

Editorial



Nachdem das letzte Editorial bereits im November 2004 verfasst worden war, jedoch aufgrund der Atem raubenden politischen Verwerfungen seither (ein Alpha-Kanzler geht, eine Hochschullandschaft clustert sich zu und liegt fortan im kollektiven Exzellenz-Fieber darnieder, unser Quartl-Urahn und FORTWIHR-Gründungssprecher Christoph Zenger wird 65 Jahre alt und sagt beim Abschied leise „Servus“) erst dieser Tage in Druck gehen konnte, erscheint manches dort als ziemlich veraltet: Wer redet nach dem Spektakel vom 18. September noch von der Bush-Wahl? Und die guten Wünsche für 2005 helfen jetzt auch nicht mehr so wahnsinnig. Aber egal, freuen wir uns über das vierzigste Quartl und blicken wir nach vorn: Quartl is coming home! Nach erfolgreichen Lehr- und Wanderjahren, die unseren kleinen Pinguin zuletzt bis ins fränkische Erlangen führten, wird sich ab der nächsten Ausgabe wieder das „alte“ Redaktionsteam – bestehend aus Christa Halfar, Stefan Zimmer, Jack Daniel und meiner Wenigkeit – um das Quartl kümmern; hoffentlich wiederum zu Ihrer Zufriedenheit.

Man muss weder Altphilologe sein, noch bedarf es einer humanistischen Schulbildung, um so grob Klarheit über die Etymologie des Wortes „Exzellenz“ zu haben. Schon eher lohnt es sich dagegen, über den Gebrauch dieses in jüngster Zeit geradezu zu Kultstatus gelangten Begriffs in der deutschen Sprache zu streiten. Seit sich zunächst die deutsche Wissenschaft (u.a. in einem Grundsatzbeitrag des DFG-Präsidenten vor einigen Jahren) und dann, fast noch inbrünstiger, die Wissenschaftspolitik des Bundes der Exzellenz in der Wissenschaft verschrieben haben, gibt es offensichtlich kein Halten mehr: akademische Exzellenz wird allerorts aufgespürt (ja, es soll sogar schon universitäre Exzellenz an Orten zum Vorschein gekommen sein, an denen es gar keine Hochschulen gibt); . Exzellenz clustert sich und leitet so einen geradezu mystischen Prozess synergetischer Selbstvermehrung ein; Exzellenz gilt auch in höchsten Kriesen als so Heil bringend, dass die versammelten Obrigkeiten glatt 1.9 Milliarden Euro dafür locker machen.

Wer naiverweise hier das nur auf den flüchtigen ersten Blick nahe liegende Bestreben vermutet, uns Akademiker alle exzellenter zu machen, der irrt gewaltig, handelt es sich doch in Wahrheit nur um einen gigantischen konservativ-monarchistischen Feldzug zur Restitution glorreicher wilhelminischer Zeiten!

Du liebe Zeit, wieso denn das, fragt man sich? Schlagen wir doch mal im Brockhaus (20. Auflage ab 1996, die letzte aus dem vorigen Jahrtausend) unter „Exzellenz“ nach. Da steht: *„(lat. Erhabenheit), Ehrentitel, nicht scharf geschieden von Eminenz. E., schon in der römisch-byzantin. Kaiserzeit als ehrendes Prädikat höheren Beamten (sic!) beigelegt, wurde im MA. zunächst für langobard., später für fränk. Könige, dt. Kaiser sowie für Päpste und Bischöfe verwendet, ging dann auch auf Herzöge und Reichsgrafen über. Ab der Mitte des 17. Jh. wurde der Titel E., zunächst in Frankreich, mit höchsten Zivil- und Militärämtern verbunden, während er gleichzeitig als fürstl. Prädikat verschwand. In Deutschland gebührte der Titel bis 1918 dem Reichskanzler und den Staatssekretären des Reiches, in Preußen den Ministern und Oberpräsidenten während der Amtsdauer, außerdem den Offizieren vom Generalleutnant an aufwärts. In der heutigen Diplomatie steht die Anrede E. den Botschaftern zu und ist auch für Gesandte üblich. Die kath. Kirche führte 1930 den Titel „Hochwürdigste E.“ für alle Bischöfe und einige andere Prälaten ein; er wird jedoch seit dem 2. Vatikan. Konzil nicht mehr generell verwendet.“* Oder lieber der Duden gefällig, das „Deutsche Universalwörterbuch“? Unter dem Stichwort „Exzellenz“ wird man fündig. Nach dem Hinweis auf die Herkunft von Erhabenheit und Herrlichkeit ist dort jedoch nur die Rede von (i) einer Anrede im diplomatischen Verkehr und (ii) einem (früher gebrauchten) Titel

für Generäle und höchste Beamte. Dritter Versuch: Auch bei den Gebrüder Grimm gibt's keinen Hinweis auf Spitzenforschung – „Exzellenz sind nicht zu hause“ steht dort als besonders schönes Verwendungsbeispiel. Hoffentlich muss sich das keine unserer Unis in Zukunft an die Eingangstür kleben.

Gemeinsame Exzellenz-Initiative des Bundes und der Länder – fällt es auch Ihnen nun wie Schuppen von den Augen? 1.9 Milliarden nur dafür, dass höhere Beamte einen ihnen offensichtlich rechtmäßig zustehenden Titel wieder offiziell zuerkannt bekommen? Der Beamtenbund wird jubeln – endlich mal kein erneutes Sonderopfer, das abverlangt wird; und der Däke wird toben, wie immer. Vielleicht wäre es eine gute Idee, bei der nächsten Begegnung mit einem Ministerialrat, Dekan oder Studentenpfarrer schon vorsorglich ein huldvoll-unterwürfiges „Euer Exzellenz“ zu hauchen. Oder ist das jetzt doch zu schwarzseherisch? Aber was bleibt dann als Erklärung? PISA! Ja klar, wenn jemand von „dort werden Sie geholfen“ redet, wenn ein führendes Kreditkartenunternehmen mit „Deutschlands meister Kreditkarte“ wirbt, warum sollen dann nicht unsere Frontmänner und Frontfrauen der Wissenschaftspolitik uns etwas von Exzellenz an den Universitäten erzählen? Aber auch diese Erklärung macht nicht so richtig glücklich.

Da geht es mir ähnlich wie dem Sprecher des Seeheimer Kreises in der SPD. Nach dem Müntefering-Abschuss forderte er den geschlossenen Rücktritt des SPD-Vorstands so: „Entweder einige der Vorstände sind grenzenlos naiv, oder sie sind unglaublich intrigant – beides disqualifiziert eigentlich für ein Führungsamt.“ Wir wollen aber nicht kleinlich sein – freuen wir uns über die

Exzellenzinitiative, in dem Bewusstsein, dass auch wir bestimmt durch die Exzellenz geholfen werden! Nun viel Spaß bei der neuen Ausgabe des Quartls! Allen Lesern eine ruhige Weihnachtszeit und

einen guten Start ins Neue Jahr 2006, in dem ja neben dem Quartl auch der Fußball sein Homecoming feiern wird!

Hans-Joachim Bungartz

Register Now! **Kurzlehrgang NUMET 2006**

Nach seinem großen Erfolg in den vergangenen 11 Jahren findet der Kurzlehrgang **NUMET** (Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen) auch in 2006 am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg unter Mitwirkung von KONWIHR-Mitarbeitern statt. Die Vortragenden (darunter international anerkannte Experten in der Numerischen Strömungsmechanik wie Prof. Perić und Dr. Menter, Leiter der Entwicklungsabteilungen führender CFD-Software-Anbieter, Prof. Bungartz, Prof. Durst und Prof. Schäfer, Leiter große Lehrstühle mit Fokus auf technische Strömungsmechanik) bringen Erfahrung sowohl in der Grundlagenforschung und Entwicklung von Berechnungsverfahren als auch in der Anwendung von Software für die industrielle Praxis ein. In 21 einstündigen Vorlesungen und zusätzlichen Computerdemonstrationen werden die Grundlagen der Finite-Volumen-, Finite-Differenzen-, Finite-

Elemente- und Lattice-Boltzmann-Berechnungsverfahren und die verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten zur Lösung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen vermittelt. Die gebräuchlichen Approximations- und Diskretisierungsmethoden, der Einbau von Randbedingungen und die Modellierung typischer Phänomene wie Turbulenz oder Wärme- und Stoffübertragung werden im Detail beschrieben. Vorlesungen über gekoppelte Probleme (Fluid-Struktur-Wechselwirkung, Aeroakustik und zwei ganz neue Beiträge zu Mehrphasenströmungen) werden angeboten. Techniken zur Effizienzerhöhung von aufwendigen Strömungsberechnungen (Mehrgittertechnik, Diskretisierung mittels dünner Gitter, aber auch Portierung von Strömungsprogrammen auf Hochleistungsrechner) werden vorgestellt. Das technische Hochleistungsrechnen schafft die Voraussetzung für in der industriellen Praxis akzeptablen Rechenzeiten bei komplexen Strömungssimulationen. Es wird an der Universität Erlangen-Nürnberg vielseitig verfolgt, um Anwendern geeignete Hilfsmittel zur Verfügung zu stellen.

