



## EDITORIAL

Mit dem neuen Höchstleistungsrechner tritt das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften in eine neue Epoche modernster Informationstechnologie. Damit können nicht nur die heute notwendigen Kommunikationsleistungen auf einem hohen Niveau gesichert und ausgebaut werden. Angesichts einer Rechnerleistung, die das menschliche Vorstellungsvermögen weit übersteigt, eröffnen sich für die beiden Münchner Universitäten und weitere Nutzer neue, noch nicht absehbare Forschungsmöglichkeiten.



ARCHIV

Die Bayerische Akademie der Wissenschaften hat bei der Gründung des Rechenzentrums im Jahre 1964 Pate gestanden und seitdem das atemberaubende, so von niemand vorhergesehene Wachstum seines Zöglings begleitet und unterstützt. Darüber und über die heute erreichten Dimensionen und Zukunftsperspektiven informieren die reichhaltigen Beiträge des vorliegenden Sonderhefts unserer Zeitschrift.

Die Akademie dankt im Namen der Wissenschaft dem Freistaat Bayern und der Bundesrepublik Deutschland für die verständnisvolle und großzügige Förderung dieses ungewöhnlichen Projekts. Und sie dankt allen Mitarbeitern des Leibniz-Rechenzentrums mit Herrn Kollegen Heinz-Gerd Hegering an der Spitze für ihren engagierten Einsatz beim Umzug nach Garching, der ohne fühlbare Einbußen der „Kundschaft“ bravourös bewältigt wurde.

*Dietmar Willoweit  
Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften*

## INHALT. AUSGABE 02/2006. HEFT 17

## GRUSSWORTE

- 4 Annette Schavan
- 5 Edmund Stoiber
- 6 Thomas Goppel
- 7 Manfred Solbrig
- 8 Wolfgang A. Herrmann
- 9 Bernd Huber

## NACHBARN

- 10 Herzlich Willkommen!

## AUFGABEN

- 12 Das Leibniz-Rechenzentrum – die Einrichtung und ihre Aufgaben

## ARCHITEKTUR

- 16 Der Neubau in Garching

## DIENSTLEISTUNGEN

- 20 Am Kabel hängt alles
- 22 Lang ist relativ kurz
- 26 Das Ende der Warteschlange – Identity Management an den Universitäten
- 28 Virtuelle Welten – ganz real

## FORSCHUNG

- 34 Forschung und Entwicklung am LRZ

## HÖCHSTLEISTUNGSRECHNEN

- 38 Höchstleistungsrechnen am LRZ und sein Umfeld
- 40 Der neue Höchstleistungsrechner in Bayern: SGI Altix 4700
- 44 Quantenmechanische Modellierung heterogener Katalysatoren
- 47 Erdbenforschung durch Höchstleistungsrechnen
- 51 Die faszinierende Welt der Katalyse
- 54 Ein Kosmos im Kleinen
- 56 Selbstorganisation auf molekularer Ebene
- 59 Den Rätseln der Sternexplosion auf der Spur
- 64 Entwicklung der Strömungsmechanik
- 71 Direkte Numerische Strömungssimulation

## ÜBERBLICK

- 74 Das LRZ in Zahlen



BMBF+T

# Exzellenz im wissenschaftlichen Rechnen

GRUSSWORT DER BUNDESMINISTERIN FÜR BILDUNG UND FORSCHUNG,  
DR. ANNETTE SCHAVAN.



**Bundesministerin  
Dr. Annette Schavan.**

**E**xzellenz in der Forschung ist ohne Exzellenz im wissenschaftlichen Rechnen nicht mehr möglich. Neben Theorie und Experiment hat sich das wissenschaftliche Rechnen in einer Vielzahl von Disziplinen als dritte Säule von Wissenschaft und Forschung etabliert. Höchstleistungsrechner spielen dabei eine besondere Rolle. Ihr Einsatz ist mehr und mehr Voraussetzung für international konkurrenzfähige Forschung. Ihre Rechnungen führen oft kostengünstiger und wesentlich schneller zum Ziel als langwierige und teure Experimente. Das gilt gleichermaßen für Anwendungen in Wissenschaft,

Industrie und Wirtschaft, etwa bei der Berechnung und Simulation komplexer Probleme und Prozesse in den Materialwissenschaften, der Quanten-, Plasma- und Astrophysik, aber auch bei der Entwicklung und dem Bau von Fahrzeugen.

Durch die drei Höchstleistungsrechenzentren in Jülich, München und Stuttgart ist Deutschland auf diese Herausforderungen gut vorbereitet. Mit der jetzt beginnenden, in zwei Stufen erfolgenden Installation des neuen Höchstleistungsrechners am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften wird der Forschungsstandort Deutschland weiter gestärkt. Die Gesamtkosten von rund 80 Millionen Euro werden im Rahmen des Hochschulbauförderungsgesetzes gemeinsam vom Freistaat Bayern und der Bundesrepublik Deutschland finanziert.

Damit wird auch das LRZ weltweit einen Platz in der ersten Liga der wissenschaftlichen Höchstleistungsrechenzentren einnehmen und seinen wachsenden Aufgaben als wichtiger Partner im Rahmen der D-Grid-Initiative gerecht werden.

Um auch zukünftig im internationalen Vergleich wettbewerbsfähig zu bleiben und die Entwicklung aktiv mitzugestalten, unterstützt das BMBF die Vernetzung der deutschen Höchstleistungsrechenzentren untereinander und mit ihren Nutzern. Hier kommt modernste Technologie zum Einsatz. So wird der Zugang zu den Zentren nochmals verbessert, die Arbeitsbedingungen werden erheblich erleichtert.

Das LRZ ist dabei mit seinem Know-how und seiner effizienten Infrastruktur ein starker Partner. Ein neuer leistungsfähiger Höchstleistungsrechner, innovative Konzepte der Nutzung, ein hervorragendes Umfeld – die Voraussetzungen, um neue Herausforderungen exzellent zu meistern, sind geschaffen. Ich bin sicher, das LRZ wird sich gemeinsam mit den Partnern erfolgreich neuen Aufgaben stellen und seinen Beitrag zum hohen Niveau der technologischen Leistungsfähigkeit in Deutschland leisten. Dafür wünsche ich dem LRZ auch in Zukunft viel Erfolg.

*Dr. Annette Schavan, MdB  
Bundesministerin für Bildung und  
Forschung*





BAYERISCHE STAATSREGIERUNG

# Bayern investiert in Wissen!

GRUSSWORT DES BAYERISCHEN MINISTERPRÄSIDENTEN  
DR. EDMUND STOIBER.

**H**erzlich grüße ich alle Leserinnen und Leser der Sonderausgabe der Zeitschrift Akademie Aktuell.

Die Einweihung des Neubaus des Leibniz-Rechenzentrums auf dem Forschungsgelände in Garching ist allemal eine Sonderausgabe wert. Mit dem neuen Institutskomplex wird die Leistungsfähigkeit des weltweit renommierten Leibniz-Rechenzentrums noch einmal entscheidend gestärkt. Das bedeutet nicht nur eine grundlegende

Verbesserung der Forschungsbedingungen am Rechenzentrum selbst, sondern es ist auch ein Zeichen der Verlässlichkeit für den Kurs, den die Staatsregierung auf dem Gebiet der Wissenschaftspolitik schon vor vielen Jahren eingeschlagen hat: Bayern investiert in Wissen!

Diesen Kurs setzen wir in einer Zeit fort, in der Bayern seine Entschlossenheit, verantwortungsbewusste Haushaltspolitik zu betreiben, eindrucksvoll unter Beweis gestellt hat. Bayern ist derzeit das einzige

Land der Bundesrepublik, das seine Investitionen ohne Neuverschuldung finanzieren kann. Das ist das Ergebnis einer konsequenten Finanzplanung. Sie verlangt nicht zuletzt ein hohes Maß an Disziplin, denn selbstverständlich bedeutet sie, viele Projekte zurückzustellen, die an sich durchaus wünschenswert wären.

Aber das Wünschenswerte muss hinter dem Unverzichtbaren zurückstehen. Unverzichtbar – das ist die Stabilität des Haushalts. Unverzichtbar für die Zukunftsfähigkeit des Freistaats ist aber auch die Stärkung des Wissenschaftsstandortes Bayern. Deshalb muss gerade in dieser Zeit ein Vorhaben wie der Neubau des Leibniz-Rechenzentrums verwirklicht werden. Und deshalb haben wir Politiker das Unsere getan.

Nun ist es an den Wissenschaftlern, das Ihre zu tun. Dann wird ihr Erfolg unsere Entscheidung bestätigen!

*Dr. Edmund Stoiber  
Bayerischer Ministerpräsident*



**Ministerpräsident  
Dr. Edmund Stoiber.**

BAYERISCHES STAATSMINISTERIUM FÜR WISSENSCHAFT, FORSCHUNG UND KUNST

# Eine weitere Perle der Wissenschaft

GRUSSWORT DES BAYERISCHEN STAATSMINISTERS FÜR WISSENSCHAFT, FORSCHUNG UND KUNST DR. THOMAS GOPPEL.



Staatsminister  
Dr. Thomas Goppel.

Auf dem Garching Campus sind exzellente Forschungs- und Lehrreinrichtungen dicht aneinander gereiht. Mit dem Neubau des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ) wird dieser Kette jetzt eine weitere Perle der Wissenschaft hinzugefügt.

Nicht nur die Akademie und die Münchner Hochschulen, deren gemeinsames Rechenzentrum das LRZ darstellt, werden von einer umfassenden IT-Infrastruktur auf höchstem Niveau profitieren. Das neue Leibniz-Rechenzentrum ist für die gesamte bayerische Hochschullandschaft von herausragender Bedeutung – bietet es doch in Zusammenarbeit mit den Universitätsrechenzentren IT-Kompetenz und Rechenleistung für das ganze Land!

Zugleich mit dem Gebäude wird der neue „Höchstleistungsrechner in Bayern“ in Betrieb genommen. Mit diesem bundesweit zugänglichen Forschungsgerät wird das Leibniz-Rechenzentrum seine nationale und internationale Stellung auf dem Gebiet des High Performance Computing weiter ausbauen – zumal das wissenschaftliche Rechnen zu einer bedeutenden Schlüsselkompetenz für die Natur-, Lebens- und Ingenieurwissenschaften sowie für die Technologieentwicklung geworden ist. Dabei unterstützen wir das Leibniz-Rechenzentrum nach ganzen Kräften!

Doch wären selbst die hochwertigsten technischen Geräte wertlos ohne die spezialisierten, qualifizierten und engagierten Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Sie finden jetzt in den neuen Räumen zeitgemäße und modernste Arbeitsbedingungen vor. Ihnen und allen anderen,

die mitgeholfen haben und weiterhin dabei mithelfen, das Leibniz-Rechenzentrum zu einem Leuchtturm im Wissenschaftsland Bayern zu machen, gilt mein herzlicher Dank. Den Wissenschaftlern und Studierenden wünsche ich, dass sie die neu geschaffenen Möglichkeiten mit großem Erfolg nutzen können.

Dr. Thomas Goppel  
Bayerischer Staatsminister  
für Wissenschaft,  
Forschung und Kunst



UNIVERSITÄTSSTADT GARCHING

# Ein Glücksfall für Garching

GRUSSWORT DES ERSTEN BÜRGERMEISTERS DER UNIVERSITÄTSSTADT GARCHING BEI MÜNCHEN MANFRED SOLBRIG.

Zugegeben – ihre weithin wahrgenommene Exzellenz verdankt die Universitätsstadt Garching bei München in manchen Bereichen nicht allein der Technischen Universität, sondern auch und vor allem deren Kooperation mit herausragenden Forschungseinrichtungen, die in diesem Bereich außerhalb der Universität angesiedelt sind.

Und so sehe ich es gerade für die Wissenschaft und Forschung in Garching als weiteren Glücksfall, dass vor nunmehr gut sechs Jahren die Bayerische Akademie der Wissenschaften den Entschluss gefasst hat, das Leibniz-Rechenzentrum auf den Hochschulcampus nach Garching zu verlegen und damit das anregende Umfeld der Universität in Garching weiter zu verstärken, das sowieso schon so vorzüglich besetzt war.

Der Neubau auf dem Forschungscampus in Garching beherbergt jetzt ja das ganze Leibniz-Rechenzentrum und insbesondere auch den neuen Höchstleistungsrechner. Die langjährige Zersplitterung auf mehrere Standorte hat damit endlich ein Ende.

Als eines der größten technisch-wissenschaftlichen Rechenzentren wird das Leibniz-Rechenzentrum nach meiner Meinung in Zukunft auch ein besonders wichtiger und innovativer Teil des Hochschul- und Forschungszentrums Garching sein. Gleichzeitig stellt der Neubau einen

weiteren wichtigen Mosaikstein für den Hochschulcampus Garching – und somit die Stadt – als Standort für Spitzenforschung und Hochtechnologien dar.

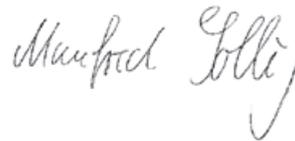
Für Garching ist Zukunftsorientierung und Weltoffenheit ein wichtiger Bestandteil des Städtelebens. Für die Stadt ist das Hochschul- und Forschungszentrum von großer Bedeutung und auch prägend für die Entwicklung. Garching hat mittlerweile ca. 9.000 Studenten in den verschiedenen Fakultäten. Über 5.000 Arbeitnehmer sind auf dem Campus beschäftigt. Dementsprechend wichtig ist es mir und auch dem Stadtrat, dass die Weiterentwicklung des Forschungs- und Hochschulgeländes vorangeht.

Auch außerhalb des Hochschul- und Forschungszentrums wird gerade im Bereich Infrastruktur viel getan – auch damit die Stadt für die Studenten und die Arbeitnehmer am Campus attraktiver wird. Als ein Paradebeispiel möchte ich hier nur den Bau der U-Bahn nennen, die wir Oktober dieses Jahres eröffnen dürfen. Damit wird sicherlich ein weiteres Zeitalter in der Entwicklung der Universitätsstadt Garching bei München aufgeschlagen.

In diesem Sinne wünsche ich dem Leibniz-Rechenzentrum und seinen Nutzern hier in Garching bei

München eine erfolgreiche, eine glänzende Zukunft. Dem weiteren kraftvollen Wachstum der bereits angesiedelten und noch dazu kommenden Fakultäten und Instituten steht jetzt jedenfalls *hardwaremäßig* nichts mehr im Wege.

Nochmals alles Gute und viel Erfolg!



Manfred Solbrig  
Erster Bürgermeister



Erster Bürgermeister  
Manfred Solbrig.



TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN

# Gemeinsamer Dienstleister für die Münchener Hochschulen

GRUSSWORT DES PRÄSIDENTEN DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT MÜNCHEN  
 PROF. DR. WOLFGANG A. HERRMANN.



Präsident Prof. Dr.  
 Wolfgang A. Herrmann.

Mit dem Neubau des Leibniz-Rechenzentrums etabliert sich das Münchener Supercomputing-Zentrum auf dem Garching Campus, der sich zu den stärksten Wissenschaftszentren Europas entwickelt.

Das LRZ schafft sich damit ein ideales Umfeld, um sein äußerst erfolgreiches Modell „Gemeinsamer Dienstleister für die Münchener Hochschulen“ in den Bereichen Netzanbindung, Höchstleistungsrechnen und IT-Administration optimal auszubauen. Die Bereitstellung der notwendigen Infrastruktur und Dienstleistungen für die Nutzer sowie Forschung sind die unmittelbaren Aufgaben des LRZ. Dem „Kompetenzzentrum

der Netze“ gelang es bereits, wertvolle Synergien durch die Nutzung gemeinsamer Infrastrukturen zwischen den Münchener Universitäten und Hochschulen zu schaffen. Die neuen Räumlichkeiten und der Einsatz des neuen Bundeshöchstleistungsrechners HLRB II werden insbesondere eine Verbesserung des Dienstleistungsangebots ermöglichen. Vorbereitet wurde die Standortentscheidung durch die Verlagerungen der Fakultäten Informatik und Mathematik von München nach Garching. In einem logischen Schritt folgte das LRZ, dem wir gerne das erforderliche Areal zur Verfügung gestellt haben. Beide Einrichtungen, das LRZ und die TU München, profitieren von der künftigen räumlichen Nähe: Das LRZ, weil die Fakultäten Mathematik und Informatik mit Algorithmen und Werkzeugen für parallele Rechner wichtige Querschnittsdienste im Rahmen des Bayerischen Kompetenznetzwerks für wissenschaftlich-technisches Hoch- und Höchstleistungsrechnen KONWIHR entwickeln und zur Nutzung bereit stellen. Die TU München, weil die Nähe zu den Anwendern in den Fakultäten Physik, Chemie und Maschinenwesen – und hoffentlich bald der Elektro- und Informationstechnik - das Angebot

des LRZ langfristig verbessern wird. Darüber hinaus spielt das „Kompetenzzentrum der Netze“ im Projekt „IntegraTUM“ der TU München eine zentrale Rolle. Dieses Projekt, das durch eine starke Drittmittelförderung über die Universität hinaus Unterstützung findet, dient der Schaffung von Informationsinfrastrukturen zur Effizienzverbesserung von Forschung, Lehre und Verwaltung. Um eine nahtlose IT-Infrastruktur zu erreichen, ist eine enge Zusammenarbeit zwischen der TU München und dem LRZ erfolgsentscheidend. Ich heiße das LRZ-Team auf dem Garching Campus herzlich willkommen und setze auf eine gute Partnerschaft. Einen persönlichen Willkommensgruß übermittle ich stellvertretend Herrn Professor Hegering, Direktor des LRZ, der neben seiner Professur für Informatik an der LMU auch Mitglied der Fakultät für Informatik der TUM – und Garchinger Bürger ist.

Prof. Dr. Wolfgang A. Herrmann  
 Präsident der Technischen Universität München



LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

# Das LRZ – ein unverzichtbarer Partner

GRUSSWORT DES REKTORS DER  
LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN PROF. DR. BERND HUBER.

Die rasante Entwicklung auf dem Gebiet der Informations- und Kommunikationstechnologien in den vergangenen Jahrzehnten hat auch die wissenschaftliche Arbeit in vielfältiger Art und Weise revolutioniert. So hat die Nutzung leistungsfähiger Rechnersysteme für Simulationen und numerische Modellierungen neue Forschungsrichtungen eröffnet. Der Einsatz moderner Kommunikationstechniken und elektronischer Datenverarbeitung ist in allen wissenschaftlichen Bereichen selbstverständlich und unerlässlich geworden. Internet und E-Mail möchten wir heute nicht mehr missen.

Das Leibniz-Rechenzentrum, 1964 von der Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften als gemeinsames Rechenzentrum für Forschung und Lehre der Münchner Hochschulen ins Leben gerufen, zählt heute zu den bedeutendsten Rechenzentren in Deutschland. Neben Höchst- und Hochleistungsrechner für wissenschaftliche Anwendungen betreibt es mit dem Münchner Wissenschaftsnetz das Rückgrat der elektronischen Infrastruktur am Wissenschaftsstandort München.

Aufgrund seiner herausragenden Kompetenz auf dem Gebiet der Informations- und Kommunikationstechnologien ist das Leibniz-Rechenzentrum heute mehr denn je ein unverzichtbarer Partner für die

Ludwig-Maximilians-Universität München. Dies belegen insbesondere zahlreiche LMU-Projekte auf den Gebieten unter anderem der Astrophysik, Biophysik, Quantenchemie, Kristallographie und Seismologie, die den Höchstleistungsrechner des LRZ nutzen, aber auch die Sicherstellung des für uns ganz alltäglichen und in der Summe enormen Informationsflusses via Internet und E-Mail.

Das Leibniz-Rechenzentrum ist zudem ein zentraler Bestandteil des Münchner Zentrums für Computational Sciences, durch dessen Gründung im Juli des vergangenen Jahres die Kräfte am Standort München auf dem Gebiet der computergestützten Forschung gebündelt und die Bedingungen für ein europäisches Höchstleistungsrechenzentrum entscheidend verbessert werden.

Der Neubau des Leibniz-Rechenzentrums auf dem Forschungscampus Garching beendet die seit Jahren bestehende Raumnot des LRZ am Standort in der Münchner Innenstadt und ist ein Meilenstein für den Betrieb des neuen Bundeshöchstleistungsrechners HLRB II und für zukünftige Vorhaben auf dem Gebiet des Super-Computing.



**Rektor Prof. Dr.  
Bernd Huber.**

Zu ihrem neuen Leibniz-Rechenzentrum beglückwünsche ich das Direktorium und alle Mitarbeiter im Namen der LMU München herzlich und verbinde dies mit dem Wunsch auf eine weiterhin gute und erfolgreiche Zusammenarbeit.

*Prof. Dr. Bernd Huber  
Rektor der Ludwig-Maximilians-  
Universität München*



BEGRÜSSUNG

# Herzlich willkommen!

DAS LEIBNIZ-RECHENZENTRUM FÜGT SICH IN EINEN FORSCHUNGSINTENSIVEN HOCHSCHULCAMPUS IN GARCHING HERVORRAGEND EIN.

**Technische Universität München**

**Prof. Dr. Johannes Buchner, Dekan der Fakultät für Chemie**



Stellvertretend für alle 12 Fakultäten der TU München begrüßen wir Garchinger Dekane der Mathematik, Informatik, Chemie, Physik und des Maschinenwesens das LRZ auf unserem Campus. Die Dienstleistungen des LRZ für Kommunikationsinfrastrukturen bis hin zum Höchstleistungsrechnen werden wir künftig noch intensiver nutzen und das LRZ in vielen gemeinsamen Projekten wissenschaftlich begleiten.

*Prof. Dr. Johann Schlichter  
Dekan der Fakultät für Informatik*



**Prof. Dr. Martin Brokate, Dekan der Fakultät für Mathematik.**



**Ludwig-Maximilians-Universität München**

Die ganze LMU nutzt die bewährten Dienste des LRZ. Durch die unmittelbare Nachbarschaft in Garching wird vor allem das Grid Computing im LHC-Projekt (Large Hadron Collider des CERN) zu einem neuen Schwerpunkt der Kooperation.

*Prof. Dr. Dorothee Schaile  
Dekanin der Fakultät für Physik*

**Prof. Dr. Udo Lindemann, Dekan der Fakultät für MW**

**Forschungsreaktor München II**

Die Heinz Maier-Leibnitz Forschungsneutronenquelle begrüßt mit dem LRZ der Bayerischen Akademie der Wissenschaften auf dem Campus Garching eine weitere Großforschungseinrichtung mit



Weltruf. Und ganz speziell freuen wir uns darauf, mit ihrem leistungsstarken vektoriellen Rechnern die Neutronenflüsse unserer Neutronenquelle simulieren zu können.

*Prof. Dr. Winfried Petry, wissenschaftlicher Direktor der Forschungsneutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II)*



**Prof. Dr. Alfred Laubereau, Dekan der Fakultät für Physik**





### Max-Planck-Institute und Rechenzentrum der Max-Planck-Gesellschaft



Die Garching Max-Planck-Institute begrüßen den neuen Nachbarn LRZ sehr herzlich. Wir sind über das MCSC (Munich Computational Science Center) unmittelbar mit dem LRZ verbunden und werden künftig das Leistungsspektrum vor allem im Bereich des wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnens verstärkt nutzen.

*Stefan Heinzl, Leiter des Rechenzentrums der MPG*



**Prof. Dr. Alexander Bradshaw,**  
MPI für Plasmaphysik

### Bayerische Staatsbibliothek München

Die Bayerische Staatsbibliothek, die in Garching ihre Speicherbibliothek mit 5 Millionen Bänden betreibt, freut sich auf die Kooperation mit dem LRZ am neuen Standort.



Insbesondere in den Bereichen der digitalen Langzeitarchivierung und des Serverhostings für den Bayerischen Bibliotheksverbund sehen wir einer engen Zusammenarbeit entgegen, die durch die räumliche Nähe noch effektiver wird.

*Dr. Rolf Griebel,*  
Generaldirektor der Bayerischen Staatsbibliothek



**Prof. Dr. Ignacio Cirac,**  
MPI für Quantenoptik

### General Electric



**Prof. Dr. Reinhard Genzel,** MPI für extraterrestrische Physik

Der Austausch mit führenden Forschungsinstitutionen am High-Tech-Standort München war ein wichtiges Argument für die Etablierung des GE - Global Research Centers Europe in Garching. In diesem Zusammenhang freuen wir uns sehr auf die erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem Leibniz-Rechenzentrum, einer hoch innovativen Infrastruktur-einrichtung für Forschung in Garching.

*Dr. Arnim Pföh, GE*

### European Southern Observatory

ESO, die Europäische Organisation für astronomische Forschung in der südlichen Hemisphäre, mit seinem Standort Garching ist stolz auf das neue Hightech-Zentrum in unmittelbarer Nachbarschaft.



*Frau Dr. Cesarsky, ESO*



**Prof. Dr. Simon White,**  
MPI für Astrophysik



ZEITGESCHICHTE

# Das Leibniz-Rechenzentrum – die Einrichtung und ihre Aufgaben

EIN RÜCKBLICK UND EIN AUSBLICK AUF DIE AUFGABENSTELLUNGEN EINES RECHENZENTRUMS VON EUROPÄISCHEM RANG.



Gottfried Wilhelm  
Leibniz (1646–1716).

VON HEINZ-GERD  
HEGERING

**E**in Komplettumzug eines sehr großen technisch-wissenschaftlichen Rechenzentrums kommt nicht allzu oft vor. Solch ein Ereignis stellt eine Riesenherausforderung für viele dar, für die Finanzgeber, für die Planer, für die Bauausführung, für die Nutzer, für die Systeme und, last but not least, für die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Aber einhergeht auch eine Riesenchance für eine Weiterentwicklung im Hinblick auf ein verbessertes und neuartiges Dienstleistungsportfolio, eine moderne und konsolidierte Systemlandschaft, eine leistungsfähige IT-Infrastruktur sowie eine angemessene räumliche

Unterbringung, und das alles in einem förderlichen Umfeld. Dies dient Nutzern und Mitarbeitern.

## Von der Richard-Wagner-Straße in die Barer Straße

Für das Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) der Bayerischen Akademie der Wissenschaften ist der Umzug nach Garching der zweite Umzug in seiner Geschichte. Im März 1964 nahm das Rechenzentrum, das zunächst Akademie-Rechenzentrum genannt wurde, seinen Betrieb in München in der Richard-Wagner-Straße 18 auf. Seit Juli 1966 führt es zu Ehren des Erfinders der ersten Vier-Spezies-Rechenmaschine den Namen Leibniz-Rechenzentrum.



In der Richard-Wagner-Straße 18 war von 1964 bis 1971 die erste Heimat des LRZ.

Im August 1970 fand der erste Teilumzug in den Neubau an der Barer Straße 21 statt, der das LRZ bis zum Umzug nach Garching an die Boltzmannstraße 1 im Mai 2006 beherbergte. Dieser Umzug ist Anlass genug, die Einrichtung und die Aufgaben des LRZ zusammenfassend darzustellen.

## Die Gründungsphase

Am 8. Mai 1956 erfolgte die Inbetriebnahme der PERM (*Programmgesteuerte elektronische Rechanlage München*), die an der TU München unter Leitung der Akademie-Mitglieder Hans Piloty und Robert Sauer erbaut worden war. Die zu geringe Rechenkapazität und die wachsende Bedeutung der Informationsverarbeitung führten auf Betreiben von Piloty und Sauer am 07.03.1962 zur Gründung der Akademie-Kommission für elektronisches Rechnen, die 1975 in Kommission für Informationsverarbeitung und 1990 in Kommission für Informatik umbenannt wurde. Diese Kommission beschloss, mit Unterstützung durch den Freistaat Bayern ein Rechenzentrum, das spätere LRZ, zu errichten und Forschung auf dem Gebiet der Informatik zu betreiben.

Die Entwicklung des LRZ wurde maßgeblich mitgestaltet von den Mitgliedern der Kommission, allen voran deren Sekretären



F. L. Bauer und Christoph Zenger, den Mitgliedern des Direktoriums (im Verlauf der Zeit die Professoren Bauer, Bode, Bross, Hämmerlin, Hegering, Samelson, Seegmüller, Siegert, Zenger) und den wissenschaftlichen Leitern des LRZ (Gerhard Seegmüller 1971–1988, Christoph Zenger kommissarisch 1988/89, Heinz-Gerd Hegering ab März 1989).

### Rechensysteme am LRZ

Am LRZ waren in über 40 Jahren etliche Systemgenerationen installiert. Diese Systeme folgten der rasanten Entwicklung der Rechensysteme einerseits, aber auch dem wachsenden Bedarf der stets steigenden Nutzerschaft.

Gestartet wurde am LRZ 1964 mit der Rechenanlage TR4 der Firma AEG-Telefunken, es folgten 1970 ein TR440 Monoprozessor- (später Doppelprozessor-)System von AEG-Telefunken, ab 1977 Cyber175-Systeme von Control Data, 1985 Cyber875, 1986 Cyber990-Systeme, ab 1999 diverse offene UNIX-basierte Systeme.

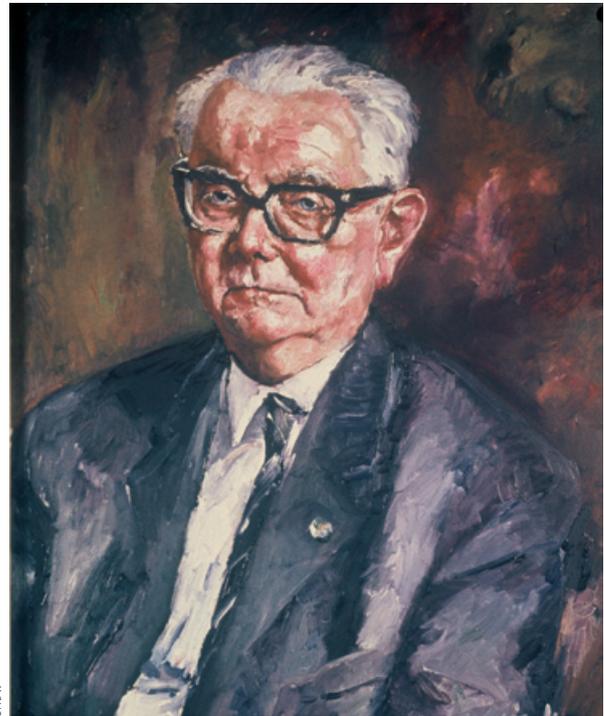
Parallel dazu wurden ab 1988 Hochleistungssysteme betrieben, so

1988 Cray-XMP, 1989 Cray-YMP 4/464, 1993 Cray-YMP 8/8128, 1992 SNI-KSR1-32, 1995 IBM 9076 SP2/77, 1998 Siemens/Fujitsu VPP 700/52, 2000 Hitachi SR8000-F1, 2002 IBM p690 HPC, 2005 SGI Altix 3700 BX2, ab 2006 SGI Altix 4700.

Ab 1977 entstand ein umfangreiches Datenfernzugriffsnetz, das sich im Laufe der Jahre zu dem respektablen Münchner Wissenschaftsnetz (MWN) entwickelte, an dem derzeit fast 60.000 Systeme angeschlossen sind.

### Die Hauptaufgaben des LRZ

Diese nüchterne Auflistung von Systemnamen spiegelt in Wirklichkeit eine atemberaubende Aufwärtsentwicklung des LRZ wider, mit der eine für die Entwicklung des Wissenschaftsstandorts München beispielhafte DV-Durchdringung aller Einrichtungen einherging, die u. a. eine wichtige Einflussgröße für die Wettbewerbsfähigkeit der hiesigen Wissenschaftsinstitutionen ist. Die Bereitstellung innovativer IT-Dienste und -Infrastrukturen und begleitende Forschungs- und Entwicklungsarbeiten sind schließlich das „Kerngeschäft“ des LRZ.



BADW

- Das Leibniz-Rechenzentrum ist
- wissenschaftliches Rechenzentrum für die Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU), die Technische Universität München (TUM), die Fachhochschule München (FHM) und die Bayerische Akademie der Wissenschaften,
  - Zentrum für technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen (bayerisches und nationales Supercomputing-Zentrum),
  - Zentrum für langfristige Datenarchivierung und automatische Datensicherung (Backup),
  - Kompetenzzentrum für Datenkommunikationssysteme und verantwortlich für Planung, Ausbau und Betrieb des Münchner Wissenschaftsnetzes und dessen Anbindung an die weltweiten Kommunikationsnetze.

Die 1673 von Leibniz vorgestellte erste Rechenmaschine, die auch multiplizieren und dividieren kann.



GOTTFRIED WILHELM LEIBNIZ-BIBLIOTHEK – NIEDERSÄCHSISCHE LANDESBIBLIOTHEK

### An der Spitze der Rechenzentren

In puncto Versorgungsbereich und systemtechnischer Ausstattung zählt das LRZ zur Spitze der technisch-wissenschaftlichen Rechenzentren, zumindest in Deutschland. Einschließlich Teilzeitkräften und



Das „alte“ LRZ-Gebäude in der Barer Straße 21 vor (unten) und nach der Sanierung.



befristet eingestellten Projektmitarbeitern sind über 170 Mitarbeiter beschäftigt. 90.000 Studenten und 25.000 Mitarbeiter der Hochschulen gehören zum Versorgungsbereich des LRZ.

### Dienstleistungen des LRZ

Aus dem Kerngeschäft des LRZ resultiert ein umfangreiches Dienstleistungsangebot. Beispiele dafür sind:

- Bereitstellung von Rechenkapazität (Hochleistungssysteme, Compute-Server) und von Spezialgeräten, die wegen ihrer Funktion zentral betrieben werden müssen oder deren Betrieb dezentral nicht wirtschaftlich oder technisch nicht möglich ist.
- Bereitstellung zentraler Kommunikationssysteme und gängiger Internet-Dienste (E-Mail, Web-Dienste, Nameserver, Directory-Dienste, Einwahlservers usw.).
- Bereitstellung von Möglichkeiten zur Datensicherung (Backup-, Datei- und Archiv-Server).
- Bereitstellung von Geräten für die Visualisierung (Großplotter,

Video-Schnittplätze, hochauflösende Graphik, Virtual Reality-Systeme).

- Auswahl, Beschaffung und Verteilung von Software (Campus- und Landeslizenzen).
- *Hosting, Housing und Remote Management* von dezentral gesicherten Systemen. Unterstützung bei Planung, Aufbau und Betrieb dezentraler Pilotinstallationen von neuen Systemen und Konfigurationen.
- Kurse, Schulung und Bereitstellung von Informationen zur IT-Nutzung. Beratung bei Fragen zur Informationsverarbeitung und zu aktuellen Informationstechnologien.
- Koordinierung der DV-Konzepte und Unterstützung der Hochschulleitungen bei der DV-Planung. Pilotierung von neuen Organisationsstrukturen für den Betrieb von IT-Infrastrukturen.

In weiteren Artikeln dieses Sonderheftes wird beispielhaft auf einige Aspekte der Dienstleistungen des LRZ detaillierter eingegangen.

## Umfangreiche Aufgaben

Aus dem Ausschnitt des Aufgaben- und Dienstleistungskatalogs lässt sich unschwer die Vielfältigkeit und Komplexität der zu dessen Erbringung erforderlichen Systemlandschaft und Infrastruktur ablesen. Diese gilt es nicht nur ständig auf dem neuesten Stand zu halten und weiter zu entwickeln, sondern es sind auch Maßnahmen zu ergreifen, die den Betrieb effektiver, effizienter und kostengünstiger abzuwickeln ermöglichen. Dazu muss unbedingt bedacht werden, dass die vielfältigen Prozesse der Lehre, Forschung und Verwaltung der Hochschulen in München und Umgebung zunehmend von den am LRZ angebotenen Diensten und Systemen direkt abhängig sind. Damit würde ein Ausfall der Systeme am LRZ unmittelbar die Handlungsfähigkeit der angeschlossenen Institutionen betreffen.

## Blick in die Zukunft

Folgende künftige Schwerpunktsetzungen beeinflussen die Ausbauplanungen des LRZ in naher Zukunft:

- Der Ausbau von Hochverfügbarkeitslösungen in den Bereichen Netz, Serverbetrieb sowie Backup und Archivierung soll verstärkt werden, um die System- und Dienstverfügbarkeit noch weiter zu erhöhen.
- Durch Rezentralisierung, Konsolidierung und Virtualisierung soll die Effizienz, aber auch das Angebot im Bereich Serverbetrieb (z.B. *Server Hosting*, *Remote Monitoring*) weiter ausgebaut werden.
- Immer mehr (Primär-)Information steht ausschließlich elektronisch zur Verfügung. Sie muss nicht nur jederzeit sicher verfü-

bar, sondern auch sehr langfristig vorhanden sein. Deshalb will das LRZ eine Stärkung des Bereiches Backup und Archivierung als große Dienstleistungssäule forcieren (Elektronische Speicherbibliothek).

- Die Softwareversorgung bekommt wegen der zunehmenden Vielfalt und der komplexen Lizenzstrukturen einen wachsenden Stellenwert. Das LRZ will hier seine Aktivitäten verstärkt fortsetzen und sein breites Angebot an Software durch weitere geeignete Rahmenverträge ausbauen. Dies verlangt teils erhebliche Finanzaufwände.
- Die system- und dienstmäßige Unterstützung der IT-Prozesse an TUM/LMU im Sinne von IntegratUM verlangt die Einrichtung und den Betrieb entsprechender Plattformen.



- *Computational Sciences* und *Data Mining* kommen ohne einen erheblichen Ausbau von Visualisierungsmöglichkeiten und *Virtual Reality*-Umgebungen nicht mehr aus.
- Die Forschung und Entwicklung im Gebiet *Grid-Computing* und *Grid-Management* sowie die In-



**Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering, Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.**

tensivierung der Aktivitäten bzgl. *High Performance Computing* (HPC) auch im europäischen Rahmen führt zu neuen Dienstnachfragen und damit zu nötigen Investitionen.

- Die immer wichtigere Forderung nach Netz- und Systemsicherheit, also Schutz gegen Kompromittierung, Viren, Spamming, Spoofing usw., führt ebenfalls zu erhöhtem Investitionsbedarf.

Das LRZ kann auf eine über 40 Jahre andauernde Erfolgsstory verweisen. Die schon zur Gründung getroffene Entscheidung, in München nicht an jeder Hochschule ein eigenes wissenschaftliches Rechenzentrum zu betreiben, sondern das LRZ an der Bayerischen Akademie der Wissenschaften anzusiedeln, um Kompetenz zu bündeln und Synergiepotential zu nutzen, hat sich in der gesamten Vergangenheit als richtig und weise erwiesen.

*Prof. Dr. Heinz-Gerd Hegering lehrt als Ordinarius Informatik an der Ludwig-Maximilians-Universität und der Technischen Universität München und ist Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.*





ARCHITEKTUR

# Der Neubau in Garching

DER NEUBAU FÜR DAS LEIBNIZ-RECHENZENTRUM IN GARCHING IST BEISPIEL FÜR EINE ARCHITEKTONISCHE AUSDRUCKSFORM MIT SYMBOLWIRKUNG.

---

**VON THOMAS HERZOG**


---

**R**echenzentren haben als Bautypus bis dato keine semantische Identität. Als neue Bauaufgabe des ausgehenden 20. Jahrhunderts war man letztlich nur bemüht, in Gebäuden, deren Nutzung eng mit Großrechnern zusammenhing, zweckmäßige Orte für ihre Aufstellung unter gut kontrollierten klimatischen Bedingungen sicherzustellen.

## Architektur mit Symbolkraft

Es stellt sich die Frage nach der architektonischen Ausdrucksform mit Symbolwirkung für den Inhalt. Da es sich beim LRZ um ein Bauwerk mit prominenter Lage an der Zufahrt zum Münchener Wissenschaftscampus in Garching handelt, hielten wir es für richtig, die drei Grundfunktionen: den Großrechner mit dem gewaltigen Umfeld an Technik, das Institutsgebäude, wo Forschung und Entwicklung stattfindet, und den Unterrichtstrakt klar zu trennen, sie in drei selbständige Baukörper umzusetzen und jedem der Gebäude eine eigene, auf den jeweiligen Inhalt bzw. seine Funktion bezogene Struktur und Form zu

geben; damit sozusagen das bauliche Ensemble als Ganzes durch seine Differenzierung „lesbar“ zu machen und die Möglichkeit zu einer jeweiligen Einzeloptimierung ziemlich kompromisslos zu nutzen, um gleichzeitig daraus eine Gesamtkomposition zu entwickeln, die städtebaulich den Auftakt zum Campus bildet, der Nutzungsfrequenz der drei Gebäudevolumina entspricht, und auch freiräumlich Angebote zum Aufenthalt macht.

## Rechnerwürfel

Auf der Westseite steht ein signifikanter Kubus, der ‚Rechnerwürfel‘, mit einer Höhe von 27,50 m und einer Kantenlänge von 35 m, der bei Bedarf um 50 % in Richtung Westen erweitert werden kann. Dieses große Raumvolumen dient zur Aufnahme des Höchstleistungsrechners, der zugehörigen Netzknotenrechner und der umfangreichen Datenarchive, was ausschließlich durch funktionale und technische Bedingungen bestimmt wird. Hier gelten erhöhte Sicherheitsansprüche. Es wird keinen Publikumsverkehr geben. Vielmehr haben nur wenige Personen eine Zutrittsberechtigung. Dieser Bereich ist hoch

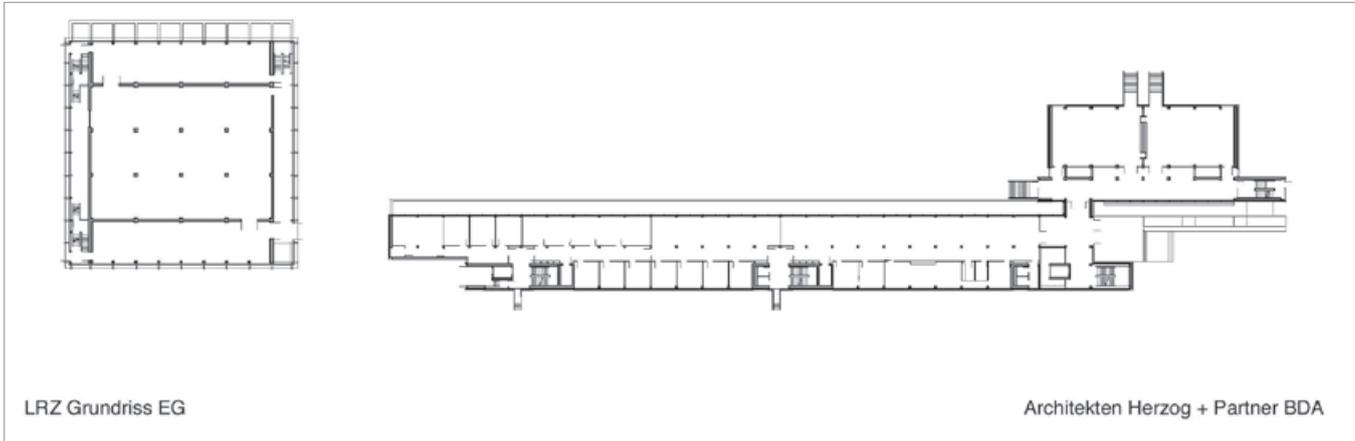
installiert und enthält keine Aufenthaltsräume. Er ist das Kernstück des Rechenzentrums.

