

news

Sonderausgabe **Scientific Supercomputing**

**Neuester Fujitsu-Vektor-
parallelrechner am FZK**

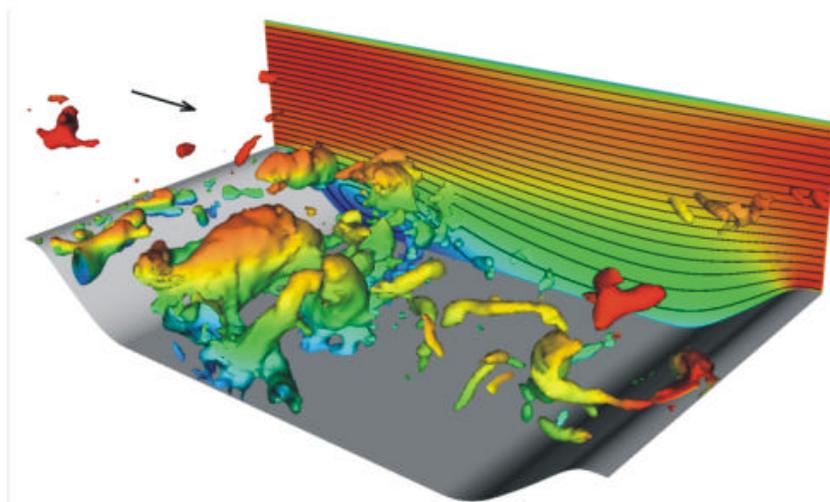
**Die Strömung im Rechner -
Turbulenz auf Karlsruher
Supercomputern**

fluent

linsol

ibm actc
workshop 2000

computational
science



IBM RS/6000 SP: Strömung über eine periodische Reihe von Hügeln

INHALT

Neuester Fujitsu-Vektorparallelrechner am Forschungszentrum Karlsruhe installiert

VPP 5000/4 in Betrieb	3
Weltweit leistungsfähigster Einzelprozessor	3
Leistungssteigerung um Faktor 3 bis 6	3
Breiter Anwendungsbereich und hohe I/O-Leistung	4
Umfangreiche Tools	4

Die Strömung im Rechner - Turbulenz auf Karlsruher Supercomputern

Hochkomplexes Phänomen	5
Modellierung mit Grobstruktursimulationen	5
Simulation statt Experiment	5
Europäisches Projekt LESFOIL: Referenzrechnung am Karlsruher SP	6
Resultate	6
Nur mit Höchstleistungsrechnern international konkurrenzfähig	7

Numerische Strömungssimulation mit Fluent

Leistungsfähiges Werkzeug zur Produkt- und Verfahrensoptimierung	7
Anwendungsbereiche	7
Programmübersicht	8
Preprocessing	8
Physikalische Modelle	9
Fluent	9
Informationstag am RZ	10

Programmpaket LINSOL: Effiziente Lösung linearer Gleichungssysteme

Was macht LINSOL?	10
Zwei Benutzer-Schnittstellen	11
Robustheit	11
Portabilität	11
Flexibilität	12
Effiziente Implementierung	12
Public Domain Software	13

European IBM ACTC Workshop 2000

Entwicklung neuer Optimierungstools	13
Pow er4-Prozessor - über 8 Gflops auf einem Chip	13
Spitzenleistung nur bei Datenlokalität	14
Ein satz von OpenMP	14

Computational Science Architecture and Use of Shared and Distributed Memory Supercomputers

English Block Lecture in July 2000 . . . 14

New chapters in the Addendum to "Scientific Supercomputing"

. 15

Erste Ansprechpartner auf einen Blick

. 16

IMPRESSUM

Herausgeber:
Prof. Dr. Wilfried Ju ling
Redaktion: Ursula Scheller,
Klaus Har dardt
Tel.: 0721/608-4865

Universität Karlsruhe (TH)
Rechenzentrum
D-76128 Karlsruhe
<http://www.uni-karlsruhe.de/~RZ-News/>
Num mer 2000/6
ISSN 1432-7015

Neuester Fujitsu-Vektorparallelrechner am Forschungszentrum Karlsruhe installiert

Nikolaus Geers/
Frank Schmitz, FZK

VPP 5000/4 in Betrieb

So wohl an der Universität Karlsruhe als auch am Forschungszentrum Karlsruhe besteht eine lange und erfolgreiche Tradition in der Nutzung von Vektorrechnern. Bereits seit den 80er Jahren, mit der Installation eines VP 50 am Forschungszentrum (1986) bzw. eines VP 400-EX an der Universität (1987), haben sich dabei Fujitsu-Siemens-Vektorprozessoren so wohl in ihrer Leistungsfähigkeit als auch in der Zuverlässigkeit bewährt.

Mit der Gründung des Virtuellen Rechenzentrums Karlsruhe im Frühjahr 1996 übernahm die Hauptabteilung Kommunikation und Information (HIK) des Forschungszentrums die Verantwortung für den Betrieb der von Universität und Forschungszentrum gemeinsam genutzten Vektorrechner. Die derzeitige Anlage VPP 300/16 (16 PEs, 32 GB Hauptspeicher, 35,2 Gflops) wurde jetzt durch das neueste Modell der Fujitsu-Vektorrechnerfamilie, ein System VPP 5000/4, ergänzt.

Weltweit leistungsfähigster Einzelprozessor

Die Installation am Forschungszentrum Karlsruhe ist die erste Installation eines VPP 5000 an einer öffentlichen Forschungseinrichtung in Deutschland und bietet damit Wissenschaftlern die Möglichkeit, auf dem weltweit leistungsfähigsten Einzelprozessor (Zykluszeit von 3,33 ns, 9,6 GFlops) serielle Anwendungen zu rechnen. Für den Sommer 2001 ist die Ablösung des VPP 300/16 durch den bis dahin auf 8 Processing-Elemente erweiterten VPP 5000 geplant.

Der VPP 5000/4 ist mit vier Processing-Elementen (PE) ausgestattet, die jeweils einen leistungsstarken Skalarprozessor (1,2 GFlop/s), einen Vektorprozessor (9,6 GFlop/s) so wie 8 GB Hauptspeicher beinhalten. Die einzelnen PEs sind über ein Kommunikationsnetzwerk in Crossbar-Technologie miteinander verbunden

(bidirektional 1,6 GByte/s). Das Gesamtsystem besitzt also eine Skalarleistung von 4,8 GFlops, eine Vektorleistung von 38,4 GFlops und 32 GB Hauptspeicher.

Das System ist eine Weiterentwicklung der VPP 300 bzw. VPP 700-Serie und ist zu diesen Systemen binär kompatibel. Trotzdem sollten Anwendungsprogramme neu übersetzt werden, um die erweiterten Funktionen des VPP 5000 nutzen zu können. Die Struktur eines PE, die im Wesentlichen der Struktur eines PE des VPP 300 entspricht, ist in Bild 1 dargestellt.

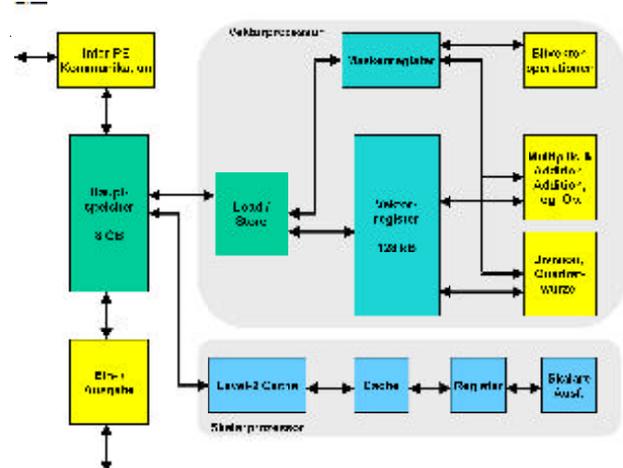


Bild 1: Blockschaltbild eines Processing-Elements

Die einzelnen Funktionseinheiten des Vektorprozessors sind jeweils 16-fach parallel ausgelegt, so dass pro Takt 16 Ergebnisse geliefert werden können. Wenn in der Multifunktionspipeline eine verknüpfte Operation von Addition und Multiplikation ausgeführt wird, also z. B. eine Fortran-Schleife der Form

```
DO i = 1, n
  A(i) = A(i) + s * B(i)
END DO
```

wird die maximale Rechengeschwindigkeit von 9,6 GFlops erzielt.