Termin: 13–16. März 2006

Anmeldung: ab sofort, Preisnachlaß bis 15. Januar

Leitung: Priv.-Doz. Dr.-Ing. M. Breuer

Email: numet2006@lstm.uni-erlangen.de

URL: <http://www.lstm.uni-erlangen.de/numet2006/>

Der Kurzlehrgang wendet sich an all diejenigen, die Rechenprogramme für Strömungssimulationen entwickeln oder aber kommerzielle Softwarepakete an-

wenden. Er bietet die Gelegenheit, alle wesentlichen Bestandteile eines kompletten Berechnungsverfahrens und dessen Funktionsweise kennenzulernen, was

für die Anwendung und für die kritische Interpretation der Rechenergebnisse unverzichtbar ist. Besonders nützlich und ist die Möglichkeit, durch Diskussio-

nen mit den Vortragenden die neuesten Entwicklungen auf dem Gebiet der numerischen Strömungsmechanik aus erster Hand zu erfahren.

Neue Rechner am LRZ

M. Brehm, R. Bader,
LRZ-München

Mit der Installation des Bayerischen Landeshochleistungsrechners II, der Fujitsu VPP700 im Mai 1997, war die am LRZ angebotene Rechenleistung damals in eine neue Dimension vorgestoßen. Das System war ursprünglich mit 34 Prozessoren mit je 2 Giga Byte (GB) Hauptspeicher geliefert worden, wurde aber bereits Anfang 1998 auf 52 Prozessoren ausgebaut. Die Spitzenrechenleistung betrug 114 GigaFlop/s. Herausragendes Merkmal der VPP war die für Vektorrechner typische hohe Bandbreite zum Memory, die sehr hohe Stabilität der Hard- und Software, ausgereifte Compiler und sehr performante Verbindungen zwischen den Prozessoren. Auch im siebten Betriebsjahr lief die VPP in bestens ein-

gefahrenem Betrieb und die Maschine wurde trotz ihres Alters weiterhin sehr gut genutzt. Tabelle 1 zeigt die erzielte Rechenleistung(MFlop/s), die mittlere Anzahl der durch Rechenprogramme genutzten Prozessoren, die erreichte Rate der Vektorisierung und die maximale Memoryausnutzung über dem Nutzungszeitraum.

Eine vom LRZ durchgeführte Bedarfsumfrage dokumentierte für die Nachfolgemaschine der VPP eine benötigte Rechenleistung von mindestens 2 TFlop/s. Das aus dieser Umfrage resultierende Anforderungsprofil hinsichtlich shared/distributed Memory und Größe eines SMP-Knotens war allerdings sehr unterschiedlich. Während die Mehrzahl der Nutzer große Shared-Memory-Knoten zur Abarbeitung ihrer Programme forderten, wünschten sich die übrigen Anwender ein MPP-System.

Year	GFlop/s	Nodes	VecRatio	Memory (max, MByte)
1997	10.7	33.6	59.5	41296
1998	21.6	49.5	66.5	71488
1999	22.7	50.5	65.1	70264
2000	23.4	49.4	64.1	69744
2001	24.8	50.8	63.1	73064
2002	22.3	50.8	68.4	71368
2003	24.5	51.3	59.9	68000
2004	18.5	48.3	57.7	77752
Mittel	22290	49.7	63.4	77752

Tabelle 1: Die auf der Fujitsu VPP700 erreichten Leistungsdaten

Die Anforderungen waren derart divergent, dass die Beschaffung eines einheitlichen Systems hinsichtlich Preis-Leistungsoptimierung unwirtschaftlich erschienen wäre. Daher wurde die VPP

durch zwei Linux-basierte Teilsysteme mit Itanium2-Prozessoren und unterschiedlicher Charakteristik ersetzt durch

- ein großes Shared-Memory-System vom Typ SGI Altix mit 128 Prozes-

- ein Cluster aus 68 Itanium2-Dualknoten, (136 Prozessoren) und rund 800 GB Hauptspeicher

Da die beiden neuen Komponenten unter Linux betrieben werden, wurden sie in das bestehende Linux-Cluster am LRZ integriert. Hieraus ergeben sich deutliche Vorteile für die Benutzer, denn alle unter Linux betriebenen IA64-Systeme erscheinen aus Benutzersicht als ein Rechner mit einheitlicher Betriebssystemumgebung und Anwender-

software. Einschließlich der bereits vorhandenen IA32 Pentium Knoten und einiger Knoten mit EM64T Technologie (AMD Opteron und Intel Nocona) umfasst das Cluster nun rund 530 Prozessoren, mit einer aggregierten Peakrechenleistung von 3.1 TFlop/s. Es hat also mittlerweile bzgl. der Peakrechenleistung den Höchstleistungsrechner in Bayern SR8000 überholt — zumindest solange, bis dessen Nachfolgemaschine im Neubau des Leibniz-Rechenzentrums in Garching installiert ist und in Betrieb geht.



Abbildung 1: die außer Betrieb genommene VPP700/52 (links) und die neue SGI Altix (rechts).

Am 21. Juli 2004 wurde der Antrag für den nächsten Höchstleistungsrechner am LRZ positiv begutachtet. Die europaweite Ausschreibung zur Beschaffung eines HLRB-Nachfolgesystems konnte daraufhin noch im Juli gestartet werden. Bis zum Ablauf der Frist für die Angebotsabgabe Ende September 2004 gingen am LRZ insgesamt 11 Angebote von 8 verschiedenen Herstellern ein. Die Angebotslage wurde dem HLRB-Lenkungsausschuss und dem HLRB-Beschaffungsgremium Mitte Oktober dargelegt. Anfang November 2004 wurden gemäß einem Votum des HLRB-Beschaffungsgremiums

mit den drei aufgrund der Angebotslage führenden Herstellern Vertragsverhandlungen aufgenommen, welche schließlich am 16. Dezember 2004 in der offiziellen Unterzeichnung eines Vertrages mit der Firma SGI über die Lieferung eines Altix 3700 Bx2-Nachfolgesystems als nächstem Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB-II) mündeten. Die Leistung des neuen Rechners ist imposant. In der ersten Ausbaustufe, die Anfang 2006 zur Verfügung stehen wird, kann er bis zu 33 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde (33 TFlop/s) durchführen, verglichen mit augenblicklich 2 TFlop/s der Hitachi SR8000. Im Endausbau (2007) werden es

sogar 70 TFlop/s sein. Die gegenwärtig 1,3 Tera Byte (TB) Hauptspeicher werden 2006 auf 25 TB, 2007 sogar auf 40 TB wachsen. Die gegenwärtig 10 TB Platten-speicher werden 2006 auf 340 und im Jahr 2007 auf 660 TB gesteigert werden.

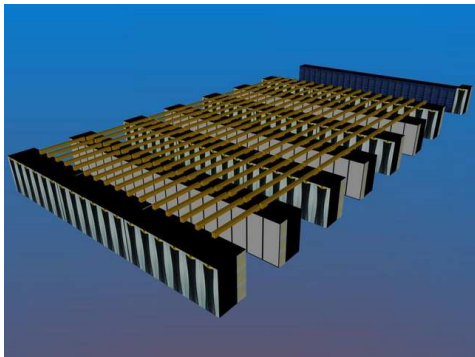


Abbildung 2: Skizze des zukünftigen HLRB-II
Entsieden hat sich das LRZ für das SGI-System, weil es unter den konkurrierenden Angeboten gemäß umfassender Benchmark-Tests die höchste Anwendungsleistung erwarten lässt. Aufgrund der Besonderheiten der SGI-Lösung — ein großer, einheitlich adressierbarer Arbeitsspeicher sowie variable Partitionierbarkeit in virtuelle Rechnerknoten unterschiedlichster Größe — ist eine sehr hohe Einsatzflexibilität des zukünftigen Höchstleistungsrechners für Distributed-Memory- (MPI) als auch Shared-Memory- (OpenMP) und hybride Anwendungen, welche sowohl MPI als auch OpenMP Programmierparadigmen verwenden, gegeben.

