

Auszug  
aus dem  
HPC-Bericht 2006

**Research Report  
High-Performance Computing in Hessen**

20. August 2007



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Vorwort</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Einleitung</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Technik und Organisation</b>	<b>8</b>
3.1	Linux-Cluster am Center for Scientific Computing (CSC) der Uni Frankfurt . . . . .	8
3.2	Der HHLR am Forschungszentrum Computational Engineering (CE) in Darmstadt	9
3.2.1	Systemaufbau . . . . .	9
3.2.2	Auslastung des HHLR . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Projektberichte</b>	<b>11</b>
4.1	Chemie . . . . .	11
4.1.1	Molecular Dynamics Simulations of Potassium Channels . . . . .	11
4.1.2	Eliminating Truncation Effects in Molecular Simulations . . . . .	13
4.1.3	Thermal Conductivity of Polymers by Non-Equilibrium Molecular Dynamics	14
4.1.4	Vapor-Liquid Equilibria in Solvent-Polymer Systems . . . . .	15
4.1.5	Molecular Dynamics Simulations of Platinum(111)/Isopropanol Interface .	16
4.1.6	Investigation of thermal diffusion in molecular fluids and polymer solutions	17
4.1.7	Multiscale simulations of dendrimers . . . . .	18
4.1.8	Mesoscale Simulations of the Fuel Cell Membrane . . . . .	19
4.1.9	Molecular Dynamics Simulations of Fuel Cell Membrane Material . . . . .	20
4.1.10	Effects of Additives on Lipid Membrane Fluidity Investigation by Molecular Simulation . . . . .	21
4.1.11	Molecular-dynamics simulation of the liquid-vapor interface of aqueous solutions of salts and sugars . . . . .	22
4.1.12	Shear Viscosity Studies in Polymer Melt Through Reverse Non- Equilibrium Molecular Dynamics Simulation . . . . .	23
4.2	Physik . . . . .	25
4.2.1	Self-consistent calculations of nuclear matter properties at nonzero temperature and density . . . . .	25
4.2.2	Plasminos in Superconductors . . . . .	27
4.2.3	Numerical Simulation of the hadron-string dynamics in heavy ion collisions	28
4.2.4	Outer crust of nonaccreting cold neutron stars . . . . .	30
4.2.5	DFT-Studies on the Oxygen Reduction Reaction in PEM-Fuel Cells . . . . .	31
4.2.6	Orbital-dependent correlation energy functionals . . . . .	33
4.2.7	Description of hadrons in the high density phase . . . . .	34
4.2.8	TDHF Simulations of Low-Energy Nuclear Collisions . . . . .	36
4.2.9	Alpha Cluster Structure and Exotic States in Light Nuclei . . . . .	37

4.2.10	Optimization of Multiple Response Processes - Inversion of Geodynamic and Seismic Constraints for Models of Large- scale Viscous Flow in the Earth's Mantle . . . . .	38
4.2.11	Probing the late stage of heavy ion reactions using resonances . . . . .	39
4.2.12	Quantum-mechanical Calculations of Inorganic Solids . . . . .	40
4.2.13	Optical properties of semiconductor photonic crystals . . . . .	41
4.2.14	Design Studies on High Current Storage Ring . . . . .	42
4.2.15	Phase Diagram of Neutral Quark Matter . . . . .	43
4.2.16	Adsorption of Element 112 on a Au (100) surface . . . . .	44
4.2.17	Exotic hadrons from cluster hadronisation . . . . .	45
4.2.18	Phase Structures in a Chiral Hadronic Model . . . . .	46
4.2.19	3d Particle-in-Cell Simulations of a Nonequilibrium Gluon Plasma . . . . .	47
4.2.20	Numerical Computation of Highly Doubly Excited Resonant S Electron States of Helium Atom . . . . .	48
4.2.21	Parton Cascade simulating ultrarelativistic heavy ion collisions . . . . .	51
4.3	Ingenieurwissenschaften . . . . .	52
4.3.1	Combustion Noise Predictions by a LES/CAA Hybrid Approach . . . . .	52
4.3.2	Large Eddy Simulation of Premixed Combustion . . . . .	53
4.3.3	Large-Eddy-Simulation of Multiphase Flows . . . . .	54
4.3.4	Heat and Mass Transfer in Complex Mixing Devices . . . . .	55
4.3.5	Large Eddy Simulation of Non-Premixed Combustion . . . . .	56
4.3.6	Optimal Grid Partitioning for Block Structured Grids . . . . .	57
4.3.7	Numerical Simulation of Fluid-Structure Interactions . . . . .	58
4.3.8	Large Eddy Simulation of Complex Turbulent Flows . . . . .	59
4.3.9	Numerical Shape Optimization of Flow Geometries . . . . .	60
4.4	Mathematik . . . . .	61
4.4.1	Constructive Galois Theory . . . . .	61
4.5	Sonstiges . . . . .	62
4.5.1	Cosmic Ray Air Shower Simulations . . . . .	62
4.5.2	Dynamics of charged biomolecules under electro-hydrodynamic effects . . . . .	64
4.5.3	Interplay of electrostatic and van der Waals forces in dimer of coronene . . . . .	65
4.5.4	Structure, stability and fission of metal clusters . . . . .	66
4.5.5	Magnetic properties of atomic clusters . . . . .	67
4.5.6	Theoretical study of structure and dynamics of polypeptide chains . . . . .	68

