

RESEARCH DESIGN AND METHODS–In Tai’s Model, the total area under a curve is computed by dividing the area under the curve between two designated values on the X-axis (abscissas) into small segments (rectangles and triangles) whose areas can be accurately calculated from their respective geometrical formulas. The total sum of these individual areas thus represents the total area under the curve. Validity of the model is established by comparing total areas obtained from this model to these same areas obtained from graphic method (less than +/- 0.4%). Other formulas widely applied by researchers under – or overestimated total area under a metabolic curve by a great margin.

RESULTS–Tai’s model proves to be able to 1) determine total area under a curve with precision; 2) calculate area with varied shapes that may or may not intercept on one or both X/Y axes; 3) estimate total area under a curve plotted against varied time intervals (abscissas), whereas other formulas only allow the same time interval; and 4) compare total areas of metabolic curves produced by different studies.

CONCLUSIONS–The Tai model allows flexibility in experimental conditions, which means, in the case of the glucose-response curve, samples can be taken with differing time intervals and total area under the curve can still be determined with precision.

## Quartl\* - Impressum

### Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüdte

### Redaktion:

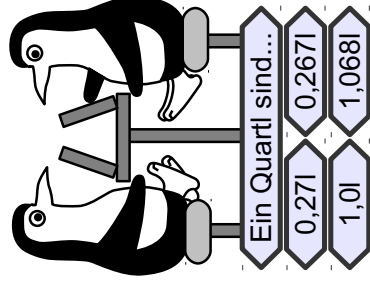
J. Daniel, C. Halfar, Dr. S. Zimmer  
Technische Universität München, Fakultät für Informatik  
Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München  
Tel./Fax: ++49-89-289 18630 / 18607

e-mail: halfar@in.tum.de, www: <http://www.5.in.tum.de/quartl>

**Redaktionsschluss** für die nächste Ausgabe: **28.2.2011**

\* Quartel : früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart : 1/4 Kanne = 0.27 l  
(Brockhaus Enzyklopädie 1972)



## Inhalt

Editorial	2
Free Shape Optimal Design of Structures	5
Zentralinstitut ZISC gegründet	14
European Multigrid Konferenz 2010	16
Ein Zuhause für den „SuperMUC“	18
Renkamele	23
Virtual Arabia Coding Days	25
Vox Populi, Vox Rindvieh	28
Es darf gebloggt werden...	30
Neues aus der Welt der Spitzenforschung	31

Das Quartl erhalten Sie online unter <http://www.5.in.tum.de/quartl/>



Das Quartl ist das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für  
Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern  
(KONWIHR) und der Bavarian Graduate School of Computational Engi-  
neering (BGCE)

## Editorial

Nicht vorenthalten möchte ich Ihnen, liebe Leserinnen und Leser, zunächst die Erklärung des Akronymys Alitalia, die mir ein Stuttgarter Kollege und treuer Quartl-Leser (nein, nicht der mit der Etymologie des Worts Quartl ...) im Nachlauf der letzten Quartl-Ausgabe zukommen ließ: „Was erwartest du – schließlich steht Alitalia für **Always Late In Take-off, Always Late In Arrival!**“ Dies noch als kleine, aber durchaus erhellende und erheiternde Nachlese.

Doch nun auf zu neuen Ufern! Eigentlich zählt die Daily Mail ja nicht zu meiner regelmäßigen Lektüre, doch wenn ein Mitarbeiter, durch einen dieser allseits beliebten Zwischenstopps in Heathrow mit der britischen Presse-landschaft konfrontiert, mir dann einen derartigen Leckerbissen mitbringt, wie er am 11. November unter der Rubrik „Life“ in der Daily Mail erschienen ist, dann muss man sich das einfach auf der Zunge zergehen lassen. An besagter Stelle findet sich eine Art Buchbesprechung, oder vielmehr einfach Auszüge aus dem 2010 erschienenen Buch „Universally Challenged“ von Wendy Roby. Auf den Punkt gebracht, beklagt das Werk die fortschreitende Verblödung der Briten, die sich beispielsweise in den desaströsen Antworten von Kandidatinnen und Kandidaten in der zunehmenden Flut von Quiz-Sendungen im Radio und im Fernsehen äußere. Nun ist uns allen klar, dass dies – wenn es denn überhaupt zutrifft – fürwahr kein Alleinstellungsmerkmal des befreundeten Volks von der Insel ist, sondern mindestens ebenso auf Germanen oder die Grande Nation zutrifft, aber Buch und Daily Mail machen nun mal – das mag den einen oder anderen ja schon etwas ungewöhnlich anmuten... – zunächst die Innenschau, bevor andere verunglimpft werden. Hier nun also, exklusiv für Quartl-Leser, ein paar Highlights – die alle übrigens mit Quellen-, sprich Show-Angabe, versehen sind. Und da das Leiben bekanntlich die besten Satiren schreibt, enthalten wir uns dabei jeden weiteren Kommentars und bringen die entwaffnenden Argumente von Wendy Roby schlicht und ergreifend in der Urtext-Ausgabe.

whole day course. It will be held by Prof. Jesper Ooppelstrup, who is Professor at the school of computer science and communication within the KTH in Stockholm.

The course will include lectures taught by Prof. Ooppelstrup and computer lab sessions (Matlab programming) given by Prof. Ooppelstrup and myself.

It is based on the book "Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems" by R.J. Leveque.

BGCE students can take this course for their additional scientific part, we will give 2.5 ECTS for participation.

Please visit also the course homepage at

<http://www10.informatik.uni-erlangen.de/Teaching/Courses/SS2010/NMHS/> for further information.

If you would like to take part in the course or have

further questions, please contact me.

Best regards,

Daniel Ritter

## Neues aus der Welt der Spitzenforschung

**Als Wissenschaftsjournal bemüht sich natürlich auch das Quartl darum, die absoluten Kracher der aktuellen Forschung kompakt aufzubreiten und zu präsentieren. Lesen Sie diesmal einen Kurzbeitrag zur numerischen Quadratur. Die Redaktion enthält sich jeden Kommentars und präsentiert statt dessen das Abstract der Arbeit von M. M. Tai<sup>1</sup>, erschienen 1994 in Diabetes Care, 1994 Oct;17(10):1223 im Originalwortlaut:**

„A mathematical model for the determination of total area under glucose tolerance and other metabolic curves.“

**OBJECTIVE**–To develop a mathematical model for the determination of total areas under curves from various metabolic studies.