## Institutsgebäude

Ein viergeschossiges Institutsgebäude erstreckt sich parallel zur Straße, wodurch die Campusbebauung ihren südlichen Abschluss findet. Es enthält mit den Arbeitsplätzen der Wissenschaftler überwiegend gleich große Einzelräume für in der Regel zwei Personen. In diesem Bereich wird es mit Ausnahme des Erdgeschosses geringen Publikumsverkehr geben. Die Grundstruktur des Institutsgebäudes und damit die Anordnung der natürlich zu belichtenden und belüftenden Räume sind bewusst asymmetrisch entworfen. Zur Südseite hin, wo man mit den unerwünschten Einflüssen von außen zu rechnen haben wird (Aufheizung des Inneren und Blendung durch die Sonne, Lärm und Fahrzeugabgase), sind im Wesentlichen solche Räume angeordnet, die der Ver- und Entsorgung oder Erschließung dienen oder dem nicht ständigen Aufenthalt, wo also die genannten Nachteile unmaßgeblich sind. Sie schirmen den größeren Teil der übrigen Geschossflächen

**Südansicht des Neubaus: links der Rechnerwürfel, daneben erstreckt sich das Institutsgebäude und der Hörsaaltrakt.**





ab und erlauben eine optimale Nutzung der überwiegend zum nördlich gelegenen Grünbereich hin orientierten Arbeitsräume, die vornehmlich für den dauernden Aufenthalt von Personen bestimmt sind. Der Bau energieabhängiger Klimaanlage wurde so vermieden. Das Erdgeschoss ist weitestgehend transparent und gestattet von der Ludwig-Prandtl-Straße im Süden aus den Durchblick auf den dahinter liegenden Grünraum.

#### Hörsaaltrakt

Im Hörsaal- und Seminarbereich wird es intensiven Publikumsverkehr geben. Insbesondere werden Studenten und externe Besucher diesen Teil der baulichen Anlage nutzen. Deshalb erfolgt der Zugang über einen vorgelagerten Platz im Osten. Man betritt eine mehrgeschossige Eingangshalle, von der aus sich die Wege verteilen.

#### Fassadengestaltung

Alle Fassaden sind ihrer Funktion entsprechend gestaltet. Insbesondere auf der straßenzugewandten Südseite des Institutsgebäudes wird durch die Anordnung von Verschattungseinrichtungen mittels einer teildurchlässigen Vorfassade die unerwünschte Aufheizung der Innenräume im Sommerhalbjahr reduziert. Ein funktional entspre-

chendes, aber formal andersartiges, sich auf die Foyerzonen vor den Unterrichtsräumen beziehendes System haben wir für den dortigen Bereich entwickelt.

Die differenziert gestaltete Metallhaut schützt die beiden Baukörper auf Dauer vor der Witterung. Die Innenraumwirkung wird wesentlich durch die Verwendung der nachwachsenden Werkstoffe Holz und Bambus bestimmt.

Der Rechnerwürfel schließlich hat mehrere Hüllen, was erschließungs- und installationstechnisch bestimmt ist. Dabei bildet die äußerste Schicht eine Art „Kettenhemd“ aus nicht rostendem Stahlgewebe, das Teil der notwendigen elektromagnetischen Abschirmung bildet und welches trotz seiner hohen Homogenität in seiner optischen Halb-Durchlässigkeit – je nach Sonnenstand und den äußeren Lichtverhältnissen – den großen Kubus immer wieder optisch anders erscheinen lässt, so dass das innere Volumen in seinen geometrisch gefassten Oberflächen gelegentlich als spontan klar erkennbar, dann wieder als metallisch reflektierend, als geschlossener und abweisender Schutz eines riesigen wertvollen Artefaktes erscheint.

#### Künstlerische Ausgestaltung

Komplexe, großformatige und raumgreifende Installationen der Münchener Kunstprofessoren Stefan Huber und Rainer Wittborn überformen und ergänzen substanzvoll die architektonische



Komposition, indem sie mit ihren bildnerischen Beiträgen mathematische Historie und die Person von Leibniz als Namensgeber des neuen nationalen Höchstleistungsrechners ins Bewusstsein rücken.

*Der Autor ist Professor am Institut für Entwerfen und Bautechnik der TU München und Architekt.*



#### Grundriss Erdgeschoss.

**Der Rechnerwürfel von Innen. Hier wird der neue Bundeshöchstleistungsrechner HLRB II aufgestellt. An der Decke ist die aufwändige Klimaversorgung angebracht.**



oben: Der Institutstrakt

unten: Der Rechnerwürfel mit der imposanten Kantenlänge von 35 x 28 Metern.

## Neubau Leibniz-Rechenzentrum in Garching

### Einzelheiten zum Entwurf des LRZ

Bauherr: Freistaat Bayern  
vertreten durch das Bauamt der TU München

Architekten: Herzog + Partner  
(Entwurf und Planung)  
Prof. Thomas Herzog und Hanns Jörg Schrade  
Projektleitung: Roland Schneider

Tragwerksplanung: Herrschmann GmbH & Co. KG

Gebäudetechnik: Climaplan GmbH

Elektrotechnik: Ingenieurbüro IBE

Landschaftsarchitekt: Rita Lex-Kerfers

Baudurchführung: Ingenieurbüro Mertig + Prüschenk IMP GmbH

Bruttogeschossfläche: ca. 13.700 m<sup>2</sup>

Hauptnutzfläche: ca. 5.700 m<sup>2</sup>

Funktionsfläche: ca. 3.200 m<sup>2</sup>

Nutzungseinheiten mit je 400 m<sup>2</sup>, mit maximaler Nutzungsvariabilität des Institutsgebäudes

Tragwerk vornehmlich aus Stahlbeton in fugenloser Bauweise. Wegen des hohen Grundwasserstandes Ausbildung einer weißen Wanne.

Bauteiltemperierung der Decken im Institutsbau und bereichsweise im Hörsaalgebäude, hybride Lüftung des Hörsaal- und Seminargebäudes.

Anschlussleistung der Stromversorgung ca. 4,7 Megawatt, davon ca. 1 Megawatt für den Höchstleistungsrechner (ohne Klimatechnik).

Gesamtkälteleistung ca. 3 Megawatt  
Bewegte Luftmenge Rechnergebäude gesamt:  
137.000 m<sup>3</sup>/h

Aufwändiges Sicherheitskonzept für Gebäude und Betrieb.



oben links:  
Der Institutstrakt mit  
dem Rechnerwürfel  
im Hintergrund

oben rechts:  
Flur im Institut-  
gebäude

links: Ostansicht des  
Neubaus.

unten: Nordansicht  
des Neubaus, rechts  
der Rechnerwürfel.





DAS NETZ

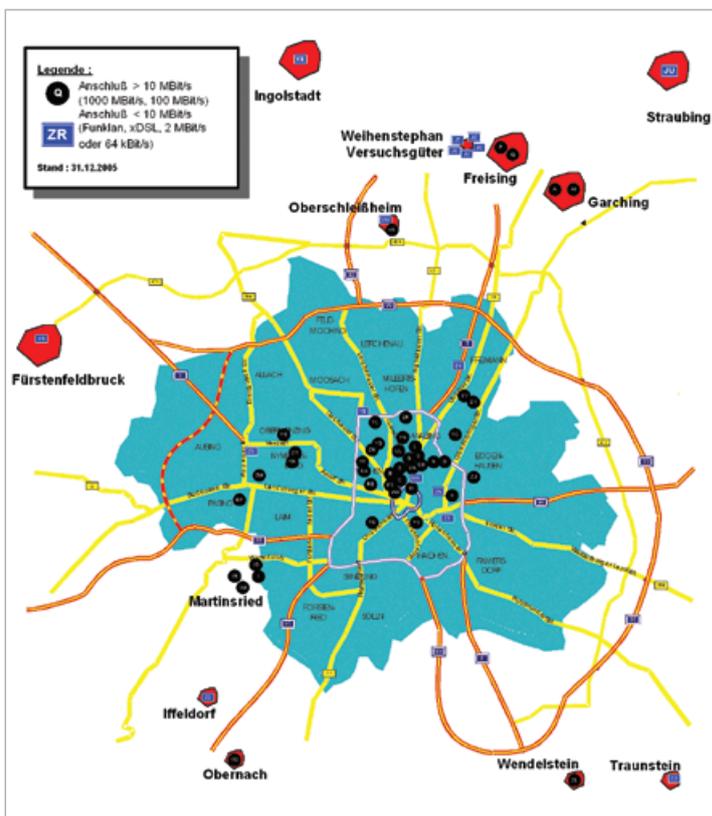
# Am Kabel hängt alles

DAS MÜNCHNER WISSENSCHAFTSNETZ VERBINDET FORSCHER, STUDIERENDE UND WISSENSCHAFTLICHE EINRICHTUNGEN UNTEREINANDER UND MIT DER WELT.

VON ALFRED LÄPPLÉ

Eine Kommunikationsinfrastruktur bildet das Rückgrat einer modernen IT-Versorgung. Dazu müssen jedoch zuerst Kabel in Räume, Flure, Stockwerke, Gebäude, Campus-Areale, in und zwischen Städten und Länder gezogen werden. Diese Kabel haben sich im Laufe der letzten 35 Jahre geändert. Wurden zuerst bereits vorhandene Telefondrähte aus Kupfer verwendet, so sind es jetzt zum Teil immer noch Kupferdrähte, jedoch in höherer Anzahl der Drähte und besserer Güte des Kabelaufbaus.

Standorte des  
Münchner Wissenschaftsnetzes (MWN).



War die Übertragungsgeschwindigkeit anfangs 300 bit pro Sekunde (da konnte man die 30 Zeichen pro Sekunde noch bequem am Fernschreiber mitlesen), so kann man jetzt mit Kupferkabel 10.000.000.000 bit pro Sekunde erreichen. Wäre der damalige Datenpfad 1 mm breit, so müsste die Datenautobahn heute eine Breite von 3.333 km haben. Über weite Entfernungen haben sich Kabel aus Lichtwellenleitern durchgesetzt, die noch wesentlich höhere Übertragungsgeschwindigkeiten zulassen (Hier wäre die Datenautobahn dann bald 100 km breit).

Da jeder Arbeitsplatz mit einem IT-Gerät ausgestattet ist, erfordert die flächendeckende Versorgung eine erheblichen Kabelmenge, die für das Netz notwendig sind. So wurden in dem Neubau des LRZ ca. 3.000 Meter Glasfaserkabel und 21.000 Meter Kupferkabel eingezogen.

## Kabel werden zum Netz verknüpft

Die Kabel werden mittels Netzkomponenten wie z.B. Switches und Router zu einem Netz verknüpft. Über 750 solcher Verknüpfungspunkte sind dies im Münchner Wissenschaftsnetz (MWN), das vom LRZ betrieben wird.

Das MWN erstreckt sich jedoch nicht nur über den Neubau, hier ist nur die Netzsteuer- und Überwachungszentrale, das Netz versorgt alle Standorte der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU), der Technischen Universität Mün-

chen (TUM), der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (BAW), der Fachhochschule München (FHM) und der Fachhochschule Weihenstephan. Es wird aber auch von anderen wissenschaftlichen Einrichtungen (u.a. Hochschule für Musik und Theater, Hochschule für Fernsehen und Film, Hochschule für Bildende Künste, Hochschule für Philosophie, Max-Planck-Gesellschaft, Fraunhofer-Gesellschaft, Museen) und von über 39 Studentenwohnheimen mitgenutzt. Beispiele hierfür sind die Studentstadt in Freimann mit 2440 Plätzen, aber auch das Maximilianeum mit 26 Plätzen, das Studentinnenheim der Armen Schulschwesterinnen oder das Spanische Kolleg.

Über die Gebäude im Münchner Stadtbereich, den Campus Garching und Großhadern/Martinsried hinaus erstreckt sich das MWN im Süden Bayerns von Oberrach am Walchensee und Iffeldorf an den Osterseen bis zum Wendelsteingipfel und bald auch bis zum Schneefernerhaus auf der Zugspitze. Im Norden Münchens sind wissenschaftliche Einrichtungen der TUM und der LMU in Oberschleißheim, Weihenstephan, Ingolstadt, Straubing und bald auch in Triesdorf bei Ansbach angebunden. Man kann also sagen: Überall wo im Großraum München Hochschule draufsteht, ist das Münchner Wissenschaftsnetz drin.

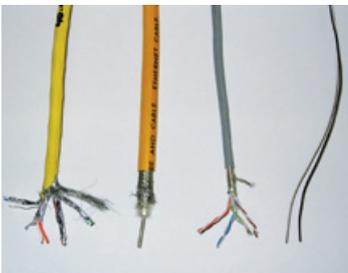
Derzeit sind an das MWN mehr als 60 Gebäudeareale mit mehr als 220 Gebäudekomplexen angebunden (siehe Abbildung). Die Lage von Standorten, die außerhalb des Münchner Stadtgebietes liegen, ist



in der Abbildung nicht maßstabsgetreu dargestellt, sondern lediglich schematisch angedeutet.

Insgesamt zählt das MWN über 55.000 Anschlüsse von IT-Geräten. Dies kann sowohl der neue Supercomputer des LRZ (HLRBII), das Archiv- und Backup-System im Rechnerwürfel des LRZ, ein Mail-Server an einem Universitätsinstitut, der PC eines Wissenschaftlers oder Studenten aber auch ein Getränke-Automat in der Mensa in Weihenstephan sein.

Das MWN bietet den Zugang zu nationalen und internationalen Forschungsnetzen und zum Internet. Dieser ist mit 10 Gigabit pro Sekunde – das entspricht rund 10.000 DSL Anschlüssen – sehr breitbandig. Im Rahmen der europäischen Zusammenarbeit von elf



Supercomputing-Zentren sind deren Höchstleistungsrechner zusätzlich mit 10 Gigabit pro Sekunde mit den anderen Zentren in Europa verbunden.

Auf dieser Infrastruktur sind dann alle nur denkbaren digitalisierten Anwendungen, wie Audio- (IP-Telefon, MP3-Daten), Video- (Bildkonferenzen), und natürlich Datenübertragungen (Speicherung im Archivsystem) möglich.

### Sicherheit im Netz

Die Anwender des MWN und deren Netznutzung sind sehr sehr unterschiedlich. Für die einen ist das Netz selbst Forschungs- und

Entwicklungsgegenstand für andere nur Mittel, um Dienste weltweit nutzen zu können. Für die Betreiber bedeutet dies häufig einen Spagat zwischen höchstmöglicher Freiheit bei der Nutzung von Diensten und dem Schutz vor Bedrohung und Angriffen von innen und außen. Grundsätzlich wird versucht dem Nutzer so wenige Einschränkungen wie möglich aufzuerlegen, aber es werden harte Maßnahmen wie Sperre des Rechners bei der Internetnutzung ergriffen, wenn dieser auffällig werden sollte. Auffällig wird ein Rechner, wenn er z.B. in zu kurzen Zeitabständen sehr viele andere Rechner abfragt oder sehr viele Verbindungen zu einem Rechner aufbaut, in kurzer Zeit viele (Spam-)Mails versendet oder Anwendungen auf falschen Ports verwendet, kurz sich nicht protokollgerecht verhält. In den meisten Fällen ist dieser Rechner dann von einem Schadprogramm „infiziert“ und wird von der Internetnutzung abgetrennt. Der Nutzer wird über diese Sperrung informiert und erhält Hilfe und Informationen, um seinen Rechner sicherer zu machen. Zur „Entvirung“ von PCs bietet das LRZ dann kostenfreie Virens Scanner und Betriebssystemupdates an.

### Netz ohne Kabel

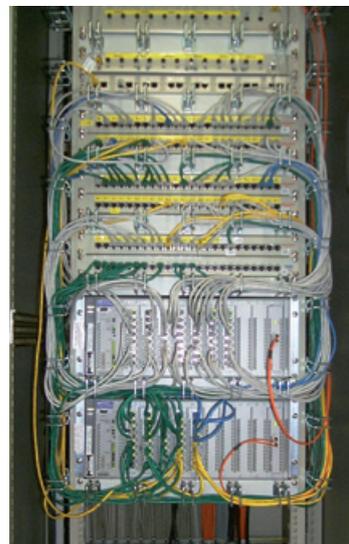
Obwohl das Netz am Kabel hängt wird eine drahtlose und mobile Nutzung des MWN immer wichtiger. Das LRZ bietet deshalb über 550 Access-Points (Hotspots), mit denen man sich über Funk-LAN mit dem MWN verbinden und das Internet nutzen kann. Dies ist vor allem in öffentlichen Räumen wie Hörsälen, Seminarräumen, Bibliotheken, Mensen, Cafeterias und Foyers aber auch von Studenten bevölkerten Freiflächen vor den Mensen oder der alten Pinakothek möglich. Auch viele Studentenwohnheime werden mit Hilfe von Funk-LAN erschlossen. Aber auch „exotischere“ Standorte wie z.B.



die Ställe der Tiermedizin oder der landwirtschaftlichen Versuchsgüter und deren Äcker werden drahtlos angebunden.

Auch wenn man meinen könnte, das Netz kann nun völlig ohne Kabel auskommen, so gilt dies nur für die Verbindung vom mobilen Gerät bis zum Access-Point. Dieser jedoch ist wieder mit Kabel am nächsten Verknüpfungspunkt des Netzes angeschlossen. Ganz ohne Kabel wird auch das MWN der Zukunft nicht auskommen.

*Der Autor ist Leiter der Abteilung Kommunikationsnetze am LRZ.*



**Ludwig I., im Eingangsbereich der LMU, könnte, falls er wollte, jederzeit kabellos ins MWN gelangen.**

**Vom alten (Telefonkabel, (rechts) zum neuen Kabel (KAT6-Kabel, links).**

**Verknüpfungen im Münchner Wissenschaftsnetz (MWN).**

LANGZEITARCHIVIERUNG

# Lang ist relativ kurz

DIE DATENARCHIVE IM NEUEN RECHENZENTRUM – EINTAGSFLIEGEN AUS SICHT DER ANALOGEN LANGZEITARCHIVIERUNG.



**Die Bandbibliotheken  
im Daten- und Archiv-  
raum.**

VON WERNER BAUR

**E**in komplettes Stockwerk im neuen Rechnerwürfel des Leibniz-Rechenzentrums – eine Halle mit 500 m<sup>2</sup> Stellfläche – wird ausschließlich zur Datenhaltung genutzt. Die Halle wird im internen Sprachgebrauch des Leibniz-Rechenzentrums DAR genannt. DAR steht für Daten- und Archiv-Raum. Das klingt nach Beständigkeit, Stille, nach langen Regalreihen, in denen Tausende Bücher und Aktenordner im Halbdunkel jahrzehntelang friedlich verstauben. Nur ab und an kommt ein Archivar vorbei und sieht nach dem Rechten oder holt sich einen Ordner. Was das Halbdunkel und die langen Regalreihen anbelangt, ist dieses

Bild gar nicht so falsch. DAR hat keine Fenster und die Notbeleuchtung verbreitet nur schummriges Licht. Es gibt tatsächlich lange Regalreihen, in denen viele tausend Magnetbandkassetten lagern und darauf warten, von einem Roboter abgeholt zu werden. Der Rest des Bildes bedarf jedoch einiger Richtigstellungen.

## Zehnjähriges Jubiläum

Das Archiv- und Backupsystem des LRZ ist in seiner heutigen Form seit Januar 1996 in Betrieb. Zwar dürfte ein Teil der Daten im DAR durchaus zehn Jahre alt sein, die Medien, auf denen diese Daten gespeichert sind, sind es definitiv nicht: die ältesten Kassetten in den Regalen

des DAR wurden 2003 beschafft. Von „jahrzehntelangem Dahinschlummern“ kann also kaum die Rede sein, auch dann nicht, wenn kein rüder Rechenzentrumsumzug die Archive wachrüttelt.

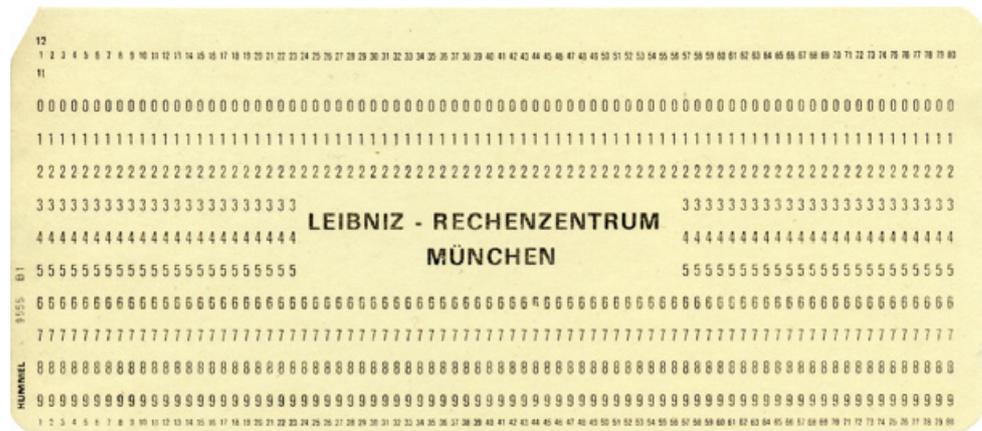
Im scharfen Kontrast zu traditionellen Informationsspeichern (z. B. dem Buch) spricht man bei der Lebensdauer von Speichermedien in der IT-Welt faktisch nicht über Jahrzehnte und schon gar nicht über Jahrhunderte, sondern einen Zeitraum von wenigen Jahren: Bei keinem Speichermedium kann hundertprozentig sichergestellt werden, dass es nach mehr als 10 Jahren noch gelesen werden kann. Dabei ist nicht allein die physische Haltbarkeit des Informationsspei-

chers ausschlaggebend, sondern die Verfügbarkeit der hardware- und softwaremäßigen Zugriffsmöglichkeiten. Es gibt keine Garantie dafür, dass die Lesegeräte über viele Jahre hinweg verfügbar und funktions-tüchtig gehalten werden können, und dass die dazu notwendigen systemtechnischen Vorbedingungen (im Wesentlichen die Verfügbarkeit der verarbeitenden Computer und deren Software) aufrecht erhalten werden können.

**Eintagsfliegen**

Anfang der sechziger Jahre waren Lochstreifen ein gängiges Speichermedium, sie verschwanden Ende der siebziger Jahre. Die Lochkarte wird seit Mitte der achtziger Jahre nicht mehr verwendet, das Halb Zoll-Magnetband auf Spule Anfang der neunziger Jahre. Eine Reihe physisch durchaus lange haltbarer optischer Medien gibt es nicht mehr, weil die Herstellerfirmen selbst untergingen bzw. die Unterstützung der Schreib-/Lesegeräte aufgaben, oder die Rechner nicht mehr gebaut wurden, an die sie anschließbar waren. Das Format der Kassetten (Metrum), von denen die ersten Daten des LRZ-Archivs 1995 übernommen wurden, ist längst Geschichte. In zehn Jahren, 2016, werden höchstwahrscheinlich die Kassetten, die heute in die Schränke des DAR gestellt werden, nicht mehr in Gebrauch sein, es sei denn als Exponate in einigen musealen Schaukästen.

Um digitale Daten über Jahrzehnte hinweg zu erhalten, bleibt nur eine praktikable Lösung: die Informationen müssen nach drei bis vier Jahren auf neue Datenträger kopiert (Fachjargon: „migriert“) werden. Die Veteranen unter den Daten des DAR haben bereits drei dieser Migrationszyklen hinter sich. Zum Verstauben bleibt da keine Zeit.

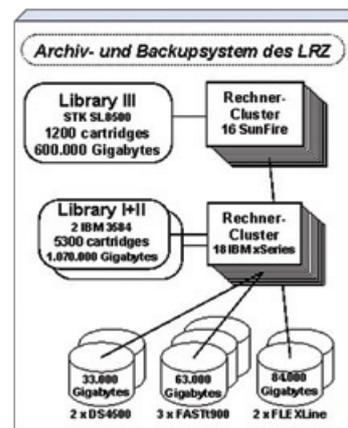


**Nächtliche Betriebsamkeit**

Noch vor 15 Jahren war technisches Personal, so genannte Operateure, notwendig, um die Bänder in die Laufwerke zu legen (zu „laden“), oder, um im Bild zu bleiben, um die Aktenordner aus den Regalen zu holen. Heute wird dieser Job von Robotern erledigt. Im DAR gibt es drei solcher Gesellen. Menschliche Archivare hätten hier alle Hände voll zu tun: Unter den 54 Bandlaufwerken, die im Archivraum stehen, sind einige, die in den knapp drei Jahren ihrer Standzeit mehr als 50.000 Ladevorgänge durchgeführt haben. Offensichtlich geht es im DAR nicht ganz so ruhig und beschaulich zu wie in traditionellen Archiven. Gerade spät nachts, wenn die Sicherungsdaten von 4.000 Systemen aus dem Münchner Wissenschaftsnetz auf die Bänder geschrieben werden, haben die Blecharchivare alle Greifarme voll zu tun. Immerhin kommen jeden Tag Daten mit einem Volumen von

5.000 Gigabytes im DAR an, die von den Bandlaufwerken auf die Medien geschrieben werden müssen. Das entspricht dem Text von einer Million Bibeln.

Die Bandlaufwerke sind Teil eines hochmodernen Speichernetzes (*storage area network*), zu dem auch



Ein typisches Speichermedium in den 70er Jahre war die Lochkarte.

Die Komponenten des Archiv- und Backupsystems sind über ein Speichernetz verbunden.

mehrere Dutzend Rechner (*server*), die das Archiv- und Backupsystem steuern, und einige hundert



In den 90er Jahren waren Bandmedien die gängigen Massenspeicher.

Modernste Klimatechnik sorgt für konstante Temperatur und Luftfeuchtigkeit in den Rechenräumen.



Festplatten (*disk caches*), auf denen die Daten zwischengelagert werden, gehören. Der entscheidende Punkt dabei ist, dass jede Speicherkomponente nicht fest an einem Rechner hängt, sondern weitgehend dynamisch über das Netzwerk dort eingesetzt werden kann, wo sie gebraucht wird.

#### Ständige Erneuerung

Nicht nur die Datenträger selbst und die zugehörigen Schreib-/Lesegeräte sind dem schnellen technischen Wandel unterworfen, auch Rechner und Platten müssen in kurzen Abständen, etwa alle 5 Jahre, durch leistungsfähigere Geräte ersetzt werden. Nur die Roboter und ihre Schränke (*Libraries*) haben eine etwas höhere Lebenserwartung: hier können durchaus zehn Jahre und mehr erreicht werden. Beim Auszug aus der Barer Straße wurden beispielsweise fünfzehn Jahre alte *Libraries* zurückgelassen. Damit die *Libraries* nicht nach ein paar Jahren aus allen Nähten platzen, wird eine hohe Ausbaufähigkeit („Skalierbarkeit“) schon von vornherein mit eingeplant. Die neueste der drei *Libraries* im DAR bietet in ihrer heutigen Ausbaustufe Platz für 4.500 Kassetten und 64 Laufwerke und kann auf 10.000 Kassetten, im Verbund mit zusätzlichen Systemen auf 300.000 Kassetten erweitert werden.

Gasflaschen mit Argon, das im Brandfall jedes Feuer im Keim erstickt.

#### Kalt und warm

Im vergangenen Jahrzehnt waren Bänder und Kassetten sicherlich das am weitesten verbreitete Speichermedium für große Datenmengen. Wahrscheinlich, aber keineswegs sicher ist dies auch für dieses Jahrzehnt noch der Fall. Die magnetische Festplatte etwa verfügt heutzutage über ein ähnliches Speichervolumen wie die Kassetten des DAR.



Warum also nicht die auf den ersten Blick gar nicht so viel teureren Festplatten statt Bänder verwenden? Eine Antwort darauf ist die monatliche Heizungsrechnung. Um Energiekosten zu sparen ist es

im DAR - nicht etwa sehr kalt, im Gegenteil, es ist sehr warm. Die im Raum installierte Hardware produziert diese Wärme. Eine starke Absenkung der Raumtemperatur würde die Klimakosten deutlich in die Höhe treiben. Daher herrscht im DAR die maximale Temperatur, in der sich die Kassetten noch „wohl fühlen“.

Würde man das gleiche Datenvolumen auf Festplatten ablegen, würde man jahrein jahraus doppelt zahlen: einmal für die Stromkosten, die der Betrieb der Platten erfordert und einmal für die Klimakosten, die entstehen, um die von den Platten produzierte Wärme wieder abzuführen.

#### Kein Raum für Katastrophen

Der Albtraum jeder Bibliothek ist ein Brand im Allerheiligsten. Noch nicht lange zurück liegt der Brand in der Herzogin Anna Amalia-Bibliothek in Weimar. Was das Feuer nicht vernichtet, zerstört das Lösch-

wasser. Hier stößt auch die Lebensdauer der gedruckten Information, ansonsten der Lebensdauer der digitalen Datenträger weit überlegen, an die gleichen Grenzen. Selbstredend wäre Feuer und Löschwasser

auch für die Daten im DAR fatal. Ein ausgeklügeltes System von Sensoren sorgt dafür, dass ein ausbrechender Brand sofort bemerkt wird. Gelöscht wird mit Argon, das den Luftsauerstoff so weit reduziert, dass jedes Feuer im Keim erstickt wird. Das Verfahren ist für die Datenträger völlig unschädlich, die Kosten sind allerdings erheblich. Sollte es trotz aller Vorsichtsmaßnahmen aber doch einmal zu einer völligen Zerstörung des Rechenzentrums kommen, bleiben immer noch die Nachbarn: Die wichtigsten Daten werden schon seit Jahren an das einige hundert Meter entfernte Rechenzentrum der Max-Planck-Gesellschaft in Garching kopiert.

Um sich mögliche Ursachen für den Datenverlust vorzustellen, müssen übrigens nicht gleich die Naturgewalten bemüht werden. Es genügt die Zerstörung der Datenbanken, in denen für jede der über zwei Milliarden Dateien Buch darüber geführt wird, auf welcher Kassette welche Version von welchem Benutzer von welchem Rechner aus zu welchem Zeitpunkt gespeichert worden ist. Diese Datenbanken bilden somit das sorgsam behütete Herzstück des Systems. Zahlreiche IT-technische Maßnahmen sorgen dafür, dass die Besitzer der Daten und vor allem die verantwortlichen Systemadministratoren nachts ruhig schlafen



können. Beispielsweise verkräftet das System durch eine Kombination verschiedener Schutzmechanismen bis zu vier gleichzeitige Plattenausfälle, ohne dass Daten verloren gehen. Ersatzplatten übernehmen dabei automatisch die Funktion der defekten Platten.

**Gestern noch viel, heute ein Nichts**

Die Datenmenge, die vor gut zehn Jahren zur Speicherung eine ganze Bibliothek am LRZ erfordert hatte, passt heute spielend auf ein bis zwei Kassetten. Müssten wir umgekehrt die Datenmenge, die heute in den Archiven des DAR liegt, auf Medien mit der Kapazität von damals unterbringen, würden die 500 m<sup>2</sup> des DAR nur für einen Bruchteil der benötigten 1,2 Mio. Kassetten ausreichen.

Die technische Entwicklung eilt mit den gleichen Riesenschritten

voran, mit denen auch der Speicherbedarf wächst. Nur deshalb ist es überhaupt möglich, die entstehende Datenflut zu bewältigen.

Der Terminus „Bibliothek“ passte übrigens 1995 noch ganz gut für die elektronischen Archive: eine Kassette entsprach in etwa dem Informationsgehalt eines Buches. Heute passt der Inhalt von 5000 Büchern auf eine Kassette.

	1996	2006
Datenmenge im Archiv des LRZ	1.000 GB	1,2 Mio GB
Kapazität einer Datenkassette	10 GB	500 GB
Aufzeichnungsgeschwindigkeit	9 MB/sek	120 MB/sek

**Regalreihen einer IBM-Library gefüllt mit mehreren Tausend Kassetten.**

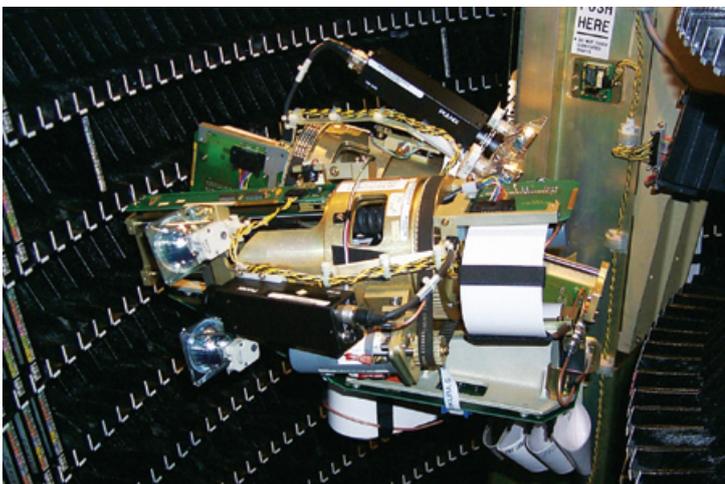
**Der Weltgeist in Garching**

Werfen wir zum Schluss noch einen Blick in ein anderes Datenarchiv, nämlich in das des Zeitmagazins. Beim Stöbern stößt man dort auf einen Artikel, demzufolge der Weltgeist ein Speichervolumen von 1.300 Petabytes oder 1,3 Milliarden Gigabytes hat. Stetigen linearen Fortschritt der Speichertechnologien vorausgesetzt, lässt das Raum für Visionen: In wenigen Jahren ist der Weltgeist in einem schummrigen Datenraum in einem kleinen Ort bei München, Oberbayern, unterzubringen.

*Der Autor leitet die Gruppe „Datei- und Speichersysteme“ am Leibniz-Rechenzentrum.*



**Ein Roboter-Greifarm holt Kassetten aus einer Library.**



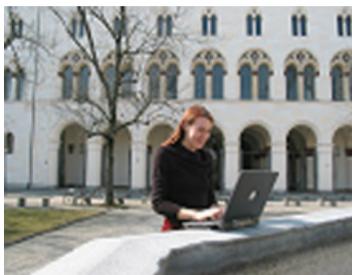
INFORMATIONEN- UND KOMMUNIKATIONSINFRASTRUKTUR

# Das Ende der Warteschlange – Identity Management an den Universitäten

DIE MÜNCHNER HOCHSCHULEN UND DAS LRZ STELLEN DEN STUDENTEN UND MITARBEITERN EINE VIELZAHL ELEKTRONISCHER DIENSTE ZUR VERFÜGUNG. FÜR DIE EFFEKTIVE VERWALTUNG DER DIENSTNUTZER UND IHRER BERECHTIGUNGEN ARBEITET DAS LRZ ENG MIT LMU UND TUM ZUSAMMEN, UM EIN HOCHSCHULÜBERGREIFENDES IDENTITY MANAGEMENT SYSTEM AUFZUBAUEN.

VON WOLFGANG  
HOMMEL

Traditionell wird neuen Studenten in den ersten Tagen ihres akademischen Lebens vor allem eines abverlangt: Geduld. Bis die Computerräume genutzt werden können, die E-Mail-Adresse eingerichtet ist, Online-Zugriff auf die Bibliothek von zu Hause aus möglich ist und die ersten Vorlesungsunterlagen aus dem E-Learning-System bezogen werden können, vergehen Tage oder gar Wochen. Für fast jeden Dienst muss man sich getrennt anmelden, also Schlange stehen, um Formblätter auszufüllen, die Nutzungsrichtlinien zu unterschreiben und Passworte abzuholen. Wer nach einigen Wochen umzieht, weil er mittlerweile doch noch eine bezahlbare Wohnung in Hochschulnähe gefunden hat, muss diese Adressänderung wiederum an vielen Stellen durchführen lassen.



Das Identity Management erleichtert den Studierenden den Zugang zu den Angeboten ihrer Hochschule.

## Qualität und Quantität

Das LRZ hat Benutzerkennungen an mehr als 60.000 Studenten vergeben; hinzu kommen die Kennungen für einen Großteil der Mitarbeiter der Münchner Hochschulen und solche für die Hochleistungsrechner des LRZ, die mittlerweile im Rahmen von Grid-Projekten europaweit genutzt werden. Eine manuelle Verwaltung aller Benutzer und ihrer Berechtigungen für die einzelnen Dienste und Systeme, wie sie derzeit noch an vielen Stellen praktiziert wird, droht die personellen Kapazitäten zu sprengen. Dadurch, dass dieselben Daten mehrfach erfasst werden, entstehen Inkonsistenzen, beispielsweise veraltete Anschriften oder Mobiltelefonnummern, so dass viele Benutzer in Problemfällen nur schwierig zu erreichen sind. Einigen Diensten wird sogar das Ausscheiden eines Mitarbeiters oder Studenten nicht zeitnah mitgeteilt, so dass diese Dienste zum Teil noch monatelang unberechtigt genutzt werden könnten.

Bei der Verwaltung der ständig zunehmenden Anzahl von IT-Diensten hat sich deshalb herauskristalliert, dass eine zentrale, in die vorhandenen Geschäftsprozesse nahtlos integrierte Benutzerverwaltung für

den effizienten Betrieb unabdingbar ist. Dadurch können auch die Dienstverantwortlichen von zeitfressenden Routinearbeiten wie dem Anlegen, Aktualisieren und Löschen von Kennungen entlastet werden.

## Identity Management

Die technische Umsetzung einer modernen, zentralen Benutzerverwaltung erfolgt über so genannte *Identity Management Systeme*. Der Begriff *Identity* bringt zum Ausdruck, dass ein Benutzer als Ganzes gesehen wird und nicht mehr wie bisher auf seine einzelnen Kennungen reduziert wird. Ein *Identity Management System* besteht aus einer zentralen Datenbank, in der die Kontaktdaten der Benutzer, ihre Kennung und ihre Berechtigungen hinterlegt werden. Diese zentrale Datenbank wird von den führenden Systemen, beispielsweise der Studenten- und Mitarbeiterverwaltung, direkt mit den relevanten Informationen gespeist und reflektiert damit jederzeit den offiziellen Datenbestand. Das *Identity Management System* übernimmt dann die Verteilung der jeweils benötigten Daten an die angeschlossenen Zielsysteme, beispielsweise die E-Mail-Server und das E-Learning-System. Scheidet ein Hochschulangehöriger

ger aus, werden die so angelegten Kennungen in den Zielsystemen auch wieder automatisch gelöscht.

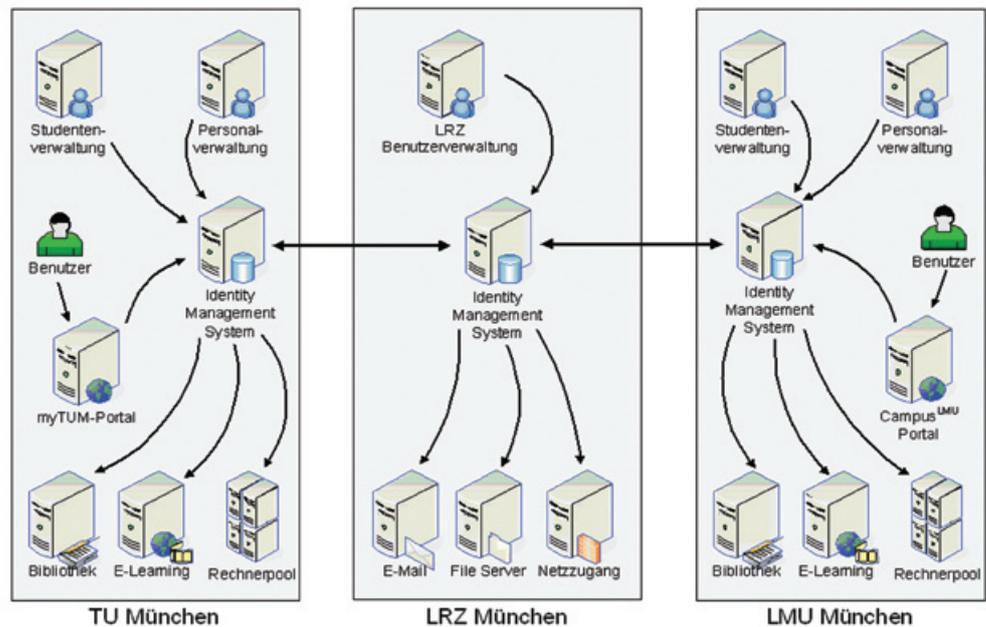
Als willkommener Nebeneffekt ergibt sich, dass jeder Benutzer nur noch eine Kennung für alle Dienste hat und sich damit nicht mehr viele verschiedene Kennungen und Passworte merken muss.

**Datenschutz**

Dadurch, dass die Vielzahl verschiedener Wege, auf denen Benutzerdaten bisher zwischen den einzelnen Stellen hochschulintern ausgetauscht wurden, beispielsweise bei der Anmeldung zu Praktika, über das Identity Management System vereinheitlicht werden, ergibt sich auch eine stärkere Betonung des Datenschutzes: An einer zentralen Stelle kann explizit definiert werden, wer auf welche personenbezogenen Daten Zugriff erhält. Die Datenflüsse können somit effizient überwacht, dokumentiert und im Rahmen der informationellen Selbstbestimmung zur Einsicht bereitgestellt werden. Statt des gläsernen Menschen wird somit vielmehr ein transparentes Verwaltungssystem geschaffen, von dessen Vorzügen sich die Hochschulangehörigen selbst überzeugen können.

**DFG-Förderung**

Die Ludwig-Maximilians-Universität (LMU), das LRZ und die Technische Universität München (TUM) haben in den letzten Jahren damit begonnen, *Identity Management Systeme* für ihre Dienste zu realisieren. An der LMU ist *Identity Management* ein zentraler Bestandteil von Campus<sup>LMU</sup> und bereits erfolgreich in Betrieb. Die TUM realisiert ihr *Identity Management* im Rahmen des DFG-geförderten Projekts IntegraTUM in enger Zusammenarbeit mit dem LRZ, das seine seit jeher zentrale Benutzer-



verwaltung derzeit ebenfalls auf zeitgemäße *Identity Management-Software* umstellt.

Dadurch, dass Dienste wie E-Mail, File Server, Backup und das Betreiben von Web-Servern zentral vom LRZ angeboten werden, ist eine Kopplung der drei *Identity Management Systeme* notwendig, wie aus Abbildung 1 ersichtlich.

Mittelfristig ist hier ferner eine direkte Anbindung an die Virtuelle Hochschule Bayern (VHB) geplant, die ihre An- und Rückmeldeverfahren derzeit ebenfalls auf solche Systeme umstellt.

**Nutzwert**

Durch diese Modernisierung wird sich der Ablauf der Immatrikulation neuer Studenten deutlich ändern: Nach der Bewerbung, die an der TUM auch online möglich sein wird, erhalten die zukünftigen Studenten bereits ihre Kennung, um damit an elektronischen Eignungsprüfungen und Vorkursen teilnehmen zu können. Mit der Immatrikulation werden die Kennungen termingerecht zum Semesteranfang

freigeschaltet und können vom ersten Tag an benutzt werden. Viele Verwaltungsangelegenheiten können über ein sicheres Web-Interface online durchgeführt werden. Änderungen, zum Beispiel von Anschrift oder Telefonnummer, müssen nur noch an dieser einen Stelle durchgeführt werden und werden automatisch an alle betroffenen Systeme propagiert. Diese moderne Informations- und Kommunikationsinfrastruktur erleichtert damit nicht nur den Betrieb der Dienste, sondern gestaltet die gesamte IT-Dienstlandschaft an den Münchner Universitäten benutzerfreundlicher und nahtloser.

Die vom LRZ im Rahmen von IntegraTUM gewonnenen Erfahrungen werden dazu genutzt werden, entsprechende Projekte mit den anderen Münchner Hochschulen durchzuführen.

