

Research Report

Hochleistungsrechner in Hessen

2010/2011



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT



GOETHE
UNIVERSITÄT



JUSTUS-LIEBIG-
UNIVERSITÄT
GIESSEN

U N I K A S S E L
V E R S I T Ä T

Philipps



Universität
Marburg

Inhalt

Vorwort zum Jahresbericht 2010-2011	7
--	---

Die Hochleistungsrechner

Der Hessische Hochleistungsrechner an der Technischen Universität Darmstadt	8
Die Hochleistungsrechner (HLR) am Center for Scientific Computing (CSC) der Goethe-Universität	10
Anpassung des LINPACK-Benchmarks für den LOEWE-CSC	12
Das Linux-Cluster im IT-Servicezentrum der Universität Kassel	13
Die Hochleistungsrechner der GSI	14
Die Rechencluster der Philipps-Universität Marburg	16
Das zentrale Hochleistungsrechen-Cluster der Justus-Liebig-Universität Gießen	18

Ingenieurwissenschaften

Simulation and Control of Drop Size Distributions in Stirred Liquid/Liquid Systems	20
Effiziente Berechnung der Aeroakustik im nahen Fernfeld	22
FSI-basierte Optimierung von Profilen	24
Parallel Non-Linear Finite Elements for Micropolar Continua	25
Time dependent shape optimization with higher-order surfaces in consideration of FSI	26
Der Einfluss des Diskretisierungsschemas auf die Grobstruktursimulation turbulenter Strömungen	27
Diskontinuierliche Galerkin-Methoden mit GPU-Unterstützung	28
Lokale adaptive Gitterverfeinerung zur Simulation von komplexen Strömungsproblemen	30
Simulation von Fluid-Struktur-Interaktion in turbulenten Strömungen	31
Vergleich von Lösungsverfahren in der Direkten Numerischen Simulation	32
Numerical Modeling of Free Surface Flows on Orthogonal and Non-orthogonal Grids	33
Numerical flow control and optimization	35
Effiziente Sensitivitätsanalyse und Strömungsoptimierung	36
Simulation and Optimization of Thermal Fluid-Structure Interaction in Blade-Disc Configurations	38
CO Prediction in LES of Turbulent Flames with Additional Modeling of the Chemical Source Term	40
Large Eddy Simulation of Combustion Systems	42
Numerical investigation of lean-premixed turbulent flame using combustion LES	44
LES of premixed methane flame impinging on the non-adiabatic wall	46
Turbulent shear flows	48
Turbulent Poiseuille Flow with Wall Transpiration: Analytical Study and Direct Numerical Simulation	50
Drag reduction in plane Couette flow	52
Elasto-hydrodynamische Mehrkörpersimulation in der motorentechnischen Anwendung	54
Finite-Elemente-Simulationen in der Kontinuums- und Festkörpermechanik	56
3D-Modellierung elastischer Wellen in anisotropen Medien mit der Elastischen Finiten Integrationstechnik	58
Entwicklung von Finite-Element-Modellen zur Analyse hochbelasteter Faserverbund-Biegeträger	60
Simulation of InGaN quantum well LEDs with reduced internal polarization	62

Mathematik und Informatik

Dataflow-like synchronization in a PGAS programming model.....	64
High Performance Computing Using Virtual Machines.....	66
Content-based Image and Video Analysis	68
Adaptive numerical wavelet frame methods.....	70
On Whitehead's asphericity conjecture	73

Biologie, Medizin, Neurowissenschaften

Pruning next-generation sequencing data for microbial fungal community assessment on balsam polar.....	74
Entwicklung von Methoden und Algorithmen für genomweite Assoziationsstudien.....	75
Entwicklung flexibler adaptiver Designs für klinische Studien.....	76
Computational Neuroscience: Learning the Optimal Control of Coordinated Eye and Head Movements	77
Large-Scale Simulations of Learning in the Brain.....	78
Simulation of non-native protein ensembles containing disulfide bonds.....	80
Monte Carlo modelling of ion-beam cancer therapy on sub-micron scales	82
Phase transformations in fullerenes	84
Multiscale Approach to the Physics of Ion Beam Cancer Therapy	85
Dynamics of biomolecules: DNA Unzipping.....	86

Geowissenschaften

Das facettenreiche Modell Erde.....	87
Global water resources in a changing world	88
Wasser für die Zukunft sichern.....	90
Soil moisture sensitivity simulations over the Indian region	92
The wave-turbulence interaction in breaking atmospheric waves.....	94
Structure-property relations of minerals and related compounds	96

Chemie und Materialwissenschaften

Thermal conductivity and thermal rectification in carbon-nanotube-based materials.....	98
The influence of nanostructures on the static wetting properties of solid surfaces.....	100
Two Experimental Studies on Self-Assembled Monolayers.....	102
Laser Induced Acoustic Desorption	104
Fractals on a Surface.....	105
Chemical order and local structure of the lead-free relaxor ferroelectric $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$	106
Crystal structure prediction for molecular compounds	109

Structures and Stabilities of Group-13 Adducts $(\text{NHC})_2(\text{E}_2\text{Hn})$ ($\text{E} = \text{B} - \text{In}$).....	110
Theoretical Study on the Carbonylation of Carbenes.....	112
Structure and Dynamics of Clusters and Fullerenes	113
Quantum Chemical Calculations on divalent Carbon(0) Compounds	115
A theoretical study on the adsorption of GaP-precursors on the $\text{Si}(001)(2\times 1)$ -surface.....	116
Vibrational Davydov-Splittings and Collective Mode Polarizations in Organic Semiconductor Crystals.....	118
Surface Chemical Bonding: Implementing and testing an EDA algorithm for periodic systems.....	120
Mechanism of Ammonia Formation by Metal-Ligand Cooperative Hydrogenolysis of a Nitrido Complex.....	122
DFT Study on the Mechanism of Main-Chain Boron-Containing Oligophenylenes	124
Mechanistic Details on the Reactivity of Trimethylamine with Chlorodisilane.....	126
Determination of the Conformation of the 2'OH Group in RNA by NMR Spectroscopy and DFT Calculations.....	128
Quantum Chemical Assessment of the Bond Energy of CuO^+	130
Novel Light Sources: Crystalline Undulator and Crystalline-Undulator-based Gamma-Laser	132
Development of Computer Tools for Graphical Processors.....	133
Monte Carlo modeling of neutron production and transport in spallation targets	134
The Ground State and the Optical Response of Graphene	136
Phonon-assisted luminescence of polar semiconductors.....	137
Simulationen für quantitative Auswertungen von gemischten III/V-Halbleiter-Heterostrukturen	138

Physik

Terahertz-Spektroskopie von Halbleitern.....	140
Microscopic Calculation of Intersubband Absorption in Quantum Wells.....	141
Phonon-Squeezing: Vorläufer für nicht-thermisches Schmelzen in Silizium.....	142
Dichtematrix-Funktional-Theorie für das Anderson-Modell	143
Magnetische Verunreinigungen in Nanodrähten.....	144
Spindichtewellenunstabilität in Nanodrähten aus Übergangsmetallen.....	145
Magnetismus, Struktur und chemische Ordnung in kleinen FeRh-Legierungsclustern.....	146
Nicht kollineare magnetische Ordnung in Nanostrukturen aus Übergangsmetallen	147
Magnetische Wechselwirkungen zwischen Co-Atomen und Clustern auf Pt-Oberflächen.....	148
Phase transitions in large clusters of transition metals.....	149
Simulation der Laseranregung von BN-Nanotubes.....	150
Phase transformations in fullerene-based nanowires.....	152
Photo-induced processes in nanostructures: Photo-processes in clusters.....	153
Orbital-dependent exchange-correlation energy functionals.....	154
Ultrakalte Atome in optischen Gittern.....	156
Stirred, not shaken: How to make an ultracold atomic cocktail with vortices.....	158
Phasen in Sternmaterie.....	160
Frühe Evolution des quark-gluonischen Plasmas.....	162
Ultra relativistic Quantum Molecular Dynamics on Manycore Architectures	164
Die Spuren des Quark-Gluon-Plasmas.....	165
Schwere Quarks in ultrarelativistischen Schwerionenkollisionen.....	166
Kollektives Verhalten, Energieverlust und Jet-Rekonstruktion	168

