VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

HIGH PERFORMANCE COMPUTING IN ÖSTERREICH

DER VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER



INHALT

Vorworte 4

Die Clustersysteme des Vienna Scientific Cluster 6

Statistische Daten über den Vienna Scientific Cluster 10

Steering Committee 12

VSC Team - Support 14

Materialforschung am Computer 16

Projekte der Universität Wien 18

Projekte der TU Wien 22

Projekte der BOKU Wien 26

Projekte der TU Graz 30

Projekte der Uni Innsbruck 32

Übersicht der Forschungsprojekte am Vienna Scientific Cluster 34

VORWORTE

Numerische Simulationen sind heute neben Theorie und Experiment ein integraler Bestandteil moderner Wissenschaften. Sie ermöglichen es in vielen Fällen erst, theoretische Vorhersagen mit experimentellen Resultaten zu vergleichen. Wegen der großen Komplexität vieler heute untersuchter und modellierter Systeme aus verschiedensten Bereichen der Naturwissenschaft und Technik erfordern derartige Simulationen Rechner mit extremer Leistungsfähigkeit. Neben Simulationen werden derartige Hochleistungsrechner heute zunehmend auch in der Datenanalyse eingesetzt. Moderne Messsysteme, etwa in den Bereichen Genetik und Fernerkundung oder Hochenergiephysik liefern in kurzer Zeit extreme Datenmengen, welche nur mit Rechnern höchster Leistung analysiert werden können.

Da die Beschaffung und der Betrieb von Hochleistungsrechnern mit großem finanziellen Aufwand verbunden ist, haben sich österreichische Universitäten mit finanzieller Unterstützung des Bundesministeriums für Wissenschaft und Forschung (heute: Bundesministerium für Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft) zu einem Konsortium zum Betrieb derartiger Rechner zusammengeschlossen. Die Bezeichnung der Rechner VSC-1, VSC-2 und demnächst VSC-3 (VSC = Vienna Scientific Cluster) deutet auf die Entstehung des Konsortiums im Wiener Raum hin. Das Projekt wurde ursprünglich in Kooperation von Universität Wien und Technischer Universität Wien unter Beteiligung der Universität für Bodenkultur initiiert. In der gegebenen Finanzlage der österreichischen Universitäten war das optimale Kosten/Leistungsverhältnis seit Beginn des Projektes ein entscheidendes Kriterium. Neben einer im Internationalen Vergleich sehr schlanken Personalausstattung und einem Minimum an Bürokratie wird dies durch effiziente Hardwarebeschaffung im Rahmen von Ausschreibungen und starke Betonung von Energieeffizienz erreicht.

Die vorliegende Broschüre gibt einen Eindruck vom Einsatz der Rechner in einem enorm breiten Bereich von verschiedenartigen Wissenschaftsdisziplinen.

Projekte aus den Lebenswissenschaften reichen von Genetik über Chemie und Dynamik von Proteinen bis zur Simulation von Zellmembranen und den darin eingebauten Ionenkanälen. Am anderen Ende der Energieskala werden Simulationen der Dynamik von Sternen und von Kernfusionsplasmen und des sogenannten Quark-Gluon-Plasmas durchgeführt. Arbeiten aus dem Bereich der Umweltwissenschaften betreffen unter anderem Klimaforschung und den Transport von Schadstoffen im Boden. Die Physik und Chemie der kondensierten Materie ist ein ganz wesentlicher Schwerpunkt der Arbeiten. Hier werden sogar zwei weltweit verbreitete Programmpakete zur quantenmechanischen Simulation von Festkörpern in Wien entwickelt und natürlich auch am VSC stark eingesetzt.

Mit Unterstützung aus Hochschulraum-Struktur-Mitteln (HSRM) wird der VSC einerseits um eine für Bio-Informatik optimierte Komponente erweitert, um dem rasch wachsenden Bedarf aus diesem Bereich Rechnung zu tragen, andererseits wird mit dem ebenfalls daraus eingerichteten VSC Research Center unter anderem der Benutzersupport verbessert und die Möglichkeit von Software-Entwicklungsprojekten geschaffen.

Der gemeinsame Weg soll auch in Zukunft weiter gegangen werden, denn in einem im rasanten Wandel begriffenen Gebiet wie Rechentechnik können es nur gebündelte Ressourcen ermöglichen, auch in Zukunft vorne mit dabei zu sein und neue Herausforderungen zu bewältigen, die auf uns alle zukommen. Ein Beispiel für neue Herausforderungen ist der Bedarf an Infrastruktur zur Archivierung großer Datenbestände.

Sabine Seidler, Rektorin Technische Universität Wien
Heinz W. Engl, Rektor Universität Wien
Martin H. Gerzabek, Rektor Universität für Bodenkultur Wien
Harald Kainz, Rektor Technische Universität Graz
Tilmann Märk, Rektor Universität Innsbruck



Moderne Forschungsinfrastruktur ist eine essentielle Grundlage für exzellente Forschung und wettbewerbsfähige Technologieentwicklung.

Die österreichweite Zusammenarbeit im Bereich des so genannten Supercomputing, also der Nutzung der modernsten Computerinfrastruktur, und die daraus resultierende Etablierung des Vienna Scientific Clusters (VSC) sind ein herausragendes Bespiel für die Chancen, die sich aus der gelebten Kooperation zwischen den einzelnen Hochschulen ergeben können. Diese Bündelung hat dazu beigetragen, dass Österreich bei internationalen Rankings der schnellsten Hochleistungsrechner der Welt im Spitzenfeld liegt und das in einem Bereich, wo sich die Technik rasant entwickelt.

An fast allen Universitäten gibt es Forschungsbereiche, die mittels Hochleistungsrechnern neue wissenschaftliche Erkenntnisse erzielen, die mit herkömmlichen Methoden nicht erreichbar wären. Viele Projekte, die auf der Berechnung komplexer Modelle und Simulationen basieren, wären ohne die hohe Rechenleistungen, die der Vienna Scientific Cluster bietet, nicht möglich. Das High Performance Computing, sei es durch hochparallele Supercomputer oder durch Computercluster, ist eine aktuelle Schlüsseltechnologie, um aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen in vielen Bereichen zu lösen.

Dank der Anstrengungen in den letzten drei Leistungsvereinbarungsperioden ist es gelungen, das erfolgreiche Wiener Modell zum schnellsten und leistungsfähigsten Hochleistungsrechner Österreichs auszubauen, von dem alle beteiligten Universitäten enorm profitieren. Durch ihre Bereitschaft in Wissenschaft und Forschung kooperativ an einem Strang zu ziehen und eine Gesamtstrategie zum koordinierten Ausbau von gemeinsamen Forschungsinfrastrukturen im Bereich Supercomputing zu verfolgen leisten alle beteiligten Personen einen Beitrag zur Profilbildung des Innovationsstandortes Österreich.

Ich gratuliere zu dieser gelungenen Kooperation, die durch die gemeinsame Beschaffung, den gemeinsamen Betrieb und die gemeinsame Nutzung des VSC nicht nur die optimalen Voraussetzungen für exzellente Wissenschaft an den österreichischen Universitäten bietet, sondern darüber hinaus auch die Wettbewerbsfähigkeit des Forschungsraums Österreichs insgesamt absichert.

Dr. Reinhold Mitterlehner
Bundesminister für Wissenschaft,
Forschung und Wirtschaft



DIE CLUSTERSYSTEME DES VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

Im Jahr 2007 wurde, nachdem mehrere Jahre kein österreichischer Computer mehr in der TOP-500-Liste der Hochleistungsrechner zu finden war, eine Kooperation zwischen Universitäten begonnen, um Ressourcen zu bündeln.

VSC-1

Das erste Ergebnis dieser Zusammenarbeit war der VSC-1, für den die Universität Wien, die Technische Universität Wien und die Universität für Bodenkultur, ebenfalls in Wien, Mittel zusammenlegten. Mit 35,5 TFlop/s (Tera floating point operations per second) wurde der beachtliche 157. Platz der weltweit schnellsten Rechner erreicht. Der VSC-1 war bereits, wie seine Nachfolgesysteme ein Cluster, bestehend aus leistungsfähigen 2-Sockel-Knoten, die durch ein Infiniband-Hochleistungsnetzwerk verbunden waren. Durch die strikte Trennung von Luftzu- und abfuhr mittels eines Warmganges, der die erhitzte Abluft sammelt, wurde ein innovatives Kühlkonzept umgesetzt, das es ermöglichte, den VSC-1 im Rechnerraum der Technischen Universität Wien aufzustellen. Der Vollausbau inklusive nachfolgender Erweiterungen mit einem Stromverbrauch von bis zu 180 kW machte es aber bereits absehbar, dass Nachfolgesysteme einen neuen Standort benötigen würden.

Die Leistungsfähigkeit des gemeinsamen größeren Computers ermöglicht es den Forschern, vornehmlich aus den Naturwissenschaften, zu den jeweiligen Spitzenzeiten sehr aufwändige Simulationen durchzuführen, da sich die Verbrauchsprofile der Arbeitsgruppen recht gut ergänzen.

Ein Beispiel: zur Grundlast einiger Arbeitsgruppen aus den Materialwissenschaften kommen zeitweise Arbeiten von Meteorologen oder Biologen, die wenige Tage oder Wochen einen sehr hohen Rechenbedarf haben, dann aber wieder ganze Monate mit der Auswertung ihrer Simulationen beschäftigt sind.

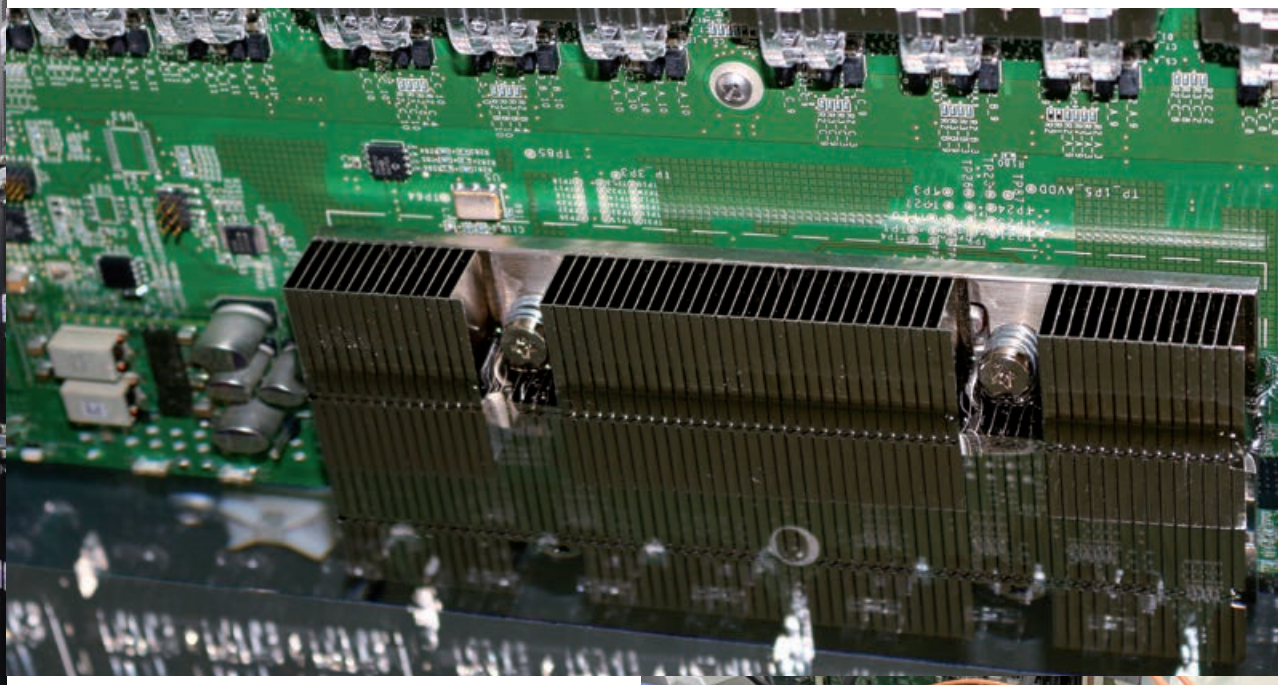
Bei mehreren hundert Projekten mitteln sich diese Bedarfsspitzen sehr gut aus.

VSC-2

Nachdem der VSC-1 etabliert und bald wieder zu klein geworden war, konnte die Planung für den Nachfolger beginnen, der ein deutlich größeres System werden sollte. Die Standortsuche ergab, dass Räume im Stadtentwicklungsgebiet am Arsenal geeignet wären.

Zugleich mit der Ausschreibung fand der Umbau eines Rechnerraumes, diverser Infrastrukturräume für Strom und Kühlwasserverteilung und der außen gelegenen Kühlinfrastruktur statt. Der VSC-2 wurde 2011 eröffnet, war mit 30 Racks deutlich größer als der VSC-1 mit 18 Racks, hatte etwa die vierfache Anzahl an Rechenkernen und setzte auch deutlich mehr Strom und damit Abwärme um. Das Kühlkonzept war wiederum recht innovativ: anstatt die Abwärme zuerst zu sammeln und zentral zu kühlen, weisen alle 30 Racks einen





Links: Blick in den VSC-2,
oben: ein Infiniband Switch des VSC-3,
unten: Außenansicht des VSC-1,
rechts: Rechenknoten des VSC-3 im Ölbad.





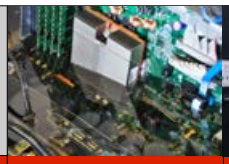
Wärmetauscher an der Rückseite auf. Die Ventilatoren der Knoten drücken die warme Luft durch diese Wärmetauscher und erzeugten im Raum angenehme 22°C und etwa 50% Luftfeuchtigkeit. Zum Vergleich: im Warmgang des Vorgängers hat es bis zu 45°C und extrem trockene Luft. Die Geräuschkulisse der Ventilatoren macht die Bedingungen dennoch bei beiden Systemen recht unwirtlich. Ein kleines Detail: der Aufstellungsraum mit etwa 100m² wird von etwa 6000 Kabeln mit einer Gesamtlänge von über 20km durchzogen.

Ein durchdachtes Kabelmanagement macht die Behebung von Ausfällen und Servicearbeiten in vernünftiger Zeit machbar.

Diesmal konnte in der zweimal jährlich erscheinenden Top-500-Liste bereits der Junitermin wahrgenommen werden, erforderte jedoch besonderen Einsatz, einerseits zur Verlängerung der Abgabefrist, andererseits um zu diesem Termin dann auch einen guten Wert liefern zu können: die gelieferten Speichermodule zeigten jeweils etwa jedes dritte Jahr einen Fehler, was bei 10000 Modulen zu einer MTBF (Mean Time Between Failure) für das Gesamtsystem von wenigen Stunden führte. Ein optimaler Komplettlauf des Linpack-Benchmarks erfordert einen ganzen Tag. Mit suboptimalen Parametersets konnte mit einem 10-Stunden-Lauf mit 135,6 TFlop/s dennoch der 56. Platz der weltweit schnellsten Rechner erreicht werden. Dieser Wert wurde nach einem Speichertausch (der im Übrigen auch zuvor bei VSC-1 notwendig war) auf 152,9 TFlop/s verbessert, womit in der Nachfolgeliste noch Platz 77 zu holen war. In der inoffiziellen Länderwertung konnte sich Österreich in beiden Listen des Jahres 2011 unter den Top-20 Forschungsnationen behaupten.

Weitere Universitäten schließen sich an

Die Benutzerbasis konnte mit diesem größeren System weiter vergrößert werden, Interesse kam mittlerweile auch von den anderen österreichischen Universitäten, die teilweise schon recht große Testprojekte laufen ließen. Auch die Benutzeranforderungen änderten sich, es begann eine Verschiebung hin zu neuen Disziplinen wie der Biologie und daneben wuchsen auch Anforderungen, die zum Schlagwort ‚Big Data' passen. Das Hauptaugenmerk des VSC-Projektes bleibt aber weiterhin die günstige Bereitstellung von Rechenleistung, insbesondere für parallele Programme. Als Folge konnte der VSC-3 wiederum etwas größer ausgeschrieben werden und ein weiterer Raum im Gebäude, das schon den VSC-2 beheimatet, wurde gefunden - zumindest am Plan. Zur Realisierung waren wiederum Umbauarbeiten notwendig, unter anderem der Abriss einer 200m² Zwischendecke mit einer Traglast von 5t/m² und der Errichtung

			
Name	**VSC-3**	**VSC-2**	**VSC-1**
Anschaffungsjahr	2014	2011	2009
Hersteller	ClusterVision	Megware	IPS (Sun/Oracle)
Prozessor	Intel Ivy Bridge Xeon E5-2650v2	AMD Opteron Magny Cours 6132HE	Intel Nehalem X5550 (Erweiterungen: Intel Westmere X5650 und Intel Sandy Bridge)
Sockel pro Knoten	2	2	2
Taktrate (GHz)	2,6	2,2	2,66
Knotenanzahl	2020	1352	436 (562)
Cores pro Knoten	16	16	8 (12)
Cores pro Cluster	32320	21280	3488 (5064)
Hauptspeicher pro Core (GB)	4	2	3 (2)
Hauptspeicher pro Knoten (GB)	64-256	32-256	24
Hauptspeicher pro Cluster (TB)	144	44,7	10,5 (13,5)
Netzwerk	Intel Infiniband 4xQDR-80	Mellanox Infiniband 4xQDR ConnectX-2	QLogic Infiniband 4xDDR (teilweise 4xQDR)
Anzahl Switches	312 Infiniband + 50 Ethernet	89 Infiniband + 65 Ethernet	31 Infiniband + 23 Ethernet
Zugangsknoten	5	3	3
Stromverbrauch (kW)	540	420	180
Kühlmethode	Öltank ("Liquid Submersion Cooling")	passive Kühltüren (Rackrückseite)	Warmgang
Kühlmitteltemperatur (°C)	Bis 43	16-18	10
Raumtemperatur (°C)	Bis 45	22	Bis 45
Theoretische Rechenleistung (TFlops/s)	672,3	190,4	40,5
Linpack Wert (TFlops/s)	>500	152,9	35,5
Initialer Platz in den TOP-500	?? (2014)	56 (Juni 2011)	157 (November 2009)
Initialer Platz in Green-500	?? (2014)	71 (Juni 2011)	94 (November 2009)

neuer Decken und Wände im bestehenden Gebäude - ohne Unterbrechung des normalen Betriebes.

Die Ausschreibung des Rechners spiegelte eine kleine Veränderung in der Herstellerlandschaft wieder: QLogic (Infiniband VSC-1) war von Intel aufgekauft worden, AMD (Prozessoren VSC-2) hat sich praktisch aus dem Servergeschäft zurückgezogen, alternative Prozessorarchitekturen waren nicht mehr in Sicht. Selbst IBM oder Cray machten in Vorgesprächen deutlich, Intelprozessoren anbieten zu wollen.

Neue Kühlkonzepte

Auf der anderen Seite waren mittlerweile Kühlkonzepte mit direkter Wasserkühlung am Markt, die deutlich höhere Effizienz und Packungsdichte erlauben. Neben Luftkühlung war noch ein drittes Kühlkonzept im Gespräch und seit einem Jahr im Probebetrieb des VSC-Teams im Einsatz: die kompletten Rechner wurden von beweglichen Teilen getrennt und in ein Spezialöl getaucht.