*Der Autor ist Mitarbeiter des Leibniz-Rechenzentrums und für die Konzeption und Realisierung von Identity-Management-Lösungen an der TU München und am Leibniz-Rechenzentrum verantwortlich.*



**Abb. 1:** Datenflüsse mit Benutzerinformationen

VISUALISIERUNG

# Virtuelle Welten – ganz real

ALS REGIONALES RECHENZENTRUM FÜR DIE HOCHSCHULEN IN UND UM MÜNCHEN BIETET DAS LEIBNIZ-RECHENZENTRUM EIN UMFASSENDES ANGEBOT AN HARD- UND SOFTWARE FÜR DIE WISSENSCHAFTLICHE DREIDIMENSIONALE VISUALISIERUNG. IM JAHRE 2000 WURDE DIE ERSTE VIRTUAL-REALITY-ANLAGE BESCHAFFT. HEUTE VERFÜGT DAS LRZ ÜBER EIN BREITES SPEKTRUM IMMERSIVER 3D-VISUALISIERUNGSSYSTEME.



[HTTP://DE.WIKIPEDIA.ORG](http://de.wikipedia.org)

**Zeichnung in der Höhle von Lascaux. Vermutlich zwischen 17.000 und 15.000 Jahren vor unserer Zeitrechnung erstellt. Die Zeichnung stellt hauptsächlich realistische Abbilder größerer Tiere wie Auerochse, Pferd und Hirsch dar.**

VON CHRISTIAN BROSSMANN

Sehen ist einer der wichtigsten unserer Sinne. Das Visualisieren, also Darstellen, des „Gesehenen“ war für den Menschen schon in der Steinzeit ein großes Bedürfnis. Die Zeichnung in der Höhle von Lascaux gibt uns heute viel Aufschluss über die Kultur und Vorstellungswelt der Steinzeit. Bemerkenswert ist die Tatsache, dass die Menschen der ausgehenden Altsteinzeit schon perspektivisch zeichneten, verschiedene Maltechniken benutzten und das Verhalten von Tieren naturgetreu wiedergaben.

Dreidimensionales Sehen ist ein zentraler Garant für das Überleben. Seit Beginn der Entwicklung von Lebewesen mit zwei Augen profi-

tierten diese von der phantastischen Fähigkeit des Gehirns, aus zwei nur leicht unterschiedlichen Bildern des rechten und linken Auges (Parallaxe) einen Tiefeneindruck aus der ursprünglich zweidimensionalen Bildinformation heraus zu „rechnen“. Hilfreich war dies besonders bei der Jagd - oder auf der Flucht. Der Mehrgehalt von Bildern mit „Tiefgang“ lässt sich leicht verstehen, wenn man versucht, ein Objekt mit einem Stein zu treffen und dabei nur mit einem Auge das Ziel anvisiert.

Die Idee, das Potential unserer Sehrinde im Okzipitallappen nachzuahmen und Nutzen daraus zu ziehen, ist nicht neu. Bereits im 4. Jh. v. Chr. befasste sich der griechische Mathematiker Euklid in den Bänden 11 bis 13 seiner Lehrbücher zur Mathematik mit der Stereometrie. Er wusste schon damals um den physiologischen Zusammenhang zwischen den beiden Stereohalb Bildern und dem räumlichen Seheindruck.

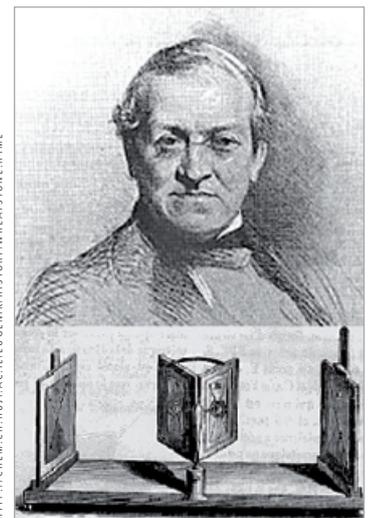
## Anfänge der Stereoskopie

1838 präsentierte Sir Charles Wheatstone (1802–1875), Professor für experimentelle Naturwissenschaften am King's College in London, seine ersten Forschungsergebnisse über körperliches (Stereo-) Sehen. Er berechnete und zeichnete Stereobildpaare und konstruierte für deren Betrachtung ein Spiegelstereoskop, damit linkes und rechtes

Auge ihre perspektivisch unterschiedlichen Ansichten sehen.

## Stereofotografie

Mit der Fotografie begann dann der Durchbruch der Stereoskopie. Bereits 1860 waren in Europa über



[HTTP://CHEM.CH.HUJI.AC.IL/EUGENIK/HISTORY/WHEATSTONE.HTM](http://chem.ch.huji.ac.il/EUGENIK/HISTORY/WHEATSTONE.HTM)

**Sir Charles Wheatstone und das von ihm konstruierte Spiegelstereoskop.**

eine Million Stereoskope und ein Vielfaches an dazugehörigen Stereokarten verkauft. Die Gebrüder Lumière produzierten bereits 1903 einen einminütigen 3D-Kurzfilm *L'Arrivee du Train*. 1922 wurde der erste Langfilm *The Power Of Love* als Stummfilm aufgeführt. Um den 3D-Eindruck zu realisieren, wurden Rot-Grün Anaglyphenbrillen verwendet. Bei heutigen 3D-Fil-

men wird die Bildtrennung mittels Polarisationsbrillen oder Shutterbrillen erzielt.

3D-Sehen ist allerdings nicht der einzige Faktor - wenn auch der wichtigste - der uns unsere Umwelt räumlich wahrnehmen lässt. Neben Verdeckung, Schattenwurf, Texturen und perspektivischen Aspekten spielt die Bewegungsparrallaxe (Blick aus dem fahrenden Zug) und die Haptik – die Interaktion mit der Umwelt – eine zentrale Rolle. Film und Fotografie stoßen bei letzteren an ihre Grenzen.

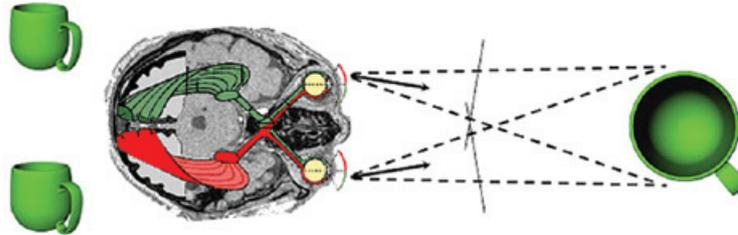
### Virtual Reality

In den 80er Jahren wurde unter anderem vom Musiker und Künstler



**Der Musiker und Künstler Jaron Lanier ist einer der Mitbegründer des Begriffs „Virtual Reality“.**

Jaron Lanier der Begriff *Virtual Reality* definiert. Darunter versteht man das Vortäuschen einer künstlich erzeugten Realität durch Erzeugung entsprechender Sinneswahrnehmungen mit Hilfe technischer Verfahren. Ziel ist ein Gefühl des Eintauchens (*Immersion*) in die Künstliche Welt. Derzeit wird dies durch Stereoskopie (3D-Sehen), *Tracking* (ständige Perspektivenanpassung abhängig vom Standort des Betrachters durch ein Positionsver-



**Zwei Augen, Parallaxe, Sehstrahlung und Sehrinde erzeugen den Tiefeneindruck.**

folgungssystem) sowie Interaktionsmöglichkeiten mittels 3D-Computereingabegerät (3D-Maus) erreicht. Mit haptischen Geräten ist es sogar möglich, Tasteindrücke (*Force Feedback*) zu vermitteln. Durch Integration von 3D-Sound lässt sich der Raumeindruck noch weiter steigern. Im Bereich der Unterhaltung wird zusätzlich mit der Simulation von Geruchseindrücken gearbeitet (*Sensorama*).

### Technik

Um diese Anforderungen zu realisieren, musste man auf entsprechend leistungsfähige Grafikkhardware warten. Die ersten leistungsfähigen Grafikkarten sind seit den 80er Jahren verfügbar. In den 90er Jahren stellten Computer der Firma SGI den Standard für anspruchsvolle Grafikanwendungen dar. Mit der Entwicklung leistungsfähiger Grafikkarten für den Entertainment Bereich (Computerspiele) in den späten 90er Jahren sind Virtual-Reality Installationen nun auch mit kostengünstigerer PC-Hardware möglich.

### VR-Ausstattung des LRZ

Das Leibniz Rechenzentrum installierte für die Wissenschaftler und Institute aus dem Münchner Hochschul Umfeld im Jahr 2000 eine L-förmige Großprojektionsanlage (*Holobench*), welche ursprünglich von einer SGI Onyx II betrieben wurde.

Um dem wachsenden Leistungshunger der Daten gerecht zu werden, hat das LRZ 2004 einen

PC-Cluster beschafft. Die Frage der Benutzer nach mobiler 3D-Visualisierung motivierte zur Beschaffung einer mobilen 3D-Projektionsanlage - vergleichbar einer geschrumpften IMAX Version und eines *Head-Mounted-Displays* (HMD) - einem helmartigen, auf dem Kopf zu



PETER WEINERT

tragenden Stereoprojektionssystem. **Forschung**

Der Einsatz der oben genannten Technologien ist sehr vielseitig. Es gibt bereits einige kommerzielle und frei verfügbare wissenschaftliche Softwarepakete, die einerseits als Analyse, Mess- und Rekonstruktionswerkzeug am „normalen“

**Beamerhalterung der mobilen 3D-Projektionsanlage. Interessant für Präsentationen vor einer größeren Anzahl von Zuschauern. Auf Positionsverfolgung wird bewusst verzichtet. Die ausgefeilte Feinjustierung des Gestells zur Ausrichtung der Projektoren wurde von Peter Weinert konstruiert.**



**Ein Head-Mounted-Display (HMD) macht Virtual Reality „mobil“.**



Virtual Reality-Labor des LRZ.

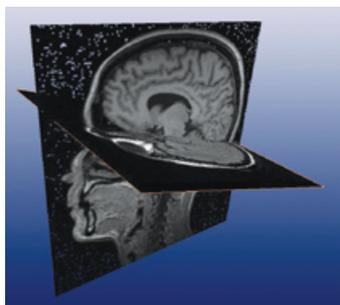
PC im Institut dienen, andererseits ein Plug-In zur Einbindung von wissenschaftlichen Bilddaten in eine Virtual Reality Umgebung bereitstellen. Dies vereinfacht den Arbeitsablauf und verringert den Zeitaufwand für derartige Projekte. Als Beispiele für Fachgebiete, die mit 3D-Daten arbeiten, seien genannt: Medizin (Scanverfahren wie z.B. die Computertomographie

und Magnetresonanztomographie), Biologie, Zoologie und Anatomie (Paraffinschnitte, konfokale Mikroskopie), Geographie und Geologie (Satellitendaten), Paläontologie (Schliffpräparate), Architektur und Ingenieurwissenschaften (CAD Modelle, Simulationsdaten) sowie Psychologie. Allen gemeinsam ist die in der Regel große Datenmenge, die visualisiert werden soll. Zu

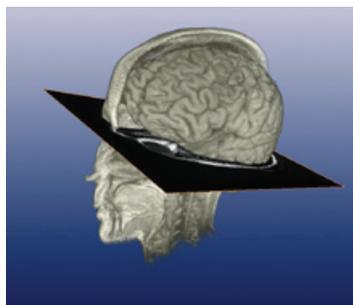
diesem Zweck sind Rechner mit großen Kapazitäten erforderlich. Prä- und Intraoperative.

**Planung in der Neurochirurgie**

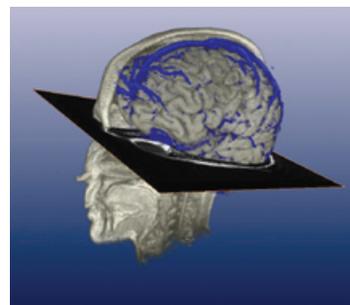
PD Dr. Winkler und Dr. Vollmar, Neurologische Klinik des Universitätsklinikum Großhadern (LMU), verwenden die 3D-Rekonstruktion und immersive Visualisierung mit



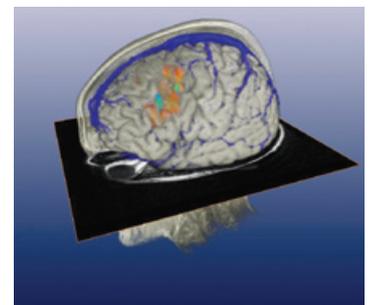
Unterstützung für den Mediziner sowohl bei der Diagnose wie bei der Therapieplanung: Ausgangspunkt sind 2D- Schichtdaten aus Computer- und Magnetresonanztomographie.



Aus verschiedenen Aufnahme-sequenzen kann mit der Rekonstruktion begonnen werden. Hirnoberfläche (T2 gewichtete MR-Aufnahmen).



Die Hirnvenen (blau) bieten sich als eine auch makroskopisch gut sichtbare Landmarke an.



Pathologische Veränderungen (grün-orange) können z.B. mittels MR (hier: FLAIR Sequenz) visualisiert werden.

DR. VOLLMAR, KL.GROSSHADERN, LMU

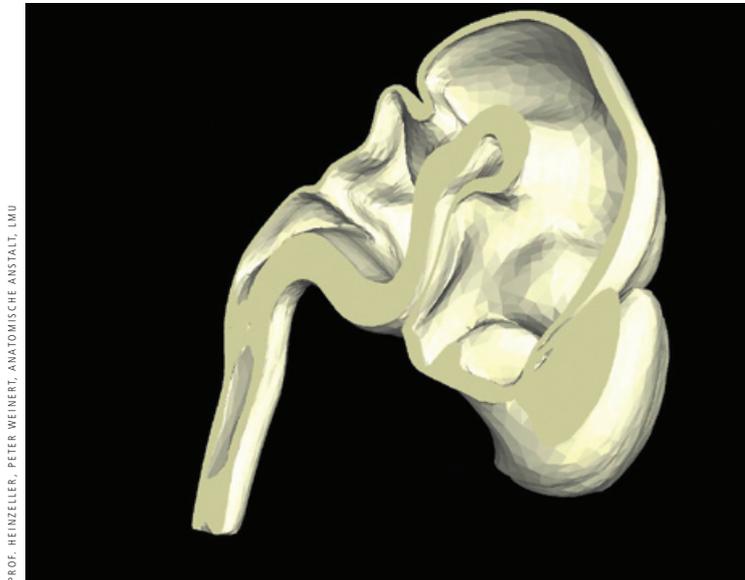
dem Ziel, chirurgische Eingriffe am Gehirn von Patienten mit Epilepsie noch exakter planen zu können. Hierzu werden DICOM-Bilddaten verschiedenster Aufnahmetechniken (CT, MRT, SPECT, PET) fusioniert, segmentiert und anschließend rekonstruiert.

DICOM ist die Abkürzung für *Digital Imaging and Communications in Medicine* und ist ein standardisiertes Bildformat in der Medizin. Unter Segmentierung versteht man die Erzeugung von inhaltlich zusammenhängenden Regionen durch Zusammenfassung benachbarter Pixel (Bildpunkt) oder Voxel (Volumenelement) entsprechend einem bestimmten Homogenitätskriterium.

Das Resultat ist ein multimodales 3D-Modell der gesunden und pathologischen Strukturen des jeweiligen Patienten. Der Chirurg erhält so Daten für die prä- und intraoperative Planung. Die Bilder links unten zeigen die schrittweise Rekonstruktion von Gehirn (grau), Hirnvenen (blau) und pathologischen Veränderungen (orange-grün) in der Großhirnrinde.

#### Analyse und 3D-Visualisierung – Neue Einblicke für Forschung und Lehre

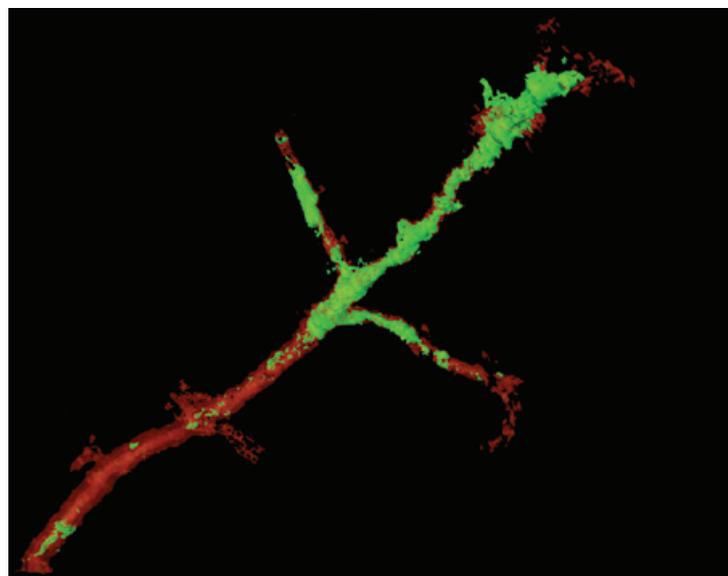
Die Arbeitsgruppe um Professor Heinzeller (Beate Aschauer und Peter Weinert) vom Lehrstuhl III für Neuroanatomie der Anatomischen Anstalt der LMU verwendet immersive Projektionstechnologie und 3D-Visualisierungsverfahren, um komplexe mikroskopische Strukturen zu analysieren und leichter verständlich zu präsentieren. Unter anderem werden Paraffinschnittserien von embryonalen Organen digital fotografiert. Die anschließende Aufbereitung der Daten im Rechner ist wesentlich aufwendiger als bei DICOM-Daten. Zum einen entstehen beim Schneidevorgang unvermeidliche Stauchungen, was



Sagittaler Schnitt durch die Rekonstruktion eines ca. 8 Wochen alten human-embryonalen Gehirns.

Korrekturen an den meisten Bildern erfordert, zum ändern müssen die Einzelbilder zueinander ausgerichtet werden (Alignierung). Ziel der Forschung ist das bessere Verständnis der komplexen embryonalen Entwicklung. Um die großen 3D-Datenmengen stereoskopisch visualisieren zu können, wurde von Peter Weinert ein angepasster und sehr leistungsfähiger 3D-Viewer programmiert. Das Teilprojekt B2 (Projektleiterin: Frau PD Dr. Wagner; Doktoranden: Lisa Kurtz, Katharina Machura, Alexander Sauter) des Sonderforschungsbereichs 699 am Lehrstuhl

für Physiologie Professor Kurtz an der Universität Regensburg verfolgt bei der Erforschung der Regulation des Nierenhormons Renin in der embryonalen Entwicklung einen ähnlichen Ansatz. Dabei werden histologische Serienschnitte von embryonalen Mausembrionen mit einer Doppelimmunfluoreszenz-Färbung behandelt und anschließend mikroskopisch digitalisiert. Nachdem die Daten weiter verarbeitet worden sind, kann die dreidimensionale Rekonstruktion erfolgen. Neben verschiedenen statistischen Auswertungen können außerdem die



Darstellung eines Nierenblutgefäßes (rot) mit reninbildenden Zellen (grün).



**Virtual Reality Experiment der Psychologen. Totales Eintauchen in die Virtuelle Welt dank HMD und Lenkapparat.**

räumlichen Zusammenhänge über verschiedene Entwicklungsstadien vergleichend an der Holobench immersiv analysiert werden.

**Psychologie – Fear Response mit Virtual Reality Technik**

In der Experimentalreihe „Fear Response“ des Instituts für

Allgemeine Psychologie II der LMU untersucht das Team von Prof. Dr. Friedrich Försterling und Dipl.-Psych. Martin Binsler in Kooperation mit dem Leibniz-Rechenzentrum verschiedene Aspekte Furcht auslösender Stimuli sowie die Reaktionen darauf. Es geht darum, zu erfahren, ob sich im Laufe der menschlichen Evolution verschiedene adaptive Antworten auf unterschiedliche Angst auslösende Situationen (Höhenangst und Furcht vor einem Angreifer) herausgebildet haben.

Dabei werden Versuchspersonen entsprechenden Situationen in der Virtuellen Realität ausgesetzt und ihre Reaktionen mittels Fragebögen sowie Bewegungssensoren erhoben. Dipl.-Psych. Martin Binsler und mit dem Projekt assoziierte Institute entwickelten eine innovative Lenkmethode auch für therapeutische Zwecke.

Ein Beispiel ist etwa die Behandlung der Höhenphobie. Die Technologie wurde deshalb über die bayerische Hochschul-Patentinitiative *BayernPatent* zum Patent angemeldet. Um möglichst realitätsgetreue Stimuli zu erzeugen, werden mit der Technologie des Computerspiels

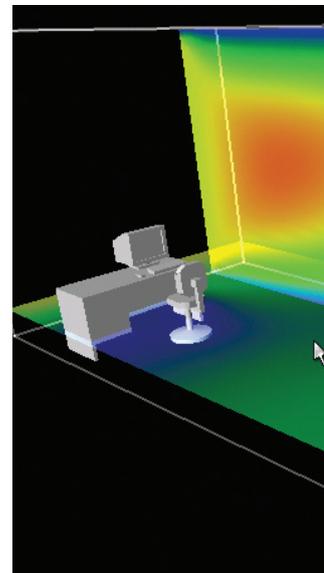
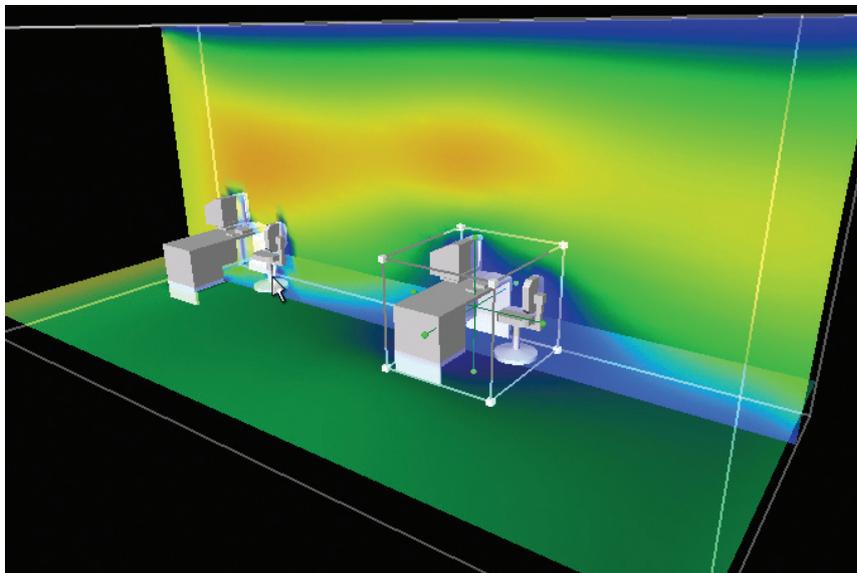
Farcry der Fa. Crytek entsprechende Welten konstruiert. Diese werden Versuchspersonen mit dem vom LRZ bereitgestellten HMD präsentiert.

**Computational Steering – Interaktive Strömungssimulation im Bauwesen**

Ein wichtiger Aspekt bei der Planung von Gebäuden ist unter anderem die Berücksichtigung von Luftströmungen, zum Beispiel bei der Gestaltung ergonomischer Arbeitsplätze in Büroräumen: Um bereits in der Planungsphase eine möglichst realistische Abschätzung zu ermöglichen, wurde am Lehrstuhl für Bauinformatik der TUM unter Prof. Rank in Zusammenarbeit mit dem LRZ eine interaktive Anwendung zur Strömungssimulation entwickelt.

Durch den Einsatz des Bundeshöchstleistungsrechners HLRB können die aufwendigen Strömungsberechnungen nahezu in Echtzeit durchgeführt und auf geeigneten Grafikrechnern dreidimensional visualisiert werden. Dies erlaubt dem Architekten oder Bauingenieur, interaktiv die Belüf-

**Computational Steering in der Komfortanalyse: Die Anordnung von Einrichtungsgegenständen und die Belüftungseinstellungen eines Büroraumes können während der Simulation interaktiv verändert werden. Im Planungsprozess ist dies hilfreich, da die entsprechende Veränderung der Luftströmung in Echtzeit berechnet und visualisiert wird. (Kontakt Petra Wenisch, wenisch@bv.tum.de)**



tungs- und Zugluftkonfiguration eines geplanten Raumes zu analysieren und gegebenenfalls geeignet abzuändern.

### Raumerfahrung – Studenten der Kunstpädagogik erleben virtuelle Welten ganz real

Dass Virtual Reality nicht nur rein wissenschaftlich genutzt werden kann, sondern durchaus auch in praxisorientierte Seminare eingebunden ist, zeigt die seit 2002 bestehende Kooperation mit Dr. Karin Guminski vom Institut für Kunstpädagogik der LMU.

Ziel der Lehrveranstaltung ist es, den Studierenden einen Überblick in Theorie und Praxis über das Themengebiet der 3D-Computergraphik und der 3D-Computeranimation zu geben. Hierbei werden neben den Grundlagen für die dreidimensionale Darstellung, der Erzeugung von 3D-Szenen und der Animation von 3D-Objekten auch Aspekte der Echtzeit-3D-Darstellung behandelt.

Die Studenten lernen dabei den Umgang mit einer 3D-Visualisierungs- und Animationssoftware und sind in der Lage, die von



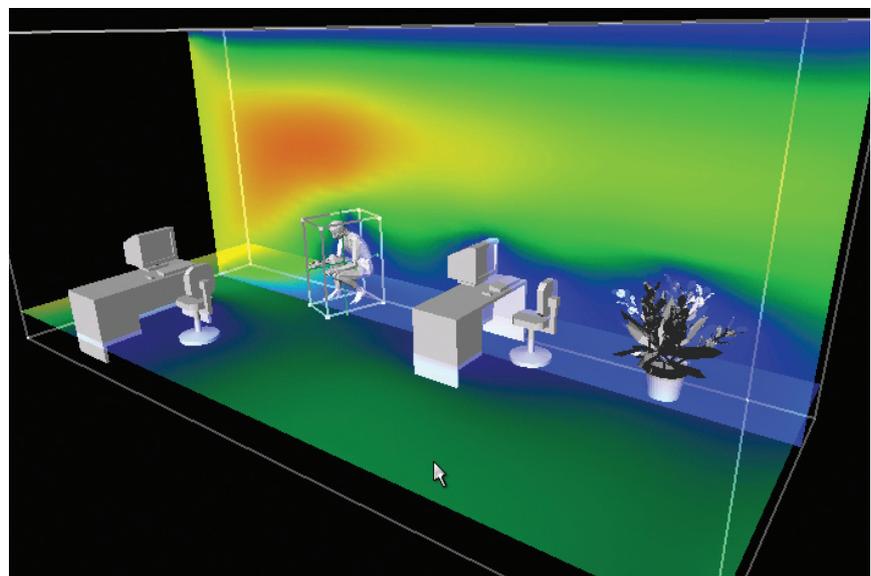
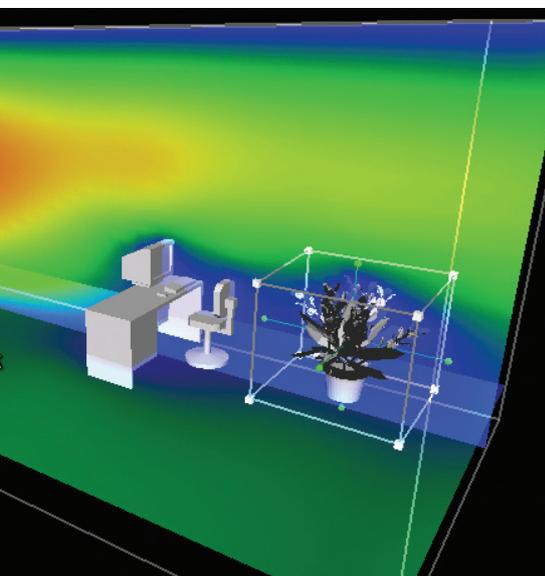
Ihnen konstruierten Modelle, Welten und Räume nach Fertigstellung am 2D-Monitor an der Holobench virtuell zu erforschen. Der „Aha“-Effekt ist dabei vorprogrammiert: die Diskrepanz zwischen der 2D-Planung und dem echten Raumgefühl, dem Erleben von Beleuchtungseffekten, die Wirkung von Texturen beim „davor

stehen“ oder die Verwunderung über den eigenen Geschmack beim ganz realen Erleben der eigenen, virtuellen Welt.

*Der Autor ist Arzt und betreut den Bereich Virtual Reality und wissenschaftliche Datenvisualisierung am Leibniz-Rechenzentrum.*



**Virtuelle Welten – ganz real! Studenten der Kunstpädagogik „begehen“ ihre eigenen Modelle.**





FORSCHUNG

# Forschung und Entwicklung am LRZ

EIN RÜCKBLICK AUF DIE FORSCHUNGSLEISTUNGEN DES LRZ BELEGT DIE HOHE WISSENSCHAFTLICHE QUALITÄT.

VON HEINZ-GERD HEGERING

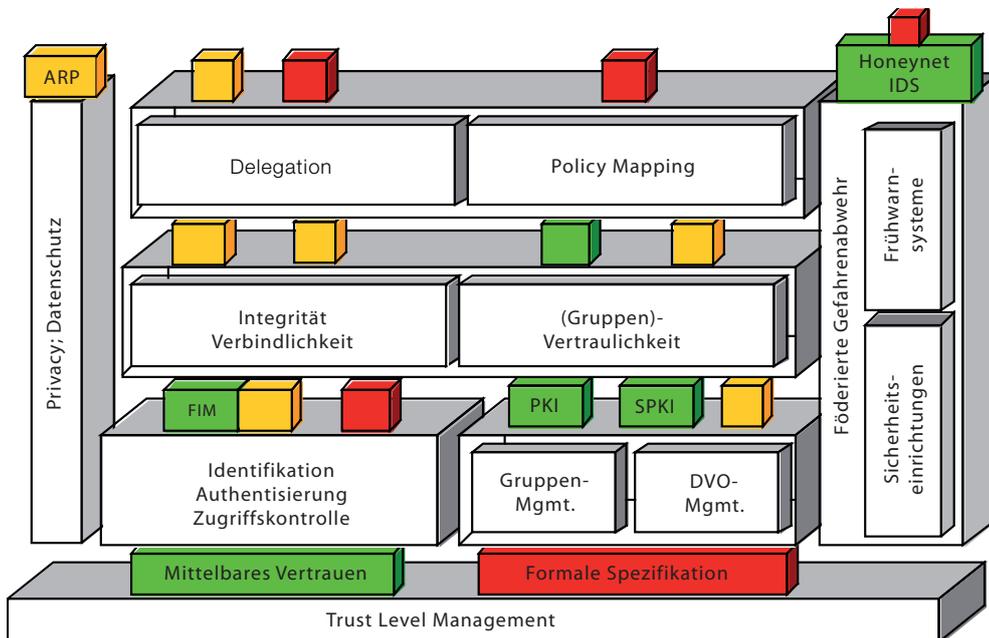
Die Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften hat sich satzungsgemäß nicht nur mit dem Betrieb des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) zu befassen, sondern auch mit der Forschung auf dem Gebiet der Informatik. Das LRZ war in seiner ganzen Geschichte immer an Forschungs- und Entwicklungsprojekten beteiligt. Dies geschah und geschieht durch Mitglieder der Kommission für Informatik und durch Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des LRZ. Der Vorsitzende des Direktoriums des LRZ sorgt für die

wissenschaftliche Ausrichtung der Arbeiten am LRZ. Die Ergebnisse der Arbeiten sind in zahlreichen Projektberichten und Publikationen festgehalten, die auch in den Jahresberichten der Akademie aufgezählt sind. Die untersuchten Themen orientierten und orientieren sich am jeweiligen Bedarf des LRZ und seiner Nutzer, sie spiegeln aber auch etwas die Entwicklungsgeschichte der Informatik wider: Fragen der Systemprogrammierung, der Betriebssysteme, der Programmiersysteme, des Compilerbaus, der numerischen Algorithmen, der Programmbibliotheken, der IT-Managementverfahren, des *High-Performance Computing* und des *Grid Computing*.

## Neuentwicklungen – von Anfang an

Da das LRZ erst im Jahre 1963 mit wissenschaftlichem Personal ausgestattet wurde und zum Lieferzeitpunkt des TR4 (1964) keine funktionell ausreichenden Systemprogramme vom Hersteller zu erwarten waren, gab es bereits ab 1960 im Rechenzentrum der TU München (PERM-Arbeitsgruppe) umfangreiche Untersuchungen, Entwürfe und teilweise auch erste Implementierungs-Skizzen zur Systemsoftware für die neue Maschine. Die beiden wichtigsten Themenkreise waren ein Programmiersystem für ALGOL60 und ein Betriebssystem für eine Magnetband-orientierte Anlage.

## Sicherheitsarchitektur für Grids.



Nach den Betriebserfahrungen mit der PERM erschien es dringend erwünscht, bei Laufzeitfehlern von Benutzerprogrammen, denen ALGOL-Quellprogramme zugrunde lagen, eine Fehlerdiagnose zu liefern, die sich auf das Quellprogramm bezieht (Fehlerstatus-Angabe auf Quellebene). Nebenbedingung war dabei, dass erst bei Auftreten eines Fehlers vom voll kompilierten Maschinenprogramm auf die Quell-Ebene zurückgegangen werden sollte. Dadurch wurden Effizienz-Einbußen zur Programmlaufzeit vermieden. Die hierfür notwendigen Komponenten (*Compiler* mit optionaler Bereitstellung von Hilfslisten für den Fehlerfall) und weitere Laufzeit-unterstützende Programme wurden im Program-



miersystem zusammengefasst. Dazu gibt es neben den damaligen Betriebsbeschreibungen aus dieser frühen Phase nur eine Literaturstelle: *G. Seegmüller, Some remarks on the computer as a source language machine*, Proceedings IFIP Congress 62, North-Holland, 1962, 524–525.

### Das TR4-Betriebssystem

Neuland wurde mit dem Entwurf, der Konstruktion und der Implementierung des TR4-Betriebssystems beschrieben. Da große Flexibilität in der Betriebsgestaltung angestrebt wurde, sah man die Abfolge der vom System zur Ausführung gebrachten Komponenten eines Benutzer-Jobs als „Befehle“ eines übergeordneten „Superautomaten“ an, der vom Betriebssystem realisiert wurde. Dies wurde in Analogie zur Befehlsausführung auf Maschinenebene gesehen. Das Prinzip erwies sich als sehr tragfähig für die geplanten Funktionen (Stapelverarbeitung mit *Spooling*, Systemänderungen bei laufendem Betrieb, dynamisches *Job-Scheduling*, Mehrprozessbetrieb, Einbettung von Programmiersystemen). Dazu existiert die Veröffentlichung von *H.-R. Wiehle, G. Seegmüller, W. Ulrich, F. Peischl: Ein Betriebssystem für schnelle Rechenautomaten*, Elektron. Rechenanlagen 6 (1964) 119–125.

### Erste Programmibibliotheken

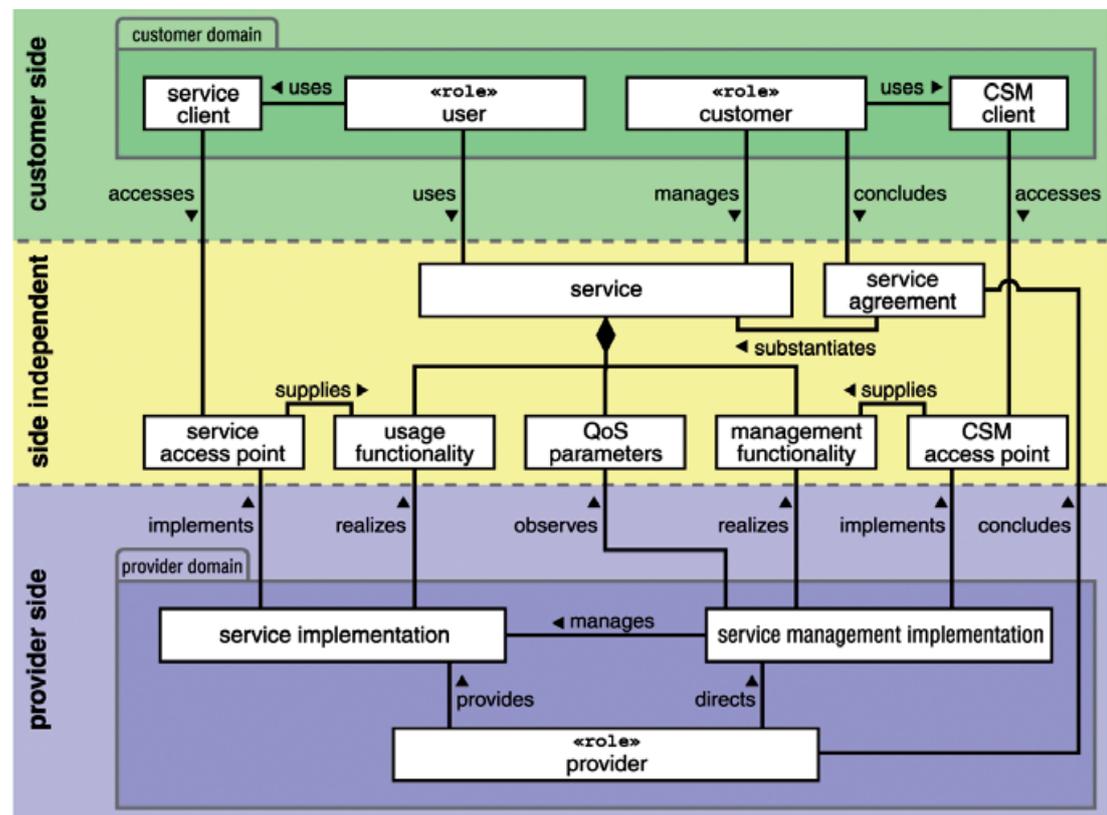
Schon früh erfolgte auch die Entwicklung erster Programmibibliotheken, insbesondere für die Gebiete Statistik-Verfahren und Numerik, sowie Forschung auf den Gebieten von Eigenwert- und Approximationsverfahren.

### ADA und ASTRA

In den 70er und 80er Jahren war das LRZ unter Gerhard Seegmüller bei der Entwicklung des prozess-

orientierten TR440-Multiprozessor-Betriebssystems BSM mit beteiligt. Es war unter Christoph Zenger und Klaus-Dieter Reinsch aktiv in der Entwicklung von Numerik- und Grafik-Algorithmen, die sich niederschlug im LRZ-Grafiksystem,

Zürich; auch Informatik-Pioniere wie Brinch-Hansen, Dijkstra und Hoare waren häufig Gast am LRZ. Am LRZ wurden umfangreiche Produktevaluationen mit den ersten PC-Generationen durchgeführt, was zu viel beachteten Bewertungskrite-



Das MNM-Dienstmodell

das lange Jahre im Produktionsbetrieb war und sich durch eine geräteunabhängige Ausgabe-schnittstelle und -zweischensprache auszeichnete. Genannt werden müssen auch die Aktivitäten zur Entwicklung von Systemimplementierungssprachen (ADA, ASTRA) in enger Kooperation mit der *IFIP Working Group 2.1*. Erwähnt sei beispielsweise die Publikation von *H.-G. Hegering, D. Schneider, G. Seegmüller und A. Schwald: Systems Programming Elements of the Language ASTRA* in: Software-Systems Engineering Conference, Uxbridge 1975. Besonders enge Zusammenarbeit bestand damals mit Nikolaus Wirth von der ETH

rien-Katalogen führte (siehe etwa in Informatik-Fachbericht 96, Springer 1985).

### Entwicklung der Netze

Mit der Einführung des AEG-Fernzugriffnetzes auf die zentralen Cybersysteme entstand als Vorläufer zu jetzigen Netzmanagementsystemen bereits 1982 ein multiresidentes System zur Netzstatusanzeige, das auf einem Farbgraphikgerät die Netzauslastung und den Status der Außenstationen darstellen konnte. Auch wurde deutschlandweit das erste 10Mbit-Ethernet (*Net-/One* von Ungermann-Bass) und die erste Nutzung von Glasfasern für Ether-

net (Hirschmann) pilotiert und in vielen Publikationen dokumentiert (etliche LRZ-Berichte, Konferenzbeiträge und die Monographie von Chylla/Hegering bzw. Läßle/Hegering über Ethernet-LANs).

### IT-Management

Mit der Übernahme der LRZ-Leitung durch Heinz-Gerd Hegering gewannen Projekte im Netzbereich und Forschung auf dem Gebiet des IT-Managements stark an Gewicht. Es liegt ja auf der Hand, dass bei einer so umfangreichen und vielfältigen Kundenstruktur und Systeminfrastruktur, wie beim LRZ gegeben, das IT-Management der Komponenten, aber auch das IT-Servicemanagement eine bedeutende Rolle spielen. Hier sind zu nennen die Einführung von Netzmanagement-Plattformen in Forschung und Betrieb (ab 1989), die Entwicklung von Trouble-Ticket-Systemen zur Unterstützung von Hotline und Fehlermanagement (ab 1990), der Betrieb der ersten X.25-2Mbit/s- und 34Mbit/s-Strecke der Telekom im Rahmen eines DQDB-MAN-Testbeds (1991) und die Beteiligung am DFN-Projekt Regionales Testbed Bayern (Test 155Mbps über ATM) von 1994 bis 1996. Die Testbeds waren wesentlich für den Aufbau des Deutschen Forschungsnetzes.

### Customer Service Management

Ab 1998 war das LRZ federführend in der Entwicklung des DFN-Projektes *Customer Service Management* (CSM). Dabei geht es um eine Kundeninformations- und -interaktionsschnittstelle über Netzdienste. Der vom LRZ entwickelte CSM-Prototyp wurde zunächst (1998–2000) für das B-WiN produktiv eingesetzt und 2000–2004 für das G-WiN weiterentwickelt. Seit 2005 wird das Ergebnis auf das europäische Wissenschaftsnetz Géant übertragen. 1998–2000

war das LRZ auch beim DFN-Gigabit-Testbed beteiligt, bei dem WDM-Systeme und ATM-Switches untersucht wurden. In der Zeit entstand die weltweit erste 2,448-Gbps-Übertragung über ATM.

### IntegraTUM und Langzeitarchivierung

Ab 2004 wurde das LRZ mit einer größeren Gruppe Partner der TUM im DFG-Projekt IntegraTUM, wo es die Bereiche Mail-Systeme und *Federated Identity Management* abdeckt. Es geht dabei um die komplexe Aufgabenstellung, auf der Basis einer zu konzipierenden gemeinsamen *Metadirectory*-Struktur ein integriertes Informationsmanagement für viele Hochschulprozesse der Forschung, Lehre und Verwaltung zu ermöglichen, indem personenbezogene Verwaltungsdaten über Standardschnittstellen bereitgestellt und mit Beständen der Web-Portale, Bibliotheken, Medienzentren und lokalen System-Benutzerverwaltungen automatisiert abgeglichen werden. Seit 2005 ist das LRZ auch Partner im DFG-Projekt Langzeitarchivierung, bei dem die Bayerische Staatsbibliothek die Federführung hat.

### Grid Computing

Im Bereich *Grid Computing* konnte das LRZ sowohl beim EU-Projekt DEISA als auch beim BMBF-Projekt D-Grid eine Reihe von Drittmittelstellen einwerben. Beim *Large Hadron Collider Computing Grid* (LCG), dem großen europäischen Beschleuniger-Experiment des CERN, ist das LRZ als sog. Tier-2-Zentrum beteiligt. Schon 2000 hatten die ersten Grid-Aktivitäten begonnen, denn das LRZ hat an der Entwicklung der UNICORE-Middleware aktiv mitgearbeitet und später für die UNICORE-Community die Zertifizierungsinstanz wahrgenommen. Im Rahmen des D-Grid soll eine nachhaltig

nutzbare Basis-Grid-Infrastruktur entstehen und weiterentwickelt werden. Das Grid virtualisiert dabei Daten-, Informations- und Rechen-dienste, indem es die technischen Details der konkreten i.a. verteilten Realisierung verbirgt. Neben dieser Virtualisierung ist die kooperative Nutzung von Ressourcen ein Schlüsselement. Das Grid wird künftig eine Vielzahl von Dienstenutzern, sowohl aus dem wissenschaftlichen Bereich als auch aus der Wirtschaft, mit Dienstleistungen versorgen, die selbst wieder von einer Vielzahl von Dienstleistern erbracht werden. Das LRZ ist in Teilprojekten vertreten, die sich mit der Middleware Globus, der Ressourcen- und Dienstintegration, dem Management virtueller Organisationen, dem Monitoring sowie dem Accounting in Grids beschäftigen.

