

Kapitel 1

Allgemeiner Teil/ Zusammenfassung

1.1 Wissenschaftliche Entwicklung des Sonderforschungsbereichs

In der zweiten Arbeitsperiode des SFB 393 wurden die Grundlagenuntersuchungen und Experimentalrealisierungen

für die numerischen Grundprobleme bei moderner FEM und BEM und ihre schnellen Löser (Projektbereich A);

für die neuen Problemstellungen des Cluster-Computing bei Parallelrechnerkonzeption und -management (Projektbereich B);

für die Anwendung auf numerische Simulationen der Physik (in Projektbereich C) sowie

für die Simulation kontinuumsmechanischer Fragestellungen (in Projektbereich D)

erfolgreich weitergeführt.

Dies betrifft zum einen disziplinäre Ergebnisse in den einzelnen Teilprojekten, zum anderen sind viele Forschungsleistungen im SFB 393 durch das interdisziplinäre Zusammenwirken aus mehreren Fakultäten hervorgegangen oder wurden durch die Diskussionen im SFB-Seminar besonders befruchtet. Dies bezieht sich vorrangig auf die gemeinsame Bearbeitung der Teilprojekte in D durch Ingenieurkollegen und Mathematiker. Daneben wurde insbesondere die Zusammenarbeit zwischen Kollegen aus der Physik (Projektbereich C) und der Mathematik intensiviert, was sich in weiteren gemeinsamen Projekten der geplanten Fortführung ausdrückt.

Im Projektbereich A wurden hauptsächlich

- adaptive Finite Elemente Techniken in ihrer Gesamtheit untersucht, einschließlich
 - neue Datenstrukturen,
 - anisotrope Fehlerschätzer/Netzsteuerungen,
 - 2D-Implementierung für große Anwendungsklasse,
 - parallele 3D-Implementierung mit Rebalancing.
- ILU- und algebraische Multigrid-Löser für allgemeinere Gleichungssysteme bearbeitet.

Im Projektbereich B wurden Problemstellungen auf dem Gebiet der Kommunikation in Clustersystemen behandelt. Dabei wurden Entwicklungen im gesamten Bereich von der Hardware über die Systemsoftware bis hin zu Kommunikationsbibliotheken gemacht:

- ein neuartiger, hochleistungsfähiger Netzwerkadapter, welcher die Vorteile eines *Distributed Shared Memory* auf Basis von SCI (*Scalable Coherent Interface*) mit *User-Level Block Transfers* der *Virtual Interface Architecture* (VIA) verbindet

- zugehörige Systemsoftware, d.h. Treiber für Linux, welches vorzugsweise als Betriebssystem eingesetzt wird
- eine MPI-Kommunikationsbibliothek, die die Vorzüge der speziellen VIA/SCI Hardware gezielt ausnutzt und gute Leistungen besonders im Bereich der kleinen (einige Bytes) und mittleren (einige Kilobytes) *Message*-Längen erzielen kann
- Management und Aufbau von Clustersystemen, d.h. es wurden Methoden zum Verwalten und Warten von Clustern entwickelt/getestet. Dies betrifft sowohl das Management aus Sicht des Systemadministrators als auch den Umgang mit dem Cluster durch den Anwender.

Im Projektbereich C wurden

- Modelle von elektronischem Transport, unter anderem die Delokalisierung durch Vielteilchen-Wechselwirkung und die mikroskopische Behandlung bei endlicher Temperatur mit Präzisionsmethoden der numerischen Physik studiert,
- effiziente klassische und quantenmechanische Methoden zur Simulation von korrelierten ungeordneten elektronischen Systemen entwickelt und damit sowohl die Ergodizitäts- als auch die Transporteigenschaften detailliert untersucht,
- verschiedene Optimierungs- und Relaxationsalgorithmen entwickelt bzw. verbessert.

Im Projektbereich D

- ist die numerische Simulation von komplizierten Verformungsgesetzen wesentlich weiterentwickelt worden. Zusätzlich zum Stand zu Beginn dieser Phase sind die "großen Deformationen" behandelbar zusammen mit wesentlich allgemeineren Materialgesetzen und es ist die Grundlage einer adaptiven Arbeitsweise gelegt.
- ist die numerische Simulation von dispersen Mehrphasenströmungen (Fluid-Feststoff-Strömungen) mittels paralleler Euler-Lagrange-Verfahren wesentlich vorangetrieben worden. Durch die interdisziplinäre Zusammenarbeit mit den Teilprojekten aus dem Projektbereich A konnte die Stabilität und Konvergenzgeschwindigkeit der eingesetzten Gleichungslöser deutlich verbessert werden. Für das 3-dimensionale Lagrange-Verfahren wurde eine Parallelisierung mit dynamischer Lastbalancierung entwickelt. Des Weiteren wurden im Berichtszeitraum durch die enge Kopplung von Navier-Stokes- und Lagrange-Löser (einheitliche Implementierung in C, einheitliche Datenstrukturen, globaler Integrationszeitschritt, iterative Kopplung) die Grundlagen für die parallele Simulation transienter Mehrphasenströmungen gelegt.

1.2 Entwicklung der Kooperation im Sonderforschungsbereich

Die interdisziplinäre Zusammenarbeit von Wissenschaftlern verschiedener Fachdisziplinen hat an der TU Chemnitz eine lange Tradition und wurde zu einem Hauptmerkmal des SFB 393.

