ARBEITS– UND ERGEBNISBERICHT 1996–1997–1998

SFB 393

An die
Deutsche Forschungsgemeinschaft
– Sonderforschungsbereiche –

über
Magnifizenz der Technischen Universität Chemnitz

Bezeichnung des Sonderforschungsbereichs:

Numerische Simulation auf Massiv Parallelen Rechnern

Sprecherhochschule: Technische Universität Chemnitz

Sprecher:

Prof. Dr. Arnd Meyer
Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
TU Chemnitz
D-09107 Chemnitz
Tel. 0371/531/2659

Sekretariat:

Fakultät für Mathematik
Numerische Analysis
TU Chemnitz
D-09107 Chemnitz
Tel.: 0371/531/2659
FAX: 0371/531/2657

WWW-Homepage:

http://www.tu-chemnitz.de/sfb393

Chemnitz, den 30. März 1998

(Prof. Dr. rer. nat. habil. Arnd Meyer)
– Sprecher des SFB 393 –

Chemnitz, den 30. März 1998

(Prof. Dr. rer. nat. habil. Christian von Borczyskowski)
– Rektor der TU Chemnitz –

Technische Universität Chemnitz

SFB 393

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Allgemeiner Teil/ Zusammenfassung

1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs

In der ersten Arbeitsphase des SFB 393 wurden erfolgreich Grundlagenuntersuchungen und Experimentalrealisierungen durchgeführt zu numerischen Grundproblemen der FEM und schnellen Lösern (Projektber. A), der objektorientierten FEM und Parallelrechnerkommunikation (Projektber. B), sowie der Anwendung auf Simulationsfragen in der Physik (Projektbereich C) und der Kontinuumsmechanik (Projektbereich D). Es wurden jeweils sowohl disziplinär geprägte Ergebnisse in den einzelnen Teilprojekten erzielt als auch durch die von vornherein angestrebte interdisziplinäre Zusammenarbeit über die Teilprojekte hinweg insbesondere bei numerischen Experimenten gemeinsame Ergebnisse durch Beteiligung mehrerer Teilprojektbearbeiter erhalten. So hat die intensive Beschäftigung mit MPI–Kommunikationsstandards im Projektbereich B zu deutlich besseren Effizienzen in 3D–Realisierungen der Teilprojekte aus A und D geführt.
Im Projektbereich A wurden im wesentlichen

- die Fragen der FE–Fehler bei anisotropen Netzen und in der a–posteriori Schätzung untersucht,
- schnelle Löser durch Multi–Level–Vorkonditionierer für echt 3D, und für besondere Schalenmodelle parallel erarbeitet und getestet;
- adaptive Herangehensweisen aufbereitet, um im weiteren in einer hohen parallelen Effizienz weiterentwickelt zu werden;
- Fortschritte bei rein algebraischer Vorgehensweise analog zu DD– und algebraisch Multigrid erhalten.

Im Projektbereich B wurde zusammen mit der Schaffung eines Experimentalprogramms zur objektorientierten FEM gleichzeitig die Einführung von MPI–basierten Kommunikationsbibliotheken zur Vervollkommnung der in allen Teilprojekten nutzbaren Werkzeuge erarbeitet.
Im Projektbereich C wurden

- skalierbare parallele Versionen für die Lanczos-Diagonalisierung, die Transfer-Matrix-Methode und das Damaga-Spreading-Problem entwickelt,
- durch Vergleich mit modernsten zur Verfügung steheneden Diagonalisierungsverfahren die Effizienz des Lanczos-Verfahrens für das vorliegende Problem bestätigt,
- und eine sehr effektive Methode zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme gefunden.
- Unter Einbeziehung spezieller kinetischer Faktoren in die Relaxationsdynamik auf hierarchischen Strukturen konnten die Reinitialisierungseffekte, wie sie experimentell beobachtet wurden, reproduziert werden.

- Bei der Untersuchung von kurzreichweitigen Ising-Spingläsern konnte nachgewiesen werden, daß die Zustandsdichte in der Umgebung des lokalen Minimums langsamer als exponentiell anwächst.

- Neue adaptive Schedules für Simulated Annealing wurden entwickelt, getestet und angewendet. Dadurch konnten bei der Modellierung von atomaren Struturen wesentlich bessere Ergebnisse als bisher erzielt werden.