Space-time evolution of the electromagnetic field in relativistic heavy-ion collisions	170
A unified quark-hadron model for the study of nuclei, nuclear matter, and neutron stars	172
Research Report	174
Nonequilibrium chiral fluid dynamics including dissipation and noise	176
Lattice QCD on LOEWE-CSC	178
Polyakov-loop effective theory on FUCHS-CSC	180
Computation of transport coefficients on the LOEWE-CSC	182
Dynamical equilibration of the strongly-interacting parton matter	184
Dileptons from the strongly interacting quark-gluon plasma (sQGP)	185

Impressum

Herausgeber:

Hochschulrechenzentrum der Technischen Universität Darmstadt
im Auftrag des Hessischen Beirats für Hochleistungsrechnen

Redaktion:

Nicole Voß und Dr. Andreas Schönfeld
Hochschulrechenzentrum der Technischen Universität Darmstadt

Texte und Bilder

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die in den Jahren 2010 und 2011
an den Hochleistungsrechnern in Hessen gearbeitet haben.

Gestaltung, Reinzeichnung, Produktion:

Pia Lauck, Dipl.-Designerin – www.desktop-design.de

Vorwort

zum Jahresbericht 2010-2011

Liebe Leserinnen, liebe Leser,

die Bedeutung computergestützter Untersuchungen hat in allen Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften weiter zugenommen und ist heute ein unverzichtbares Element wissenschaftlichen Arbeitens in der Forschung und auch in der Ausbildung. Die hier von den Arbeitsgruppen an den hessischen Hochschulen zusammengetragenen Forschungsaktivitäten aus den Jahren 2010 bis 2011 belegen dies in eindrucksvoller Weise.

Das Spektrum der Beiträge reicht von subatomaren Stoßprozessen, bei denen Computer nicht nur für die Datenanalyse sondern auch für die Simulation und Interpretation der Messungen herangezogen werden, über die Materialwissenschaften und die Chemie, wo neuartige Substanzen erst im Computer simuliert werden, bevor die teurere, experimentelle Synthese angestrebt wird, bis hin zu den notorisch schwierigen Untersuchungen von Verbrennungen und Turbulenzen.

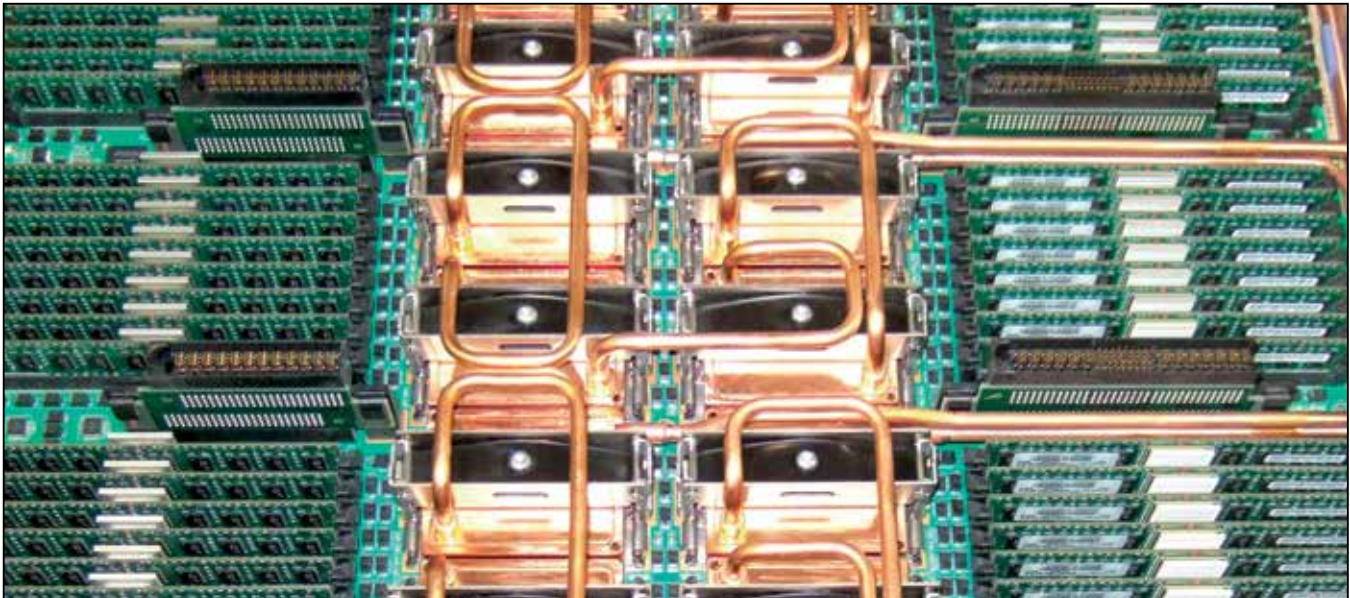
Es sind die vielen Variablen, die oft nichtlinearen Wechselwirkungen und die breit verteilten Zeitskalen, die einer analytischen Lösung im Wege stehen und die numerische Simulation erfordern. Diesen Anforderungen ist mit schnelleren CPUs alleine nicht beizukommen, es sind auch entsprechend angepasste Algorithmen zu entwickeln. Beides zusammen hat dazu geführt, dass nun in vielen Bereichen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und experimentellen Beobachtungen erzielt wird. Dieser Erfolg führt zwangsläufig dazu, dass die Anforderungen an Zahl und Komplexität von Untersuchungen in silico weiter zunehmen, nicht nur in der grundlagenorientierten Wissenschaft, sondern auch in den anwendungsnahen Forschungsbereichen und der Industrie. Die Wissenschaftler dürfen sich also auf neue Fragen und neue Herausforderungen freuen.

Die hier dargestellten Forschungsergebnisse dokumentieren zunächst die vielfältigen, international sichtbaren Forschungsleistungen der beteiligten Gruppen. Sie zeigen weiter, welche Möglichkeiten das Hochleistungsrechnen in Hessen bietet und weisen auf die Hürden hin, zu deren Überwindung neue Hard- und Software erforderlich sein wird. Sie sind aber auch ein Ausweis der hohen Qualität der in den Projekten tätigen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, die über ihre Forschungsbeiträge bestens für eine immer stärker von Computersimulationen dominierte Arbeitswelt vorbereitet werden.