System		Cores	Peak Performance (TFlop/s)	Memory (TByte)	Disk (TByte)
HLRB II	sgi Tornado (March 2006)	5120	33	25	340
	sgi Tornado (mid 2007)	6656	70	40	660
HLRB I	Hitachi SR8000-F1 (2005)	1344 (+168 Service CPUs)	2	1.3	10
Linux - Cluster	IA32	188	0.9	0.3	1.5
	EM64T	12	0.1	0.03	
	2-way MPP 10GE/Parast.	134	~0.9	~0.8	12
	4-fach SMP Myrinet	68	0.4	0.1	
	IA64 SGI Altix 128-way SMP	128	0.8	0.5	11
	gesamt	330	2.1	1.4	23
	gesamt	~530	3.1	1.7	24.5
IBM p690 HPC		8	0.04	0.03 (SAN)	0.9

Tabelle 2: Leistungskennzahlen der Systeme am LRZ

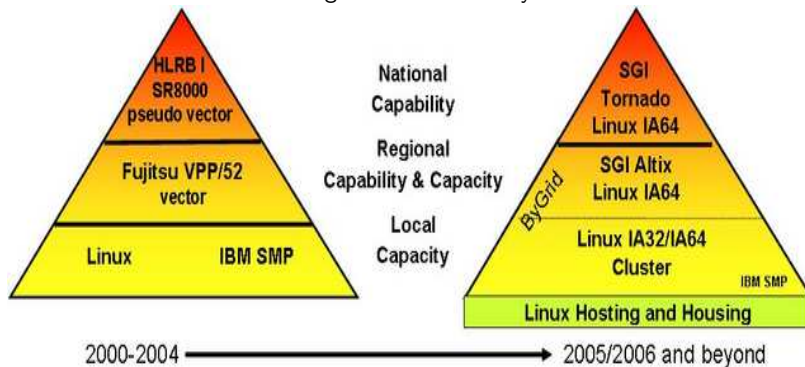


Abbildung 4: Entwicklung der Rechnerpyramide am LRZ

Der HLRB-II wird im neuen, vom LRZ im Campus in Garching bezogenem Rechenzentrumsgebäude installiert. Wenn das System komplett ausgebaut ist, wird es aus über 100 Racks bestehen, an die 100 Tonnen wiegen und eine Standfläche von etwa 250 m² einnehmen. Die Leistungsaufnahme für Betrieb und Lüftung wird knapp 1 MW betragen. Bereits Mitte 2005 hat SGI am LRZ ein Test- und Migrationssystem installiert, mit 64 Itanium2-Prozessoren, 256 GB Arbeitsspeicher und 6 TB Plattenkapazität. Mit Inbetriebnahme des HLRB-II steht dann am LRZ eine umfassende Leistungspyramide an Rechenleistung unter Linux mit Intel Prozessoren zur Verfügung. Für die Benutzer bedeutet dies, dass sie bei wachsenden Anforderungen nahtlos in eine höhere Leistungsklasse wechseln können und die dazu notwendigen Anpassungen

und Optimierungen minimal sind. Die Entwicklung der Leistungspyramide ist in Abb.3 dargestellt.

Zusammenfassend ergibt sich für das Hochleistungsrechnen in den nächsten Jahren eine beträchtliche Leistungssteigerung. Durch den Zuwachs an Hauptspeicher und Plattenplatz gehen viele Wünsche von Anwendern in Erfüllung. Ein Wermutstropfen bleibt allerdings im Rückblick: Systeme mit relativer Hauptspeicherbandbreite von 12 Byte/Flop, wie sie der CRAY Y-MP, oder 8 Byte/Flop, wie bei der Fujitsu VPP zu finden waren, stehen am LRZ nicht mehr zur Verfügung. Anwender müssen nun viel mehr Cache-optimieren. Die Schere zwischen Anwendungsleistung und Peak-performance klappt weiter auseinander.

brehm@lrz.de

bader@lrz.de

Canadian-German cooperation: Towards accurate prediction of aerosol drug delivery

M. Breuer, H.T. Baytekin
LSTM-Erlangen
E.A. Matida,
Carleton Univ., Ottawa, Canada

Aerosol drug delivery [1] into the lungs through the oral cavity has become an established method in the treatment of lung disease and has a great potential for other non-lung diseases. The drug is normally generated in form of solid or liquid particles from devices such as nebulizers or inhalers. Although the lung is the target, part of the dose is typically lost through deposition on the walls of the extrathoracic region (from the mouth opening to the end of the trachea). That leads to deviations from ideal delivery and unwanted side effects. To

study aerosol deposition, a variety of *in vitro* measurements in idealized mouth-throat models have been carried out, see e.g. [2]. Numerical simulations are very useful in gaining better physical understanding of the aerosol deposition in the mouth-throat region. Matida *et al.* [3] investigated the deposition of monodisperse particles in an idealized geometry based on the Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations for the continuous phase and a Lagrangian random-walk eddy-interaction model (EIM) for the particulate phase. Only with a special near-wall correction in the EIM reasonable deposition rates could be achieved.

Owing to that drawback and the well-known deficiency of RANS models for the prediction of complex flow features such as streamline curvature or secondary flows, in the present study the continuous phase is simulated based on large-

eddy simulation combined with a Lagrangian particle tracking algorithm for the disperse phase. As a first step towards the entire geometry a highly idealized throat region is considered where the geometry and flow parameters rely on the 90° bend experiment of Pui *et al.* [4]. Here the deposition efficiency of liquid monodisperse particles in tube bends with a circular cross-section were measured for different flow (Re) and particle Reynolds numbers (Re_p). The curvature ratio of the bend is 5.6 and hence the flow is in the large Dean number range ($De = 4225$). The particles adhere to the tube surface upon contact and particle bounce from the bend is not considered to be a problem.

The LES code *LESOCC* used for the solution of the filtered Navier-Stokes

equations, is a 3-D finite-volume solver for arbitrary non-orthogonal and non-staggered (block-structured) grids [5,6]. The spatial discretization of all fluxes is based on a central scheme of second-order accuracy. A low-storage multi-stage Runge-Kutta method (second-order accurate) is applied for time-marching. For modeling the non-resolvable subgrid scales, two different models are implemented, namely the well-known Smagorinsky model and the dynamic model. *LESOCC* is highly vectorized and additionally parallelized by domain decomposition with explicit message-passing based on MPI allowing efficient computations especially on vector-parallel machines.

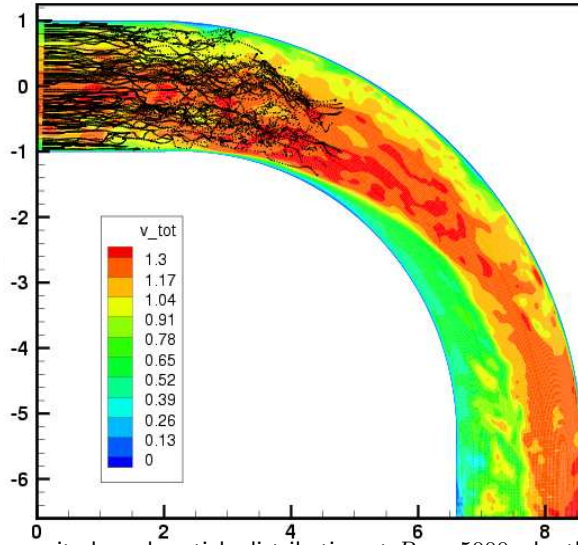


Figure 1: Velocity magnitude and particle distribution at $Re = 5000$, shortly after injection.

The volume fraction of the particles is assumed small ($\mathcal{O}[10^{-6}]$), so only a one-way coupling is considered. The dispersed phase is computed using Newton's law, accounting only for drag and gravity. Due to the high density ratio of the droplets ($\rho_P/\rho_F \gg 1$) all other contri-

butions (added-mass force, forces due to pressure gradient, viscous stresses, etc.) can be neglected. The ordinary differential equations of particle motion are integrated by a fourth-order Runge-Kutta scheme. Local flow velocities predicted by LES are interpolated tri-linearly. To ena-

ble efficient tracking of $O(10^7)$ particles on block-structured curvilinear grids, integration is done in the computational space rather than in the physical space. With a well defined coordinate transformation, this method has the advantage that no search of new particle positions is required. Physical space algorithms spend most of the CPU time on that.

The combined Euler-Lagrange method was extensively tested with turbulent particle-laden flows within plane channels and pipes. Dispersion and deposition of particles were investigated for a variety of different cases, at different Reynolds number, particle diameter, initial conditions [7]. As next step towards the accurate prediction of aerosol drug delivery, simulations for the 90° bend experiment of Pui *et al.* [4] at $Re = 5000$. were carried out, to study the deposition of monodisperse particles. To generate appropriate inflow boundary conditions, a separate LES in a straight pipe with the same cross-section and Re was carried out, and instantaneous flow data in a plane were used as inlet data for the bend. Over a short time, 250 000 randomly distributed particles were released over a cross-section near the inlet.