Im Projektbereich D entstanden

- sowohl ein Simulationstool für elasto–plastische Probleme kleiner Deformationen, mit dem effiziente Parameteridentifikationsläufe möglich wurden als auch die Grundlagen zur Behandlung endlicher (großer) Deformationen, womit in der Weiterführung wesentlich realitätsnahere Simulationen sowie Einbau von Schädigungsgesetzen ermöglicht wird;

- ein vollständig parallel arbeitendes Simulationswerkzeug für Mehrphasenströmungen, in dessen letzter Version von klassischen DD–Datenaufteilungen bei der Partikelverfolgung zu variablen Prozessormappings übergegangen wird, um den früheren drastischen Effizienzverlust zu überwinden;

- ein Simulationstool für 3–dimensional gekoppelte Strömungsprobleme mit gleichem Modellumfang wie das schon vorhandene 2D–Programm unter wesentlicher Benutzung der Vorarbeiten aus A3 und D4. Vorarbeiten zu parallelen adaptiven Methoden werden in der Weiterführung zu wesentlicher Erhöhung der Leistungsfähigkeit führen;

- Werkzeuge für Parallel–Preprozessing, mit denen die notwendigen effizienten Datenstrukturen umsetzbar sind;

- Werkzeuge für Parallel–Postprocessing, um insbesondere für eigene Testfragestellungen bei Experimentalrechnungen in kurzer Zeit Ergebnisinformationen zu haben.

1.2 Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich

Interdisziplinäre Zusammenarbeit von Wissenschaftlern verschiedener Fachdisziplinen hat an der TU Chemnitz längere Tradition.
Dies galt innerhalb des SFB 393 insbesondere für Kooperation zwischen Mathematik und Mechanik, die auch erfolgreich (insbesondere innerhalb D1) weitergeführt wurde. Im Jahr 1998 wurde die Forschungskooperation auf die thematisch ähnlich gelagerten Fragestellungen bei Prof. M. Kuna an der TU–Bergakademie Freiberg ausgedehnt, was sich im Fortsetzungsantrag zu dieser Thematik niederschlagen wird.
Eine weitere ständige Kontakte erfordernde Kooperation entwickelte sich zwischen Informatik (Bearbeiter von B2) und Mathematik. Einerseits war dies die Voraussetzung für die Erarbeitung einer FEM–Realisierung auf modernem informatischem Niveau bei den Bearbeitern von B2, andererseits hatte dies unmittelbare Rückwirkung auf die Bearbeitung der Parallel–Löser in A3, D1 bis D4 durch effiziente MPI–basierte Kommunikationstools und Bereitstellung neuer Hardware–Plattformen (Pentium–basierte Compute–Cluster mit verschiedenen Kommunikations–Technologien).
Die neuentstandene Zusammenarbeit zwischen Physik (Bearbeiter C1/C2/C3/C4) und Mathematik (Bearbeiter A3/A4) zeigte die noch unzufriedenstellenden Fortschritte bei allgemeinen iterativen Lösern, die effizient beim wichtigen Eigenwertproblem der Anderson–Lokalisierung einsetzbar wären. Dies führt in der Fortführung zu einem eigenständigen Kooperationsthema der beteiligten Wissenschaftler.
Darüber hinaus sind seitens der Teilprojekte des Projektbereichs C im Zuge der Algorithmenentwicklung unter MPI die Kontakte zur Informatik (Teilprojekt B2) intensiviert worden. Hierbei wurden Eigenschaften der MPI-Implementierungen erörtert, um die Kommunikationszeiten der verwendeten Algorithmen zu verringern.
Kooperationsbeziehungen nahezu aller Mitarbeiter im SFB untereinander sind durch Nutzung und „Tuning“ des (der) Parallelrechner gegeben, über die der SFB (die TU Chemnitz) verfügt oder an denen einzelne Kollegen auswärts als Gast tätig waren. Insbesondere über den Aufenthalt von Dr. Th. Frank in Edinburgh (Cray-T3D) wurde auf einem gemeinsamen SFB–Seminar berichtet.
Hat sich in diesem Zusammenhang gezeigt, daß auf der wesentlich teureren Maschine T3D trotzdem keine wesentlich gesteigerte Leistung im Vergleich zum TU Chemnitz–Parallelrechner GC PowerPlus erreichbar war, so hat sich die Entscheidung zur Anschaffung dieser Hardware–Plattform als außerordentlich günstig für die Arbeit des SFB (und weiterer Forschungsgruppen der TU) erwiesen. Die nahezu lückenlose und sichere Arbeitsfähigkeit auf dieser Maschine verdanken wir dem vorbildlichen Management unseres TU–Rechenzentrums und namentlich dem zur Betreuung des Parallelrechners eingesetzten Mitarbeiter. Die hierzu regelmäßig durchgeführten Nutzerberatungen dienten ebenfalls dem Erfahrungsaustausch innerhalb des SFB, der auf diesen Beratungen naturgemäß das Hauptgewicht hatte.