Leistungssteigerung um Faktor 3 bis 6

Erste Tests und Benchmarkrechnungen auf dem VPP 5000 zeigen, dass für unterschiedliche Anwendungen i. a. eine Leistungssteigerung um den Faktor 3 bis 6 gegenüber dem VPP 300 erzielt werden kann. Insbesondere

dere bei Anwendungen, die einen signifikanten skalaren Anteil haben, ist eine deutlich stärkere Beschleunigung des Programms zu beobachten, als sich aus der reinen Verkürzung der Taktfrequenz ergibt. Einige dieser Ergebnisse sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefasst:

Pro-gramm	VPP 300		VP 500	
	CPU-Zeit	MFlops	CPU-Zeit	MFlops
Linpack 1000 Bench-mark		1936		8758
Band-löser	7.14	1139	1.64	5117
KAMM	1436		431	
CFX-4	20800		5393	

Breiterer Anwendungsbereich und hohe I/O-Leistung

Das Betriebssystem des VPP 5000 ist UXP/V V20, das sich von der Vorgängerversion auf dem VPP 300 vor allem durch das neue *Flexible and high Performance File System* (FPFS) auszeichnet, das je nach Größe der zu übertragenen Datenmenge entscheidet, ob die Daten intern gepuffert oder direkt zwischen dem Anwendungsprogramm und den Platten übertragen werden. Es kombiniert somit die Vorteile traditioneller und spezieller Dateisysteme wie z.B. das VFL-FS des VPP 300 für große I/O-intensive Anwendungen. FPFS ist deshalb für einen wesentlich breiteren Anwendungsbereich geeignet als viele andere Dateisysteme. Durch den Einsatz eines Noble-Raid-Systems von SUN und den Anschluss über Fibre Channel erreicht man Datenübertragungsraten von 80 MByte/s, die durch die parallele Nutzung verschiedener Raids noch zu steigern ist.

Umfangreiche Tools

Die Softwareentwicklungsumgebung auf dem VPP 5000 umfasst neben dem Fortran 95-Compiler auch

vektorisierende Compiler für C und C++. Als Kommunikationsbibliothek für parallele Anwendungen kann MPI benutzt werden, das entsprechend den Spezifikationen für MPI 2.0 implementiert ist, also auch MPI-IO und einseitige Kommunikation beinhaltet. Als weitere Tools für die Programmentwicklung stehen der Debugger Total View 3.9 und für die Laufzeitanalyse paralleler Programme "Vampir" zur Verfügung. Die bislang bereits auf dem VPP 300 eingesetzten Unterprogrammbibliotheken BLAS, ScaLapack, Lapack, LIN-SOL, IMSL und NAG werden teilweise bereits in einer VPP 5000 spezifischen Form angeboten. Ansonsten falls diese Bibliotheken zu nächst in ihrer bisherigen VPP 300-Version weiterhin genutzt werden können.

Wegen des großen Hauptspeichers von 8 GB pro PE und wegen des sehr schnellen Vektorprozessors eignet sich der VPP 5000 insbesondere für die Ausführung gut vektorisierter, serieller Programme mit hohem Hauptspeicherbedarf.

Weitere Einzelheiten zu den Zugangsregelungen sowie zu technischen Fragen finden Sie auf dem Web-Server des HIK unter <http://www.fzk.de/~VPP/>.

Nikolaus Geers, Tel. -3755,

E-Mail: geers@rz.uni-karlsruhe.de.



Der neue Vektorparallelrechner Fujitsu VPP 5000/4, im Vordergrund das Noble-Raid-Plattensystem von SUN

Die Strömung im Rechner - Turbulenz auf Karlsruher Supercomputern

*J. Fröhlich, Ch. Melten, W. Rodi/
Institut für Hydromechanik*

Hochkomplexes Phänomen

Die Turbulenz, wie sie als ungeordnete Bewegung in Flüssigkeiten und Gasen vor kommt, gehört zu den komplexesten Phänomenen in der Natur und ist bis heute nicht befriedigend verstanden. Je höher die Geschwindigkeit in einem strömenden Medium ist, desto größer wird seine Tendenz, regellose Wirbel zu bilden.

Sehr schön sieht man dies, wenn man bei spielsweise am Rheinufer steht und die Wasseroberfläche betrachtet. Große und kleine Wirbel tau chen auf und verschwinden wieder, hinter Pfeilern bilden sich abwechselnd links und rechts Wirbel, und am flachen Strand werden sie durch das Ufer gedämpft. Trotz dieser Regellosigkeit würde ein Boot mit Rudern, die eine Pause machen, sehr gleichmäßig von der mittleren Geschwindigkeit des Wassers davongetragen.

Stellen wir uns vor, die Strömung im Rhein sollte auf einer Länge von z. B. 1 km berechnet werden. Zählt man einmal, wieviele kleine Wirbel auf einem Quadratmeter Wasseroberfläche vorhanden sind, überlegt sich, dass der Streckenabschnitt mehrere hunderttausend Quadratmeter überdeckt und stellt sich vor, dass über die ganze Wassertiefe von einigen Metern ähnliche Wirbel existieren, wird einem sofort klar, dass selbst die allergrößten Computer nicht in der Lage sind, diese immense Datenfülle zu speichern, geschweige denn über einen Zeitraum von bei spielsweise einer Stunde zu berechnen.

Modellierung mit Grobstruktursimulationen

Wenn wir uns nur für die Geschwindigkeit interessieren, mit der ein Ruderboot den Strom hinabschwimmt, könnten wir auf den Gedanken kommen, die vielen Wirbel einfach zu vernachlässigen und nur

die mittlere Geschwindigkeit zu berechnen. Das ist im allgemeinen genau das, was in Ingenieur anwendungen von hauptsächlichem Interesse ist. Allerdings bestimmt die Größe und Stärke der vielen kleinen Wirbel die Verteilung der mittleren Geschwindigkeit ganz entscheidend - diese einfach zu vergessen geht also nicht.

Hier setzt die Turbulenzmodellierung an und repräsentiert den Einfluss der Wirbel auf die mittlere Strömung durch ein Modell. Sehr viele verschiedene Modelle wurden bisher entwickelt und für Berechnungen eingesetzt, wobei im allgemeinen die Gesamtheit aller Wirbel modelliert wird. In den letzten Jahren ging man jedoch auch dazu über, wenigstens die größten Wirbel in einer Strömung zu berechnen und nur den Einfluss der kleineren Wirbel auf die größeren Wirbel und auf die mittlere Strömung zu modellieren. Solche Verfahren heißen Grobstruktursimulationen oder englisch 'Large Eddy Simulation'.