### Netze der nächsten Generation

Ab 2006 ist das LRZ Partner im *European Network of Excellence on Management of the Internet and Complex Services* (EMANICS), wo es um neue Managementkonzepte für Netze der nächsten Generation geht. Ferner betreut das LRZ im Auftrag von DANTE und DFN das neue europäische Projekt *Monitoring of Multidomain Networks*. Im Zusammenhang mit europäischen Forschungs- und Grid-Projekten werden nämlich in zunehmendem Maße auch auf europäischer Ebene virtuelle private Netze gebildet. Dabei wird es immer wichtiger, ein Monitoring zu etablieren, das in der Lage ist, die Domänengrenzen der rechtlich und technisch autonomen nationalen Forschungsnetze und des europäischen Verbundnetzes *Geant2* zu überwinden und eine echte Ende-zu-Ende-Sicht auf das virtuelle private Netz zu liefern. In einem von der europäischen Union geförderten Projekt (*Geant2*

GN2-JRA4-WI03) wird ein Konzept sowie eine prototypische Implementierung für ein solches domänenübergreifendes Monitoring entwickelt.

### Einsatz in Lehre und Forschung – Das MNM-Team

Im Zuge der Forschung am LRZ im Bereich IT-Management entstand das Münchner Netzmanagement-Team, international bekannter unter seiner Abkürzung MNM-Team, das sich unter der Leitung von Heinz-Gerd Hegering als eine der ersten Gruppen in Deutschland seit mehr als zwanzig Jahren mit Themen aus dem Bereich des IT-Managements in Lehre und Forschung befasst. Aus der Arbeit gingen fast dreihundert Veröffentlichungen, meist international, und zahlreiche Dissertationen hervor, ferner mehrere hundert Diplomarbeiten und Entwicklungsprojekte.

Was die Gruppe treibt, sind die Fragen, wie werden vernetzte Systeme betrieblich beherrschbar, welche Tools, welche Managementkonzepte, welche IT-Prozesse sind adäquat. Wie kommt man methodisch zu angemessenen Managementarchitekturen, Plattformen, Spezifikationen und Policies? Engste Zusammenarbeit gibt es mit verschiedensten Lehrstühlen an TU München, LMU, Universität der Bundeswehr München und weiteren Hochschulen im In- und Ausland. Zu den Kooperationspartnern gehören u.a. Siemens, HP, IBM, BMW, T-Systems, BMC Remedy, DFN, BSI, Materna, DANTE.

### Bezug zur Praxis

Die Forschungsarbeit des Teams profitiert erheblich davon, dass Mitglieder auch konkrete Betriebsverantwortung für umfangreiche IT-Infrastrukturen in komplexen organisatorischen Umfeldern haben. So kommen viele Fragestellungen

aus der Praxiserfahrung und können der Forschungs- und Entwicklungsarbeit zugeführt werden; umgekehrt können Ergebnisse und Prototypen einem Praxis- und Härtetest zum Tragfähigkeitsnachweis in konkreter Dienstleistungsumgebung unterworfen werden.

### Höchstleistungsrechnen am LRZ

Last but not least muss erwähnt werden, dass das LRZ seit geraumer Zeit aktiv in Projekten des Höchstleistungsrechnens (*High Performance Computing*, HPC) ist. Das begann bereits in den 80er Jahren mit einer DFG-Studie zum HPC-Bedarf und setzte sich fort mit Untersuchungen zu systemspezifischen Optimierungsmöglichkeiten von Algorithmen, nachdem ab 1988 mit einer Cray erstmals Supercomputer im LRZ installiert waren.

Nach der Gründung einschlägiger Sonderforschungsbereiche (SFB 342) und Kompetenzzentren der Bayerischen Forschungstiftung (FORTWIHR ab 1992, KONWIHR ab 1999) war das LRZ ab 1999 an dortigen HPC-Projekten beteiligt. Seit 2005 ist das LRZ Partner im Projekt DEISA (*Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications*). Dort wird Entwicklung im Bereich des Grids betrieben (z.B. Shared File System) und eine europäische Vernetzungsinfrastruktur mit einer vereinheitlichten Produktionsumgebung für nationale Supercomputerzentren aufgebaut. Projektbestandteil ist aber auch eine HPC-Anwendungsförderung (DEISA *Extreme Computing Initiative*), bei der sich das LRZ mit zwei Anwendungen aus dem Bereich der Strömungsmechanik einbringen konnte. Über Aktivitäten im LRZ-Umfeld beim High Performance Computing und bei den Computational Sciences wird in einem gesonderten Beitrag in diesem Heft berichtet.

### Munich Computational Sciences Centre

Es sei jedoch noch erwähnt, dass 2005 auf Initiative des LRZ die Gründung des *Munich Computational Sciences Centre* (MCSC) stattfand; den dazu gehörenden Rahmenvertrag haben Bayerische Akademie der Wissenschaften, Technische Universität München, Ludwig-Maximilians-Universität München, Max-Planck-Gesellschaft, LRZ und Rechenzentrum Garching der MPG unterschrieben.

Abschließend sei noch festgehalten, dass Mitglieder des Direktoriums des LRZ und wiss. Mitarbeiter des LRZ in diversen wichtigen Gremien aktiv bzw. leitend mitgearbeitet haben: Kommission für DV-Konzepte in Bayern, Netz- und Bibliothekskommissionen, Beirat Bayern Online, DFG-Kommission für Rechenanlagen, Beratender Ausschuss für Rechenanlagen (BAR) der MPG, Nationaler Koordinierungsausschuss für Höchstleistungsrechner des Wissenschaftsrates, DFN-Vorstand, ZKI/ALWR, BRZL usw. Es sei auch noch betont, dass eine Reihe von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die aus den verschiedensten Tätigkeitsbereichen des LRZ stammen, Hochschullehrer wurden.

*Der Autor ist Ordinarius für Informatik an der Ludwig-Maximilians-Universität München und Mitglied des Lehrkörpers der Informatik an der Technischen Universität München sowie Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.*

*Sein Forschungsschwerpunkt sind Netz- und Systemmanagement. Er ist Gründer und Leiter des Münchner Netz-Management-Teams MWM.*





FÜR FORSCHUNG UND LEHRE

# Höchstleistungsrechnen am LRZ und sein Umfeld

FORSCHUNGSVERBÜNDE AUS GANZ BAYERN SETZEN DIE RECHENKAPAZITÄTEN DES LEIBNIZ-RECHENZENTRUMS FÜR IHRE PROJEKTE EIN.

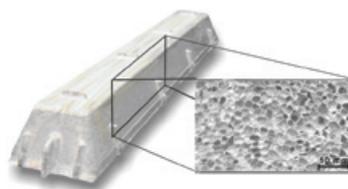
VON ARNDT BODE UND CHRISTOPH ZENGER

**S**echzig Millionen für einen Höchstleistungsrechner am LRZ. " So las man am 24. März 1996 in der Presse in Berichten über eine Regierungserklärung von Ministerpräsident Stoiber zur 2. Privatisierungsoffensive in Bayern. Diese Ankündigung war der Startschuss für

das Gebiet des Hochleistungsrechnens zu festigen und auszubauen. In der Ende 1994 erstellten Stellungnahme dieser Kommission wurde zum ersten Mal die Summe 60 Mio. DM, die man für einen Höchstleistungsrechner als erforderlich erachtete, festgeschrieben.

## Forschungsverbund und SFB

Die Zeit war günstig. Zwei Jahre zuvor, im März 1992 war der Bayerische Forschungsverbund für Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen FORTWIHR eingerichtet und für eine Laufzeit von 3 Jahren mit insgesamt 10 Millionen DM von der Bayerischen Forschungsförderung gefördert worden. Diese Förderung bedeutete einen kräftigen Schub für die ganze Disziplin mit Schwerpunkten in München und Erlangen und trug auch dazu bei, dass die neue Disziplin des Höchstleistungsrechnens auch öffentlich auf vermehrtes Interesse stieß.



Allerdings muss darauf hingewiesen werden, dass dieser Forschungsverbund nur die Spitze des Eisbergs einer Fülle von Projekten im Hochleistungsrechnen darstellte, die über die Universitäten Bayerns verstreut in diesen Jahren bearbeitet wurden

und die vorhandene Kapazität an Rechenleistung deutlich überschritt, z.B. der an der TU München von 1990 bis 2000 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft geförderte Sonderforschungsbereich 342 *Werkzeuge und Methoden für die Nutzung paralleler Rechnerarchitekturen*. Im Juli 1994 hatte deshalb der 1. Sprecher von FORTWIHR, Christoph Zenger, der auch das zuvor genannte Expertengremium des Ministeriums leitete, in einem Schreiben an Staatsminister Zehetmair auf die im nationalen und internationalen Vergleich immer weiter ins Hintertreffen geratende Ausstattung mit Hochleistungsrechnerkapazität hingewiesen und um Ausbaumaßnahmen gebeten. Die bayerische Staatsregierung reagierte rasch und großzügig mit der Bereitstellung der 60 Millionen, zusammen mit der Förderung von FORTWIHR ein damals in Deutschland absolut einmaliges Engagement der Bayerischen Staatsregierung, um das wir von unseren Kollegen in den anderen Bundesländern auch entsprechend beneidet wurden.

## Wettbewerb der Standorte

Damit war zwar eine günstige Ausgangssituation erreicht, aber zunächst musste sich Bayern noch als Standort für ein Höchstleistungszentrum nach den Vorgaben des Wissenschaftsrates durchsetzen. Dieser hatte 1995, also ein Jahr vor Bekanntgabe der Bayerischen Initiative, in einer *Empfehlung zur Versorgung der Wissenschaft und*



**KONWIHR-Projekt FreeWIHR (U. Rude, Lehrstuhl für Systemsimulation; C. Körner, Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Technologie der Metalle; Universität Erlangen-Nürnberg): Lattice-Boltzmann-Simulation der Herstellung von Aluminiumschaumformteilen.**

den Ausbau des LRZ zum Standort für einen von drei deutschen Zentren für Höchstleistungsrechnen in Deutschland neben dem Rechenzentrum der Universität Stuttgart und dem Rechenzentrum des Forschungszentrums Jülich.

## Bayerns Spitzenstellung

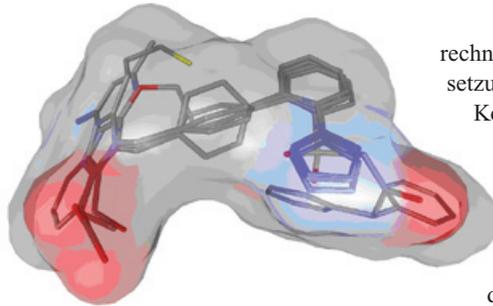
Diese Ankündigung kam zwar auch für die Insider überraschend, aber doch nicht wie der Blitz aus heiterem Himmel. Zwei Jahre zuvor hatte das Staatsministerium für Unterricht und Kultus eine Expertenkommission einberufen, um zu klären, welche Maßnahmen erforderlich seien, um die traditionell gute Stellung Bayerns auf dem



Forschung mit Höchstleistungsrechenkapazität gefordert, ca. drei Höchstleistungszentren einzurichten, die in zeitlich versetztem Beschaffungstakt Höchstleistungsrechner beschaffen sollten, die zum Beschaffungszeitpunkt jeweils mit der internationalen Spitze mithalten sollten. Nachdem Stuttgart bereits als Standort etabliert war, bewarben sich Bayern mit dem Standort München, aber zeitgleich auch der Norddeutsche Rechnerverbund mit einem auf Hannover und Berlin verteilten Standortkonzept. Obwohl befürchtet wurde, dass Hannover als Heimat des damals frisch gewählten Bundeskanzlers auch wegen eines nicht übersehbaren Rückstands der Region gegenüber Süddeutschland die besseren Chancen haben würde, ging Bayern als Sieger aus diesem Wettstreit hervor, wobei die von dem damaligen Ministerialrat Willisch hervorragend vorbereitete Strategie einen wesentlichen Beitrag leistete. Es war gleichzeitig ein hoffnungsvolles Indiz dafür, dass gute Sachargumente sich trotz manchmal aufkeimender Zweifel auch im politischen Umfeld immer noch durchsetzen können.

### Beschaffung des HLRB I

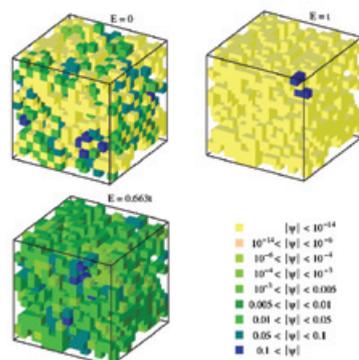
Am 1. März 2000 wurde nach einem von den Hauptnutzern und den Fachleuten des LRZ sorgfältig durchgeführten Auswahlprozess der Rechner HLRB I der Firma Hitachi vom Typ SR8000-F1 installiert, ein Ereignis, das in der Fachwelt, aber auch in der Presse ein ungewöhnlich großes Interesse fand. Auf der Liste der weltweit leistungsfähigsten Rechner, der TOP500 nahm er zum Beschaffungszeitpunkt die respektable Position 5 ein, obwohl er nicht wie manche Konkurrenten auf einen möglichst guten Listenplatz, sondern auf die realen Bedürfnisse der Benutzer getrimmt war und erfüllte damit die vom



Wissenschaftsrat vorgegebenen Kriterien. Das änderte allerdings nichts daran, dass er wie seine Vorgänger praktisch vom ersten Tag an voll ausgelastet war und sich schon bald wieder eine längere Warteschlange von Benutzer-Jobs bildete.

### Forschungsverbund KONWIHR

Der Weisheit des Wissenschaftsrates ist zu verdanken, dass mit der Einrichtung eines Höchstleistungsrechenzentrums auch die Förderung eines Kompetenznetzwerks verbunden ist. Damit soll sichergestellt werden, dass die teure Ressource auch so effizient wie möglich genutzt werden sollte. Nachdem der Bayerische Forschungsverbund FORTWIHR nach (für einen Forschungsverbund eher ungewöhnlichen) zwei Verlängerungen (FORTWIHR II und FORTWIHR III) im Jahre 2000 endgültig auslief, wurde vom Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst das Kompetenznetzwerk KONWIHR unter dem Sprecher Arndt Bode eingerichtet, indem Projekte aber auch Beratungsdienste auf dem neuen Bundeshochleistungsrechner gefördert wurden.



rechner gefördert wurden. Die Fortsetzung dieser Förderung für ein Kompetenznetzwerk zum neuen Bundeshochleistungsrechner ist noch nicht endgültig gesichert, die Wissenschaftler hoffen aber zuversichtlich, dass der Bayerische Staat, den vom Wissenschaftsrat geforderten Verpflichtungen nachkommt.

### Einsatz in der Lehre

Die Installation des Höchstleistungsrechners trug auch Früchte in der Ausbildung. Bei der Beantragung des Höchstleistungsrechners bei DFG und Wissenschaftsrat wurde auch angekündigt, Studiengänge im Hochleistungsrechen einzurichten, um auch in der Lehre ein Signal zu setzen. Dieses Versprechen, das bei der Bewilligung von den Gutachtern positiv gewürdigt wurde, ist eingehalten worden. Drei internationale Master-Studiengänge, die alle in englischer Sprache angeboten werden, wurden eingerichtet. Die Teilnehmer kommen überwiegend aus dem Ausland. In zeitlicher Reihenfolge sind es die Studiengänge Computational Engineering (CE) in Erlangen, Computational Mechanics (COME) an der TU München und Computational Science and Engineering (CSE) ebenfalls an der TU München. Alle drei Studiengänge bieten seit 2005 im Rahmen der Bavarian Graduate School for Computational Engineering ein Eliteprogramm an, das vom Bayerischen Elitenetzwerk gefördert wird. Auch bei der Besetzung mancher Professuren mag die gute Versorgung mit Rechenkapazität eine positive Rolle gespielt haben.

*Prof. Bode ist Inhaber des Lehrstuhls für Rechnertechnik und Rechnerorganisation, Prof. Zenger Vorsitzender der Kommission für Informatik der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.*



**KONWIHR-Projekt ENZYMECH** (T. Clark, J. Gasteiger, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen-Nürnberg). Überlagerung von Angiotensin-II Antagonisten, welche die Bindung des blutdrucksteigernden Botenstoffs Angiotensin-II an seine Oberflächenrezeptoren der Blutgefäße blockieren können.

**KONWIHR-Projekt HQS@HPC:** (H. Fehske, Theoretische Physik, Universität Bayreuth/Greifswald; G. Wellein, RRZE, Universität Erlangen-Nürnberg). Das Bild zeigt die Amplitude der Wellenfunktion in einem 3D-Anderson ungeordneten System und verdeutlicht die Ausbildung leitender Bereiche (Quantenperkolation) in Abhängigkeit von der Teilchenenergie oberhalb der Perkolationschwelle.

HLRB II

# Der neue Höchstleistungsrechner in Bayern: SGI Altix 4700

EIN ENORMER LEISTUNGSSCHUB FÜR DIE WISSENSCHAFT.



**Abb. 1:** Die neue SGI Altix 4700. **VON REINHOLD BADER UND MATTHIAS BREHM**

Nach einer Betriebsdauer von sechseinhalb Jahren wird der im LRZ-Gebäude in der Innenstadt Münchens betriebene Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB I), eine Hitachi SR8000-F1, Ende Juni 2006 außer Betrieb genommen. Er wird durch den erheblich leistungsfähigeren HLRB II ersetzt. Dabei handelt es sich in der ersten Ausbaustufe um ein Altix 4700-System der Firma SGI mit 4096 Intel Itanium2-Prozessoren. Dieser Rechner wird im Laufe des Junis im obersten

Stockwerk des LRZ-Neubaus in Garching installiert.

Die Leistungsdaten des neuen Systems sind bereits in der ersten Ausbaustufe imposant: Mit einer Spitzenrechenleistung von mehr als 26 Billionen Rechenoperationen (*Teraflops*) pro Sekunde wird Forschern aus ganz Deutschland am LRZ wieder ein Rechensystem mit europaweit konkurrenzfähiger Rechenleistung zur Verfügung stehen. Stellt man sich die Rechenoperationen als Nägel vor, die in einem Abstand von 1,5 mm einzuschlagen sind, so müsste man innerhalb einer Sekunde eine Strecke abarbeiten,

die den Äquator 975mal umrundet! Aber auch die Größe des Hauptspeichers ist gigantisch: mehr als 17 Terabytes (das sind 17000 Gigabytes) werden sehr umfangreiche und neuartige Simulationen ermöglichen.

## Die Vorzüge des neuen Rechners

Die besonderen Vorzüge des neuen Systems bestehen nicht nur in der obengenannten Spitzenrechenleistung, sondern auch in einer breiten Palette von Eigenschaften, deren Zusammenspiel eine sehr effiziente Nutzung des neuen Rechners ermöglicht. Die wichtigsten dieser Eigenschaften seien im Folgenden aufgezählt:

1. Das System ist in 16 Einheiten (*Partitionen*) mit jeweils 256 Prozessoren unterteilt, wobei jeder Partition ein logisch einheitlich ansprechbarer Hauptspeicher von 1 Terabyte zur Verfügung steht; kein anderes System in Europa weist derzeit diese spezielle Fähigkeit auf. In geeigneter Weise parallelisierte Programme können mehrere Partitionen gleichzeitig benutzen. Im Laufe des Betriebs und insbesondere mit der Installation der zweiten Ausbaustufe wird die Größe dieser Partitionen weiter wachsen.
2. Das System weist eine hohe aggregierte Bandbreite zum

Hauptspeicher auf, weil jedem Prozessor ein eigener Speicherkanal zur Verfügung steht. Damit sind datenintensive Simulationen sehr effizient durchführbar. Weil darüber hinaus jedem Prozessor ein 6 Megabytes großer schneller Cache-Speicher zur Verfügung steht, lassen sich manche Anwendungen sogar überproportional zur Zahl der verwendeten Prozessoren beschleunigen.

3. Der für die Ablage und Weiterverarbeitung von Daten verfügbare Hintergrundspeicher ist bezüglich Quantität und Qualität besonders performant ausgelegt worden: Es stehen für große Datensätze 300 Terabytes an Plattenplatz zur Verfügung (dies entspricht dem Inhalt von etwa 100 Milliarden voll beschriebenen DIN A4-Seiten). Die Daten können mit einer aggregierten Bandbreite von 20 Gigabytes/s gelesen oder geschrieben werden. Damit kann theoretisch der Hauptspeicherinhalt des Gesamtsystems innerhalb einer Viertelstunde auf die Platten herausgeschrieben werden. Da viele wissenschaftliche Programme in regelmäßigen Abständen Daten herausschreiben oder einlesen, wird hierdurch ein mitunter deutlicher Flaschenhals, der auf anderen Systemen zu leer stehenden Prozessoren führt, behoben.
4. Für die Benutzerverzeichnisse mit Programmquellen, Konfigurationsdateien usw. stehen weitere 40 Terabytes an extrem ausfallsicher ausgelegtem Plattenplatz zur Verfügung, auf den ein Zugriff auch von außerhalb des Systems möglich ist. Dieser Plattenbereich zeichnet sich durch hohe Transaktionsraten aus, so dass die effiziente Verarbeitung einer Vielzahl von kleinen Dateien gewährleistet ist.
5. Da das System aus Itanium2 Standard-Prozessoren der Firma Intel aufgebaut ist und als

Betriebssystem das inzwischen weit verbreitete Linux verwendet wird, steht ein großes Spektrum an Standard-Softwarepaketen zur Verfügung, die ohne großen Portierungsaufwand auf dem System eingesetzt werden können. Für die von Forschern selbst erstellten Programme steht eine vollständige Entwicklungsumgebung zur Verfügung, die einen fast nahtlosen Übergang von Arbeitsplatzsystemen oder von Clustern auf den neuen Höchstleistungsrechner ermöglicht.

	SGI Altix 4700	Hitachi SR8000
Prozessoren	4096	1344
Spitzenleistung	26,2 Teraflops/s	2,0 Teraflop/s
Hauptspeicher	17,2 Terabytes	1,3 Terabytes
Speicherbandbreite	34,8 Terabytes/s	5,4 Terabytes/s
Plattenplatz	340 Terabytes	10 Terabytes
Latenz des Interconnects	1-6 Mikrosekunden	14 Mikrosekunden

**Tabelle 1:**  
Vergleich der Leistungen des alten und des neuen Höchstleistungsrechners.

Die folgende Tabelle gibt eine Übersicht über die wesentlichen Leistungszahlen des neuen Systems im Vergleich zum Vorgänger. In der hier beschriebenen Konfiguration wird die Altix 4700 bis etwa Mitte 2007 betrieben; danach werden in einer zweiten Ausbaustufe alle Prozessoren durch ein Nachfolgemodell mit jeweils zwei Rechenkernen (statt einem) auf einem Prozessor-Knoten ersetzt.

Außerdem wird zusätzlicher Hauptspeicher und Plattenplatz installiert, sodass in der zweiten Ausbaustufe ein nahezu doppelt so leistungsfähiges System verfügbar sein wird; die vertraglich zugesicherte, durch Benchmark-Programme definierte Anwendungsleistung des Systems wird sich von 7 auf 13 Teraflops/s erhöhen.

**Systemarchitektur**

Die Systemarchitektur ist eine verteilte Shared-Memory-Architektur,

das heißt: der gemeinsame Hauptspeicher ist über die Systemknoten verteilt. Memory-Controller auf den Systemknoten sorgen für den cache-kohärenten Zugriff aller Prozessoren auf diesen gemeinsamen Hauptspeicher. Je nachdem, ob ein Speicherzugriff auf physisch lokale oder auf einem anderen Systemknoten befindliche Daten erfolgt, ergeben sich jedoch unterschiedliche Zugriffszeiten und Bandbreiten. Daher wird die Systemarchitektur auch als *cache-coherent non-uniform memory access* (ccNUMA)

bezeichnet. Die effiziente Nutzung eines derart ausgelegten Speichersystems stellt den Programmierer durchaus noch vor Herausforderungen, bietet aber auch große Flexibilität der Nutzung.

**Systemknoten**

Einzelne Systemknoten der Altix 4700 sind entweder mit Prozessoren ausgestattet oder es handelt sich um Ein/Ausgabe-Knoten. Alle Knotentypen sind in Form von Blades, einer flachen Bauform von Platinen mit gemeinsamer Strom- und Lüftungsversorgung, realisiert. Diese Blades werden mittels des SGI-Numalink4-Interconnects zu einem Shared-Memory-System zusammengeschaltet. Ein Compute-Blade besteht aus einem Intel Itanium2-Prozessorchip und einem Memory-Controller, der den Prozessor mit dem physisch lokalen Hauptspeicher verbindet sowie zwei Numalink-Kanäle zur Anbindung an den Interconnect bereitstellt (Abb. 2).

Die Intel Itanium2-CPU's sind mit 1,6 GHz getaktet und haben zwei Multiply-Add-Einheiten. Damit ergibt sich pro Prozessor eine Spitzenleistung von 6,4 Gigaflops/s (6,4 Milliarden Gleitkomma-Operationen pro Sekunde). Jede CPU ist darüber hinaus mit 256 Kilobytes Level 2 Cache und 6 Megabytes Level 3 Cache ausgestattet; im Unterschied zum „normalen“ Hauptspeicher laufen diese Caches mit der vollen Systemfrequenz, sodass solche Anwendungen, die ausreichend oft Daten aus dem

renzchnittstelle erlaubt es, Daten cache-kohärent direkt von der IO-Schnittstelle (z.B. PCI-X-Karte) über den Numalink4-Interconnect in den verteilten Hauptspeicher auf den Prozessorknoten zu transportieren.

### Aufbau des Interconnect

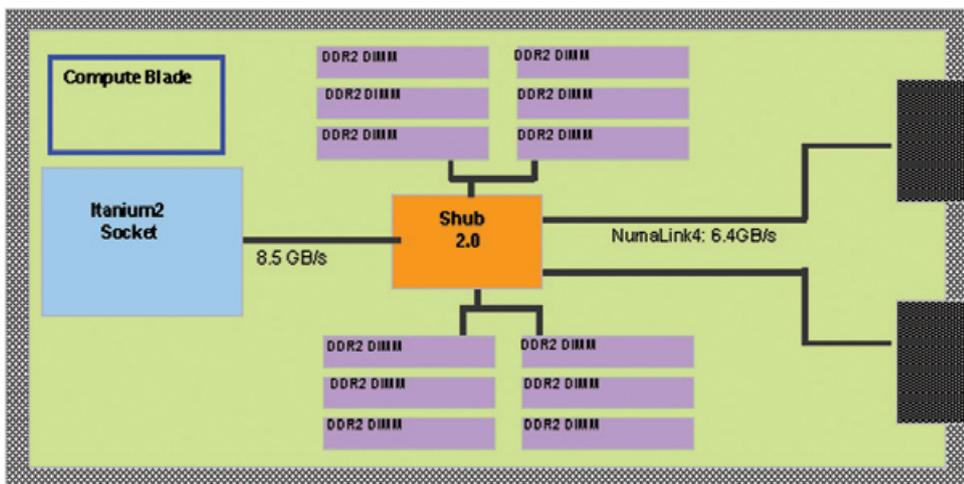
Der NumaLink4-Interconnect der Altix 4700 verbindet die einzelnen Blades miteinander. Er unterscheidet sich von handelsüblichen Netzwerk-Technologien dadurch, dass

Die NumaLink-Ports werden dabei mit der Backplane verbunden, die die Verbindung dieser zehn Blade-Slots untereinander und zu anderen Blades hin bereitstellt. Abb. 3 zeigt die Topologie einer Backplane eines Blade-Chassis.

Die 8-Port-Router verbinden jeweils vier Prozessor-Blades und (maximal) einen I/O-Blade untereinander und über eine zweistufige Hierarchie von Meta-Routern (hier nicht gezeigt) mit dem System-Interconnect. Diese zweistufige Hierarchie ist doppelt ausgelegt, sodass man die Topologie des Interconnects auch als „dual plane fat tree“ bezeichnet. Auf ihrer Basis beruht die Kommunikation innerhalb einer 256-Prozessor-Partition. Für die Kommunikation zwischen unterschiedlichen Partitionen stehen ebenfalls NumaLink4-Verbindungen zur Verfügung. Diese sind jedoch nur als sog. „Mesh-Topologie“ ausgelegt und weisen damit weniger Übertragungsbandbreite auf.

### Software-Umgebung

Die SGI Altix 4700 wird unter einem Standard-Linux-Betriebssystem betrieben. Als Linux-Distribution kommt Novells SUSE Linux Enterprise Server (SLES 10) zum Einsatz. Für diese Distribution bietet SGI zusätzliche Software für den Einsatz auf großen Systemen in Rechenzentren an: Neben den HPC-Numa-Tools, dem Message Passing Toolkit und der Scientific Subroutine Library (SCSL) sind das z. B. Storage Management Software wie das XFS-Filesystem mit XVMM Volume Manager, sowie deren Cluster-Erweiterungen CXFS und CXVM, Accounting-Pakete und der Performance Co-Pilot zur Systemüberwachung. Benutzern stehen zur ausgefeilten Performance-Messung an eigenen Programmen die SGI Tools histx, profile.pl sowie Speedshop zur Verfügung.



**Abb. 2:**  
Schematische Darstellung eines Systemknotens.

Cache wiederverwenden können, eine sehr hohe Anwendungsleistung erzielen. Auf der am LRZ installierten Altix 4700 sind die Speicherbänke im Normalfall mit 4 Gigabytes pro Blade bestückt; auf der zur interaktiven Nutzung vorgesehenen Partition stehen sogar 8 Gigabytes pro Blade zur Verfügung. In Phase 2 wird neben dem Austausch der Itanium2-CPU durch einen Doppelkern-Prozessor auch zusätzlicher Hauptspeicher in jeden Knoten eingebaut, um so auch letzteren in etwa zu verdoppeln.

Ein Ein/Ausgabe-Knoten besteht aus einer Cache-Kohärenzschnittstelle (TIO-Chip) und einem ASIC, der die gängigen IO-Schnittstellen, wie zum Beispiel PCI-X oder PCI-Express, bereitstellt. Die Kohä-

der Zustand des gesamten Hauptspeichers zu jeder Zeit für alle Prozessoren sichtbar ist. Darüber hinaus ist die Latenz beim Zugriff auf Daten auf anderen Blades gering. Der Interconnect besteht aus 8-Port-Routern, 8-Port-Metaroutern und Kabelverbindungen der Nodeboards mit den Routern sowie der Router mit den Metaroutern. Jede Kabelverbindung leistet 6,4 Gigabytes/s (3,2 Gigabytes/s je Richtung non-blocking). Die Router und Metarouter sind als non-blocking Crossbar-Einheiten realisiert und verfügen über acht NumaLink Ports (acht Eingänge und acht Ausgänge). Der Grundbaustein einer Partition ist ein Blade-Chassis, das über zehn Blade-Schächte verfügt, in die Prozessor- oder Ein/Ausgabe-Blades eingebracht werden können.

**Compiler und Tools**

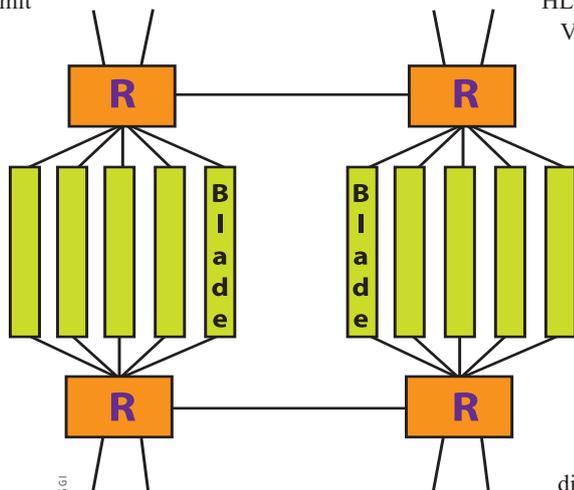
Für die Generierung von optimalem Code aus Fortran-, C- oder C++-Quellen kommen die Compiler-Produkte der Firma Intel zum Einsatz; diese unterstützen die entsprechenden Sprach-Standards (Fortran 2003, C99 und ANSI C++) und sind in der Lage, die besonderen Eigenschaften des Itanium2-Prozessors hinsichtlich der hochgradig parallelen Ausführung von Instruktionen auszunutzen. Darüber hinaus wird auch die OpenMP-basierte parallele Programmierung mit Threads durch die Intel-Compiler konform zum OpenMP-Standard 2.5 unterstützt. Die C/C++-Compiler sind kompatibel zu den mit dem Betriebssystem mitkommenden C- und C++-Compilern der GNU Compiler Collection. Darüber hinaus ist auch Sprachmischung zwischen Fortran und C/C++ möglich.

Als Alternative zur Verwendung von mathematischen Funktionen der Linearen Algebra (BLAS, LAPACK) und Fourier-Transformationen) in der SCSL ist es auch möglich, die Intel Math Kernel Library (MKL) zu verwenden. Diese stellt darüber hinaus auch schnelle Vektor-Versionen mathematischer Funktionen sowie Löser für dünn besetzte Matrizen (PARDISO) zur Verfügung. Die Integrated Performance Primitives-Bibliothek (IPP) stellt Codecs für die Audio, Film- und Bildverarbeitung, aber auch kryptographische Funktionen bereit. Zur Analyse des Laufzeit- und Kommunikationsverhaltens MPI-paralleler Programme dienen die Intel Tracing Tools (Vampir); für die Performance-Analyse serieller Programme auf der Basis der Itanium Hardware Performance

Counter stellt Intel mit VTune ein Tool mit graphischem Interface bereit, das auf dem Login-Knoten des LRZ-Systems verfügbar sein wird. Zur Fehlersuche und Fehlerbehebung in Programmen stehen Debugger von Intel und Etnus (Totalview) zur Verfügung.

**Rechenbetrieb**

Der größte Teil des Altix 4700-Superclusters wird in der Regel über das Warteschlangensystem PBSPro der Firma Altair zugänglich sein,



**Abb. 3:** Jeder der hier gezeichneten 8-Port-Router (R) verbindet jeweils vier Prozessoren-Blades mit maximal einem I/O-Blade.

sicherstellen, zu dem der Nutzer von seinem Arbeitsplatz aus das Programm bedienen kann.

**Nahtloser Übergang**

Das LRZ hat sich von Anfang an bemüht, für die Anwender einen nahtlosen Übergang auf das neue System zu ermöglichen. Seit Juli 2005 betreibt es deshalb eine SGI Altix 3700 mit 64 Prozessoren als Migrationssystem. Dort ist im Wesentlichen die Softwareumgebung installiert, wie sie auch auf dem HLRB II verfügbar sein wird.

Viele Nutzer haben dadurch bereits ihre Programme an das neue System anpassen können. Auch ein Wachstumspfad für künftige Programmentwicklungen ist vorhanden: Programme, die auf dem Linux-Cluster des LRZ und insbesondere auf der darin integrierten 128-Prozessor Altix 3700 Bx2 entwickelt wurden, können, wenn sie mit diesen Ressourcen nicht mehr auskommen, auf den neuen

Höchstleistungsrechner gebracht werden. Zum ersten Mal in der Geschichte des LRZ steht damit eine Leistungspyramide mit einer weitgehend einheitlichen Programmier- und Prozessorumgebung zur Verfügung, beginnend beim Linux-PC auf dem Schreibtisch, über das Linux-Cluster und die 128-Prozessor Altix auf Landesebene, bis hinauf zum bundesweit genutzten neuen Höchstleistungsrechner in Bayern.

*Dr. Reinhold Bader ist Mitarbeiter der Gruppe Hochleistungsrechnen am Leibniz-Rechenzentrum, Dr. Matthias Brehm leitet diese Gruppe.*



THEORETISCHE CHEMIE

# Quantenmechanische Modellierung heterogener Katalysatoren

NEBEN HÖCHSTLEISTUNGSRECHNERN UND HOCH OPTIMIERTER SOFTWARE SPIELT DIE MODELLBILDUNG ALS DRITTER FAKTOR EINE WESENTLICHE ROLLE BEI RECHNERGESTÜTZTEN SIMULATIONEN HETEROGENER KATALYSATOREN.

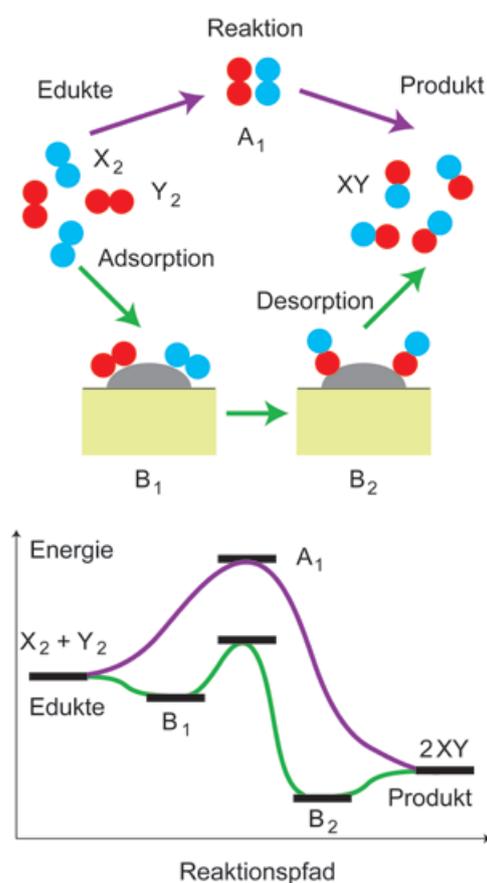


Abb. 1. **VON NOTKER RÖSCH UND SVEN KRÜGER**  
Wirkung eines heterogenen Katalysators

Bei der Synthese nahezu aller Produkte der chemischen Industrie werden Reaktionen eingesetzt, die nur bei Anwesenheit eines Katalysators ablaufen, obwohl die Produkte thermodyna-

misch stabiler sind als die Ausgangsstoffe. Bildlich gesprochen bewegt sich das System insgesamt zwar „bergab“, muss aber zunächst einen energetisch hoch liegenden ungünstigen Zwischenzustand durchlaufen, wodurch die Stoffumwandlung von alleine praktisch nicht oder nur viel zu langsam vonstatten gehen würde. Durch die Anwesenheit eines Katalysators wird die vom System zu durchquerende „Energiewand“ so verformt, dass der höchstgelegene Pass entlang des Reaktionsweges eine niedrigere Höhe aufweist (Abb. 1). Katalysatoren sind aber nicht nur für die chemische Produktion von essentieller Bedeutung, sie spielen auch eine wichtige Rolle bei der Herstellung von Medikamenten oder in der Umweltchemie (Abgaskatalyse, Abfallentsorgung, Wasseraufbereitung).

Obwohl das Verständnis der heterogenen Katalyse in den letzten Jahrzehnten enorm zugenommen hat, werden auch heute noch Katalysatoren hauptsächlich auf der Basis von Erfahrung und durch schrittweise Verbesserung entwickelt. Nur wenige katalytische Reaktionen sind in allen Einzelschritten genau verstanden, was eine Voraussetzung dafür ist, die entsprechenden Katalysatoren zielgerichtet verbessern zu können. Daher setzt man neben Experimenten zunehmend

rechnergestützte Simulationen ein, um katalytische Reaktionen auf atomarem Niveau zu verstehen. Entsprechend genaue Rechnungen mit quantenmechanischen Methoden sind sehr aufwändig und daher weitgehend auf den Einsatz von Höchstleistungsrechnern und speziell optimierter Software angewiesen. Um die Komplexität dieser Simulationsaufgabe zu erfassen, werfen wir einen kurzen Blick auf Aufbau und Funktion typischer Katalysatoren.

In der Regel umfassen heterogene Katalysatoren mehrere Komponenten. Besonders häufig sind Katalysatoren auf der Basis von Metallen, Legierungen oder Metalloxiden. In vielen Fällen steigern geringe Spuren von Fremdatomen (sog. Promotoren) die katalytische Effizienz. Aus Kostengründen nutzt man metallische Katalysatoren in feinsten Verteilungen (dünne Filme oder Partikel mit charakteristischen Dimensionen von Mikrometern und weniger!) auf einem Träger, z.B. Keramik (Abb. 2). Denn nur Atome einer wenige Atomlagen umfassenden Oberflächenregion sind katalytisch aktiv.

In Abgaskatalysatoren für Autos werden beispielsweise mehrere Metalle (Palladium, Rhodium, Platin) gemeinsam verwendet, um unerwünschte Stickoxide in die

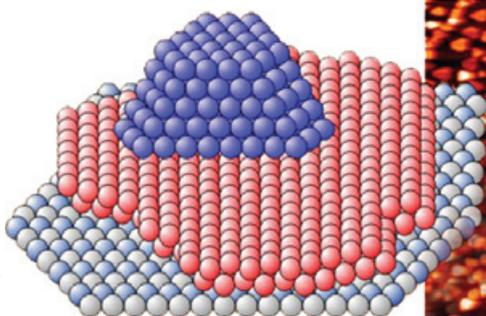
harmlosen Gase Sauerstoff und Stickstoff, Kohlenmonoxid in Kohlendioxid sowie Kohlenwasserstoffe in kleinere Moleküle umzusetzen. Andere Katalysatoren enthalten als wirksame chemische Einheiten Säuregruppen oder strukturelle Besonderheiten des inaktiven Grundmaterials, wie Kristallfehler oder Ecken und Kanten auf Oxid- oder Metalloberflächen.

Die Funktion eines heterogenen Katalysators ist in Abb. 1 für eine exemplarische Reaktion  $X_2 + Y_2 = 2 XY$  schematisch zusammengefasst.  $X_2$  und  $Y_2$  stellen dabei die Ausgangsstoffe (Edukte) und  $XY$  das gewünschte Produkt dar. Während die direkte Reaktion der Ausgangsstoffe nur langsam über eine energetische Barriere abläuft (Weg A) führt die Bindung der Edukte an den Katalysator sowie die dort stattfindende Umsetzung zu einem zwar komplizierteren, aber energetisch weniger aufwendigen Reaktionsweg (Weg B). Der Katalysator ebnet über geeignete Zwischenschritte den Reaktionsweg. Dabei kommt der Chemie der am Katalysator gebundenen Zwischenprodukte eine entscheidende Bedeutung zu.

Aufgabe einer rechnerischen Modellierung ist es, den Katalysator selbst sowie die chemische Umwandlung der Edukte über mögliche Intermediate zu den Produkten strukturell und energetisch zu charakterisieren. Mit anderen Worten: der Reaktionsweg des Systems ist auf atomarem Niveau zu beschreiben – eine Anforderung, die so detailliert von Experimenten nicht geleistet werden kann.