Das Öl zirkuliert durch den Rechner und nimmt die Abwärme etwa 1000-fach effizienter als Luft auf. Ein Öl/Wasser-Wärmetauscher führt die Wärme sehr leise ab. Damit ist eine hohe Packungsdichte ohne aufwändige Umbauten der Kühlkörper möglich. Nebenbei werden Nebenkomponenten sehr effizient gekühlt und die Prozessortemperatur bleibt typischerweise deutlich unter der Temperatur, die mit Luftkühlung erreicht werden kann. Die drei Kühlkonzepte: einfache, bewährte, günstige Luftkühlung, Untertauchen in Öl und Wasserkühlung direkt am Prozessorkühlkörper, bisweilen inklusive Speichermodule, haben jeweils ihre eigenen Vorteile. Im Wesentlichen geht es dabei darum, höhere Investitionskosten geringeren Betriebskosten gegenüberzustellen.





Peter Marksteiner (HPC-Konsulent der Universität Wien), Ernst Haunschmid und Herbert Störi (v.l.n.r.) inspizieren das Ergebnis ihrer Planungsarbeiten, den VSC-3, in der Aufbauphase.

Die Ausschreibung zum VSC-3 war vom Gedanken geprägt, bei maximaler Leistungsfähigkeit die Gesamtkosten des Systems über die Laufzeit zu minimieren. Neben der Berücksichtigung des Stromverbrauchs für die Kühlung wurde ein Bonus vergeben, wenn das ganze Jahr ohne Kompressorkühlung das Auslangen gefunden werden konnte. Es wurden luft-, wasser- und ölgekühlte Systeme angeboten, etwa die Hälfte der angebotenen Lösungen konnte den Bonus für kompressorfreie Kühlung in Anspruch nehmen.

VSC-3

ClusterVision konnte mit einem überzeugenden Gesamtkonzept auf Basis von Ölkühlung und einer beachtlichen Systemgröße das Rennen für sich entscheiden: es werden nicht die schnellsten Prozessoren verwendet, sondern es ist eine gute Balance zwischen Prozessorleistung, Speicherdurchsatz und Netzwerkperformance gefunden worden. Der zur Verfügung stehende Raum mit etwa 100m² wird zur Gänze ausgenutzt. Durch das Interesse von Universitätsinstituten und weiterer Projektpartner an eigenen, zusätzlichen Knoten kann auch eine optionale Erweiterung des Systems in Anspruch genommen werden, wodurch Teile des Systems, die nicht ölgekühlt sind, in einen anderen Raum ausweichen. Dies war in der Ausschreibung von Anfang an vorgesehen und sollte auch andere innovative Lösungen wie Single-Socket-Boards erlauben.

In der Green-500-Liste wird das innovative Kühlsystem zu einer sehr beachtlichen Platzierung führen, insbesondere unter den Computern ohne spezielle Koprozessoren (Grafikkarten oder Xeon Phi). Die Top-500-Platzierung des VSC-3 wird trotz sehr deutlicher Steigerung der Rechenleistung aber wohl nicht an die beste Platzierung des VSC-2 heran reichen.

Die Cluster des VSC-Projektes weisen einige Gemeinsamkeiten auf, die über die halbe Dekade Bestand hatten: es sind jeweils Zwei-Sockel-Boards mit Serverprozessoren, die sehr guten Speicherdurchsatz aber nicht maximale Rechenperformance zeigen.

Das Hochleistungsnetzwerk ist jeweils Infiniband-basiert, in der letzten Ausbaustufe mit zwei Adaptern pro Rechenknoten. Daneben gibt es Ethernet-basierte Netzwerke für Systemaufgaben und Wartung. Alle drei Cluster können mit einer jeweils zu ihrer Zeit innovativen Kühllösung aufwarten, die die Gesamtkosten über die gesamte Laufzeit niedrig halten.

Die eingesetzte Software zeigt eine ähnliche Kontinuität: professionelle Compiler, optimiertes MPI (Message Passing Interface) und hoch optimierte Programmbibliotheken wie BLAS, ScaLAPACK oder FFTW führen zu sehr guten Laufzeiten. Auf einige Benutzer kommt jetzt dennoch ein Entwicklungsschritt zu, der schon seit Jahren erwartet wird: die Kombination von Shared-Memory- und Message-Passing-Parallelisierung zeigt für einige Programme bereits Geschwindigkeitsverbesserungen im zweistelligen Prozentbereich. Eine Verlagerung von Entwicklerressourcen in diese Richtung erscheint angesichts steigender Core-Anzahl pro Rechenknoten als gut investiert.

STATISTISCHE DATEN ÜBER DEN VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

Der Rechenzeitverbrauch auf den beiden aktiven Clustersystemen ist aus Abb. 1 ersichtlich. Dem Beginn des regulären Benutzerbetriebs (1.1.2010: VSC-1 bzw. 1.1.2012: VSC-2) ging jeweils eine drei-monatige Testphase voraus. Bereits drei Monate nach Inbetriebnahme waren die Cluster vollständig ausgelastet. Man spricht ab einer Auslastung von etwa 80 Prozent von einer Vollauslastung, da beispielsweise aufgrund von Knotenausfällen oder Reservierungen im Queueing System für hochparallele Jobs eine 100 prozentige Auslastung nie gegeben sein kann. Trotzdem fallen in den Daten des VSC-1 Werte von über 100 Prozent auf. Diese resultieren aus Rechenzeiten von Knoten aus privaten Queues, welche ihre freien Rechenzeiten der Allgemeinheit zur Verfügung stellen. Dies dient als Gegenleistung dafür, dass der VSC die Infrastruktur wie Fileserver, Netzwerk und Kühlung für die privaten Knoten bereit stellt, sowie die Wartung durch die VSC Mitarbeiter übernimmt.

Werte unter 70 oder 80 Prozent können Ausfällen auf Grund von Wartungsarbeiten für das System oder die Klimainfrastruktur oder gelegentlichen Stromausfällen, die beispielsweise durch gekappte Hochspannungskabel bei Bauarbeiten ausgelöst wurden, zugeschrieben werden.

In den vier Jahren Betriebszeit (1.1.2010 - 31.12.2013) standen den Benutzern des VSC-1 etwa 147 Mio. Core Stunden an Rechenzeit zur Verfügung von denen 124,5 Mio. Core Stunden verbraucht worden sind. 55 Prozent davon können Mitarbeitern von Projekten der Universität Wien, 37 Prozent Benutzern von Projekten der Technischen Universität Wien und 8 Prozent von solchen der BOKU Wien zugeordnet werden.

Von den rund 370 Mio. Core Stunden, die den Benutzern des VSC-2 in den Betriebsjahren 2012 und 2013 bereitgestellt werden konnten, sind 295 Mio. Stunden, das sind knapp 80 Prozent, tatsächlich genutzt worden. Das ist auch im Vergleich zum VSC-1 ein beachtlicher Wert, vor allem wenn man berücksichtigt, dass keine „privaten" Institutsknoten im VSC-2 integriert sind und dieser die Gesamtkapazität des VSC-1 übersteigt. Nicht ganz die Hälfte der genutzten Rechenzeit wurde von Nutzern der Technischen Universität Wien, 39 Prozent von Mitarbeitern der Universität Wien und 3 Prozent von Benutzern der Universität für Bodenkultur verbraucht. Die restlichen rund 8 Prozent der verbrauchten Core-Stunden teilen sich auf Testprojekte von Nutzern der Technischen Universität Graz, Universität Graz, Montanuniversität Leoben und der Universität Innsbruck auf. Diese Testzugänge zum VSC-2 wurden als Vorbereitung auf die produktive Nutzung des VSC-3 durch Mitarbeiter dieser Universitäten eingerichtet.

Projekte am Vienna Scientific Cluster

Im Allgemeinen wird am VSC zwischen Testprojekten und regulären Projekten unterschieden. Testprojekte sind auf eine Laufzeit von einem Monat begrenzt und erhalten Zugang zu beschränkte Ressourcen an Rechenzeit und Storage. Sie dienen als Vorläufer eines regulären Projekts dem Ausprobieren des Systems, um beispielsweise auszutesten, ob und wie performant der eigene Code auf dem Clustersystem funktioniert.

Reguläre Projekte müssen ein Peer Review Verfahren durchlaufen haben, um Rechenzeit am VSC zu erhalten. Erhält ein Projekt bereits eine Förderung durch einen Fördergeber wie FWF, WWTF, EU, etc. und hat damit bereits eine Begutachtung erfahren, kann um Rechenzeit am VSC angesucht werden. Das Steering Committee des VSC überprüft diese Ansuchen und entscheidet über die Zuteilung der beantragten Rechen-Ressourcen.

Erhält ein Projekt noch keine Förderung, so besteht die Möglichkeit, ein internes Projekt zu beantragen. Ein entsprechender Antrag wird von den Mitgliedern des Steering Committees zur Begutachtung durch externe Referees gebracht. Auf Basis dieser Gutachten wird dann in Folge über die Vergabe von Ressourcen am VSC entschieden.

Die aus den Abb. 2 und 3 zu entnehmenden Zahlen zeigen, dass nach Inbetriebnahme eines Clustersystems eine große Anzahl an Projekten die Arbeit aufgenommen hat. Jährlich begannen anschließend zusätzlich zwischen 14 und 27 neue Projekte, wobei das eine oder andere Projekt auch bereits wieder beendet wurde. So erreichte die Anzahl der aktiven Projekte auf dem VSC-1 im Jahr 2012 den Maximalwert von 106 und auf dem VSC-2 im Jahr 2013 mit 109 aktiven Projekten.

Die Anzahl „aktiver Benutzer" (definiert als solche, die auch tatsächlich Rechnungen am Cluster durchgeführt haben) bewegte sich, wie aus Abb. 4 ersichtlich, zwischen 223 und 258.

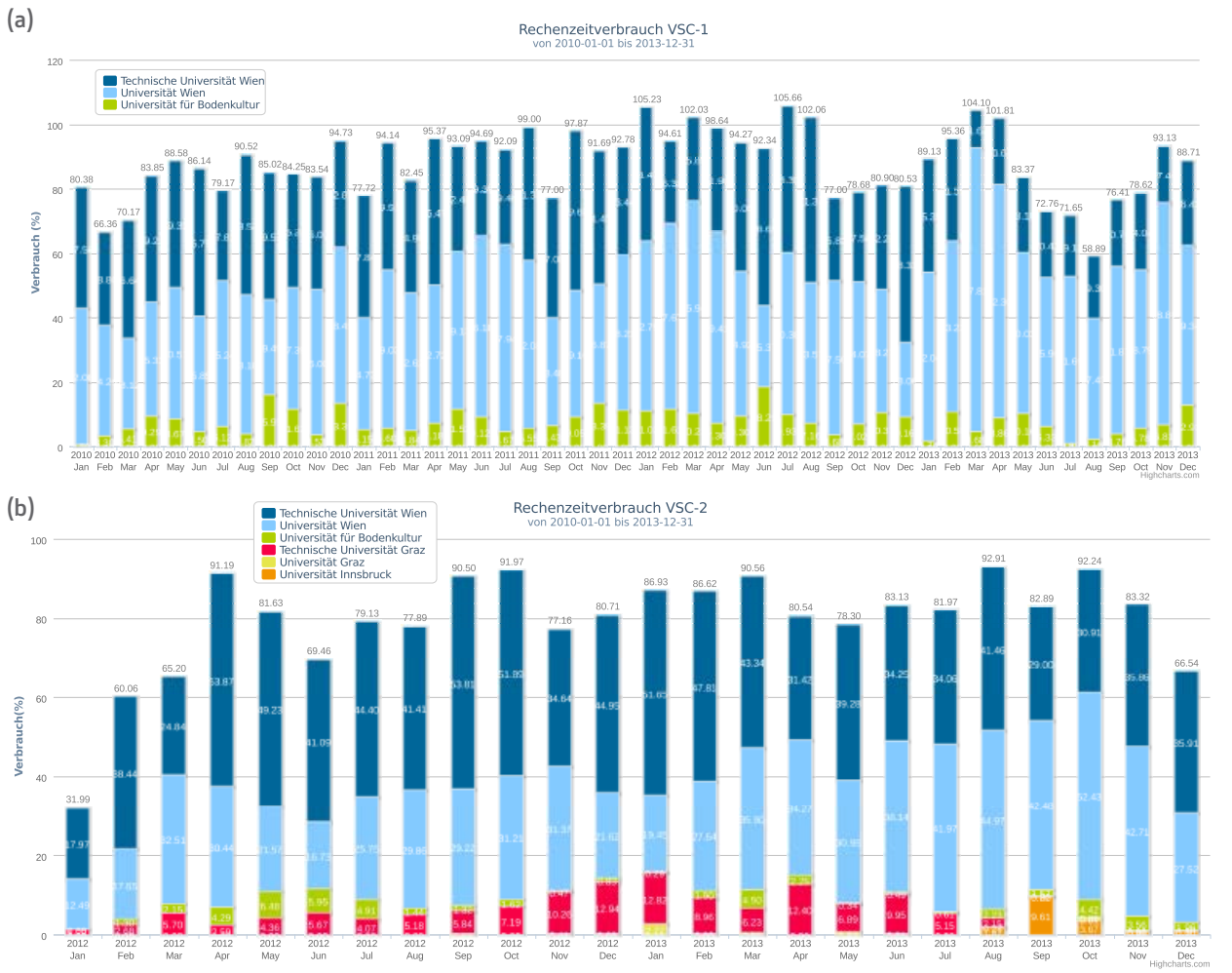


Abb. 1: Rechenzeitverbrauch seit Beginn des regulären Benutzerbetriebs: VSC-1 seit 1.1.2010 (a), VSC-2 seit 1.1.2012 (b) Verbrauchswerte über 100% resultieren aus zusätzlichen Rechenzeiten privater Queues.

VSC-1	reguläre Projekte				Testprojekte			
	2010	2011	2012	2013	2010	2011	2012	2013
TU Wien	30	13	8	4	16	7	13	5
Uni Wien	45	9	6	7	11	9	6	5
BOKU	10	2	0	4	7	4	2	4
Gesamt	85	24	14	15	34	20	21	14

VSC-2	reguläre Projekte		Testprojekte	
	2012	2013	2012	2013
TU Wien	40	11	16	4
Uni Wien	31	13	8	8
BOKU	4	3	4	2
TU Graz			22	
Uni Graz			2	
Uni Innsbruck				12
Gesamt	75	27	52	26

Abb. 2: Neue Projekte pro Jahr und teilnehmender Universität.

VSC-1	2010	2011	2012	2013
TU Wien	30	44	47	40
Uni Wien	45	48	49	42
BOKU	10	12	10	7
Gesamt	85	104	106	89

VSC-2	2012	2013
TU Wien	40	48
Uni Wien	31	42
BOKU	4	7
TU Graz	22	
Uni Graz	2	
Uni Innsbruck		12
Gesamt	99	109

Abb. 3: Aktive Projekte pro Jahr auf VSC-1 und VSC-2.

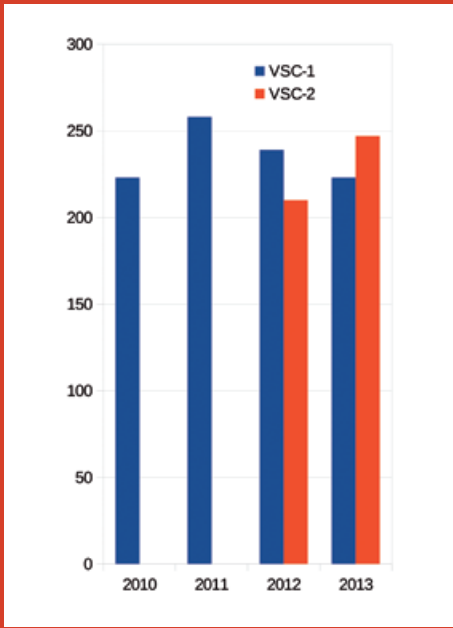


Abb. 4: Anzahl aktiver Benutzer am Vienna Scientific Cluster.

STEERING COMMITTEE

Das Steering Committee des VSC setzt sich aus Vertretern aller am Projekt beteiligten Universitäten zusammen. Jeder Projektpartner entsendet dorthin den (die) zuständigen Vizerektor (-in), den Leiter des Informatikdienstes und einen Vertreter der Benutzer. Die Ausnahmen bilden die Universität für Bodenkultur, die als Partner der Technischen Universität am VSC Projekt beteiligt ist und die Montanuniversität Leoben, die Karl-Franzens Universität Graz und die Alpen-Adria Universität Klagenfurt, die von der Technischen Universität Graz vertreten werden.

In den regelmäßig einberufenen Sitzungen wird das Steering Committee laufend über die Nutzung der Clustersysteme informiert und berät über alle Entscheidungen die den VSC betreffen, insbesondere über dessen strategische Entwicklung.

Eine weitere wesentliche Aufgabe ist die Genehmigung und Zuteilung von Rechnerressourcen für die Benutzergruppen.



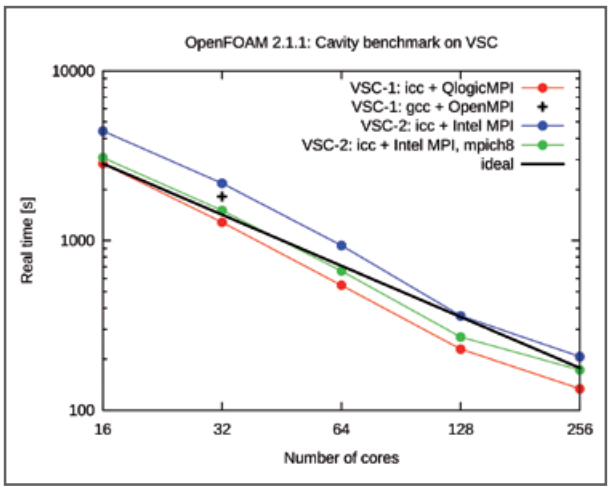

KLÖTZL

VSC TEAM - SUPPORT

Für den Betrieb des VSC ist der Zentrale Informatikdienst (ZID) der Technischen Universität Wien verantwortlich. Dieser stellt, in Kooperation mit den am VSC Projekt teilnehmenden Partnern, Personal für den VSC - das VSC Team - zur Verfügung. Gemeinsam mit jenen Firmen, welche die Clustersysteme installiert haben und für einen gewöhnlich drei Jahre umfassenden Zeitraum ab Systemabnahme warten, sind die Mitarbeiter des VSC Teams für die Funktion der Rechenknoten, Server und der Infrastruktur verantwortlich. Neben der Wartung der Hardware, muss auch das Betriebssystem der File-Server, Login-Server, Administrations-Server und Rechenknoten laufend auf einem aktuellen Stand gehalten werden.

Weitere Serviceleistungen, die vom VSC Team erbracht werden, sind die Wartung von Software, wie z.B. Compiler, MPI Umgebungen, Bibliotheksfunktionen, die wesentlich für die Installation von Benutzersoftware sind und der Betrieb eines Queueing Systems mit einem ausgeklügelten Fair-Share Scheduling. Die Benutzer werden dabei unterstützt, ihre Codes möglichst optimal für die Hardware des jeweilgen Clustersystems zu übersetzen, um eine effiziente Nutzung der zur Verfügung stehenden Rechenzeit zu gewährleisten. Für auf den Clustern häufig verwendete Codes werden Benchmarktests durchgeführt, um unter Verwendung unterschiedlicher Compiler und/oder Bibliotheksfunktionen zu ermitteln, unter welchen Bedingungen optimale Laufzeiten zu erwarten sind. Durch Variation der an einem Benchmarktest beteiligten Rechenkernen wird außerdem das Skalierungsverhalten eines Codes getestet. Unterstützung erhalten die Benutzer des weiteren, um Testsysteme mit aktueller Hardware, wie Rechenknoten, die mit GPU Karten oder solche, die mit Xeon Phis ausgestattet sind, verwenden zu können. Viele relevante Themen zur Benutzung des Clusters werden außerdem in einem eigenen Wiki dokumentiert.

Um Projekte am VSC zu verwalten, wird der „VSC Vergabe Assistent" bereitgestellt. Über einen webbasierten Zugang können Projektleiter Rechenzeit beantragen, Benutzeraccounts einrichten und ihren Ressourcenverbrauch einsehen.



