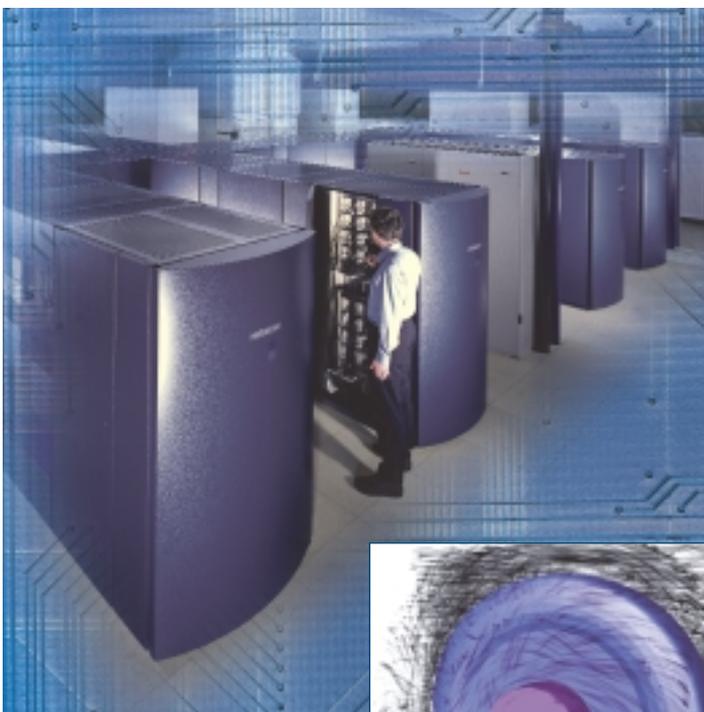


# Spitzenforschung in Bayern

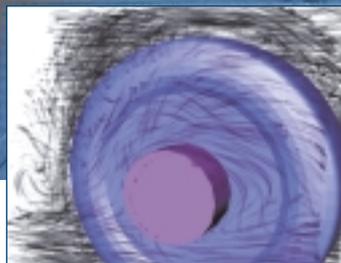


Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches  
Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern

## SIMULATIONEN UND BERECHNUNGEN VON KOMPLEXEN AUFGABEN



Das Bild zeigt die Hitachi SR8000-F1/168 im Rechenraum des Leibniz Rechenzentrums München. Die Gesamtlänge der Maschine beträgt 10 Meter, die maximale Breite 8 Meter.



Simulation einer turbulenten Luftströmung im Inneren eines Radkastens. Direkte Volumenvisualisierung mittels 3D Line Integral Convolution (LIC).

Der Einsatz von Höchstleistungsrechnern setzt große Erfahrung voraus und die Komplexität der behandelten, oftmals interdisziplinär angelegten Problemstellungen verlangt eine kompetente Nutzer-Beratung.

Explizites Förderziel des Verbundes ist die Aus- und Weiterbildung, damit auch in Zukunft genügend und qualifizierter Nachwuchs zur Verfügung steht. Deshalb unterstützt

KONWIHR den Masterstudiengang „Computational Science and Engineering“ sowie Kurse und Workshops in den bayerischen Rechenzentren.

Besonders wichtig sind eine enge Zusammenarbeit zwischen Grundlagendisziplinen, Anwendern (insbesondere auch aus der Wirtschaft) und anderen beteiligten Rechenzentren sowie ein effizienter Transfer der Ergebnisse in die Anwendung.

### Sprecher:

Prof. Dr. Arndt Bode, TU München  
Prof. Dr. Dr. h.c. Franz Durst, Universität Erlangen-Nürnberg

### Geschäftsführung:

KONWIHR, Geschäftsstelle Süd:  
Andreas C. Schmidt, TU München  
Lehrstuhl für Rechnertechnik und Rechnerorganisation  
Acrisstraße 21, 80333 München  
Tel (089) 2 89-2 53 66  
Fax (089) 2 89-2 82 32  
E-Mail [konwahr@in.tum.de](mailto:konwahr@in.tum.de)  
Internet <http://konwahr.in.tum.de>

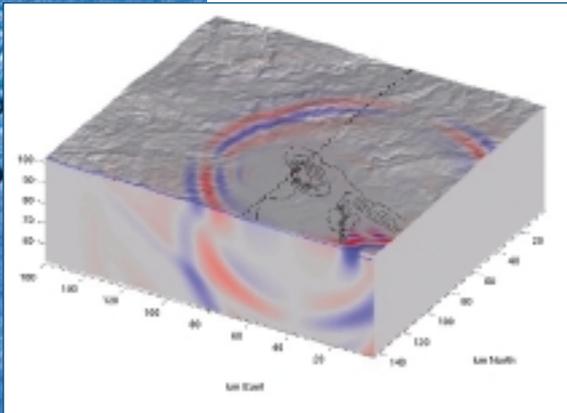
KONWIHR, Geschäftsstelle Nord:  
Dr.-Ing. Gunther Brenner, Universität Erlangen-Nürnberg  
Lehrstuhl für Strömungsmechanik  
Paul-Gordan-Str. 3, 91052 Erlangen  
Tel (09131) 85-2 30 05  
Fax (09131) 85-2 30 02  
E-Mail [brenner@lstm.uni-erlangen.de](mailto:brenner@lstm.uni-erlangen.de)

Gefördert durch das Bayerische Staatsministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst im Rahmen der High-Tech-Offensive Bayern.