Prof. Dr. Bruno Eckhardt

Vorsitzender des Hessischen Beirates für das Hochleistungsrechnen

Der Hessische Hochleistungsrechner an der Technischen Universität Darmstadt



Systemaufbau

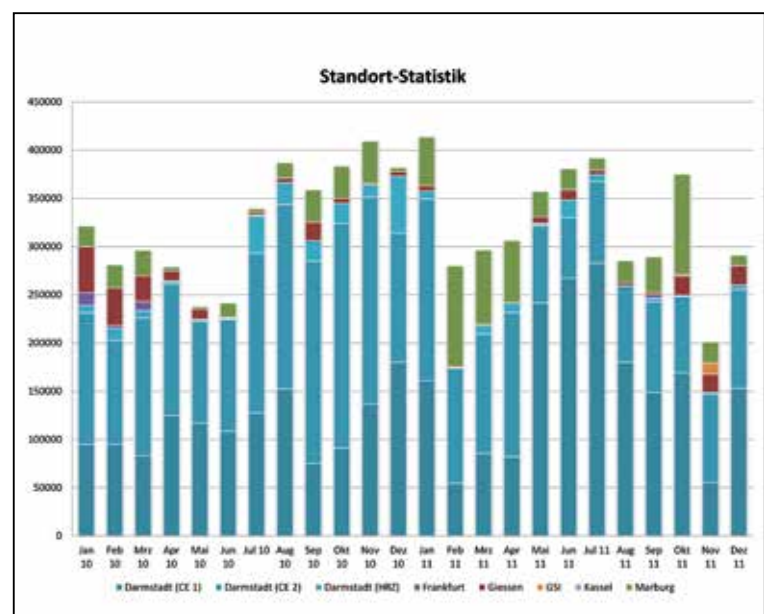
Der Hessische Hochleistungsrechner (HHLR) besteht aus einem Cluster von 18 Rechenknoten mit jeweils 32 Power6-Prozessoren. Die ersten Systeme wurden bereits im November 2008 installiert. Damit gehört der Rechner heute zu den Oldtimern unter den Hochleistungsrechnern. Trotz der nach heutigen Standards eher beschaulichen Gesamtrechenleistung von 11 TFLOP/s (Peak), kann er sich bei kleinen und mittleren Problemstellungen (bis 64 parallele Prozesse) aber noch gut mit modernen Rechnern messen. Die hohe Taktfrequenz von 4,7 GHz und der schnelle Arbeitsspeicher machen es möglich.

Der Rechner wird – nach einigen Verzögerungen im Bau – in der zweiten Jahreshälfte 2012 abgelöst. Anders als in der Vergangenheit werden die vielfältigen Anforderungen dann nicht mehr von einer einzelnen Systemarchitektur abgedeckt. Stattdessen wird es für die wesentlichen Bereiche spezialisierte Systeme geben. Arbeitsspeicherintensive Anwendungen werden zum Beispiel anders behandelt als klassische massiv-parallele Rechenanwendungen.

Auslastung des HHLR

Die mittlere Auslastung des HHLR lag in den Jahren 2010 und 2011 bei etwa 77%. Auffällig ist dabei, dass die Nutzung im Vergleich zu früheren Jahren stark schwankt. So gibt es Monate in denen keine 70% der theoretisch verfügbaren Rechenzeit abgerufen wurden, während in anderen Monaten der Rechner mit einer Auslastung von merklich über 90% de facto voll war.

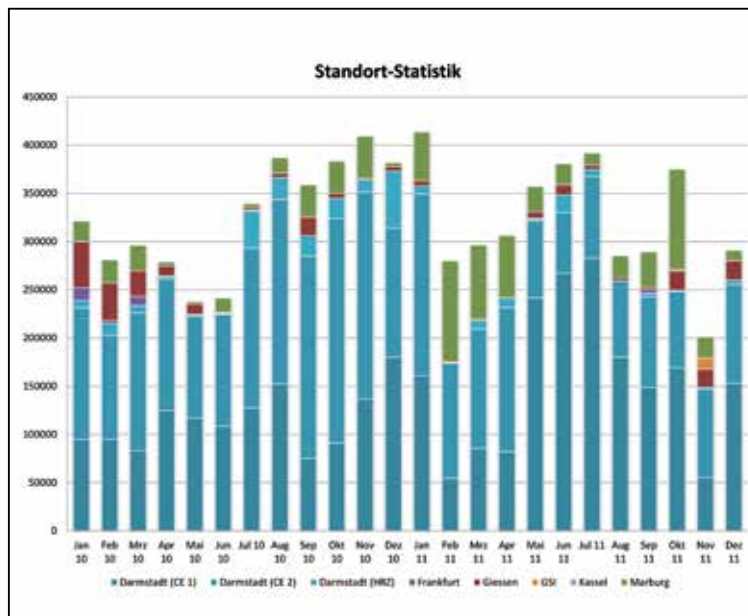
Die Verteilung der Rechenzeit auf die wissenschaftlichen Einrichtungen hat sich im Vergleich zu den Vorjahren erneut verschoben. Der Anteil der TU Darmstadt ist von 71% im Jahr 2009 auf 86% in den Jahren 2010/11 gestiegen. Die Universität Marburg nutzte 2011 14% und die Universität Gießen 3% der Rechenkapazität. Neu in den Nutzerkreis gekommen ist das GSI Helmholtz-zentrum für Schwerionenforschung. In der Gesamtnutzung des Rechners fällt sie aber mit weniger als 1% (wie auch die Universitäten Kassel und Frankfurt) nicht ins Gewicht.



Parallelität der Jobs

Betrachtet man die Entwicklung der Jobgrößen (Parallelität) so fällt auf, dass zusehends mehr Rechenzeit von Jobs mit mehr als 128 Prozessen (grün) genutzt wird. Trotz dieser Entwicklung hin zu größeren Problemstellungen wird nach wie vor die Hälfte der Rechenzeit von Jobs verwendet, die innerhalb eines Knotens (32 Prozessoren) bearbeitet werden können.

Dies ist auf die Architektur des HHLR zurückzuführen, da Jobs dieser Größe besonders effizient bearbeitet werden.



Die Hochleistungsrechner (HLR) am Center for Scientific Computing (CSC) der Goethe-Universität



Der Hochleistungsrechner LOEWE-CSC

In Frankfurt läuft seit November 2010 der LOEWE-CSC, einer der Energie effizientesten Großcomputer Europas. Seine Rechenleistung von 299 TFlop/s macht ihn zum derzeit drittschnellsten Supercomputer Deutschlands. Mit 740 MFlop/s pro Watt verbraucht der LOEWE-CSC nur etwa ein Viertel der Energie vergleichbar schneller Computer, zu Investitionskosten, die mit knapp fünf Millionen Euro bei etwa einem Drittel liegen.

Der Frankfurter Rechner ist eine Eigenentwicklung der Goethe-Universität, des Center for Scientific Computing (CSC), des Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS) und des Helmholtz International Center for FAIR (HIC for FAIR). Das System umfasst 832 Rechenknoten mit 20.928 AMD-Magny-Cours-Kernen sowie 778 GPU (AMD Radeon HD 5870), 56 TB Hauptspeicher und über 2.5PB Festplattenspeicher. Die Rechenknoten sind über ein latenzarmes QDR-Infiniband (40 Gb/s) vernetzt. Der Anteil der Kühlung am Stromverbrauch des Rechners beträgt unter maximaler Last nur 7%. Die Architektur des LOEWE-CSC ist dem sehr heterogenen Anforderungsprofil unterschiedlicher Forschungsprojekte angepasst, denn am LOEWE-CSC arbeiten unter anderem Wissenschaftler aus den Bereichen Physik der elementaren und komplexen Materie, Quantenchemie, Lebenswissenschaften und Klimaforschung.

Den hervorragenden PUE-Koeffizienten von 1,07 verdankt der Rechner einer mit der Firma Knürr

gemeinsam entwickelten Wärmetauscher-Technologie: Die Gehäuselüfter blasen die heiße Luft durch den Wärmetauscher in der hinteren Tür. Dadurch brauchen die Racks keine zusätzlichen Ventilatoren. Die Wasserkühlung wurde mit der Firma Infrserv am Standort des Rechners, dem Industriepark Höchst, realisiert. Über zwei Kühltürme wird Flusswasser verdampft und über einen Wärmetauscher das Wasser des inneren Kreislaufs gekühlt.

LOEWE-CSC wurde im Jahr 2011 mit dem GreenIT Best Practice Award in der Kategorie 'Visionäre Gesamtkonzepte' ausgezeichnet. In diesem Jahr gehört LOEWE-CSC zu den Preisträgern im Wettbewerb „365 Orte im Land der Ideen“.