Grafische Darstellung des nahezu optimalen Skalierungsverhaltens eines Benchmarks für OpenFoam,

VSC Research Center

Das VSC Research Center ist ein durch Hochschulraumstrukturmittel gefördertes Projekt, das die organisatorische und personelle Infrastruktur stärkt, mit dem Ziel eine Verbesserung der technischen Unterstützung für Nutzer und Projekte zu ermöglichen. Dies geschieht einerseits durch eine Vergrößerung des VSC Support Teams um drei zusätzliche Personen mit Kompetenzen im Übergangsbereich von Wissenschaft und Software-Entwicklung. Diese personelle Aufstockung ermöglicht es dem VSC Team, Anwendern besseren Support bei der Nutzung des Clusters zu geben. Andererseits wird die Möglichkeit geschaffen DoktorandInnen und PostDocs für ausgewählte Projekte anzustellen, welche Forschergruppen bei der Optimierung und Weiterentwicklung wissenschaftlicher Software unterstützen. Diese Maßnahme ist besonders wichtig für die internationale Wettbewerbsfähigkeit des Wissenschaftsstandorts Österreich. Das Research Center wird es in Zukunft außerdem ermöglichen, vermehrt Hardware mit neuen Architekturen für Tests und Entwicklung anzuschaffen, und durch das Erkennen von Trends und Innovationen in diesem Bereich können diese nun wesentlich früher zur Software-Entwicklung genutzt werden.



Dieter Kvasnicka und Markus Stöhr (oben und unten links) sind Teil des Wiener VSC Support Teams.
Sabine Kreidl (links) ist um die Benutzer der Universität Innsbruck bemüht. Ernst Haunschmid (unten rechts) ist Leiter der Abteilung für High Performance Computing an der TU Wien.







MATERIALFORSCHUNG AM COMPUTER

Um die Eigenschaften von Materialien zu verstehen, muss man oft bis in die atomare Ebene hinabsteigen. Materialwissenschaftliche Computersimulationen sollen neue, bessere Werkstoffe hervorbringen.

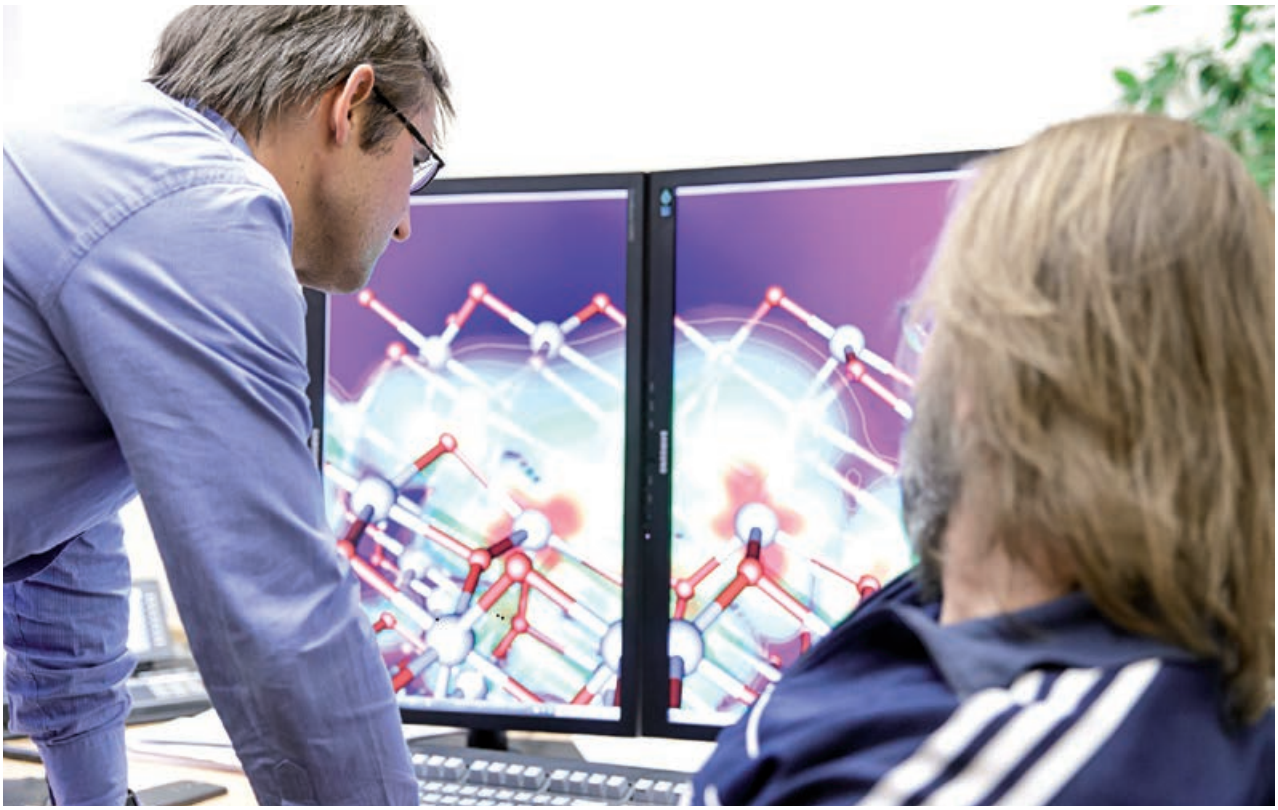
Mit Versuch und Irrtum alleine kommt man oft nicht weit. Sucht man nach neuen Werkstoffen, zum Beispiel nach Materialien, die ganz besondere elektromagnetische oder thermische Eigenschaften haben, muss man die Materialphysik auf Quanten-Ebene verstehen. Das komplizierte Zusammenspiel der Atome eines Festkörpers und ganz besonders das Verhalten seiner Elektronen legen seine Eigenschaften fest.

Berechnen kann man das nur mit großem Aufwand. Oft werden für solche Berechnungen besonders leistungsfähige Computercluster mit tausenden Prozessorkernen verwendet. Die Universität Wien und die TU Wien liefern seit Jahren wichtige Beiträge für den Forschungsbereich der computergestützten Materialforschung. Im Rahmen des Spezialforschungsbereichs „ViCom" (Vienna Computational Materials Laboratory), gefördert vom österreichischen Wissenschaftsfonds FWF, werden neue Computermethoden entwickelt, verbessert und angewandt.

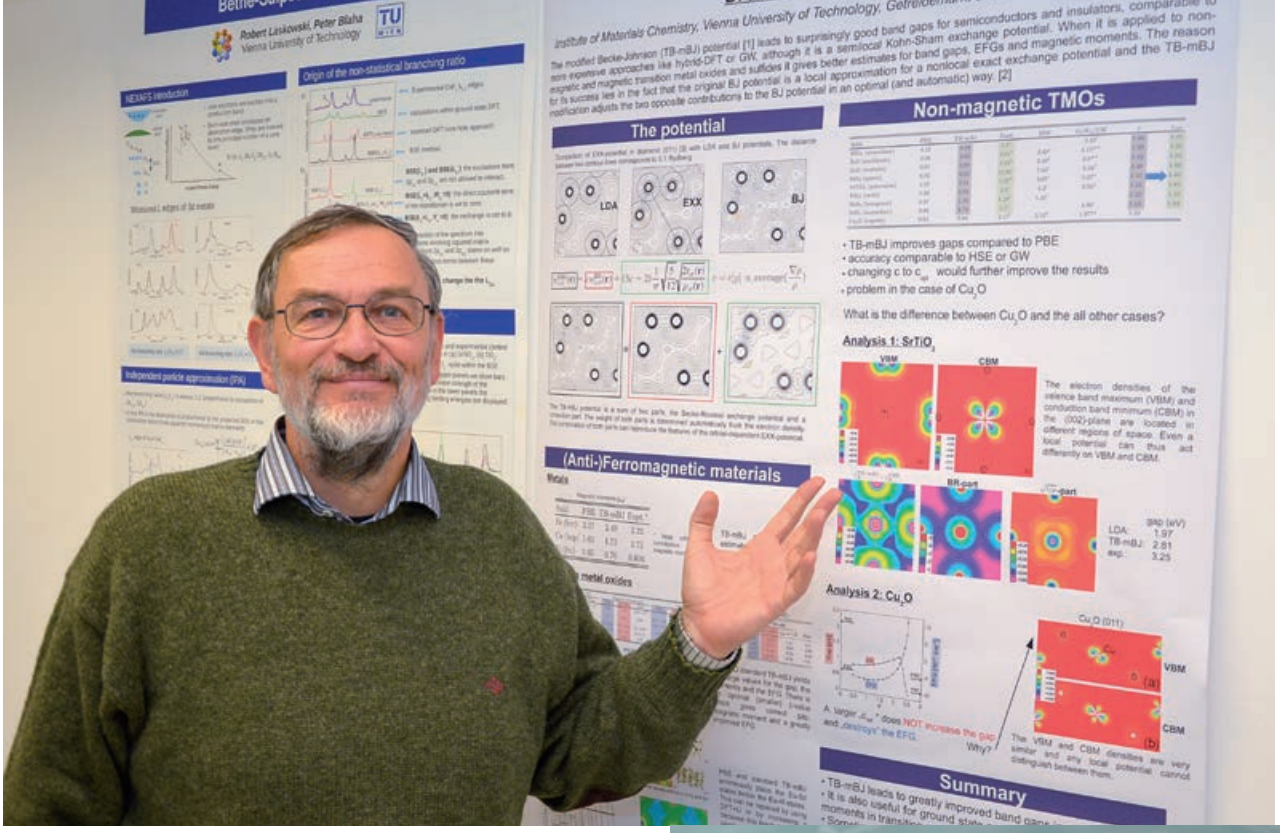
Kompetenzcluster mit Weltruhm

„Dass es in Wien mittlerweile so viele international angesehene Forschungsgruppen in diesem Bereich gibt, ist für uns alle ein großer Vorteil", ist Prof. Karsten Held, einer der Principal Investigators des ViCom-Projektes, überzeugt. „In diesem Bereich haben wir eine kritische Masse erreicht, sodass wir nun weltweit als ein wichtiges internationales Zentrum der computergestützten Materialwissenschaft wahrgenommen werden. Dadurch ist es auch viel leichter möglich, neue hervorragende Leute aus dem Ausland nach Wien zu holen."

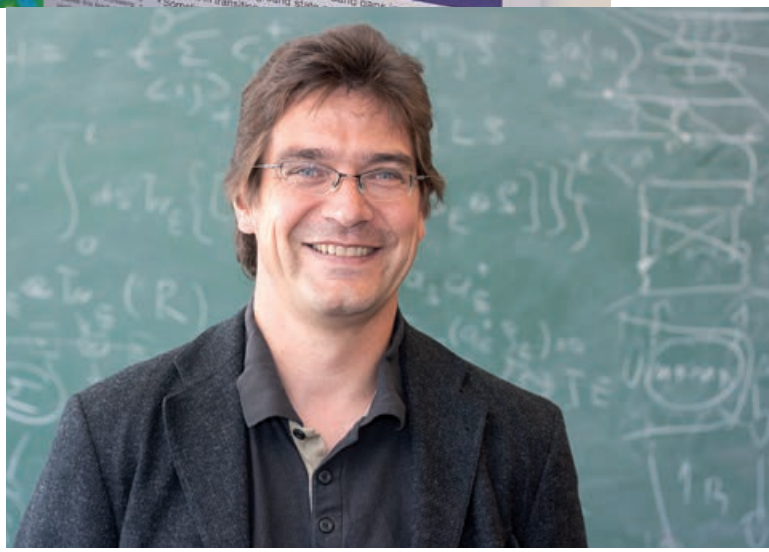
Für viele Anwendungen ist es von großer Bedeutung, die elektronische Bandstruktur eines Materials zu kennen – auch sie lässt sich für gegebene Materialien am Computer berechnen. Die Bandstruktur gibt Auskunft darüber, welche Energien die Elektronen in einem Material überhaupt annehmen können. Das wiederum entscheidet über viele physikalische Materialeigenschaften – etwa die Transparenz oder die elektrische Leitfähigkeit.



Georg Kresse (Universität Wien, Projektleiter des SFB ViCom) und Martijn Marsman studieren eine Kristallstruktur.



Peter Blaha (oben), Autor des Wien2k Softwarepakets, und Karsten Held (rechts) sind zwei der leitenden Wissenschafter an der TU Wien im SFB ViCom.



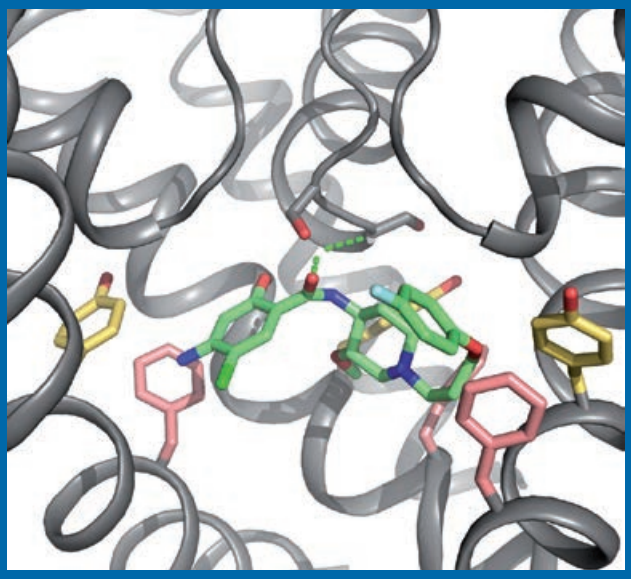
Die Elektronen in einem Festkörper üben aufeinander Kräfte aus, ähnlich wie die Himmelskörper in einem Sonnensystem. Allerdings gibt es einen fundamentalen Unterschied zwischen Elektronen und makroskopischen Objekten: Elektronen können sich in einem Zustand befinden, indem es keinen Sinn mehr macht, sie einzeln zu beschreiben, sie bilden gemeinsam ein quantenphysikalisches Objekt, das sich nur im Ganzen verstehen lässt. Man bezeichnet solche Elektronen als „hoch korreliert". Mathematisch sind solche Zustände sehr schwer zu beschreiben. Einige der leistungsfähigsten Großrechner der Welt werden verwendet, um hinter die physikalischen Geheimnisse hoch korrelierter Elektronen zu kommen. Viele spannende Effekte wie etwa die Hochtemperatur-Supraleitung sind nur mit Berücksichtigung solcher Quanten-Korrelationen zu verstehen.

Computercodes als Exporthit

Heute gibt es eine Reihe von mathematischen Methoden, die dazu dienen, in großen Computersimulationen Materialforschung zu betreiben - etwa die Dichtefunktionaltheorie, für die 1998 der Chemie-Nobelpreis vergeben wurde. Doch für viele Anwendungen müssen die bestehenden Methoden erweitert und abgewandelt werden. „Bei uns gibt es eine sehr erfolgreiche Tradition der Methodenentwicklung", betont Held. So wurden von den Wiener Materialforschungs-Teams etwa die Software „Wien2k" (Dichtefunktionaltheorie) oder auch das Programmpaket VASP (Vienna ab-initio Simulation Package – Dichtefunktionaltheorie und Hartree-Fock) entwickelt. Beide Produkte wurden in die ganze Welt verkauft und werden mit großem Erfolg angewandt.

Doch nicht immer sind es die quantenphysikalischen Elektroneneigenschaften, die man in der Materialphysik verstehen muss. Wie interagieren Teilchen in einer Flüssigkeit? Was geschieht, wenn winzige Kolloide, etwa die Fetttröpfchen in Milch, die Eigenschaften einer Substanz bestimmen? Wie müssen Teilchen beschaffen sein, damit sie sich ganz von alleine zu komplizierten, dreidimensionalen Strukturen zusammenfinden? Auch solche Fragen lassen sich heute mit Computermethoden erforschen. Werkstoffwissenschafter sind oft an den makroskopischen Eigenschaften eines Materials interessiert – sie brauchen ein mehrstufiges Beschreibungssystem, das die Brücke von den einzelnen Atomen bis hin zum makroskopischen Werkstück umfasst.

„All diese Forschungserfolge wären völlig unmöglich, wenn wir nicht Zugang zu erstklassigen Computerressourcen hätten", sagt Held. Der VSC spielt für die computergestützte Materialforschung eine ganz entscheidende Rolle. Zweifellos ist dieses Forschungsgebiet eines, das die Möglichkeiten moderner Computercluster bis an die Grenzen ausreizt: Egal wie gut und modern ein Großrechner ist – Ideen für Simulationen, die noch ein bisschen mehr Rechenpower bräuchten, gibt es immer.



Ein Strukturmodel des hERG-Kaliumkanals (grau), mit dem Arzneistoff Cisaprid (grün) und den wichtigsten Aminosäuren der Bindetasche S624 (grau), Y652 (gelb) und F656 (rosa). Wird dieser Kanal gehemmt – zum Beispiel unabsichtlich durch Medikamente – können schwerwiegende Herzrhythmusstörungen auftreten.

DAS HERZ, DAS IM COMPUTER SCHLÄGT

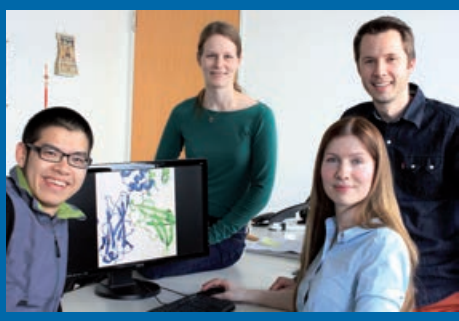
In unseren Herzzellen finden ständig unzählige komplizierte Prozesse statt: Ionen werden ausgetauscht, Botenstoffe docken an Rezeptoren an. Mit Computersimulationen kann man die Funktionsweise von Arzneimitteln ergründen.

Dass unser Herz schlägt, verdanken wir den elektrischen Signalen in unseren Herzmuskelzellen. Jede Zelle ist durch eine dünne Membran von der Außenwelt getrennt. Spezielle Proteine sorgen für Stoffaustausch zwischen der Zelle und ihrer Umgebung. Eines von ihnen ist der sogenannte hERG-Kanal, durch den positiv geladene Kalium-Ionen vom Inneren der Zelle nach außen transportiert werden. Dieser elektrische Strom spielt bei jedem Herzschlag eine entscheidende Rolle für die Rückkehr der Zelle in den Ruhezustand (die sogenannte Repolarisierungsphase). An der Universität Wien werden diese Kalium-Kanäle auf atomarer Ebene am Computer simuliert: Damit wollen die WissenschafterInnen die Funktionsweise von Medikamenten besser verstehen lernen.

Medikamente mit gefährlichen Nebenwirkungen

Die Kalium-Kanäle in den Herzmuskelzellen sind wichtige Angriffspunkte für Antiarrhythmika. Allerdings hat man beobachtet, dass manche dieser Medikamente den Kalium-Kanal verstopfen, und damit lebensgefährliche Herzrhythmusstörungen auslösen können. „Zahlreiche, chemisch ganz unterschiedliche Substanzen binden innerhalb der Kanalpore. Dadurch wird der hERG-Kanal blockiert und kann keine Kalium-Ionen mehr aus der Zelle transportieren“, erklärt Anna Weinzinger von der Universität Wien.

Mit Computersimulationen ist es möglich, die Vorgänge in den Ionenkanälen nachzuberechnen und zu verstehen. Molekulardynamik-Simulationen am VSC geben Auskunft über die Interaktion von Arzneistoffen mit den Ionenkanälen. Das Team am Department für Pharmakologie und Toxikologie der Universität Wien konnte dadurch beispielsweise bereits aufklären, wie das Öffnen und Schließen der hERG-Kanäle auf atomarer Ebene funktioniert oder wie sich bestimmte Mutationen auf die Fähigkeit der Proteine auswirken, Liganden an sich zu binden.



v.l.n.r. : Song Ke, Eva-Maria Zangerl, Anna Weinzinger, Tobias Linder

universität wien

FLÜSSIGE SALZE ALS LÖSUNGSMITTEL

Wie wechselwirken Moleküle miteinander? Computersimulationen helfen dabei, Substanzen mit maßgenschneiderten Eigenschaften herzustellen.