**5 Veröffentlichungen**

**69**

# 1 Vorwort

Der hier vorliegende Forschungsbericht gibt Rechenschaft darüber ab, wie die an den Universitäten des Landes Hessen installierten Computerkapazitäten in den Jahren 2004 - 2006 für die Forschung in den Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften genutzt wurden. Die beeindruckende Liste der mehr als 125 Publikationen, die in international führenden Zeitschriften veröffentlicht wurden, sind ein Beleg für das hohe Niveau der Forschungsleistungen und der Produktivität der Arbeitsgruppen an den hessischen Universitäten, die sich weltweiter Konkurrenz stellen können. Die auszugsweise vorgestellten Forschungsarbeiten weisen auf das breite Spektrum unterschiedlicher Themen hin, für deren Bearbeitung der Zugang zu Hoch- und Höchstleistungsrechnern unabdingbar ist. Wir legen diesen Bericht nicht ohne Stolz auf die hier dokumentierten wissenschaftlichen Leistungen vor, die in den vergangenen drei Jahren erbracht wurden. Sie wurden durch die schöpferische Kreativität und den engagierten Einsatz der daran beteiligten Wissenschaftler und Studenten ermöglicht, die auf die vorhandene Infrastruktur an den Rechenzentren und die Computerkapazitäten an den hessischen Universitäten zurückgreifen konnten. Das Zusammenspiel beider Komponenten machte es möglich, daß die im folgenden vorgestellten wissenschaftlichen Ergebnisse erzielt werden konnten. Der Forschungsbericht ist ein eindrucksvoller Beleg für das hohe Forschungsniveau an den hessischen Hochschulen. Die beteiligten Wissenschaftler legen den Bericht als Beleg dafür vor, daß die nicht unerheblichen Investitionen in Computerkapazitäten eine dokumentierbare und nachhaltige Stärkung des Forschungsniveaus an den hessischen Universitäten nach sich ziehen. Die sich daraus ergebene Stärkung der Qualität in der Lehre liegt auf der Hand.

Prof. Gernot Frenking, Marburg, 19.8.2007  
Vorsitzender des Hessischen Beirats für Hochleistungsrechnen

## 2 Einleitung

Die Bedeutung des Wissenschaftlichen Rechnens als einer Schlüsseltechnologie für nahezu alle Bereiche von Wissenschaft und Technik ist heutzutage unumstritten. Trotz der enormen Fortschritte im Bereich der Rechnertechnologie ist hierbei in vielen Anwendungsfällen der Einsatz von Hochleistungsrechnern unerlässlich, nicht zuletzt auch aufgrund der stetig wachsenden Komplexität der Problemstellungen. Das Hochleistungsrechnen trägt entscheidend zur Reduktion von Entwicklungszeiten neuer Methoden und Technologien bei und es können Probleme angegangen werden, die aufgrund der hohen Anforderungen an die Rechenleistung anderweitig einer numerischen Simulation nicht zugänglich sind.

Der Verfügbarkeit einer adäquaten Hochleistungsrechnerkapazität kommt damit für den Wissenschaftsstandort Hessen eine überaus wichtige Bedeutung zu, da dies die Grundlage für eine national und international konkurrenzfähige Forschung im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens darstellt. Der Erfolg von Sonderforschungsbereichen, Forschergruppen, Graduiertenkollegs und einer Vielzahl unterschiedlicher Einzelprojekte hängt entscheidend davon ab.