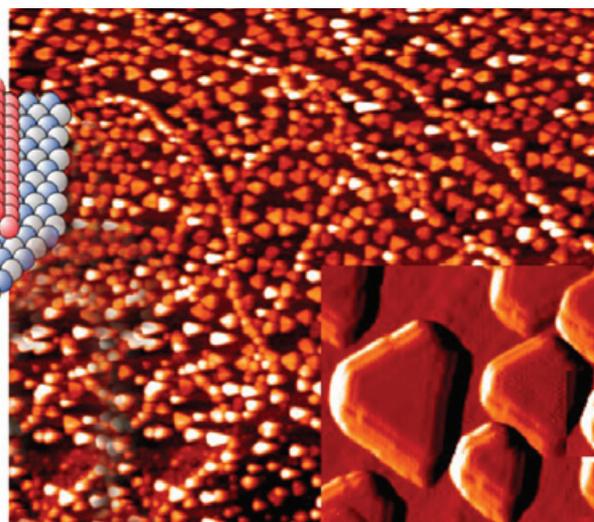
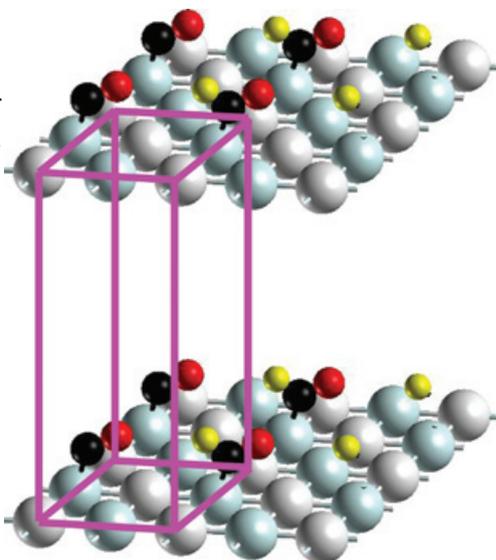
### Modelle auf atomarer Skala

Für Moleküle und Kristalle existieren genaue und effiziente quantenmechanische Methoden zur Berechnung der



Struktur und der elektronischen Eigenschaften. Moleküle mit 50–100 Atomen lassen sich so gut beschreiben. Bei Festkörpern erleichtert eine streng kristallin geordnete Struktur die Simulation. Heterogene Katalysatoren sind vom Umfang her Festkörpern vergleichbar, zeigen aber auf atomarer Ebene kaum eine regelmäßige Ordnung. Daher ist die rechnerische Simulation heterogener Katalysatoren sehr aufwendig.

Eine direkte rechnerische Umsetzung würde selbst die Möglichkeiten heutiger Höchstleistungsrechner weit übersteigen. Für eine genaue und realitätsnahe Lösung derartiger Simulationen bedarf es deshalb neben leistungsfähiger Hardware und hoch optimierter Software vor allem einer geeigneten Modellbildung. Dieser oft unterschätzte Aspekt von Simulationen soll nachfolgend beispielhaft für metallbasierte heterogene Katalysatoren veranschaulicht werden.



**Abb. 2:** Tunnelmikroskop-aufnahmen eines Katalysators aus Palladiumpartikeln auf Aluminiumoxidfilm auf NiAl-Legierung (Einschub rechts: einzelne Metallpartikel in höherer Auflösung) sowie Clustermodell eines einzelnen getragenen Metallpartikels (links). Zur Verfügung gestellt von Bäumer, Libuda und Freund (FHI Berlin).

Eine einfache Anpassung an effiziente Rechenmethoden für kristalline Festkörper besteht in der Einführung künstlicher Regelmäßigkeit in Modellen. Während ein Kristall aus Einheiten (Einheitszellen) besteht, die sich in allen drei Raumrichtungen (praktisch) unendlich oft wiederholen, sind seine Oberflächen, auf denen chemische Reaktionen ablaufen, höchstens in zwei Dimensionen geordnet. Dies lässt sich umgehen, indem man Festkörperoberflächen durch unendliche Stapel von Schichten modelliert, wodurch man ein effizient zu berechnendes Modell erhält, das auch in der dritten Dimension periodisch ist (Abb. 3). Der Rechenaufwand für derartige Superzellenmodelle wächst mit der Zahl der Atome in der wiederholten Kristalleinheit. Superzellenmodelle stellen Oberflächen von Katalysatoren als unendlich ausgedehnte Oberflächen von relativ dünnen Schichten (aus 5–20 Atomlagen) dar und idealisieren damit die gewöhnlich nur im Bereich von wenigen interatomaren Abständen geordnete Oberflächenstruktur realer Katalysatoren.

Superzellenmodelle wurden von uns sehr erfolgreich eingesetzt, um die Umsetzung von Methanol zu Kohlendioxid und Wasserstoff mittels eines Palladiumkatalysators, geträgert auf Zinkoxid (Pd/ZnO),

Superzellenmodelle wurden von uns sehr erfolgreich eingesetzt, um die Umsetzung von Methanol zu Kohlendioxid und Wasserstoff mittels eines Palladiumkatalysators, geträgert auf Zinkoxid (Pd/ZnO),

**Abb. 3:** Superzellenmodell (mit eingezeichneter Einheitszelle) für Formyl CHO auf einer Monolage der Legierung PdZn.

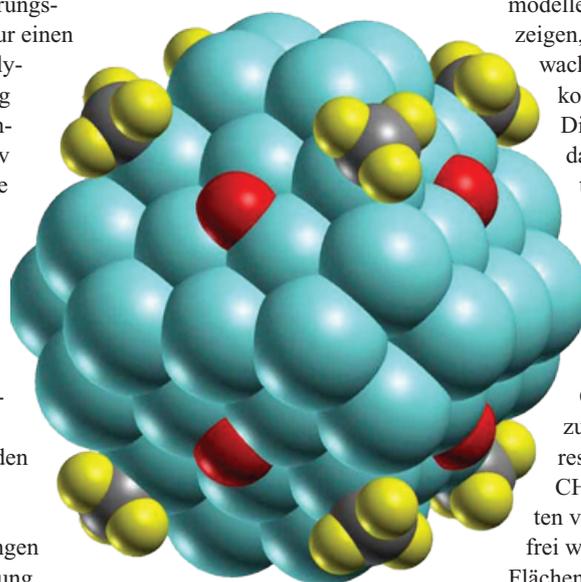
zu verstehen (Abb. 3). Mittels dieser sog. Reformierungsreaktion erzeugt man Wasserstoff „vor Ort“ zum Betrieb einer Brennstoffzelle. Bisher wurden dafür Cu/ZnO-Katalysatoren eingesetzt, die sich jedoch bei höheren Betriebstemperaturen zersetzen.

**Abb. 4:** Dissoziation von Methoxid  $\text{CH}_3\text{O}$  auf einem Nanoclustermodell aus 85 Pd-Atomen; Methylgruppen  $\text{CH}_3$  auf Kanten adsorbiert, Sauerstoff (rot) auf den Flächen.

In einer zweiten Modellierungsstrategie berechnet man nur einen sehr kleinen Teil des Katalysators, etwa die Umgebung einer aktiven Stelle, gleichsam wie ein Molekül. Naiv angewendet würden solche „Cluster“-Modelle zu Artefakten führen, denn sie vernachlässigen wichtige Effekte der Festkörperumgebung, etwa bei ionischen Trägern den Einfluss langreichweitiger elektrostatischer Felder. Ferner werden beim „Ausschneiden“ des Modells aus dem realen System chemische Bindungen gebrochen. Durch Einbettung des Clustermodells in vereinfachte Modelle der Umgebung lassen sich die genannten Artefakte beheben, so dass genaue lokale Modelle auf atomarem Niveau entstehen. Hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit sind Supercellen- und Clustermodelle komplementär.

Eingebettete Clustermodelle eignen sich besonders, um Metallteilchen in nanoporösen Aluminosilikaten (Zeolithe) zu beschreiben, deren Einheitszellen mehrere hundert Atome umfassen. Mit ihnen beschreibt man auch die Eigenschaften einzelner Metallpartikel auf oxidischen Trägern (Abb. 2), insbesondere um deren Wachstum und Eigenschaften auf Trägermaterialien zu untersuchen. In einer Reihe von Arbeiten konnten wir für das oft verwendete Trägermaterial Magnesiumoxid zeigen, dass Metallatome und kleine Metallcluster mit wenigen Atomen auf

einer idealen Kristalloberfläche nur schwach binden, stärker dagegen auf Fehlstellen an Oberflächen. Entgegen einer weit verbreiteten Ansicht ergaben die Rechnungen, dass auf Fehlstellen verankerte Metallatome nicht automatisch bevorzugte Keimstellen für das Wachstum von



Metallclustern sind. Simulationen zeigten außerdem, dass die Bindung etwas grösserer Metallteilchen an das Trägermaterial kaum noch davon abhängt, ob sie auf einer idealen oder defektbehafteten Stelle sitzen.

Schließlich sei noch eine kürzlich von uns entwickelte Modellstrategie auf der Basis von Nanoclustern erwähnt. Derartige Modelle sind besonders geeignet, um Metallpartikel zu beschreiben, die von ebenen Facetten begrenzt sind, deren Kanten oft nur wenige Nanometer lang sind. Wie Schichtmodelle die Translationssymmetrie, so nutzt die Strategie regulärer Nanocluster Rotationsymmetrien zur Reduktion des Rechenaufwandes (Abb. 4), etwa durch Einsatz von Kuboktaedern oder Oktaedern aus 100 und mehr Atomen. Während bei Kristallmodellen eine Reaktion in jeder

der unendlich vielen Einheitszellen synchron abläuft, so geschieht dies bei Nanoclustermodellen auf symmetrieäquivalenten Oberflächenfacetten. Bei traditionellen Clustermodellen hängt die Bindungsstärke eines adsorbierten Moleküls stark von der Clustergröße ab; dagegen konnten wir für Nanoclustermodelle mit regulären Facetten zeigen, dass diese Eigenschaft mit wachsender Clustergröße rasch konvergiert.

Diese Nanocluster eignen sich daher sehr gut, um Katalysatorparteilchen zu modellieren.

Wir setzten Nanoclustermodelle erstmals erfolgreich ein, um die katalytische Spaltung der C-O-Bindung in Methoxid  $\text{CH}_3\text{O}$  an Palladiumteilchen zu beschreiben. Die dabei resultierenden Methylgruppen  $\text{CH}_3$  binden bevorzugt an Kanten von Nanopartikeln, während frei werdende Sauerstoffatome die Flächen des Partikels bevorzugen.

Ein wesentlicher Unterschied experimenteller und rechnerischer Studien zu heterogenen Katalysatoren besteht darin, dass im Experiment ein nicht genau spezifiziertes System analysiert werden muss, um Strukturen und Vorgänge zu verstehen. Umgekehrt erlaubt eine Simulation an Modellen mit wohl definierten Strukturen und Bindungsverhältnissen Schlüsse auf das Verhalten realer Systeme. Damit ergänzen sich beide Ansätze sehr vorteilhaft, was schlussendlich zu einem genaueren Verständnis komplexer katalytischer Prozesse führt.

*Prof. Dr. Notker Rösch und Dr. Sven Krüger arbeiten am Department Chemie, Theoretische Chemie, der Technischen Universität München in Garching.*



GEOWISSENSCHAFTEN

# Erdbebenforschung durch Höchstleistungsrechnen

MODERNE SUPERCOMPUTER ERMÖGLICHEN DIE SIMULATIONEN REALISTISCHER ERDBEBEN-SZENARIEN UNTER BERÜCKSICHTIGUNG KOMPLIZIERTER, GEOPHYSIKALISCHER ERDMODELLE.

VON MARTIN KÄSER,  
HEINER IGEL, JOSEPH  
DE LA PUENTE,  
BERNHARD SCHUBERTH,  
GUNNAR JAHNKE UND  
PETER BUNGE

Die Erforschung der Struktur und der damit verbundenen physikalischen Eigenschaften des Erdinnern basiert überwiegend auf Ergebnissen der Seismologie. Dabei stellen Computersimulationen seismischer Wellenausbreitung heute eine unverzichtbare Untersuchungsmethode dar, um die auftretenden Wellenphänomene und deren Ursachen zu verstehen. Zuverlässige Computersimulationen möglicher Erdbebenszenarien sind für vor allem bei der Risikoabschätzung und der Beurteilung des Gefahrenpotentials evtl. betroffener Regionen von großer Bedeutung.

Eine neue numerische Methode zur Simulation seismischer Wellenausbreitung stellt das *Diskontinuierliche Galerkin-Verfahren* dar. Dies ist momentan das einzige Verfahren, das die zugrunde liegenden Wellengleichung mit beliebig hoher Approximationsordnung in Raum und Zeit lösen kann. Zudem ist die Methode so konzipiert, dass hochflexible Tetraeder-Gitter zur dreidimensionalen Modelldiskretisierung verwendet werden können, ohne dass die Genauigkeit des Verfahrens beeinträchtigt wird.

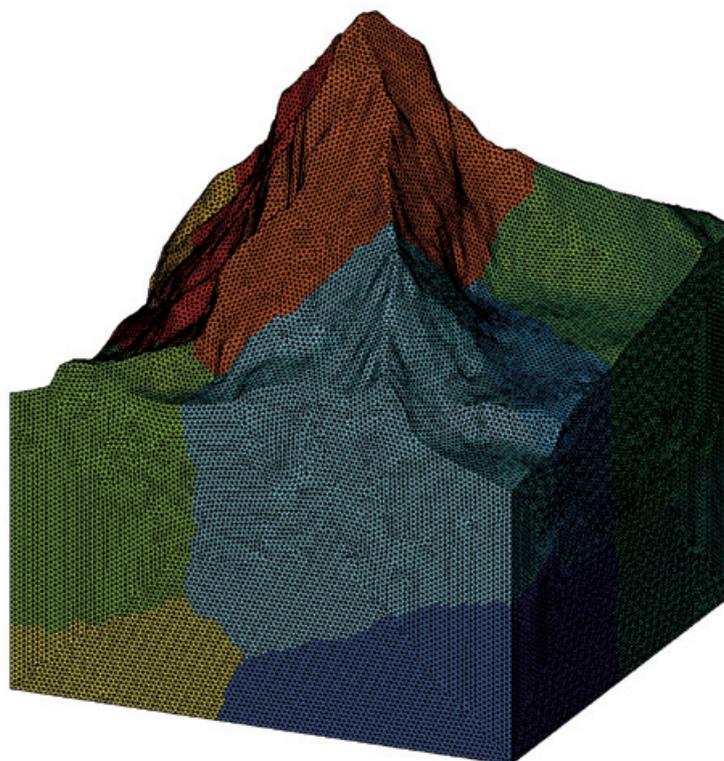
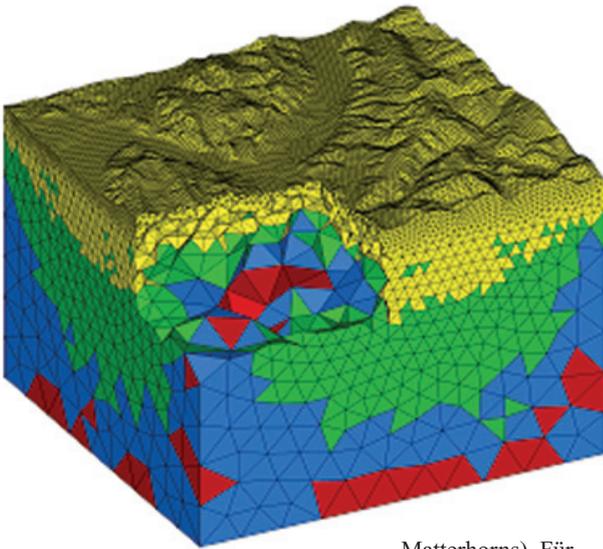


Abb. 1: Tetraeder-Gitter eines digitalen Geländemodells des Matterhorns und dessen Zerlegung in Teilgebiete für paralleles Rechnen.

## Komplizierte dreidimensionale Geometrien

Geologische Strukturen, wie Schichtgrenzen, tektonische Bruchflächen oder Oberflächentopographie, weisen in der Regel äußerst komplizierte Geometrien auf, die von den Simulationsalgorithmen berücksichtigt werden müssen. Vor allem die Erdoberfläche, an der sich spezielle Wellenphänomene (*Love- und Rayleigh-Wellen*) bilden, stellt dabei ein schwieriges aber entscheidendes Problem dar, da im Besonderen diese Wellentypen für auftretende Schäden verantwortlich sind. Um die notwendige, mathe-

mathematische Formulierung solcher Randbedingung möglichst exakt zu handhaben, muss das Diskretisierungsgitter diesen Grenzflächen folgen. Unstrukturierte Tetraeder-Gitter haben sich dabei als außerordentlich flexibel und nützlich erwiesen und können nahezu beliebig komplizierten Geometrien angepasst werden. Durch die Schnittstelle mit der Geodäsie und Geographie, können z.B. digitale Geländemodelle direkt bei der Gittergenerierung verwendet werden (Abb. 1, einem Modell des



**Abb. 2:** die Berechnung realistischer Erdbebenszenarien sind Tetraeder-Modelle mit mehreren Millionen Tetraedern nötig, um die 3-dimensionale Geometrie ausreichend genau zu beschreiben. Deshalb muss das Modell anschließend in mehrere Teilgebiete zerlegt (partitioniert) werden, um so den Rechen- und Speicheraufwand auf viele Prozessoren eines Hochleistungsrechners zu verteilen. Eine gleichmäßige Verteilung und die Minimierung des notwendigen Datenaustausch zwischen den Prozessoren ist dabei für die Effizienz des Verfahrens von entscheidender Bedeutung und erweist sich auf unstrukturierten Tetraeder-Gittern als nicht-trivial. Dies gilt vor allem, wenn die Approximationsordnung problemadaptiv gewählt werden soll.

### **p - Adaptivität**

Bei der Diskretisierung geologischer Modelle schreibt die Geometrie, z.B. die interne Schichtung oder die Oberflächentopographie, oft eine bestimmte, zu verwendende Gitterweite vor, um die Strukturen entsprechend fein aufzulösen. Die dabei entstehenden Tetraeder können dadurch sehr kleine Dimensionen im Vergleich zum gesamten Rechenmodell annehmen.

**Abb. 3:** Die Integration einer gekrümmten Bruchfläche als kinematische Erdbebenquelle in einem Tetraedergitter.

Bei expliziten Simulationsverfahren wird die Zeitschrittweite, mit

der die zeitabhängige Lösung des seismischen Wellenfeldes berechnet werden kann, daher oft sehr klein. Zudem muss die Zeitschrittweite bei der Verwendung höherer Approximationsordnungen weiter verringert werden, um das Simulationsverfahren numerisch stabil zu halten.

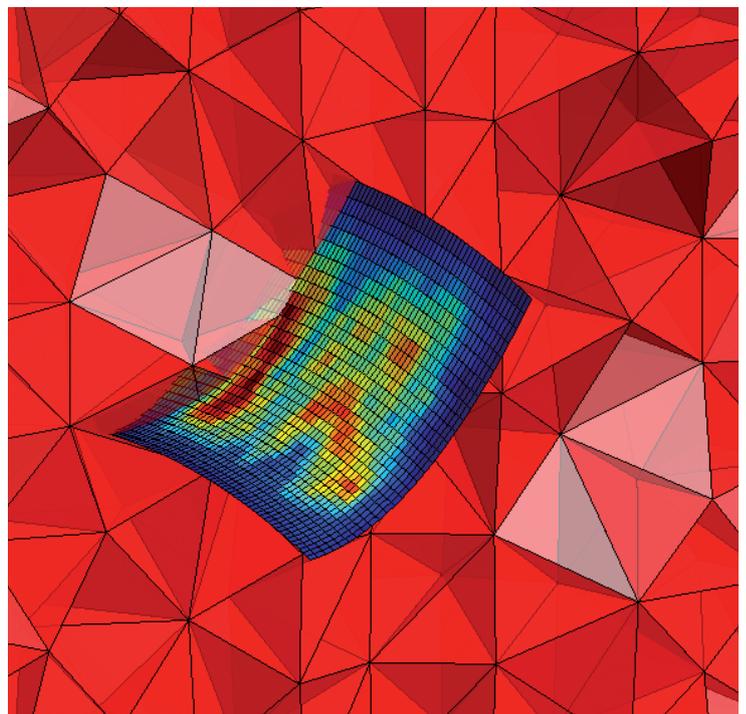
Die adaptive Wahl der Approximationsordnung in Abhängigkeit der Gitterweite entschärft daher die Einschränkung der maximal erlaubten Zeitschrittweite und führt zudem zu einer wesentlichen Reduktion des Rechenaufwands. Da kleine Tetraederelemente das propagierende Wellenfeld automatisch räumlich besser auflösen, kann in diesen Elementen eine niedrigere Polynomordnung verwendet werden. In großen Elementen kann eine entsprechende räumliche Auflösung durch eine höhere Polynomordnung erreicht werden (Abb. 2).

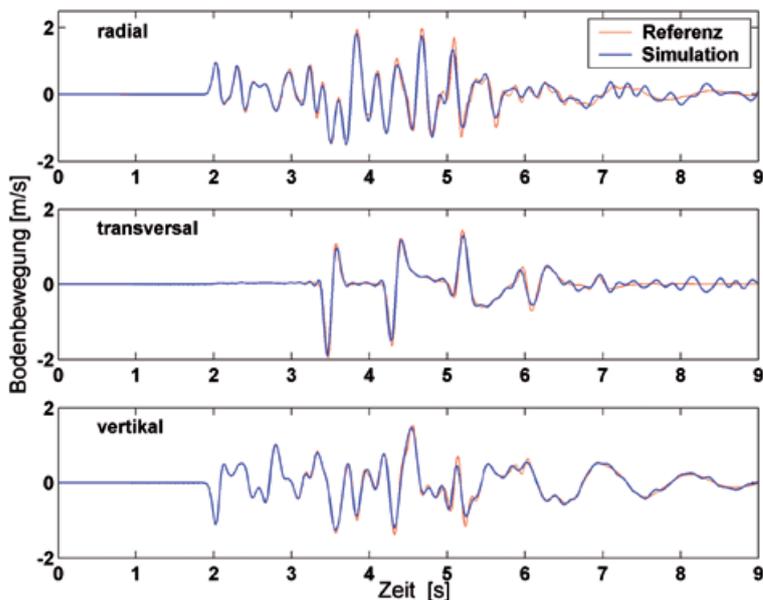
### **Integration von Bruchflächen als Erdbebenquelle**

Erdbeben werden fast ausschließlich durch Bruchprozesse in der Erdkruste verursacht, bei denen

über lange Zeiträume aufgebaute Spannungen im Gestein häufig zu einer abrupten Zerschneidung des Gesteins entlang einer Bruchfläche führen. Die Verteilung der Verschiebungsamplituden und -richtungen kann dabei sehr heterogen sein, und die Form der Bruchfläche kann geometrisch kompliziert sein, d.h. Krümmungen aufweisen oder in mehrere Teilflächen segmentiert sein. Die kinematische Beschreibung solcher Bruchflächen erfolgt im oben genannten *Diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren* anhand von Punktwolken, wobei jedem Punkt, d.h. jeder Quelle, eine repräsentative Fläche mit entsprechender Verschiebungsamplitude und -richtung zu jedem beliebigen Zeitpunkt zugeordnet wird. Die Position der Punkte im Rechengebiet ist dabei völlig beliebig und muss nicht mit Gitterpunkten des Tetraedergitters übereinstimmen.

Eine Anpassung des Gitters an die Bruchfläche ist also nicht nötig und erlaubt so eine extrem hohe geometrische Flexibilität. (Abb. 3) Durch die Überlagerung und Integration aller Beiträge der einzelnen punktuellen Brüche wird





#### Seismische Tomographie und die Struktur des Erdinneren

Der Begriff seismische Tomographie erinnert an die medizinische Tomographie, und in der Tat besteht eine enge formale Verwandtschaft. In der Medizin werden um den zu untersuchenden Körper zahlreiche Quellen und Empfänger platziert. Elektromagnetische Wellen werden durch den Körper auf vielen verschiedenen Wegen geschickt, woraus sich nach einem aufwändigen mathematischen Verfahren ein dreidimensionales Bild des Innern berechnen lässt. Für die Seismologen sind die Quellen die Erdbeben und die Empfänger die Seismographen. Hier ergeben sich sofort – im Vergleich zur Medizin – einige Schwierigkeiten: Erdbeben finden zum Einen nicht regelmäßig statt und zum Anderen nur in sehr begrenzten Regionen der Erde (nämlich vor allem an den Rändern der Kontinentalplatten). Darüber hinaus sind mehr als 70% der Erdoberfläche vom Meer bedeckt. Dies bedeutet, dass die

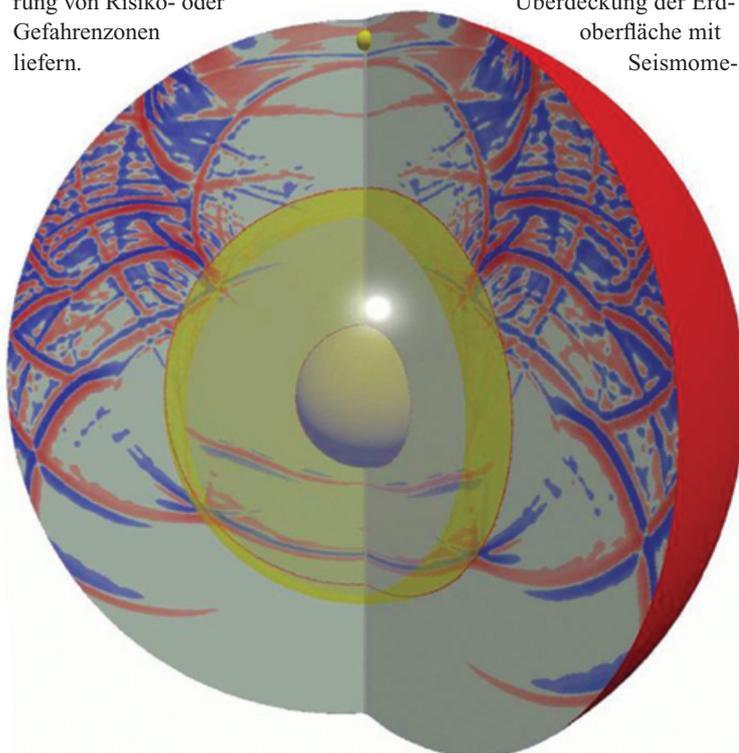
Abb. 4: Validierung synthetischer Seismogramme anhand analytischer Referenzlösungen.

der gesamte Bruchprozess genau beschrieben. Bei der Integration dieser Quellterme spielt wiederum die hohe Polynomordnung innerhalb einer Tetraeders eine entscheidende Rolle, da dadurch wesentlich größere Tetraedergitter verwendet werden können als die kleinskalige Diskretisierung der Bruchfläche, wodurch wiederum der Rechenaufwand reduziert werden kann.

#### Validierung und Optimierung numerischer Erdbebensimulationen

Um realistische Erdbebenszenarien zuverlässig und innerhalb genau definierter Fehlerintervalle numerisch zu simulieren, müssen die numerischen Verfahren und deren Approximationsfehler bei der Lösung der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen sorgfältig untersucht werden. Dies geschieht in der Regel durch das numerische Lösen von vereinfachten Problemen, für die analytische, d.h. mathematisch exakte Lösungen als Referenz vorliegen. Ein Vergleich der numerischen und analytischen Lösungen (Abb. 4) und die genaue Fehleranalyse liefert dann Aufschluss über die zu verwendende Polynom- bzw. Approximationsordnung, eine sinnvolle Gitterweite und die resultierende mögliche

Zeitschrittlänge. Basierend auf diesen Fehlerabschätzungen und der geeigneten Wahl der Simulationsparameter können dann realistische Erdbebenszenarien (Abb. 5) auf Großrechnern simuliert werden und zuverlässige Abschätzungen der zu erwartenden Schwingungsamplituden getroffen werden. Die Untersuchung der lokal auftretenden Bodenbewegungen können dann wichtige Beiträge zur Identifizierung von Risiko- oder Gefahrenzonen liefern.



Überdeckung der Erdoberfläche mit Seismome-

Abb. 5: Visualisierung des seismischen Wellenfeldes nach einem Erdbeben in einem Schnitt durch die Erde.

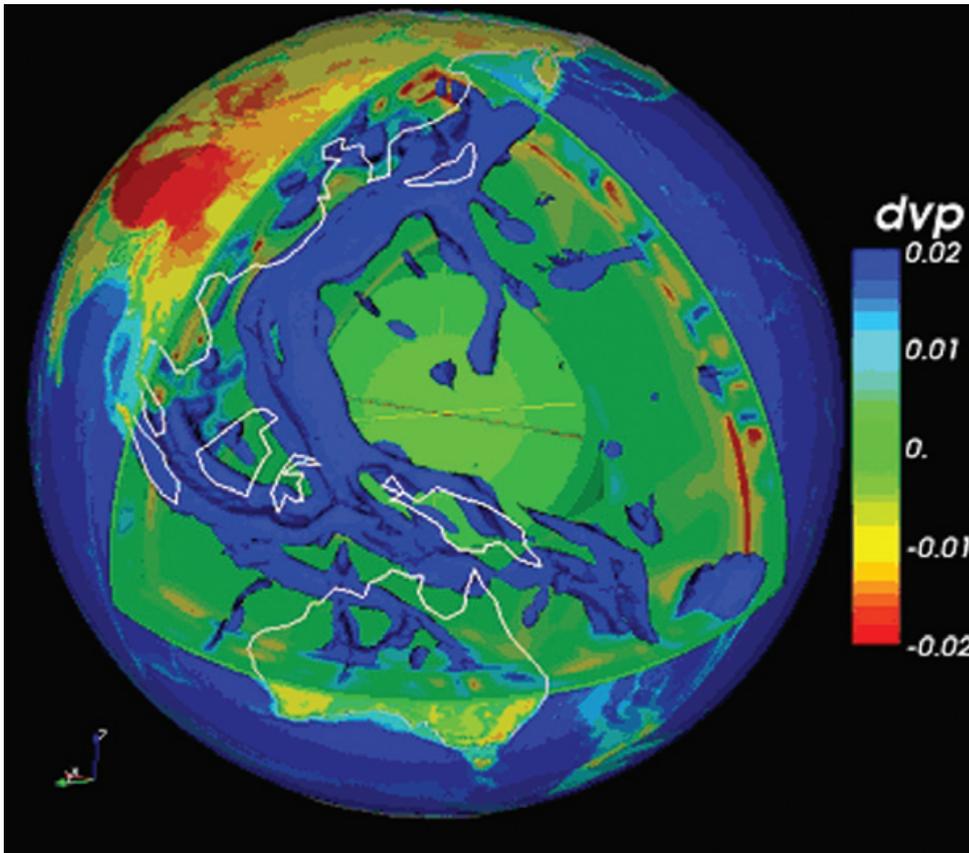


Abb. 6:

**Schnitt durch ein Erdmodell, dessen interne Struktur durch numerische Simulation der Mantelkonvektion berechnet wurde. Die blauen Kanäle sind Zonen erhöhter seismischer Geschwindigkeit (erniedrigter Temperatur) und entsprechen den hinabsinkenden Teilen der Lithosphärenplatten. Die Farbkodierung beschreibt die Perturbation der P-Wellengeschwindigkeit  $v_p$  um ein mittleres Modell.**

tern stark durch die Verteilung der Kontinente bestimmt wird.

Die seismische Tomographie erlaubt nun, durch Auswertung der Seismogramme, die weltweit nach jedem größeren Erdbeben aufgezeichnet werden, die 3D-Struktur des tiefen Erdinneren zu bestimmen. Wir bestimmen dabei für die einzelnen Regionen des Erdinneren die Geschwindigkeiten, mit denen sich die seismischen Wellen ausbreiten (zwischen 3 km/s und 14 km/s). Seit den 60er Jahren wissen wir, dass großräumige Bewegungen im Erdmantel (Konvektion) für die Bewegung der Kontinentalplatten (Plattentektonik) verantwortlich sind. Die Tomogramme des Erdinneren haben gezeigt, dass die ozeanische Kruste, welche in so genannten Subduktionszonen im Erdinneren verschwindet, bis hinunter an die Grenze zwischen Erdmantel und Erdkern (in ca. 3000km Tiefe) versinken kann. Allerdings gibt es in diesem Bereich der Geowissenschaften – der Geodynamik – noch

zahlreiche offene Fragen, die für das Verständnis der Entwicklung unseres Planeten – auch im Zusammenhang mit der Klimageschichte – von zentraler Bedeutung sind: Welches sind die kontrollierenden Faktoren für die Bewegungen im Innern der Erde? Wie tief reichen die Wurzeln der Hot Spots? Warum sinken an einigen Stellen der Erde die Ozeanplatten bis in große Tiefen, an anderen nicht?

Um diese und andere Fragen beantworten zu können, reichen die Verfahren der heutigen Tomographie, die zum Teil auf starken Vereinfachungen beruhen, nicht aus. Antworten auf diese Fragen stecken in den enormen seismischen Datenbanken, die digitale Aufzeichnungen der Erdbeben enthalten. Um Details dieser Seismogramme zu verstehen und unser Bild des Erdinneren zu verbessern, müssen wir allerdings Methoden entwickeln, die es uns erlauben, seismische Wellenausbreitung in einer 3D-Erde zu simulieren. Dies geschieht

u.a. mit der spektralen Elemente Methode, mit der Wellen durch dreidimensionale Modelle berechnet werden, die durch aufwändige Mantelkonvektionssimulationen erstellt wurden (Abb. 6).

### Seismologie und Höchstleistungsrechnen

Der Aufwand der Rechenoperationen für realistische Erdbebensimulationen ist enorm, sodass der Einsatz von massiven Parallelrechnern mit extrem hoher Speicherkapazität unumgänglich ist. Eine Optimierung eines numerischen Verfahrens speziell für die verwendete Rechnerarchitektur ist oft nötig, um die volle Leistungsfähigkeit eines Höchstleistungsrechners nutzen zu können. Daher wird es in Zukunft immer wichtiger sein, enge Kooperationen auf dem Gebiet der numerischen Seismologie und des Höchstleistungsrechnens zu gründen. Ein beispielhafter Ansatz dafür ist die vom Leibniz-Rechenzentrum angebotene *Intensive Application, Optimization and Porting Initiative*. Die professionelle Unterstützung bei der Anwendung und Optimierung des oben genannten *Diskontinuierlichen Galerkin-Verfahrens* gewährleistet eine kontinuierliche Anpassung und Verbesserung der Software an Hardware-Veränderungen und sichert die Weiterentwicklung von Erdbebensimulations-Software parallel zu aktuellsten Entwicklungen im Bereich des Höchstleistungsrechnens.

*Die Autoren arbeiten am Department für Geo- und Umweltwissenschaften der Ludwig-Maximilians-Universität München, Dr. Käser auch am Laboratory of Applied Mathematics of Civil and Environmental Engineering, University of Trento, Italien.*



CHEMIE

# Die faszinierende Welt der Katalyse

WIE CHEMIKER STÖRRISCHE MOLEKÜLE AUF TRAB BRINGEN.

VON HERBERT OVER UND  
ARI P. SEITSONEN

Seit jeher beschäftigt sich die Chemie mit der Synthese neuer Verbindungen. Ziel dabei ist es, dem Produkt besondere Eigenschaften zu verleihen. Bei dieser „Synthese von Eigenschaften“ spielt die Katalyse eine herausragende Rolle, da rund 80% aller technisch relevanten Substanzen auf der Basis katalytischer Prozesse hergestellt werden. Während die effizientesten Katalysatoren immer noch mit ingenieurmäßiger Intuition (*trial and error*-Methode) gefunden werden, sind in Zukunft noch leistungsfähigere Katalysatoren nur durch den Einsatz auf atomarer Skala maßgeschneiderter Materialien zu realisieren; Stichwort: rationales Katalysatordesign. Es bedarf also der eingehenden Beschreibung katalytischer Reaktionen auf der atomaren Ebene, um diesem Ziel näher zu kommen. Die von uns an der Hitachi des Leibniz-Rechenzentrums durchgeführten Rechnungen basieren auf der Dichtefunktionaltheorie (DFT). In den letzten Jahren haben wir uns eingehend mit einfachen katalysierten Reaktionen auf  $\text{RuO}_2$  beschäftigt.

## Was ist eigentlich Katalyse?

Ein einfacher Vergleich aus dem Umfeld der Biologie soll den Begriff der Katalyse ein wenig karikieren. Einen störrischen Esel zum Laufen zu bringen erfordert viel Zeit und Energie. Der Esel lässt sich jedoch möglicherweise überli-

sten, indem man ihm eine Mohrrübe, die an einer Angel befestigt ist, vor die Nase hält. Die – erfolglosen – Versuche des Esels, die Mohrrübe zu erreichen, führen letztendlich zu einer – erfolgreichen – Stimulation seines Bewegungsdrangs. Dabei bleibt die Mohrrübe während des gesamten Vorgangs unverzehrt.

Überträgt man diese Situation auf chemische Reaktionen, so gelangt man sehr schnell zu der Definition eines Katalysators. Nach Wilhelm Ostwald (1907) ist ein Katalysator ein Stoff (im nebenstehenden Bild die Mohrrübe), der eine Reaktion beschleunigt, ohne dabei verbraucht zu werden.

Dabei darf der Katalysator durchaus aktiv in die Reaktion eingreifen. Er muss lediglich nach vollendeter Reaktion wieder unverändert vorliegen. Um wesentliche Einsichten in die elementaren Prozesse an einem Katalysator zu erhalten, sollte die gewählte Reaktion möglichst einfach sein, wie z.B. die Oxidation von Kohlenstoffmonoxid ( $\text{CO}$ ) zu Kohlenstoffdioxid ( $\text{CO}_2$ ). Sie ist eine stark exotherme Reaktion, bei der 280 kJ/mol an Energie (Wärme) frei werden.

Dennoch läuft die Reaktion in der Gasphase nicht ab ( $\text{CO}$  verhält sich wie ein störrischer Esel), da es eine große Aktivierungsbarriere von etwa 220 kJ/mol gibt. Damit dennoch die  $\text{CO}$ -Oxidationsreaktion

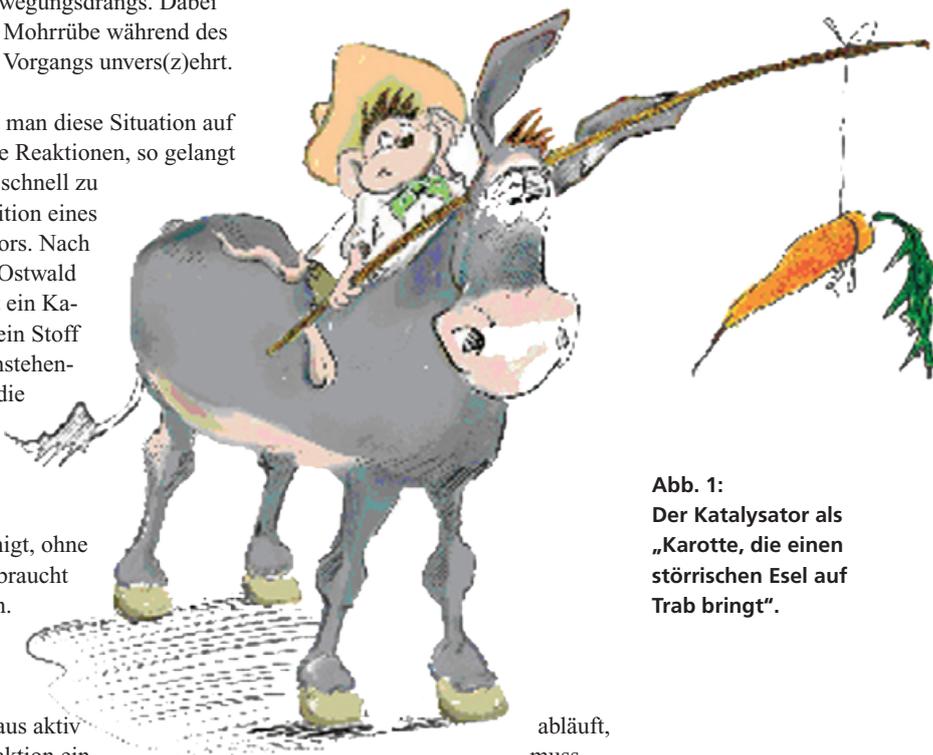


Abb. 1:  
Der Katalysator als  
„Karotte, die einen  
störrischen Esel auf  
Trab bringt“.

abläuft, muss zunächst die interne Sauerstoff-Sauerstoff-Bindung aufgebrochen oder zumindest gelockert werden. Dazu ist der Einsatz eines Katalysators – z.B. Rhodium (Rh), Palladium (Pd) oder Platin (Pt) – notwendig. Der Katalysator macht nichts anderes als die Aktivierungsbarriere herabzusetzen, nämlich von 220 kJ/mol auf 100 kJ/mol im Falle von Pt. Unter normalen Bedingungen, wie sie

etwa im Auspuff eines Autos vorliegen, kann daher das giftige CO im Abgas nahezu vollständig zum ungiftigen CO<sub>2</sub> oxidiert werden.

Nicht nur die reinen Metalle können gute Katalysatoren sein. Auch die Oxide der Metalle zeigen häufig eine hohe katalytische Aktivität, die meist von der des reinen Metalls abweicht. Besonders deutlich zeigt sich dies im Fall von Ruthenium (Ru). Metallisches Ru ist ein äußerst schlechter Katalysator für die CO-Oxidation. Rutheniumdioxid (RuO<sub>2</sub>) zeigt hingegen eine erstaunlich hohe katalytische Aktivität bei der CO-Oxidation.

#### Rutheniumdioxid – eine Erfolgsstory

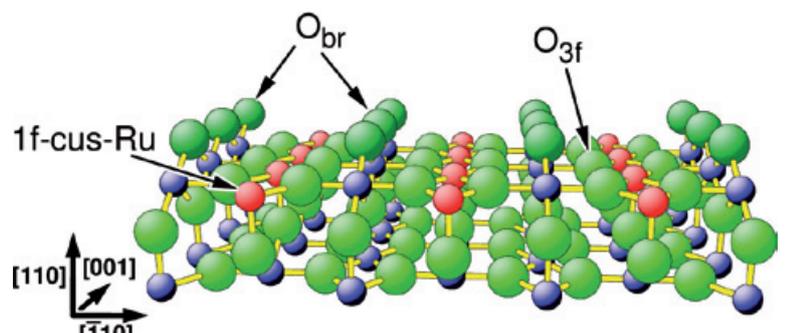
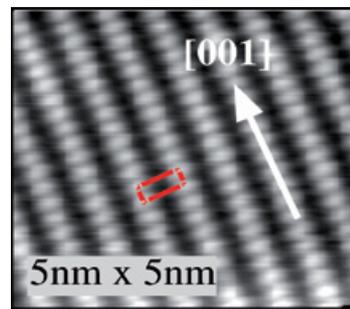
Rutheniumdioxid kristallisiert in der so genannten Rutilstruktur. Im Volumen sind die Metallatome, in Abb. 2 blaue Kugeln, von sechs nächsten Sauerstoffatomen (grüne Kugeln) umgeben. Die Sauerstoffatome hingegen sind jeweils von drei Ru-Atomen umgeben. An der Oberfläche wird die Fortsetzung dieser regelmäßigen Struktur jedoch unterbrochen. Damit besitzen die unmittelbar an der Oberfläche liegenden Atome eine andere Umgebung als jene im Volumen. Die Ruthenium-Atome sind an

**Abb. 2:**  
Die atomare Struktur von Rutheniumdioxid entlang der (110)-Orientierung. Die grünen Bälle stellen Sauerstoff (O) dar und die kleinen roten und blauen Atome sind Ruthenium-(Ru)-Atome. Zum Vergleich ist auch eine Rastertunnelmikroskop-Aufnahme mit atomarer Auflösung dargestellt: Die Reihen von hellen Perlensträngen sind die Reihen von Sauerstoffatomen, die aus der Oberfläche herauschauen (O<sub>br</sub>). Hell bedeutet im RTM-Bild, dass die Atome weiter aus der Oberfläche herauschauen.

der Oberfläche nur noch von fünf Sauerstoff-Atomen umgeben (Rucus) und ein Teil der Sauerstoffatome (Brückensauerstoff, O<sub>br</sub>) nur noch von zwei Ruthenium-Atomen. Das heißt sowohl die Brückensauerstoffe als auch die cus-Ru-Atome besitzen eine freie Bindung (Valenz), die senkrecht von der Oberfläche wegzeigt und für Reaktionen mit Molekülen aus der Gasphase bereit steht. Mit den freien Valenzen, sprich ‚Bindungsarmchen‘, greifen die Oberflächenatome nach Molekülen aus der Gasphase und binden sie auf die Oberfläche (Adsorption). DFT Rechnungen an der Hitachi haben dieses einfache Bild bestätigt und verfeinert.