Simulation statt Experiment

In der Arbeitsgruppe 'Turbulente Strömungen' am Institut für Hydromechanik (IfH) der Universität Karlsruhe werden solche Modellierungsstrategien getestet und weiterentwickelt. Bei den dafür notwendigen Tests ist es unverzichtbar, je weils über eine gut dokumentierte Referenz zu verfügen. Klassischerweise werden dazu Vergleichsdaten aus Experimenten verwendet. Dabei tritt jedoch oft die Problematik auf, dass viele interessierende Größen einer Messung nur schwer oder gar nicht zugänglich sind. Hier können aufwendige Simulationen an die Stelle des Experimentes treten und - in einfachen Geometrien - solche Referenzdaten liefern. Hat man die Strömung einmal 'im Rechner', können daraus alle Informationen gewonnen werden, die man wissen möchte. Wird anschließend eine einfache Rechnung mit einem Modell durchgeführt, kann man mit diesen Vergleichsdaten den Einfluss des verwendeten Modells beurteilen.

Europäisches Projekt LESFOIL: Referenzrechnung am Karlsruher SP

In dem europäischen Verbundprojekt LESFOIL zur Grobstruktursimulation der Strömung um Tragflügelprofile wurden nach einer geeigneten Konfiguration gesucht, um Modelltests durchzuführen. Leider zeigte sich jedoch, dass die Simulation der vorhandenen Experimente zu anspruchsvoll gewesen wäre, um als kostenarmer Vorabtest von Turbulenzmodellen dienen zu können, oder dass die vorliegenden Messungen nicht genau genug waren. Es wurde daher beschlossen, eine neue Konfiguration zu erarbeiten und diese in einer möglichst vollständigen Vergleichsrechnung zu analysieren.

Es handelt sich dabei um die Strömung über eine periodische Kette von Hügeln, wobei die Strömung im Windschatten der Hügel ein größeres Rückstromgebiet bildet. Solche sogenannten Ablöseblasen sollen später auch am Tragflügel, allerdings bei viel höherer Geschwindigkeit berechnet werden.

Auf der IBM RS/6000 SP des Rechenzentrums der Universität Karlsruhe wurde im Sommer 1999 die Referenzrechnung mit dem am IfH entwickelten Programm LESOCC durchgeführt. Dabei wurden mehr als 5 Millionen Gitterpunkte verwendet und die strömungsmechanischen Gleichungen für 205.000 Zeitschritte gelöst. Mittels Gebietszerlegung und explizitem Message Passing (MPI) wurden dafür 96 Prozessoren eingesetzt, was für die vollständige Rechnung zu einer Gesamtrechenzeit von 60.000 h führte.

Die so erzeugten Daten für das Geschwindigkeitsfeld und andere Größen wurden anschließend bei einem Projekttreffen mit den Partnern aus Schweden, England, Frankreich und Italien vorgestellt und dienen diesen nun zur Bewertung ihrer eigenen Rechnungen.

Resultate

Eine Visualisierung der berechneten Strömung innerhalb einer Periode der Hügelkette ist auf der Titelseite der Ausgabe zu sehen. An der Rückfront ist die

mittlere Geschwindigkeit in Form von Stromlinien dargestellt, wobei die Strömung von links hinten nach rechts vorne verläuft. Man erkennt, wenn auch etwas verdeckt, das Rückstromgebiet im Windschatten des hinteren Hügels.

Im Vordergrund ist eine Fläche konstanten Drucks dargestellt, wobei der mittlere Druck subtrahiert wurde. Sie ist, genau wie die Rückfront, entsprechend der mittleren horizontalen Geschwindigkeitskomponente eingefärbt. Durch diese Druckfläche werden sehr schön die komplexen Wirbelstrukturen in der momentanen, instationären Strömung deutlich: im Ablösebereich liegen die Wirbel vorzugsweise parallel zu den Hügeln, verursacht durch die sogenannte Kelvin-Helmholtz Instabilität.

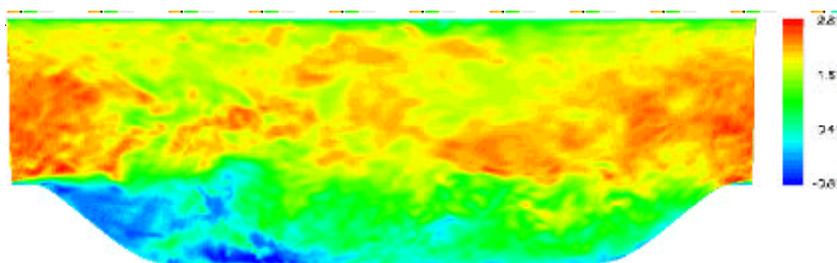


Abb. 1: Momentane horizontale Geschwindigkeitskomponente in einem Längsschnitt durch das Strömungsfeld.

Im Bereich der Hügelvorderseite sind die Wirbel vorzugsweise in Längsrichtung orientiert, sogenannte Görtler-Wirbel. Beim Vergleich von mittlerer Strömung, die an der Rückfront dargestellt ist, und momentaner Strömung im Innern des Rechengebietes wird klar, wie wichtige Informationen über die Mechanismen in einer turbulenten Strömung aus einer Grobstruktursimulation gewonnen werden können. Wie erwähnt, werden dann zwar nicht die aller kleinsten, aber doch die größeren und damit wichtigeren Wirbel berechnet und können somit analysiert werden. Einen Eindruck der aufgelösten Strömung gibt auch Abb. 1. Sie zeigt die momentane horizontale Geschwindigkeitskomponente, insbesondere die instationäre Rückströmung hinter dem Hügel, sowie die dünne Scherschicht, die sich an seinem Scheitelpunkt ablöst.

Neben der hohen Zahl von Gitterpunkten ist die Notwendigkeit der zeitlichen Mittelung der instationären Strömung ein zweiter Grund für den hohen Rechenzeitbedarf instationärer Turbulenzrechnungen. Selbst wenn in Grobstrukturimulationen ein Modell für die

kleineren Wirbel verwendet wird, sind auch diese Rechnungen aus den selben Gründen immer noch sehr aufwendig. Sie liefern für bestimmte Konfigurationen allerdings auch bessere Ergebnisse als klassische Turbulenzmodelle. Die berechneten Mittelwerte verschiedener Größen können zur Beurteilung der Turbulenzmodelle herangezogen werden. Abb. 2 zeigt typische Resultate.

Nur mit Höchstleistungsrechnern international konkurrenzfähig

Um auf dem Gebiet der Grobstruktursimulation auf internationalem Niveau konkurrenzfähig sein zu können, ist daher der Zugang zu den jeweils aktuellen Höchstleistungsrechnern eine grundlegende Voraussetzung. Mit den bei den Karlsruher Rechnern SP und VPP ist die Gruppe am IfH in der Lage, auf die sich rasant entwickelnden Gebiet mitzuhalten. Das wurde

in dem geschilderten Projekt eindrucksvoll deutlich.

An dieser Stelle möchten sich die Autoren bei den Mitarbeitern des Karlsruher Virtuellen Rechenzentrums für Rat und Hilfe bei der Durchführung dieses und anderer Projekte ganz herzlich bedanken.

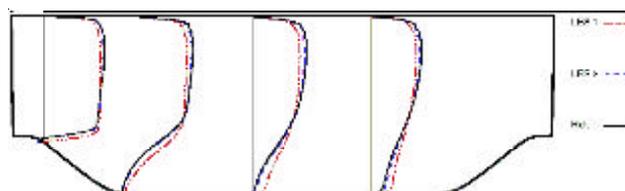


Abb. 2: Profile der mittleren horizontalen Geschwindigkeitskomponente an verschiedenen Stellen im Strömungsfeld. Grobstruktursimulationen auf zwei verschiedenen Gittern (LES1, LES2) werden mit der Referenzrechnung verglichen. Das Resultat von LES2 ist deutlich besser als das von LES1.