<sup>1</sup>New York Obesity Research Center, St. Luke's-Roosevelt Hospital Center, New York, New York

Erst die Blamage, dass sie nicht für Berechnungen mit GPUs programmieren können, nein sie erhitzen auch noch Wasser, um es dann in den Kühlkreislauf zu leiten. \*kopfschüttel\*

#### Sonstiges:

"ohne Fuchsschwanz und auch nicht tiefergelegt. noch nicht einmal Ralleystreifen! Da bin ich mal gespannt, ob das was wird ohne die ganzen Keyfeatures."

Aufgrund der Faulheit des Autors hat dieser die zahlreichen grammatikalischen und orthographischen Ausschweifungen der Kommentare sowie die diversen verbalen Entgleisungen im Originalzustand belassen.

C. Riesinger

## Es darf gebloggt werden...

**Neu bei der BGCE: Blog courses made in Erlangen. Ob das ein neues Soft-Skill-Format ist?**

From: Daniel Ritter <daniel.ritter@informatik.uni-erlangen.de>  
 To: bgce\_stud@mailsccs.in.tum.de  
 Cc: bgce\_orga@mailsccs.in.tum.de, bgce\_memb@mailsccs.in.tum.de  
 Subject: Announcement Blog Course "Numerical Methods for Hyperbolic Systems"

Dear BGCE students and students of the KTH double master program,  
 as already mentioned on the Research Day last week, there will be a block course with the title "Numerical Methods for Hyperbolic Systems" at the ISS in Erlangen.  
 The course will take place from August 9th to 13th as a

Q: Of which hot drink is „cat“ an anagram? – A: Hot chocolate?

Q: What is the Italian word for „motorway“? – A: Espresso.

Q: The action of which Shakespeare play takes place between dusk on January 5 and dawn on January 6? – A: A Midsummer Night's Dream.

Q: Was the Tyrannosaurus Rex a carnivore or a herbivore? – A: No, it was a dinosaur!

Q: In science, what is botany the study of? – A: Bottoms.

Q: Name the German national airline! – A: The Luftwaffe.

Q: Which classical composer became deaf in later life: Ludwig van ...? – A: ... van Gogh.

Q: Name a famous bridge? – A: The bridge over troubled water.

Q: Do you know where Cambridge University is? – A: No, geography is not my strong point. – Q: But there's a clue in its title. A: Err ... Leicester?

Q: How many kings of England have been called Henry? – A: Well, I know Henry VIII – so three?

Q: What is the name of the primitive language used by the Ancient Egyptians and painted on walls? – A: Hydraulics?

Q: What was Hitler's first name? – A: Heil.

Q: In 1863, which American president gave the Gettysburg Address? – A: I don't know, it was before I was born.

Q: In the 1940s, which politician was responsible for the welfare state: William ...? – A: .... the Conqueror!

Q: Which British prime minister famously said „We have become a grandmother“? – A: John Major.

Q: Which jungle-swinging character clad only in a loincloth did Johnny Weissmuller play? – A: Jesus.

Q: Who is the only Marx brother that remained silent throughout all their films? – A: Karl.

Q: Name a game you can play in the bath. – A: Scuba diving.

Q: In which European country is Mount Etna? – A: Japan. – Q: I did say in which European country, so in case you didn't hear that, I can let you try again. – A: Err ... Mexico?

Q: What is the capital of Italy? – A: France. – Q: France is another country, try again. – A: Oh, Benidorm. – Q: Wrong, sorry. Let's try another question. In which country is the Parthenon? – A: Sorry, I don't know. – Q: Just guess a country, then. – A: Paris.

Q: On which street did Sherlock Holmes live? – ... silence ... Q: He makes bread. – A: Err ... – Q: He makes cakes ... – A: Kipling street?

Q: With whom did Britain go to war over the Falklands? – A: Err ... – Q: It's a South American country. – A: Iran.

Q: Name a domestic animal! – A: Leopard.

Q: Name something people believe in but cannot see! – A: Hitler.

Nun, das alles erinnert schon fatal an die beiden diesbezüglichen historischen Klassiker „Wo fand die Schlacht im Teutoburger Wald statt?“ und „Wie lange dauerte der dreißigjährige Krieg?“ Oder ist das jetzt zu gemein – so von wegen Nervosität, Lampenfieber und Blackout? Wohl kaum! Was ich mich aber schon immer wieder frage: Haben wir es hier wirklich mit einem fortschreitenden Verblödungsprozess zu tun, oder nimmt einfach der geistige Exhibitionismus über Mechanismen wie besagte Sendungen derart rasant zu, dass sich der Eindruck kollektiver Verblödung geradezu aufdrängt? Warum sollte der geistige Exhibitionismus denn auch zurückgehen? Der körperliche am Strand tut das ja auch nicht – da zeigen sich ja auch nicht nur die Ansehnlichsten unter der Sonne leicht geschürzt. Wahrlich nicht. Und kann man aus solchen erschütternden Anblicken kollektive Verfettung folgern? Wer weiß, vielleicht ja doch ...

Zum Abschluss noch eine ganz besondere Perle. Kürzlich erreichte folgende elektronische Post mein Sekretariat: „Guten Tag, mein Name ist *Ban Corina* und ich bin die persönliche Assistentin von Herrn Müller-Lüden-scheid (Name von der Redaktion geändert). Derzeit ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Super-Informatik (Name von der Redaktion ebenfalls geändert) an der TUM (Name von der Redaktion nicht geändert), sucht aber einen neuen Betreuer für seine Dissertation und damit eine neue Stelle als wissenschaftlicher Mitarbeiter. Wichtig dabei ist, dass eine Promotion auf dieser Stelle erwünscht oder zumindest möglich ist. Können Sie

„Das heißt, da subventionieren mal wieder alle bundesweiten Steuerzahler ein Projekt in Bayern. Sozusagen der Soli oder Länderfinanzausgleich unter der öffentlichen Wahrnehmungsschwelle. Steht in der PM auch, was da berechnet wird, oder werden die über 100 Mio. einfach für ein bisschen 'Forschung' verheizt?“

„-.-.....gefragt werden wir natürlich nicht...“

### Vergabep Praxis:

„Daher scheint es mir hier so als ob man aus irgend einem Grund unbedingt der IBM das Geld in den Arsch blasen wollte. Es fehlt wohl der Mut.“

„Sorry, aber ich unterstelle den Chinesischen Entscheidern hier einiges mehr an Kompetenz als unseren 'Experten'. In China hat man zumindest das Gefühl, dass die Regierung ein Ziel verfolgt, dass das Land voranbringt.“

„Die Beschränkung auf XEON Prozessoren dürfte die Kosten für die realisierte Rechenleistung noch dazu drastisch in die Höhe treiben, sprich bei Verwendung von GPGPUs hätte man für das gleiche Geld deutlich höhere Rechenleistungen realisieren können.“

„Also ich persönlich rechne nur noch auf GPU. die CPU verkommt zum reinen Leitwerk“

„Selbst 'oma krauses garagenHPC solution' kommt heute mit mindestens 4 GPUS“

### Heißwasserkühlung:

„Oh man wie peinlich sind denn die Münchener.“

System von elf Rechnern mit insgesamt 21 Grafikkarten und somit war unser Ziel klar: Hier muss unsere Anwendung laufen.