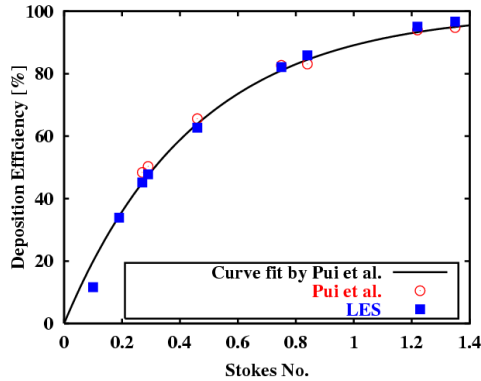


Figure 2: Deposition efficiency of particles in a

turbulent bend flow at $Re = 5000$.

Figure 1 shows an instantaneous flow field and paricle distribution in the midplane. The deposition efficiency was determined for different particle diameters (Stokes numbers $0.26 \leq St \leq 1.35$). Figure 2 compares these results to the measurements of [4]. A curve fit through the experimental data, $\eta = 1 - 10^{0.963 \cdot St}$, is also shown. A very good agreement is found between the measurements and the simulations. Hence these simulations represent a valuable step towards the prediction of the inhalation process in the entire mouth-throat region which is planned for the near future.

Literatur

- [1] **Finlay, W.H.:** *The Mechanism of Inhaled Pharmaceutical Aerosols: An Introduction*, , 2001. Academic Press, London
- [2] **Dehaan, W.H. & Finlay, W.H.:** In vitro monodisperse aerosol deposition in a mouth and throat with six different inhalation devices, *J. of Aerosol Medicine* **14**(3), pp.361–367, 2001.
- [3] **Matida, E.A., Finlay, W.H., Lange, C.F., Grgic, B.:** Improved numerical simulation of aerosol deposition in an idealized mouth-throat, *J. of Aerosol Science* **35**, pp.1–19, 2004.
- [4] **Pui, D.Y.H., Romay-Novas, F., Liu, B.Y.H.:** Experimental study of particle deposition in bends of circular cross-section, *Aerosol Science and Technology* **7**, pp.301–315, 1987.
- [5] **Breuer, M.:** Large eddy simulation of the sub-critical flow past a circular cylinder: Numerical and modeling aspects , *Int. J. for Numer. Methods in Fluids* **28**, pp.1281–1302, 1998.
- [6] **Breuer, M.:** A challenging test case for large eddy simulation: High Reynolds number circular cylinder flow, *Int. J. of Heat and Fluid Flow* **21**(5), pp.648–654, 2000.
- [7] **Baytekin, H.T.:** *Investigations of Particle Dispersion and Deposition for Turbulent Flows in Channels, Pipes and Bends based on LES Predictions*, , 2004. M.Sc. Thesis, Lehrstuhl f. Strömungsmechanik, Universität Erlangen-Nürnberg

breuer@lstm.uni-erlangen.de

Cache-optimale Implementierung der Finiten-Element-Methode

M. Mehl & T. Neckel
Inst. f. Informatik, TU-München

Bei der Implementierung moderner numerischer Löser für partielle Differentialgleichungen tritt immer häufiger das Problem auf, dass die Möglichkeiten der Hardware vor allem in Bezug auf den Datenzugriff und den Speicherbedarf nicht effizient genutzt werden. Gerade in Verbindung mit dem Einsatz von numerisch hoch effizienten Methoden wie Mehrgitterverfahren und dynamisch adaptiven Gittern kommt es im Laufe des Algorithmus beim Datenzugriff zu zum Teil großen Sprüngen im physikalischen Speicher der Rechner. Aufgrund dieser Nicht-Lokalität befinden sich die benötigten Daten daher oft nicht mehr in den oberen Niveaus der Speicherhierarchie, wie beispielsweise dem L1- oder L2-cache, sondern müssen neu aus dem Hauptspeicher geholt werden. Es tritt also ein sogenannter cache miss auf. Dadurch kommt es oft zu erheblichen Wartezeiten für die CPU, die ihre Kapazität so nicht voll nutzen kann. Um diesen negativen Effekt zu vermeiden und die Möglichkeiten der Speicherhierarchie moderner Prozessoren besser zu nützen, wurde in der Arbeitsgruppe ‘Peano’ Lehrstuhls 5 für Informatik der TU München an einer cache-optimalen Implementierung für Finite-Element-Verfahren gearbeitet. Im Wesentlichen werden dabei drei Bausteine verwendet: Space-Tree-Gitter unter Verwendung von raumfüllenden Kurven, darauf abgestimmte Datenstrukturen und eine zellweise Auswertung der jeweiligen diskreten Operatoren.

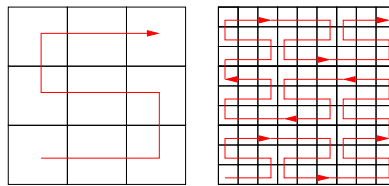


Abbildung 1: Diskrete Iterierte der 2-D Peano-Kurve: Erste und zweite Rekursionsstufe.

Space-tree-Gitter haben den Vorteil, trotz ihrer Strukturiertheit auch die benötigte Flexibilität hinsichtlich Adaptivität zuzulassen. Unter Verwendung von diskreten Iterierten raumfüllender Kurven wie der Peano-Kurve (siehe Abbildung 1) ist es möglich, die einzelnen Zellen des Gitterbaumes mittels einer top-down-depth-first-Strategie zu durchlaufen und so eine lineare Abarbeitungsordnung der Gitterzellen aller Verfeinerungsebenen zu definieren.

In der Arbeitsgruppe wurde gezeigt, dass es möglich ist, aufbauend auf dieser Reihenfolge der Gitterzellen spezielle Datenstrukturen nicht nur für zellzentrierte Daten sondern auch für hierarchische Knotendaten so zu konstruieren, dass sich eine streng lokale Abarbeitungsreihenfolge während einer Lösungsiteration ergibt. Die Datenpakete werden dabei auf einer dimensionsabhängigen — aber von der Gitterfeinheit unabhängigen — Anzahl von ‘Kellern’ angeordnet. Diese erlauben nur die zwei einfachen Operationen *push* (Paket oben auf Stapel legen) und *pop* (oberstes Paket vom Stapel holen) und stellen damit die größtmögliche räumliche Lokalität im Speicherzugriff sicher. Die zeitliche Lokalität, das heißt die zeitliche Nähe zwischen der ersten und der letzten Verwendung eines Datenpaketes wird durch die Lokalitätseigenschaft der Peano-Kurve garantiert. Der resultierende Algorithmus erlaubt bei Errei-

chen einer Zelle die Verwendung aller ihr zugeordneter Knotendaten, nicht jedoch der Daten benachbarter Zellen. Die Auswertung der diskreten Operatoren (z.B. Differenzensterne) erfolgt daher zellweise, das heißt bei einem Gebietsdurchlauf werden die Beiträge aller Zellen in den jeweiligen Eckknoten akkumuliert und somit der gesamte Operator ausgewertet.

processes	1	2	4	8	16
speedup	1.00	1.95	3.73	6.85	12.93

Tabelle 1: Speedup der parallelen Implementierung bei bis zu 16 Prozessen für die Poisson-Gleichung auf einer 3d-Kugelgeometrie mit 23 118 848 Freiheitsgraden.

Auf diese Weise ist es gelungen, für die Poisson-Gleichung in zwei [2], drei [8] und d [3] Dimensionen einen effizienten

additiven Mehrgitteralgorithmus zu entwickeln, der die Zahl der Cache-Misses minimiert. Die L2-Cache Hit-Rate beträgt bei den betrachteten Beispielen stets mehr als 99,9%, unabhängig von der Anzahl der Freiheitsgrade sowie der Dimension des Raumes. Die Zahl der gemessenen cache misses liegt nur um etwa 10% über dem theoretischen Minimum.

Vergleichbare Effizienz konnte für sämtliche Weiterentwicklungen des Grundprogramms, also für die parallele Version [4,6], für einen dynamisch adaptiven PDGL-Löser mit Diskretisierung höherer Ordnung [1,5], sowie ein Simulationsprogramm für die zweidimensionalen inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen [7,9] bestätigt werden.