Numerische Strömungssimulation mit Fluent

Dr. Markus Braun / Fluent Deutschland GmbH

Leistungsfähiges Werkzeug zur Produkt- und Verfahrensoptimierung

Die numerische Simulation von Strömungsvorgängen setzt sich immer mehr im Produktdesign, in der Anlagenplanung und für die Optimierung bereits vorhandener Produkte durch. Für den Einsatz stehen eine Reihe von ausgereiften Programmen zur Verfügung, die sich bereits in vielen Bereichen, wie etwa der Kraftwerkstechnik, der chemischen Industrie und des Anlagenbaus bewährt haben.

In der Verfahrenstechnik auftretende Strömungen sind in der Regel mehrdimensional und lassen sich nicht mehr mit einfachen Gleichungen beschreiben. Für Angaben des Druckverlusts oder des Wärmeübergangskoeffizienten müssen deshalb oft aufwendige Messungen am fertigen Produkt durchgeführt werden.

Mit der numerischen Strömungssimulation kann der Entwicklungsingenieur bereits vor der Herstellung des Produkts an beliebigen Orten des Strömungsgebietes einen tiefgehenden Einblick in die lokalen Vorgänge

gewinnen und die Strömung ohne Eingriff analysieren. Dadurch rückt die Erprobung und Optimierung bereits ins Designstadium vor und die Entwicklungskosten werden durch Verkürzung der Entwicklungszeiten – bei gleichzeitig weiter gesteigerter Produktqualität – gesenkt.

Anwendungsbereiche

Neben den klassischen Gebieten der Brennerentwicklung, Optimierung von chemischen Reaktoren und Wärmeaustauschern eröffnen sich dem Entwicklungsingenieur mit diesen Programmsystemen weitere Anwendungsbereiche.

Die Verwendung von unstrukturierten Gittern ermöglicht die Berechnung von Strömungen durch komplizierte Geometrien wie Ventile oder statische Mischer auf einfache Weise. Pumpen und andere Aggregate mit rotierenden Teilen wie Rührwerke lassen sich durch den Einsatz von rotierenden Bezugssystemen und auf einander abgeleiteten Netzen, so genannte Sliding Meshes, optimieren.

Mehrphasen- und Partikelströmungen, wie sie in Zyklonen, pneumatischen Förderern oder bei Filtra-

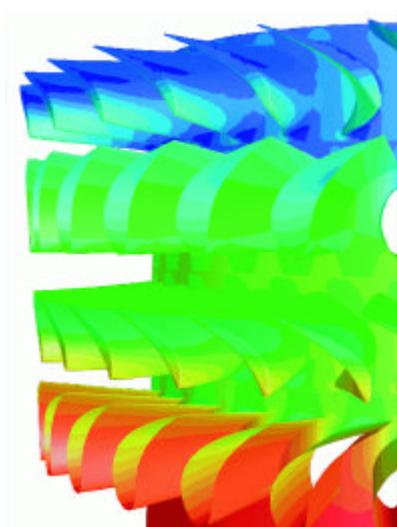
tionsprozessen auftreten, sind aufgrund der Vielzahl von physikalischen Modellebenen fallweise erfassbar.

Weitere Anwendungsbereiche sind die Ausbreitung von Schadstoffen in der Atmosphäre und in geschlossenen Räumen, freie und gemischte Konvektion in Raumluftströmungen sowie die Entwicklung thermischer und chemischer Prozesse und Verfahren.

Programmübersicht

Die Fluent Produktfamilie bietet CFD-Lösungen für nahezu alle Klassen von Strömungsproblemen und Fluiden an:

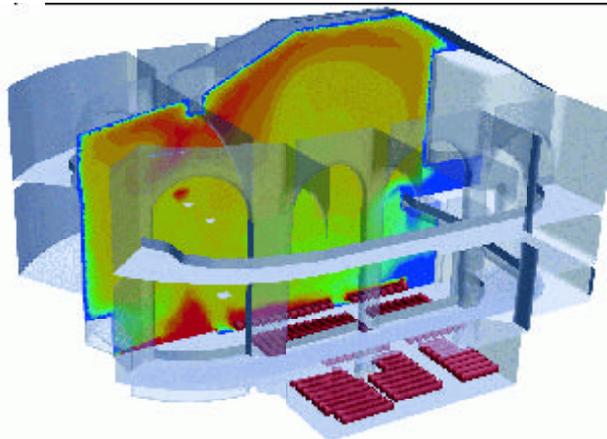
- Für laminare und turbulente Strömungen im Unter- und im Überschallbereich, wie sie im gesamten Bereich der Verfahrenstechnik vorliegen, wird überwiegend der Finite-Volumen Solver FLUENT5 eingesetzt, der die Navier-Stokes Gleichungen auswertet. Das Programm erlaubt die gleichzeitige Berechnung von Wärmetransport und chemischer Reaktion. Auch Mehrphasenberechnungen sind möglich.
- FIDAP hat seine besonderen Stärken im Bereich laminarer Strömungen, insbesondere bei Schmelzen und nicht-Newton'schen Fluiden.
- MixSim ist ein leistungsfähiges Analyseinstrument für die komplette hydrodynamische Simulation speziell von Rührwerksbehältern.
- Für schleichende Strömungen, wie sie im Bereich der kunststoffverarbeitenden Industrie auftreten,



Strömungsfeld in einer Gasturbine. Rechengebiet über 2 Rotor-Stator-Paare. Instationäre Rechnung erfasst Rotor-Stator-Interaktion

kommt das Softwarepaket POLYFLOW zum Einsatz.

- Die Gittergenerierung erfolgt für alle Programme mit GAMBIT.



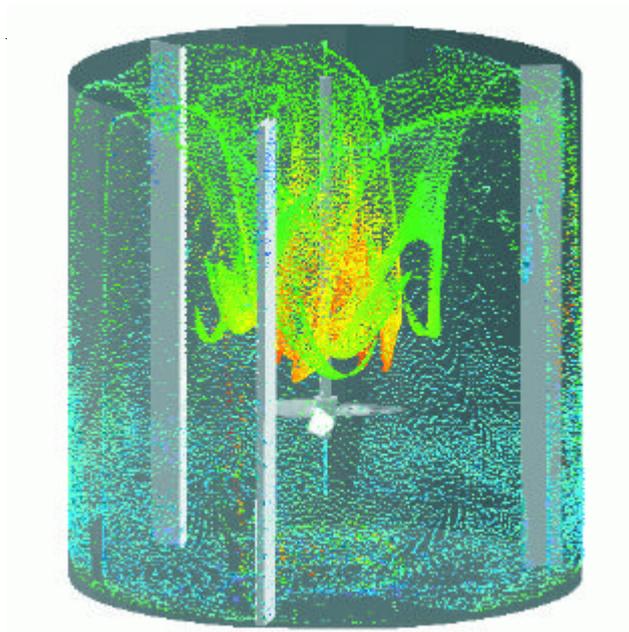
Kreuzkirche in Dresden, Temperaturverteilung im Mittelschiff. Mit freundlicher Genehmigung der Gebäude-Technik-Dresden GmbH

Grundlage dieser Programme ist die numerische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen mit modernsten Algorithmen. Besonderes Gewicht wurde hier auf die Robustheit der Algorithmen und die einfache Bedienung gelegt, um dem Entwicklungingenieur den alltäglichen Umgang mit den Programmen zu vereinfachen.

Alle Programme haben eine einheitliche grafische, mausgesteuerte Benutzeroberfläche, die den Anwender durch die Modelldefinition, die Berechnung und die Visualisierung der Ergebnisse führt. Die Interaktivität der Benutzeroberfläche erlaubt es dabei, eine laufende Berechnung jederzeit zu unterbrechen, das Resultat durch grafische Visualisierung zu bewerten und Veränderungen an den Modellparametern durchzuführen. Der integrierte Postprozessor gestattet die einfache Darstellung von dreidimensionalen Feldgrößen bis hin zum Aufbau von Szenen und Animationen.