Manche Salze sind bei Raumtemperatur flüssig, man nennt sie „ionische Flüssigkeiten". In den letzten Jahren haben diese Flüssigkeiten in der Forschung viel Aufmerksamkeit erregt, weil sie als Lösungsmittel verwendet werden können, mit denen sich pharmazeutische Wirkstoffe direkt aus der Biomasse extrahieren lassen. Die Eigenschaften dieser ionischen Flüssigkeiten variieren sehr stark, je nach den Molekülen, aus denen sie sich zusammensetzen. Mit Computersimulationen wird es möglich, die Eigenschaften zu verstehen und noch bessere Substanzen zu entwickeln.

Kochsalz ist eine sehr einfache Substanz: Es besteht bloß aus Natrium- und Chlor-Ionen, die ein regelmäßiges Gitter bilden. Andere Salze sind viel komplizierter, ihre Bausteine sind nicht einzelne Ionen, sondern große, positiv und negativ geladene Moleküle (Kationen und Anionen). Das macht die Ausbildung eines regelmäßigen Kristallgitters viel komplizierter, daher sind diese Salze auch bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen noch flüssig. Erst in den 80erjahren erkannte man, welche Chancen diese Klasse an Substanzen bietet, seither sind die ionischen Flüssigkeiten ein heißes Forschungsgebiet.

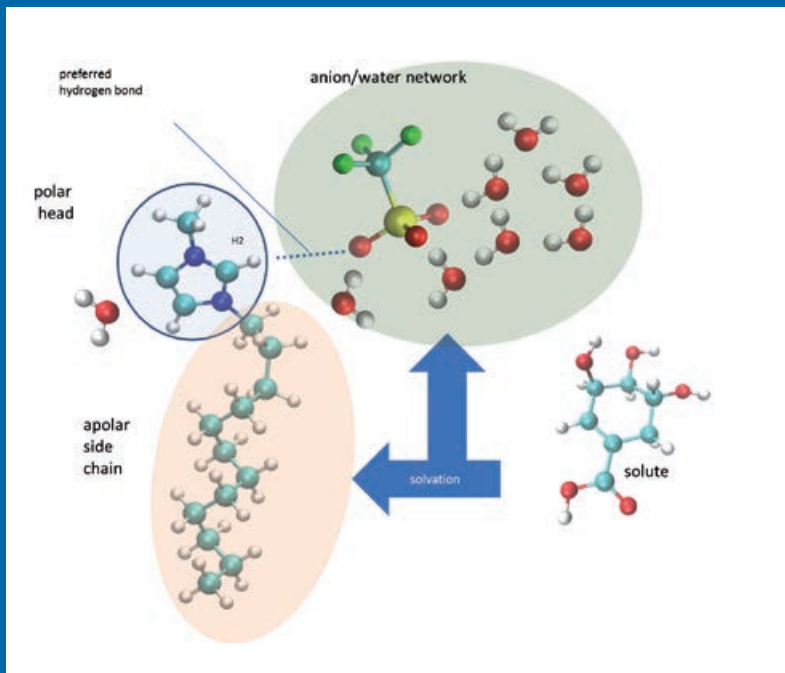
„Die Löslichkeitseigenschaften der ionischen Flüssigkeit werden stark von der Wahl der Kationen und Anionen beeinflusst, aus denen sie sich zusammensetzt", sagt Othmar Steinhauser vom Institut für Computergestützte Biologische Chemie der Universität Wien.

Ob Stoffe durch ionische Flüssigkeiten gelöst werden können oder nicht, hängt ganz entscheidend von den Wasserstoffbrücken ab. Wasserstoffbrücken sind relativ lose Verbindungen zwischen zwei Molekülen, die dadurch entstehen, dass ein gebundenes Wasserstoffatom des einen Moleküls mit Elektronen des anderen Moleküls wechselwirkt.

In reinen ionischen Flüssigkeiten gibt es schwache Wasserstoffbrücken zwischen den Kationen und Anionen. Mischt man sie mit Wasser, stehen diese Wasserstoffbrücken in Konkurrenz zu den deutlich stärkeren Wasserstoffbrücken zwischen den negativ geladenen Anionen der ionischen Flüssigkeit und den Wassermolekülen. Verwendet man ionische Flüssigkeiten als Lösungsmittel, greift der zu lösende Stoff genau in diesen Wasserstoffbrücken-Konkurrenzkampf ein. „Einerseits kann dieser Stoff seinerseits Wasserstoffbrücken ausbilden, andererseits kann er auch durch den hydrophoben Bereich der Kationen gelöst werden", sagt Steinhauser.

Die Computerberechnungen an der Universität Wien sind wichtig um experimentelle Daten interpretieren zu können. Ionische Flüssigkeiten werden spektroskopisch untersucht, die resultierenden Spektren hängen davon ab, welche Schwingungen und Rotationen der Atome in den einzelnen Molekülen angeregt werden können. In der Computersimulation kann man solche Prozesse sauber getrennt voneinander untersuchen und verstehen, während man im Experiment immer nur eine schwer zu deutende Überlagerung all dieser Anregungen sieht.

Für die Solvatation eines Stoffes spielen Wasserstoffbrücken eine entscheidende Rolle. In reinen ionischen Flüssigkeiten existieren schwache Wasserstoffbrücken zwischen den Kationen und Anionen. In Mischungen mit Wasser stehen diese in Konkurrenz zu wesentlich stärkeren Wasserstoffbrücken zwischen den Anionen und Wasser. In diesen Konkurrenzkampf greift nun der zu lösende Stoff ein. Einerseits bildet er vielleicht selbst Wasserstoffbrücken zu den Anionen oder Wasser, auf der anderen Seite kann er aber auch in apolaren (hydrophoben) Domänen der langen Kationenseitenketten gelöst werden.







v.l.n.r: Patrick Blies, Peter Schiansky, Herbert Muthsam, Eva Mundprecht, Friedrich Kupka, Natalie Happenhofer, Hannes Grimm-Strele

Ein Pulsar im Krebsnebel.

PULSIERENDE STERNE

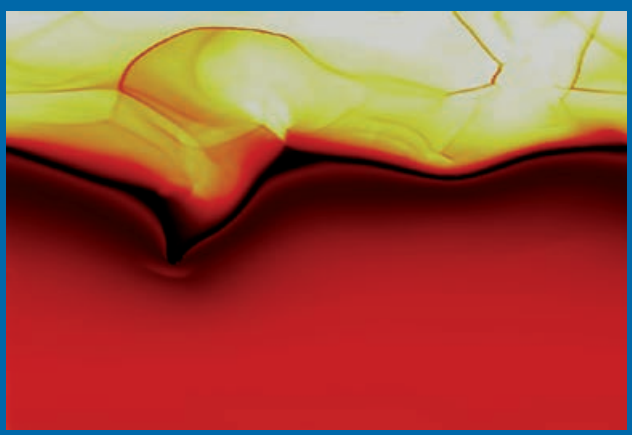
Manche Sterne ändern ihre Helligkeit aufgrund höchst komplizierter Prozesse in ihrer Atmosphäre, die sich nun in Computersimulationen berechnen lassen.

Entfernungsmessungen im Universum sind keine einfache Angelegenheit. Zwar lässt sich die von der Erde aus beobachtete Helligkeit eines Sterns präzise messen, doch um daraus auf seine Entfernung schließen zu können, müsste man seine tatsächliche Gesamtleuchtkraft kennen. Allerdings gibt es ganz besondere Sterne, mit denen sich dieses Problem lösen lässt: Die sogenannten Cepheiden sind pulsierende Sterne, deren Helligkeit sich entsprechend regelmäßig ändert. Aus der Dauer dieser Pulsationsperiode kann man auf die wahre Helligkeit des Sterns schließen und damit die Entfernung angeben. An der Universität Wien werden Cepheiden am Computer simuliert.

Von wenigen Tagen bis zu mehreren Wochen kann die typische Dauer eines Cepheiden-Helligkeitszyklus reichen. Verantwortlich für die immer wiederkehrenden Leuchtkraftschwankungen sind relativ komplexe Vorgänge im Stern. Die Energie, die im Inneren des Sterns freigesetzt wird, muss erst durch die äußeren Regionen des Sterns gelangen, um zur Leuchtkraft beizutragen. Allerdings sind nicht alle Regionen des Sterns gleich durchlässig für diese Strahlung von innen. Die Strahlungsdurchlässigkeit des Sterns hängt unter anderem vom Druck und von der Temperatur ab.

Wenn ein Teil der Strahlung nicht nach außen gelangen kann, staut sich die Energie im Inneren. Druck und Temperatur steigen, dadurch wird die äußere Schicht des Sterns noch undurchsichtiger. Irgendwann ist dann allerdings eine kritische Schwelle erreicht – die aufgeheizte Region und letztlich der ganze Stern dehnt sich aus, dadurch sinkt der Druck wieder und der Stern kann wieder mehr Licht abstrahlen. Die Gravitationskraft komprimiert den Stern anschließend, und der Zyklus beginnt von vorne.

Die Beobachtung dieser Objekte hat durch Satellitenmissionen eine Genauigkeit



Die Atmosphäre eines Cepheiden. Die scharfen Strukturen markieren starke Stoßwellen in der Atmosphäre, die sich teilweise mit mehr als 4-facher Schallgeschwindigkeit bewegen.

erreicht, von der man vor zehn Jahren nur träumen konnte. Um aber aus den Beobachtungen die wirklich interessierenden Resultate (Festlegung der Entfernungsskale im Universum, innerer Sternaufbau, auch chemische Zusammensetzung des Sterns) gewinnen zu können, sind Modellrechnungen am Computer nötig.

Derartige Rechnungen werden nun zwar seit Jahrzehnten durchgeführt, es handelt es sich freilich um radialsymmetrische („zwiebelschalenförmig aufgebaute") Modelle. Erst ganz neuerdings sind mehrdimensionale Modelle in Reichweite, in denen auch die verwirbelten konvektiven Strömungen dargestellt werden können, nicht nur Bewegungen in Richtung hin zum Sternzentrum oder weg davon. „Eine derartige Modellierung dieser Sternpulsationen wird in der Community als die Grand Challenge bezeichnet, weil sie extrem aufwändig ist, viele hundert Mal mehr Rechenleistung erfordert als radialsymmetrische Modelle", erklärt Herbert J. Muthsam von der Universität Wien: „Man benötigt die besten Methoden der numerischen Mathematik. Die Numerik muss nicht nur mit der gewaltigen Ausdehnung, sondern auch mit kleinräumigen, scharfen Strukturen zurechtkommen. Viele interessante Effekte können so aber erstmals dargestellt werden." Auf diesem Wege sollen in den nächsten Jahren den präzisen modernen Beobachtungen hochentwickelte theoretische Modelle zur Auswertung zur Seite gestellt werden.

RECHNEN BIS DIE RETTUNG KOMMT

Tourenplanung für Krankentransporte ist eine komplizierte Angelegenheit. Mit klugen Computerprogrammen kann man Fahrten sparen und unnötige Wartezeiten verhindern.

Dass bei einem Notfall möglichst rasch die Rettung kommen muss ist klar. Doch es gibt auch viele Fahrten von Rettungswägen, die zeitlich verschiebbar sind, etwa wenn Personen zu Untersuchungsterminen ins Krankenhaus geholt und wieder nach Hause gebracht werden müssen. Diese Touren optimal zu planen ist eine große mathematische Herausforderung, besonders wenn man auch noch berücksichtigt, dass unvorhergesehene Ereignisse wie verstopfte Straßen oder kurzfristige Zusatzaufträge vorkommen können. Wissenschaftler der Universität Wien und Johannes Kepler Universität Linz entwickeln Computer-Algorithmen, die mit diesen Anforderungen fertig werden.

Die Aufgabenstellung ähnelt dem berühmten „Travelling Salesman Problem" der Informatik: Angenommen, Sie müssen eine Reihe von Orten in beliebiger Reihenfolge besuchen – was ist die Route mit der kürzesten Wegstrecke? Bei einer großen Zahl von Orten steigt die Anzahl der möglichen Reihenfolgen rasch ins Astronomische und selbst die leistungsfähigsten Computer können nicht mehr alle Varianten durchprobieren.



Die Erstellung des Rettungs-Tourenplans ist allerdings noch viel komplizierter. Man hat eine bestimmte Anzahl von Fahrzeugen, die gleichzeitig eingesetzt werden können, und zusätzlich müssen noch eine Reihe von Bedingungen erfüllt werden: So darf etwa die Zeitdauer, die eine Person im Rettungswagen verbringt, eine gewisse Maximaldauer nicht übersteigen (man spricht dann von einem „Dial-A-Ride-Problem").

Zu diesem hochkomplexen System wurden nun in der Forschungsgruppe von Richard Hartl an der Universität Wien und Karl Dörner (Johannes Kepler Universität Linz) verschiedene stochastische Erweiterungen studiert: Der beste Tourenplan nützt nämlich wenig, wenn er durch einen kleinen Zusatzauftrag gleich wieder umgeworfen werden muss. Effizienter ist es, passende Pufferzeiten freizuhalten, damit man auch mit unvorhergesehenen Aufgaben fertig werden kann. Man muss abschätzen, wie lange einzelne Personen im Krankenhaus bleiben werden, um dann auch gleich ihren Rücktransport zu planen. Außerdem können die Fahrzeiten manchmal zufällig deutlich länger sein – etwa bei einem Verkehrsstau aufgrund eines Unfalls. „Wir haben historische Unfalldaten analysiert und in das Programm miteinbezogen", erklärt Michael Schilde (Johannes Kepler Universität Linz).

Kein Computer kann bei so einem komplexen System alle denkbaren Tourenpläne durchrechnen um den effizientesten zu finden. Man benötigt daher kluge Heuristiken – Programme, die in möglichst wenigen Rechenschritten zu einem guten Ergebnis kommen, selbst wenn das dann nicht unbedingt die beste aller möglichen Lösungen ist. Das Ziel ist ein Programm, das in Echtzeit laufend Tourenpläne berechnet und anpasst. Genau so schnell wie neue Informationen hereinkommen, müssen sie auch verarbeitet werden – spätestens wenn die Rettung kommt, muss die Berechnung fertig sein, damit man sie an den richtigen Ort weiterschicken kann.

TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN
Vienna University of Technology

DIE RÄTSEL ULTRAHEISSER MATERIE

Das Quark-Gluon-Plasma ist der heißeste Materiezustand, den man kennt. Teilchenphysikalische Computersimulationen sollen nun helfen, dieses Plasma zu verstehen.

Hunderttausendmal heißer als das Zentrum der Sonne ist ein Quark-Gluon-Plasma, der Materiezustand, in dem sich das ganze Universum Sekundenbruchteile nach dem Urknall befand. Heute entstehen Quark-Gluon-Plasmen nur bei extrem hochenergetischen Teilchenkollisionen, etwa am Beschleunigerring am CERN, wenn man Blei-Atomkerne fast mit Lichtgeschwindigkeit zur Kollision bringt. Dieser exotische Materiezustand gibt der Wissenschaft bis heute große Rätsel auf. An der TU Wien gelingt es, einige dieser Rätsel durch Computersimulationen zu lösen.

Eine Teilchenkollision ist kein Autounfall

Das Quark-Gluon-Plasma ist so heiß, dass in seinem wilden Teilchengetümmel nicht einmal Protonen und Neutronen stabil bleiben können. Sie werden in der Hitze des Plasmas in ihre Einzelteile aufgeschmolzen, die elementaren Bausteine der Materie können sich ohne feste Bindung bewegen: Quarks, die fundamentalen Masseteilchen, und Gluonen, die als Kraftteilchen dafür verantwortlich sind, dass sich die Quarks zu Protonen und Neutronen zusammenbinden können.

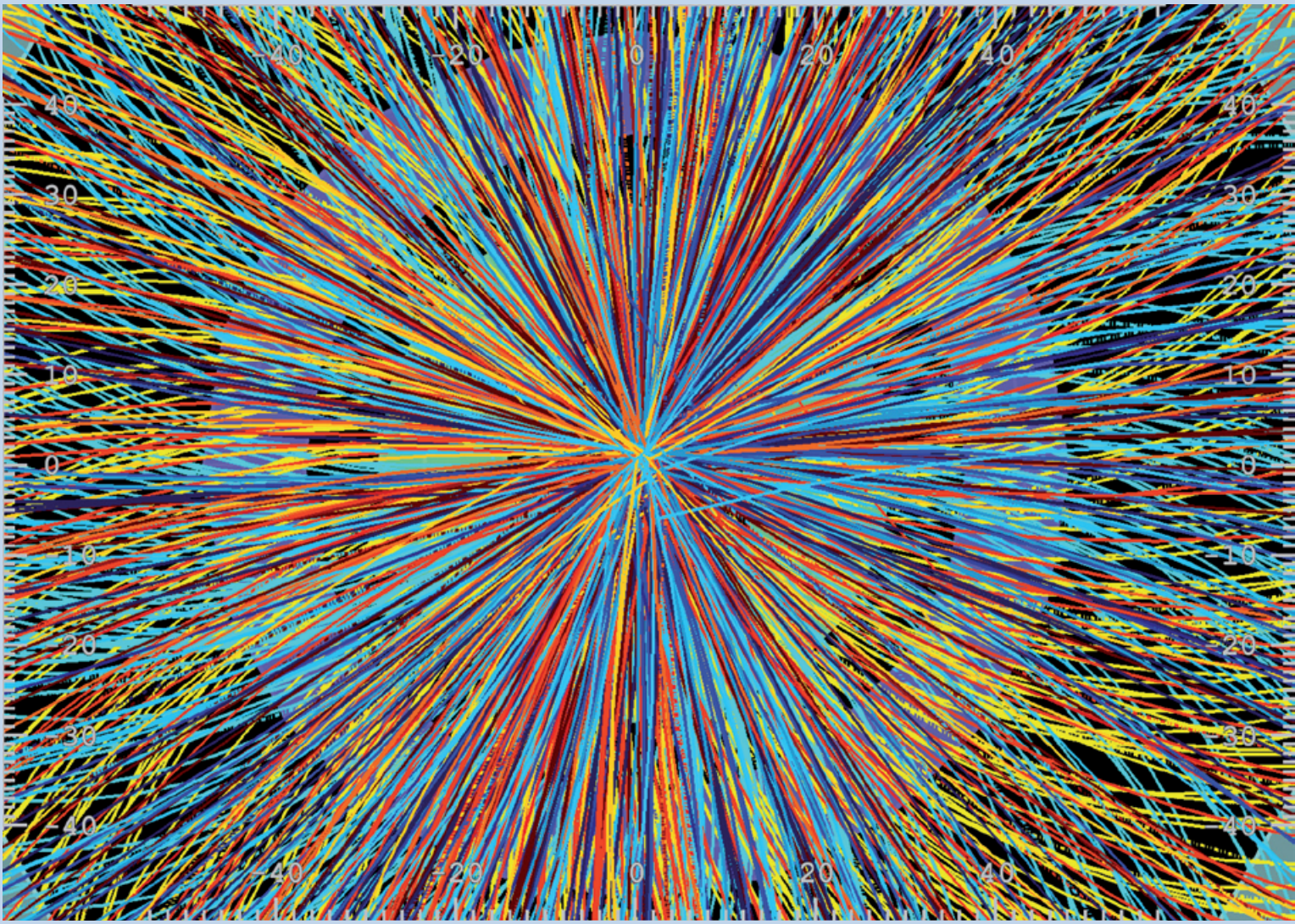
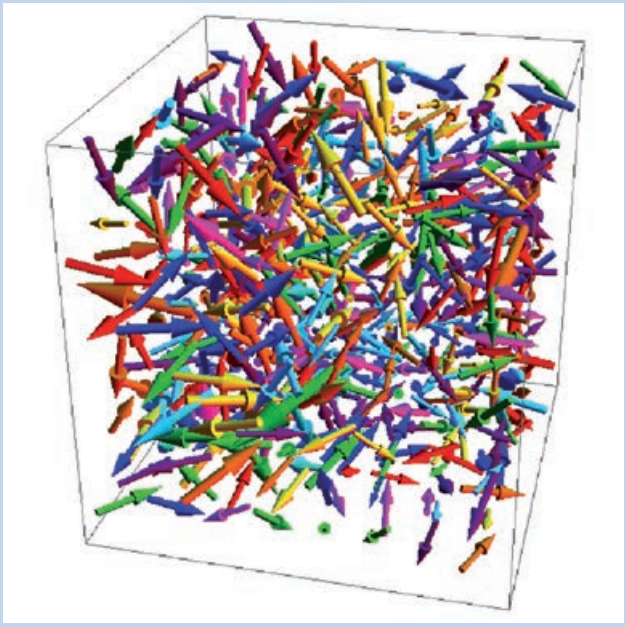
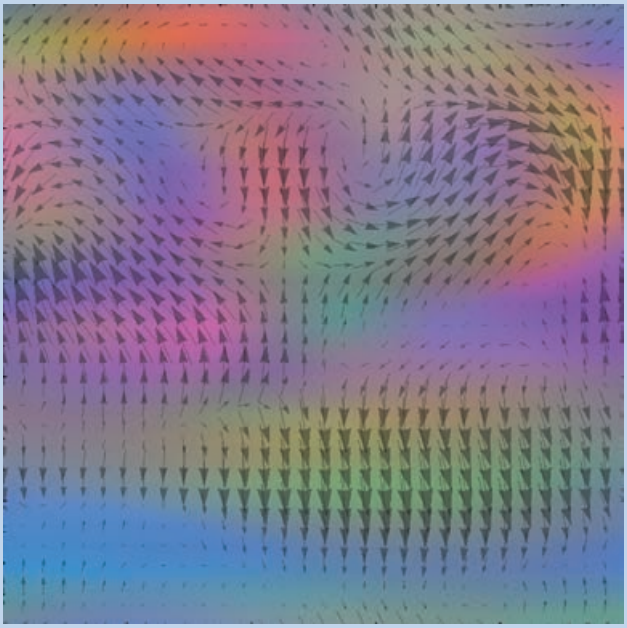


Bild einer Blei-Ionen-Kollision am CERN





Visualisierung des Quark-Gluon-Plasmas mit seinen Plasma-Instabilitäten.