Der Hochleistungsrechenbedarf in Hessen wird durch zentrale Rechenkapazitäten auf Landesebene gedeckt. Aufgrund unterschiedlicher Anforderungen der Nutzer werden zwei größere Systeme mit unterschiedlichen Architekturen betrieben:

- Ein SMP-Cluster an der TU Darmstadt für Anwendungen mit feingranularer Parallelität mit vergleichsweise hohen Anforderungen an die Kommunikationsleistung, wie z.B. Strömungssimulationen oder Strukturrechnungen komplexer Quantensysteme.
- Ein MPP-Cluster an der Universität Frankfurt für Anwendungen mit grobgranularer Parallelität mit vergleichsweise geringen Anforderungen an die Kommunikationsleistung, wie z.B. Vielteilchendynamik in Stoßprozessen.

Dem Darmstädter Forschungszentrum CE und dem Frankfurter CSC kommt die Funktion von Kompetenzzentren im Bereich des Hochleistungsrechnens zu. Die notwendige fachübergreifende Kompetenz ist durch die interdisziplinäre Zusammensetzung der beiden Zentren, sowie durch entsprechende Aktivitäten der Mitglieder in Forschung und Lehre gewährleistet. Damit leisten beide Zentren einen Beitrag zu den folgenden Aufgaben:

- Entwicklung bzw. Weiterentwicklung von Anwendungssoftware für den Hochleistungsrechner in den verschiedenen Anwendungsbereichen,
- Unterstützung von Nutzern bei der Portierung von Anwendungssoftware.
- Ausbildung von wissenschaftlichem Nachwuchs im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens durch entsprechende Lehrangebote,
- Technologietransfer in die Industrie im Rahmen von Kooperationsprojekten,
- Organisation von regelmäßigen Benutzer-Kolloquien, die den Erfahrungsaustausch zwischen allen Nutzern des Rechners ermöglichen,

- Kontaktpflege und Zusammenarbeit mit anderen im Bereich des Hochleistungsrechnens tätigen Arbeitsgruppen im In- und Ausland (z.B. Workshops, Forschungsprojekte).

Die Rechenzentren der hessischen Universitäten betreiben den Rechner gemeinsam unter Federführung der Rechenzentren der TU Darmstadt und der Universität Frankfurt, an denen die Rechner installiert sind. Zu den Aufgaben der Rechenzentren an den beiden Standorten gehören:

- Bereitstellung von Räumlichkeiten und der zugehörigen Infrastruktur,
- Administration und Operating (24-Stunden-Betrieb),
- Betriebssteuerung und Überwachung der Betriebsvorgaben,
- Fehlerverfolgung und -behebung,
- Benutzerverwaltung,
- Datensicherung.

Die Rechner sind für Nutzer aller hessischen Universitäten zugänglich. Die einzelnen Rechenzeitkontingente richten sich nach den finanziellen Beteiligungen der Hochschulen, Fachbereiche bzw. Fachgebiete. Dies wird durch eine entsprechende Prioritätenvergabe erreicht.

## 3 Technik und Organisation

### 3.1 Linux-Cluster am Center for Scientific Computing (CSC) der Uni Frankfurt

Das Center for Scientific Computing (CSC) der Goethe-Universität betreibt einen der beiden hessischen Hochleistungsrechner. Das CSC wurde im Jahr 2002 als gemeinsame Initiative von 15 Forschungsgruppen der naturwissenschaftlichen Fachbereiche der Universität Frankfurt ins Leben gerufen. Ausgangspunkt für seine Gründung war die Erkenntnis, dass in den modernen Naturwissenschaften die Bewältigung komplexer numerischer Aufgaben eine zentrale Rolle einnimmt.

Das CSC bietet daher neben der Bereitstellung einer umfangreichen Rechenkapazität für die Projekte der beteiligten Forschergruppen ein fachübergreifendes Forum auf dem Gebiet Computational Science in Form von interdisziplinären Vorträgen. Darüber hinaus bietet das CSC einen zweijährigen, englischsprachigen Masterstudiengang in Computational Science an. Der Studiengang ist in modularer Form konzipiert, so dass alle Studienleistungen in Form von international anerkannten Credit Points gemäß dem European Credit Transfer System bewertet werden. Die durchweg in englischer Sprache gehaltenen Kurse eröffnen auch ausländischen Studierenden eine interdisziplinäre Ausbildung in allen Bereichen der Computer Simulation.