Preprocessing

Der Einsatz von unstrukturierten Gittern unter Verwendung von Tetraedern und Hexaedern hilft dabei, die Zeiten zur Gittererzeugung extrem zu verringern und ermöglicht die lokale, automatische Adaption des Gitters aufgrund von Strömungsgrößen wie Druck-, Geschwindigkeits- oder Temperaturgradienten. Diese



Strömungsvisualisierung in einem Rührkessel. Mit freundlicher Genehmigung der Firma Lightning

Technik hat Vorteile hinsichtlich der Genauigkeit von Strömungsberechnungen und des Bedarfs an Gitterzellen, da auf die selbe Art und Weise das Gitter auch dort vergrößert werden kann, wo in der Strömung nur geringe Änderungen auftreten.

Die Erzeugung eines Berechnungsgitters nimmt bei der Berechnung von Strömungen in komplexen Geometrien die meiste Zeit in Anspruch. Zur Verringerung dieses Zeitaufwands wurde GAMBIT entwickelt. Dieser Präprozessor vereint Geometrieerzeugung und Vernetzung unter einer gemeinsamen grafischen Benutzeroberfläche. Fortschrittliche Protokollfunktionen und Parametrisierung gestatten dem Anwender, fertige Geometriemodelle, bei spielsweise im Rahmen von Designvariationen, schnell zu modifizieren und neu aufzubauen.

GAMBIT bietet die volle Funktionalität eines 3D-CAD-Programms für die Erstellung von Geometrien und fügt sich in den hausinternen Entwicklungszyklus ein durch vielfältige Importmöglichkeiten bereits existierender Konstruktionsdaten.

Physikalische Modelle

Der Anwender wird durch eine Vielzahl von Modellen unterstützt. Unter anderem stehen folgende Modelle für die Berechnung von kompressiblen und inkompressiblen Strömungsvorgängen zur Verfügung:

- stationäre und zeitliche abhängige Strömungen
- "State-of-the-Art"-Turbulenzmodelle
- gekoppelter Wärmeaustausch zwischen Strömungen und festen Körpern
- verschiedene Strahlungsmodelle
- homogene und heterogene chemische Reaktionen
- Simulation von Verbrennungsvorgängen
- Mehrphasenströmungen (Euler-Lagrange- oder Euler-Euler-Beschreibungsweise)
- Berechnung von freien Oberflächen
- Schmelz- und Mischvorgänge sowie
- nicht-Newton'sche Flüssigkeiten

Fluent

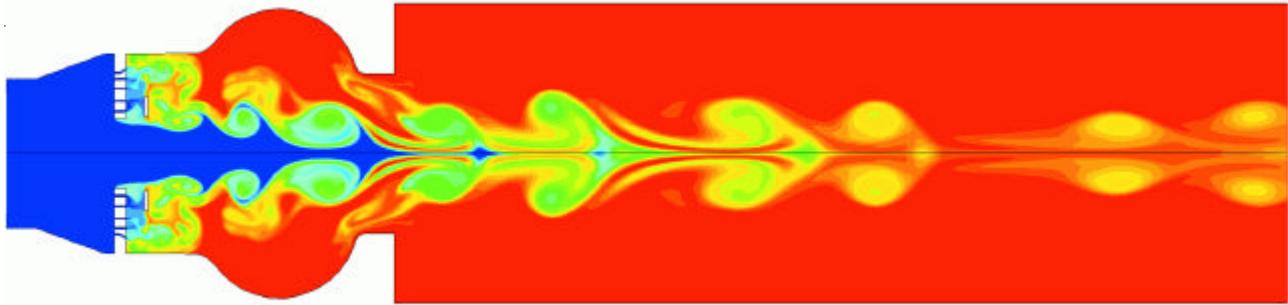
Fluent ist der weltweit führende Anbieter im rasch wachsenden Markt der Software zur Strömungssimulation (CFD: Computational Fluid Dynamics). Die Anwendungsmöglichkeiten reichen von der Modellierung laminarer und turbulenter Strömungen mit Wärmeaustausch inklusive Strahlung bis hin zu Mischvorgängen, chemischen Reaktionen, Verbrennungen, Mehrphasenströmungen und Aerodynamikberechnungen. Die integrierten Programmsysteme unterstützen alle notwendigen Schritte im Rahmen einer Strömungssimulation: Geometrieerstellung, Netzgenerierung, Dateneingabe, Berechnung von stationären oder zeitabhängigen Lösungen sowie ein umfassendes Post-Processing zur Auswertung und Darstellung der Ergebnisse. Die Software von Fluent zeichnet sich insbesondere durch eine einfache Bedienbarkeit über eine grafische Benutzeroberfläche aus.

Darüber hinaus bietet Fluent sämtliche Dienstleistungen im Bereich Strömungssimulation an. Die vollständige, termingerechte und kompetente Durchführung von Projekten unterstützt Firmen bei Kapazitätsengpässen bzw. ermöglicht Neukunden einen ersten Einblick in die Leistungsfähigkeit eines modernen CFD-Werkzeugs. Experten für alle industriellen Anwendungsbereiche, von der Automobiltechnik über die Kunststofftechnik bis hin zu Verfahrens- und Umwelttechnik stehen zur Mitarbeit bei Ihren Problemlösungen bereit.

Informationstag am RZ

Einen detaillierten Überblick über die CFD-Software von Fluent erhalten Sie im Rahmen eines Informationstages am Rechenzentrum der Universität Karlsruhe am 12. Juli 2000. Das entsprechende

Anmeldeformular so wie eine Agenda finden Sie unter www.uni-karlsruhe.de/~FLUENT oder Sie senden eine E-Mail an info@fluent.de. Für einen kleinen Imbiss während der Veranstaltung ist gesorgt.
Dr. Paul Weber, Tel. -4035,
E-Mail: Paul.Weber@rz.uni-karlsruhe.de.



LES-Modellierung von Verbrennungsinstabilitäten in einem Vormischbrenner, Darstellung der Produktspezies

Programmpaket LINSOL Effiziente Lösung linearer Gleichungssysteme

Hartmut Häfner

Am Rechenzentrum wurde in der Projektgruppe "Numerikforschung für Supercomputer" Software entwickelt, die durch optimale Datenstrukturen die Eigenschaften moderner Rechnerarchitekturen von einer einzelnen Workstation bis zu einem Parallelrechner mit hundert Rechenknoten effizient ausnutzt. So entstanden in den letzten Jahren die Programmpakete FIDISOL, VECFEM und LINSOL, die inzwischen weltweit in mehr als 100 Installationen eingesetzt werden. Derzeit arbeitet die Projektgruppe an einem neuen Programmpaket namens FDEM und auch LINSOL wird weiterentwickelt.

Was macht LINSOL?

Linsol löst lineare Gleichungssysteme. Dabei ist das Programmpaket hauptsächlich zur Lösung von Gleichungssystemen mit großen, dünn besetzten Matrizen

entwickelt worden, kann aber genauso gut bei voll besetzten Matrizen angewandt werden. Durch den Einsatz geeigneter Datenstrukturen kann der zur Verfügung stehende Speicherplatz sehr effizient genutzt werden und so mit können sehr große Gleichungssysteme gelöst werden.

Da bei der Benutzung direkter Löser der Speicherbedarf während des Lösungsvorganges sehr stark ansteigt, werden in LINSOL hauptsächlich iterative Lösungsverfahren eingesetzt. Einsetzbar sind die folgenden von der CG-Methode (CG steht für Conjugate Gradients) abgeleiteten Verfahren: PRES20, BCG, BICO, BiCGSTAB, BiCGSTAB2, CGS, QMR, CGNE, ATPRES, GMERR und das klassische CG-Verfahren. Sollte es allerdings mit den erwähnten Methoden nicht klappen bzw. keine Konvergenz erreichbar sein, dann kann man einen für dünn besetzte Matrizen optimierten direkten Löser, der den Gauss-Algorithmus als Basisverfahren benutzt, zuschalten. Der direkte Löser kann dabei entweder als Präkonditionierer der iterativen Verfahren oder auch als eigenständiger Löser benutzt werden.