Hochleistungsrechner FUCHS und GPU-Cluster Scout

Der Hochleistungsrechner FUCHS ist seit April 2010 in Betrieb. Er wurde aus Mitteln der DFG und des HMWK finanziert. Das System besteht aus 4920 AMD-Istanbul-Kernen mit einer Spitzen-Rechenleistung von 43 TFlop/s, 14 TB Hauptspeicher und 537 TB Massenspeicher. Die Rechenknoten, die bis zu 24 CPU-Kerne und 128 GB Hauptspeicher bieten, sind mit InfiniBand vernetzt.

Der Scout, ein gpGPU-Cluster, enthält neun Rechen-einheiten, wobei jede Einheit aus zwei CPU- und drei GPU-Knoten aufgebaut ist. Die CPU-Systeme bestehen aus zwei QuadCore Xeon CPUs mit 16 Gbyte Hauptspeicher. Die GPU-Knoten sind Tesla S1070 Systeme von Nvidia. Jeder GPU-Knoten leistet

4 TFlop/s single precision (sp), bzw. 345 GFlop/s double precision (dp), so dass das Gesamtsystem eine Spitzenleistung von 108 TFlop/s sp, bzw. 9.3 TFlop/s dp erreicht. Ziel des Scout ist es, allen interessierten Arbeitsgruppen Erfahrungen im Einsatz von gpGPU-Systemen zu ermöglichen.

Auslastung der Hochleistungsrechner

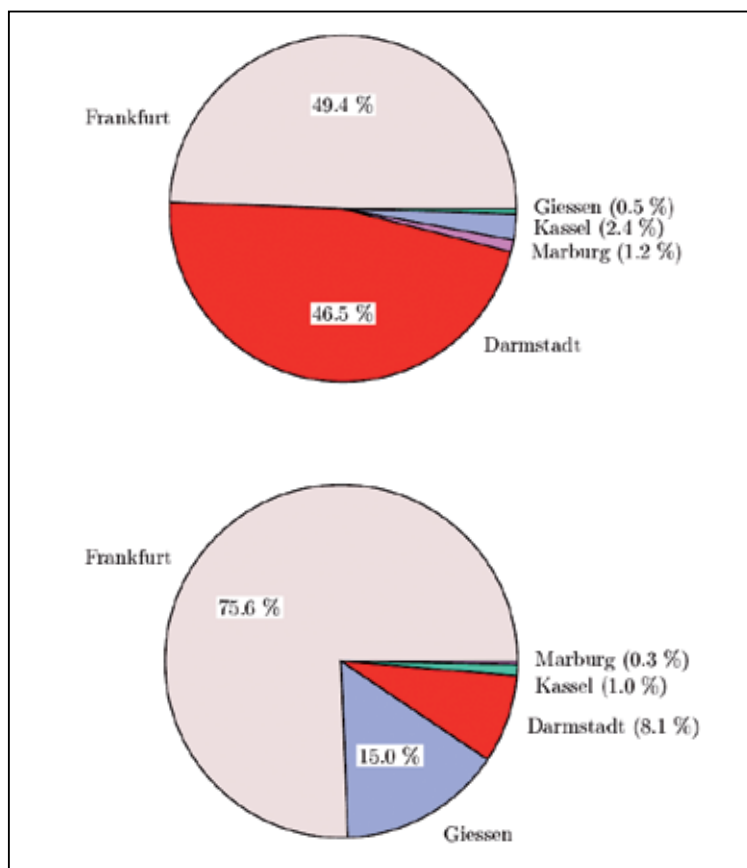
Mehr als 650 Forscher aus über 100 Arbeitsgruppen der Naturwissenschaften, der Mathematik und der Informatik nutzen die Hochleistungsrechner des CSC. Die Rechner versorgen einerseits die Frankfurter Wissenschaftler mit Rechenkapazität, stehen über den hessischen HLR-Verbund aber auch den anderen Hochschulen des Landes zur Verfügung. Beide Rechner sind im Jahresmittel zu 85% ausgelastet. Entsprechend des sehr heterogenen Nutzungsprofils naturwissenschaftlicher Anwendungen, verteilt sich die abgegebene Rechenzeit zu % auf Ein-Kern-Jobs und zu 85% auf parallele Anwendungen.

Der Studiengang Computational Science an der Goethe-Universität

Das CSC organisiert den Master-Studiengang Computational Science. Der Studiengang wird vollständig in englischer Sprache angeboten und erlaubt somit auch internationalen Studierenden den Zugang ohne Sprachbarriere.

Ziel des Studiengangs ist die Vermittlung der theoretischen Grundlagen sowie praktischer Fähigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen. Voraussetzung für die Zulassung ist ein Bachelor in Informatik, Geowissenschaften, Mathematik, Meteorologie, Neurowissenschaften, Chemie oder Physik. Aufbauend auf der Basis mathematischer und methodischer Grundlagen des jeweiligen Bachelor-Studiums, bietet der Master-Studiengang eine Einführung in das moderne wissenschaftliche Rechnen, sowohl allgemein als auch im Hinblick auf das jeweilige wissenschaftliche Arbeitsgebiet, in dem sich die Studierenden spezialisieren.

<http://www.physik.uni-frankfurt.de/mpcs/index.html>



Nutzung der HLR
LOEWE-CSC
(links) und FUCHS
(rechts) nach
Standorten im Jahr
2011

Anpassung des LINPACK-Benchmarks für den LOEWE-CSC

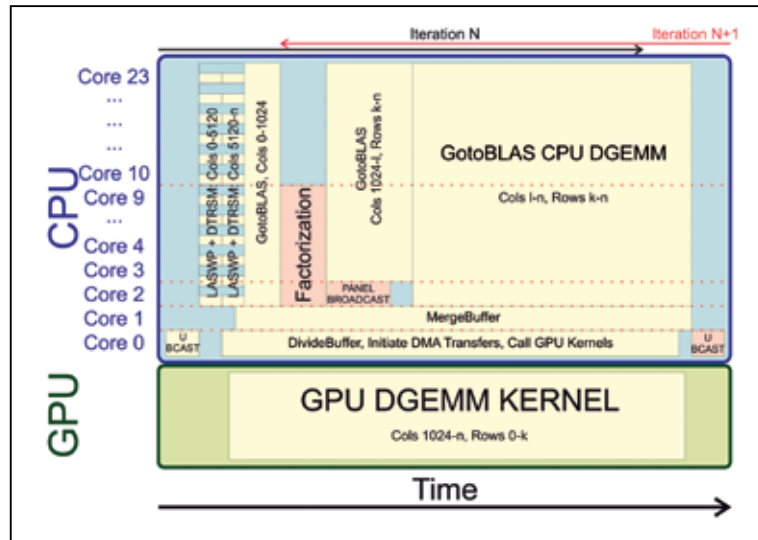
Der LOEWE-CSC-Rechencluster ist ein heterogenes System, dessen Rechenleistung sowohl von gewöhnlichen Prozessoren (CPUs) als auch von Grafikkarten (GPUs) bereitgestellt wird. Zur Messung der Spitzenrechenleistung eines Clusters wird für gewöhnlich der Linpack-Benchmark eingesetzt. Linpack misst die erreichte Rechenleistung anhand der Anzahl von Fließkomma-Operationen, die der Cluster während des Lösen eines dicht besetzten Gleichungssystems durchzuführen vermag.

Die vorhandenen Implementierungen des Linpack-Benchmarks sind auf herkömmliche Cluster ausgelegt und können die von den Grafikkarten zusätzlich bereitgestellte Rechenleistung nicht oder nur eingeschränkt nutzen. Aus diesem Grund wurde für den LOEWE-CSC eine neue Variante des Benchmarks entwickelt.

Den größten Teil der Laufzeit des Linpack-Benchmarks nimmt eine Subroutine namens DGEMM ein, die eine Matrixmultiplikation durchführt. Matrixmultiplikation führt abwechselnd Multiplikationen und Additionen durch und ist damit wie geschaffen für Grafikkarten.