Die Forschungsaktivitäten der am CSC arbeitenden Wissenschaftlern umfassen eine große Zahl von Projekten mit hohem numerischen Aufwand. Die Projekte, die auf dem CSC-Cluster bearbeitet werden, umfassen eine weite Spanne aktueller Themenbereiche. Sie erstrecken sich über so unterschiedliche Gebiete wie die Untersuchung der Strukturen von Proteinen in der Biochemie und die Eigenschaften von Kristallen unter höchstem Druck in der Geophysik. Die Dynamik der Grundbausteine der Materie, den Quarks und Gluonen, im Urknall und bei Hochenergieexperimenten werden in der theoretischen Physik auf dem CSC simuliert. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies modellieren komplexe atomare Strukturen und untersuchen die Möglichkeiten der Krebstherapie mit Schwerionenstrahlen.

Der Hochleistungsrechner des CSC besteht aus 3 Linux MPP-Cluster, die über das schnelle universitätsweite Netz (10Mb/s) verbunden sind.

CSC I wurde im Jahr 2003 beschafft und besteht aus 70 Knoten mit jeweils 2 Intel Xeon, 2.4 GHz, CPUs. Jeder Server ist mit 2 Gigabyte Hauptspeicher ausgerüstet. Eine Partition mit 32 Knoten (70 Prozessoren) ist über ein latenzarmes Myrinet-Netz verbunden, um schnelle Kommunikation für parallele Programme zu ermöglichen.

CSC II wurde 2004 in Betrieb genommen. Die Anlage besteht aus 10 wassergekühlten Racks, die 282 Rechenknoten enthalten, die mit jeweils 2 64bit Opteron CPUS mit einer Taktrate von 1.8 GHz bestückt sind. Die Knoten sind standardmäßig mit 4 GByte Hauptspeicher ausgerüstet. 15 Knoten wurden auf 8 Gbyte, weitere 15 auf 16 GByte Speicher aufgerüstet. 64 Knoten sind mit Myrinet schnell vernetzt, die übrigen Knoten mit Gigabit Ethernet verbunden. Das RAID-System verfügt

über 10 TByte Plattenplatz.

Der dritte Cluster CSC III wurde in 2006 zur Benutzung freigegeben. Er besteht aus 251 Knoten, die jeweils mit 2 Dual-Core 2GHz Opteron CPUs ausgestattet sind. Jeder Knoten verfügt über 8 GByte Hauptspeicher, zusätzlich sind 44 Knoten auf 16 GByte aufgerüstet worden. 64 der Knoten sind mit Myrinet vernetzt. Ein Raid-System stellt 25 TByte Speicherplatz zur Verfügung.

Durch den stetigen Ausbau verfügt das CSC damit über ein MPP-System aus insgesamt 1708 Prozessoren mit einer theoretischen Rechenleistung von etwa 6.4 TFlop/s. Es werden eine Vielzahl von Softwarepaketen und Compilern zur Verfügung gestellt. Die Datensicherung aller Systeme erfolgt über das Backup-System des Hochschulrechenzentrums der Universität.

Mehr als 360 Nutzer in über 60 Arbeitsgruppen aus dem Bereich der Naturwissenschaften, Mathematik und Informatik sorgen für eine vollständige Auslastung des Rechners über das ganze Jahr. Etwa ein Drittel der verfügbaren Rechenzeit wird von Gruppen aus Darmstadt, Marburg, Gießen und Kassel verbraucht.

Die Finanzierung der Anlage erfolgte überwiegend durch Beiträge Frankfurter Hochschullehrer und -Institutionen, sowie Zuschüsse des Landes Hessen und des Bundes (im Rahmen des Hochschulbau-Förderungsgesetzes). Über den Verbund der Hessischen Hochleistungsrechner (HHLR) haben Wissenschaftler aller hessischen Hochschulen Zugang zu den Computersystemen des CSC.

## 3.2 Der HHLR am Forschungszentrum Computational Engineering (CE) in Darmstadt

### 3.2.1 Systemaufbau

Der Hessische Hochleistungsrechner besteht aus 64 SMP-Knoten unterschiedlicher Leistungsfähigkeit mit insgesamt 520 Power-Prozessoren. Der Zugang erfolgt über einen speziellen Loginknoten. Auf diesem kann der Nutzer seine Programme vorbereiten, sowie Daten analysieren und abholen. Compute-Knoten im Backend sind für den Nutzer nicht direkt zugänglich, sondern werden über ein Queuing-System angesprochen. 60 dieser Rechen-Knoten sind mit, jeweils acht Power5 CPUs ausgestattet zwei weiter verfügen über je 16 Power5+ Prozessoren. Die Power5-Prozessoren sind in der Lage vier Floatingpoint-Operationen pro Tackt auszuführen und haben einen Cache von 36MB im Prozessor integriert. Damit eignen sie sich besonders gut für HPC-Andendungen.