Zwei Benutzer-Schnittstellen

Das Programmpaket LINSOL hat insgesamt zwei Benutzer-Schnittstellen. Die erste ist eine sogenannte "stand-alone" Schnittstelle, bei der alle Informationen, die LINSOL benötigt, über Dateien zur Verfügung gestellt werden. Die Matrix kann im Harwell/Boeing- oder LINSOL-Dateiformat abgespeichert sein. Bei Benutzung des LINSOL-Dateiformats ist es möglich, eine in mehreren Dateien verteilt abgespeicherte Matrix parallel auf allen Prozessoren gleichzeitig einzulesen. Voraussetzung ist natürlich, dass die Anzahl der Dateien mit der Anzahl der benutzten Prozessoren übereinstimmt. Des Weiteren müssen die rechte Seite des linearen Gleichungssystems in einer Datei, die eventuell vorhandene Startlösung in einer Datei und eine Parameterdatei, die den Programmablauf von LINSOL steuert, dem Programm zur Verfügung gestellt werden.

Es ist auch möglich, mehrere lineare Gleichungssysteme in einem Programmablauf zu berechnen, indem man mehrere rechte Seiten in eine Datei und eventuell vorhandene Startlösungen in eine weitere Datei schreibt. Die Lösung bzw. die Lösungen werden wiederum in eine Datei geschrieben. In der Parameterdatei müssen die Namen der Dateien und der zugehörigen Verzeichnisse angegeben werden, welches Verfahren benutzt wird, ob der direkte Löser als Präkonditionierer oder als vollständiger Löser geschaltet wird, ob die Matrix normalisiert wird etc.

Die zweite Benutzer-Schnittstelle ist eine Fortran90-Schnittstelle und dient der Integration von LINSOL in ein Benutzerprogramm. Sie ermöglicht das Einbetten von LINSOL in Benutzerprogramme, die auf einer beliebigen Prozessorzahl laufen können.

Die wichtigsten Merkmale des Programmpakets LINSOL sind:

- Robustheit
- Portabilität
- Flexibilität
- und die effiziente Implementierung für Workstations, Vektor- und Parallelrechner

Robustheit

Robustheit wird im Wesentlichen durch zwei besondere Implementierungsmerkmale erreicht. Zum einen

lässt sich ein Polyalgorithmus einschalten, der aus vielen Iterationsverfahren das jeweils optimale Verfahren auswählt und automatisch bei Konvergenzverschlechterung auf ein anderes besser konvergierendes Verfahren umschaltet. Falls alle implementierten Verfahren nicht oder zu langsam konvergieren, lässt sich zum zweiten der direkte Löser als Präkonditionierer zuschalten. Dabei kann der Benutzer über zwei Parameter die Qualität der Präkonditionierung steuern. Je nach Wahl der beiden Parameter erhält man alle Abstufungen zwischen der vollständigen LU-Zerlegung, die sicher nach einem präkonditionierten Iterationsschritt zur Lösung führt, und einer schwachen Approximation der vollständigen Zerlegung, die unter Umständen keine Beschleunigung des Iterationsverfahren bewirkt.

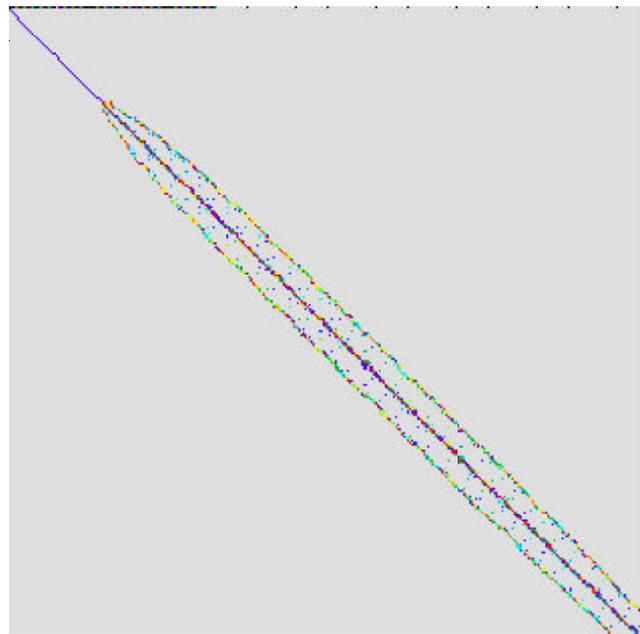
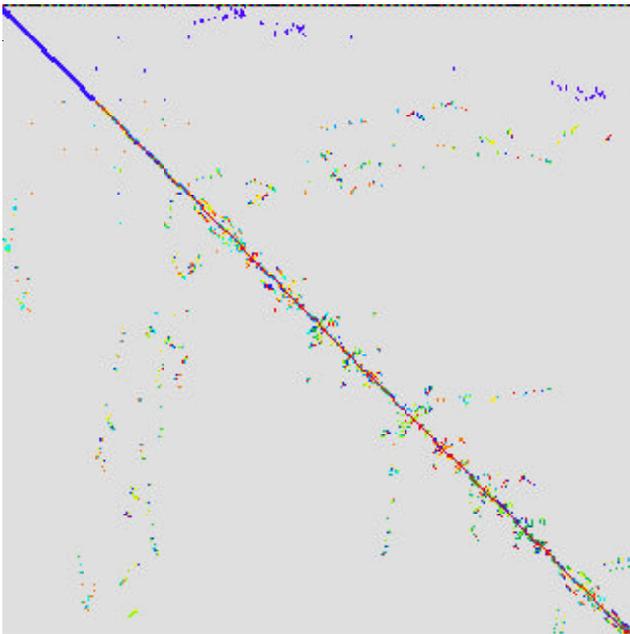
Wie oben bereits kurz erwähnt, darf man an dieser Stelle folgende, für alle direkten Löser geltende Regel nicht vergessen zu erwähnen: je besser die Approximation der Zerlegung ist, desto größer ist der Speicherbedarf. Dieser liegt üblicherweise um ein Vielfaches über dem Speicherbedarf der ursprünglichen Matrix, will man eine Beschleunigung der Konvergenz des iterativen Verfahrens erreichen!

Portabilität

Die Portabilität des Programmpakets wird durch das Einhalten des Fortran90-Standards und im besonderen auf Parallelrechnern durch die Benutzung des "message passing" Paradigma erreicht. Damit lässt sich LINSOL auf allen Parallelrechner typen-unabhängig da von, ob



Beleuchteter Innenraum mit Spiegelreflexionen berechnet mit Ray-Tracing-Software und LINSOL als integriertem Softwarepaket auf der IBM RS/6000 SP



Diskretisierungsmatrix eines CFD-Problems vor und nach der Bandbreitenoptimierung mittels LINSOL

essichumeinenParallelrechnermit“sharedmemory” oder“distributedmemory”handelt-einsetzen,aufdeneneineBibliothekfürdas“messagepassing”installiertist.DaLINSOLeineeigene,sehrschmale“messagepassing”Schnittstellebenutzt,könnenallebekannten“messagepassing”Bibliothekenwiez.B.MPI oderPVMalsdarunterliegendeSchichteingebundenwerden.