Die Linpack-Version für den LOEWE-CSC ist wie folgt designt: Die Matrixmultiplikation wird zum größten Teil auf die GPU ausgelagert. Die CPU übernimmt alle übrigen Subroutinen. Insofern noch freie CPU-Ressourcen zur Verfügung stehen, übernimmt die CPU Teile der Matrixmultiplikation, sodass eine vollständige Auslastung beider Prozessoren gewährleistet ist. Hierfür wird ein dynamischer Scheduler nach dem Work-Stealing-Prinzip eingesetzt.

Der ursprüngliche Linpack-Benchmark arbeitet seriell und kann auf einem Rechenknoten nicht gleichzeitig die Matrixmultiplikation und andere Berechnungen durchführen, da diese jeweils das Ergebnis des anderen benötigen. Eine genaue Analyse der Abhängigkeiten zeigt jedoch, dass nur ein gewisser Teil der Matrixmultiplikation benötigt wird, um die nachfolgenden Schritte durchzuführen. Indem die Matrix geschickt zerlegt wird, kann dieser Teil zuerst berechnet werden, sodass danach beide Teilaufgaben unabhängig sind und parallelisiert werden können.



Darüber hinaus ermöglicht die Aufspaltung der Matrix in mehrere Teile, eine Pipeline für den GPU-Arbeitsfluss einzurichten. Für jeden Matrixteil müssen nacheinander ein Vorbereitungsschritt auf der CPU, der Transfer auf die GPU, die eigentliche Matrixmultiplikation, der Rücktransfer und eine Nachbearbeitung durchgeführt werden. Die Pipeline ermöglicht es, dass diese Schritte für verschiedene Matrixteile überlappen. Dies stellt sicher, dass zu jeder Zeit die GPU durch Matrixmultiplikation voll ausgelastet ist. Die Abbildung vermittelt einen Überblick über das komplexe Scheduling.

Die Matrixmultiplikation auf der Grafikkarte erreicht mit 494 GFlop/s ca. 90% der spezifizierten Maximalleistung. Berücksichtigt man noch den Transfer sowie Vor- und Nachbearbeitung bleiben noch 465 GFlop/s für den Anwender nutzbare Leistung übrig. Übernimmt die CPU einen entsprechenden Teil der Matrix, steigert sich die Gesamtleistung der Matrixmultiplikation auf 624 GFlop/s. Der Linpack-Benchmark, der zum größten Teil aus der Matrixmultiplikation, aber auch aus anderen Subroutinen besteht, wobei letztere nicht gleichermaßen effizient implementiert werden können, kommt noch auf 563 GFlop/s. Nutzt man mehrere Rechenknoten gleichzeitig, reduziert sich dies wegen Verlusten durch die Latenz der Datenübertragung auf 525 GFlop/s pro teilnehmendem Knoten. Der LOEWE-Cluster insgesamt kommt in der Messung auf 299 TFlop/s.

Das Linux-Cluster im IT-Servicezentrum der Universität Kassel



Das Linux-Cluster besteht zurzeit aus 160 Maschinen mit insgesamt 1200 Prozessorkernen. Jede Maschine hat mindestens zwei AMD-Opteron-Prozessoren und 8 GB Hauptspeicher. 62 dieser Systeme sind mit einer Infiniband-Vernetzung ausgestattet. Das Cluster läuft unter dem Betriebssystem CENTOS 5.4 mit PBS-Torque-Resource-Manager und Maui-Cluster-Scheduler.

Zehn Maschinen stehen für die interaktive Nutzung zur Verfügung. Der Zugriff auf Plattenspeicher erfolgt über GPFS-Dateisysteme. Von den 1200 Prozessoren wurden 336 Prozessoren aus Mitteln eines Fachgebietes im Fachbereich Naturwissenschaften beschafft und stehen deshalb nur den Mitarbeitern dieses Fachgebietes zur Verfügung. Im Jahr 2009 wurden als letzte Ergänzungsbeschaffung 40 Doppelprozessorsysteme mit je zwei AMD-Sechskernprozessoren und 64 bzw. 128 GB Hauptspeicher in Betrieb genommen.

Im laufenden Jahr wird das Linux-Cluster um 3300 Prozessorkerne (AMD-Opteron 6276) erweitert. Die Erweiterung erfolgt über einen Großgeräteantrag des Fachbereichs Mathematik und Naturwissenschaften gemäß Artikel 91b des Grundgesetzes. Die Clustererweiterung soll insbesondere für den Betrieb von massiv-parallelen Anwendungen in der Theoretischen Physik genutzt werden.

Das Hessische Ministerium für Wissenschaft und Kunst fördert die Nutzung des Linux-Clusters für massiv-parallele Anwendungen im Rahmen der Stärkung der Methodenkompetenz im Hessischen Hochleistungsrechnen. Im Zuge der Erweiterung des Linux-Clusters ist auch die Aktualisierung des Betriebssystems und der Anwendungssoftware geplant. Aktuell wird das Cluster auf das Betriebssystem Scientific Linux 6 umgestellt.

Anwendungssoftware

Abaqus-6.10-2 (x86-64), ACML 4.1.0, jrMan, Gaussian 03, GROMACS 3.3.3-1, Matlab R2011b, Mathematica 7.0, MD Nastran 2.1 (x86-32), MD Patran 2.1 (x86-32), Meep-0.20.3, MPI: mpich-1.2.7, MPI: LAM/MPI version 7.1.2, MPI: mpich2-1.0.5p4, MPI: mvapich2-1.0.1, mpb-1.4.2, NWChem 5.1, OpenFOAM-1.5, Pixie-2.2.4, R-2.8.1 (Rmpi mit lme4)

Compiler

gcc-4.1.2, Portland-7.0-5 (C, C++, Fortran), Intel-12.1 (C, C++, Fortran)

Auslastung

In den Jahren 2010 und 2011 wurden insgesamt 14.000.000 CPU-Stunden zur Verfügung gestellt, von denen 6.500.000 Stunden von ca. 50 Nutzern abgerufen wurden. Die größten Nutzergruppen kommen aus den Fachbereichen Physik, Maschinenbau und Elektrotechnik.

Die Hochleistungsrechner der GSI



Die GSI betreibt eine große, weltweit einmalige Beschleunigeranlage für Ionenstrahlen. Forscher aus aller Welt nutzen die Anlage für Experimente in der Grundlagenforschung. Die wohl bekanntesten Resultate sind die Entdeckung von sechs neuen chemischen Elementen und die Entwicklung einer neuartigen Tumorthherapie mit Ionenstrahlen. In den nächsten Jahren wird an der GSI das neue internationale Beschleunigerzentrum FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research) entstehen.

Die wichtigsten Anforderungen an die Hochleistungsrechner-Systeme der GSI sind:

- Die Analyse der Daten der GSI-Experimente, die vorbereitenden und begleitenden Simulationsrechnungen sowie die Langzeitarchivierung der Daten und Ergebnisse
- Die Beteiligung als Tier-2-Zentrum am weltweiten Grid zur Auswertung des LHC-Experiments ALICE
- Rechnungen zur Vorbereitung der FAIR-Beschleunigeranlage und der FAIR-Experimente
- Unterstützung der für die Schwerionenphysik notwendigen Theorie-Rechnungen

Das System

Das HLR-System der GSI ist für die Analyse von Experimentdaten der Kern- und Hochenergiephysik optimiert, das heißt für die Verarbeitung großer Datenmengen bei höchster I/O-Leistung.