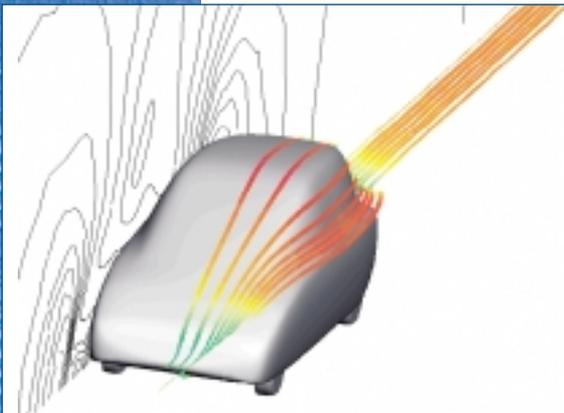
**H**auptanliegen von KONWIHR ist, die Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern, insbesondere die des HLRB (Höchstleistungsrechner in Bayern, betrieben am Leibniz Rechenzentrum München), fachlich zu unterstützen und deren Einsatzpotenzial durch

Forschungs- und Entwicklungsvorhaben auszuweiten. Wissenschaftler bei KONWIHR bearbeiten Grand Challenge-Anwendungen aus den Bereichen Biologie, Chemie, Geologie, Informatik, Mathematik, Physik und den Werkstoffwissenschaften.

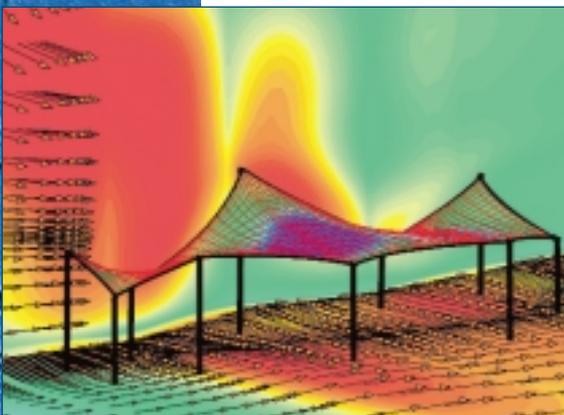
# AKTUELL GEFÖRDERTE FORSCHUNGSVORHABEN:



**Schnappschuss einer Erdbebenwellenausbreitung im Kölner Becken. Die Blickrichtung ist nach Süd-Osten. In der rechten unteren Bildecke sind verstärkte Effekte zu erkennen, die durch die dort vorliegende Sedimentstruktur bedingt sind.**



**Visualisierung der Strömung um ein PKW-Modell im Windkanal.**



**Blick auf die Bucht von San Francisco, einer seismisch aktiven Region.**

## Biologie:

- ParBaum -Parallelisierung von Maximum Likelihood-Verfahren zur Rekonstruktion eines umfassenden Stammbaums des Lebens aus multiplen Alignments molekularer Daten.

## Chemie:

- ENZYMECH -Computer-simulation von Enzym-Reaktionsmechanismen
- PARAGAUSS - Ausbau und Anwendung einer parallelen Dichtefunktionalmethode für Moleküle und Cluster unter besonderer Berücksichtigung des Höchstleistungsrechners Hitachi SR8000-F1.

## Dienstleistungsprojekte (wie Beratung, Außendarstellung):

- cxHPC -Beratung, Ausbildung und Unterstützung im Höchstleistungsrechnen (ehemals BAUWIHR)
- LIA -Lehre, Infrastruktur, Außendarstellung
- LRZ -Ausbildung, Öffentlichkeitsarbeit und Industriekooperation.

## Geologie:

- NBW -Numerische Berechnungen des elastischen Wellenfeldes in seismisch aktiven Regionen.

## Informatik/Mathematik:

- gridlib -Simulation und Visualisierung großer Datenmengen (ehemals Adhoc 3D)
- MethWerk -Methoden und Werkzeuge für die ultraskalierbare numerische Simulation auf hybrid parallelen Architekturen
- Par-EXPDE -Effiziente objekt-orientierte Mehrgitterverfahren auf hierarchisch hybriden adaptiven Gittern
- Peridot -Automatische Leistungsanalyse und Leistungsüberwachung paralleler Programme
- SkvG -Strömungen in komplizierten, veränderlichen Geometrien.

## Physik:

- CUHE -Computersimulationen unendlich großer hochkorrelierter Elektronensysteme
- HQS@HPC -Hochkorrelierte Quanten-Systeme auf Höchstleistungsrechnern
- OOPCV -Objektorientierte Programmierbausteine für Computersimulationen in der Vielteilchenphysik.

## Strömungsmechanik:

- BESTWIHR -Lattice Boltzmann-Automaten und Anwendungen in der Fluidmechanik
- DiSiVGT -Direkte numerische Simulation zur Entwicklung eines Vier-Gleichung-Turbulenzmodells
- Flusib -Fluid-Struktur-Wechselwirkungen im Bauwesen
- ParChem -Effiziente numerische Verfahren zur Lösung von steifen chemischen Problemen mittels Finiten Volumen und Lattice Boltzmann Verfahren
- RexSim -Simulation des gekoppelten Energietransports durch Strahlung auf Hochleistungsrechnern.