Die folgenden zwei Tage waren neben der Präsentation unserer Arbeit vor den Interessierten der KAUST und Diskussionen darüber bestimmt, wie man am besten unter Verwendung trigonometrischer Funktionen und ein wenig Zauberei drei (!) linear unabhängige Punkte in einer Fläche bestimmt, wenn man nur die Rotationswinkel um zwei Achsen kennt. Doch dank unserem streng interdisziplinären Ansatz führten Ingenieurwesen, Mathematik und Informatik zum Ziel. Pünktlich zum Abschluss unseres letzten Tages in Saudi-Arabien konnten wir unser Werk auch auf der NexCAVE betrachten. Zufrieden mit unserem Tagewerk machten wir uns dann zurück auf den Weg zum Flughafen, nicht jedoch ohne in Jeddah die Spezialitäten der einheimischen Küche zu genießen und bei Wasserpfeife, Saudi Champagne und Hummus unseren letzten Abend ausklingen zu lassen. Satt und zufrieden saßen wir dann am Flughafen, und der eine oder andere fragt sich schon, wann wir wohl das nächste Mal die Sonne über dem roten Meer untergehen sehen.

V. Varduhn

## Vox Populi, Vox Rindvieh

**Was Facebook für den Durchschnittsjugendlichen ist, ist das Heise Online-Forum für den Informatiker: Ein schier unerschöpflicher Quell an Unterhaltung. So auch einige der Leserkommentare zur Bekanntgabe, dass IBM den neuen SuperMUC bauen wird.**

### Kosten:

"Das Ziel besteht also nicht darin für das Geld - des Steuerzahler - das leistungsfähigste System zu bekommen? Dann ist es also gezielte Subvention der US Industrie."

*mir da helfen? gez. Corina Ban – Strandschicht persönliche virtuelle Assistenten.“ Ja du heiliger Strohsack, was ist das jetzt wieder für ein Social-Network-Second-Life-Web7.8-Ubiquitous-Blödsinn? Aber vielleicht wäre ja das die passende Antwort: „Guten Tag, mein Name ist Hein Blöd, und ich bin der persönliche Assistent von Professor Bungartz. Er sucht momentan keine neuen Mitarbeiter, aber wenn, dann wäre es nicht nur möglich, sondern in hohem Maße erwünscht, dass Kandidatinnen und Kandidaten ihr Anliegen selbst vortragen und keine – realen oder virtuellen – Assistentinnen vorschicken. Ihnen ist folglich nicht zu helfen – in dieser Sache nicht und überhaupt schon gleich gar nicht. gez. Hein Blöd – Quartl persönliche virtuelle Assistenten.“*

Doch nun viel Spaß mit dem neuen Quartl, und allen einen guten Start ins neue Jahr 2011!

H.-J. Bungartz

## Free Shape Optimal Design of Structures

Actual trends in numerical shape optimal design of structures deal with the handling of very large dimensions of design space. The goal is to allow as much design freedom as possible while considerably reducing the modelling effort. As a consequence, several technical problems have to be solved to get procedures which are robust, easy to use and which can handle many design parameters efficiently. The paper briefly discusses several of the most important aspects in this context and presents many illustrative examples which show typical applications for the design of light weight shell and membrane structures.

### 1. Introduction

Shape optimal design is a classical field of structural optimization. Applied to the design of free form shells and membranes or, more generally, light weight structures, it is of big importance in architecture, civil engineering or various applications of industrial metallic or composite shells as e.g. in automotive or aerospace industries [1, 2, 3]. In the “old“ days of the pre-

computer age optimal shapes had been found by experiments such as inverted hanging models or soap film experiments. Still, those shapes are of great importance for practical design as they define structures of minimal amount of bending which, in turn, are as stiff as possible. As a consequence, “stiffness” is one of the most important design criteria one can think of. The methods discussed in the sequel refer to this design criterion in various ways.

A standard approach of optimal shape design is to discretize the structure and to use geometrical discretization parameters as design variables, e.g. nodal coordinates. As optimization is a mathematical inverse problem it exhibits typical pathological properties which in particular become obvious or even dominant if the number of design parameters becomes large. In particular, one has to deal with questions like irrelevant degrees of freedom tangential to the surface, highly non-convex design spaces, and mesh dependency, just to mention the most important. The state-of-the-art answer to those problems is to use CAGD methods for the discretization of geometry: The success of that approach, however, is a consequence of the reduced number of design parameters rather than a consequent elimination of the source of deficiencies. In other words, if the number of CAGD parameters used for structural optimization is increased, the pathological properties become obvious, again.

If geometrical parameters of a fine discretization are used, as e.g. the coordinates of a finite element mesh, strategies have to be developed to stabilize the original deficiencies of the inverse problem.

## 2. Shape Control

Consider a discretized solid body as shown in Fig. 1. It is obviously clear that moving a surface node will modify the body’s shape only if it is moved in normal direction  $n$ . In contrast, movements along the surface tangents  $t_1$  and  $t_2$  will affect the mesh but not the shape. Consequently, movements of discretization nodes are distinguished to be either “shape relevant” or shape “irrelevant”. In turn, there are two or three shape relevant move directions at edges or vertices, respectively. Modifications of nodes inside the body are

rungs-Hardware. Im Vorfeld hatte unsere Gruppe bereits ihre verschiedenen Applikationen wie das Terrain-Rendering, die Verarbeitung der Gebäude- und Infrastrukturdaten oder die Kopplung der Tracking-Geräte an die Visualisierung vorbereitet – und da stand sie nun, die erwartete Zielhardware. Ein Konglomerat von Grafikkarten, 3D-Monitoren, Tracking-Systemen, Polarisationsbrillen und Grafikklustern, die auch jedem noch so nüchternen Naturwissenschaftler das Lächeln der Technikbegeisterung aufs Gesicht zauberte.