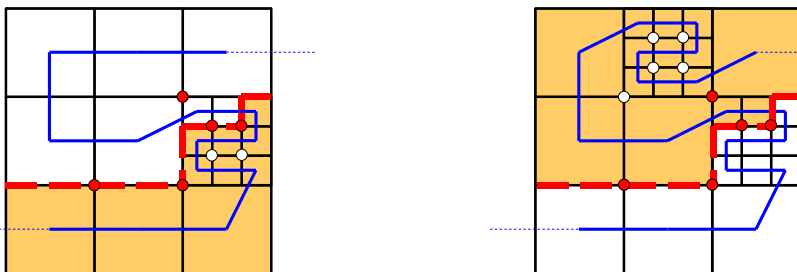


Abbildung 2: Aufteilung eines zweidimensionalen adaptiven Gitters auf zwei Prozessoren anhand der Peano-Kurve. Die roten Knoten der Gebietsränder werden in beiden Prozessoren verwendet.

Hinsichtlich des Speicherbedarfs besteht ein zweiter Vorteil unseres Konzeptes im minimalen Speicheraufwand für Verwaltungsinformationen. Pro Zelle muss lediglich ein Bit (Ist die Zelle Blatt des Zellbaums?) zur weiteren Verfeinerung sowie eines für die Geometrieinformation (Außenzelle?) gesetzt werden. Außerdem kann aufgrund der streng linearen Abarbeitung der Daten ein Teil der gesamten Datenmenge ohne Zeitverlust auf die Festplatte ausgelagert werden. Dreidimensionale Rechnungen sind so beispielsweise bis zu einer Zahl von ca. 10

Milliarden Freiheitsgraden durchführbar [8]. Dabei werden etwa 470 MB realer Hauptspeicher benötigt, um ca. 55 GB an Daten für Freiheitsgrade zu bewältigen. Die entwickelten Methoden tragen somit zur Aufhebung der Speicherbeschränkungen sowohl hinsichtlich der Speicherzugriffszeiten als auch in Bezug auf die benötigte Speichermenge bei.

Literatur

- [1] **Dieminger, N.:** *Kriterien für die Selbstadaptation cache-effizienter Mehrgitteralgorithmen*, 2005. Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik, TU München

- [2] **Günther, F.:** *Eine cache-optimale Implementierung der Finite-Element-Methode*, , 2004. Dissertation, Institut für Informatik, TUM
- [3] **Hartmann, J.:** *Entwicklung eines cache-optimalen Finite-Element-Verfahrens zur Lösung d-dimensionaler Probleme*, , 2004. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TUM
- [4] **Herder, W.:** *Lastverteilung und parallelisierte Erzeugung von Eingabedaten für ein paralleles Cache-optimales Finite-Element-Verfahren*, , 2005. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TUM
- [5] **Krahnke, A.:** *Adaptive Verfahren höherer Ordnung auf cache-optimale Datenstrukturen für dreidimensionale Probleme*, , 2005. Dissertation, Institut für Informatik, TUM
- [6] **Langlotz, M.:** *Parallelisierung eines cache-optimalen Finite-Element-Verfahrens*, , 2004. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TUM
- [7] **Neckel, T.:** *Einfache 2d-Fluid-Struktur-Wechselwirkungen mit einer cache-optimale Finite-Element-Methode*, , 2005. Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik, TUM
- [8] **Pögl, M.:** *Entwicklung eines cache-optimale 3d Finite-Element-Verfahrens für große Probleme*, , 2004. Dissertation, Institut für Informatik, TUM
- [9] **Weinzierl, T.:** *Eine cache-optimale Implementierung eines Navier-Stokes-Lösers unter besonderer Berücksichtigung physikalischer Erhaltungssätze*, , 2005. Diplomarbeit, Institut für Informatik, TUM

mehl@informatik.tu-muenchen.de

Anisotropy invariant Reynolds stress model (AIRSM) and its applications to separated flows

V. Kumar, J. Jovanovic, M. Breuer, W. Zuo, F. Durst
*Lehrst. f. Strömungsmechanik, FAU
 Erlangen-Nürnberg*

The anisotropy invariant Reynolds stress model (AIRSM) proposed by Jovanović [1] is modified, and improved for implementation in finite-volume CFD codes (the in-house FASTEST-3D and the commercial CFX-5) in conjunction with standard wall functions. The objective is prediction improvement in a variety of turbulent flows. The model was implemen-

ted [6] and found to perform very well for several flows [2], of which an asymmetric diffuser and a backward-facing step will be described here. For detailed results see [2]. AIRSM is convincing in comparison with existing RSM, e.g. the Speziale-Sarkar-Gatski (SSG) model.

The AIRSM accounts for the anisotropy of turbulent stresses, using invariant theory to formulate a turbulence closure [1] for unknown terms in the transport equations for the Reynolds stresses $\overline{u_i u_j}$ and the dissipation rate ε . The AIRSM for the Reynolds stress transport [1] is modified for inhomogeneous turbulent flows to become

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial t} + \overline{U_k} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} &\simeq \mathcal{P}_{ij} + (1 - \mathcal{J}) \mathcal{P}_{ss} a_{ij} + \mathcal{F} (\mathcal{P}_{ss} \delta_{ij} / 3 - \mathcal{P}_{ij}) \\
 &+ \left((C - 2\mathcal{A} \varepsilon_h) a_{ij} - \frac{2}{3} \varepsilon_h \delta_{ij} \right) + C_s \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} \right) + \frac{\nu}{2} \frac{\partial^2 \overline{u_i u_j}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (1) \\
 a_{ij} &= \frac{\overline{u_i u_j}}{2k} - \frac{1}{3} \delta_{ij}, \quad q^2 = 2k = \overline{u_i u_i}, \quad \varepsilon_h = 5\nu q^2 / \lambda^2 = 5q^4 / \nu R_\lambda^2, \\
 \mathcal{J} &= 1 - 9 \left(\frac{1}{2} \Pi_a - \text{III}_a \right), \quad \mathcal{F} \approx 1 - \frac{2}{5} \mathcal{J}, \quad \mathcal{A} \approx 1 + 0.5 (\mathcal{W} - 1) \mathcal{J}, \\
 \mathcal{C} &\approx C_J (\mathcal{W} - 1) \varepsilon_h \mathcal{J}, \quad C_L \mathcal{W} \approx \sqrt{1 + C_L^2} - 1, \quad C_L = \sqrt{\pi/2} (5/C_w R_\lambda).
 \end{aligned}$$

The C_s -term models [5] contributions by tripple correlations. The model functions $\mathcal{A}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{J}$, $\mathcal{F}$ depend only on invariants of $\overline{u_i u_j}$ and are interpolate between their values on the boundaries of the invariant map, using experimental and DNS data (in particular, $C_w = 0.18$, $C_s = 0.1$, $C_J = 4.78$) and analytical considerations; $\mathcal{J}$ and $\mathcal{F}$ depend only on the second and third invariant $\Pi_a = a_{ij}a_{ji}$ and $\text{III}_a = a_{ij}a_{jk}a_{ki}$ of the Reynolds stress anisotropy tensor a_{ij} .

The dissipation tensor is split into homogeneous (ε_{ij}^h) and inhomogeneous parts:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \overline{u_i u_j}}{\partial x_i \partial x_j} + \varepsilon_{ij}^h, \quad (2)$$

For axisymmetric turbulence, an exact

$$\frac{\partial \varepsilon_h}{\partial t} + \overline{U}_k \frac{\partial \varepsilon_h}{\partial x_k} \simeq -2\mathcal{A} \frac{\varepsilon_h \overline{u_i u_k}}{k} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_k} - \psi \frac{\varepsilon_h^2}{k} + C_\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k^2}{\varepsilon_h} \frac{\partial \varepsilon_h}{\partial x_k} \right) + \frac{\nu}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_h}{\partial x_k \partial x_k} \quad (4)$$

where $\psi \approx 2(1-\mathcal{J}) + (1.8-0.4\mathcal{W})\mathcal{J}$ and $C_\varepsilon = 0.09$ are taken.

Plane asymmetric diffuser

The turbulent flow in a planar diffuser a challenge, since it involves a wide range of spatial scales and adverse pressure gra-

relation between the anisotropy tensor (a_{ij}) of the Reynolds stresses and the anisotropy (e_{ij}) of the homogeneous dissipation tensor holds, $e_{ij} = \mathcal{A}(\Pi_a, \text{III}_a) a_{ij}$.

The velocity-pressure correlation is split into a “slow” and a “rapid” part; the latter is modeled in the AIRSM as

$$\Pi_{ij}^r = a_{ij} \mathcal{P} + (\mathcal{P} \delta_{ij} / 3 - \mathcal{P}_{ij}) \mathcal{F} \quad (3)$$

where $\mathcal{P}_{ij}$ and $\mathcal{P}$ denote the production tensors and its trace. The “slow” part is modeled by a linear “return to isotropy model” [4], $\Pi_{ij}^s = \mathcal{C} a_{ij}$.

Employing two-point correlation technique and a local homogeneity assumption, the dissipation rate is modeled [1] as

dients. Obi *et al.* [7] performed detailed experimental investigations of this flow using a single component laser Doppler anemometer. Fig. 1 presents a schematic view of the computational domain for this case.