1.3 Stellung innerhalb der Hochschule

An der TU Chemnitz werden z.Zt. drei Sonderforschungsbereiche von der DFG gefördert. Der SFB 393 arbeitet auf dem auch international exponierten Wissenschaftsprofil des „High Performance Computing", was nichtzuletzt durch großzügige Förderungen in den letzten 10 Jahren einen bedeutenden Aufschwung erlebt hat. Damit ist in Chemnitz ein besonderes Kompetenzzentrum entstanden, was auch zu Kooperationsbeziehungen zu anderen Forschungseinrichtungen Sachsens (TU Dresden, TU-Bergakademie Freiberg, Institut für Troposphärenforschung Leipzig, u.a.) sowie Deutschlands (z.B. Institut für Feuerwehr Sachsen-Anhalt) führte.

Innerhalb der TU Chemnitz zeichnet sich der SFB 393 durch seine Interdisziplinarität besonders aus.

Der SFB 393 kann auf eine gute Unterstützung von Seiten der TU Chemnitz und des Sächsischen Staatsministeriums für seine Anfangsphase zurückblicken. So war der C4-Ruf von Prof. Schneider auf die Professur „Analysis und Numerik Partieller Differentialgleichungen" mit seiner Bereitschaft zur Integration und Mitarbeit im SFB verknüpft. Dies ist mit dem Teilprojekt A7 geschehen, was gleichzeitig die Themenvielfalt in Richtung der modernen Wavelet-Methoden deutlich verbesserte.

Der SFB 393 bedankt sich auch bei der Verwaltung der TU Chemnitz für die zunehmend konstruktive Zusammenarbeit bei Personalfragen und der Drittmittel–Verwaltungshilfe.

1.4 Förderung der Lehre und des wissenschaftlichen Nachwuchses

Die Untersuchungen im Sonderforschungsbereich beeinflussen naturgemäß die Arbeiten an den beteiligten Fakultäten und Instituten erheblich. Nicht nur die aus den Teilprojekten finanzierten wissenschaftlichen Mitarbeiter, sondern auch die aus anderen Mitteln finanzierten Wissenschaftler nehmen starken Anteil an den Themen und Veranstaltungen des SFB.

Besonderes Gewicht hat die Qualifizierung hauptsächlich von Promovenden innerhalb der durch den SFB zustandegekommenen Forschungsgruppen. So entstanden unmittelbar aus dem im SFB mitarbeitenden Arbeitsgruppen

in der Mathematik:	8 Promotionen (2 verteidigt, 6 stehen vor Abschluß) und 2 Habilitationen,
in der Physik:	4 Promotionen (vor Abschluß),
im Maschinenbau:	3 Promotionen (1 verteidigt, 2 eingereicht).

Der unmittelbare Einfluß auf die Lehre ist vor allem durch die Tätigkeiten der studentischen Hilfskräfte und durch Diplom- und Jahresarbeitsthemen gegeben. Besonders konnten die umfangreichen Mittel für studentische Hilfskräfte die Arbeitsgruppen des SFB in die Lage versetzen, Studenten höherer Semester zielgerichtet in die Forschungsarbeit zu integrieren. Die Tätigkeit als studentische Hilfskraft hatte typischerweise stets wissenschaftlichen Charakter, einige konnten nach Erwerb des Disploms für die weiteren Projektarbeiten auf halben Stellen gewonnen werden. Insgesamt haben ständig etwa 15 Studenten im SFB mitgearbeitet (summarisch mehr als 25).

Vorträge von Gastwissenschaftlern aus dem In– und Ausland und Besuche an Institutionen mit ähnlich gelagertem Forschungsprofil führen zu einem erheblichen Zuwachs an Fachinformation, die die Forschung und Lehre der beteiligten Fachbereiche und Institute befruchteten.

Kapitel 2

Projektbereiche