Besonderes Interesse erregte bei dem jungen Team die NexCAVE und die große PowerWall. Die PowerWall besteht aus einer Aufteilung von zehn mal vier Monitoren und damit einer Fläche von ungefähr 16 Quadratmetern, jeweils vier Monitore werden von einem Rechner mit zwei Grafikkarten gesteuert, und so machten wir uns gleich an die Portierung unserer mitgebrachten Software.

Bei der NexCAVE handelt es sich um den Prototypen einer neuen Generation von immersiven Umgebungen, bei dem die Monitore mit einem Versatz von jeweils  $36^\circ$  um die vertikale Achse und  $20^\circ$  um die horizontale Achse in drei Reihen und sieben Spalten so angeordnet sind, dass sich die Normale der Monitore im Standpunkt des Benutzers treffen. Gefüttert wird dieses

gekommen am nächsten Morgen zum Campus in Thuwal auf. Der eine oder andere nutzte die etwa einstündige Fahrt, um ein wenig Schlaf nachzuholen, der bedingt durch das zweieinhalbstündige Procedere beim Einchecken ins Hotel am Vorabend und die pünktliche Abfahrt des Busses zum Campus um 7:00 Uhr etwas zu kurz gekommen war.



Die „Coding-Gruppe“

Als wir dann auch noch die beiden Sicherheitsringe auf dem Weg zum Campus durchquert und dabei das ein oder andere Mal die Pässe gezückt hatten, waren wir auch schon angekommen. Auch wenn wohl jeder von uns bereits die Bilder der KAUST zuvor gesehen hatte und sich mit großen Erwartungen auf den Weg gemacht hat, ist der erste Eindruck von der Architektur und Größe des gesamten Areals überwältigend. Empfangen von Jens Schneider, unserem TUM-PostDoc vor Ort, brachen wir zu einer Tour über den Campus auf und erlebten uns das gesamte Areal.

Nun waren wir aber nicht (nur) zum Sightseeing nach Saudi-Arabien gekommen, sondern um endlich Hand anzulegen an die vorhandene Visualisie-

shape irrelevant in all three dimensions. It is intuitively clear that if a design parameter is linked to a shape irrelevant direction the optimization problem will be singular with respect to that parameter. As for several reasons that kind of parameters cannot be eliminated, instead, the problem formulation must be enhanced by additional stabilization terms.

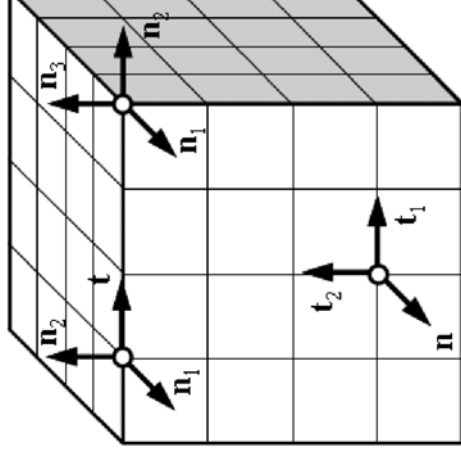


Fig. 1: Surface characteristics of a solid body.

### 3. Minimal Surfaces

As it is well known the mechanical analogy to the geometrical definition of minimal surfaces is the equilibrium shape of a surface stress field of given constant magnitude (soap film analogy). The principle of virtual work applies in terms of prescribed Cauchy surface stresses  $\sigma$ , derivatives of virtual displacements  $u$  and additional surface loads  $q$  such as pressure. Thickness  $t$  is assumed to remain constant during deformation.

Consequently, if the problem is discretized with respect to all three spatial coordinates of surface nodes it appears that the resulting system of equations is singular with respect to the shape irrelevant degrees of freedom. Typically, they cannot be eliminated because the discretization mesh must tangentially

be adapted if the edges are flexible. A typical application is form finding of textile membranes supported by edge cables.

The problem can be reformulated in terms of 2nd Piola Kirchhoff stresses  $\mathbf{S}$  and the deformation gradient  $\mathbf{F}$  which refers to appropriate reference geometries.

If, now,  $\mathbf{S}$  is prescribed instead of  $\sigma$  the system of equation appears to be non-singular and can be solved. The reason is that  $\mathbf{S}$  refers to the undeformed reference geometry. Of course, the solution differs from the true minimal surface. Repeating the procedure with adapted reference geometry the solutions will converge to the true solution. That's why the method is called Updated Reference Strategy, URS. Irrelevant degrees of freedom are stabilized and element shape can be controlled by proper choice of the reference base vectors. Also, anisotropic stress fields can be prescribed as it is the case in many practical applications. Reducing URS to cable nets leads to the force density method which is well established for the design of pre-stressed cable nets [4, 5, 6].

#### 4. Plateau regularization; tangential mesh control

URS can be generalized to control mesh quality on any surface other than minimal surfaces. Now, an artificial surface stress field  $\mathbf{S}$  is assumed which now is referring to the shape irrelevant degrees of freedom only. All normal directions, Fig. 1, are assumed to be fixed for this artificial loading [7].

#### 5. Normal mesh control; shape derivative

As a consequence of the inverse nature of optimization many problems appear to be highly non-convex with respect to shape relevant parameters. Without further modifications optimization strategies converge to arbitrary, highly oscillating solutions depending on the choice of initial values and algorithmic constants. Furthermore, shape oscillations which originally are physically explained may lead to severely distorted meshes which then create additional spurious locking effects and, therefore, wrong results. As an example, think of the non-unique problem of how to create stiffening beads in thin metal plates.

As a recipe against this effect the function derivatives with respect to sha-

Zielgruppe waren primär die Mitarbeiter des KSL (KAUST Supercomputing Laboratory), die auch einige ihrer „most popular“ Anwendungen mitgebracht hatten, wie sie denn auf der Shaheen laufen. Shaheen ist der KAUST Supercomputer, eine BlueGene/P-Installation, die auf der aktuellen Top 500-Liste immerhin immer noch einen respektablen 34ten Platz belegt. Der Name bezeichnet eigentlich einen arabischen Falken – selbstredend den schnellsten seiner Gattung. Die Gruppe war klein, aber dafür war das Arbeiten produktiv, und geprägt von ganz konkreten Fragestellungen und Problemen, wie sie bei der Betreuung und Verwendung massiv paralleler Applikationen auftreten.