#### CO-Oxidation auf Rutheniumdioxid

In den letzten Jahren haben wir uns eingehend mit der CO-Oxidation auf RuO<sub>2</sub> beschäftigt. Die Untersuchungen zur CO-Oxidation auf RuO<sub>2</sub>(110) sind eine Erfolgsgeschichte, in der gerade das enge Zusammenwirken von Theorie und Experiment die entscheidenden Durchbrüche im Verständnis der



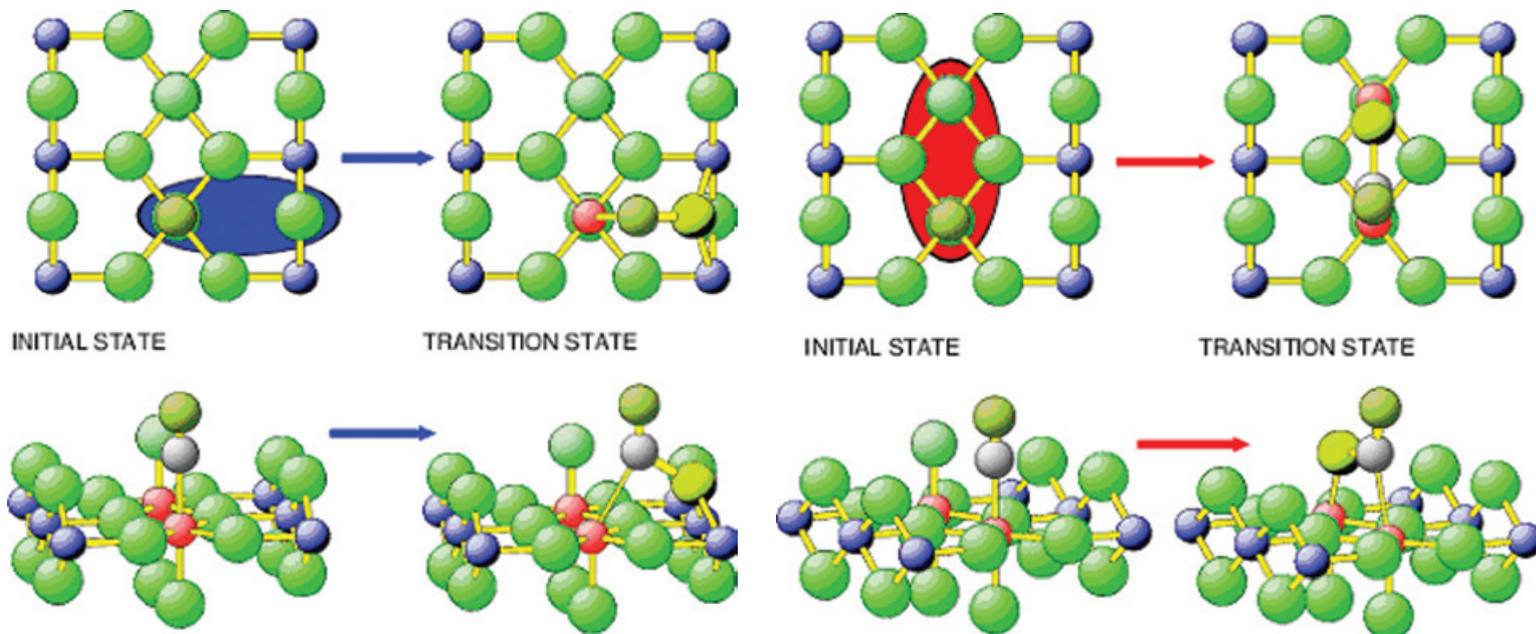
mikroskopischen Schritte auf diesem oxidischen Modellkatalysator ergeben haben. RuO<sub>2</sub> hat vielfältige Anwendungen in der Chemie und auch in der Elektronikindustrie. So ist RuO<sub>2</sub> zum Beispiel ein wichtiger Katalysator für Brennstoffzellen, in denen Methanol zu CO<sub>2</sub> und Wasser und die damit verbundene chemische Energie in elektrische Energie umgesetzt wird.

#### Oxidationsverlauf

Im Folgenden sei der Reaktionsverlauf der CO-Oxidation auf einer Rutheniumdioxid-(110)-Oberfläche näher diskutiert, wie er sich aus den DFT-Rechnungen ergibt. Zuerst adsorbieren CO und Sauerstoff aus der Gasphase auf der RuO<sub>2</sub>-Oberfläche auf den unterkoordinierten Ru-Atomen (rote Ru-Atome in Abb. 3). Wir betrachten nun zwei unterschiedliche Reaktionspfade:

1. Das CO-Molekül reagiert mit dem Brückensauerstoffatom oder
2. das CO-Molekül reagiert mit dem *on-top*-O-Atom.

Der Übergangszustand (*transition state*) zeigt das CO-Molekül, das sich einem Brückensauerstoffatom nähert. Bei diesem Annähern lockern sich sowohl die Bindungen des CO-Moleküls als auch die Bindungen des Brücken-Sauerstoffs zu seinen Nachbaratomen. Gleichzeitig entsteht eine anziehende Wechselwirkung zwischen dem



CO-Molekül und dem Brückensauerstoff. Es entsteht der so genannte Übergangszustand, dessen Energie um 70 kJ/mol höher liegt als die der beiden Reaktionspartner auf der Oberfläche. Die CO-Oxidation hat also eine Aktivierungsbarriere von 70 kJ/mol. Bewegt sich nun das CO-Molekül noch ein wenig weiter auf den Brückensauerstoff zu, so reagieren CO und O zu  $\text{CO}_2$  ohne weitere Aktivierung.

#### On-top-Sauerstoffreaktion

Als nächstes wurde die Reaktion des *on-top*-Sauerstoffs mit CO untersucht. Dieser Reaktionspfad erscheint sehr viel versprechend zu sein, da der *on-top*-Sauerstoff um 140 kJ/mol schwächer gebunden ist als der brückegebundene Sauerstoff. DFT-Rechnungen zeigen aber, dass die Aktivierungsbarriere mit 65 kJ/mol nur unwesentlich kleiner ist als der zwischen dem CO-Molekül und dem brückegebundenen Sauerstoff.

#### Filmsequenzen im Internet

Molekulardynamische Rechnungen ergeben ein tieferes Verständnis der elementaren Reaktionsschritte in der CO-Oxidation auf  $\text{RuO}_2(110)$ . Illustrierte Filmsequenzen der katalytischen CO-Oxidation können von der Web-Seite <http://www.iki.fi/~apsi/Science/movies/> abgespielt werden. Anhand dieser Filme erkennt man sehr schön die innere Anregung von Schwingungen und Rotationen des wegfliegenden  $\text{CO}_2$ -Moleküls und wie sich der Katalysator bei der Reaktion strukturell verändert. Atome des  $\text{RuO}_2$  verschieben sich dabei um mehrere Zehntel Ångström. Weitere Informationen und Originalarbeiten können über unsere Web-Seite [www.chemie.uni-giessen.de/home/over](http://www.chemie.uni-giessen.de/home/over) abgerufen werden.

#### Optimale Nutzung des HLRB II

Für den Modellkatalysator Rutheniumdioxid konnten also die mikroskopischen Elementarschritte bei der Wechselwirkung von CO mit Sauerstoff aufgrund der DFT-Rechnungen vollständig aufgeklärt werden. Das Potential

dieses Modellkatalysators ist damit aber noch lange nicht erschöpft.  $\text{RuO}_2$  hat gezeigt, dass es ein sehr effizienter Katalysator für die Oxidation von Ammoniak zu  $\text{NO}_2$  ist und durchaus das Potenzial besitzt, den herkömmlichen Pt-Katalysator zu ersetzen. Diese Reaktion gilt es im Einzelnen zu verstehen und auf Anwendbarkeit in Mikrostrukturreaktoren zu prüfen. Auch bei dieser Reaktion wird es unerlässlich sein, umfangreiche DFT-Rechnungen auf dem Nachfolgerechner der Hitachi durchzuführen und damit ein effektives Zusammenspiel von Theorie und Experiment schon im Frühstadium des Projektes zu erlauben. Das bedeutet: die bereitgestellte Rechenleistung kann optimal genutzt werden.

*Prof. Over ist Professor für Physikalische Chemie an der Justus Liebig Universität Gießen, Dr. Seitsonen arbeitet am Institut für Physikalische Chemie der Universität Zürich.*

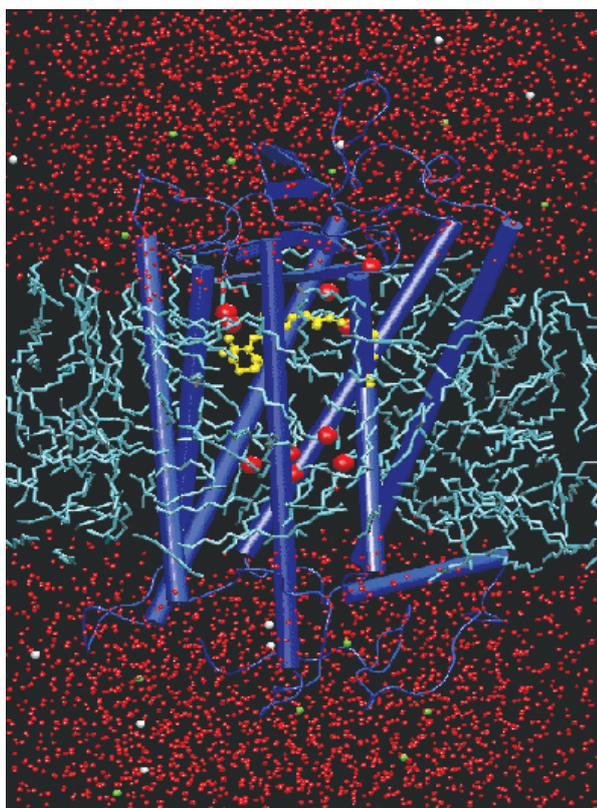


**Abb. 3:** Auf der  $\text{RuO}_2(110)$ -Oberfläche gibt es während der CO-Oxidation zwei potentiell aktive Sauerstoff-Spezies, mit der CO zu  $\text{CO}_2$  reagieren kann. Das ist einmal der Brückensauerstoff (linke Seite), und das andere Mal der on-top-Sauerstoff (rechte Seite). DFT-Rechnungen haben die zugehörigen Übergangszustände bestimmt (transition state).

QUANTENCHEMIE

# Ein Kosmos im Kleinen

WIE AUS LICHT CHEMISCHE ENERGIE WIRD.



**Abb. 1:**  
Modell von Rhodopsin, stabilisiert durch eine Umgebung, die die Verhältnisse in einer biologischen Membran imitiert (24000 Atome).

VON IRMGARD FRANK

Wenn Licht auf die Netzhaut fällt, wird dadurch ein Signal ausgelöst, das an das Gehirn weitergegeben wird. Die eigentliche Aufnahme des Lichts geschieht dabei durch die Photorezeptoren, Stäbchen und Zapfen, wobei die Stäbchen für das Hell-Dunkel-Sehen und die Zapfen für das Farbsehen zuständig sind. Innerhalb der Stäbchen wird das Licht von Rhodopsin, dem Sehpurpur, aufgenommen. Bei dieser Substanz handelt es sich um ein Membranprotein, also um ein Protein, das in seiner biologisch

aktiven Form nur innerhalb einer speziellen Membranumgebung stabil ist. Rhodopsin setzt sich zusammen aus dem Proteinanteil Opsin, sowie aus Retinal, das im Körper aus dem strukturell sehr ähnlichen Vitamin A gebildet werden kann. Dieses an Opsin gebundene Retinal ist in der Lage, Licht im sichtbaren Bereich zu absorbieren, und wird daher als Chromophor, also als ‚Farbträger‘, bezeichnet. (Größenverhältnisse: Netzhautdicke: einige 100 Mikrometer, Rhodopsin: rund 10 Nanometer, Retinal: rund 1 Nanometer).

Die Eigenschaft, Licht zu absorbieren, teilt die Substanz mit vielen anderen farbigen Materialien. Während von Farbstoffen absorbiertes Licht aber meist wieder abgestrahlt oder in Wärme umgewandelt wird, wird in Retinal eine gerichtete Bewegung ausgelöst, die zu einem Nervensignal führt. Erstaunlich ist dabei die hohe Effizienz dieses von der Natur optimierten Prozesses: Von drei Photonen sind zwei ‚erfolgreich‘, ein sehr hoher Anteil der Lichtenergie wird als chemische Energie gespeichert.

Grundlage ist die Photoreaktion von Retinal von der sogenannten *11-cis-* zur *all-trans-Form*. Das System führt dabei eine Rotation um eine Kohlenstoff-Kohlenstoff-Doppelbindung aus. Eine solche Isomerisierung, also eine Reaktion ohne Änderung der chemischen Zusammensetzung, tritt in Folge von Lichtanregung in vielen

ungesättigten Verbindungen auf, allerdings ist erstaunlich, dass sie in Rhodopsin derart zielgerichtet und schnell abläuft: Die Reaktionszeit liegt unterhalb 200 Femtosekunden und zählt damit zu den schnellsten chemischen Reaktionen. Die Proteinumgebung ist auf dieser extrem kurzen Zeitskala weitgehend unbeweglich und kaum in der Lage, für die Reaktion Platz zu machen, die den chemischen Strukturformeln zufolge sehr raumgreifend sein sollte. Überraschenderweise findet man aber, dass die Proteinumgebung aber keineswegs ein Hindernis darstellt, vielmehr beschleunigt sie die Reaktion verglichen mit der Reaktion des freien Chromophors in Lösung.

## Bewegung nach physikalischen Gesetzen

Das Staunen über die Komplexität und Effizienz dieser biochemischen Prozesse führt auf die Frage, ob eine Erklärung auf der Grundlage physikalischer Gleichungen möglich ist. Die Beschreibung von Prozessen auf der Piko- und Nanometerskala ist prinzipiell mit den Gesetzen der Quantenmechanik möglich. Mit Hilfe moderner Rechnersysteme werden gegenwärtig immer komplexere chemische und biochemische Prozesse einer quantenmechanischen Simulation zugänglich.

Im Forschungsgebiet der Quantenchemie werden Methoden entwickelt, die zwar nicht die exakte, wohl aber die effiziente, näherungsweise Lösung solcher Probleme erlauben. Der Erfolg dieser Näherungsmethoden drückt

sich unter anderem in der Vergabe des Nobelpreises 1998 an Pople und Kohn aus. Speziell auf Kohns Arbeiten bauen die Methoden auf, mit denen heute im Rahmen der sogenannten *Car-Parrinello-Moleküldynamik* bzw. *First-Principles-Moleküldynamik* chemische Reaktionen simuliert werden können. Damit ist es möglich, ein chemisches System aufzusetzen, also Atome in gewünschter Weise anzuordnen, und den Computer die Frage beantworten zu lassen, welche chemischen Bindungen hier auf kürzesten Zeitskalen gebildet oder gebrochen werden, also welche chemischen Prozesse ablaufen werden, wenn sich diese Atome nun bei endlicher Temperatur bewegen und nach quantenmechanischen Gesetzen wechselwirken.

### Simulation 'from first principles'

Die Simulation des ersten Schrittes des Sehprozesses, also der cis-trans-Isomerisierung von Rhodopsin, stellt eine besondere Herausforderung für einen First-Principles-Moleküldynamikansatz dar. In einer Kooperation zwischen der LMU München und der ETH Zürich gelang die Simulation der Photoreaktion von Rhodopsin auf dem Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB) am Leibniz-Rechenzentrum (s. Abb. 1).

Es zeigt sich, dass die Proteinumgebung bereits vor der Lichtanregung den Chromophor bis zu einem gewissen Grad deformiert. Die Struktur der Chromophors wird also durch zweidimensionale Strukturformeln nur höchst unvollständig beschrieben. Im angeregten Zustand sind dann nur noch minimale Bewegungen nötig, um eine Drehung um die Doppelbindung zu bewirken. Während der gesamten Photoreaktion bewegt sich keines der Atome über größere Distanzen als 0,15 nm, das entspricht lediglich der Länge

einer einzelnen Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindung. Der Chromophor ist flexibel genug, um dennoch durch eine Verdrillung die Isomerisierung zu ermöglichen. Allerdings wird dadurch das System gleich einer Feder gespannt. Diese Spannung wird dann in dem System sukzessive durch Umlagerungen reduziert, was schließlich eine rasche Abfolge weiterer Prozesse auslöst, die sogenannte Sehkaskade, die letzten Endes zu einem Nervensignal führt.

### Lichtgetriebene Nanorotoren

Biologische Phänomene, wie die Isomerisierung von Rhodopsin, lassen sich als Grundlage für die Entwicklung von Nano-Funktionseinheiten bzw. Nanodevices nutzen. Charakteristisch für Rhodopsin ist die lichtgetriebene, unidirektionale Rotation um 180 Grad um eine Bindung. Danach ist ein komplexer biologischer Prozess notwendig, um die ursprüngliche 11-cis-Form wiederherzustellen. Wenn man an die Konstruktion von lichtgetriebenen Nanorotoren oder – im



nächsten Schritt – Nanomotoren denkt, wäre aber eine wiederholte unidirektionale Rotation um volle 360 Grad wünschenswert. Mit anderen Worten, das Molekül sollte sich fortgesetzt im immer gleichen Drehsinn (oder zumindest in einer Vorzugsrichtung) um eine feste Achse drehen.

Feringa und Mitarbeitern gelang vor einigen Jahren erstmals die Synthese eines Systems, für das unidirektionale 360-Grad-Rotation in einem vierstufigen Prozess nachgewiesen werden konnte. Wie auch der Rhodopsin-Chromophor ist dieses Molekül nicht planar, sondern besitzt eine dreidimensionale Struktur (s. Abb. 3) und ist chiral, d.h. es ist nicht identisch mit seinem Spiegelbild. Während es von vornherein naheliegend war, anzunehmen, dass das Fehlen einer Spiegelebene im Molekül mit der Unidirektionalität der Rotation zusammenhängt, war doch zunächst völlig unklar, warum genau dieses Molekül im Gegensatz zu anderen chiralen Molekülen diese bemerkenswerten Rotationsseigenschaften aufweist. Mit Moleküldynamiksimulationen gelang es, das Phänomen auf physikalischer Grundlage zu verstehen.

### Hochkomplexe Chemie im Dreidimensionalen

Sowohl Rhodopsin als auch der lichtgetriebene Nanorotor stellen Beispiele für chemische Reaktionen dar, die in ihren Einzelheiten so komplex sind, dass die Intuition des Chemikers hier an ihre Grenzen stößt. Mit First-Principles-Moleküldynamik-Simulationen kann die Intuition unterstützt und ein chemischer Zusammenhang mit physikalischen Gesetzen erklärt werden. Begrenzt wird dieser Ansatz durch den Rechenaufwand. Der Anstieg der Rechenkapazitäten hat aber in den letzten Jahren diese Grenzen enorm erweitert und faszinierende Einblicke in die Welt der Moleküle ermöglicht.

Die Autorin ist Privatdozentin am Department Chemie, Bereich Physikalische Chemie, der Ludwig-Maximilians-Universität München



**Abb. 2:** Der molekulare Rotor. Gezeigt ist die Elektronendichte, die in den Simulationen den Zusammenhalt der Atomkerne bewirkt.

THEORETISCHE PHYSIK

# Selbstorganisation auf molekularer Ebene

EINE HERAUSFORDERUNG FÜR THEORIE UND SIMULATION.

VON GERO SCHMIDT

Die Integrationsdichte elektronischer Bauelemente auf Siliziumchips folgt seit Jahrzehnten erstaunlich genau einer von Gordon Moore, Mitbegründer des Chipherstellers Intel, bereits 1965 gefundenen Regel: *Moore's Law* besagt, dass sich die Zahl der Transistoren auf einem Chip alle zwei Jahre verdoppelt. Ermöglicht wird dies durch die Verkleinerung der lithographischen Strukturen

1,2 Nanometer, das sind nur etwa fünf  $\text{SiO}_2$ -Lagen! Die Miniaturisierung der Bauelemente hat damit zu Strukturgrößen buchstäblich atomarer Dimensionen geführt.

## Top down oder bottom up?

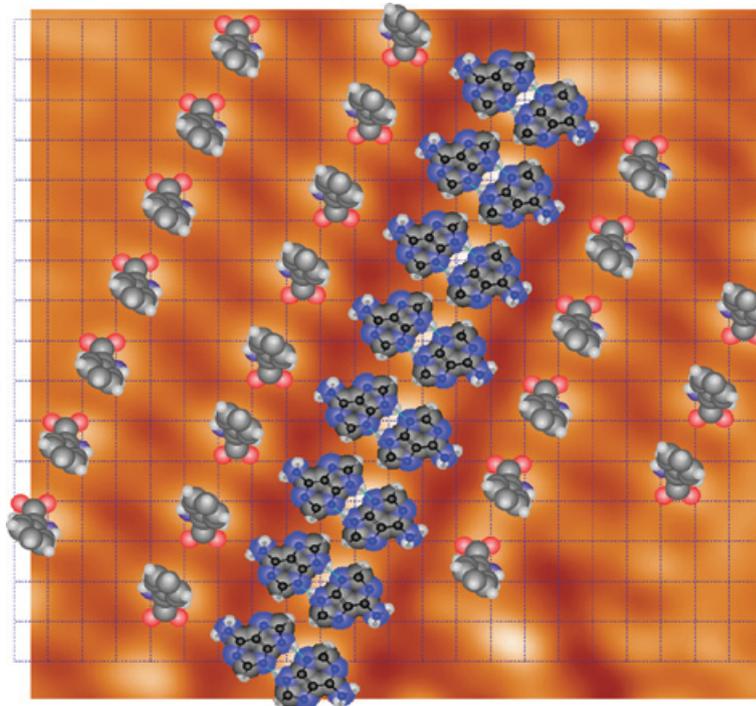
Die Realisierung solcher Strukturen mittels eines *Top-Down*-Ansatzes, d.h. durch lithographische Prozesse ist extrem kostenaufwändig und fehlerträchtig. Eine mögliche Alternative besteht im sogenannten

geeigneten Bedingungen spontan zusammen. Dieses Verfahren ist der Natur abgeschaut, welche mit Hilfe einiger weniger molekularer Bausteine, den Aminosäuren, die unglaubliche Vielfalt an Lebensformen entwickelt hat. Es ist der Forschung bislang in einzelnen Fällen gelungen zu zeigen, dass eine derartige Technologie grundsätzlich auch zur Realisierung elektronischer Bauelemente möglich ist. Wir sind jedoch weit davon entfernt, die damit verbundenen Phänomene und Prozesse grundlegend zu verstehen. Höchstleistungsrechner helfen hier, die komplexen Vorgänge zu verstehen.

## Molekulare Selbstorganisation

Moleküle, die schwach auf chemisch inerten oder Metallsubstraten gebunden sind, stellen ein dem Experiment und der Theorie gleichermaßen zugängliches Laborsystem zur Untersuchung der molekularen Selbstorganisation dar. Solche Systeme können mit den hochentwickelten spektroskopischen Werkzeugen der Oberflächenanalytik detailliert untersucht und gegebenenfalls auch beeinflusst werden, z.B. mit der Spitze eines Rastertunnelmikroskops. Abb. 1 zeigt als ein Beispiel schematisch die Adsorption der DNA-Base Adenin und einer kleinen Aminosäure (Phenylglycin) auf der Kupferoberfläche. Deutlich zu erkennen ist die Ausbildung einer langreichweitigen Ordnung der Moleküle. Die Adeninmoleküle bilden eine Dimerreihe aus, zu der sich parallel die Aminosäuren anlagern.

Abb. 1:  
Experimentell beobachtete Adsorption von Adenin und Phenylglycin auf der Kupfer-(110)-Oberfläche. Schematische Darstellung entsprechend einer rastertunnelmikroskopischen Aufnahme von Chen und Richardson, *Nature Mat.* 2 (2003) 324.



der Chips. Bei den momentan produzierten Transistoren der 65-Nanometer-Generation hat die Gateoxidschicht eine Dicke von

*Bottom-Up*-Ansatz der molekularen Selbstorganisation: Elektronische Schaltkreise bauen sich aus einer Vielzahl von Molekülen unter

### Atomare Präzision

Was verursacht die Ausbildung dieser Struktur mit atomarer Präzision? Die Ordnung reicht offensichtlich weit über den nächsten-Nachbar-Abstand des Kupfersubstrats hinaus und übersteigt damit typische chemische Bindungslängen um ein Mehrfaches. Als einen ersten Schritt zur Aufklärung dieser Frage haben wir die Adsorption von Adeninmolekülen auf Festkörperoberflächen numerisch im Rechner untersucht. Für quantenmechanische Simulationen mehrerer hundert Atome, wie sie im vorliegenden Fall für die Modellierung der Oberfläche und der Adsorbatmoleküle benötigt werden, ist die Dichtefunktionaltheorie hierbei die Methode der Wahl.

### Simultane Berechnungen

Geeignete Berechnungsverfahren sind in modernen Programmpaketen wie zum Beispiel VASP (*Vienna Ab-initio Simulation Package*) implementiert. Die Größenordnung des Problems – die Beschreibung der Valenzelektronen mehrerer Hundert Atome erfordert einen Basissatz von mehreren Hunderttausend bis zu einigen Millionen ebenen Wellen – macht darüber hinaus eine massive Parallelisierung der Rechnungen erforderlich. Nur durch die simultane Berechnung der elektronischen Zustände und Basisfunktionen auf mehreren Hundert Prozessoren waren wir in der Lage, innerhalb einiger Tage bis zu wenigen Wochen numerisch auskonvergierte und physikalisch zuverlässige Adsorptionsgeometrien zu berechnen. Erst durch die Verfügbarkeit massiv-paralleler Höchstleistungsrechner wie zum Beispiel der Hitachi SR8000 am Leibniz-Rechenzentrum wurde es daher möglich, die Frage zu beantworten, warum und wie z.B. Adeninmoleküle auf Kupfer- oder auch Graphitoberflächen adsorbieren.

### Verblüffende Einsichten

Dass diese Frage alles andere als trivial ist, wird bei Betrachtung von Abb. 2 deutlich. Hier ist die Differenz der Ladungsdichten des Adsorbatsystems, d.h. Adenin adsorbiert auf Kupfer, und der einzelnen Teilsysteme, d.h. der reinen Kupfer-(110)-Oberfläche

und des Adeninmoleküls in der Gasphase gezeigt. Obwohl die Molekül-Metall-Bindung durch die Aminogruppe des Adenines vermittelt wird, tritt zwischen dem Stickstoffatom der Aminogruppe und dem nächstliegenden Kupferatom eine Elektronenverarmung auf (rote Isofläche in Abb. 2). Dies widerspricht scheinbar dem aus dem Chemieunterricht geläufigen Bild, wonach chemische Bindungen mit Elektronenanreicherung einhergehen.

### Bindung durch gegenseitige Polarisierung

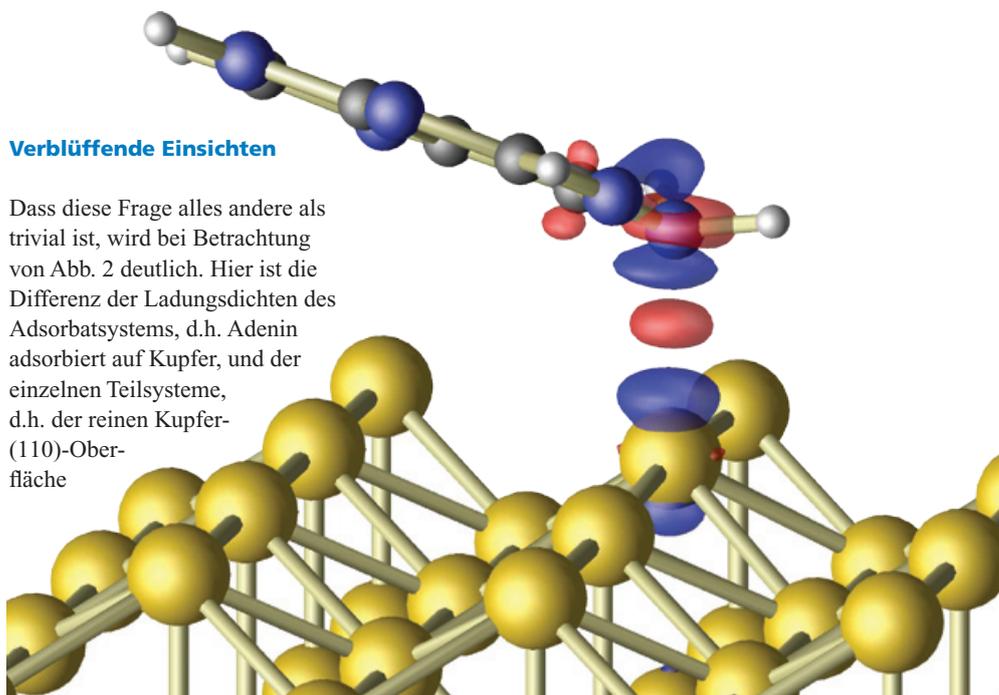
Eine detaillierte numerische Analyse der verschiedenen Beiträge zur Gesamtenergie des Adsorbatsystems zeigt, dass in dem vorliegenden Fall die Bindung durch eine gegenseitige Polarisierung von Molekül und Substrat verursacht ist. Das freie Elektronenpaar der Aminogruppe induziert eine positive Bildladung in der Kupferoberfläche, die wiederum die Aminogruppe polarisiert. Infolge dessen ändert sich die Hybridisierung des Stickstoffatoms von  $sp^2$  zu  $sp^3$  und es kommt zur Herausbildung der gezeigten Adsorptionsgeometrie, die in guter Übereinstimmung mit gemessenen

Daten ist. Es steht zu vermuten, dass die hier beispielhaft diskutierten elektrostatischen Wechselwirkungen auch bei der Herausbildung großer supramolekularer Strukturen wie in Abb. 1 eine entscheidende Rolle spielen.

### Dynamische Wechselwirkungen

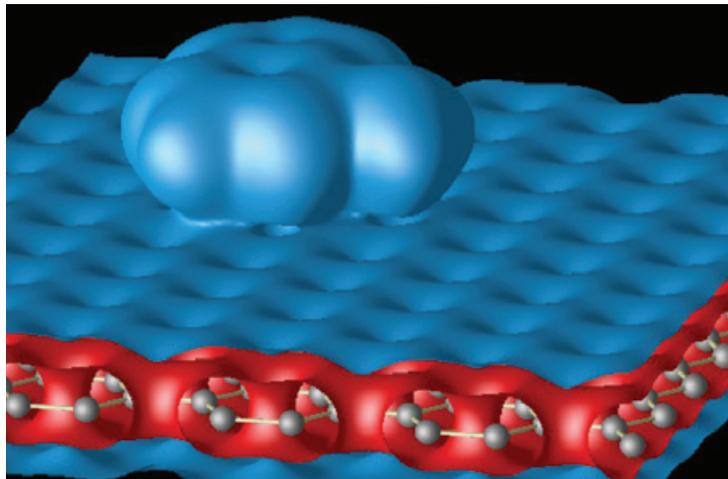
Neben solchen elektrostatischen Effekten müssen auch noch dynamische Wechselwirkungen zwischen den Polarisationsladungen mit berücksichtigt werden. Den signifikanten Einfluss dieser Kräfte konnten wir kürzlich durch massiv-parallele numerische Simulationen zur Adsorption von Adenin auf der Graphit-(0001)-Oberfläche [2] demonstrieren. Abb. 3 zeigt die Isoflächen der Valenzladungsdichte eines Adeninmoleküls auf der Graphitoberfläche.

In diesem Fall verschwindet die Ladungsdichte zwischen Molekül und Oberfläche nahezu völlig und das Molekül scheint auf dem Substrat zu schwimmen. Wodurch ist es letztlich gebunden? Die Rechnung zeigt, dass für Abstände in der Größenordnung von 5 bis 6 Å die delokalisierungsbedingte



**Abb. 2:** Umverteilung der metallischen und molekularen Valenzelektronendichte hervorgerufen durch die gegenseitige Polarisierung von Adenin und Kupferoberfläche. Elektronenverarmungs- bzw. anreicherungsgebiet sind mit roten bzw. blauen Isoflächen gekennzeichnet. Daten aus [1].

**Abb. 3:**  
Isoflächen der  
Ladungsdichte von  
Graphit-adsorbiertem  
Adenin.



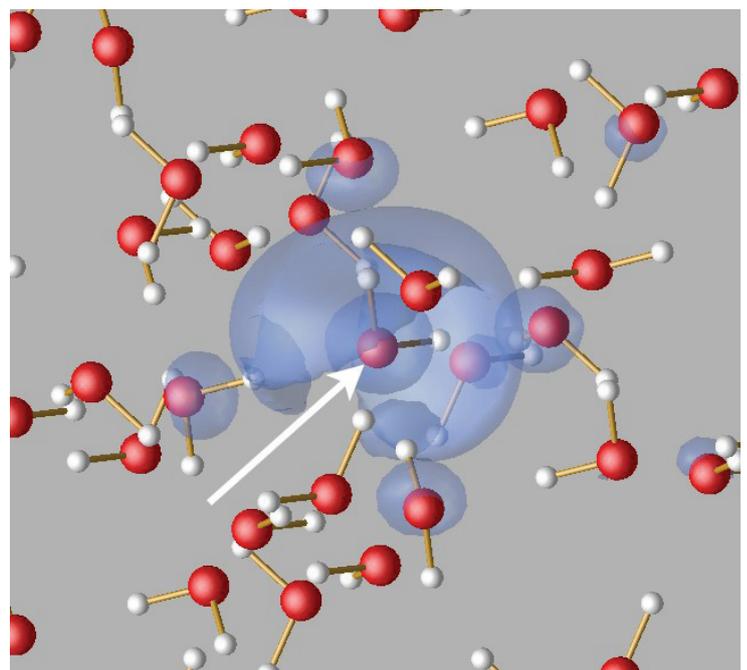
Absenkung der kinetischen Energie der Valenzelektronen stabilisierend wirkt und für kleinere Abstände der Hauptbeitrag der attraktiven Wechselwirkung von den van-der-Waals-Kräften kommt. Die genaue Berechnung dieser Kräfte ist methodisch und numerisch zur Zeit eine der größten Herausforderungen bei der Aufklärung molekularer Selbstorganisationsprozesse.

#### Interessante Anwendungen

Das Verständnis der Anregungseigenschaften molekularer und supramolekularer Strukturen ist die Voraussetzung, um solche Strukturen gezielt als elektronische Schalter oder optische Bauelemente zu nutzen. Kompliziert hierbei ist insbesondere die Berechnung von Systemen, deren räumliche Ausdehnung den Exzitonradius, d.h. den mittleren Abstand eines optisch angeregten Elektrons vom zurückgelassenen Fehlelektron (Loch), übersteigt. Gerade solche Systeme lassen jedoch interessante Anwendungen erhoffen, wenn man z.B. an Hybridsysteme aus organischen Molekülen und Halbleiterbauelementen denkt. Mit neuen algorithmischen Ansätzen und der jetzt zur Verfügung stehenden Rechenleistung [3] wurde es erstmalig möglich, optische Spektren von komplexen supramolekularen Strukturen wie z.B. Eis akkurat zu berechnen [4]. Schon die Modellierung des optischen Spektrums

eines Wasservolumens von lediglich vier Molekülen erfordert die Berechnung und Diagonalisierung einer Hamiltonmatrix mit einem Rang von über 200.000 für die Elektron-Loch-Paarzustände. Die hierzu notwendigen Rechnungen sind ohne leistungsfähige und massiv-parallele Rechner undenkbar. Abb. 4 zeigt die berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines optisch angeregten Elektrons im Eis. Deutlich zu erkennen ist die Wasserstoffbrückenbindungs-induzierte Delokalisierung des Elektrons auf die Nachbarmoleküle, die Anlass zur optischen Anomalie des Wassers gibt.

**Abb. 4:**  
Räumliche Verteilung  
eines optisch ange-  
regten Elektrons in  
hexagonalem (natür-  
lichem) Eis. Der Pfeil  
markiert die Position  
des zugehörigen  
Lochs. Daten aus [4]



An dieser Stelle möchte ich Prof. Friedhelm Bechstedt, Dr. Patrick Hahn, Martin Preuss und Frank Ortmann von der Friedrich-Schiller-Universität Jena für die Zusammenarbeit herzlich danken. Ohne sie und die großzügigen Rechenkongente des Leibniz-Rechenzentrums München sowie des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart wären die hier vorgestellten Arbeiten nicht möglich gewesen.

#### Literatur

- [1] M. Preuss, W. G. Schmidt, and F. Bechstedt, Phys. Rev. Lett. (2005) 236102.
- [2] F. Ortmann, W. G. Schmidt, and F. Bechstedt, Phys. Rev. Lett. (2005) 186101.
- [3] W. G. Schmidt, S. Glutsch, P. H. Hahn, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B (2003) 085307.
- [4] P. H. Hahn, W.G. Schmidt, K. Seino, M. Preuss, F. Bechstedt, and J. Bernholc, Phys. Rev. Lett. (2005) 037404.

*Der Autor lehrt Theoretische Physik an der Universität Paderborn.*



SUPERNOVAEXPLOSIONEN

# Den RätseIn der Stern- explosionen auf der Spur

DIE GEWALTIGEN EXPLOSIONEN, MIT DENEN MANCHE STERNE IHR SPEKTAKULÄRES ENDE FINDEN, HABEN SICH ALS TURBULENTE UND HOCHKOMPLEXE VORGÄNGE ENTPUPPT. ES BENÖTIGT DIE AUFWÄNDIGSTEN SIMULATIONSRECHNUNGEN AUF SUPERCOMPUTERN, UM IHNEN WENIGSTENS EINEN TEIL IHRER GEHEIMNISSE ZU ENTREISSEN.

VON WOLFGANG HILLEBRANDT, JENS NIEMEYER, FRIEDRICH RÖPKE, WOLFRAM SCHMIDT

Als der dänische Astronom und Adlige Tycho Brahe am 11. November 1572 im Sternbild Cassiopeia einen neuen Stern entdeckte, der heller aufleuchtete als der Planet Jupiter, war das eine Sensation – mit Tychos Worten „ein Wunder, wie es seit Anbeginn der Welt nicht gesehen wurde“. Heute sind viele Wissenschaftshistoriker der Meinung, dass damals die moderne Astronomie begann; denn erstmals wurde offenbar, dass der Fixsternhimmel nicht unveränderlich ist, und diese Erkenntnis sollte unser Weltbild nachhaltig verändern. Allerdings dauerte es dann noch mehr als 300 Jahre, bis man erkannte, dass einige dieser „neuen“ Sterne außergewöhnlich hell erstrahlen – für einige Wochen erreichen sie fast die Leuchtkraft einer ganzen Galaxie mit vielen Milliarden Sternen – und es dauerte dann noch einmal fast 100 Jahre, bis man einigermaßen verstand, was die Ursachen dieser gewaltigen Lichtausbrüche sind, die man heute Supernovae nennt.

So glauben wir sicher zu sein, dass für etwa die Hälfte aller Supernovae der Kollaps eines massereichen Sterns zu einem Neutronenstern

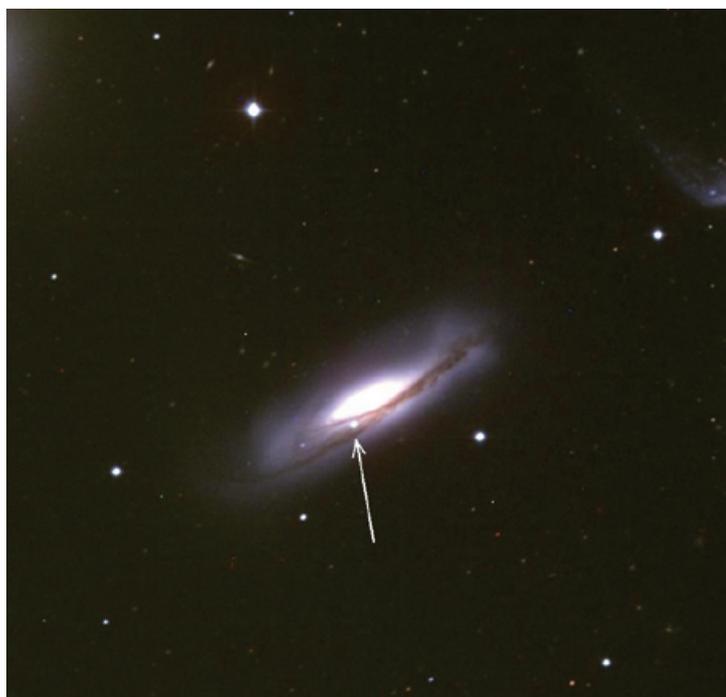


Abb. 1: Bild der Typ Ia Supernova SN 2002bo in der Galaxie NGC 3190. Diese Supernova wurde am 9. März 2002 fast zwei Wochen vor Erreichen des Maximums ihrer Helligkeit entdeckt und danach von der European Supernova Collaboration (ESC) mehrere Monate fast in jeder Nacht beobachtet. Die so gewonnenen Daten, auch anderer Supernovae, bilden die Basis für den Vergleich mit den numerischen Simulationen.

– oder eventuell zu einem Schwarzen Loch – der Auslöser ist. Diese nennen die Astronomen Typ II, Typ Ib und Typ Ic. Die andere Hälfte, die Supernovae vom Typ Ia, sind dagegen wahrscheinlich das Ergebnis thermonuklearer Explosionen weißer Zwergsterne (Abb. 1). Für diese Interpretation spricht die gute Übereinstimmung der aus Modellen berechneten Spektren und Lichtkurven mit den Beobachtungen. Obwohl also Beobachtungen die genannten Szenarien stützen, bleibt dennoch das Modellieren der Explosionen eine der größten

Herausforderungen für die Astrophysik. Seit vielen Jahren werden die jeweils schnellsten Computer der Welt mit möglichst realistischen Simulationen gefüttert, aber erst die neuesten Simulationen scheinen der Wirklichkeit nahe zu kommen.

## Standardkerzen für die kosmische Expansion

In den letzten Jahren ist das Interesse der Astronomen an den thermonuklearen (Typ Ia) Supernovae stark gewachsen; denn man konnte sie erfolgreich zur Messung

**Abb. 2:** Physikalisch betrachtet ähneln manche Vorgänge bei der Kernfusion in einem Weißen Zwerg einer chemischen Verbrennung. Turbulente Flammen – hier Schnappschüsse im Labor – können sich auf zweierlei Weise ausbreiten: durch Wärmediffusion mit Unterschallgeschwindigkeit (Deflagration) oder durch Verdichtung des Gemischs in einer überschallschnellen Stoßwelle (Detonation). Auf welche dieser Arten ein Weißer Zwerg „verbrennt“ ist eine noch offene Frage.



kosmischer Entfernungen verwenden. So ist es gelungen, die Entfernungen von Supernovae zu messen, die explodierten, als das Universum nur etwa halb so alt war wie heute und das Sonnensystem noch nicht einmal entstanden war.