Insbesondere die Kooperation zwischen Mathematik und Mechanik in den Teilprojekten D1 und D2 hat zu den dort geschilderten Erfolgen bei der Simulation kontinuumsmechanischer Prozesse beigetragen. Andererseits ergaben sich Impulse für die mathematischen Teilprojekte, die in der Fortführung Beachtung finden werden. So ist etwa die Einbeziehung von Kontaktaufgaben als eine besonders interessante Anwendung der adaptiven Finite Elemente Techniken vorgesehen.

Durch den gewachsenen Bekanntheitsgrad innerhalb der TU Chemnitz, sind weitere Kooperations-Teilprojekte mit Ingenieurkollegen in Vorbereitung.

Im Jahre 2000 hat Frau Prof. G. Rünger ihre Tätigkeit an der Fakultät für Informatik der TU Chemnitz aufgenommen und begann mit einem Nachantrag für 2001 eine Mitarbeit im SFB 393. Neben der Stärkung der informatischen Komponente ist dies ein weiteres Teilprojekt, das in der Fortführung wesentlich durch interdisziplinäre Zusammenarbeit mit den Kollegen der Mathematik und eventuell Physik gekennzeichnet ist.

Eine intensive Zusammenarbeit aller Teilgruppen des SFB 393 und mit dem Universitätsrechenzentrum war zur strategischen Planung eines neuen Parallelrechners für die TU Chemnitz im Jahre 1999 und zur Beschaffung (2000) erforderlich. Genaueres wird hierzu im Kapitel 1.3 ausgesagt.

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 20 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, MPI Leipzig) sowie Deutschlands 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 bisherigen zwei Antragsphasen 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. Gleiches gilt für die Wiederbesetzung einer Analysis-Professur an der Fakultät für Mathematik durch Prof.P.Stollmann, dessen Arbeitsgebiet eng mit den Themen der Physik-Teilprojekte verwandt ist,

so dass eine Mitarbeit im SFB in der Fortsetzung geplant ist.

An der Fakultät für Naturwissenschaften ist ebenfalls ein C4-Ruf an Prof. Radons erfolgt, der ebenso zum weiteren Ausbau des SFB 393 dienen kann.

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

Eine besondere Rolle spielte der SFB 393 bei der Neuanschaffung eines TU-Parallelrechners. Naturgemäß sind die Wissenschaftler des SFB 393 die Hauptnutzer von Parallelrechentechnik, deshalb wurde zur intensiven Vorbereitung dieser Beschaffung eine Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern des Universitätsrechenzentrums und des SFB 393 gegründet, die sich seit Beginn des Jahres 1999 regelmäßig traf, um eine Ersatzbeschaffung des bis dahin verwendeten Parsytec-GC 128 vorzunehmen. Die wissenschaftliche Leitung hatten Prof. U. Hübner (URZ) und Prof. A. Meyer (SFB 393), die Gesamtkoordinierung lag in den Händen von Dr. Riedel (URZ). Von Seiten des SFB arbeiteten aus jeder Teilgruppe ein Wissenschaftler mit (Dr. Pester, Prof. Rehm, Dr. Blaudeck, Dr. Frank).

Im Jahre 1999 wurde vorrangig eine strategische Entscheidung zum Prozessortyp, Typ der Kommunikationsverbindungen und Gesamtgrößenordnung herbeigeführt, die wesentlich auf Benchmark-Rechnungen von Dr. Pester beruhen. Mit der Entscheidung zum "Cluster-Computing" wird die Bezeichnung **CLIC** für Chemnitzer Linux Cluster gebraucht. Als im August 1999 der Parsytec-GC durch einen Brand unbrauchbar wurde, war diese Ersatzbeschaffung umso dringlicher erforderlich und konnte ab Januar 2000 in die Tat umgesetzt werden. Hauptanliegen der endgültigen Entscheidung zu einem 528-PentiumIII-Cluster mit Fast-Ethernet-Switches war die Tatsache, dass es einen recht großen Einzelnutzerkreis gibt (allein im SFB etwa 30 bis 40), der möglichst ungestört einen Subcluster mit nicht zuwenig Prozessoren für eigene Entwicklungen/Testrechnungen erhalten muss. Dies war der wesentliche Engpass beim vorangegangenen Parallelrechner.

Deshalb wurde aus Preisgründen einer hohen Prozessorzahl der Vorrang vor alternativen Kommunikationsnetzen gegeben. Bei der Indienststellung von August bis Oktober 2000 war wieder der SFB 393 als wichtiger Erkenntnisträger für Parallel-Benchmarks beteiligt. Insbesondere Dr. Pester ist es zu verdanken, dass der nötige Dongarra-Benchmark auf 484 Prozessoren den Platz 126 der aktuellen Top-500-Liste erbrachte.

Der SFB 393 dankt ausdrücklich den beteiligten Mitarbeitern des URZ der TU Chemnitz für ihr Engagement, das letztlich zum erfolgreichen Abschluss dieser nicht alltäglichen Installation führte.

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 zustande gekommenen Forschungsgruppen. So entstanden unmittelbar aus den im SFB mitarbeitenden Arbeitsgruppen

in der Mathematik: 9 Promotionen
(7 verteidigt, 2 stehen vor Abschluss)
und 3 Habilitationen,
in der Physik: 9 Promotionen
(7 verteidigt, 2 stehen vor Abschluss)
und 3 Habilitationen,
im Maschinenbau: 3 Promotionen
(2 verteidigt, 1 eingereicht)
und 1 Habilitation.

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.