Neben der Kursarbeit gab es natürlich auch wieder viele interessante Gespräche, die Möglichkeit (für viele das erste Mal), den beeindruckenden Campus zu besichtigen – hier kam der Gruppe zu Hilfe, dass diesen Sommer vier KAUST-Studenten eine Zeit in München verbracht hatten und diese sich sofort bereit erklärten, eine Führung „from a student's point of view“ zu geben – und dann hatten wir am Abend auch noch die Möglichkeit, zwei richtig nette Ausflüge an die romantische Strandpromenade und in die frisch renovierte Altstadt von Jeddah zu unternehmen.

T. Weinzierl

## Virtual Arabia Coding Days

Am Freitag, dem 3. Dezember war es nun soweit, und eine Gruppe von zehn Wissenschaftlern der TUM (Alin Murarasu (Prof. Bode), Marc Treib (Prof. Westermann), Amal Benzina, Marcus Tönnis (Prof. Klincker), Gerrit Buse, Daniel Butnaru (Prof. Bungartz), Jérôme Frisch, Ralf Peter Mundani, Vasco Varduhn (Prof. Rank)) brach zum ersten Mal zur Reise an die King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) auf. Die Vorhut (Dr. Weinzierl) war schon vor Ort, die Nachhut (Prof. Bungartz) noch in Garching bei der Arbeit.

Weder Schnee, Eis, ausgefallene Flüge noch Wartelistenplätze für die Eratzmaschine konnten uns aufhalten, und so brachen wir, just in Jeddah an-



Man beachte die geballte Ansammlung von Kompetenz und Nachnamen, die mit W beginnen! Kerninhalt des Kurses war das Programm, wie es im Rahmen diverser VI-HPS (Virtual Institute – High Productivity Supercomputing) Veranstaltungen schon mehrfach durchgeführt worden ist: Zunächst wurde eine kurze Beschreibung der Programme und der zugehörigen Grundlagen gegeben, um dann die Werkzeuge direkt anhand von Applikationen, die die Teilnehmer mitbringen konnten, zu testen.



Dr. Josef Weidendorfer inspiziert die fachmännisch durchgeführte LAN-Verkabelung in der Innenstadt von Jeddah

pe relevant parameters must be filtered within a certain diameter. Choices of diameter and regularizing filter function are design decisions and intrinsic part of problem modelling. Usually, no natural principle exists which may guide in that regard.

Smoothness is further improved if first order sensitivity data or even higher derivatives (if available) are filtered. Even simple hat functions on a radial basis as filter function are successful. Considering discretized problems sensitivity data at all nodes within the filter radius has to be considered. Now,  $D_i$  is the value of the filter function at node  $i$  within the filter radius and sensitivity at a certain node is modified with respect to all neighbouring nodes within the filter radius.

### 6. Adjoint sensitivity analysis

In principle, the coordinates of all nodes of a finite element model are candidates to be design parameters. Consequently, the dimension of the optimization problem is very large. It is straight forward to reduce numerical effort and, therefore, to apply adjoint methods to determine system sensitivity data as prerequisite for gradient based solution methods. It appears that simple descent methods are very robust and effective.

### 7. Semianalytical sensitivity analysis

A typical bottleneck in sensitivity analysis is the effort to get derivatives of element stiffness matrices with respect to design parameters  $s$ . In particular, for sophisticated elements as e.g. shell elements the straight forward development of the chain rule results is cumbersome and error prone. Also, evaluating all the additional terms generated by the chain rule in total takes more time than evaluating the element stiffness matrix itself. Therefore, it is effective and efficient in terms of coding as well as execution to consider finite difference approximations for the element stiffness derivatives. However, additional covariant terms have to be considered explicitly as derivatives with respect to geometrical parameters have to be taken. Those terms are identified by the rigid body rotation (RBR) test. Basic research in this direction had been undertaken by Mijenek, Lund and van Keulen which has been consolidated by own results [8].

## 8. Illustrative examples

### 8.1. Pre-stressed surfaces

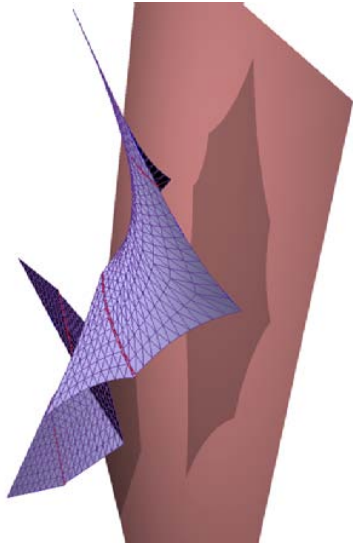


Fig. 2: “Bat Wing” form finding of hybrid structure: Isotropic surface stress, edge cables, spokes in compression and bending

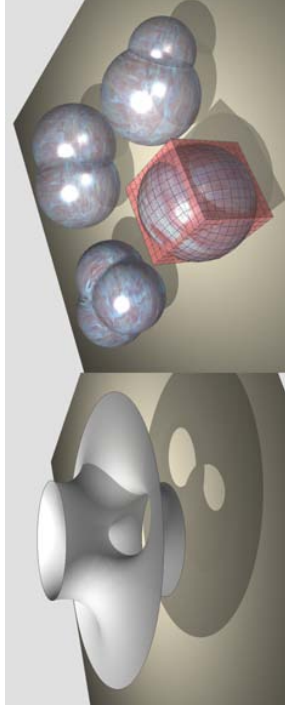


Fig. 3: Form finding of minimal surfaces and ideal spherical soap bubbles

These examples, Figs. 2-3, present the direct application of URS for the design of pre-stressed surfaces due to isotropic (minimal surfaces) and anisotropic surface stresses. Note that even ideal minimal surfaces can easily be determined which is a challenge for many available structural form finding

## Rennkamele

Kein Quartl ohne KAUST. Diesmal geht es ausschließlich um die Geschwindigkeit, und zwar die Geschwindigkeit (Performance) von Applikationen auf KAUSTs Supercomputer Shaheen. Im Rahmen eines Performance-Analysis Workshops Anfang November sind einige wackere Streiter gen Saudi-Arabien aufgebrochen, um Werkzeuge und Methoden der Performance-Analyse vorzustellen. Apropos Shaheen – der Begriff Rennfalke wäre natürlich für den Titel viel passender gewesen, aber wer kann sich darunter schon etwas vorstellen?