Dass sich die Kernteilchen von Atomen in ihre Bestandteile auflösen, wenn sie mit Höchstgeschwindigkeit aufeinandergeschossen werden, klingt intuitiv einleuchtend – doch man darf sich diese Zusammenstöße nicht vorstellen wie einen Autocrash, bei dem die Autoteile in der Luft herumfliegen. „Es lösen sich nicht nur die Neutronen und Protonen der Kerne in ihre Bestandteile auf, zusätzlich entsteht auch eine ganze Menge neuer Teilchen", erklärt Andreas Ipp (TU Wien). Nach Einsteins Relativitätstheorie sind Masse und Energie äquivalent, die Bewegungsenergie der Atomkerne kann beim Zusammenstoß in neue Teilchen umgewandelt werden. Die Bruchstücke, die nach der Kollision übrigbleiben, haben daher insgesamt mehr Masse als die beiden Atomkerne.

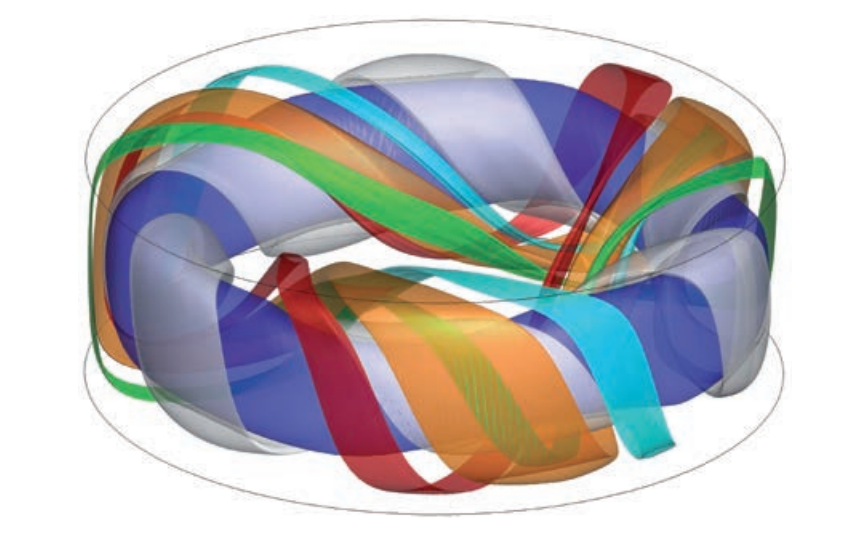
Die flüssigste Flüssigkeit der Welt

Die Eigenschaften des Quark-Gluon-Plasmas bergen noch immer einige große Rätsel für die Wissenschaft: Wie sich herausstellt ist das Plasma ungeheuer dünnflüssig – vermutlich sogar so dünnflüssig, wie ein Fluid aus quantentheoretischer Sicht überhaupt nur sein kann. Außerdem strebt es nach der Teilchenkollision äußerst schnell in ein thermisches Gleichgewicht. In Materie, wie wir sie kennen, stellen sich solche Gleichgewichte recht langsam ein. Es kann lange dauern, bis das Einschalten der Heizung auch auf der anderen Seite des Zimmers zu spüren ist. Das Quark-Gluon-Plasma hingegen zeigt schon in den winzigen Sekundenbruchteilen, in denen es nach der Teilchenkollision beobachtet werden kann, eine gleichmäßig-homogene Temperaturverteilung.

Ein Schlüssel zum Verständnis solcher Phänomene könnten die sogenannten „Plasma-Instabilitäten" sein – spontan auftretende Ströme im Plasma: „Man kann sich das ähnlich vorstellen wie elektrische Ströme, allerdings gibt es im Quark-Gluon-Plasma gleich acht verschiedene Sorten davon", erklärt Andreas Ipp. Ähnlich wie elektrischer Strom mit elektromagnetischen Feldern zusammenhängt, gehen die Plasma-Ströme mit Gluonen-Feldern einher.

Am Computer lassen sich solche Plasma-Instabilitäten berechnen, allerdings nur mit großem Aufwand: Die Prozesse im Plasma, die man analysiert, dauern nur einige Yoktosekunden – eine Yoktosekunde (10^{-24} Sekunden) ist ein Millionstel eines Milliardstels einer Milliardstelsekunde. Das Verhalten der Teilchen innerhalb dieses Zeitraumes zu berechnen nimmt allerdings auch mit einem großen Computercluster einige Wochen an Rechenzeit in Anspruch.

Die Messungen am CERN werden wohl auch in den nächsten Jahren neue, spannende Ergebnisse für die Quark-Gluon-Forschung liefern – und vielleicht hilft uns das letztlich auch, die Sekundenbruchteile nach dem Urknall besser zu verstehen und zu erkennen, warum unser Universum gerade so aussieht, wie wir es heute wahrnehmen können.





Hendrik Kuhlmann und Mitarbeiter

Durch mikro-Strömungseffekte bilden sich Torus-artige Strukturen aus, in denen sich die Teilchen bewegen.

BERECHNET IN WIEN, GETESTET IM WELTRAUM

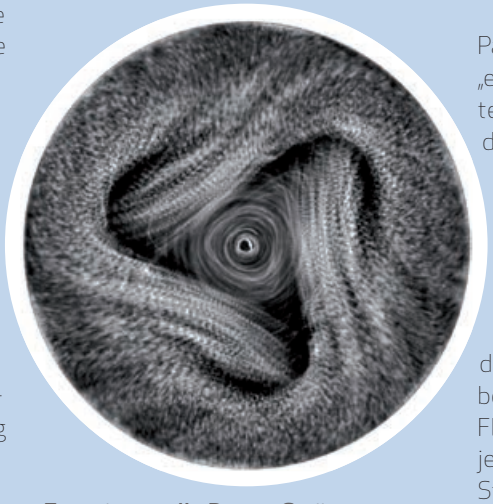
Einem überraschenden Effekt geht man mit Computersimulationen und Experimenten in der Schwerelosigkeit auf den Grund: Teilchen in einem Tropfen können sich schnell zu regelmäßigen Bändern zusammenfügen.

Geheimnisvoll schöne Muster entstehen am Computerbildschirm, wenn an der TU Wien die Teilchenbahnen von winzigen Partikeln in einem Flüssigkeitstropfen berechnet werden. Die Oberflächenspannung ist die treibende Kraft hinter diesen Vorgängen. Mit Hilfe von Computerberechnungen bereitet man nun Experimente in Schwerelosigkeit vor, die auf der Raumstation ISS durchgeführt werden sollen. Diese Forschungen sollen ein besseres Verständnis von Flüssigkeitsströmen bringen. Diese grundlegenden Untersuchungen könnten später beim Bau eines „Lab on a Chip" wichtig werden, wenn es um die Manipulation kleinster Flüssigkeitsmengen geht, die mit Partikeln versetzt sind. Auch die Herstellung von Halbleiter-Kristallen wird durch solche Strömungen beeinflusst.

Strömungen, verursacht durch Oberflächenspannung

Die Oberflächenspannung sorgt nicht nur dafür, dass ein Wasserläufer über einen Teich spazieren kann ohne zu versinken und dass Wassertropfen im freien Fall eine runde Form annehmen. Die Oberflächenspannung kann auch für die Ströme im Inneren der Flüssigkeit verantwortlich sein.

„Wir studieren Flüssigkeitstropfen zwischen zwei zylindrischen Stäben mit unterschiedlicher Temperatur", erklärt Hendrik Kuhlmann. Die Oberflächenspannung hängt von der Temperatur ab, daher ist sie auf den beiden Seiten des Tropfens unterschiedlich stark. Das kann einen Konvektionsstrom im Inneren des Tropfens verursachen – die Flüssigkeit beginnt intensiv zu zirkulieren.



Experimentelle Daten: Strömungseffekte mit kleinen Partikeln

Um diese Flüssigkeitsströme sichtbar zu machen, bringt man winzige Teilchen in den Tropfen ein und verfolgt ihre Bahn. Eigentlich sollten diese Teilchen dann genau dieselben Wege einschlagen wie die anderen Moleküle im Tropfen. Man könnte vermuten, dass sie sich gleichmäßig ausbreiten und so Aufschluss über das Strömungsverhalten in jedem einzelnen Punkt des Tropfens geben. Doch überraschenderweise verhalten sich die Teilchen oft ganz anders. Sie schließen sich zusammen und können verschiedene Muster bilden, wie zum Beispiel ein geschlossenes und gewundenes Band, das im Tropfen rotiert.

Ein Kick von der Oberfläche

„Diese Bewegung hängt von vielen Parametern ab", sagt Hendrik Kuhlmann, „etwa von der Teilchengröße, ihrer Dichte und von der Struktur der Strömung in der Flüssigkeit." Wie es zu dem Phänomen kommt, dass sich die Teilchen entmischen und eine geschlossene Struktur bilden, wird in Fachkreisen noch diskutiert. Der entscheidende Grund dafür dürfte auch wieder in der Oberflächenspannung liegen: Wenn die Teilchen klein sind und genau dieselbe Dichte haben wie die umgebende Flüssigkeit, dann folgt der Schwerpunkt jedes Teilchens einer bestimmten Stromlinie. Diese Stromlinien können der Oberfläche beliebig nahe kommen. Wird der Abstand der Stromlinie zur Oberfläche kleiner als der Radius des Teilchens, würde das Teilchen eigentlich ein Stück aus der Oberfläche herausragen. Dazu müsste das Teilchen aber die Oberflächenspannung überwinden.

Die Oberflächenspannung verhindert also, dass der Schwerpunkt des Teilchens der Oberfläche beliebig nahe kommen kann und übt in diesem Fall eine Kraft auf das Teilchen aus. „Genau diese Krafteinwirkung bewirkt, dass die Gesamtheit aller Teilchen wie auf einem Torus gewunden durch den ganzen Tropfen führt", erklärt Hendrik Kuhlmann.

Die Berechnungen, mit denen sich solche Strömungsphänomene verstehen lassen, sind äußerst komplex. Die Flüssigkeitsströmung muss mit sehr hoher Auflösung berechnet werden, um die richtigen Ergebnisse zu erhalten. Ohne einen Großrechner wie den VSC wären solche Berechnungen nicht möglich.

Auf der internationalen Raumstation soll in den kommenden Jahren ein Experiment unter Schwerelosigkeit neue Einblicke in dieses Phänomen geben. Es ist wichtig, schon jetzt die Berechnungen dazu durchzuführen, um dann im Experiment genau zu wissen, bei welchen Parametern besonders interessante Effekte zu erwarten sind.

Auf die spannenden Phänomene der Strömungsmechanik auf kleinen Längenmaßstäben wurde man unter anderem durch Kristallzucht-Versuche aufmerksam. Seit einiger Zeit weiß man, dass bei der Kristallzucht aus der Schmelze Verunreinigungen periodisch in den Kristall eingebaut werden, wenn die Strömung in der Schmelze oszilliert. Besonders auf dem Gebiet der Mikrofluidmechanik ist das Zusammenspiel von Oberflächenspannung und Strömung wichtig: Mit Mikro-Strömungen möchte man den Transport von kleinen Teilchen sowie ihre Vermischung und Entmischung kontrollieren.

„Ein wichtiges Ziel der Mikrofluidmechanik ist heute das ‚Lab on a Chip'", erzählt Hendrik Kuhlmann. Messmethoden können heute so miniaturisiert werden, dass sie auf einem kompakten Chip von oft nur wenigen Millimetern Größe untergebracht werden können. Dieser Chip ermittelt dann direkt in der Flüssigkeit wichtige Messgrößen. Dabei werden winzigste Fluidmengen gezielt transportiert und mit anderen Agenzien zur Reaktion gebracht. Die Funktionsweise eines solchen Chips kann man nur mit Hilfe der Strömungsmechanik erklärt werden. Die Computersimulationen liefern also nicht bloß faszinierende Muster von Teilchenbahnen, sondern wichtige Erkenntnisse, die in unterschiedlichen Technologien eine große Rolle spielen können.

QUANTENEFFEKTE IN SUPER-ZEITLUPE

Mit Hilfe von Laserpulsen lassen sich immer kürzere Zeiträume auflösen. Dadurch eröffnen sich ganz neue Einblicke in die Physik der Atome und Moleküle.

Haben Sie schon einmal versucht, eine vorbeifliegende Libelle zu fotografieren? Schnelle Bewegungen, rasche Prozesse sind schwer zu beobachten. Ganz besonders trifft das auf Vorgänge in der Quanten-Welt zu: Mit Millionen Kilometern pro Stunde bewegen sich Elektronen eines Atoms. Die Zeitskala, auf der atomare Prozesse ablaufen, ist so kurz, dass sie mit unserer menschlichen Vorstellung kaum fassbar ist. Trotzdem gelingt es heute, in diesen Bereich vorzudringen. Mit Hilfe ultrakurzer Laserpulse lässt sich der zeitliche Ablauf von Quanten-Prozessen beobachten. Am Institut für Theoretische Physik der TU Wien wird daran seit Jahren erfolgreich geforscht.

Quantenphänomene laufen meist sehr schnell ab. Sogar die Zeitskala moderner Mikroelektronik, die mit Gigahertz-Taktfrequenzen arbeitet, wirkt dagegen noch recht gemächlich. Untersucht werden diese Phänomene, indem man ultrakurze Laserpulse auf einzelne Atome oder Moleküle abfeuert.

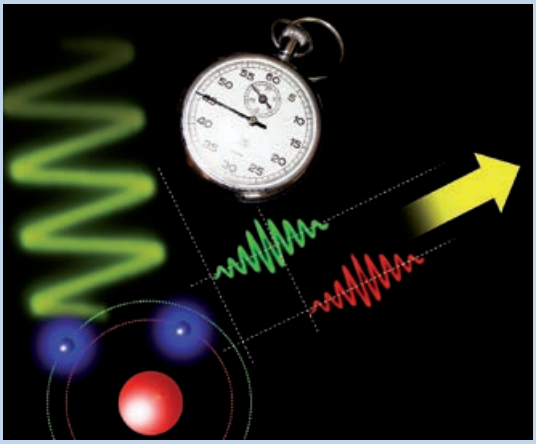


v.l.n.r.: Joachim Burgdörfer, Stefan Nagele, Renate Pazourek

Mittlerweile lassen sich Laserpulse in der Größenordnung von Attosekunden herstellen, etwa am Institut für Photonik der TU Wien. Eine Attosekunde ist ein Milliardstel eines Milliardstels einer Sekunde, also 10 hoch minus 18 Sekunden. Verglichen mit den Zeitskalen, mit denen wir im täglichen Leben zu tun haben, ist das unvorstellbar kurz: „Eine Attosekunde verhält sich zu einer Sekunde etwa so wie eine Sekunde zum Alter des Universums", erklärt Prof. Joachim Burgdörfer, Vorstand des Instituts für Theoretische Physik. Die Lichtwelle des Attosekunden-Laserpulses hat nur Zeit für einige wenige Schwingungen, bevor der Laserpuls wieder vorüber ist.

Die Attosekundenphysik ist heute ein boomendes Forschungsgebiet, das auf der ganzen Welt mit großer Aufmerksamkeit verfolgt wird. Das liegt nicht nur daran, dass man durch neue Attosekunden-Forschung einen tieferen Einblick in die Zeitabläufe in der Quantenphysik erhält, sondern auch an den technologischen Möglichkeiten, die sich daraus ergeben. Letzten Endes sollen ultrakurze Laserpulse dazu verwendet werden können, genau zum richtigen Zeitpunkt in atomare und molekulare Prozesse eingreifen zu können, zum Beispiel um gezielt chemische Bindungen aufzubrechen oder gewünschte Reaktionen zu beschleunigen.

Dazu muss man allerdings das Zusammenspiel zwischen Licht und Materie noch besser verstehen und viele technologische Probleme besser in den Griff bekommen. So könnten sich etwa eines Tages Moleküle mit Hilfe von Laserpulsen in genau definierte Bruchstücke aufspalten lassen – doch bis das tatsächlich möglich wird, muss sich die Attosekundenphysik wohl noch einige Zeit lang ähnlich dynamisch weiterentwickeln, wie sie das auch schon in den letzten Jahren und Jahrzehnten getan hat.



Licht interagiert mit Materie: Dieses Wechselspiel geht auf unvorstellbar kurzen Zeitskalen vor sich. Durch eine Kombination von hochpräzisen Messungen und aufwändigen theoretischen Berechnungen kann man die Vorgänge allerdings zeitlich auflösen – etwa die Emission von Elektronen aus einem Atom.