Flexibilität

FlexibilitätimHinblickaufdieIntegrationdesProgrammpaketsineineAnwendungwirderreichtdurchdieUnterstützungvielergebräuchlicherSpeichermusterfürdünnbesetzteMatrizen.Diewichtigsten sind:Diagonale,ZeileundSpalte-je weils voll undgepackt.Dabei ist es erlaubt,die Matrix des linearen Gleichungssystems aus mehreren Speichermustern zusammenzusetzen.Beispielsweise wäre es möglich,die Hauptdiagonale der Matrix über das Speichermuster“Hauptdiagonale”abzuspeichernundalleübrigenElemente über das Speichermuster“gepackte Zeile”,so dass eine dünn besetzte $n \times n$ -Matrix üblicherweise $n+1$ Datentypen (1 Datentyp des Speichermusters“volle Diagonale” und n Datentypen des Speichermusters“gepackte Zeile”) aufweist.

Effiziente Implementierung

Eine effiziente Implementierung für Workstations, Vektor- und Parallelrechner von LINSOL wird durch ein Bündel von Maßnahmen erreicht, das auf allen Ebenen der Programmentwicklung greift. Das grundlegende Prinzip, das über allen anderen Optimierungsstrategien steht, ist dabei die Trennung der Selektion und der Verarbeitung der Daten. Dieses Prinzip ist in LINSOL umgesetzt und führt zu einem kontinuierlichen Fluss der Daten durch die Arithmetikpipelines. Erreicht wird dadurch eine hohe Leistung auf Vektorrechnern und Workstations. Auf Workstations bzw. auf Rechnern, die einen Cache besitzen, lässt sich eine Cacheoptimierung zuschalten.

Das wichtigste Merkmal des Programmpakets für die Benutzung auf Parallelrechnern ist die Skalierbarkeit bezüglich des Zeitbedarfs und auch des Speicherverbrauchs. Weitere Optimierungsmaßnahmen betreffen die Benutzung des direkten Lösers; der (unvollständigen) Zerlegung der Matrix lässt sich ein Bandbreitenoptimierer vorschalten, der das Auffüllen der dünn besetzten Präkonditionierungsmatrix mit Einträgen während der Faktorisierung vermindert; bei Matrizen, die nicht symmetrisch sind und Zeilen aufweisen, die nur einen Eintrag haben, lässt sich zusätzlich eine

“pre-forward elimination” einschalten, die Einträge der Matrix mit Hilfe bekannter Lösungskomponenten des linearen Gleichungssystems auf die rechte Seite schafft und anschließend aus der Matrix entfernt.

<http://www.uni-karlsruhe.de/~LINSOL> zum Downloaden angeboten. Bis dahin können Sie das Programm paket über die unten genannte E-Mail-Adresse anfordern.

Public Domain Software

Das Programmpaket LINSOL ist Public Domain Software und wird demnächst auf der WWW-Seite

Hartmut Häfner, Tel. -4869,
E-Mail: haefner@rz.uni-karlsruhe.de

European IBM ACTC Workshop 2000

Nikolaus Geers

Nach dem im Herbst vergangenen Jahres der erste europäische Workshop des IBM Advanced Computing Technology Center (ACTC) gemeinsam vom ACTC und dem Rechenzentrum der Universität Karlsruhe veranstaltet worden war, fand der diesjährige ACTC Workshop vom 24. bis 26. Mai in Paris statt. Das IBM ACTC ist Teil des IBM T. J. Watson Research Center und unterstützt Anwender von IBM-Rechnern bei der Portierung und Optimierung von technisch-wissenschaftlichen Programmen. Dies beinhaltet unter anderem die Entwicklung von optimierten Kommunikationsbibliotheken und weiteren Tools zur Programmanalyse, die größtenteils von der Homepage des ACTC (<http://www.research.ibm.com/actc/index.html>) abgerufen werden können.

Im Mittelpunkt der sechs zweiten Workshops, der von über 120 Teilnehmern aus verschiedenen europäischen Ländern besucht wurde, stand die Diskussion über Programmentwicklungen für Parallelrechner mit SMP-basierten Einzelknoten, die Realisierung von Anwendungen mit hohen Ein-/Ausgabe-Anforderungen, die Portierung paralleler Applikationen sowie das Benchmarking von Parallelrechnern und PC-Clustern.

Entwicklung neuer Optimierungstools

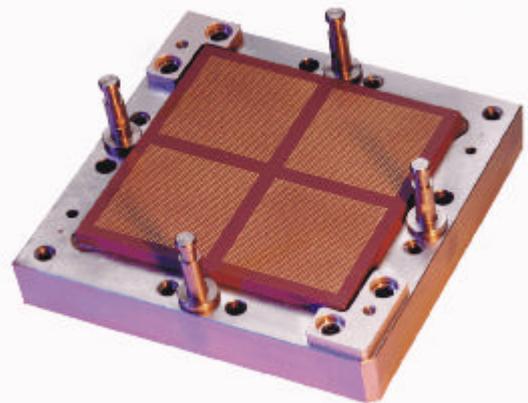
Des Weiteren berichtete das ACTC über neue Projekte bei der Entwicklung von Optimierungstools: Die Implementierung dieser Tools basiert auf einer dynamischen Instrumentierung der Anwendungsprogramme, so dass auch ohne erneutes Übersetzen oder Lin-

keninformationen über das Laufzeitverhalten gesammelt werden können. Erste Tools, die auf diesen Mechanismus aufsetzen, sind bereits verfügbar oder werden in Kooperation mit verschiedenen Forschungsgruppen derzeit entwickelt.

Für die Kommunikation in SMP-Systemen mit SMP-Knoten, wurde eine neue Kommunikationsbibliothek vorgestellt, die insbesondere bei der Nutzung kollektiver Kommunikationsoperationen eine deutliche Verbesserung sowohl in der Latenzzeit als auch in der Kommunikationsleistung bringt.

Power4-Prozessor - über 8 Gflops auf einem Chip

In ausführlichen Übersichtsvorträgen wurden die aktuellen POWER3-Prozessoren und die zukünftige POWER4-Prozessorfamilie sowie die darauf aufbau-



“Power4 Multi Chip Module, 8 Prozessoren mit jeweils mehr als 4 GFlops”

enden Systemarchitekturen vorgestellt. Die Systementwicklung ist zurzeit dadurch gekennzeichnet, dass die Leistungsfähigkeit der Prozessoren (d. h. die Taktrate) jährlich um ca. 60% steigt während die Geschwindigkeitssteigerung bei den Speicherchips mit ca. 10% pro Jahr deutlich geringer ausfällt. Um diese Diskrepanz auszugleichen, werden bei den derzeitigen POWER3-Systemen ein großer Level-2-Cache (8 MB) sowie weitere Funktionen wie Prefetching von Daten implementiert; d. h. das Laden der Daten aus dem Hauptspeicher wird bereits angesprochen, bevor die Daten überhaupt angesprochen werden. Beim zukünftigen POWER4-Prozessor ist davon auszugehen, dass zwei Prozessoren zusammen mit einem gemeinsamen Level-2-Cache auf einem Chip realisiert werden können, d. h. ein einzelner Chip wird bei einer Taktfrequenz von mehr als 1 GHz eine Leistung von über 8 GFlops liefern. Der Hauptspeicherzugriff wird über weitere Hierarchiestufen (Level-3-Cache) erfolgen, wobei ein wesentliches Ziel der Prozessorentwicklung die Bereitstellung möglichst hoher Bandbreiten (z. B. 100 GBps zwischen Datencache und Prozessor) und geringer Latenzzeiten ist (s. a. <http://www.rs6000.ibm.com/resource/features/1999/power4.html>).