Über Allerheiligen sind die Herren Bungartz, Gerndt, Weber, Weidendorfer, Weinzierl, Wolf und Wylie an die King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) geflogen, um einen Performance-Analysis Kurs zu halten und insbesondere die Werkzeuge KCachegrind, Periscope, Scalasca und Vampir vorzustellen.



Fachmännische Begutachtung der diversen Sportangebote

die Forscher am besten verstehen, wenn sie in räumlichen Szenen dargestellt werden. Bereits jetzt ist das LRZ führend darin, komplexe Simulationen auf Supercomputern nicht nur darzustellen, sondern auch interaktiv zu steuern.

**Revolutionäres Kühlkonzept**

Revolutionär ist das neue Kühlkonzept. Die aktiven Komponenten wie z.B. Prozessoren und Memory werden unmittelbar mit Wasser gekühlt, das über vierzig Grad warm sein darf. Diese „Hochtemperaturflüssigkeitskühlung“ und eine hochinnovative Systemsoftware zur energieeffizienten Leistungssteuerung ermöglichen es, den Anstieg des Energieaufwands und damit der Betriebskosten so gering wie möglich zu halten und darüber hinaus alle LRZ-Gebäude mit der Abwärme des Rechners zu heizen. „SuperMUC steht für unerreichte Energieeffizienz im Sinne des Green Computing und für Spitzenleistung in der Rechenkapazität durch massive Parallelität der universell einsetzbaren Multicore-Prozessoren“, hob Prof. Bode hervor.

**133 Millionen Euro investieren Bund und Bayern gemeinsam**

Die Investitions- und Betriebskosten einschließlich der Stromkosten für den SuperMUC werden 83 Mio. Euro betragen, die das Land Bayern und der Bund zur Hälfte finanzieren, ebenso wie die 50 Mio. Euro für die bereits laufende Gebäudeerweiterung des LRZ. Darüber hinaus fördert Bayern weitere begleitende Projekte wie z.B. das Bayerische Kompetenznetz für Wissenschaftlich-Technisches Höchstleistungsrechnen KONWIHR mit seinen mehr als 25 überregionalen Anwendungen. Wissenschaftsminister Dr. Wolfgang Heubisch bezeichnete den SuperMUC als Investition in die Zukunft: „Leistungsfähige Rechner und Software sind heute der Schlüssel für wissenschaftliche und technologische Konkurrenzfähigkeit. Das Leibniz-Rechenzentrum in Garching wird mit dem neuen Höchstleistungsrechner zum Vorreiter einer energieoptimierten Computertechnik“.

Mehr Informationen und Bilder finden Sie auf den Webseiten des LRZ:

<http://www.lrz.de/presse/ereignisse/supermuc-vertrag-2010-10-18/>  
<http://www.lrz.de/presse/ereignisse/supermuc-vertrag-2010-12-13/>.

L. Palm

methods. The implemented procedure is able to treat form finding under additional effects as there are additional surface loads (e.g. pressure), interior edge cables (needs additional formulation of constraints on cable length) and consideration of stiffening members in bending and compression (kind of tensegrity structures).

For further information refer to [www.membranes24.com](http://www.membranes24.com)

*8.2. Bead design of plates and shells for single loads*

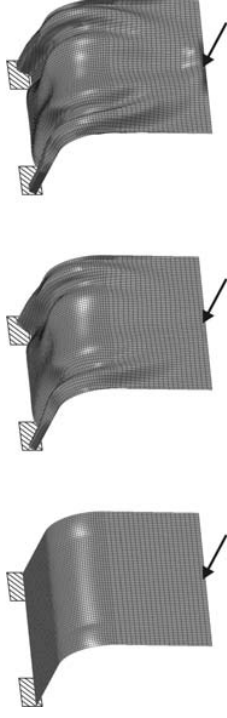


Fig. 4: Shape optimization of a cantilever shell

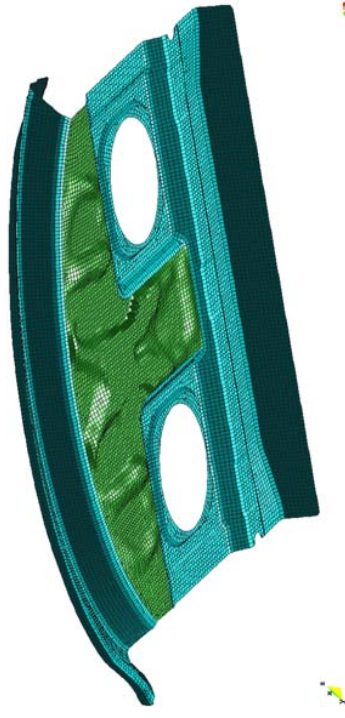


Fig. 5: Bead optimization of a thin metal sheet for the automotive industry.

A bend cantilever made of a thin (metal) sheet is loaded as shown, Fig. 4. A filter radius as large as the width of support is used. The model consists

of appr. 5.000 shape variables. The optimal shape (most right) is reached after 19 iteration steps. Fig. 5 shows the result of a joint project together with Adam Opel GmbH. The optimal distribution of beads has been determined to maximize the five lowest eigen-frequencies of a thin metal sheet. The number of iterations appears always to be not more than 40 for every problem size.

### 8.3. Optimal design of a pressure bulkhead

This example demonstrates how the different techniques of form finding and shape optimization can be combined to find suitable best solutions. It is motivated by joint work together with EADS regarding oval airplane fuselages as for the new generations of Airbus aeroplanes. We are dealing with an oval bulkhead under pressure, a typical structure as it is used as closure of pressurized fuselages, Fig. 6. An actual research project is dealing with the question of directly including structural stability during optimization.