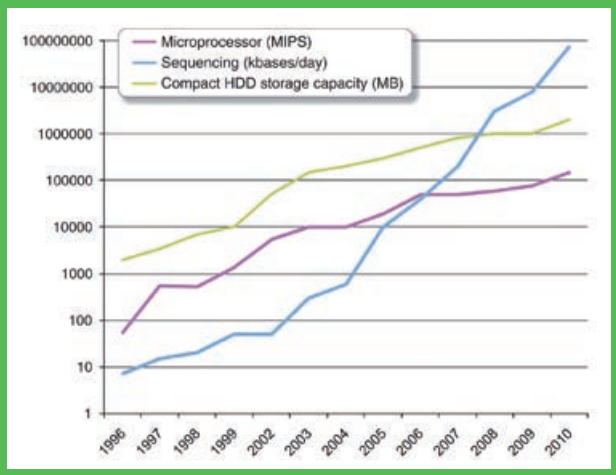
DURCH COMPUTERANALYSEN DAS LEBEN VERSTEHEN

Dass die DNA den wesentlichen Bauplan für lebendige Organismen enthält, wissen wir seit über 60 Jahren. Heute erlauben Computermethoden, tief in die Muster des Gen-Codes hineinzublicken.

Das gesamte Genom eines Menschen passt auf eine CD. Komprimiert hätte die gesamte Auflistung unserer DNA-Basenpaare einen Speicherbedarf von weniger als 600 Megabyte. Das klingt im Zeitalter von Terabyte-Festplatten recht harmlos, doch Gene zu sequenzieren und ihr Zusammenspiel analytisch zu erforschen ist eine Aufgabe, die man heute nur mit großen Hochleistungscomputern lösen kann. Assoziierter Prof. David Kreil, Universität für Bodenkultur Wien (BOKU), verwendet dafür den VSC.

Die Gene sind Bauanweisungen für die Herstellung funktioneller Mokeküle – doch nicht jeder Abschnitt der Gen-Sequenz wird gleichermaßen genutzt. In Form von RNA-Molekülen werden die Bauanweisungen der DNA kopiert und weitergegeben. Dabei können Teile des Gens aus der RNA herausgeschnitten werden – man spricht dann vom „Splicing". Dadurch kann es sein, dass von ein und demselben Gen in unterschiedlichen Fällen unterschiedliche Abschnitte verwendet werden und zur Erzeugung unterschiedlicher funktioneller Moleküle führen. Die Unterscheidung dieser oft sehr ähnlichen Varianten ist eine große technische Herausforderung.

Welche Gene in einem Organismus gerade aktiv sind, lässt sich nämlich im Experiment quantitativ erfassen.



Die Geschwindigkeit des Gen-Sequenzierung nahm in den letzten Jahren dramatisch zu. Gemäß dem Mooreschen Gesetz beobachtet man in der Rechenleistung von Computern oder auch in der verfügbaren Speicherkapazität exponentielle Anstiege. Die von Gen-Sequenzierung erzeugte Datenmenge wächst jedoch sogar noch rascher. Deren Analyse erfordert daher den Einsatz neuer Algorithmen und paralleler Hochleistungsrechner wie den VSC.



Ein winziger DNA-Abschnitt – unser Genom besteht aus etwa 3 Milliarden Basenpaaren.

Dabei entstehen jedoch gewaltige Datenmengen: Ein typischer Datensatz ist 6 Terabyte groß, und benötigt selbst auf 100 VSC Rechenknoten Wochen zur Auswertung.

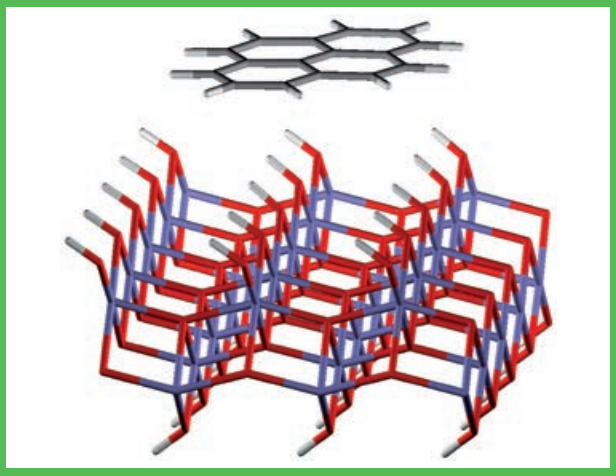
Mit moderner Bioinformatik und entsprechenden Großrechnern lässt sich so heute nicht nur aus einzelnen sequenzierten DNA-Stücken die Genomsequenz zusammenbauen, sondern man kann auch feststellen, welche Gene in welcher Situation besonders aktiv sind, welche Gene miteinander wechselwirken und welche Abschnitte im Splicing-Prozess weggeschnitten werden. Das gibt zum Beispiel Einblick, in welchem Krankheitsstadium sich ein geschwächter Organismus befindet, ob eine bestimmte Heilmethode bei einem Patienten wirken wird oder nicht, und selbst den molekularbiologischen Geheimnissen des Alterns könnte man mit solch systematischen Studien nachgehen.



David Kreil erklärt sein Forschungsprojekt am VSC Benutzer-Workshop in Neusiedl am See.



Daniel Tunega am Dach des Franz Schwackhöfer Hauses der BOKU Wien.



Ein Pyren interagiert mit einer Oberfläche aus mineralischem Lepidokrokit (Gamma-FeOOH – Eisenoxihdroxid).

DIE CHEMIE DES BODENS

An der Universität für Bodenkultur wird mit Computerberechnungen erklärt, wie Böden auf Schadstoffe reagieren.

Was machen Schadstoffe, wenn sie in den Boden gelangen? Viele verschiedene chemische Substanzen werden in den Boden eingebracht, etwa durch die Landwirtschaft. Wie sie sich dort verhalten, an welchen Bestandteilen des Bodens sie andocken und wie sie sich dabei verändern können, wird an der Universität für Bodenkultur Wien erforscht.

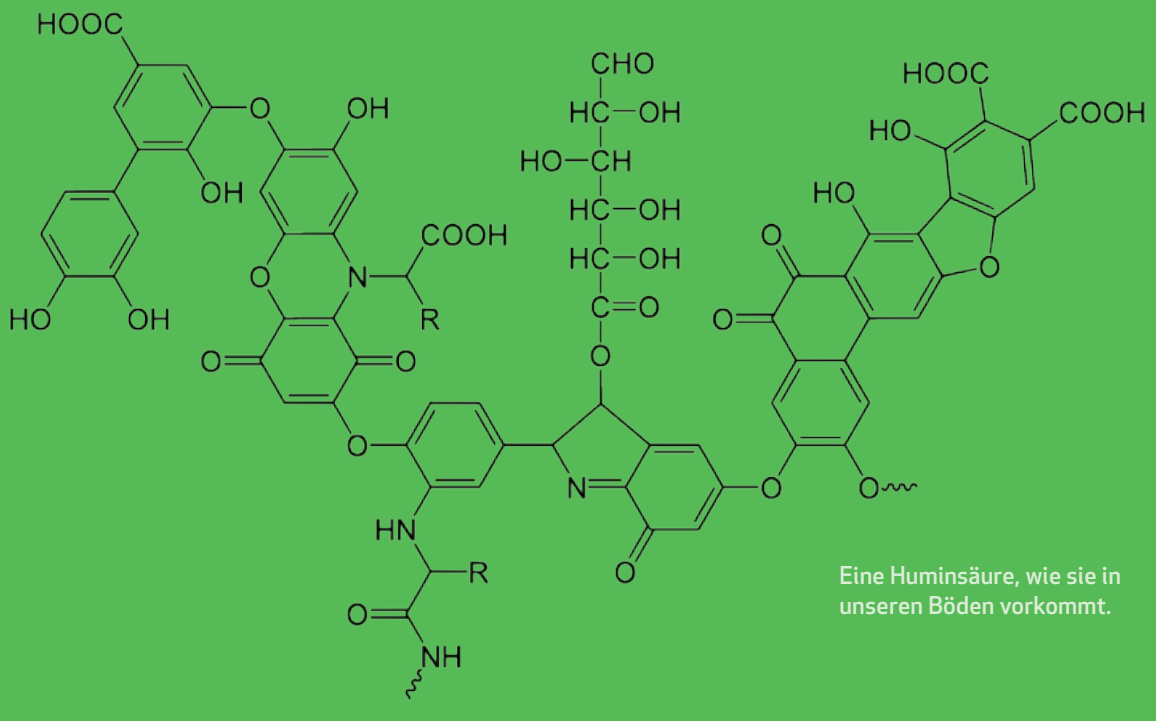
Unsere Böden sind ein kompliziertes Gemisch aus vielen ganz verschiedenen Einzelkomponenten: „Der Hauptanteil wird von anorganischen Stoffen gebildet, von den Bodenmineralien", erklärt Daniel Tunega. Daneben enthalten die Böden auch organisches Material – lebende Mikroorganismen, aber auch abgestorbenes organisches Material. Der Rest des Bodens besteht aus Wasser und Luft.

Pestizide und Herbizide sickern in den Boden ein, Schadstoffe aus dem Regen oder aus der Luft gelangen in die Erde. Um erklären zu können, mit welchen der vielen Bodenbestandteile diese Stoffe wechselwirken, muss man die Vorgänge im Boden auf atomarer Ebene untersuchen.

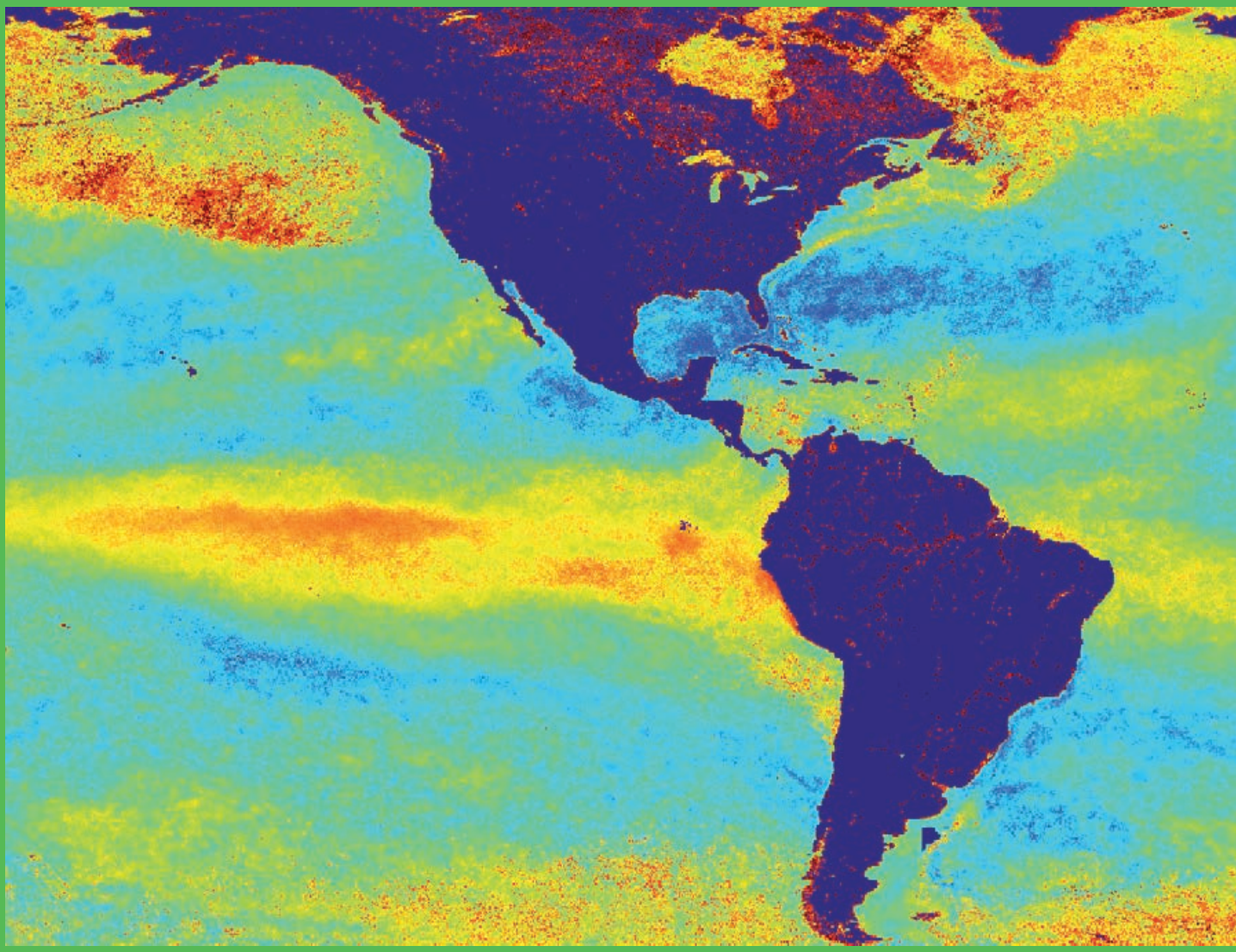
Anorganische Mineralien sind oft verhältnismäßig einfach zu beschreiben, die anorganischen Bestandteile hingegen sind meist viel komplizierter: Sie enthalten oft Makromoleküle, zum Beispiel die Huminsäuren, die aus vielen tausend Atomen bestehen können.

Derartig komplizierte Objekte kann man heute selbst mit den größten und schnellsten Computern nicht im Detail berechnen, man muss daher kluge Vereinfachungen entwickeln. Oft muss man gar nicht das ganze Molekül beschreiben, sondern nur die funktionale Gruppe, die letztlich dafür verantwortlich ist, dass ein anderes Molekül andocken kann.

Das Wissen über das chemische Verhalten unserer Böden kann wichtige Aufschlüsse darüber geben, welche Substanzen für den Boden schädlich sein können, und welche eher harmlos sind. Ein besseres Verständnis der Chemie des Bodens kann also für die Umwelt von großer Bedeutung sein.



Eine Huminsäure, wie sie in unseren Böden vorkommt.

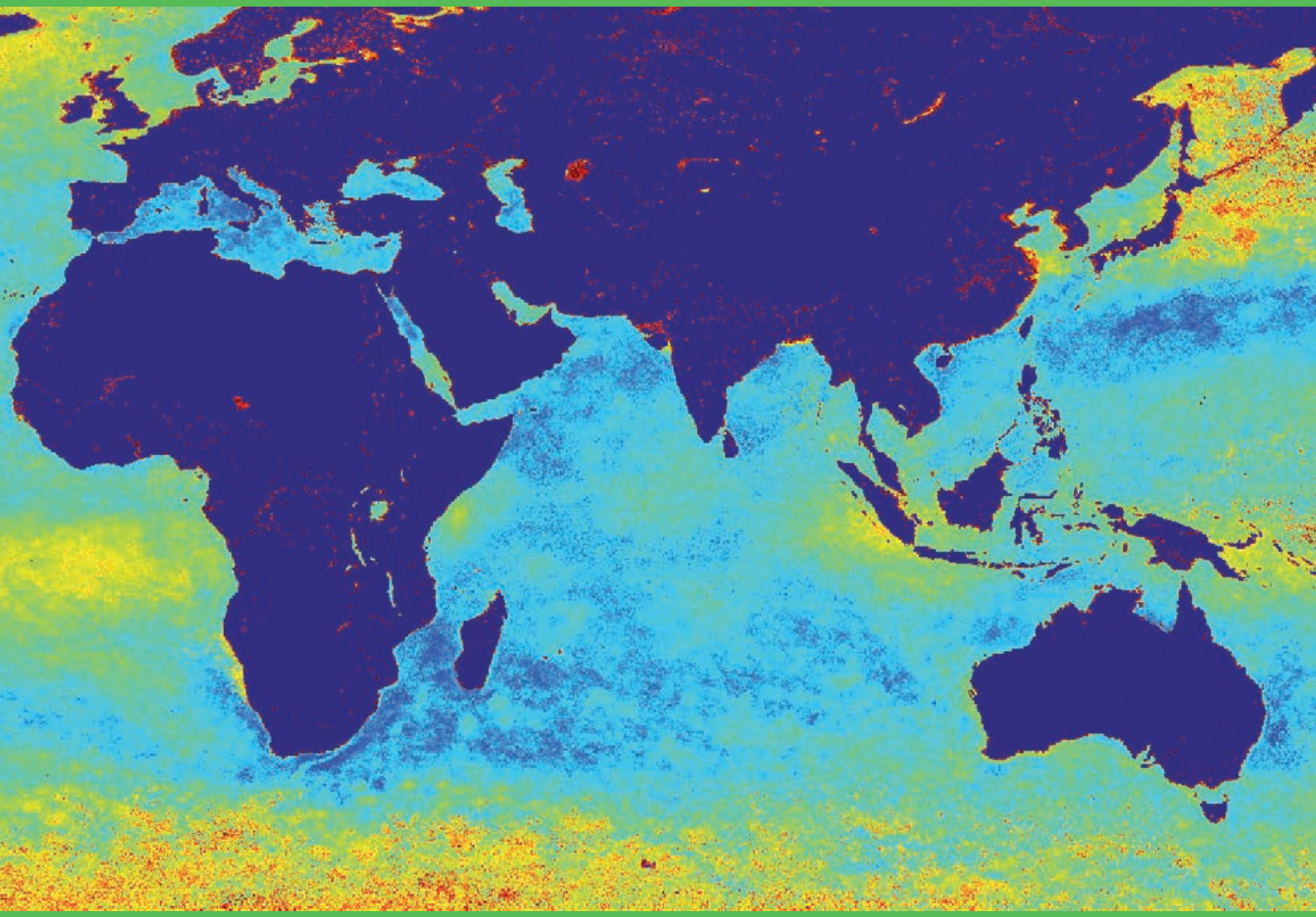


SATELLITENDATEN FÜR DIE GLOBALE BEOBACHTUNG DER VEGETATION

Satelliten liefern uns täglich gewaltige Bildmengen über den gesamten Erdball. Mit hoher Rechenleistung kann man aus diesen Daten wertvolle Information über die Dynamik der Landoberfläche gewinnen.

Rund um die Uhr machen Satelliten Bilder von der Erde. Man benötigt sie nicht nur für die Wettervorhersage, sondern auch um das Klima zu verstehen oder Veränderungen der Vegetationsdichte im Lauf der Jahreszeiten zu registrieren. Doch die Fotos alleine sagen noch wenig aus. An der Universität Für Bodenkultur Wien (BOKU) werden die Satellitendaten eingehend bearbeitet und untersucht.

„Wir bearbeiten Zeitreihen aus einer großen Anzahl an Bildern", erklärt Prof. Clement Atzberger. „Durch Filterung, Glättung und Interpolation kann man Wolken, atmosphärische Störungen oder Datenlücken ausgleichen und somit die Qualität des Bildmaterials deutlich verbessern."



„Korrelation“ zwischen Vegetationsanomalien über Land (d.h. Abweichungen vom typischen Wachstumsverlauf auf Grund von Wetterbedingungen) und Anomalien in der Wassertemperatur der Ozeane. Rot bedeutet eine hohe und Blau eine niedrige Korrelation.

Dadurch erst werden Veränderungen der Vegetationsdichte erkennbar, die oft eng mit Dürreepisoden in Zusammenhang stehen.

Neben der Bearbeitung von Bilder-Zeitreihen beschäftigt sich Clement Atzbergers Forschungsteam auch mit der statistischen Auswertung von satellitengestützten Temperaturmessungen der globalen Ozeane: Es gibt enge Zusammenhänge zwischen Wetterphänomenen in ganz unterschiedlichen Weltgegenden und Anomalien der Wassertemperatur. Das bekannteste Beispiel ist El Nino. „Wenn zum Beispiel der Pazifik zu einer bestimmten Zeit besonders kalt ist, hat das einen Einfluss auf die atmosphärische Luftzirkulation, und Monate später führt das in gewissen Regionen zu vermehrtem Niederschlag, andere sind dafür besonders trocken.“

Mit statistischen Methoden (‚Data Mining‘) will man solche Zusammenhänge aufspüren und so ein besseres Verständnis von den komplizierten meteorologischen Abläufen gewinnen, die unser Klima bestimmen.

