

Science on Cluster Computers 291. WE-Heraeus-Seminar

Clustercomputer gewinnen in den computergestützten Natur- und Ingenieurwissenschaften zunehmend an Bedeutung. Solche Beowulf-Systeme, preiswert aus PC-Komponenten aufgebaut und vernetzt, lassen sich kostengünstig unter Linux betreiben. Mittlerweile halten sich viele Anwender mit höchstem CPU-Zeitbedarf eigene Systeme, damit sie im boomenden Gebiet der Computersimulationen mithalten können.

Vor diesem Hintergrund trafen sich im Physikzentrum Bad Honnef vom 22. bis 24. August etwa 45 Vertreter aus Computational Science und Informatik zum 291. Heraeus-Seminar „Science on Cluster Computers“. Mit der für Deutschland erstmalig in dieser interdisziplinären Breite ausgerichteten Tagung wollen die Organisatoren, die als Physiker und Mathematiker das ALiCE-Cluster an der Universität Wuppertal betreiben, eine verstärkte Kooperation der Disziplinen anstoßen, zur Optimierung des Zusammenspiels von PCs und Netzwerk in Simulationen der Computational Science.

Dass Deutschland früh eine führende Rolle im angewandten Cluster-Computing eingenommen hat, wurde von Rednern führender deutscher Cluster-Sites wie Chemnitz (U. Hübner), Heidelberg (S. Lang), Paderborn (S. Blazy), Tübingen (P. Leinen) und Wuppertal (Th. Lippert) eindrucksvoll belegt. Als besondere Stärke der deutschen Cluster-Szene ist die Entwicklung der Kommunikationssoftware ParaStation (W. Tichy) zu bewerten, die inzwischen durch die ParTec AG (N. Eicker) vertrieben wird.

International beispielhaft ist das Engagement der US-Gitter-QCD in der SciDAC-Initiative des DOE, vorgestellt von C. Watson (Jefferson Lab), D. Holmgren (Fermilab), R. Brower (BU), S. Gottlieb (Indiana) und J. Negele (MIT). Im Rahmen von SciDAC werden in den USA bis Ende 2004 zwei 10-Teraflops-Cluster aufgebaut. Wie weit man Cluster für die QCD optimieren kann, wurde von M. Hasenbusch (DESY), Z. Sroczynski (Wuppertal), P. Coddington (Adelaide) und Z. Fodor (Budapest) demonstriert.

Interessante Pilotprojekte belegten die Anwendungsbreite der Technologie: Die Palette reichte dabei von der Festkörperphysik (M. Schreiber), über die Dynamik Schwarzer Löcher (R. Spurzem), Computational Chemistry (Th. Müller) bis hin zur medizinischen Bildgebung (S. Vollmar) und Simulation von Turbinen (V. Michelassi, Rom).

Th. Sterling (CALTEC), der Vater der Beowulf-Idee, sowie R. Gupta (LANL) boten den Teilnehmern faszinierende Ausblicke auf Petaflops-Simulationen zu Beginn der nächsten Dekade und verbanden dies mit der Aufforderung an Informatiker und Anwender, im Schulterschluss auf dieses Ziel hinzuarbeiten.

Die Organisatoren danken den Vortragenden für ihre hochkarätigen Präsentationen und allen Teilnehmern für ihre Diskussionsfreudigkeit, die im regen E-Mail-Austausch nachklingt. Ein herzliches Dankeschön geht

an die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, deren finanzielle Förderung dieses Treffen erst ermöglicht hat. Es ist deutlich geworden, dass das Treffen der Cluster-Avantgarde nicht das letzte dieser Art gewesen sein wird.

ANDREAS FROMMER, THOMAS LIPPERT,
KLAUS SCHILLING

Progress in Nonequilibrium Green's Functions 285. WE-Heraeus-Seminar

Hochtemperatur-Supraleitung, Urknall, Exzitonische Absorption in Mikroresonatoren, Coulomb-Explosion von Metallclustern, Leitfähigkeit von Nanotransistoren und organischen Strukturen, Suprafluidität von Kernmaterie, Inertialfusion und Partonen-Dynamik haben auf den ersten Blick nicht allzu viel gemeinsam. So mag die Wahrscheinlichkeit, die führenden Experten auf diesen Gebieten gleichzeitig anzutreffen, gegen null tendieren. Aber genau das konnte man vom 18.–22. August in Dresden auf dem 285. Heraeus-Seminar. Was die Teilnehmer vereinte, war die zentrale Rolle von Quanten-Transport-Prozessen unter wesentlichem Einfluss starker Korrelationen in all den genannten Vielteilchensystemen. Die Ähnlichkeit der grundlegenden physikalischen Probleme und der sich daraus ergebenden theoretischen Konzepte war für viele überraschend. Gerade die Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen (NGF) erweisen sich immer wieder als die am besten geeignete Methode, derart unterschiedliche komplexe Probleme anzupacken, systematisch Näherungen zu entwickeln, dabei aber gleichzeitig ein Höchstmaß an Konsistenz zu bewahren. Der fächerübergreifende Austausch war unkonventionell und äußerst stimulierend, genau wie auf der ersten derartigen Tagung 1999 in Rostock.