Als man die Daten auswertete, fand man überraschend, dass das heutige Universum beschleunigt zu expandieren scheint – im Widerspruch zum gängigen kosmologischen Weltbild. Das Universum würde danach heute und auch in der Zukunft durch eine neue unbekannte Energieform dominiert, die so genannte Dunkle Energie. Was diese Energie mit negativem Druck ist, ob eine „kosmologische Konstante“ – einst von Albert Einstein in die Allgemeine Relativitätstheorie eingeführt und bald wieder verworfen –, die Energiedichte des Quantenvakuums oder ein neues Kraftfeld, für das es noch keine Theorie gibt, ist zu einer der Schlüsselfragen der Physik geworden.

**Abb. 3:** Die dreidimensionale Simulation einer Supernova-Explosion vom Typ Ia zeigt in vier Schnappschüssen – Beginn der Zündung sowie 0,3 Sekunden, 0,6 und etwa 10 Sekunden danach – die thermonukleare Explosion eines Weißen Zwergs. Die Dichtestruktur des Sterns ist farbkodiert dargestellt; die blaue Struktur gibt die thermonukleare „Flamme“ wieder. Der Größenmaßstab expandiert mit der Supernova.

Bevor man jedoch so weitreichende Schlüsse zieht, muss man sicher sein, dass Supernovae auch wirklich als Standardkerzen taugen. Niemand kann zum Beispiel garantieren, dass die weit entfernten Explosionen die gleichen sind wie die, die wir für die Eichung

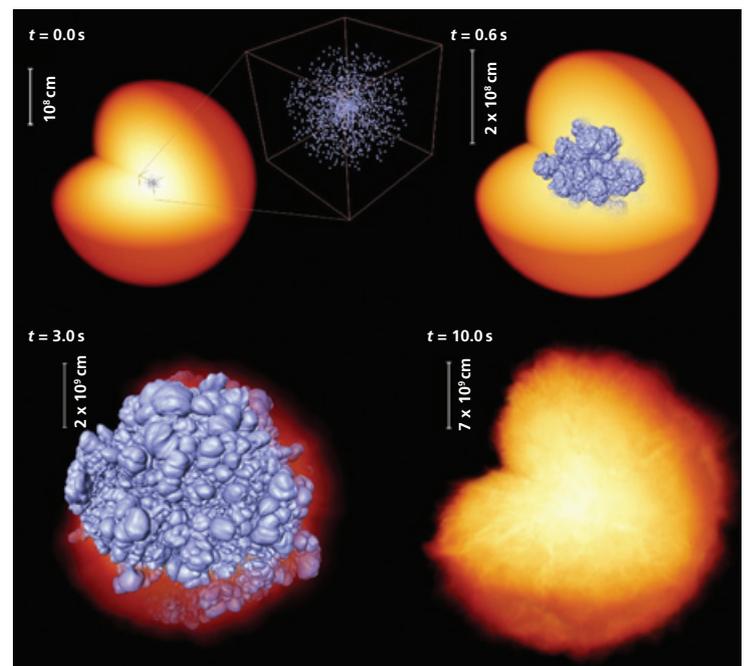
benutzt haben. Darum müssen wir die Explosionen verstehen sowie die Beziehungen, auf denen die Eichung beruht.

### Warum explodieren Weiße Zwerge?

Wie erwähnt erklärt man Typ-Ia-Supernovae als thermonukleare Explosionen Weißer Zwerge. Diese Sterne bestehen zu etwa gleichen Teilen aus Kohlenstoff und Sauerstoff, haben ungefähr die Masse der

Sonne und ein Drittel des Erddurchmessers. Stabil gehalten werden sie durch den Druck eines dichten Gases sich extrem schnell bewegend Elektronen. An sich würde ein Weißer Zwerg für alle Zeit in diesem Zustand verharren, denn er verbraucht keine Kernenergie, um stabil zu bleiben. Um aus ihm eine Supernova zu machen, muss es einen nahen Begleitstern geben, von dem Materie zu ihm strömt. Dadurch nimmt die Masse des Weißen Zwergs zu, und er wird zusammengepresst, bis schließlich Dichte und Temperatur die Zündbedingungen für die Fusion von Kohlenstoff und Sauerstoff zu schwereren chemischen Elementen erreichen. Eine thermonukleare „Flamme“ entsteht, über deren Natur uns Beobachtungen Informationen liefern.

In den Spektren von Typ-Ia-Supernovae findet man starke Linien von mittelschweren chemischen Elementen wie Silizium, Schwefel und Kalzium. Dies zeigt, dass die Fusion nicht immer bis zum am stärksten gebundenen Kern fortschreitet. Das bedeutet aber auch, dass die Temperatur in Teilen des

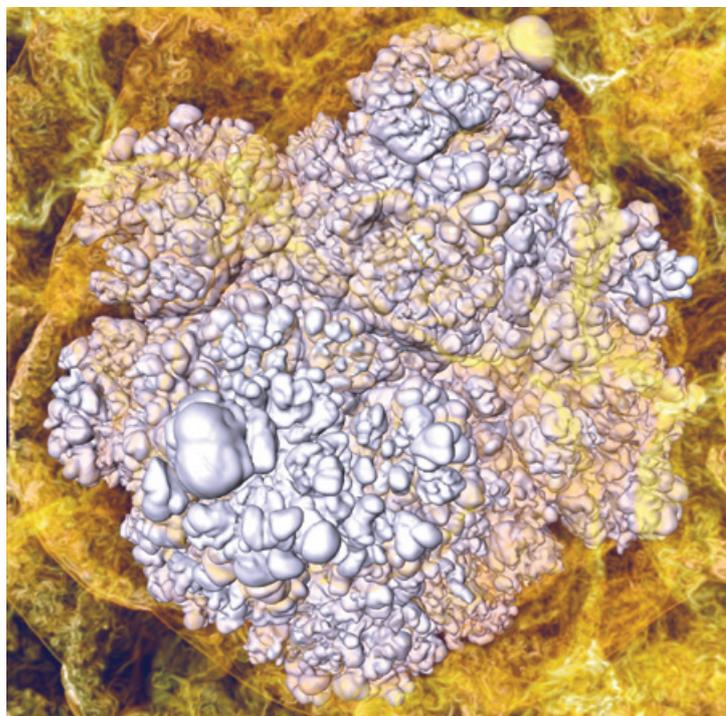


Sterns einige Milliarden Grad nicht übersteigt – was wiederum ein Indiz dafür ist, dass sich die Flammen zumindest für einige Zeit nicht als überschallschnelle Detonation ausbreiten, sondern langsamer als so genannte Deflagration. Durch eine Detonation würde fast der gesamte Stern vollständig zu Nickel und Eisen verbrannt, im Widerspruch zu den beobachteten Spektren. Natürlich ist nicht ausgeschlossen, dass im Verlauf der Explosion aus der Deflagration noch eine Detonation wird; diese Möglichkeit wird derzeit unter Experten heiß diskutiert. Doch eine thermonukleare Flamme, die sich allein durch Wärmediffusion ausbreitet, vermag den Stern nicht zur Explosion zu bringen. Nur ein kleiner Teil würde verbrannt, danach würde der Stern sich ausdehnen und abkühlen, und die nuklearen Flammen würden wieder verlöschen. Um den Stern zu zerreißen, muss die Brenngeschwindigkeit einige tausend Kilometer pro Sekunde erreichen statt nur ein paar hundert.

Seit den ersten Versuchen, thermonukleare Supernovae auf Computern zu simulieren, hat dieses Problem die meisten Schwierigkeiten bereitet. Dabei war die Lösung eigentlich bekannt, und zwar von Automotoren. Das Zauberwort heißt Turbulenz. Auch Autos würden ohne Turbulenz nicht fahren. Sie vergrößert bei vorgemischten Flammen deren Oberfläche durch Falten und Dehnen. Daher wächst die Verbrennungsrate, die proportional zu der Flammenoberfläche ist, stark an. Nur aus diesem Grund kann ein Automotor mit einigen tausend Umdrehungen pro Minute laufen. Im Prinzip sollte das in Supernovae ähnlich funktionieren (Abb. 2).

### Supernova als Verbrennungsmotor

Lassen sich physikalische Konzepte und numerische Methoden aus der technischen Verbrennung tatsäch-



**Abb. 4:** Thermonukleare „Flammen“ (in blau) und Turbulenz (dargestellt durch die Vortizität). Das Bild zeigt, dass die Supernovamaterie bereits eine halbe Sekunde nach dem Zünden der Fusion hochgradig turbulent ist, in Übereinstimmung mit unseren Erwartungen.

lich auf Supernova-Explosionen übertragen? Diese Frage ist in den letzten Jahren von einer Gruppe am Max-Planck-Institut (MPI) für Astrophysik in Garching sowie von Teams an der Universität Würzburg, der University of California und der University of Chicago weitgehend beantwortet worden. Wie in der technischen Verbrennung kann man auch in Supernovae nur die großen Längenmaßstäbe direkt simulieren; die nicht aufgelösten kleinräumigen Prozesse müssen modelliert werden.

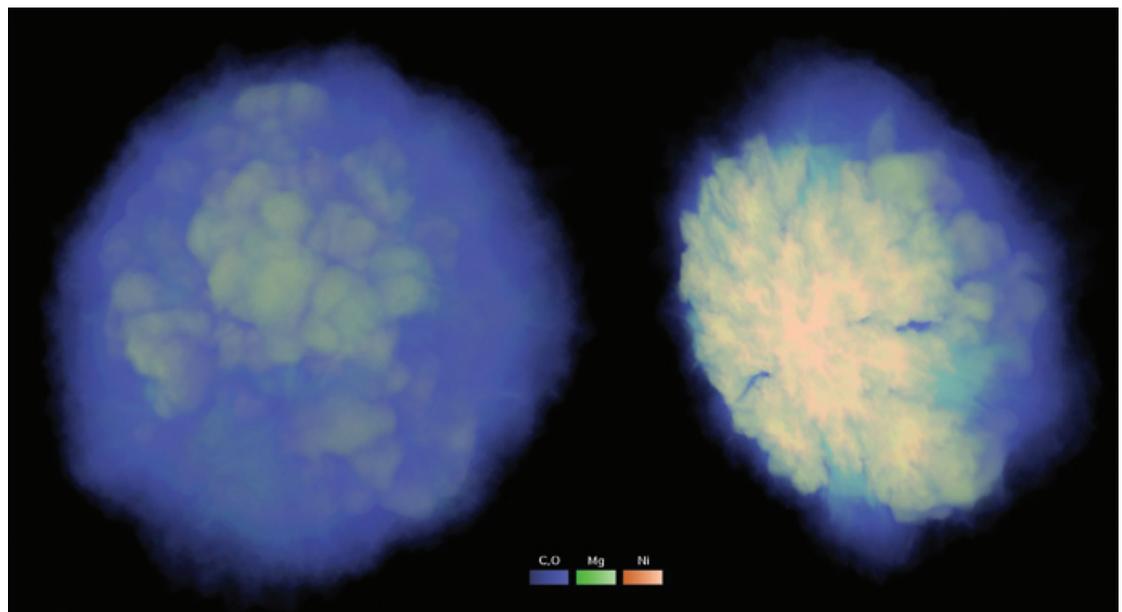
Bei der Simulation der Wechselwirkung von Flammenausbreitung und Turbulenz nutzt man den Umstand, dass, verglichen mit dem Durchmesser des Sterns die Flammen beliebig dünn erscheinen. Das heißt, man kann sie mathematisch als Diskontinuität auffassen, die Brennstoff von den Brennpunkten trennt. Ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit ist fast während der gesamten Supernovaexplosion ausschließlich durch die Turbulenz bestimmt, die in einem sehr großen Skalenraum mit der Flamme wechselwirkt. Um diese – in der Computersimulation nicht auflösbare

– Turbulenz zu modellieren, greift man auf ein Konzept zurück, das ursprünglich in der Meteorologie entwickelt wurde und in letzter Zeit auch erfolgreich zur Simulation von chemischen Verbrennungsprozessen angewendet wird. Die große Ähnlichkeit der turbulenten thermonuklearen Verbrennung in der Supernovaexplosion mit chemischer Verbrennung in einem Otto-Motor wird hierbei ausgenutzt. Wir haben es mit einem für die Astrophysik ungewöhnlichen Umstand zu tun: Während die meisten numerischen Modelle der Astrophysik wegen der dort herrschenden extremen Bedingungen nicht in Laborexperimenten überprüft werden können, kommen bei der Simulation von thermonuklearen Supernovaexplosionen Methoden zum Einsatz, die in irdischen Verbrennungsexperimenten getestet worden sind.

Den Schlüssel zur Simulation der turbulenten Verbrennung bildet der sogenannte Large Eddy-Ansatz. Hier wird nur die großskalige turbulente Verwirbelung direkt auf dem Rechengitter aufgelöst. Mit Hilfe eines sogenannten subgrid scale-Modells

werden dann aus den turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen auf der Länge der Rechenzellen die Effekte der Turbulenz auf kleineren nicht aufgelösten Skalen abgeleitet. Die bislang aufwändigste Serie von Simulationen wurde kürzlich auf dem IBM-Supercomputer am Rechenzentrum des MPI in Garching und auf dem Hitachi SR8000-Rechner des LRZ durchgeführt. Typische Simulationen benutzten zwischen  $512^3$  und  $1024^3$  Gitterpunkte zur Beschreibung des Sterns, wodurch Längen bis hinunter zu weniger als einem

**Abb. 5:**  
**Räumliche Verteilung der chemischen Elemente in der Supernova am Ende der Simulation im „volume rendering“ (links) und im Schnitt. Man sieht, dass außen im Stern noch die „unverbrannten“ Elemente Kohlenstoff und Sauerstoff dominieren (blaue Farbe) und weiter im Inneren hauptsächlich die Produkte der Kernfusion (mittelschwere Elemente in grün und Elemente der Eisen-Gruppe in orange) zu finden sind. Dies entspricht grob auch der Verteilung, die man in Supernovaspektren findet.**



Kilometer aufgelöst wurden. Der Hauptspeicherbedarf betrug bis zu einem Terabyte und die Rechenzeit für die aufwändigste Simulation mehr als 500 000 Prozessorstunden. In gewissem Sinn waren die Simulationen parameterfrei: Nur physikalische Parameter wie die chemische Zusammensetzung und die Zündbedingungen wurden variiert; sie sind aber auch in der Natur von Supernova zu Supernova verschieden.

Eine typische Simulationsfolge zeigt die komplexen pilzartigen Strukturen der thermonuklearen

Brennfront, wie sie auch von aufsteigenden heißen Gasblasen in einer Flüssigkeit bekannt sind (Abb. 3). Man sieht, wie im Verlauf der Explosion auf den Oberflächen der Blasen durch Turbulenz kleinräumige Strukturen entstehen (Abb 4).

Demnach war unsere Vermutung richtig. Das Anwachsen der Fusionsrate durch Turbulenz reicht aus, den Weißen Zwerg in wenigen Sekunden zu zerreißen. Die „Asche“ der thermonuklearen Flammen expandiert mit einer Geschwindigkeit von mehr als 10 000

Zwergs so verändert werden, wie es wahrscheinlich auch die Natur tut. Diese Weißen Zwerge können aus unterschiedlichen Mengen von Kohlenstoff und Sauerstoff bestehen, oder sie können, in Abhängigkeit von ihrer Entstehungsgeschichte, mit unterschiedlicher Dichte explodieren. In einem weiteren Schritt müssen für die Modelle Lichtkurven und Spektren berechnet werden, die man dann direkt mit beobachteten Daten vergleichen kann. Auch dazu sind sehr aufwändige Rechnungen erforderlich, die einen Höchstleistungscom-

puter mit riesigem Hauptspeicher erfordern wie er jetzt mit dem SGI Altix-Rechner am LRZ in Betrieb genommen wird.

#### Was noch zu tun bleibt

Natürlich wüsste man gerne, wie gut die Simulationen auch quantitativ mit beobachteten Supernovaexplosionen übereinstimmen, auch um die eingangs gestellte Frage nach dem zukünftigen Schicksal unseres Universums sicherer beantworten zu können. Hierzu ist eine große Zahl von ähnlichen Simulationen nötig, in denen die physikalisch relevanten Eigenschaften des Weißen

puter mit riesigem Hauptspeicher erfordern wie er jetzt mit dem SGI Altix-Rechner am LRZ in Betrieb genommen wird. Daneben gibt es aber auch noch viele offene Fragen. Wie sich ein Weißer Zwerg bis zum Zünden der nuklearen Fusion entwickelt, ist noch weitgehend unbekannt. In unseren Simulationen wurde der Anfang der Explosion eingeleitet, indem zu Beginn der Simulation „per Hand“ einige Blasen aus heißer, verbrannter Materie in die Nähe des Sternzentrums gesetzt wurden. Die Anzahl und der Ort

dieser „Zündkerzen“ wurden nach einer Kombination aus deterministischen und stochastischen Gesichtspunkten ausgewählt und gingen als freie Parameter in die Simulationen ein. Erst in einer kürzlich am LRZ durchgeführten Studie wurde die Zeitabhängigkeit der Zündung berücksichtigt und auch nach dem Beginn der Explosion weitere Zündpunkte im heißen Sterninneren erzeugt (Bild 6).

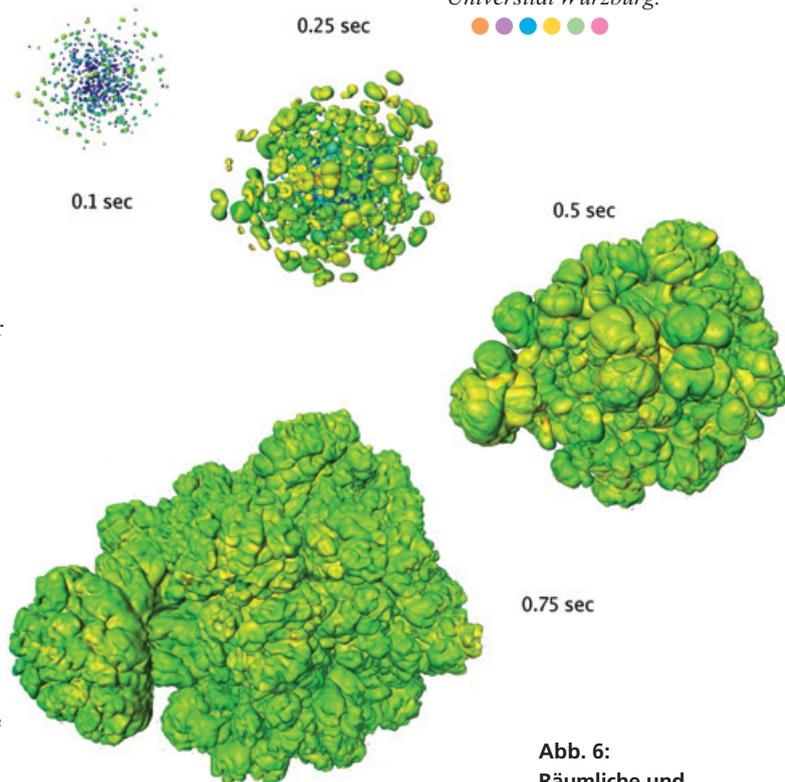
Damit konnte die Energieausbeute in manchen Fällen deutlich erhöht werden. Es scheint so, als könnten nicht nur die „typischen“ sondern auch einige etwas hellere Supernovae durch die Modelle erklärt werden. Allerdings stellte sich auch heraus, dass die resultierende Bandbreite an Explosionsstärken zwar größer war als in den bisherigen Studien, aber sie dennoch auch weiterhin zu begrenzt ist. Aber vielleicht sind wir doch dem Ursprung der beobachteten Supernova-Vielfalt ein wenig näher gekommen.

In die gleiche Richtung zielt eine weitere Untersuchung, in der die Rolle der Rotation des Sterns vor und während der Explosion unter die Lupe genommen wurde. Durch den stetigen Gasstrom, der den Stern auf die kritische Masse anwachsen lässt und schließlich zur Explosion bringt, wird dieser wie ein Jojo zu immer schnelleren Umdrehungen um die eigene Achse angetrieben. In den Simulationen konnten wir nun verfolgen, wie stark die thermonukleare Verbrennung durch die Eigenrotation des Sterns beeinflusst wird. Tatsächlich steigen die heißen Ascheblasen bevorzugt entlang der Rotationsachse auf und führen damit zu Explosionsüberresten, deren Erscheinungsbild stark vom Blickwinkel des Betrachters abhängt. Solche Effekte lassen sich möglicherweise mit aktuellen Supernovabeobachtungen identifizieren.

Auch die Physik der turbulenten Verbrennung unter extremen Bedingungen mag noch Überraschungen bereithalten. In der Tat gibt es aus Supernova-Daten Hinweise, dass das hier gezeichnete Bild noch unvollständig ist. Die bisherigen reinen Deflagrationsmodelle besagen, dass ein beträchtlicher Teil der Materie des Weißen Zwergs unverbrannt in den Raum geschleudert würde. Diesen Kohlenstoff und Sauerstoff sollte man spätestens nach einem Jahr in den Spektren sehen – aber man findet nichts davon. Zudem liegen die Explosionsenergien und Hellig-

terentwicklung der Methode, die wir zur Modellierung der Deflagrationen einsetzen, nun auch Detonationen und ihre Wechselwirkung mit bereits verbranntem Material simulieren. Damit wird ein neues Feld für zukünftige Simulationen eröffnet, an dessen Ende wir die Natur der Typ Ia-Supernovae hoffentlich weitgehend verstanden haben.

*Prof. Hillebrandt und Dr. Röpke arbeiten am Max-Planck-Institut für Astrophysik in Garching, Dr. Niemeyer und Dr. Schmidt am Lehrstuhl für Astronomie der Universität Würzburg.*



keiten der Modellsupernovae zwar im Bereich der Beobachtungen, aber doch etwas auf der niedrigen Seite. Als Erweiterung des Deflagrationsmodells wurde zur Lösung dieser Probleme schon vor einigen Jahren ein spontaner Übergang zu einer Überschallverbrennung (Detonation) in der Spätphase der Explosion vorgeschlagen. Wir können dank einer am LRZ durchgeführten Wei-

**Abb. 6:**  
Räumliche und zeitliche Verteilung der thermonuklearen „Flammen“ in einer Supernova. Etwas früher gezündete Flammen sind grün gefärbt, die später gezündeten blau. Auch in diesem Fall haben sich nach sehr kurzer Zeit die typischen Explosionsstrukturen gebildet.

STRÖMUNGSMECHANIK

# Entwicklung der Strömungsmechanik

MIT DEN NEUEN LEISTUNGSFÄHIGEN HÖCHSTLEISTUNGSRECHNERN KÖNNEN KOMPLEXE STRÖMUNGSPROBLEME MITHILFE VON SIMULATIONEN ERFORSCHT WERDEN.

VON FRANZ DURST UND SIEGFRIED WAGNER

**Abb. 1:** Stromlinien und Druckverteilung in einem Schnitt durch den Zug; oben: ohne Windschutzzaun, unten: mit Windschutzzaun.

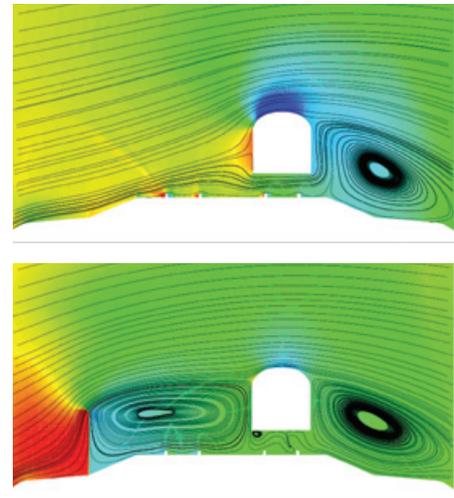
Entwicklungen numerischer Methoden, verbunden mit beachtlichen Steigerungen der Rechnerleistungen, führten in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts zu den heute vorliegenden Möglichkeiten, Strömungsprobleme auf Computern zu lösen. Dazu werden die zeitgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen, die sogenannten Reynoldsschen Gleichungen, gelöst, in Verbindung mit Turbulenzmodellen, z.B. dem k-ε-Modell. Dieser Satz von Gleichungen ist untenstehend zusammenfassend dargestellt. Mit diesem Satz von Differentialgleichungen lassen sich Strömungsprobleme in vielen Bereichen des Ingenieurwesens, der Naturwissenschaften und der Medizin bzw. Medizintechnik

numerisch lösen. Einige Beispiele solcher Lösungen werden in diesem Beitrag erörtert.

## Aerodynamik schienengebundener Fahrzeuge

Die Tendenz, die Reisegeschwindigkeit moderner Züge ständig zu erhöhen, erklärt die heutige Bedeutung der Aerodynamik in diesem Bereich der Technik. Bei Untersuchungen spielt nicht nur der Strömungswiderstand eine zentrale Rolle. Vor allem bedrohen auftretende Seitenwinde und Böen die Sicherheit des Zugverkehrs, da sie zu sehr hohen Seitenkräften und Rollmomenten führen können, so dass der Zug den Kontakt zur Schiene verlieren kann. Windkanal- und Felduntersuchungen sind die traditionellen Zugänge, um die aerodynamischen Eigenschaften von Zügen zu bewerten. Diese sind teuer und zeitaufwändig. Numerische Strömungssimulationen haben sich zu einer kostengünstigen Alternative entwickelt. Detaillierte Untersuchungen unterschiedlicher Einflussfaktoren und Parametervariationen können damit schnell und einfach durchgeführt werden.

Im Rahmen des europäischen Projekts TRANSAERO wurden Berechnungen der turbulenten Umströmung von Hochgeschwindigkeitszügen durchgeführt. Im Mittelpunkt der Arbeiten standen Untersuchungen zur Seitenwindempfindlichkeit der Fahrzeuge, die für die Sicherheit des Zugverkehrs



von großer Bedeutung ist. Ziel der Berechnungen war die Bestimmung der bei Seitenwindbedingungen am Zug angreifenden Kräfte und Momente, um daraus Aussagen über sichere Betriebsbedingungen ableiten zu können. Ferner wurde die Wirkungsweise und Effektivität von Windschutzzäunen zur aktiven Beeinflussung der Seitenwindempfindlichkeit untersucht.

Die Arbeiten basierten auf einer sehr detaillierten Zugeometrie inklusive Drehgestell und Schienen. Der Zug fuhr dabei auf einem Bahndamm in der atmosphärischen Grenzschicht. Ferner wurde in einer der Simulationen ein Windschutzzaun berücksichtigt und die Auswirkungen auf das Strömungsfeld und die auf den Zug wirkenden Kräfte und Momente bestimmt. Diese wurden mit den Messdaten aus dem Windkanal (University of Notting-

**Reynoldssche Gleichungen:**

Kontinuitätsgleichung ( $\rho = \text{const}$ ): 
$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0$$

Impulsgleichungen: 
$$\rho \left[ \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} \right) - \rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j + \rho g_j$$

**k-ε-Turbulenzmodell:**

Turb. Impulstransport  $\rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j = -\mu_t \left( \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} k$ ;  $\mu_t = c_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$

k-Gleichung: 
$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_v \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho c + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \mu_t / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$

ε-Gleichung 
$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \tau_v \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (\mu + \mu_t / \sigma_\epsilon) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right]$$

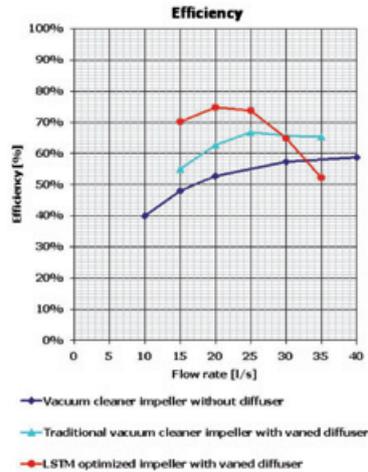
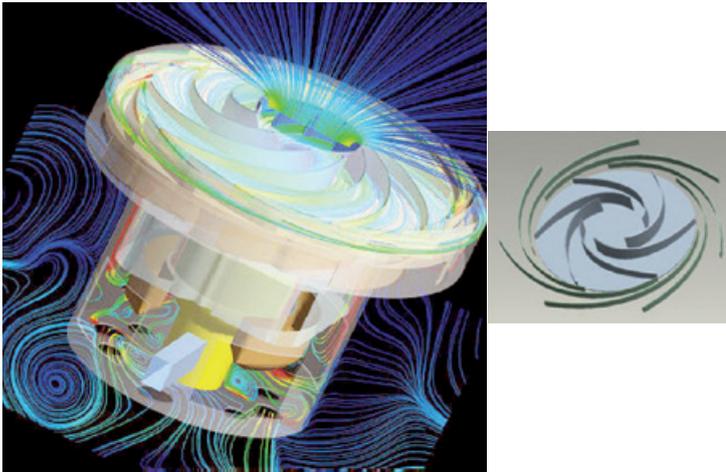


Abb. 2: Wirkungsgrad: dunkelblau: ohne Diffusor; hellblau: herkömmlicher Diffusor; rot: neue optimierte Laufrad-Diffusor-Kombination.

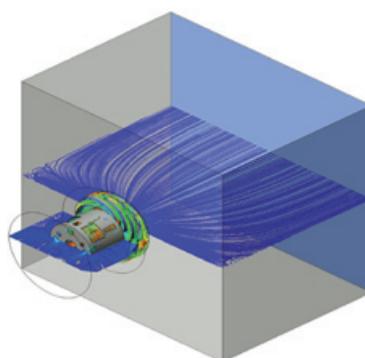
ham) bzw. den Messungen auf der Teststrecke (DB AG) verglichen. Vor allem mit den Windkanal-Daten ergab sich bei den wichtigen Seitenkräften bzw. Rollmomenten eine zufrieden stellende bereinstimmung. Abb. 1 deutet die gewählte Zuggeometrie und deren Erfassung mit einem numerischen Gitter und die erhaltenen Berechnungsergebnisse an (oben). In der unteren Abbildung wird die Wirkungsweise von Windzäunen auf die Seitenkräfte des Zuges deutlich.

**Strömungen in Gebläsen**

Mit Hilfe numerischer Berechnungsverfahren lässt sich eine Strategie entwickeln, die eine gezielte Optimierung von Strömungsmaschinen ermöglicht, wie z.B. von Radialrädern, Ventilatoren und Gebläsen. Mittels dieser Strategie ist es möglich, hydraulische Kennwerte von Strömungsmaschinen zu optimieren: Volumenstrom, Druck bzw. Wirkungsgrad. Aeroakustische Aspekte, wie z.B. der Gesamtschalldruckpegel, das Frequenzspektrum und der Einfluss der tonalen Komponenten auf den psychoakustischen Eindruck des Geräusches, können in der Auslegungsphase mit berücksichtigt werden.

Strömungsmaschinen werden heute nach Strategien ausgelegt, die sich an eindimensionalen Strömungsgleichungen orientieren und einfache Energiebetrachtungen umfassen. Die einzelnen Teile einer Strömungsmaschine, z.B. Lauf-

rad, Diffuser, Rückführschaufeln, etc., werden sequentiell ausgelegt. Die heute möglichen Strategien zur Auslegung von Strömungsmaschinen umfassen kombinierte Auslegungen für Laufrad, Diffuser und Rückführschaufeln in einem Stück. Für die Schaufelausbildung kommt ein voll digitales Mean-Line-Design zur Anwendung. Die Schaufelformen werden nach Vorgabe des gewünschten Druckverlaufs im Schaufelkanal mittels eines inversen Verfahrens berechnet. Dieses Verfahren ermöglicht Schaufelformen, die zu einem optimierten Druckaufbau im Schaufelkanal und somit zu höchsten Wirkungsgraden führen. Nach dem Design, werden die selektierten Auslegungen mit einem kommerziellen CFD-Programm (*Computational Fluid Dynamics*, d.h. numerische Strömungsmechanik) nachgerechnet. In diesem Schritt werden die ausgelegten Geometrien validiert und Feinheiten aufgelöst. Nach der Validierung der Auslegung mittels CFD kann der Prototypenbau praktisch risikolos erfolgen. Am



Lehrstuhl für Strömungsmechanik in Erlangen (LSTM) gibt es drei Prüfstände unterschiedlicher Größe, um die Kennlinien von Gebläsen, Laufrädern und anderen Strömungsmaschinen zu ermitteln. Die experimentelle Validierung der entwickelten Prototypen erfolgt auf einer dieser Einrichtungen.

**Berechnungen mittels der LES-Methode**

Simulationen turbulenter Strömungen auf der Basis der RANS-Gleichungen, kombiniert mit statistischen Turbulenzmodellen, liefert für viele einfache Strömungsprobleme sinnvolle und für den Ingenieur ausreichend genaue Ergebnisse. In nahezu allen kommerziellen Programmpaketen sind heutzutage derartige statistische Turbulenzmodelle implementiert. Dies darf allerdings nicht darüber hinwegtäuschen, dass selbst die aufwändigsten Turbulenzmodelle bei

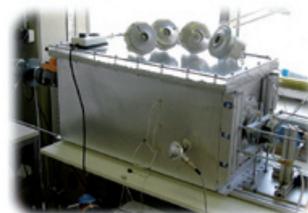
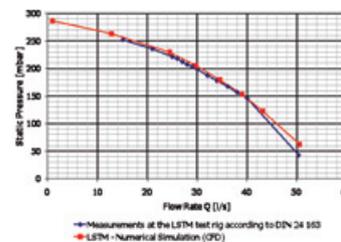


Abb. 3: Vergleich zwischen Strömungssimulation und Messungen.

vielen Strömungsproblemen versagen und keine im ingenieurmäßigen Sinn zufrieden stellende Vorhersage der Strömung liefern. Dies ist insbesondere der Fall, wenn in der Strömung komplexe Strömungsphänomene wie Ablösung, Transition oder großskalige Wirbelstrukturen vorhanden sind. Derartige Strömungen lassen sich bei niedrigen Reynolds-Zahlen bekannterweise hervorragend mittels direkter numerischer Simulation (DNS) berechnen. Für höhere Reynolds-Zahlen hat sich in den vergangenen Jahren verstärkt die Large-Eddy Simulationstechnik (LES) durchgesetzt. Bei der LES werden die großen, energietragenden Wirbel (Grobstruktur) durch das numerische Verfahren direkt aufgelöst, während die kleinen, energiearmen Wirbel (turbulente Feinstruktur) sich nicht auflösen lassen und folglich ihr Einfluss auf die Grobstruktur mo-

Spektrum der Energiekaskade abdecken müssen. Diese theoretischen Überlegungen spiegeln sich auch in der Praxis wider.

#### Beispiel für die LES-Methode

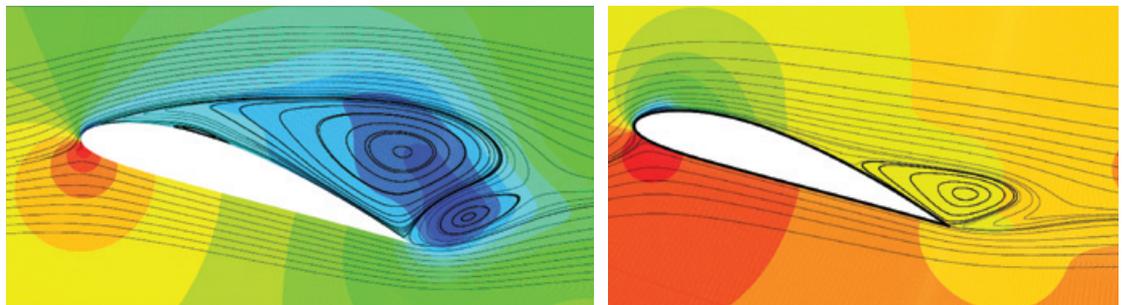
Durch die Entwicklung moderner numerischer Verfahren, die Formulierung geeigneter Feinstrukturmodelle sowie nicht zuletzt durch die effiziente Implementierung der Algorithmen auf Höchstleistungsrechnern ist man heute in der Lage, mit Hilfe der LES komplexe turbulente Strömungen detailliert zu berechnen. Derartige Simulationen stellen auch einen hervorragenden Ausgangspunkt dar, um strömungsphysikalische Vorgänge zu untersuchen und auf diese Weise zu einem besseren Verständnis turbulenter Strömungsphänomene beizutragen. Gegenstand der hier vorgestellten Berechnungen ist die Umströmung

auf der Flügeloberseite. Wie Abb. 4 auch zeigt, bildet sich bei der Reynoldszahl 100.000 infolge des laminar-turbulenten Umschlags, nahe der Oberfläche, eine laminare Ablöseblase am Profil aus. Die Strömung bleibt dadurch länger am Flügel anliegen und es kommt zu einer Hinterkantenablösung mit entsprechend kleinerem Ablösegebiet. Diese Beobachtungen sind in guter Übereinstimmung mit den entsprechenden Experimenten. Die Simulationen liefern jedoch das vollständige, vierdimensionale Strömungsfeld, was sehr umfangreiche Studien der strömungsmechanischen Vorgänge zulässt.

#### Simulation der Strömung gesamter Hubschrauber

Die Fähigkeit des Hubschraubers zum Schwebeflug, zum Senkrechstart und zur senkrechten Landung

**Abb. 4:**  
Stromlinien des zeitlich gemittelten Strömungsfeldes um einen Tragflügel mit Anstellwinkel 18 Grad;  $Re = 20.000$  (links),  $Re = 100.000$  (rechten).



delliert werden muss. Der Vorteil der LES gegenüber statistischen Modellen liegt somit auf der Hand; lediglich die kleinen Wirbelstrukturen, die numerisch nicht mehr aufgelöst werden können, müssen modelliert werden. Die großen Wirbelstrukturen dagegen, die i. A. sehr stark von der Geometrie und den Randbedingungen des jeweiligen Strömungsproblems abhängen, werden durch Lösen der vollständigen Erhaltungsgleichungen direkt berechnet. Folglich können die Modelle zur Beschreibung der turbulenten Feinstruktur wesentlich einfacher sein als statistische Turbulenzmodelle, die das gesamte

eines auf einem NACA-4415 Profil basierenden ungepfeilten Tragflügels, der in einem Wind- bzw. Wasserkanal montiert ist.

Abb. 4 zeigt Stromlinien des zeitlich gemittelten Strömungsfeldes für die Reynoldszahlen 20.000 und 100.000 bei einem Anstellwinkel von 18°. Daraus wird die unterschiedliche Strömungsstruktur der beiden Fälle ersichtlich. Bei der niedrigen Reynolds-Zahl löst die von der Viskosität beeinflusste Schicht an der Profilnase ab und es ergibt sich eine so genannte Vorderkantenablösung mit ausgeprägtem Rezirkulationsgebiet

verschafft ihm einen einzigartigen Platz im Transportsystem, z.B. durch seine herausragende Rolle bei Rettungseinsätzen, Polizeieinsätzen, Überwachungsaufgaben und beim Transport von Gütern in schwer zugängliche Gebiete. Allerdings ist der Hubschrauber nach wie vor ein kostspieliges Gerät mit hohen Wartungskosten, niedriger Kraftstoffeffizienz, mäßigem Flugkomfort, bemerkenswerter Lärmerzeugung und Luftverschmutzung. Diese Nachteile rühren von der Komplexität der Strömung um den Hubschrauber her, die in Abb. 5 dargestellt ist, und nachdrücklich verbessert werden muss.

Unter Ausnutzung der hochentwickelten computergestützten Strömungsmechanik (CFD) spielen Simulationen der Aerodynamik, Aeroakustik und der Koppeffekte zwischen Aerodynamik und Dynamik des Rotorblattes bereits heute eine zentrale Rolle in der europäischen Hubschrauberindustrie, müssen jedoch im Entwurfsprozess aus Wettbewerbsgründen noch gesteigert werden.

Große Fortschritte wurden bislang schon durch Simulationen höchster Güte von gekoppelten Wechselwirkungen an Hubschrauberkomponenten, wie isolierten Haupt- und Heckrotoren, mittels derzeitiger Höchstleistungsrechner erzielt. Abb. 6 zeigt beispielhaft die Gegenüberstellung von zwei Rotornachläufen, wie sie zum einen bisher aus Gründen der Rechnerkapazität durchgeführt werden mussten, nämlich mit einer vergleichsweise noch starren Nachlaufgeometrie (linke Bildseite), und zum anderen einer realistischen Nachlaufgeometrie (rechte Bildseite), wie sie mit heutigen Rechnern simulierbar ist. Die genaue Beschreibung der Nachlaufgeometrie ist deshalb so wichtig, weil der genaue Abstand zwischen Blattspitzenwirbel und Rotorblatt entscheidend für die Wechselwirkung zwischen Wirbel und Rotorblatt (BVI, Blade-Vortex-Interaction) und somit für die Lärmentwicklung und das Vibrationsniveau des Hubschraubers ist. Um numerisch bedingte Dissipation des Blattspitzenwirbels zu vermeiden und seine volle Wirkung auf die Umströmung des Rotorblattes erfassen zu können, muss der Wirbel über mehrere Umdrehungen des Rotors verfolgt und fein aufgelöst erhalten werden. Abb. 7 zeigt, wie diese Forderungen durch ein wirbelangepasstes Gitter innerhalb eines verwölbten Nachlaufs durch Anwendung der so genannten Chimera-Technik verwirklicht werden können.

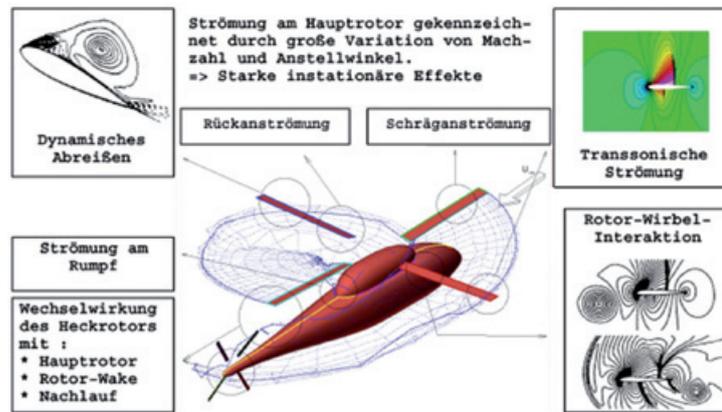


Abb. 5: Strömungsprobleme am Hubschrauber.

Das Ziel ist jedoch die Simulation der Vorgänge am gesamten Hubschrauber. Hierzu sind Höchstleistungsrechner mit noch größerer Leistung und Speicherkapazität erforderlich. Das Hauptproblem im Entwurfsprozess ist die nicht einfach zu vollziehende Skalierung vom Rotor- oder Hubschraubermodell zur Großausführung. Eine genaue Simulation eines isolierten Rotors auf einem Supercomputer

periodischer Zustand erreicht ist. Zur Trimmung des Rotors sind weitere 5 Umdrehungen zu simulieren. Diese Simulation kostet bereits rund 30.000 CPU-Stunden.