Die wichtigsten Kennzahlen sind:

- 621 Rechenknoten in Intel64/AMD64-Architektur

unter Debian GNU/Linux verteilt auf zwei Rechencluster;

- Cluster-Filesystem Lustre: 140 Fileserver mit ca. 5000 Festplatten und einer Kapazität von 3,5 PB;
- Archiv, basierend auf zwei Automatic Tape Libraries mit einer Kapazität von 3,5 PB;
- Backbone-Ethernet-Switch Brocade BigIron RX-32 mit einer Kapazität von 5,12 Tb/s.

Für das HLR-Cluster betreibt die GSI eine Strategie des kontinuierlichen Ausbaus und der kontinuierlichen Erneuerung. Ein- bis zweimal pro Jahr werden die jeweils am besten geeigneten, aktuell am Markt verfügbaren Gerätegenerationen beschafft. Dadurch wird die schnelle Weiterentwicklung und Leistungssteigerung der IT-Komponenten optimal genutzt.

Bis Ende 2010 entstand ein Rechen-Cluster mit 521 Rechnern unterschiedlicher Leistungsfähigkeit („Harpertown“, „Clovertown“, „Gainestown“), mit insgesamt etwas mehr als 3000 Kernen und 2 bis 4 GB Hauptspeicher pro Kern. Als Betriebssystem werden verschiedene Versionen von Debian Linux eingesetzt. Zur Installation und Pflege des Systems werden FAI und cfengine benutzt. Das Monitoring basiert auf Nagios, Torrus und Monalisa. Die Nutzer nutzen auf dem Cluster ihr GSI-weites Home-Filesystem und submittieren ihre Jobs via LSF.

Im zweiten Quartal 2011 baute die GSI einen zweiten Cluster auf, bestehend aus 100 Systemen

mit insgesamt 1600 Kernen. Dabei wurden neue Software-Technologien erprobt, die es erlauben, das System auf mehrere zehntausend Kerne zu erweitern. Das Cluster-Management wurde auf das Ruby-basierte System Chef umgestellt. Das Batchsystem wurde durch SGE ersetzt. Zur Verteilung von Benutzersoftware wird cvmfs genutzt.

Die Systeme der GSI sind darauf optimiert, mit Tausenden von Jobs gleichzeitig große Datenmengen zu lesen. Im Zentrum steht das Cluster-Filesystem Lustre. Der Metadaten-Server (MDS) besteht aus zwei redundanten Systemen mit jeweils 48 Kernen und 128 GB Hauptspeicher, die via drdb synchron gehalten werden. Die Daten befinden sich auf 140 Fileservern mit ca. 5000 SATA-Festplatten und einer Kapazität von 3,5 PB. Das Lustre-System und die Rechenfarmen sind mittels Backbone-Ethernet-Switch Brocade BigIron RX-32 so verbunden, dass sich eine aggregierte Bandbreite von 0,5 Tb/s ergibt.

Zur Archivierung der Experimentdaten wird das bei GSI entwickelte System gStore verwendet. Es basiert zurzeit auf zwei Automatic Tape Libraries (ATL 3584-L23) mit einer Kapazität von 3,5 PB und 16 Data-Mover-Servern mit einem Lese/Schreibcache von insgesamt 200 TB, die in einem Storage Area Network (SAN) miteinander verbunden sind. gStore wurde im Hinblick auf einfache Skalierbarkeit entwickelt, sowohl im Hinblick auf Datenkapazität als auch auf I/O-Bandbreite. Mit der derzeitigen Konfiguration erreicht man Transferraten von 1.2 GB/s zwischen den Data-Mover-Platten und der Tape Library, 5 GB/s zwischen den Data-Movern und Klienten im LAN (Lustre) und bis zu 1 GB/s von der Experiment-Datenaufnahme zu den Data-Movern.

Ausbaupläne

Im Berichtszeitraum war die HLR-Infrastruktur über drei Standorte verteilt:

- Das Hauptrechenzentrum der GSI hat 400 qm Grundfläche und eine Anschluss- und Kühlkapazität von 180 kW. Mit einer traditionellen Luftkühlung und ausgelegt auf die niedrigen Leistungsdichten der Mainframe-Ära dient es als General-Purpose-Rechenzentrum und ist bis an die Grenzen der Kapazität ausgelastet. Es beherbergt etwa die Hälfte der Lustre-Fileserver.
- Für die Rechenknoten wurde ein zweiter Standort im Beschleuniger-Betriebsgebäude mit 200kW Kühlleistung in Betrieb genommen.
- Die zweite Hälfte der Lustre-Fileserver befindet sich in einem alten Container. Dort testet die GSI ein innovatives Kühlkonzept: Die Rechner befinden sich in geschlossenen 19-Zoll-Schränken, mit einem passiven Wärmetauscher in der hinteren Tür. Die Luft von etwa 40-45°C vor

dem Wärmetauscher wird auf die Raumtemperatur von etwa 27-28° C gekühlt. Durch die hohe Raumtemperatur ist freie Kühlung möglich. Dies führt zu einem PUE kleiner 1,1 im Jahresmittel. In den über 1,5 Jahren Betrieb gab es keine erhöhten Ausfälle von Servern oder Platten.

Nach dem erfolgreichen Test des neuen Kühlkonzepts wurde ein Rechenzentrum als eine Art zweistöckiges Hochregallager aufgebaut. Pro Stockwerk stehen 48 12-Zoll-Schränke zur Verfügung. Die Infrastruktur mit 2 MVA Strom und 1,2 MW Kühlkapazität (ausbaubar auf 1,8MW) war Ende 2011 fertiggestellt. Im ersten Quartal 2012 wird dort ein Rechencluster mit ca. 10000 Kernen und einem latenzarmen Infiniband Netz, sowie ein Lustre-System mit IPB in Betrieb genommen. Danach sollen dort alle HLR-Systeme der GSI zentralisiert werden. Gegen Ende 2012 ist geplant ein größeres mit GPUs bestücktes System aufzubauen. Damit wird das HLR-Cluster der GSI auch für Anwendungen des klassischen Hochleistungsrechnens attraktiv. Es soll dann in größerem Umfang für GitterQCD-Rechnungen verwendet werden.

Nutzung

Die Hauptnutzer sind die GSI-Experimente HADES und FOPI, das ALICE-Experiment am CERN, die FAIR-Experimente CBM, PANDA und NUSTAR, die Theorie-Gruppe der GSI, die Beschleunigertheorie, und die Abteilung Sicherheit und Strahlenschutz. Die Verteilung der Ressourcen wird monatlich abgestimmt und kann kurzfristig den jeweiligen Bedürfnissen angepasst werden. Mit der Ausnahme der beiden Theoriegruppen, die auch parallele MPI Jobs benötigen, wird das System durch serielle Batchjobs im High-Throuput-Betrieb genutzt. Die wichtigsten Programmiersprachen sind Fortran und C++.

Für das ALICE Experiment ist die GSI als Tier-2-System in das internationale Gridsystem für die LHC-Experimente integriert. Dafür stehen etwa 1000 Jobslots und 400TB Plattenplatz zur Verfügung und werden kontinuierlich genutzt. Die deutschen ALICE-Gruppen können zusätzlich weitere 1000 Jobslots für das innovative System der Analyse-Trains verwenden. Hierbei kombinieren die Physiker ihre Analyse-Schritte als verschiedene Wagen eines Zuges. So müssen die Daten nur einmal gelesen werden. Zusammen mit der riesigen I/O-Bandbreite des Lustre-Systems führt dies dazu, dass mehrmals pro Woche Hunderte von Terabytes mit neuen Analyseschritten ausgewertet werden können. Dies führt zu einem wichtigen Vorsprung der deutschen Gruppen bei der Auswertung von ALICE.

Die Rechencluster der Philipps-Universität Marburg



Der alte Linux-Cluster MaRC

Die Systemarchitektur des HPC-Clusters MaRC (Marburger Rechenclusters) wurde bereits im vorangegangenen Jahresbericht beschrieben (vgl. [1]). Das folgende Diagramm zeigt die fortgeschriebene Nutzungsstatistik bis zum Januar 2012.