Spitzenleistung nur bei Datenlokalität

Für die effiziente Nutzung dieser Prozessoren wird es deshalb immer wichtiger, verstärkt auf Datenlokalität

zu achten. Bereits heute sollte man bei der Programmierung nicht mehr davon ausgehen, dass alle Daten im Hauptspeicher mit gleicher Zugriffsgeschwindigkeit angesprochen werden können. Wichtig ist die Vereinbarung von Datenstrukturen, die den kontinuierlichen Zugriff auf benachbarte Daten (stride 1) ermöglichen, und die mehrfache Nutzung von Daten, die bereits vom Hauptspeicher in die Daten-Caches geladen wurden. Nur unter Beachtung dieser Prinzipien kann man erwarten, auch zukünftig bei der tatsächlich erreichten Rechnerleistung von der Steigerung der Spitzenleistung zu profitieren.

Einsatz von OpenMP

In mehreren Beiträgen wurde über Erfahrungen mit dem Einsatz von OpenMP bei der Parallelisierung innerhalb eines SMP-Systems berichtet. Diese Untersuchungen zeigen, dass die Parallelisierung auf einer sehr hohen Ebene innerhalb des Programms und nicht erst auf der Ebene der DO-Schleifen erfolgen sollte. Dies gewährleistet eine größere Entkopplung der einzelnen Threads und minimiert den konkurrierenden Zugriff auf gemeinsame nutzte Daten.

Weitere Informationen zu diesem Workshop, sowie Unterlagen zu den einzelnen Vorträgen können über die ACTC-Hompage (<http://www.research.ibm.com/actc/index.html>) abgerufen werden. Nikolaus Geers, Tel. -3755
E-Mail: geers@rz.uni-karlsruhe.de

Computational Science Architecture and Use of Shared and Distributed Memory Supercomputers

Prof. Dr. Willi Schönauer

English Block Lecture in July 2000

Background: Supercomputers are built by connecting vector pipelines or microprocessors by a communication network. The theoretical peak performance now is more than 1 TFLOPS (teraflops, 1E12 floating-point operations per second). These parallel computers are used for the numerical si-

mu lation in all technical and scientific areas: crash tests for automobiles, weather forecast, elementary particle physics, drug design etc. The progress in science and technology is essentially determined by this new "Computational Science".

An IBM RS/6000 SP and a Siemens/Fujitsu VPP300+5000 are installed at the Universität Karlsruhe (TH) and the Forschungszentrum Karlsruhe. At LRZ München a Hitachi SR8000 with more than 1 TFLOPS

is available for German scientists. You should therefore get acquainted with the usage of such supercomputers.

Scientific Supercomputing: Architecture and Use of Shared and Distributed Memory Supercomputers (in English)

(1637 + 1638, 2 + 2 SWS)

Date: Block lecture in the week
31.7. - 4.8.2000

Time: Mon. - Fri. 8:30 - 10:00, 10:30 - 12:00
Mon. - Tues. 14:30 - 16:00

Location: Seminarraum 217 in the Computing Center of the Universität Karlsruhe (TH), 2nd floor, building 20.21

Prof. Dr. Willi Schönauer/Hartmut Häfner:

Exercises

Time: Mon. 16:30 - 19:00 and further terms

Location: Seminarraum 217 and terminal room

Contents: The contents of the lecture and how to obtain the manuscript can be looked up at <http://www.uni-karlsruhe.de/~rz03/book/>.

It should be mentioned that there is an open-ended (handwritten) addendum to this basic lecture where new architectures and algorithms are published. It is accessible by the above URL.

Prerequisite for the exercises is the basic knowledge of UNIX and Fortran.

There is no necessity of registration for students of Karlsruhe University. External participants should send an e-mail. Information about the Computing Center is available at <http://www.rz.uni-karlsruhe.de/>. The next term will be 19. - 23.2.2001.

New chapters in the Addendum to “Scientific Supercomputing”

Prof. Dr. Willi Schönauer

New chapters are available in the Internet Version 1.2 of the Addendum to the basic lecture “Scientific Supercomputing”, see URL <http://www.uni-karlsruhe.de/~rz03/addendum/>.

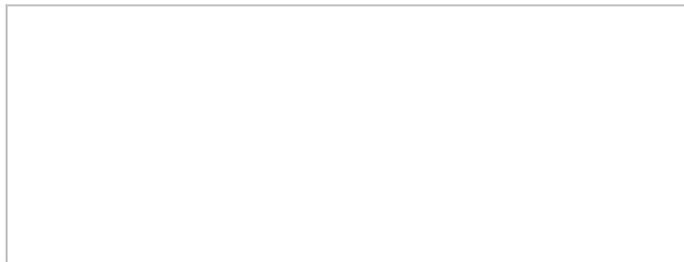
The three new Japanese Supercomputers are described and measurements are presented. Above all the concepts of pseudo vector processing (PVP) and of cooperating microprocessors (COMPAS) of the Hitachi SR8000 are discussed.

The following sections and chapters have been added:

- A1.4 Further Details of the SX-5
- A1.5 The SX-5e Model
- A11 The Fujitsu VPP5000
- A12 The Hitachi SR8000

It should be mentioned that the handwritten manuscript of the basic lecture will be deleted from the Internet on June 1, 2000. Then only the printed booklet is available (see the above URL). The Addendum with its changing actual information will remain only in handwritten form in the Internet.

Erste Ansprechpartner *auf einen Blick*



So erreichen Sie uns

Telefonvorwahl: +49 721/608-
Fax: +49 721/32550
E-Mail: Vorname.Nachname@rz.uni-karlsruhe.de

BIT8000 (Help Desk)

Tel. -8000, E-Mail: BIT8000@rz.uni-karlsruhe.de

Sekretariat

Tel. -3754, E-Mail: rz@uni-karlsruhe.de

Information

Tel. -4865, E-Mail: info@rz.uni-karlsruhe.de

MicroBIT-Hotline

Tel. -2997, E-Mail: microbit@rz.uni-karlsruhe.de

Anwendungen

Tel. -4031/4035, E-Mail: anwendung@rz.uni-karlsruhe.de

Netze

Tel. -2068/4030, E-Mail: netze@rz.uni-karlsruhe.de

UNIX

Tel. -4038/4039, E-Mail: unix@rz.uni-karlsruhe.de

Virus-Zentrum

Tel. 0721/9620122, E-Mail: virus@rz.uni-karlsruhe.de

Mailing-Listefür Internetmissbrauch

abuse@uni-karlsruhe.de

ASKnet AG (SW-Lizenzen)

Tel. 0721/964580, E-Mail: info@asknet.de

Zertifizierungsstelle (CA)

Tel. -7705, E-Mail: ca@uni-karlsruhe.de

PGP-Fingerprint

pub 1024/A70087D1 1999/01/21 CA Uni versität Karlsruhe
7A 27 96 52 D9 A8 C4 D4 36 B7 32 32 46 59 F5 BE

Öffentliche Rechnerzugänge

World Wide Web:

[http://www.rz.uni-karlsruhe.de/\(InformationssystemdesRechenzentrums der Universität Karlsruhe\)](http://www.rz.uni-karlsruhe.de/(InformationssystemdesRechenzentrums der Universität Karlsruhe))

[http://www.uni-karlsruhe.de/Uni/CA/\(Zertifizierungsstelle am Rechenzentrum der Uni versität Karlsruhe\)](http://www.uni-karlsruhe.de/Uni/CA/(Zertifizierungsstelle am Rechenzentrum der Uni versität Karlsruhe))

[http://www.ask.uni-karlsruhe.de\(Informationssystemder Akademischen Software Kooperation ASK\)](http://www.ask.uni-karlsruhe.de(Informationssystemder Akademischen Software Kooperation ASK))

Ftp:

ftp.rz.uni-karlsruhe.de; Benutzernummer: ftp(anonymerFtp-Server des Rechenzentrums)

ftp.ask.uni-karlsruhe.de; Benutzernummer: ftp(anonymerFtp-Server der ASK)