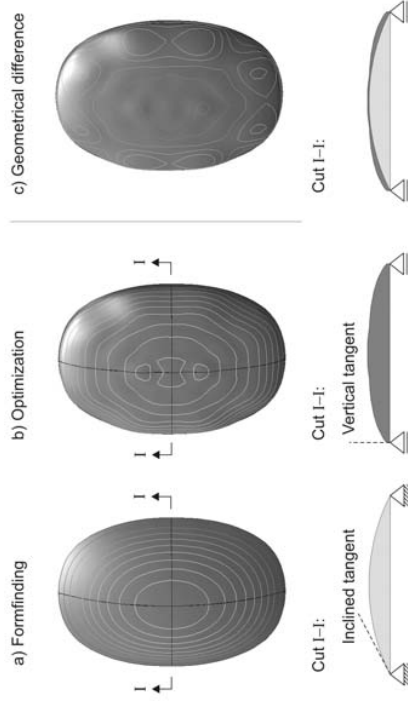


Fig. 6: Two stage optimal design of a pressure bulk head

### 8.4. Norwegian pavillon at EXPO 2010, Shanghai

This example shows the application of the URS technique in architecture



Prof. Arndt Bode und Martin Jetter mit einem Prototypen für ein Bauteil des SuperMUC

### Richtfest am LRZ

Staatsminister Herrmann dankte allen am Bau Beteiligten für „die gelungene Operation am offenen Herzen“, denn der derzeit laufende Höchstleistungsrechner muss auch während der Erweiterung des Rechnergebäudes in Betrieb bleiben. Lediglich für die Umschaltung von der bisherigen Stromversorgung auf eine für den SuperMUC ausgelegte, stärkere werden kurze Abschaltungen nötig sein. Auch Prof. Bode, Leiter des LRZ, dankte allen am Bau Beteiligten, „von der Bauverwaltung über die Architekten, die am Bau tätigen Mitarbeiter bis hin zu allen beteiligten Institutionen und Firmen. Sie sind heute die Hauptpersonen und Ihnen gebührt unser besonderer Dank für ihre erfolgreiche Arbeit.“ Nur zwei Jahre vergingen für Planung und Bau bis zum Richtfest, für ein derart anspruchsvolles Vorhaben ist dies eine sehr kurze Zeit. Nicht nur der markante „Rechnerwürfel“ wird erweitert: Es entstehen auch ein neues Gebäude für weitere Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter sowie ein Visualisierungszentrum, in dem komplexe Rechenergebnisse vollständig dreidimensional und begehbar dargestellt werden können. Die gigantische Menge Zahlen, die heutige Supercomputer erzeugen, können



Prof. Bode und Innenminister Herrmann unter dem Richtkranz



Staatsminister Dr. Wolfgang Heubisch, Prof. Dr. Arndt Bode, LRZ, Martin Jetter, IBM, Andreas Pflieger, IBM, Prof. Dr. Dietmar Willoweit, Präsident der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (v.l.n.r.).

and civil engineering for the form finding of the roof for the Norwegian pavilion at the EXPO 2010 in Shanghai, Fig. 7, [9].



Fig. 7: The roof of the Norwegian pavilion at 2010 EXPO, Shanghai: Application of URS.

## Literatur

- [1] K.-U. Bletzinger, M. Firl, J. Linhard, R. Wüchner, Optimal shapes of mechanically motivated surfaces, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199 (2010), 324-333.
- [2] K.-U. Bletzinger, R. Wüchner, F. Daoud, N. Camprubi. Computational methods for form finding and optimization of shells and membranes. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.* 194 (2005) 3438-3452.
- [3] J. Linhard, R. Wüchner, K.-U. Bletzinger, „Upgrading“ membranes to shells – The CEG rotation free shell element and its application in structural analysis, *Finite Elements in Analysis and Design* 44 (2007) 63-74.
- [4] K.-U. Bletzinger, E. Ramm, A general finite element approach to the form finding of tensile structures by the updated reference strategy, *Int. Journal of space structures*, 14 (1999) 131-146.

- [5] R. Wüchner, K.-U. Bletzinger. Stress-adapted numerical form finding of prestressed surfaces by the updated reference strategy. *Int. J. Numer. Methods Engng.* 64 (2005) 143-166.
- [6] K. Linkwitz, Formfinding by the Direct Approach and pertinent strategies for the conceptual design of prestressed and hanging structures, *Int. Journal of Space Structures* 14 (1999) 73-88.
- [7] R. Wüchner, M. Firl, J. Linhard, K.-U. Bletzinger, Plateau regularization method for structural shape optimization and geometric mesh control, *PAMM*, 8, (2008), 10359-10360.
- [8] K.-U. Bletzinger, M. Firl, F. Daoud, Approximation of derivatives in semi-analytical structural optimization, *Comp. & Struct.* 86, (2008), 1404-1416.
- [9] J. Lienhard, R. Abrahamsen, S. Schoene, M. Soto, J. Knippers, *The Norwegian Pavilion at the Expo Shanghai 2010*, IASS conference, Shanghai, 2010.

K.-U. Bletzinger, M. Firl, J. Linhard, R. Wüchner

## Gründung und Einsetzung des Zentralinstituts für wissenschaftliches Rechnen in Erlangen

Mit dem Beginn des Neuen Jahres hat an der Universität Erlangen-Nürnberg das Zentralinstitut für wissenschaftliches Rechnen (ZISC) seine Arbeit aufgenommen.

Dieses Zentralinstitut soll die an der FAU bestehenden Aktivitäten im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens fakultäts- und departmentübergreifend koordinieren, sowie interdisziplinäre Forschungsprojekte und die Vernetzung mit der regionalen und überregionalen Industrie fördern. Fortan wird es in Erlangen also eine Kommunikationsplattform für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, Doktorandinnen und Doktoranden geben, die sich in verschiedensten Bereichen der Simulation und Optimierung interdisziplinär austauschen können.

Um diesen Kooperationscharakter zu unterstreichen, wurden für das ZISC im neuen Dekanatsgebäude eine Reihe von Büros und ein CIP-Pool eingerichtet, die im Rahmen von fachübergreifenden Projekten genutzt werden

nicht nur an den erheblichen Investitionssummen deutlich, sondern auch daran, dass beim Richtfest der Bauherr Innenminister Herrmann und bei der Vertragsunterzeichnung Wissenschaftsminister Dr. Heubisch anwesend waren.



Luftaufnahme der Erweiterung des LRZ (Juli 2010, Foto: Ernst Graf)



Richtfest am 18. Oktober 2010 für die Erweiterung des LRZ

Ansonsten beschäftigten sich viele Vorträge mit algebraischen Mehrgittermethoden, dem diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren und weiteren Anwendungen. In der Sitzung über elliptische Probleme gab es u.a. den Vortrag von Tobias Köppl über einen Raum-Zeit-gekoppelten Mehrgitteralgorithmus im Peano-Framework und den Vortrag des verbleibenden Erlangerers Björn Gmeiner, der die Anwesenden mit Skalierungsergebnissen des hgh auf mehr als 250.000 Prozessoren beeindruckte – und das dramaturgisch überaus gekonnt: Vor den interessantesten Ergebnissen nutzte er eine rhetorische Pause, um die Spannung zu steigern. Bevor das etwa acht Gänge umfassende Conference Dinner genossen werden konnte, gab es noch etwas fürs Auge: bunte Bilder und spannende Simulationsszenarien des Industriepartners „Advanced Simulation Techniques“, präsentiert von Gotthard Rainer aus dem Vorstand dieses österreichischen Unternehmens. Nach dem erschlagend reichhaltigen Dinner fand sich noch ein harter, internationaler Kern von Konferenzteilnehmern, die noch die halbe Nacht im angeregten Gespräch auf der Terrasse des Hotels verbrachten.