Die Zeitspanne der wirtschaftlichen Nutzung von MaRC neigt sich dem Ende zu. Nach Ablauf der Garantiephase wurden Hardware-Ausfälle meist nicht mehr kompensiert. Stattdessen wurden aus funktionsfähigen Einzelteilen defekter Compute Nodes lauffähige Systeme zusammengestellt, soweit der Aufwand vertretbar war. Mehrere Stromausfälle in den Jahren 20 und 2011 führten nicht nur zum Verlust von Rechenzeit (sichtbar in der Nutzungsstatistik), sondern verursachten auch Defekte bei RAM-Modulen in den Compute Nodes der zweiten Ausbaustufe und damit weitere Ausfallzeiten.

MaRC2 – der neue HPC-Cluster

Im Sommer 20 stellte Professor Bruno Eckhardt einen DFG-Antrag für Forschungsgroßgeräte, an dem zehn Marburger Forschungsgruppen und das HRZ beteiligt waren. Dieser Antrag wurde im Februar 2011 bewilligt. Durch die großzügige Förderung der DFG und des HMWK konnte so das Nachfolgesystem MaRC2 im Rahmen einer EU-Ausschreibung beschafft und im Februar 2012 installiert werden. Der Testbetrieb für die ersten Nutzer startete im März 2012.

Der Cluster MaRC2 basiert auf der AMD-Interlagos-Architektur. Jeder der 88 Compute Nodes verfügt über vier 2.3 GHz CPUs mit jeweils 16 Cores (=8 Module). Damit sind pro Compute Node insgesamt 64 CPU Cores verfügbar, die auf 256 GB RAM zugreifen können. Dies ermöglicht eine hohe Parallelisierung im Rahmen des Shared-Memory-Programmiermodells, zum Beispiel via OpenMP. Der hohe Speicherausbau war für viele Anwendungen von zentraler Bedeutung.

Alle Compute Nodes sind über ein QDR Infiniband-Netzwerk verbunden.

Einen deutlichen Ausbau gegenüber dem Vorgänger MaRC hat auch das I/O-Subsystem erfahren, und zwar sowohl bzgl. Performance als auch bzgl. der Kapazität. Die I/O-Leistung des Fileservers von MaRC hatte sich in der letzten Betriebsphase für viele Anwendungen als Flaschenhals erwiesen. MaRC2 verfügt über zwei clusterweite File-Services: Das Home-Filesystem ist per NFS angebunden und zielt auf eine hohe Verfügbarkeit. Die Scratch-Fileserver stellen ein performantes paralleles Filesystem (FhGFS) bereit. Die nutzbare Kapazität beträgt für beide File-Services jeweils über 30 TB.

Abbildung:

Der Cluster MaRC2 nach Aufbau und Installation. Für den Betrieb von MaRC2 wurde die Klimatisierung im HPC-Serverraum renoviert. Eine Kaltgang-Einhausung soll zudem künftig die Luftführung optimieren.

Auf den Einsatz von GPUs wurde verzichtet, da die Unterstützung der Benutzer bei der Nutzung einen zu hohen Betreuungsaufwand erfordert hätte, der derzeit nicht geleistet werden kann. Für Anwendungen, die vom Einsatz von GPUs in hohem Maße profitieren, steht im Rahmen des hessischen HLR-Verbunds mit dem CSC Cluster in Frankfurt eine prominente Alternative bereit.

Besonderes Gewicht wurde bei der Ausschreibung von MaRC2 auf die Energieeffizienz des Systems gelegt: Die HPL-Effizienz von MaRC2 liegt bei 563 MFlops/Watt.

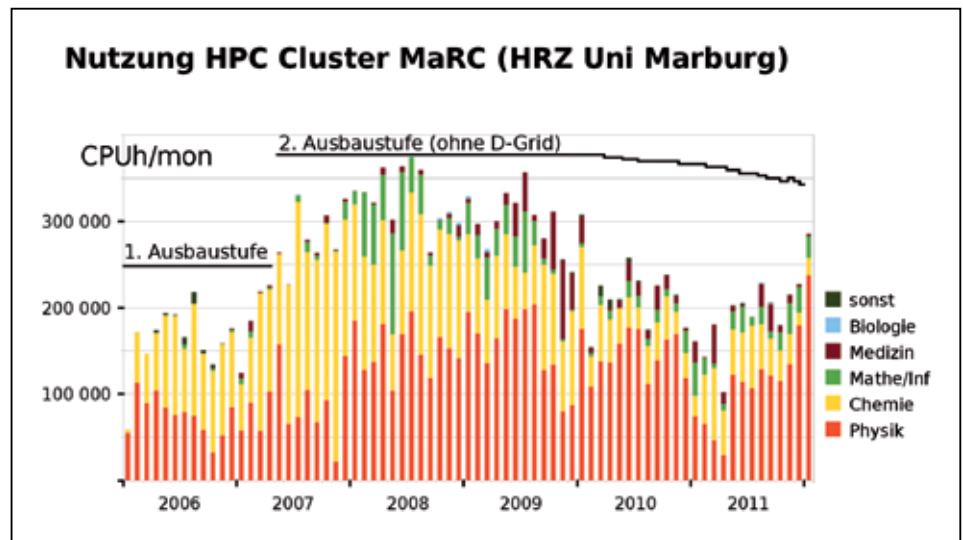


Abbildung:
Nutzung von MaRC durch verschiedene Fachbereiche. Knoten der zweiten Ausbaustufe wurden ihrer höheren Taktfrequenz entsprechend mit dem Faktor 1.2 gewichtet.

Das zentrale Hochleistungsrechen-Cluster der Justus-Liebig-Universität Gießen



Skylla heißt das zentrale Hochleistungsrechen-Cluster der Justus-Liebig-Universität Gießen. Mit einer theoretischen Rechenleistung von 9,3 TFLOPs und insgesamt 2304 GB Hauptspeicher unterstützt es die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler dabei, komplizierte Probleme binnen Stunden oder Tagen zu lösen, für die normale Rechner mehrere Jahre bräuchten.

2009 von der Firma Clustervision geliefert, aufgebaut und konfiguriert, wurde das Cluster im Mai 2011 auf den jetzigen Stand ausgebaut. Skylla setzt sich aktuell aus 86 Rechenknoten mit insgesamt 992 Prozessorkernen, zwei Frontend-Rechnern, einem Lustre-Dateisystem und dem internen Kommunikationssystem zusammen. Diese Komponenten sind in vier Racks mit dazwischen angeordneten Kühleinheiten eingebaut. Durch die Kühleinheiten ist die Klimatisierung des kompletten Systems von der Raumklimatisierung unabhängig.

Die Rechenknoten sind in Twin-Chassis untergebracht, die je zwei Motherboards mit je zwei Vier- oder Sechs-Kern AMD-Prozessoren enthalten. Der Hauptspeicherausbau ist so gewählt, dass jedem Rechenkern mindesten 2 GB RAM zur Verfügung stehen. Für Aufgaben, die einen schnellen Zugriff möglichst vieler Rechenkern auf einen gemeinsamen Hauptspeicherbereich erfordern, sind sechs Rechenknoten mit je vier Acht-Kern Prozessoren (32 Rechenkern) und 64 GB Hauptspeicher ausges-

tattet. Der Zugang der Nutzer zum System erfolgt über die beiden Frontend-Rechner, die außer als Login- auch als File- und Queuing- Server dienen.