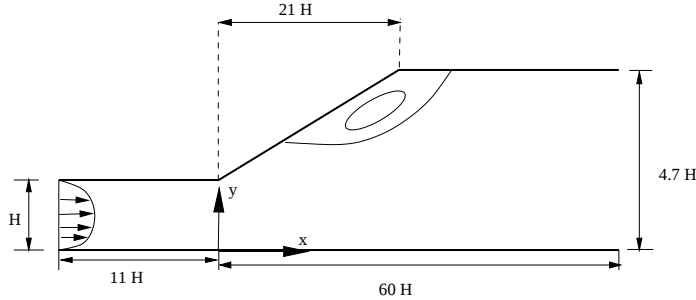


Fig.1: A schematic view of the plane 2D asymmetric diffuser

The Reynolds number $Re = U_0 H / \nu$ based on the inlet height and mean-flow velocity (U_0) was 2.12×10^4 . In order to obtain flow conditions at the inlet boundary of the diffuser (at $x/H = -11$), a fully developed channel flow computation is

performed. Fig.2(a) presents the predicted streamwise velocity profiles at different stations in the region of separation. Both AIRSM and SSG models accurately predict the mean streamwise velocity. Fig.2(b-d) shows the Reynolds stresses:

near the diffuser throat, turbulence changes rapidly, but both SSG and AIRSM models still capture both the normal and shear stresses. Far downstream the throat

($x/H > 15$) the predictions of turbulent stresses by AIRSM are marginally better than by SSG.

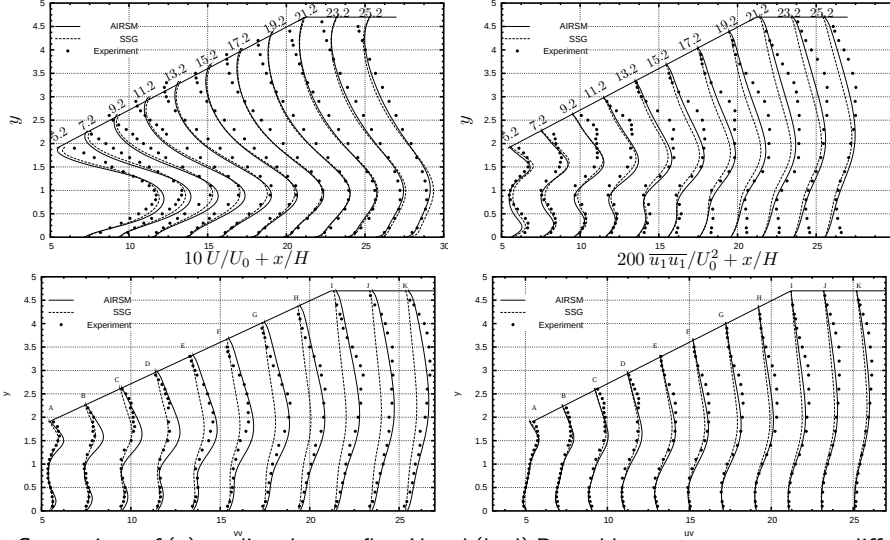


Fig.2: Comparison of (a) predicted mean flow U and (b-d) Reynolds stress components at different stations ($x/H = 5.2-25.2$) with measurements of Obi *et al.* [7] in an asymmetric 2D diffuser.

Backward-Facing step

Turbulent flow over a backward-facing step is a widely used benchmark problem to evaluate the performance of various

turbulence models for separated flows. The present test case of backward-facing step is based on the experiment of Driver and Seegmiller [8].

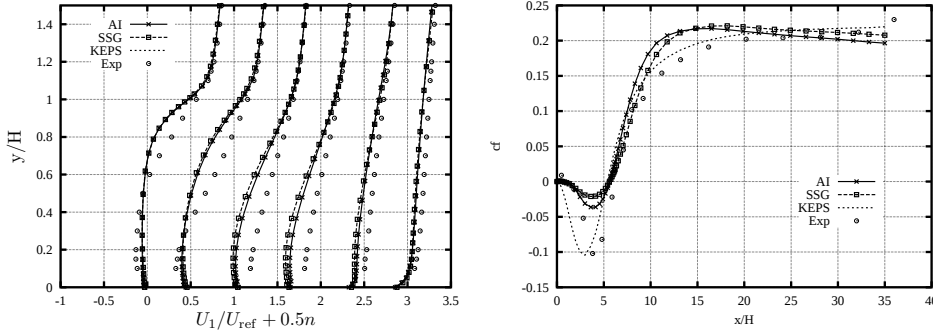


Fig.3: Velocity at $x/H = 2, 4, 6.5, 8, 14, 32$ (left), skin friction along step wall (right).

The $k-\varepsilon$, SSG and AIRSM models were compared. Detailed velocity profiles near the wall at various locations (x/H) behind the start ($x/H = 0$) of the step

are presented in Fig.3(a). Both SSG and AIRSM models are satisfactorily predicting the mean flow. It may be noticed that the AIRSM predictions are in bet-

ter agreement with experiments than the SSG ones. In Fig.3(b), the skin friction coefficient C_f is determined in order to characterize the flow separation and reattachment downflow the step. From the profile of the skin friction coefficient one can accurately estimate the reattachment length in a usual computation. However, a precise estimation of reattachment can not be expected, since the log-law for the

mean flow is applied as a wall function in the region of separation. Thus the computed values of C_f is not considered to be a good indicator for this purpose. It is interesting to note that the AIRSM model better predicts the peaks of C_f which itself is an indicator of the strength of the bubble. From these two plots one can infer that the overall performance of the AIRSM is as good as the SSG model.

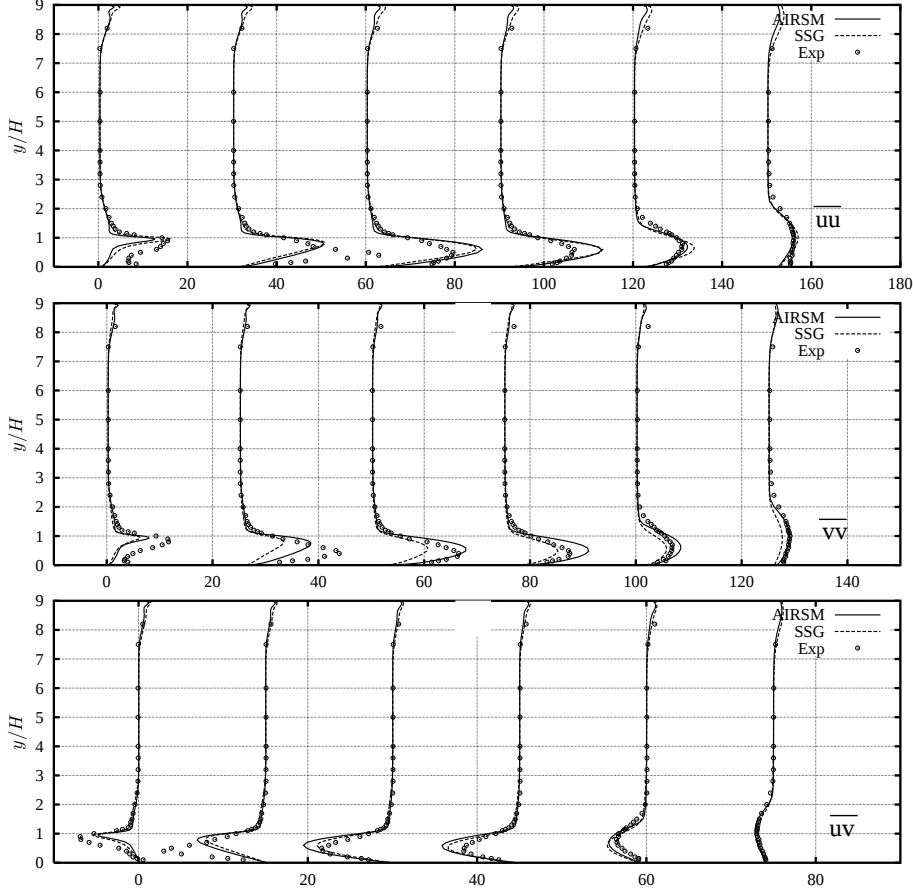


Fig.4: The stress components predicted by AIRSM and SSG model for a backward facing step, at the same x/H stations as in Fig.3.

In Fig.4 the streamwise, longitudinal and shear stresses are plotted in order to estimate the performance of AIRSM

against the standard SSG model. Impressive agreements with the experimental results and the predictions from both

the models can be observed. Despite the usage of simple wall functions for the Reynolds stresses and the restrictive or modified formulation of the AIRSM, reasonably well profiles of the Reynolds stresses can be observed.