Als Shared Memory Rechner (SMP) sind die Maschinen besonders gut für parallele Probleme mit hohem Kommunikationsbedarf geeignet. Um auch Programme, die mehr als einen SMP-Knoten benötigen, effektiv verarbeiten zu können, sind die Rechner untereinander mit einem schnellen internen Netzwerk verbunden (IBM High Performance Switch (HPS)).

Das Hochschulrechenzentrum (HRZ) der TU Darmstadt betreibt das Rechnersystem im Auftrag des HHLR-Beirats sowie der Kompetenzgruppe wissenschaftliches Hochleistungsrechnen im Forschungszentrum Computational Engineering (CE).

### 3.2.2 Auslastung des HHLR

Der Rechner wurde im November 2005 ausgebaut. Bereits im Januar 2006 wurde von den Nutzern mehr Rechenzeit abgerufen, als vor dem Ausbau verfügbar war. In der ersten Jahreshälfte ist die Nutzung kontinuierlich angestiegen. In der zweiten Hälfte 2006 ist sie jedoch wieder etwas zurück gegangen. Seit Dezember 2006 ist ein erneuter Anstieg der zu erkennen. Der Einbruch im Februar 2007 ist auf eine 14-tägigen Ausfall des Systems (Ausfall der Klimatisierung) zurückzuführen.

Seit März 2007 ist das System mit 300.000 CPUh/Monat defakto an der Auslastungsgrenze. Theoretisch könnte das System zwar 374.400 CPUh im Monat abgeben, in der Praxis ist es auf einem System mit dieser Jobstruktur aber nur schwer möglich eine deutlich besser Auslastung als 80% zu erreichen.

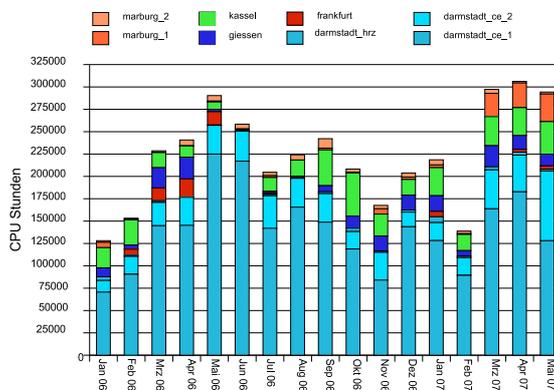


Abbildung 3.1: Verteilung der Rechenzeit auf die einzelnen Universitäten

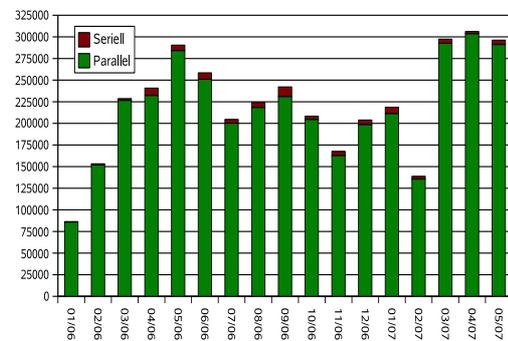


Abbildung 3.2: Verteilung der Rechenzeit auf Serielle- und Parallelejobs

### Jobprofil des HHLR

Der HHLR ist speziell für die effektive Verarbeitung von parallelen Job konzipiert. Durch den Aufbau aus Mehrprozessorrechnern (8-Wege SMP mit hoher Memorybandbreite) können auch Problem mit starker Kopplung effektiv auf dem System verarbeitet werden. Ein Teil der Knoten ist untereinander nochmal mit einem sehr schnellen Netzwerk (HPS) gekoppelt. Auf dieser HPS-Partition können Job mit bis zu 128 CPUs effektiv laufen. In Abbildung 3.2 ist zu erkennen, dass diese Auslegung des Systems durch die Nutzung des Rechners voll bestätigt wird. Auf dem Rechner laufen fast ausschließlich parallele Rechnungen. 2006 wurde die meiste Rechenleistung am HHLR für 8-fach-parallele Jobs aufgewendet. 65% der Rechenzeit wurde für sie aufgewendet. Fast 19% der Rechenzeit ging an Jobs mit 16 oder mehr Prozessoren. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass durch den Aufbau des Rechners Jobs die maximal 8 CPUs benutzen im Scheduling und bei der Verarbeitung im Vorteil sind. Die Nachfrage nach stärker parallelen Jobs kann durch die begrenzten Ressourcen am HPS nicht immer befriedigt werden. Es ist aber ein klarer Trend zu stärkerer Parallelisierung zu erkennen.