Der Donnerstag war dann auch schon der Abreisetag, und viele Teilnehmer traf man auch auf der Fähre oder am Flughafen wieder. Die Konferenz war sehr gut organisiert und fand in einem tollen Rahmen auf Ischia statt, dafür möchten wir uns noch einmal ganz herzlich beim diesjährigen Organisator Alfio Borzi bedanken!

D. Ritter, H. Köstler

## Ein Zuhause für den „SuperMUC“

**Am 18. Oktober fand am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) das Richtfest für den Erweiterungsbau statt, in dem der nächste Höchstleistungsrechner „SuperMUC“ arbeiten wird. SuperMUC wird von IBM geliefert werden. Einen entsprechenden Vertrag schlossen das LRZ und IBM am 13. Dezember 2010 ab.**

Die hohe Bedeutung, die die Bayerische Staatsregierung der Förderung des wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens und dem LRZ beimisst, wird

können. In diesem neuen Gebäude, das in nur 10 Monaten errichtet wurde (März bis Dezember 2010), werden also in Zukunft Mitarbeiter von verschiedenen Lehrstühlen und Institutionen gemeinsam an komplexen Simulationsaufgaben arbeiten. Die offizielle Übergabe des Gebäudes und damit der Startschuss für das ZISC wie auch für das neue Dekanat fand am 22.12.2010 statt.

Die kollegiale Leitung des ZISC übernehmen fürs Erste Prof. Dr. Knabner und Prof. Dr. Leugering aus dem Department für Mathematik, Prof. Dr. Görling aus der Chemie, Prof. Dr. Clark vom Computerchemiezentrum, Prof. Dr. Rüde aus dem Department Informatik, Prof. Dr. Mecke und Prof. Dr. Delgado aus dem Cluster of Excellence Engineering of Advanced Materials (EAM) und Prof. Dr. Wellein vom Erlanger Rechenzentrum. Zum Sprecher des ZISC, und damit offiziellen Vertreter nach außen, wurde Prof. Dr. Rüde gewählt. Die Geschäftsführung übernimmt Dr. Iglberger.



Anstoßen beim Richtfest des ZISC am 31.5.2010

K. Iglberger

## European Multigrid Konferenz 2010

Die European Multigrid 2010 fand vom 19.09. bis zum 24.09.2010 am Golf von Neapel auf der Isola d'Ischia statt. Vom Lehrstuhl für Systemsimulation aus Erlangen waren Björn Gmeiner, Harald Köstler und Daniel Ritter dorthin aufgebrochen. Schon die Anreise gestaltete sich für die Teilnehmer als mehr oder weniger großes Abenteuer. Falls man den Transfer sorgfältig geplant hatte, konnte man innerhalb einer halben Stunde mit dem Bus vom Flughafen Neapel zum Hafen gelangen und noch am gleichen Tag einen Platz in einer Fähre ergattern und nach Ischia übersetzen. Schließlich erreichte man nach 20 Minuten zu Fuß das Konferenzhotel „Continental Terme“.

Ansonsten gab es auch die Möglichkeit, einen günstigen Flug zu buchen und spät abends in Neapel anzukommen. Das dann vor Ort benötigte preiswerte Hotel entpuppte sich allerdings als Freudenhaus (man hätte wohl schon bei der Fahrt zum Hotel stutzig werden können, als der Taxifahrer aus Angst Tür und Fenster verriegelte). Doch durch die guten Beziehungen des Taxifahrers, der sich während der (teueren) Fahrt durch die engen Gassen sehr gut unterhalten und gleichzeitig telefonieren konnte, wurde dann doch noch ein (teueres) Hotelzimmer in der Nähe des Hafens als Alternative gefunden. Am nächsten Morgen ging es dann endlich per Fähre nach Ischia.

Die Konferenz wurde am Sonntag Abend mit einem Empfang eröffnet, zu dem es italienische Snacks mit Meeresfrüchten, Bruschetta, Prosecco und Wein gab. Das wissenschaftliche Programm begann am nächsten Morgen mit den ersten Vorträgen von Wolfgang Hackbusch und Volker Schulz. Eine der ersten Sessions drehte sich um die Lösung von Optimierungsproblemen mit Multi-Level-Verfahren. Am Nachmittag gab es dann die Session über GPU Computing, in der gleich zwei der drei Erlanger (Harald und Daniel) über ihre Fortschritte beim Integrieren eines Mehrgitterlösers in das WaLBerla-Framework berichteten. Insgesamt kamen die Vorträge sehr gut an (obwohl Irad Yavneh gleichzeitig vortrug, war unser Sitzungsraum gut gefüllt), auch wenn auf dieser Mathematik-lastigen Konferenz Themen wie

Hardwareoptimierung und paralleles Programmieren immer etwas exotisch sind. Ein typischer Kommentar eines anderen Teilnehmers: „Warum verwendet Ihr dieses komplizierte CUDA? Erzählt lieber was über OpenMP, das ist einfach.“ Der erste Tag klang bei Bier, Pizza und einer interessanten Unterhaltung mit Craig Douglas und Mike Giles gemütlich aus.

Am Dienstag drehte sich dann viel um diverse Anwendungen von Mehrgittermethoden, so z.B. die Simulation des Reifeprozesses von Äpfeln, die, wie könnte es anders sein, vom „Post-Harvest Research Center“ gefördert wird (Vortrag von Stefan Vanderwalle), die Modellierung von Neuronen (Gabriel Wittum), oder auch Spieltheorie, in der Mehrgittermethoden Verwendung finden (Sylvie Detourmay).



Am Mittwoch ging es mit einem Vortrag über Mehrgitter für stochastische Differentialgleichungen (Mike Giles) los. Das Mehrgitter wurde hier verwendet, um die Kosten für eine Monte-Carlo-Simulation zu minimieren.