Conclusion

The anisotropy invariant Reynolds stress model (AIRSM) implemented in finite volume codes was used to predict turbulent separated flows. The model predictions for the mean flow field as well as for the turbulent stresses are fairly good. Despite using only simple wall functions, the results for Reynolds stresses agree well with experimental data. As a next step, integration up to the wall will be performed to predict turbulence more accurately in the boundary layer region.

References

- [1] **Jovanović, J.:** *The Statistical Dynamics of Turbulence*, , 2003. Springer
- [2] **Kumar, V.:** *Modeling and numerical simulation of complex transport phenomena in crystal growth processes*, , 2005. Ph.D. thesis, LSTM, Universität Erlangen-Nürnberg
- [3] **Jovanović, J., Otic, I., Bradshaw, P.:** On the Axisymmetric Strained Turbulence in Dissipation Range, *ASME J. Fluids Eng.* **125**, pp.401–413, 2003.
- [4] **Rotta, J.C.:** Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz, *Z. Phys.* **129**, pp.547–572, 1951.
- [5] **Shir, C.C.:** A preliminary study of atmospheric turbulent flow in the idealized planetary boundary layer, *J. Atmos. Sci.* **30**, pp.1327–1339, 1973.
- [6] **Obi, S., Aoki, K., Masuda, S.:** *Anisotropy invariant Reynolds stress model and its application to fully developed channel flow*, In Proc. 76th Annual GAMM Meeting, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2005.
- [7] **Obi, S., Aoki, K., Masuda, S.:** *Experimental and computational study of turbulent separated flow in an asymmetric diffuser*, In Proc. 9th Symp. Turb. Shear Flows, Kyoto, 1993.
- [8] **Driver, D.M. & Seegmiller, H.L.:** Feature of a reattachment turbulent shear layer in a divergent channel flow, *AIAA J.* **23**, pp.163–171, 1985.

breuer@lstm.uni-erlangen.de

Bavarian Graduate School of Computational Engineering

J. Bungarz
Inst. f. Informatik, TU-München

“The most scientifically important and economically promising research frontiers in the 21st century will be conquered by those most skilled with advanced computing technologies and computational science applications.” So steht es schwarz auf weiß geschrieben im jüngsten PITAC-Report, dem Bericht des hochkarätig besetzten “President’s Information Technology Advisory Committee” an den Präsidenten der USA. Und genau diese Experten auf international höchstem Niveau auszubilden, hat sich das ENB-Programm BGCE, die Bavarian Gradua-

te School of Computational Engineering auf seine Fahnen geschrieben.

Aber worum geht es eigentlich genau bei diesem Computational Engineering, oder Computational Science, wie es das PITAC-Zitat nennt? Der Oberbegriff Computational Science and Engineering umfasst im weitesten Sinn alle Forschungsrichtungen, in denen der Computer als zentrales Werkzeug eingesetzt wird – vom PC als Arbeitsplatzrechner bis zum Supercomputer à la Blue Gene, Earth Simulator & Co. Im engeren Sinn bezeichnet er vor allem die mathematische Modellierung und numerische Simulation von Phänomenen und Prozessen aus den Natur- oder Ingenieurwissenschaften. Was früher nur durch theoretische Überlegungen oder aufwändige Ex-

perimente zugänglich war, wird heute immer mehr am Rechner virtuell durchgespielt. Hierbei sind natürlich Allrounder gefragt - versehen mit tiefen Kenntnissen in angewandter, insbesondere numerischer Mathematik, versiert in zentralen Teilgebieten der Informatik, und ausgestattet mit hinreichend Expertise in der jeweiligen Anwendungsdomäne. Kaum eine Disziplin kann sich dabei der Faszination der simulierten Welten ent-

ziehen: vom allabendlichen Wetterbericht bis zur Erstellung und Analyse von Klimamodellen, von der Aerodynamik von Fahrzeugen bis zur Optimierung von Verbrennungsprozessen in deren Motoren, von der Entwicklung neuer Nanomaterialien bis zur Simulation von Galaxien im Universum, und ebenso von der Stabilität mikromechanischer Bauteile bis zur Statik von Bauwerken – nichts geht mehr ohne Simulation!

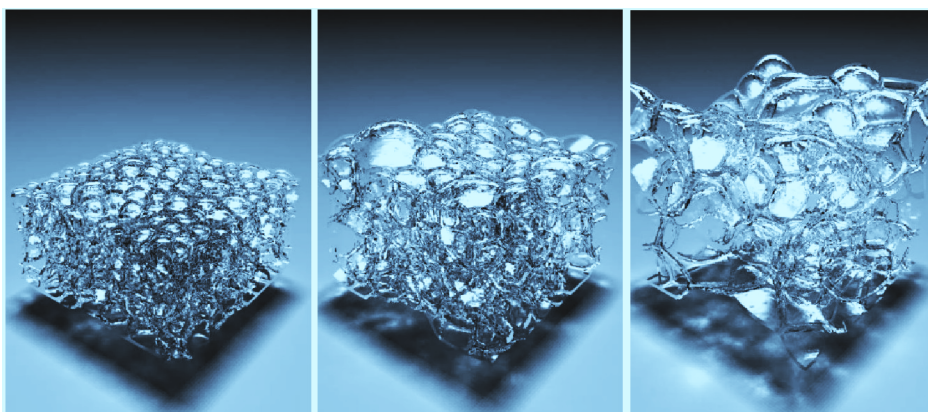


Abb.1: Bildung eines Metallschaums – Visualisierung einer Simulationsrechnung.

Die Bavarian Graduate School of Computational Engineering ist entstanden aus drei internationalen Masterstudiengängen, die sich aus unterschiedlichen Blickwinkeln mit genau diesen Fragestellungen beschäftigen: Computational Engineering an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg sowie Computational Science and Engineering und Computational Mechanics an der Technischen Universität München. Alle drei Programme befassen sich mit der kompletten “Pipeline” des Simulationsprozesses: von der mathematischen Modellierung und dem Entwurf geeigneter Rechenverfahren über die Umsetzung in effiziente Algorithmen und deren Implementierung auf (parallelen) Hochleistungsrechnern bis hin zur grafi-

schon Visualisierung der Ergebnisse und deren Validierung. Bei aller Verwandtschaft setzen sie jedoch unterschiedliche Schwerpunkte: Während Computational Mechanics die Mechanik als wichtiges Anwendungsfeld ins Zentrum des Interesses stellt, widmen sich Computational Engineering sowie Computational Science and Engineering stärker den allgemeinen mathematischen und informatischen Fragen.

Zusammengeschlossen haben sich die drei genannten Masterstudiengänge im Jahre 2004 im Rahmen des Elitenetzwerks Bayern (ENB) der Initiative des Freistaats zur Förderung und Bündelung motivierter und hochbegabter Studenten an seinen Hochschulen. Seitdem bieten sie nun ein gemeinsames, interdisziplinäres und

Standort-übergreifendes Eliteprogramm an — die BGCE. Nach einem Auswahlsemester werden die jeweils besten Studierenden aus den drei Programmen in ein individuelles Förderprogramm aufgenommen, das aus drei Säulen besteht:

- in fortgeschrittenen Blockkursen von international renommierten Experten sowie in Sommerschulen soll die fachliche Ausbildung weiter vertieft werden;
- überfachliche Qualifikationen, neu-deutsch auch Soft-skills genannt, werden in entsprechenden Seminaren über Führung, Kommunikation oder betriebswirtschaftliche Themen vermittelt;
- im Rahmen einer studienbeglei-

tenden, einjährigen Projektarbeit schließlich wird der Einsatz der erlernten Fähigkeiten in realistischen Szenarien geübt.

Alles folgt dem BGCE-Motto “Do more – get more”: Dreißig zusätzliche Credits müssen BGCE-Studierende erwerben, was in etwa dem Stoffumfang eines zusätzlichen Semesters entspricht. Dafür erhalten sie ein individuelles Mentoring, sind von Anfang an in aktuelle Forschungsprojekte an den beteiligten Lehrstühlen integriert und veredeln am Ende ihren Master-Abschluss mit dem Prädikat “with Honours” (*cum laude*). Von dem resultierenden Motivations-schub profitieren fraglos beide Seiten, Lehrende wie Lernende.