Die zusätzliche Berücksichtigung des Rumpfes und des Heckrotors sowie aller gegenseitigen Wechselwirkungen lassen den Rechenzeitbedarf leicht auf 150.000 CPU-Stunden steigen. Die Einbeziehung

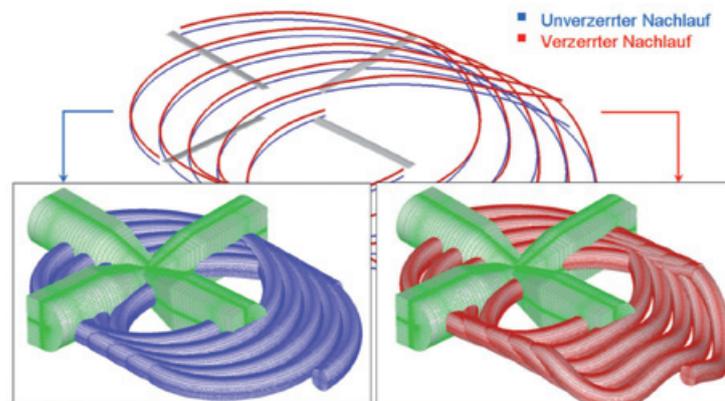


Abb. 6: Unverzerrte und verzerrte Nachlaufgeometrie.

heutiger Leistungsklasse, erfordert ungefähr 20 Millionen Gitterpunkte pro Rotor, 7.200 Zeitschritte für jede Umdrehung des Rotors und rund 5 Rotorumdrehungen, bis ein

von Regelungselementen und Steuereingaben des Piloten wird die Anforderung an die computergestützte Simulation um einen weiteren Betrag steigern. Die

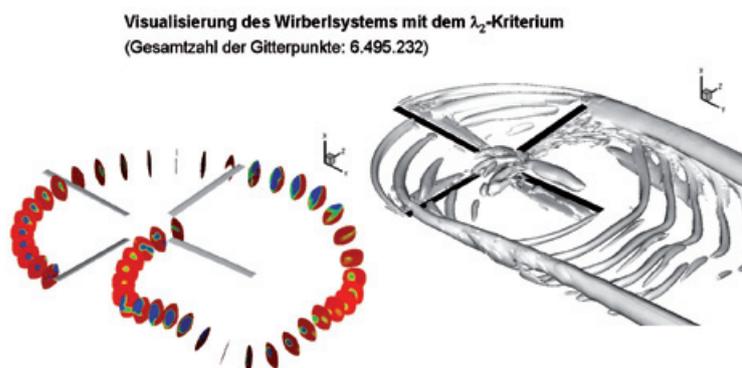


Abb. 7: Genaue Erfassung des Blattspitzenwirbels auf Basis verzerrter Gitter.

**Abb. 8:** Herstellung von Silizium-Einkristallen nach dem Czochralski-Verfahren. Links: fertiger Einkristall, Durchmesser 200 mm (Wacker Siltronic AG). Rechts: schematische Darstellung des Züchtungsprozesses.

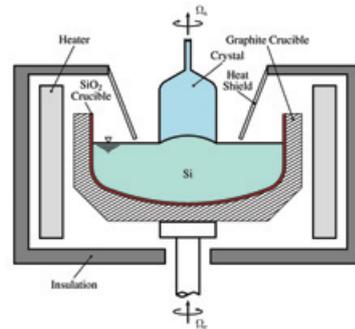


Simulation von Flugmanövern wird schließlich zu einem inhärent multidisziplinären Problem mit Beiträgen aus verschiedenen Fachgebieten führen und so ein herausforderndes Projekt darstellen, wo verschiedene Lösungsalgorithmen und Modellierungstechniken in einer einzigen parallelen Umgebung zusammenwirken müssen. Dies erfordert eine Leistung des Computers in der Größenordnung von Petaflops/s.

**Silizium-Kristallzüchtung**

Für die Herstellung integrierter Schaltkreise und optoelektronischer Bauelemente werden in der Elektronikindustrie große Mengen monokristallinen Siliziums hoher Qualität benötigt. Ein wichtiges Verfahren zur Produktion von Silizium-Einkristallen im industriellen Maßstab ist das Czochralski-Verfahren, nach dem mehr als 90 % der Siliziumkristalle für elektronische Bauelemente hergestellt werden. Bei diesem Verfahren wird ein Monokristall mit Hilfe eines Impfkristalls durch Ziehen aus einer Siliziumschmelze gewonnen. Eine schematische Darstellung dieses Kristallzüchtungsprozesses zeigt Abb. 8.

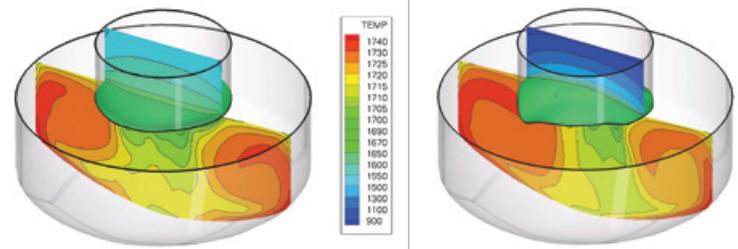
**Abb. 9:** Berechnetes Temperaturfeld ohne (links) und mit Kühlung des Kristalls (rechts).



ist jedoch, dass es mit wachsender Kristallgröße zunehmend schwieriger geworden ist, die hohen Qualitätsanforderungen zu erfüllen, die für die Herstellung elektronischer Bauelemente gestellt werden. Die Qualität der produzierten Einkristalle wird wesentlich vom Wärme- und Stofftransport in der Schmelze beeinflusst. Hohe Reinheit und Homogenität der Kristalle sind dabei für die Elektronikindustrie von besonderer Bedeutung. Verunreinigungen mit Sauerstoff sind in der Regel nicht zu vermeiden, da der Schmelztiegel meist aus Quarzglas besteht, das bei hohen Temperaturen Sauerstoff an die Schmelze abgibt. Aus diesen Grün-

in der Schmelze ist entscheidend für die Sicherung und Verbesserung der Kristallqualität. Da Messungen des Strömungsfeldes in der Schmelze extrem schwierig und kostspielig sind, spielen Simulationsmethoden dabei heute eine unverzichtbare Rolle. Aufwändige Berechnungen mittels quasi-direkter numerischer Simulationen (QDNS) oder LES, die aufgrund ihrer hohen Anforderungen an die rechnerischen Ressourcen auf Hochleistungsrechnern durchgeführt werden müssen, liefern detaillierte Informationen über das instationäre Strömungsfeld in der Schmelze.

Abb. 9 zeigt beispielhaft das Temperaturfeld in zwei unterschiedlichen Schmelztiegelkonfigurationen. Bei der rechten Konfiguration wurde der Kristall zusätzlich gekühlt, so dass die Phasengrenze nach oben

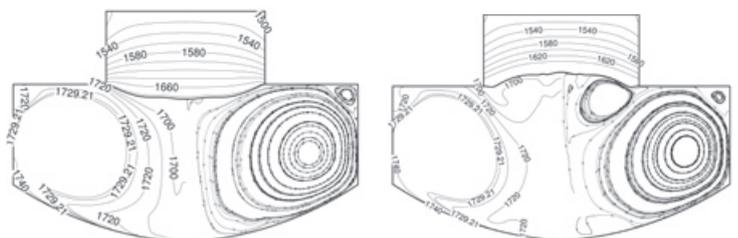


den ist es notwendig, möglichst homogene Strömungsverhältnisse in der Schmelze herzustellen. Dazu werden Kristall und Schmelztiegel in der Regel in Rotation versetzt, da dies ausgleichend auf Schwankungen im Strömungsfeld wirkt. Zusätzlich wird die Schmelze oft auch magnetischen Feldern ausgesetzt, die eine Dämpfung der Temperaturfluktuationen bewirken. Ein tieferes Verständnis der komplexen strömungsmechanischen Vorgänge

gewölbt ist. In Abb. 10 ist das Strömungsfeld für zwei weitere Konfigurationen dargestellt. Im rechten Bild ist die Rotationsrate des Einkristalls erhöht, was ebenfalls zu einer Wölbung der Phasengrenze nach oben führt. Solche Parameterstudien können dazu dienen, Hinweise für eine Optimierung von Form und Lage der Phasengrenze zu geben und damit die Kristallqualität positiv zu beeinflussen.

**Abb. 10:** Auswirkungen einer erhöhten Kristallrotation (rechts) auf das Strömungsfeld (Stromlinien und Temperaturisolinien).

Aufgrund der Nachfrage der Elektronikindustrie nach immer größeren Silizium-Wafern hat auch die Größe der produzierten Einkristalle in den letzten Jahrzehnten stetig zugenommen. Kristalldurchmesser von bis zu 400 mm sind heute technisch realisierbar. Ein wesentlicher Nachteil dieser Entwicklung



**Beispiele von Strömungsberechnungen mittels LBM**

Seit wenigen Jahren nehmen Anzahl und Umfang der Anwendungen von Lattice-Boltzmann-Verfahren (LBM) zur detaillierten numerischen Simulation von komplexen Strömungen schnell zu. Das LBM ist zum Mittel der Wahl in vielen Bereichen geworden ist. Einerseits ermöglichen Sie eine beeindruckende Beschleunigung und gleichzeitige Vereinfachung der zur Simulation herangezogenen Computerprogramme. Andererseits stellen sie, sowohl aus theoretischer als auch aus praktischer Sicht eine natürliche und gleichzeitig effiziente Art dar, komplexe physikalische Phänomene, insbesondere auch bei Auftreten von physikalischen Problemen mit breitem Skalenspektrum, wie sie die Strömungsmechanik darstellt, zu modellieren und numerisch zu simulieren.

**Das Lattice-Boltzmann-Verfahren**

Historisch sind die LBM als Erweiterung und Verbesserung der sogenannten Lattice-Gas-Automata entstanden. Theoretisch sind sie vor allem als Diskretisierungen von kinetischen Gleichungen zu betrachten. Solche Gleichungen liegen allen kinetischen Theorien zugrunde, die den Übergang zwischen der mikroskopischen Dynamik auf Partikelebene und der makroskopischen Dynamik von flüssigen, elastischen, partikelbeladenen und anderen Arten von Medien ermöglichen, die sich als Kontinuum behandeln lassen. Kinetische Theorien unterscheiden sich im Wesentlichen durch ihre Vorschriften für den Stoßterm, der die Wechselwirkung im Medium beschreibt. Bei den meisten LBM liegt der so genannte BGK-Ansatz zugrunde, eine maximal vereinfachte Stoßterm-Formulierung.

$$\frac{f_a(t + \Delta t, x + \xi_a \Delta t) - f_a(t, x)}{\Delta t} = -\frac{(f_a - f_a^{eq})(t, x)}{\tau(t, x)}$$

Die Relaxationszeit  $\tau$  bestimmt hier in strömungsmechanischen Berechnungen die effektive Viskosität  $\mu$  der mit zweiter Ordnung in Zeit und Raum approximierten Navier-Stokesschen dynamischen Gleichungen:

$$\mu = \rho c_s^2 (\tau - \Delta t / 2)$$

Für Berechnungen muss noch die Gleichgewichtsverteilung vorgeschrieben werden. Üblicherweise ist dies eine optimale Taylor-Reihen-Approximation des klassischen Maxwellischen Ansatzes, z. B. bei isothermalen LBK

$$f_a^{eq} = w_a \left( 1 + \frac{p}{c_s^2} + \frac{v \cdot \xi_a}{c_s} + \frac{1}{2} \frac{v \cdot \xi_a \otimes \xi_a - c_s^2 I}{c_s^2} \right) \frac{v}{c_s}$$

Da die interne Energie nicht herangezogen wird, ist das Gleichgewicht für die Strömungsbedingungen nur vom Druck

$$p = c_s^2 \sum_a f_a = c_s^2 \sum_a f_a^{eq}$$

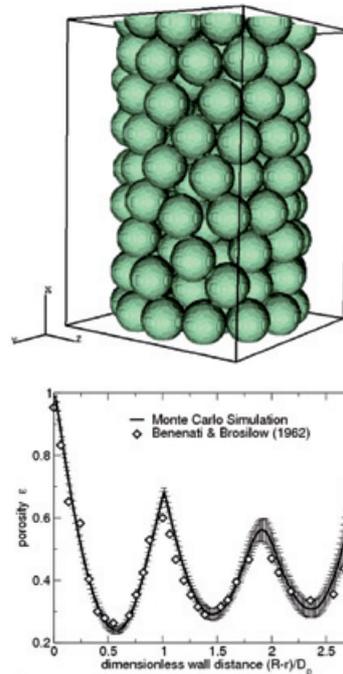
und von der Geschwindigkeit

$$v = \sum_a \xi_a f_a = \sum_a \xi_a f_a^{eq}$$

abhängig. Die Entwicklung der Lattice-Boltzmann-Verfahren hat nun zu einer Reihe von Lösern geführt, die als Lattice-Boltzmann-Schemata in der Literatur beschrieben sind. Bei den am LSTM-Erlangen untersuchten Anwendungen hat sich das 3-D Schema mit 19 Freiheitsgraden pro Punkt ( $-9 \leq i \leq 9$ ) als optimal erwiesen. In den parallelierten Codes am LSTM-Erlangen sind aber alle bekannte Schemata implementiert und teilweise benutzt worden.

**Durchströmung einer Kugelschüttung**

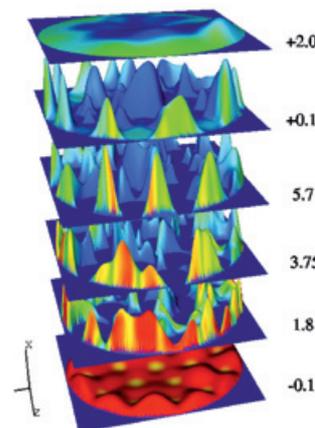
Die erste Standardanwendung von LBM ist die Berechnung detaillierter Strömungsverhältnisse in porösen Medien. Dabei stammt die Komplexität der Strömung direkt aus der geometrischen Komplexität des Strömungsgebietes, während die Geschwindigkeiten sehr niedrig bleiben. Monodisperse Kugelschüt-



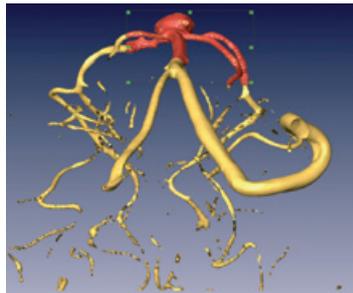
**Abb. 11:** Numerisch erzeugte Kugelschüttung als Basis für detaillierte Strömungsberechnungen mit LBM-Verfahren.

tungen sind ein einfaches Beispiel. Der wichtigste kontrollierbare Parameter ist der Kugeldurchmesser bzw. sein Verhältnis zum Reaktordurchmesser. Die Porosität kann gut mit Rechenalgorithmen nachgebildet werden. Das Ergebnis und ein Vergleich mit experimentellen Daten bei selbem Verhältnis der Durchmesser ist in Abb. 11 zu sehen.

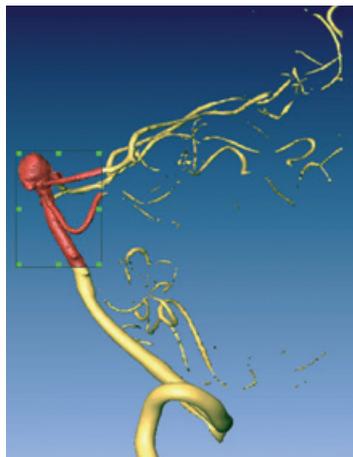
Entsprechende Ergebnisse der LBM-Simulation sind in Abb. 12 dargestellt. Von Hauptinteresse bei Reaktoren ist der Verlauf der Konzentrationen von bestimmten, in chemische Reaktionen einbezogenen Komponenten. Die über den Querschnitt des zylindrischen Reaktors gemittelten Verläufe für die einfachste Reaktion,  $A+B \rightarrow C$ , sind vom untersten Bild abzulesen. Das zweite Bild zeigt die detail-



**Abb. 12:** Räumlicher Verlauf einer „A+B ->C“ Reaktion in Kugelschüttungs-Mini-reaktor mit Kugel : Rohr Durchmesser-verhältniss von 3: querschnittgemittelte Konzentration (links), räumliche Konzentrationsverteilung (rechts, rot: hohe Konzentration von „A“).



**Abb. 13:** Segmentierung einer CT-Angiographie von Gehirnarterien im Circle of Willis bei einem Patienten mit terminalem Aneurysma; das Rechengebiet für die Simulation ist in rot.



lierte räumliche Verteilung der Konzentration des Edukts. Der an der Berandung des Porenreaktors ersichtliche Randeffect ist deutlich zu sehen. Entsprechende Ergebnisse der LBM-Simulation sind in Abb. 12 dargestellt. Von Hauptinteresse bei Reaktoren ist der Verlauf der Konzentrationen von Reagenten.

**Abb. 14:** Die über den Querschnitt des zylindrischen Reaktors gemittelten Verläufe für die einfachste Reaktion,  $A+B \rightarrow C$ , sind vom untersten Bild abzulesen. Das zweite Bild zeigt die detaillierte räumliche Verteilung der Konzentration des Edukts. Der wichtige ungünstige Randeffect ist deutlich zu sehen.

**Strömungen in Blutgefäßen mit Aneurysmen**

Ein weiteres Anwendungsgebiet von LBM-Strömungsberechnungen mit großer Bedeutung ist die

simulationsgestützte Analyse der Hämodynamik in gefährdeten Blutgefäßen. Als Beispiel zeigt Abb. 13 eine Gehirnarterien-Verzweigung (in rot) eines Patienten mit Aneurysma (ballonförmiger Erweiterung, auch in rot).

Aneurysmen im Gehirn, an der Aorta und an anderen großen Blutgefäßen sind Abweichungen vom Normalzustand. Sie treten auf, weil das Wandmaterial der Blutgefäße geschwächt und mechanisch belastet wird. Deswegen werden mit hoher Wahrscheinlichkeit Aneurysmen platzen und können dann unheilbare Gesundheitsschäden und den Tod verursachen. Genauere Untersuchung der Ursachen der Gefahr, die von einem Aneurysma ausgeht und Voraussage der Wahrscheinlichkeit bedrohlicher Weiterentwicklungen sind von großer Bedeutung und müssen individuell, möglichst genau und quantitativ, dennoch aber bei einer großen Anzahl von Fällen durchgeführt werden.

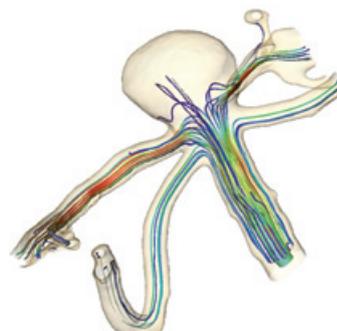
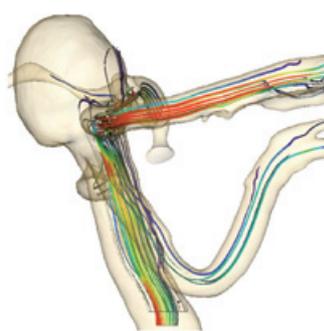
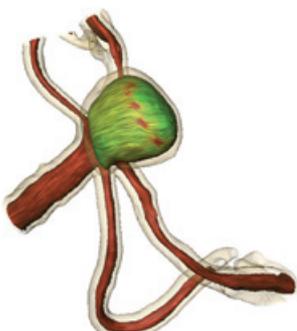
Es wird seit zehn Jahren in vielen Gruppen durch Zusammenarbeit von Ärzten und Ingenieuren weltweit versucht, wenigstens die technischen Voraussetzungen für derartige Studien zu schaffen. Ein immer größerer Teil der Gruppen benutzt kommerzielle Software, auch für die Strömungssimulation. So hat sich der Gesamtzeitaufwand pro Simulation von zwei Arbeitswochen bis auf wenige Arbeitstage verringert. Erst mit der Anwendung von LBM auf Hochleistungsrechnern konnten die Zeiten bis auf 1–2 Stunden verringert werden.

Ein kritischer Schritt im Workflow ist die sogenannte Segmentierung der Tomographiedaten, d. h. die Festlegung des genauen Verlaufs der Gefäßlumina. Stets werden die Erfahrung der Radiologen und die Modalitäten fortgeschrittener Software gefragt, um Uneindeutigkeiten und unzureichende Auflösung zu kompensieren. Ein am LSTM-Erlangen entwickeltes Programm übernimmt einen Teil der Segmentierungsaufgaben und die Anpassung der Rechengitter an die individuelle Gefäßgeometrie. Darauf wird die Blutstrom-Simulation automatisch durchgeführt, woraus eine Reihe von Momentaufnahmen (wie z. B. in Abb. 14 dargestellt) und gemittelten Charakteristiken entstehen. Davon ist die Wandbelastung der betroffenen Gefäßabschnitte am wichtigsten. Darüber hinaus können aus der Druckverteilung und den Scherspannungen (Abb. 14) wichtige Schlüsse bezüglich der von einem Aneurysma ausgehenden Gefahr gezogen werden. LBM haben den Vorteil, diese Größen auf jedem Rechengitterpunkt unabhängig berechnen zu können, was die Effizienz und Stabilität steigert.

**Literatur**

[1] Bell ET (1936) Men of Mathematics. Simon & Schuster, New York  
 [2] Rouse H, Ince S (1980) History of Hydraulics. The University of Iowa, Inst. of Hydraulic Research, Ames  
 [3] Sžabo I (1987) Geschichte der mechanischen Prinzipien und ihrer wichtigsten Anwendungen. Birkhäuser, Basel

*Franz Durst ist Inhaber des Lehrstuhls für Strömungsmechanik an der Universität Erlangen-Nürnberg und o. Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Siegfried Wagner ist Prof. i.R. für Aerodynamik und Gasdynamik an der Universität Stuttgart.*



STRÖMUNGSMECHANIK

# Direkte Numerische Strömungssimulation

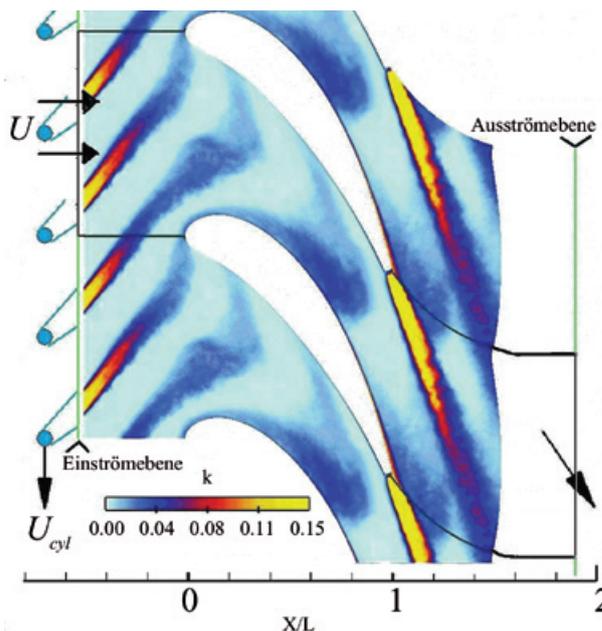
DIREKTE NUMERISCHE SIMULATION DER STRÖMUNG UND DES WÄRMEÜBERGANGS IN EINEM EBENEN TURBINENSCHAUFELGITTER.

VON JAN WISSINK UND WOLFGANG RODI

In Schaufelgittern von Turbomaschinen ist aufgrund der Laufrad/Leitradwechselwirkung die Strömung periodisch instationär, wobei turbulenzbehaftete Nachläufe durch die Schaufelkanäle wandern und einen starken Einfluss auf das Grenzschichtverhalten an den Schaufeln ausüben.

Besonders groß ist dieser Einfluss in den Gittern der Niederdruckturbine, wo wegen der relativ niedrigen Reynoldszahl größere Teile der Grenzschicht laminar sein können und die Transition eine wichtige Rolle spielt, und dieser Einfluss betrifft nicht nur das aerodynamische Verhalten wie z.B. die Tendenz zur Ablösung und die dadurch entstehenden Verluste sondern auch den Wärmeübergang

vom heißen Anströmgas zu den zu kühlenden Schaufeln. Für die Auslegung der Schaufeln ist die Kenntnis der komplexen physikalischen Mechanismen und deren zuverlässige Berechenbarkeit und damit die Entwicklung von Rechenmodellen äußerst wichtig. Hierzu sind verlässliche Detailinformationen über die Strömungsvorgänge notwendig, die nur schwer aus Experimenten zu gewinnen sind. Aufgrund der stetig steigenden Leistung von Großrechnern (s. Grafik) können immer komplexere Strömungsprobleme mit der Methode der Direkten Numerischen Simulation (DNS) untersucht werden, d.h. durch numerisches Lösen der strömungsmechanischen Grundgleichungen ohne Verwendung eines Modells. Wegen der relativ niedrigen Reynoldszahl ist für Niederdruckturbinen die Berechnung der Strömung mit dieser Methode

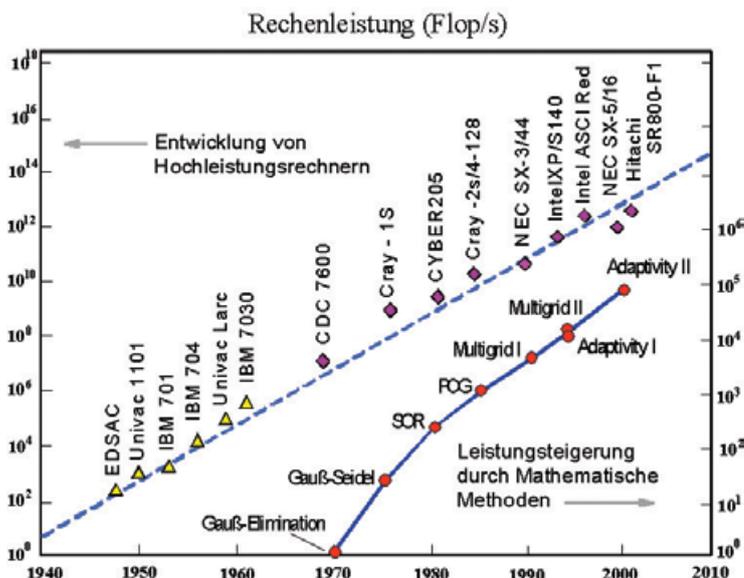


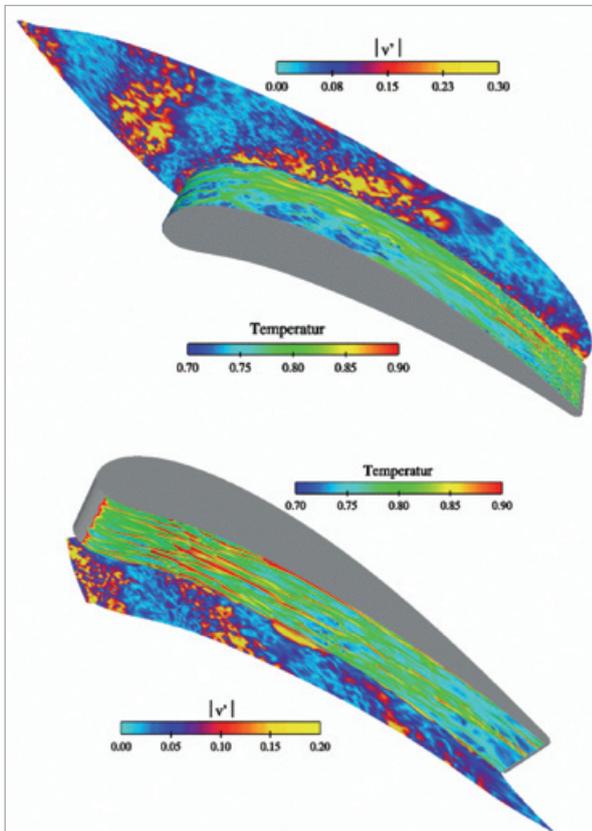
**Abb. 1:** Berechnete Strömungskonfiguration mit Rechengebiet (zwischen den schwarzen Linien und den 2 oberen Schaufeln) sowie Sichtbarmachung der Nachläufe durch Konturen der phasengemittelten kinetischen Energie  $k$  der Schwankungen ( $k$  ist dimensionslos gemacht mit  $U^2$ ).

zumindest im Mittelschnitt möglich – die Methode ist hierbei ein ideales Werkzeug zur Erforschung aller Details der komplexen Strömung und zur Klärung der physikalischen Mechanismen der Transition unter dem Einfluss vorbeilaufender Nachläufe und dem im Experiment beobachteten starken, durch Außen-turbulenz verursachten Anstieg des Wärmeübergangs in den laminar bleibenden Grenzschichten. In einem DFG-Projekt wurden deshalb solche DNS-Rechnungen durchgeführt und es werden in diesem Beitrag ausgewählte Ergebnisse einer solcher Rechnung vorgestellt. Die Untersuchungen sind ausführlich in Wissink und Rodi [4] beschrieben.

## Rechenverfahren und untersuchte Konfiguration

In der DNS werden die dreidimensionalen, instationären Navier-Stokes-Gleichungen und die Konvektions-Diffusionsgleichung für die Temperatur mit einem Finite-Volu-





**Abb. 2:** Momentaufnahmen der Grenzschichten entlang der Saugseite (oben) und der Druckseite (unten) mit Sichtbarmachung durch Isoflächen der momentanen spannungsweitigen Wirbelstärke, eingefärbt mit der lokalen Temperatur. Die Hintergrundebenen senkrecht zur Schaufeloberfläche zeigen Konturen des Betrags der Schwankungsgeschwindigkeit und identifizieren den Ort der Nachläufe.

men-Verfahren unter Verwendung von Zentralfdifferenzen zweiter Ordnung und nichtversetzten Variablenanordnung numerisch gelöst. Es wurde eine Schaufelgitterkonfiguration berechnet, die näherungsweise der von Liu und Rodi [2,3] experimentell untersuchten entspricht. Die Geometrie ist in Abb. 1 dargestellt. Es wurde angenommen, dass die periodischen Nachläufe durch vor dem Schaufelgitter mit einer Geschwindigkeit  $U_{cyl} = 1.36 U$  vorbeilaufende Zylinderstäbe erzeugt werden. Die mit der Zuströmgeschwindigkeit  $U$  und der axialen Sehnenlänge  $L$  gebildete Reynoldszahl ist  $Re = 72.000$ . Es wurde die Strömung durch einen Schaufelkanal berechnet, und das Rechengebiet ist in Abb. 1 eingezeichnet. Die Nachlauferzeugung wurde nicht mitberechnet, sondern es wurden in der in Abb. 1 gezeigten

Einströmebene der gleichförmigen Einströmgeschwindigkeit  $U$  künstliche Nachläufe und dazwischen Hintergrundturbulenz mit einem Turbulenzgrad  $Tu = 4\%$  überlagert. Die Nachlaufdaten wurden freundlicherweise von Wu und Durbin von der Stanford Universität zur Verfügung gestellt und die Schwankungen der Hintergrundturbulenz stammen von einer separaten Large-Eddy-Simulation isotroper Turbulenz in einem Quader. Sie berücksichtigen die im Experiment vorhandenen Hintergrundschwankungen. Wie im Experiment waren die Schaufeln beheizt und hatten eine konstante Temperatur  $T = T_0$  während die Zuströmung die Temperatur  $T = 0,7 T_0$  hatte. Weitere Details über die Rechnung und die Randbedingungen sind in Wissink und Rodi [4] zu finden.

Die Rechnung wurde auf der Hitachi SR8000-F1 des Leibniz Rechenzentrums (LRZ) in München durchgeführt unter Verwendung von 256 Prozessoren und 93,4 Millionen Gitterpunkten. Zur Erzielung verlässlicher statistischer Daten benötigte die Rechnung 240.000 Zeitschritte und insgesamt 2.000 Stunden Laufzeit auf dem Rechner.

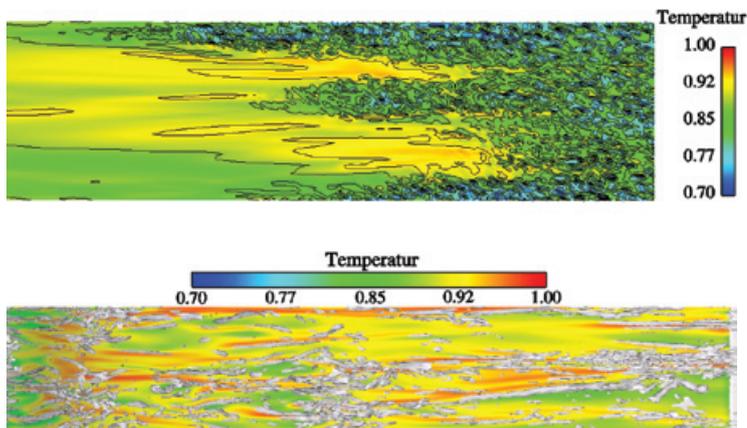
### Ergebnisse

Abb. 1 zeigt für einen Zeitpunkt Konturen der phasengemittelten kinetischen Energie der Schwankungen und vermittelt einen guten Eindruck des Wanderns der Nachläufe durch das Rechengebiet und den Schaufelkanal. Beim Eintritt in den Schaufelkanal legen sich die Nachläufe um die Schaufelvorderkante; auf der Saugseite werden sie dann durch die dort vorliegende starke Beschleunigung gestreckt und treffen praktisch tangential auf die Grenzschicht auf. Weiter stromab werden die Nachläufe durch die ungleichförmige Strömung im Kanal stark verzerrt. Im Scheitel der deformierten Nachläufe werden

Schwankungen erzeugt, so dass dort die kinetische Energie erhöht wird. Die an der Hinterkante der Schaufeln entstehenden Nachläufe sind ebenfalls gut zu sehen. Sie vermischen sich stromab der Schaufeln mit den durch den Kanal wandernden Nachläufen.

Abb. 2 illustriert den Einfluss der auf die Grenzschichten auftretenden Nachlauf- und Hintergrundfluktuationen, und zwar im oberen Bild für die Saugseite und im unteren für die Druckseite. Die Vorgänge in den Grenzschichten werden durch Isoflächen der spannungsweitigen Wirbelstärke, welche mit der lokalen Temperatur eingefärbt sind, sichtbar gemacht. Die Hintergrundflächen senkrecht zur Schaufeloberfläche zeigen Konturen des Betrags der Schwankungsgeschwindigkeit und identifizieren damit den Ort der Nachläufe zum betrachteten Zeitpunkt. Zwischen den Nachläufen sind Gebiete mit reduziertem Schwankungsniveau, d.h. die Hintergrundschwankungen sichtbar. Im vorderen Bereich der Saugseite, in welchem die Strömung stark beschleunigt wird, wirken die auftretenden Schwankungen wenig in die Grenzschicht hinein, was an der nur leicht fleckigen Temperaturverteilung zu sehen ist.

Weiter stromab treten streifenförmige Strukturen auf und in der Nähe der Hinterkante, wo die Strömung verzögert wird, ist eine feinskalige Struktur zu erkennen, die auf das Auftreten von Turbulenz hindeutet. In diesem Bereich findet eine sogenannte Bypass-Transition statt, die in Bild 3 noch näher illustriert wird. Dort wird die momentane Temperaturverteilung in einer wandparallelen Ebene in der Nähe der Saugseite zum selben Zeitpunkt wie in Bild 2 gezeigt. Es bilden sich Turbulenzflecken, welche stromab geschwemmt werden und zusammenwachsen, so dass direkt an der Hinterkante die Strömung zu



diesem Zeitpunkt vollturbulent ist. In diesem Gebiet führen die kleinskaligen Turbulenzschwankungen zu einem starken Anstieg des Wärmeübergangs von der Schaufel an die Außenströmung. Im unteren Teil von Bild 2 ist auf der Druckseite ein ausgeprägtes streifenförmiges Muster der Temperaturverteilung zu erkennen. Hier erzeugen die auftretenden Nachläufe ausgeprägte Längswirbel in der Grenzschicht, wie dies auch schon in anderen Direkten Numerischen Simulationen beobachtet wurde.

Diese Längswirbel sind auch in Bild 4 zu erkennen, in welchem sie durch das  $\lambda_2$ -Kriterium von Jeong und Hussain [1] sichtbar gemacht wurden. Sie führen zu einem Anstieg des Wärmeübergangs von der beheizten Schaufel an die kältere Außenströmung von etwa 30%. Ihr Einfluss zeigt sich auch in den Temperaturkonturen, wobei deren streifenförmiges Muster mit dem Auftreten der Wirbelstrukturen gut korreliert ist. Schließlich zeigt Abb. 5 für verschiedene Querschnitte entlang der Saugseite wieder zum selben Zeitpunkt Konturen der momentanen Temperatur sowie Streichlinien des Geschwindigkeitsfeldes der Schwankungen. Die Bilder illustrieren klar den Einfluss der aus der Aussenströmung auftretenden Störungen auf die Temperaturverteilung entlang der Saugseite, wobei an manchen Stellen

wärmeres Fluid von der Schaufeloberfläche an die Außenströmung getragen wird, und zwar um so weiter nach außen je näher man der Schaufelhinterkante kommt. Durch diese Detailinformationen kann man sehr gut den Wärmeübergangsmechanismus studieren.

**Schlussbemerkungen**

Es wurden Direkte Numerische Simulationen der Strömung und des Wärmeübergangs in einem Niederdruck-Turbinenschaufelgitter unter dem Einfluss von periodischen Nachläufen und Hintergrundturbulenz in der Anströmung vorgestellt. Entlang der Saugseite initiieren die auftretenden Fluktuationen Bypass-Transition mit turbulenten Flecken, welche stromab geschwemmt werden und dabei zusammenwachsen, so dass im direkten Bereich der Hinterkante die Grenzschicht vollturbulent ist. Die kleinskaligen Schwankungen in diesem Bereich führen zu einem starken Anwachsen des Wärmeübergangs. Entlang der Druckseite verursachen die Nachläufe das Auftreten von längsseitigen Wirbelstrukturen. Diese Strukturen sind verantwortlich für einen Anstieg des Wärmeübergangs auf dieser Schaufelseite von ca. 30%.

**Danksagungen**

Die vorgestellte Rechnung wurde in einem von der Deutschen For-

schungsgemeinschaft finanzierten Projekt durchgeführt. Die Autoren bedanken sich beim Leitungskomitee des HLRB für die Zurverfügungstellung von Rechenzeit auf dem Hitachi Rechner am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) in München.

**Referenzen**

[1] Jeong, J. and Hussain, F. 1995, On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.*, 285, 69-94.  
 [2] Liu, X. and Rodi, W. 1994, Velocity measurements in wake-induced unsteady flow in a linear turbine cascade. *Exp. in Fluids* 17, 45-58  
 [3] Liu, X. and Rodi, W. 1994, Surface pressure and heat transfer measurements in a turbine cascade with unsteady oncoming wakes. *Exp. in Fluids* 17, 171-178  
 [4] Wissink, J.G. and Rodi, W. 2006, DNS of flow and heat transfer in a turbine cascade with incoming wakes. To appear in *J. Fluid Mech.*

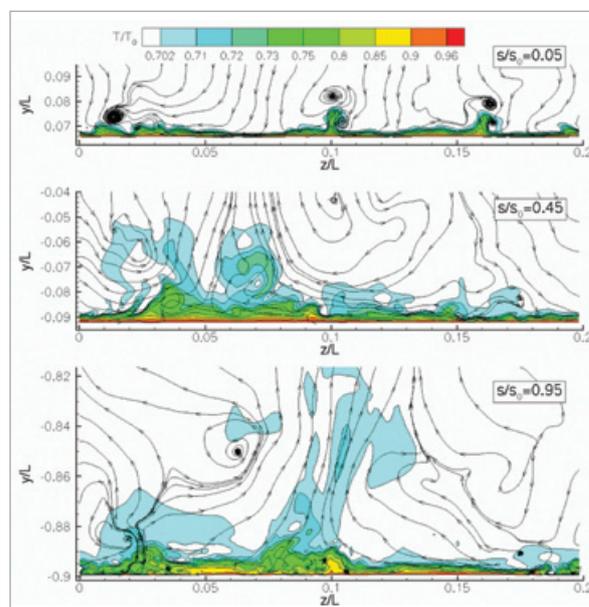
*Prof. Dr. Wolfgang Rodi und Dr. Jan Wissink arbeiten am Institut für Hydromechanik der Universität Karlsruhe.*



**Abb. 3:** Momentaufnahme der Verteilung der Temperatur in einer Ebene parallel und in der Nähe der Saugseite im hinteren Bereich der Schaufel.

**Abb. 4:** Momentaufnahme des Strömungsfeldes in einer Ebene parallel und in der Nähe der Druckseite. Konturen der momentanen Temperatur und Wirbelstrukturen visualisiert durch das  $\lambda_2$  Kriterium von Jeong und Hussein [4].

**Abb. 5:** Momentaufnahmen von Konturen der Temperatur und der Streichlinien in verschiedenen Querschnitten entlang der Saugseite der Schaufel.





## ÜBERBLICK

# Das LRZ in Kürze

---

 VON LUDGER PALM
 

---

## Menschen

- Über 170 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter am Leibniz-Rechenzentrum versorgen
- 90.000 Studentinnen und Studenten und
- 25.000 Beschäftigte der Münchner Hochschulen mit IT-Dienstleistungen.

## Dienste

Das LRZ stellt u. a. folgende Dienste bereit:

- Rechenkapazität in allen Größenordnungen
- Betrieb des Münchner Wissenschaftsnetzes und Übergang ins Internet
- Internet-Dienste wie E-Mail, Web-Dienste, Nameserver, Einwahlservers
- Datensicherung durch Archivierung und Backup
- Softwarebeschaffung
- Hosting, Housing, Remote Management
- Grid Computing

## Systeme

- Arbeitsplatzrechner für Studenten
- Videoschnitt, Großplotter
- Virtual Reality
- Rechensysteme vom PC bis zum Höchstleistungsrechner

## Schulung und Beratung

- Kurse zur PC-Nutzung
- Linux-Schulungen
- System- und Netz-Sicherheit
- Hochleistungsrechnen
- Hotline
- Workshops
- Schriftenverkauf

## Forschung

- IT-Management
- Pilotierung innovativer IT-Lösungen
- Computational Science

*Der Autor ist im LRZ u.a. verantwortlich für die Öffentlichkeitsarbeit.*



Der Eingangsbereich des neu erbauten LRZ

## HERAUSGEBER

PROF. DR. JUR. DIETMAR WILLOWEIT  
PRÄSIDENT DER BAYERISCHEN  
AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

## CHEFREDAKTION

MARTIN SCHÜTZ,  
PRESSEREFERENT DER BAYERISCHEN  
AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

## ART DIRECTION

TAUSENDBLAUWERK,  
MICHAEL BERWANGER  
INFO@TAUSENDBLAUWERK.DE

## REDAKTIONSANSCHRIFT

BAYERISCHE AKADEMIE DER  
WISSENSCHAFTEN  
PRESSESTELLE  
ALFONS-GOPPEL-STRASSE 11  
80539 MÜNCHEN  
TEL. 089-23031-1141  
FAX 089-23031-1285  
PRESSE@BADW.DE

## VERLAG

BAYERISCHE AKADEMIE DER  
WISSENSCHAFTEN  
ALFONS-GOPPEL-STRASSE 11  
80539 MÜNCHEN

ISSN: 1436-753X

## ANZEIGEN

PREISE AUF ANFRAGE BEIM  
PRESSEREFERENTEN DER BAYERISCHEN  
AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

## GESAMTHERSTELLUNG

LANDESAMT FÜR VERMESSUNG  
UND GEOINFORMATION  
ALEXANDRASTRASSE 4  
80538 MÜNCHEN

Erscheinungsweise: 4 Hefte pro Jahr. Der Bezugspreis ist im Mitgliedsbeitrag der Freunde der BAdW enthalten. Alle Texte dieser Ausgabe dürfen ohne Genehmigung der Bayerischen Akademie der Wissenschaften bei Nennung des Autors und der Quelle reproduziert werden. Um ein Belegexemplar wird gebeten. Die Wiedergabe der Abbildungen ist mit den jeweiligen Inhabern der Bildrechte abzuklären. Sie finden das Magazin auch als PDF (Portable Document Format) im Internet unter <http://www.badw.de>. Zum Lesen dieser Datei benötigen Sie das frei erhältliche Programm Adobe Acrobat Reader. Kostenloser Download der deutschen Version unter: <http://www.adobe.de/products/acrobat/>