principles, and rigorous bounds*, J. Fluid Mech., Vol. 206, 25–46, 1989.
- [9] M. Kaviani, *Principles of Heat Transfer in Porous Media*, 2nd ed., Springer-Verlag, New York, 1995.
- [10] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- [11] G. Brenner, *Numerische Simulation komplexer Fluider Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik*, Habilitationsschrift, Uni-Erlangen, 2002.
- [12] N. Boukhezar, *Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat Transfer in Porous Inert Media for Applications in Combustion technology*, PhD. thesis, Uni-Erlangen, 2004.

Personelles . . .

- Das **Quartl** gratuliert Herrn **Dr. Manfred Kaltenbacher** (Lehrstuhl für Sensorik, FAU; KONWIHR-Projekt FlowNoise) herzlich zum Abschluss seiner Habilitation im Fachgebiet Sensorik.
- Herr **Peter Lammers** (KONWIHR-Projekt BESTWIHR) ist Anfang Februar vom LSTM-Erlangen ans Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) gewechselt und wird dort hoffentlich die bayerischen “Kunden” bevorzugt behandeln.
- Ebenfalls zum 1. Februar ist **Dr. Fank Brechtefeld** von der HPC-Gruppe am RRZE (KONWIHR-Projekt cxHPC) an den Lehrstuhl Experimentalphysik/Optik der FAU gewechselt.
- Herr **Thomas Zeiser** (KONWIHR Geschäftsstelle Nord) wechselt zum 1. April vom LSTM-Erlangen in die HPC-Gruppe am RRZE und wird im Rahmen des *Center of Excellence for High Performance Computing (cxHPC)* sicherlich mit vielen KONWIHRLern weiterhin in engem Kontakt beleiben.
- Herr **Frank Deserno** wechselt dafür von der HPC-Gruppe am RRZE an den Lehrstuhl für Systemsimulation (Informatik 10) von Prof. Rüde, um auch dort im Bereich der Lattice Boltzmann Methoden und deren Optimierung für Höchstleistungsrechner weiterzuarbeiten.
- Seit 1. Februar 2004 arbeitet Herr **Mathias Vogt** als neuer Doktorand in der Forschungsgruppe “Numerische Methoden der Aerodynamik und Turbulenzsimulation” (PD Dr. M. Breuer) am LSTM-Erlangen. Sein Tätigkeitsfeld umfasst die Visualisierung und vor allem die Analyse von Daten aus direkten numerischen Simulationen turbulenter Strömungen. Gesponsort werden

diese Aktivitäten durch den Sonderforschungsbereich 603.

- Seit dem 1. März 2004 ist in der gleichen Gruppe Herr **Dr. Boris Kniazev** tätig. Er hat vor kurzem seine Promotion an der TU Hamburg-Harburg abgeschlossen und wird nun in einem DFG-Projekt an der Wandmodellierung für turbulente Strömungen mitarbeiten. Diese Arbeiten finden im Rahmen der “Interdisziplinären Turbulenz-Initiative” statt, einem Zusammenschluss aus Ingenieuren und Physikern, die sich beide für das Thema “Turbulenz” interessieren.
- Herr **Dr. Vivek Buwa** hat ebenfalls am 1. März 2004 eine Post-Doc Stelle am LSTM-Erlangen angetreten. Er erhielt ein Stipendium der Bayerischen Forschungsförderung, um im Bereich der numerischen Strömungsmechanik zu arbeiten. Er wird numerische Untersuchungen zur Verdampfung von Flüssigkeiten durchführen.
- Herr **Dr. Sambasivam Rajmani** wurde von der Firma TATA Steel an den LSTM-Erlangen gesandt, um hier Arbeiten zur strahlgetriebenen Strömung in Stahlschmelzöfen durchzuführen. Am LSTM-Erlangen wurde eine Forschungsgruppe zum Bereich Schmelz- und Erstarrungsprozesse eingerichtet, in der Herr Dr. Sambasivam Rajmani seit 1. März 2004 mitarbeitet.
- Herr **Prof. Dr. Kazuo Murase** vom Numerical Transport Phenomena Lab der Chuo University, Japan, wird ab 1. April 2004 *LDA Turbulence Measurements in a Swirling Pipe Flow* am LSTM-Erlangen durchführen.

Von anderen Lehrstühlen gäbe es sicherlich auch vieles zu berichten. Aber leider sind keine weiteren Informationen bis zum Quartl durchgedrungen.

Das Quartl sucht . . .

... eine(n) *engagierte(n) Nachfolger(in)* für die **Quartl-Redaktion**, da ich die KONWIHR-Geschäftsstelle Nord Ende März verlasse (vgl. "Personelles").

Sobald die Mittel für die Geschäftsstelle und damit auch die **Quartl-Redaktion** gesichert sind, wird sich diese Frage sicherlich schnell klären.

Es wäre doch wirklich schade, wenn das **Quartl** jetzt im 10. Jahr, kurz vor der 40. Ausgabe nicht mehr weitergeführt werden könnte.

Das **Quartl** hat zum 1. Jan. 1994, noch zu Zeiten von FORTWIHR, erstmals das Licht der Welt erblickt und, wie mir dieser Tage erst *ein Mann der ersten Stunde* erzählt hat, trotz anfänglicher Spötteleien – nicht zuletzt Dank ministerpräsidentlicher Lektüre – überlebt und sich dann schnell etabliert. Den Übergang zu FORTWIHR II und FORTWIHR (III) (Transfer-Projekte) hat es problemlos überstanden und KONWIHR war sicherlich froh, dass es das **Quartl** fortführen konnte. Welcher Forschungsverbund oder welches Netzwerk kann schon auf solch lange Tradition zurückblicken! Im technisch-wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen wurde die Notwendigkeit für und die Bedeutung von Information eben schon sehr früh erkannt, und das **Quartl** ist über die Jahre hinweg erfolgreich geblieben.

Ich hoffe, dass das **Quartl** auch in Zukunft erfolgreich weitergeführt wird. KONWIHR-II (oder wie auch immer es dann heissen mag) und das (bayerische) Hochleistungsrechnen im Allgemeinen werden sicherlich auch in Zukunft noch genügend Gesprächsstoff bieten.

Mir bleibt an dieser Stelle nur, allen Dank zu sagen, die mich im letzten Jahr mit Informationen und Artikeln versorgt haben, insbesondere Herrn Prof. Bungartz, der stets das Editorial beige-steuert hat.

Ihr *Thomas Zeiser*
alias **Quartl-TZ**

Bitte notieren:

Die letzte planmäßige KONWIHR-Antragrunde wurde im September 2003 eingeläutet. Kümmern Sie sich daher ggf. um geeignete Anschlußfinanzierungen außerhalb von KONWIHR!

Für den 14./15. Oktober 2004 ist ein großes **KONWIHR Abschluss-Seminar** in München/Garching geplant. Details (auch zu den Proceedings-Beiträgen) werden rechtzeitig bekannt gegeben.

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

Redaktion:

Dipl.-Ing. Th. Zeiser

Lehrstuhl für Strömungsmechanik

Cauerstraße 4, D-91058 Erlangen

Tel./Fax: ++49-9131-85 28280 / 29503

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

ab 1. April: Tel.: ++49-9131-85 28737

thomas.zeiser@rrze.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:

<http://www.konwihr.uni-erlangen.de/>

<http://konwihr.in.tum.de/>

Redaktionsschluss

für die nächste Ausgabe: **11.06.2004**

Nächste Ausgabe des **Quartls**:

Juli 2004

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