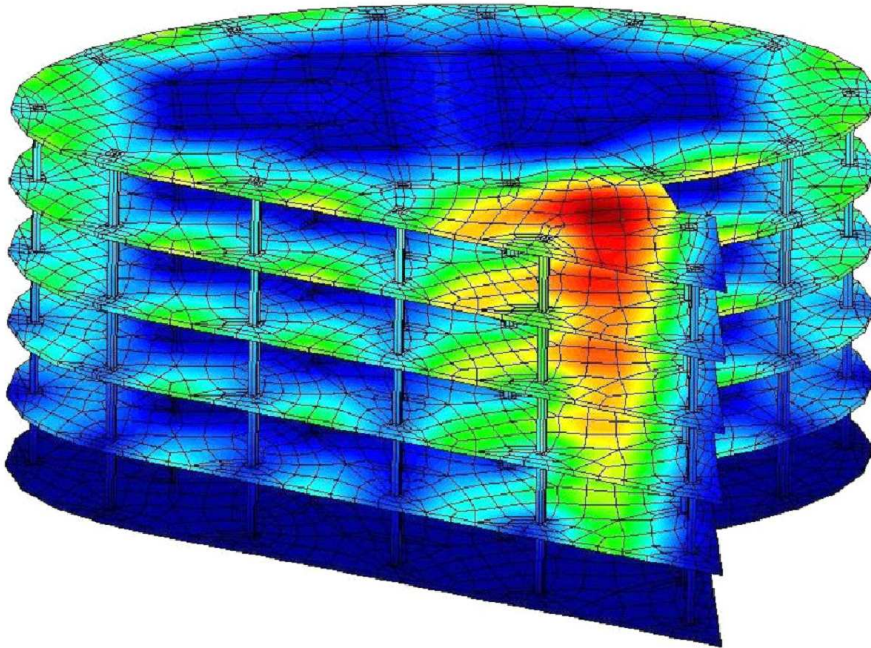


Abb.2: Berechnung der Statik eines Bürogebäudes.

“Keine Nadelstreifen oder Krawatte, sondern ein bunter Haufen von hoch interessierten Studenten, die sich gegenseitig innovative Technologien erklären.” So

bringt Jan Götz, einer der ersten BGCE-Studenten, das Prinzip der Blockkurse und Sommerschulen auf den Punkt. 2005 waren die BGCE-Studierenden vor allem

in der Ferienakademie vertreten, die die TU München, die Universität Erlangen sowie die Universität Stuttgart alljährlich im Südtiroler Sarntal veranstalten. Neben der Teilnahme an den Kursen “Computational Mechanics” oder “Numerische Simulation - Vom Modell zur Visualisierung” wurden auch im Bereich des Bergsteigens beachtliche Leistungen erzielt. Zudem wuchs die auf die beiden Standorte München und Erlangen verteilte internationale Gruppe endgültig zu einer Einheit zusammen – und wurde damit nicht zuletzt dem Netzwerkgedanken des ENB gerecht.

Im Bereich Soft-skills lautete das Motto des Sommers dagegen “Leading yourself and others”. In vier zweitägigen Seminareinheiten wurden Fähigkeiten erörtert und eingeübt, die in der universitären Ausbildung im technisch-naturwissenschaftlichen Bereich manches Mal zu kurz kommen: Kommunikation und Moderation, Teamarbeit, Führung, Selbstmanagement, und einiges mehr. Nicht nur von dem viel zitierten und beklagten Szenario der endlosen und ineffizienten Mitarbeiterbesprechung zur perfekt moderierten Teamsitzung war es ein durchaus steiniger Weg, den die 14 Seminarteilnehmer in Angriff nahmen.

Trotzdem waren alle mit Begeisterung bei der Sache – schließlich möchte man die Führungspositionen der Zu-

kunft dann doch nicht ganz kampflos den oben zitierten Krawatten und Nadelstreifen aus BWL & Co überlassen. Am Abschlusswochenende in Bernried am Starnberger See war dann die Stunde der Wahrheit gekommen: Im Planspiel Brückenbau musste sich erweisen, ob das zukünftige Top-Management die Kunst des Koordinierens und Delegierens verinnerlicht hatte, ob es gelingen würde, auch den detailverliebten Fachmann für die Konsenslösung zu begeistern, und ob die Planung so souverän ausgearbeitet war, auch höchst eigenartige Wünsche einer unter Umständen ebenso eigenartigen Kundschaft berücksichtigen zu können.

Das bisherige Fazit von Stefan Donath, einem Erlanger BGCE-Studenten sieht so aus: “Das BGCE-Programm ist anstrengend, weil es viel Extra-Zeitaufwand neben dem Studium bedeutet; aber es ist einfach der Mühe wert, weil schon alleine durch die Zusammenarbeit mit anderen Universitäten Erfahrungen hinzu kommen, die man als Student normalerweise nicht machen kann.”

Somit kommen wir auf den Anfang zurück – die BGCE’ler stehen bereit für anstehende Eroberungen in der Forschung. Und der Nachschub rollt – schließlich steht in Bälde die Auswahl des zweiten Jahrgangs an!

bungartz@in.tum.de

KONWIHR–Quartl / Agenda

KONWIHR Workshop: Perspectives of High-end-computing

Rechenzentrum Garching, Hoersaal Gebaeude D2, Boltzmannstr. 2, 07.Dec. 2005, 9-17 Uhr. Im vorläufigen Programm: Parallel astrophysical codes, formation of structure in the Universe, black holes in general rela-

tivity; Turbulent thermonuclear combustion, the FEARLESS Cosmic Turbulence Project; Lattice QCD, many-body dynamics in quantum optical systems; Ultrafast chemical reactions; Bio-medical applications with ParExpPDE, reconstructing a tree of life from DNA sequence data; A unified platform for highly efficient large scale multiphysics simulations, lattice Boltzmann for complex

flow situations in advanced material science applications and nano-technology; DNS of transitional flow in turbomachinery, of zero pressure gradient turbulent boundary layer flow, of convective turbulence, numerical research am TUM LS f. Aerodynamik, Computational seismology: earthquakes and the structure of the deep interior, Adaptive Hoehchstleistungssimulationen zur Kurzzeitprognose von Ueberflutungsereignissen.

<http://www.lrz-muenchen.de/services/compute/courses/>

ASIM Workshop

Am 22-24 Febr. 2006 findet an der TUM in Garching der dritte ASIM-Workshop "Grundlagen und Methoden der Modellbildung und Simulation" statt, der sich v.a. an Diplomanden und Doktoranden richtet. Hauptvorträge:

- Britta Nestler – Rainer Hoffmann
- Rainer Helmig – Hans-Peter Bunge
- Michael Günther – Peter Schwarz
- Thomas Ertl – Manfred Krafczyk
- Jörn Behrens – Wolfgang Wall
- Michael Manhart – Nikolaus Adams

Dazu noch ausgedehnte Postersessions. Weitere Infos und Anmeldung unter <http://www5.in.tum.de/workshops/asim.html>.

Bitte notieren:

Weltrekord im Gleichungslösen

Am Dienstag, dem 15. November 2005 wird auf der internationalen Supercomputertagung SC05 in Seattle, USA ein an der Universität Erlangen-Nürnberg erzielter Weltrekord vorgestellt. Dazu wurde mit einem Supercomputer das bislang größte Finite-Element-Gleichungssystem gelöst.

Dagstuhl Seminar 06071: Architectures and algorithms for petascale computing

International conference and research cen-

ter for computer science, Schloß Dagstuhl, D-66687 Wader, 12-17 Febr. 2006, Mit

- U. Rüde (Erlangen)
- H.D. Simon (Lawrence Berkeley Nat.Lab)
- P. Sloot (Univ. Amsterdam)

PASA 2006

8th Workshop "Parallel Systems and Algorithms," 16 March 2006, Frankfurt/Main:

- parallel architectures
- interconnection networks
- parallel embedded systems
- reconfigurable parallel computing
- models of parallel computation
- performance evaluation of parallel systems
- datastream-oriented computing
- software engineering for parallel systems
- parallel und distributed algorithms
- parallel programming languages
- network and grid computing
- technologies & architectures (SoC, PIM)

Impressum

KONWIHR $\mathfrak{Q}$ uartl*

– das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für technisch-wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen (KONWIHR)

Herausgeber:

Prof.Dr. H.-J. Bode, KONWIHR Sprecher
Prof.Dr. Dr.h.c. F. Durst, stellv. Sprecher

Redaktion: K. N. Beronov, Dr. Sci.

Lehrstuhl für Strömungsmechanik

Cauerstraße 4, D-91058 Erlangen

Tel./Fax: +49 9131 85 29501 / 29503

e-mail: mailto:konwihr@lstm.uni-erlangen.de
Tel.: +49 9131 85 28280

kberonov@lstm.uni-erlangen.de

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

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

Druck: Druckladen Erlangen

* $\mathfrak{Q}$ uartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß, $\rightarrow$ das $\mathfrak{Q}$ uart: $1/4$ Kanne = 0.27 l (Brockhaus Enzyklopädie 1972)