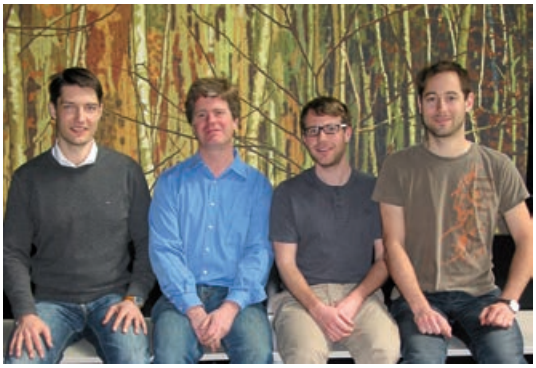
DIE ZELLMEMBRAN VERSTEHEN

Auf atomarer Ebene wird die Lipidschicht der Zellmembran analysiert. Sie spielt eine wichtige Rolle für die pharmazeutische Forschung.

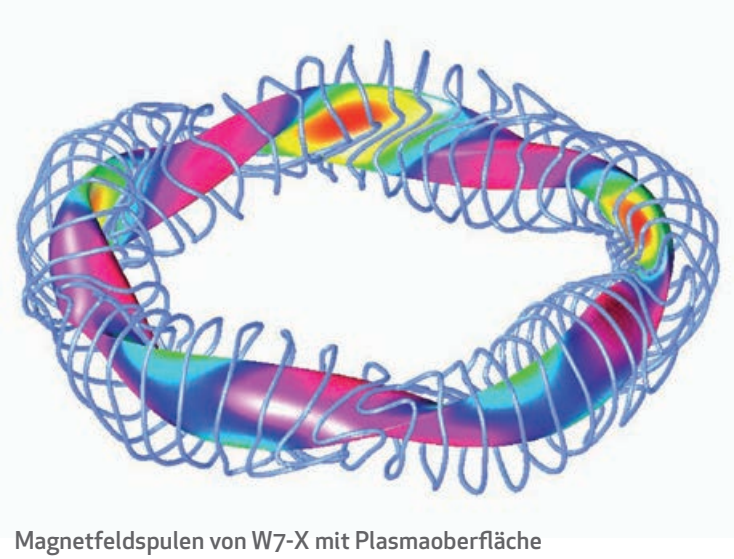
Egal ob man menschliches, tierisches oder pflanzliches Gewebe betrachtet – überall werden die Zellen von einer dünnen Zellmembran begrenzt. Das strukturelle Gerüst dieser ca. 4 – 6 Nanometer dicken Membran bildet eine Doppelschicht aus Lipiden, die hauptverantwortlich für die physikalischen Eigenschaften der Zellmembran sind. An der TU Graz gelingt es, diese Lipidschicht als Modell am Computer nachzubilden, mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen und dadurch die Struktur der Zellmembran verstehen zu lernen.

Die Zellmembran spielt für die Medizin eine entscheidende Rolle: Viele Krankheiten haben mit der Wechselwirkung von Wirkstoffen mit der Zellmembran zu tun, viele Medikamente müssen durch Kanäle in der Membran oder direkt über die Membran ins Innere der Zelle gelangen. Für das Design von neuartigen membranaktiven Wirkstoffen ist ein Verständnis der Membranstruktur unerlässlich.

Peter Heftberger von der TU Graz verwendet Röntgen- und Neutronenstreuexperimente als Werkzeug, um die Strukturen auf atomarer Eben aufzulösen. Für die Analyse der Streudaten wurde eine eigene Software entwickelt, die das Problem mittels einer Vielzahl an Parametern abbildet



von links nach rechts: Alexander Rieder (Diplomand), Georg Pabst (Gruppenleiter), Peter Heftberger (Dissertant), Benjamin Kollmitzer (Dissertant)



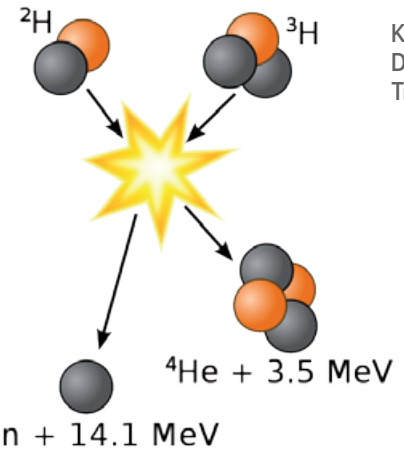
Magnetfeldspulen von W7-X mit Plasmaoberfläche

HEISSER ALS DIE SONNE

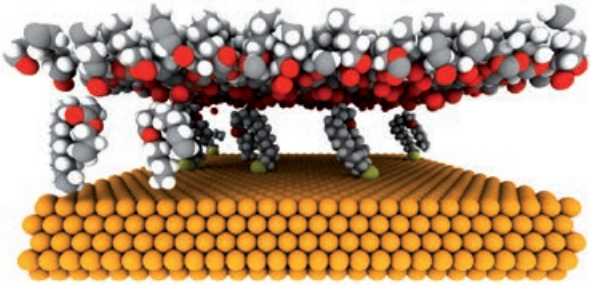
Kernfusion ist eine große Zukunftshoffnung für die künftige Energieversorgung. In Computersimulationen wird das Verhalten von heißem Plasma untersucht.

Die Sonne strahlt aufgrund von Kernfusionsprozessen. Will man dieselben Prozesse im Labor ablaufen lassen, hat man es mit einer viel geringeren Teilchendichte zu tun und benötigt dafür eine noch viel höhere Temperatur als im Sonneninneren. Bei mehreren Millionen Grad arbeiten Fusionsreaktoren, etwa das derzeit im Bau befindliche ITER oder das Fusionsexperiment W7-X, das demnächst in Deutschland in Betrieb genommen wird. Hier werden kompliziert geformte Magnetfeldspulen verwendet um die geladenen Teilchen im Plasma einzuschließen.

Der Einschluss derart heißer Plasmen stellt die Forscher aber vor große Probleme. Aufwendige numerische Verfahren sind notwendig, um die Physik der Heizung solcher Plasmen in komplizierten toroidalen Magnetfeldern zu verstehen. Von Prof. Winfried Kernbichler werden an der TU Graz Programmcodes entwickelt, mit denen man das Verhalten der geladenen Teilchen im heißen Plasma analysieren kann.



Kernfusion aus Deuterium und Tritium



Mittels Moleküldynamik simulierte Struktur von Alkylthiolen, die in ihrem Rückgrat polare Estergruppen enthalten, auf einer Au(111) Oberfläche. Für die nicht „abgeknickten" Moleküle sind nur das Kettensegment oberhalb der Estergruppe gezeigt. © Manuel Vieider

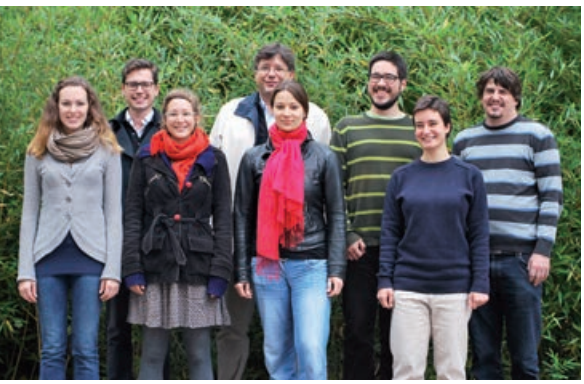
DIE HALBLEITER-ZUKUNFT IST ORGANISCH

Organische Moleküle statt Silizium: In der Halbleitertechnik halten neue Materialien Einzug.

Man kann sie bereits kaufen, die neuartigen organischen Halbleiter: In bestimmten Displays werden schon heute spezielle organische Leuchtdioden eingesetzt. Sie bieten hohen Kontrast und eine ausgezeichnete Farbdarstellung. Die nächste Generation von Displays nach LCD könnte also aus organischen Molekülen bestehen. Allerdings gibt es auf dem Gebiet der organischen Halbleiter noch viel zu forschen. Prof. Egbert Zojer von der TU Graz arbeitet daran.

Um die Halbleiter aus organischen Makromolekülen mit Strom zu versorgen, müssen sie mit Metall-Elektroden in Verbindung gebracht werden. Wie die Elektronen vom einen Material in das andere überwechseln oder welchen Einfluss Unordnungseffekte durch Materialfehler oder die Temperaturbewegung der Moleküle auf den Ladungstransport haben, kann man nur auf atomarem Niveau untersuchen. An der TU Graz werden quantenmechanische Bandstrukturrechnungen mit Moleküldynamikrechnungen kombiniert.

Um organische Elektronikbauteile zu verstehen, ist die Kombination ganz unterschiedlicher Größenskalen nötig: Parallel zur Mikroskala der Atome muss auch das Gesamtverhalten des Bauteils auf makroskopischer Skala berechnet werden – eine schwierige Aufgabe, für die man viele wissenschaftliche Werkzeuge gleichzeitig beherrschen muss, und auf die Nutzung von erstklassigen Computerressourcen angewiesen ist.



Arbeitsgruppe von Egbert Zojer (v. l. n. r.): Veronika Obersteiner, David A. Egger, Elisabeth Verwüster, Egbert Zojer, Elisabeth Wruß, Gernot Kraberger, Iris Hehn, Bernhard Kretz.

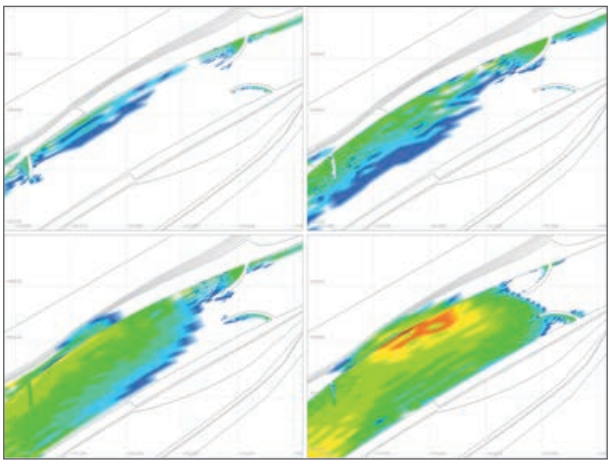
MODELLE FÜR WASSERSTRÖMUNGEN

Das Verhalten von Fließgewässern lässt sich mit der Software openTELEMAC berechnen. Die TU Graz entwickelt hydrodynamische Methoden weiter und wendet sie auf wasserbauliche Fragen an.

Was geschieht, wenn in einer Hochwasserentlastungsanlage große Wassermassen abgelassen werden? Wie breitet sich Wasser aus, wenn in kurzer Zeit große Flächen überflutet werden? Welche Ablagerungen werden dabei entstehen? An der TU Graz können Gewässer und ihre Fließeigenschaften am Computer modelliert werden.

Für Fließgewässermodellierung steht die hydrodynamische Modellierungssuite TELEMAC zur Verfügung. Diese Open-Source Software wird am Institut für Wasserbau der TU Graz für unterschiedliche Forschungsprojekte eingesetzt und gleichzeitig weiterentwickelt. TELEMAC kann äußerst flexibel eingesetzt werden und ist vor allem massiv parallelisierbar. Die Arbeit an einer einzelnen Berechnung lässt sich auf viele gleichzeitig arbeitende Prozessoren aufteilen – damit ist diese Software ideal für den Einsatz am VSC.

Die Software erlaubt sowohl zweidimensionale Berechnungen – etwa die Ausbreitung von Wellen in flachem Gewässer, als auch dreidimensionale Simulationen durch Lösung der Navier-Stokes Gleichungen. Innerhalb von wenigen Sekunden kann berechnet werden, wie sich Überflutungen auf einem 50 km² großen Gebiet ausbreiten. Auch die Berechnung von Strömungen und Sedimenttransport in einem Flussabschnitt ist mit TELEMAC möglich. So lässt sich erforschen, wie sich Einbauten im Flusslauf auf die Hydrodynamik und den Stofftransport auswirken.



Hochaufgelöste 3D Sedimenttransportmodellierung: Darstellung der zeitlichen Änderung der Flusssohle innerhalb von 50 Stunden.

VON DER STRUKTUR ZUR FUNKTION DER BAUSTEINE DES LEBENS

Computersimulationen sind ein hervorragendes Werkzeug, um die Flexibilität und somit die Funktion von Proteinen und anderen Biomolekülen auf atomarer Ebene zu verstehen.



Die Flexibilität macht das Gift. So enthalten etwa verschiedene Schlangengifte chemisch und strukturell sehr ähnliche Proteine, die Giftigkeit und somit die mit einem Schlangenbiss verbundenen Schäden sind allerdings drastisch unterschiedlich: Während einige Gifte nur einen lokalen Gewebeschaden verursachen, bewirken andere Gifte den Verlust ganzer Gliedmaßen oder führen gar zum Tod des Bissopfers. Die gefährlicheren Gifte haben eine höhere Flexibilität, können so eine größere Zahl von unterschiedlichen Zellbausteinen des Opfers angreifen und verursachen auf diese Art einen erheblich größeren Schaden.

Auch in der pharmazeutischen Forschung gewinnt die Bestimmung von Proteinflexibilität stark an Bedeutung. So ist Tamiflu der effektivste Wirkstoff gegen Grippe, indem es die virale Neuraminidase blockiert und auf diese Art den Virus an seiner Verbreitung hindert. Neu aufgetretene Mutationen des Virus verhindern aber das Binden von Tamiflu und machen so neue Wirkstoffe notwendig, um eine drohende Grippepandemie abzuwenden. Durch Berücksichtigung der Flexibilität der viralen Neuraminidase konnten neue Bindestellen identifiziert werden, die es Wirkstoffen erlauben, auch gegen Virenstämme mit Tamiflu-Resistenz wirksam zu sein.



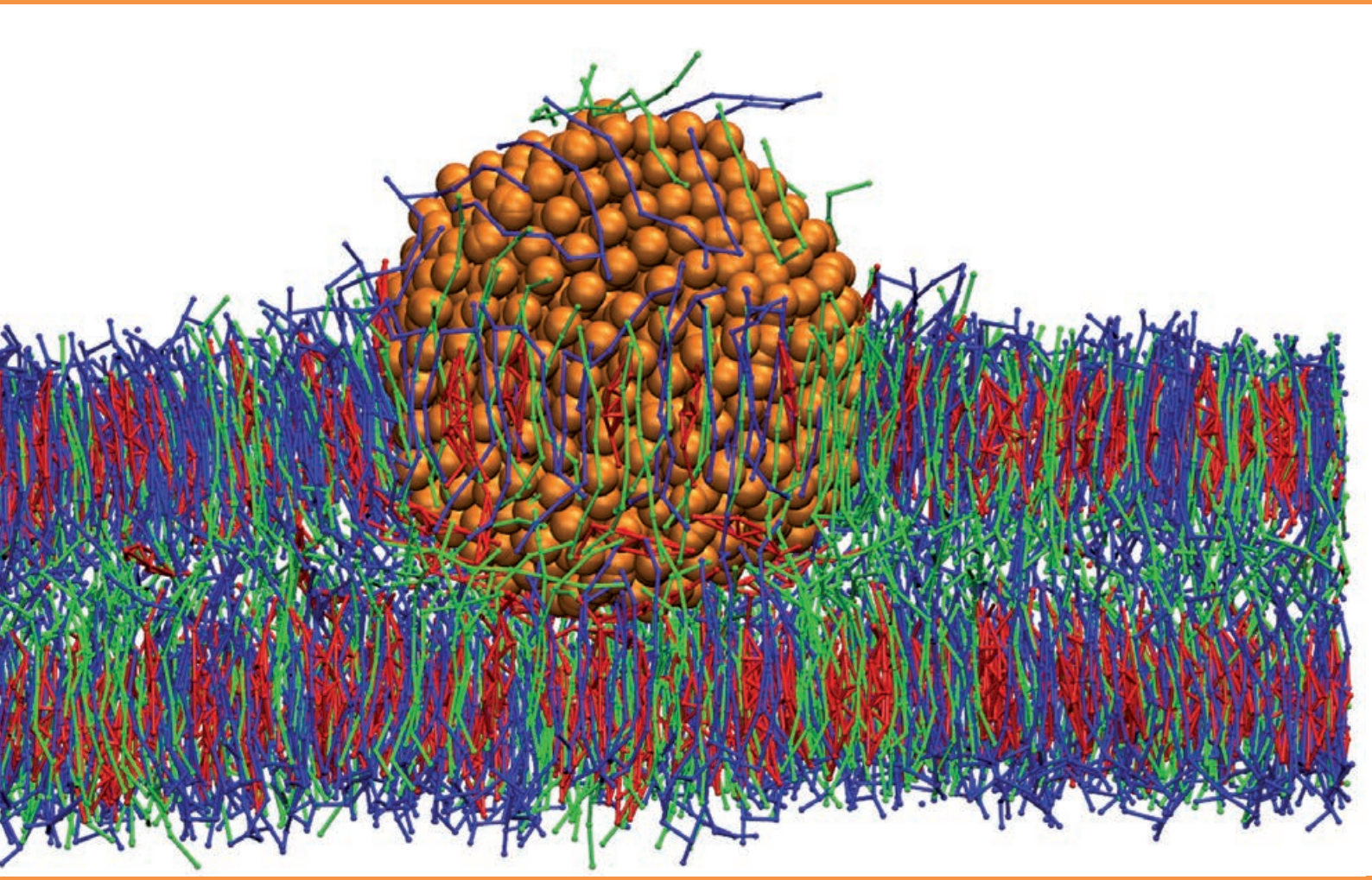
Klaus Liedl, Leiter des Forschungsbereichs Theoretische Chemie

Eine andere Proteinklasse von großer pharmazeutischer Relevanz sind Proteasen. Sie katalysieren die Spaltung von Peptidbindungen in ihren Substraten und sind bei praktisch allen fundamentalen Vorgängen in Zellen beteiligt. Es wurden etwa 500 verschiedene Proteasen mit einzigartigen Substratschneidemustern bei der Analyse des menschlichen Genoms identifiziert. Manche von ihnen wirken ganz spezifisch für bloß ein spezielles Peptid, mit anderen lässt sich ein breites Spektrum an Peptiden schneiden.

So schneiden Verdauungsenzyme eine Vielzahl von Substratsequenzen, um deren Absorption in den Körper vorzubereiten. Im Gegensatz dazu schneiden Proteasen in Signalkaskaden nur sehr wenige genau bestimmte Peptide.

Bei vielen Molekülen ist die genaue räumliche Anordnung der Atome nicht genau festgelegt – es kann etwa sein, dass sich ein Teil des Moleküls gegenüber dem Rest drehen kann. Man spricht dann von unterschiedlichen „Konformationen", die das Molekül aufweisen kann. Ob sich ein Rezeptor mit einem bestimmten Liganden verbinden kann oder nicht, kann von der Konformation des Rezeptors abhängen. Neue Modelle des Bindevorgangs („Conformal Selection") gehen davon aus, dass viele verschiedene Konformationen des Rezeptors gleichzeitig vorliegen und sich das Substrat die jeweils passende bereits vorhandene Konformation zur Bindung aussucht.

Da zelluläre Prozesse zumeist in wässriger Umgebung stattfinden, sind biomolekulare Prozesse auch oft eng mit



Computersimulation eines Nanopartikels, das eine Membran durchdringt.

der Umorganisation des Lösungsmittels Wasser verbunden. Deshalb wird an der Universität Innsbruck mit Computersimulationen die Bedeutung von Wasserordnung an biomolekularen Grenzflächen untersucht.

Ob eine chemische Reaktion ablaufen kann, hängt von der Entropie (bzw. dem Gibbs-Potenzial) ab – sie ist ein Maß für die Unordnung in einem System und ist für konkrete Anwendungen schwierig zu berechnen. Die Forschungsgruppe für Theoretische Chemie entwickelt allerdings Entropieabschätzung als ein nützliches Werkzeug im Wirkstoffdesign, um eine effiziente Vorhersage des Einflusses der Verdrängung von Wassermolekülen bei biomolekularen Bindungsvorgängen zu ermöglichen. Somit können Bindungsaffinitäten am Computer genauer berechnet werden.