Besonderes Highlight waren die Beiträge der Pioniere der Theorie – Paul C. Martin (Harvard), Alex Abrikosov (Argonne) und Leonid Keldysh (Moskau). Hauptschwerpunkt war diesmal der Quantentransport in Halbleitern und Nanostrukturen mit Beiträgen von D. Ferry (Tempe), A.-P. Jauho (Lyngby), N. Horing (Stevens Tech) und R. Lake/D. Jovanovic (Riverside/Motorola). Besonders letztere demonstrierten, dass NGF längst nicht mehr nur auf simple Modellsysteme beschränkt sind, sondern sich inzwischen zum Marktführer in quantitativer und prediktiver Modellierung in der Nanotechnologie gemauert haben. Aus dem weiteren Programm seien hervorgehoben die Beiträge zur Halbleiteroptik (K. Henneberger, Rostock; F. Jahnke, Bremen) und R. Binder, Tucson), zu Hochenergiephysik (H. van Hees, Biellefeld; P. Danielewicz, Michigan), und Laserplasmen (M. Schlages, Greifswald). Besonders perspektivreich erscheint die Kombination von NGF mit anderen theoretischen und numerischen Methoden, wie zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie (P.-G. Reinhard, Erlangen, R. van Leeuwen, Groningen) oder Quanten-Monte-Carlo und Quanten-Molekulardynamik (M. Bonitz und V. Filinov, Moskau). Das gesamte

Programm, abstracts sowie Informationen zum Tagungs-Buch sind unter www.physik.uni-rostock.de/plasmen/mich/kbt02/kb02part.htm zu finden.

Ein besonderer Dank gebührt der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für ihre großzügige Förderung, die ergänzt wurde durch grants von der DFG und dem Office of Naval Research (USA). Als wenige Tage vor Seminarbeginn die Flutwellen Teile von Dresden (und das Tagungshotel) verwüsteten und auch der Verkehr nach Dresden zusammenbrach, wurden unbürokratisch zusätzliche Mittel bereitgestellt, die es den Organisatoren ermöglichten, umgehend einen neuen Tagungsort zu buchen und alle Kollegen (es gab nur eine Absage!) sicher – wenn auch z. T. auf Umwegen – nach Dresden zu bringen. Schließlich soll hier allen Teilnehmern für ihre Unerschrockenheit gedankt werden, wodurch wieder einmal eindrucksvoll bestätigt wurde, dass sich Physiker auch von widrigen Bedingungen nicht unterkriegen lassen.

MICHAEL BONITZ, ROSTOCK

Optical Methods in Atmospheric Analysis

286. WE-Heraeus-Seminar

Zum 286. WE-Heraeus-Seminar vom 14.–18. Oktober 2002 trafen sich im Physikzentrum Wissenschaftler aus Europa, Amerika und Asien, um sich mit dem Thema der atmosphärischen Diagnostik vertieft zu befassen. Anthropogene atmosphärische Veränderungen, wie beispielsweise Sommersmog, Wintersmog, der stratosphärische Ozonabbau sowie die globale Erwärmung verleihen der Thematik eine besondere Bedeutung, denn um solche Phänomene grundlegend zu verstehen und um verlässliche Vorhersagen treffen zu können, sind umfangreiche Modellrechnungen erforderlich. Diese sollten alle relevanten physikalischen und chemischen Prozesse innerhalb der Atmosphäre berücksichtigen. Dieses ist jedoch nur dann möglich, wenn die Modelle sich auf verlässliche, dreidimensional aufgelöste Langzeitbeobachtungen stützen können. Optische Verfahren liefern hierfür die besten Voraussetzungen.

Um die Bedeutung der atmosphärischen Diagnostik herauszustellen und um dem Seminar eine klare wissenschaftliche Basis zu verleihen, wurden zunächst die grundlegenden Aspekte der Atmosphärenchemie und -physik vorgestellt. Basierend darauf wurde erörtert, wie die Architektur atmosphärischer Modelle im lokalen, regionalen und globalen Maßstab aufgebaut ist.

Dann wurden lokale Sensoren präsentiert, die am Boden, vom Ballon aus, im hochfliegenden Forschungsflugzeug sowie vom Satelliten aus meteorologische Parameter, Spurengaskonzentrationen sowie Aerosolverteilungen erfassen. Der Forderung nach dreidimensional aufgelösten Messungen ist am ehesten mittels optischer Radarverfahren (LIDAR) zu genügen. Damit können routinemäßig Spurengase wie NO, NO₂, Ozon, SO₂, Benzol, Toluol, Methan usw. bei Empfindlichkeiten bis in den ppb-Bereich (10⁻⁹) nachgewiesen werden. Weiterhin lassen sich mittels LIDAR wichtige Aussagen über Windfelder, die Luftfeuchtigkeit und das Aerosol treffen. Bis dahin jedoch war es ein langer Weg, und

Prof. Dr. Andreas
Frommer, FB Mathe-
matik, U Wuppertal

Dr. Dr. Thomas Lip-
pert, FB Physik, U
Wuppertal

Prof. Dr. Klaus
Schilling, FB Physik,
U Wuppertal

Priv.-Doz. Dr.
Michael Bonitz, FB
Physik, Universität
Rostock,