Das Innsbrucker Team ist auch Teil des von der Europäischen Union finanzierten Projekts NANODRUG. Das wissenschaftliche Ziel des NANODRUG Forschungs- und Trainingsnetzwerkes ist die Entwicklung und Charakterisierung eines Satzes neuer intelligenter Nanomaterialien, um deren Eignung als neue Systeme zum Wirkstofftransport gegen entzündliche Hauterkrankungen zu studieren. Die einzigartigen physiko-chemischen Eigenschaften dieser neuen Nanopartikel, wie deren ultrakleine Größe, deren großes Oberfläche-zu-Masse-Verhältnis und die hohe Reaktivität erlauben es, Nanopartikel auf die jeweilige Anwendung maßzuschneidern. Bei Beladung mit Wirkstoffen kann so eine Verbesserung der Wirkstoff-Freisetzung mit Hilfe der Nanopartikel im Vergleich zum freien Molekül erzielt werden. So kann etwa die Fähigkeit, die oberste Schicht der Haut zu durchdringen, mit Hilfe von Computermodellen signifikant verbessert werden.

ÜBERSICHT DER FORSCHUNGSPROJEKTE AM VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

Universität Wien

Alfred Karpfen
- Ab Initio and Density Functional Studies on Blue-Shifting Hydrogen Bonds
- Cooperative Effects in Hydrogen Bonding

Anna Weinzinger
- Dissociation of hERG Channel Inhibitors
- Molecular Drug Targets

Bernhard Völkl
- A Refinement of the Biological Market Paradigm

Bogdan Sepiol
- Atomare Diffusion untersucht mit kohärenter Röntgenstrahlung

Cesare Franchini
- Advanced Theories for Functional Oxides: New Routes to Handle the Devices of the Future (ATHENA)
- Modeling Complex Strongly Correlated Oxides for Future Devices (MINGOX)
- Microscopic Processes and Phenomena at Oxide Surfaces and Interfaces (OxSur)

Christian Hartinger
- The in Silico Design of Metal-Based Anticancer Agents and Novel Ligand Systems

Christian Höner zu Siederdissen
- In Silico Annotation of Noncoding RNAs and their Targets

Christine Strauß
- Multi-Objective Decision Support for Efficent Information Security Safeguard Selection (Moses3)

Christoph Dellago
- Computational Materials Science
- IK Computational Science - Identifying the Mechanisms of Complex Transformations
- Nucleation and Growth in Small Systems (NanoNuc)
- SFB ViCom: F4111 Dellago
- Simulation von Phasenübergängen in Weicher Materie

Christos Likos
- Comploids - Physics of Complex Colloids
- Equilibrium and Transport Properties of Ring Polymers

Dieter Blaas
- Cryo-EM Reconstruction of Rhinovirus Uncoating Intermediates

Eduard Vorobiev
- Chemodynamical Evolution of Dwarf Spheroidal Galaxies

Elke Pilat-Lohinger
- Binary Star Systems and Habitability

Florian Göltl
- Computational Materials Science

Florian Mittendorfer
- Ab-Initio Nanoscale Modelling

Frank Verstraete
- QUERG – Quantum Entanglement and the Renormalization Group
- QUEVADIS – Quantum Engineering via Dissipation
- SFB ViCom: F4106 Verstraete

Franz Clemens Heitzinger
- Mathematical Models and Characterization of BioFETs

Friedrich Kupka
- Numerische Simulationen von Sternen der mittleren Hauptreihe

Georg Kresse
- Ab Initio Description of Nanostructures
- Modelling of Interfaces for High Performance Solar Cell Materials (HiperSol)
- New Directions in Ab Initio Modeling of Materials Properties
- SFB ViCom: F4102 Kresse

Gerald Spreitzhofer
- Optimization of Gis-Based Meteorological Forecast Systems

Gerhard Ecker
- Molecular Basis of Drug-Transporter Interaction

Gerhard Hensler
- Chemo-Dynamics of Satellite Galaxies
- The Milky Way Satellite System
- Tidal-Tail Dwarf Galaxies

Gerhard Zifferer
- Eigenschaften Sternförmig Verknüpfter (Co)polymerer

Gottfried Köhler
- Molecular Dynamics Studies of Dynamic Properties of Ypgk in Aqueous Solution

Günther Pass
- The Most Ancient Splits in Insect Phylogeny

Hannes Svardal
- Multidimesional Adaptive Dynamics and the Evolution of Phenotype Determination

Hans Lischka
- Computational Photochemistry
- SFB ViCom: F4105 Lischka

Helmut Viernstein
- Cyclodextrin Inclusion Complexation - Mechanism and Drug Delivery

Herbert Muthsam
- Cepheids - a Ring Model
- Dynamik Solarer Granulation
- Mehrdimensionale Modelle von Cepheiden
- Numerische Modellierung der Semikonvektion

Ivan Coluzza
- Computational Protein Design for Highly Selective Tumor Targeting Drugs
- Theory and Simulations of Designable Modular Self-Assembling Materials

Jani Kotakoski
Properties and Creation of Defects in Graphene and Other Low-Dimensional Materials

Karl Peter Wolschann
Ion Channels
Molecular Calculations on Ligand-Protein and Protein-Protein Interactions by Molecular Dynamics Simulations

Kurt Rabitsch
Image Decomposition and Enhancing

Manuel Güdel
3d Radiative Transfer in Protoplanetary Disks
Pathways to Habitability

Mark Hannam
Black-Hole-Binary Collisions

Markus Oppel
Ultrafast Photoinduced Chemical Dynamics

Michael Grünwald
Optimizing Protocols of Self-Assembly

Michael Schilde
Flowplus - Pilotierung eines Informationssystems Für Die Nutzung von Echtzeit Verkehrsinformationen zur dynamischen Flottendisposition

Norbert Mauser
SFB ViCom: F4106 Mauser

Othmar Steinhauser
Simulation Studies of Ionic Liquids

Peter Herzig
Investigation of the Lutetium - Hydrogen System based on First Principles

Quang Minh Bui
Parallel Computing for Phylogenetic Inference

Rada Maria Weishäupl
Nonlinear Schrödinger Equation: Simulation and Application

Raimund Podloucky
Cluster Expansion
Electronic and Thermal Transport of Thermoelectric Materials
Non-Centrosymmetric Superconductors
SFB ViCom: F4110 Podloucky
Von Atomistischer zu Kontinuumsmodellierung der Keimbildung

Reinhard Bürger
Multilocus Models with Spatially Varying Selection

Richard James Matthews
Self-Assembly at a Membrane

Robert Stadler
Electrochemical Charge Transport

Rudolf Dvorak
Transport of Water and Organic Material in Early Planetary Systems

Saptarshi Das
Eso Data Reduction

Simon Aeschbacher
Domestication and Expansion of Dromedaries
Multilocus Migration-Selection Models

Sofia Kantorovich
Bridging Scales in Dipolar Soft Matter

Stefan Dullinger
Ecochange - Dynamische Modellierung der Arealdynamik von Pflanzenarten im Alpenraum
Range Dynamics of Endemic Austrian Mountain Plants under Climate Change

Stefano Serafin
Stablest - Stable Boundary Layer Separation and Turbulence
Wind Resource Assessment in Complex Terrain with a High-Resolution Numerical Weather Prediction Model

Swetlana Jungblut
Computer Simulations of Heterogeneous Crystallization

Toma Susi
Nitrogen and Phosphorus Doped Single-Wall Carbon Nanotubes (NiPhoTubes)

Wolfgang Ludwig
Wolkenbildung und Strahlungstransfer in der Atmosphäre von Exoplaneten

Technische Universität Wien

Alessandro Toschi
Quantum Criticality in Strongly Correlated Magnets (QCM)
SFB-ViCom Karrierestelle

Alexander Kössler
Partially Synchronous Distributed Real-Time Systems (PSRTS)

Alice Redermeier
Atomistic Scale Simulation of Precipitate Nucleation Process in Alloys

Andreas Hüppe
Advanced Aerodynamics - Aeroakustische Simulation von Rotierenden Gebläsen in HVAC Systemen

Andreas Tröster
Fourier Monte Carlo Simulation of Elastic Membranes

Anton Rebhan
Quark-Gluon Plasma Physics

Aram Amouzandeh
Kiras 2 - Sicherheit von Hohlraumbauten unter Feuerlast-Entwicklung

Bruno Woltzenlogel-Paleo
Proof Transformations via Cut-Elimination in Intuitionistic Logic

Christoph Vogler
Multiscale Simulations of Magnetic Structures and Rare Magentic Events

Clemens Heitzinger
Start Project PDE Models for Nanotechnology

Dieter Pahr
Large-Scale Non-Linear Micro Finite Element Framework

Dieter Süss
SFB ViCom: F4112 Suess

Elias Assmann
Correlated Heterostructures for Solar Cells

Emanuela Bianchi
Patchy Colloidal Systems

Emil Persson
Probing Electron-Electron Correlations in Helium driven by Intense Ultra-Short Laser Pulses

Ernst Kozeschnik
SFB ViCom: F4110 Kozeschnik

Florian Libisch
Graphene Nanostructures
SFB ViCom: F4105 Libisch

Friedrich Aumayr
Calculation of Fusion Relevant Cross Sections

Gerhard Kahl
Glass Formation of Colloids Confined in Porous Materials
Ordered Structures in Dipolar and Ferrofluidic Systems
Phase Transitions and Microphase Separation in Soft Matter Systems
Physics of Complex Colloids: equilibrium and driven
Self-Assembly Scenarios in Inverse Patchy Colloidal Systems
Self-Assembly Scenarios in Soft Matter Physics
SFB ViCom: F4111 Kahl

Giorgio Sangiovanni
At the Frontiers of Phonons and Correlated Electrons

Hans Mikosch
Blätter-Zeolithe HEU-CLI
Modeling Photo-Induced Phenomena in Carbon Nanotubes with Defects
Organosulfur on Au(111)

Hendrik Christoph Kuhlmann
PARTAC - Particle Accumulation in the Jeremi Experiment: Definition of Necessary Flow and Particle Parameters

Hong-Linh Truong
Service-Oriented Data Integration

Iva Brezinova
Dynamics of Correlated Many-Body Systems
Dynamics of Ultra-Cold Atoms in Optical Lattices and Disorder Potentials

Joachim Schöberl
NGsolve - Parallel Finite Element Solver

Johannes Kreutzer
Anisotropic Functionalization of Clusters

Josef Fidler
Multiscale Micromagnetic Modelling of Magnetic Materials and Devices

Josef Redinger
Functional Oxide Surfaces and Interfaces (FOXSI)
Graphene-Based Systems for Spintronics: Magnetic Interactions at the Graphene/3d-Metal Interface (SpinGraph)

Josef Weinbub
Modeling Silicon Spintronics

Jozsef Nagy
Efficient Dry and Burn
New Challenges for Reducing Agents in Smelting Reduction Process

Karsten Held
DK Solid4fun
GW+DMFT
Intelligente Modelierung Nanoskalierter Materialien MONAMI (EU Rp7)
SFB ViCom: F4103 Held
Vienna Graduate School on Computational Materials Science
W4 Computergestützte Theoretische Materialforschung

Markus Lenarcic
Numercial Investigations in a Pelton Distribution Pipe

Michael Hofbauer
FATAL - a Modeling Framework for Fault-Tolerant Asynchronous Logic

Michael Wolloch
Ab-Initio Nanotribology

Othmar Koch
Adaptives Splitting für nichtlineare Schrödingergleichungen

Paul Heinz Mayrhofer
Atomistic Simulation of Metastable Phases

Peter Blaha
Computational Materials Science (CMS)
Katalyse Mittels Gold Nano-Partikeln Supported auf dem H-Bn Nanomesh
SFB ViCom: F4107 Blaha

Peter Mohn
Complex Magnetic Structures
SFB ViCom: F4109 Mohn

Peter Weinberger
Combining Chirality and Spin Crossover: a promising liaision

Roman Höllwieser
Center Vortices and Chiral Symmetry Breaking
Dirac Eigenmoden und Zentrumsvortices

Roman Mukin
Technical Assistance for the Definition and Preparation of the Jeremi Project on the ISS

Sandro Erne
Experimentelle und numerische Untersuchungen zum instabilen Teillastbetrieb von Pumpturbinen

Shiro Sakai
Numerical Study on the Properties of Non-Fermi Liquids caused by Zeros of Green's Function

Shuhei Yoshida
Coherent Control of Rydberg Wave Packets by Ultra Short Pulses
Engineering and Control of High N Rydberg Wavepackets

Stanislav Bocanski
Drag Reduction by Polymeric Additives

Stefan Nagele
Interaction of Ultrashort Pulses with Matter

Stefan Pohn
PATOV - Process Analytical Technology Unit for Online Verification of the Cip Process in the Pharmaceutical Industry

Stefan Rotter
Nonlinear Interactions in Microlasers

Stefanie Gräfe
Innovative Projekte: Quantum Dynamics in Molecules Subject to Intense Laser Fields

Thomas Lauer
Simulation of SCR-Systems with Advanced Turbulence Models

Thomas Srdinko
ANDES (Accurate Nuclear Data for Nuclear Energy Sustainability)

Vincent Chimaobi Emeakaroha
FoSII - Foundations of Self-Governing ICT Infrastructures

Wolfgang Werner
Electron Dynamics near Surfaces

Xinhua Xie
Attosekunden Elektron-Wellenpaket Interferometrie

Universität für Bodenkultur Wien

Anja Klisch
Phenological Time Series Reconstruction (Europe) 2

Daniel Tunega
Modeling of Biogeochemical Interfaces in Soils

David Philip Kreil
WWTF Vienna Science Chair of Bioinformatics

Elisabeth Schöll-Paschinger
Computer Simulation of Self-Assembly and Crystallization of Proteins

Friedrich Leisch
Advanced Process Monitoring and Prediction of Complex Variables
Market Segmentation Methodology - Attacking the too Hard Basket

Irene Schicker
High-Resolution Atmospheric Modelling in Complex Terrain for Future Climate Simulations (HIRMOD)
Entwicklung eines Basisdatensatzes Regionalisierter Klimaszenarien – Reclip: Century I+II

Johann Sölkner
Genomic Selection in Cattle

Joseph Antoine Garate
Efficient and Accurate Simulation Techniques for Free Energies

Martin Schönhart
Werkzeuge für Modelle einer Nachhaltigen Raumnutzung

Matteo Mattiuzzi
Alpen Karpaten Korridor

Michael Tritthart
Christian Doppler Labor für Innovative Methoden in Fließgewässermonitoring

Michael Wess
Unravelling Time-Lagged Teleconnections between Sea-Surface Temperature (SST) and Vegetation Anomalies

Nauman Khurshid Awan
Cmip5WRF

Petra Seibert
Flexrisk: Flexible Werkzeuge zur Abschätzung des Nuklearen Risikos in Europa

Sabine Leroch
Adhesion Forces Between Humid Rough Silica Particles
Adsorption aus Wässrigen Lösungen
Molecular Structures and Interactions in between Particles

Werner Rammer
FUNDIV - Functional Significance of Forest Biodiversity in Europe

Technische Universität Graz

Benjamin Kollmitzer
Incoherent Optical Pumping by Means of Variational Cluster Approach

Bettina Christina Lackner
PMinter

Christoph Augustin
FETI-Laplace

Christopher Albert
Vibroacoustic Simulations

David Steffelbauer
tDMRG Fermi-Hubbard

Dirk Muschalla
i:ZSK

Egbert Zojer
Tuning the Electronic Properties of SAMS by Embedded Molecular Dipoles

Franz Rammerstorfer
FEM-BEM Coupling

Clemens Dorfmann
OpenTELEMAC

Johanna Wagner
EU Projekt BETTER

Manfred Hannes Ulz
Atomistic Support of Continuum Values using GMM

Markus Aichhorn
Electronic Structure Calculations for Correlated Materials

Martin Ganahl
Fermi-Hubbard NEQ
MPS Impurity Spectra

Martin Neumüller
A Space-Time Multigrid Method

Martin Nuss
Matrix Product State Time Evolution of the Single Impurity Anderson Model by DMRG and TEBD

Michael Knap
Moving Impurity

Peter Heftberger
Multithreading with IDL: Global Analysis of Saxs Data of Lipid Vesicles

Simon Erker
LDA+DMFT for Magnetic Materials

Thomas Hackl
GTE2012

Winfried Kernbichler
Neoclassical Transport in Plasmas

Wolfgang Slany
Combinatorial Graph Theory

Karl-Franzens-Universität Graz

Peter Puschnig
Ab-Initio Stacking-Fault Energies of Steels
Electronic Structure of Organic / Metal Interfaces

Universität Innsbruck

Birgit Waldner
Explaining Protein-Protein Interfaces in Protease Recognition with Local Dynamics

Christian Posch
QUEMOUNT - Quantifying Exchange Processes over Mountainous Terrain

Harald Höller
Flash Hydro Simulations of Galaxy Clusters

Josef Stöckl
Cosmological Simulations using Flash

Lars Bonnes
Simulation of Quantum Many Body Systems

Markus Josef Haider
Cosmological Simulation of a Galaxy Cluster using the Enzo-Code

Matthias Wiesenberger
TOEFL

Michael Probst
Solvent Dynamics

Michael Alois Margreiter
Quantum Chemistry

Nico Frank Schackert
Thermodynamic Integration

Yin Wang
Drug Penetration into Lysosomes

VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

Kontaktinformationen

Vienna Scientific Cluster
service@vsc.ac.at
http://vsc.ac.at

Univ.-Prof. Mag. Dr. Christoph Dellago
Gruppensprecher Computergestützte Physik
Universität Wien
1090 Wien, Sensengasse 8
christoph.dellago@univie.ac.at

Ao.Univ.Prof. Dr.phil. Herbert Störi
Vorstand des Instituts für Angewandte Physik
Technische Universität Wien
1040 Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/134
herbert.stoeri@tuwien.ac.at

Dipl.-Phys. Dr. Manfred Stepponat
Computing & Application Services
Zentraler Informatikdienst
Technische Universität Graz
8010 Graz, Steyrergasse 30/I
stepponat@tugraz.at

Univ.-Prof. Dr. Alexander Ostermann
Leiter des Forschungsschwerpunkts Scientific Computing
Universität Innsbruck
6020 Innsbruck, Technikerstraße 13
alexander.ostermann@uibk.ac.at

Für den Betrieb verantwortlich:
Dipl.-Ing. Dr.techn. Ernst Haunschmid
Leiter der Abteilung High Performance Computing
Zentraler Informatikdienst
Technische Universität Wien
1040 Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/020
ernst.haunschmid@tuwien.ac.at

Impressum/Offenlegung gemäß § 25 Mediengesetz:

Informationsbroschüre des VSC Projekts

Herausgeber:
Zentraler Informatikdienst der Universität Wien
Universitätsstraße 7, 1010 Wien

Zentraler Informatikdienst der Technischen Universität Wien
Wiedner Hauptstraße 8-10, 1040 Wien

Zentraler Informatikdienst der Universität für Bodenkultur
Peter-Jordan-Straße 82, 1190 Wien

Zentraler Informatikdienst der Technischen Universität Graz
Steyrergasse 30/I, 8010 Graz

Zentraler Informatikdienst der Universität Innsbruck
Technikerstraße 23, A-6020 Innsbruck

Redaktion: Florian Aigner (florian.aigner@tuwien.ac.at), Jan Zabloudil (jan.zabloudil@boku.ac.at)
Koordination: Christian Kracher (christian.kracher@univie.ac.at)
Design und Layout: typothese.at
Druck: resch-druck.at
2014

Sommer 2014