Schnelles Dateisystem

Insgesamt stehen 29 TB Plattenspeicherplatz zur Verfügung. Die Homeverzeichnis (7,5 TB) der Benutzer und ein Scratch-Bereich (3,5 TB) zur Zwischenspeicherung von Daten sind über den File-server per NFS ansprechbar. Darüber hinaus steht ein Lustre-Dateisystem mit 18 TB zur Verfügung. Es ist für große Datenmengen vorgesehen, auf die im Verlauf einer Berechnung schnell und möglichst verzögerungsfrei zugegriffen werden muss. Es ist nicht zur permanenten Datenaufbewahrung gedacht und nicht in die Datensicherung einbezogen. Das Lustre-Dateisystem ist durch zwei MDS-Server als aktiv/passiv HA-Cluster für die Metadaten und zwei OSS-Knoten für die Nutzdaten realisiert. Die Metadaten liegen auf einem externen RAID-System (RAID10 + Hotspare) mit einer Nettokapazität von ca. 1 TB. Für einen schnellen Zugriff werden im RAID-System 15*146-GB-SAS-Platten mit 15.000 RPM verwendet.

Für die interne Kommunikation zwischen den Clusterknoten stehen drei separate Daten-Netzwerke zur Verfügung: Als Standardnetzwerk dient ein 1 GBit/s-Ethernet. Für die Interprozesskommunikation und den Dateizugriff kann wahlweise ein Infiniband-Netzwerk (Mellanox-Switch, 4x Double Data Rate,

theoretisch 20 GBit/s) genutzt werden. Schließlich wird für den Zugriff auf die IPMI-Ports der Knoten (z.B. zur Hardwareüberwachung) ein 10/100-MBit-Ethernet-Netzwerk eingesetzt.

Software und Compiler

Als Betriebssystem auf den Knoten wird Scientific Linux, das auf Red Hat Enterprise Linux (RHEL) aufbaut, verwendet. Das Queuing-System „Sun Grid Engine (SGE)“ dient zur Jobsteuerung. Zur Administration des Clusters wird das proprietäre Produkt „Bright Cluster Manager“ von Clustervision genutzt. Für die Interprozesskommunikation sind folgende Software-Produkte und -Bibliotheken installiert: LAMMPI, MPICH und OpenMPI. Als Programmiersprachen stehen Fortran und C zur Verfügung. Dazu sind die folgenden Compiler installiert: GNU Compiler Collection, Intel, Portland PGI Compiler, Open64 Compiler Suite, Oracle Solaris Studio und g95. Die Liste der Anwendungssoftware umfasst die Produkte: Mathematica, Octave, Geant, R (mit verschiedenen Modulen), CMake, gnuplot, Radiance und MrBayes.

Mehr als 100 Benutzer aus acht Arbeitsgruppen teilen sich die zur Verfügung stehende Rechenkapazität, wobei der Hauptanteil auf Arbeitsgruppen aus der Physik und der Chemie entfällt. Der Auslastungsgrad des Clusters liegt bei 60%.

Simulation and Control of Drop Size Distributions in Stirred Liquid/Liquid Systems

Astrid Walle, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Ob Verfahrenstechnik, Lebensmittel- oder Ölindustrie: Viele Produkte entstehen durch das Verrühren zweier Flüssigkeiten. Wie gut sich die Flüssigkeiten mischen lassen, hängt auch von der Größe der Tropfen ab. Daher wäre es für die Industrie von Vorteil, die Größe der Tropfen berechnen und vorhersagen zu können. Bisher gibt es kein mathematisches Modell dafür. Forscher der TU Darmstadt suchen nun nach Berechnungsmodellen und Simulationsmethoden, die die Bildung der Tropfen in gerührten Flüssigkeiten beschreiben.

Stirred systems play an essential role in many applications of chemical and process engineering, as well as in food- and oil industry. One determinant factor for the efficiency of the mixing process is the Drop Size Distribution (DSD) of the disperse phase. Hence, for the optimization of the overall process it is crucial to be able to calculate and predict the DSD. The drop transformation processes breakage and coalescence are very complex and there is currently no mathematical model available to describe and predict the DSD in a stirred system correctly. Consequently the long term goal of this project is the development of models for the description and methods for the simulation of the drop formation processes in stirred liquid/liquid dispersions.

This presented study is part of an interdisciplinary project, which is carried out in cooperation with the institute of process engineering and the mathematics department of the TU Berlin (Germany). The specific purpose of this work is the numerical simulation of the dispersed system including flow simulation and calculation of the DSD.

The DSD itself is described by a transport equation, the population balance equation [1] of the number density function $f(\xi, x, t)$, which describes how many particles with the internal coordinate ξ (e.g. the drop diameter) are at location x at time t .

The source term of this equation is dependent on the respective application. In the case of stirred liquid/liquid systems with the assumption of a drop building disperse phase we take drop breakage and coalescence into account. These two phenomena are described by various models in publications, for example the models from Coulaloglou and Tavlarides [2] and the development of new accurate and enhanced models is an ongoing and challenging task.

Based on these assumptions the actual work is structured as follows:

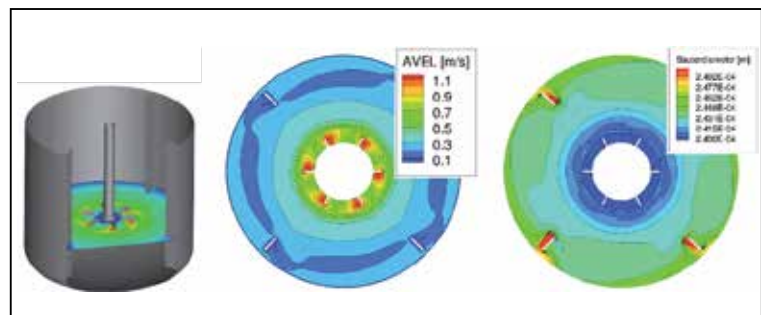


Figure 1:

Setup eines Rührkessels mit simuliertem Strömungsfeld und Tropfengrößenverteilung in einer Schnittebene

The described scalar transport equation has to be solved numerically additionally to the Navier-Stokes equations, which are already implemented in the used in-house flow solver (FASTEST [3]). Therefore it is incorporated into the existent flow solver, which already has shown its potential of simulating stirred systems [4,5]. The discretization in time and space is carried out according to the Navier-Stokes equations with the Finite Volume Method and the θ - and Crank-Nicolson Method, respectively. For the discretization of the internal coordinate there are several options. On the one hand the Method Of Moments (MOM) or enhancements of this model, e.g. the Quadrature-MOM (QMOM) or the Direct QMOM (DQMOM) [6], can be used. On the other hand the fixed or moving pivot techniques [7] experience great popularity. After the successful implementation of the additional discrete transport equation, simulations of experimental setups have to be performed in order to compare with measured data. An example for the simulation of an experimental setup can be seen in Illustration 1.

Future prospects of this work include the comparison of different discretization techniques (DQMOM, Pivot), the implementation of several models describing drop breakage and coalescence, as well as the analysis of the sensitivity of the results towards the use of different turbulence models.

In order to show the full potential of the used discretization methods not only monovariate population balance equations (PBE) but also multivariate cases will be solved. Thus, instead of assuming spherical droplets, which can be described by only one internal coordinate (e.g. diameter or volume), stretched and deformed droplets can be taken into account.

The flow in the stirrer is turbulent and because of that very complex with small scales, a fine grid resolution is necessary which requires efficient computer codes to solve these problems. The high number of grid cells and the additional equations lead to a high necessity of memory and CPU-time. Thus the investigation derives high benefit by executing the computations on parallel high-performance computers. To achieve acceptable computing times and to be able to perform on high-performance computers, like the HHLR, an efficient parallelization of the complete coupled system is a major ambition.

References:

1. M.M. Hulburt and S. Katz, Some Problems in particle technology: A statistical mechanical formulation, *Chemical Engineering Science*, 19(8):555-574, August 1964.
2. C. A. Coulaloglou and L.L. Tavlarides, Description of interaction precesses in agitated liquid-liquid dispersions, *Chemical Engineering Science*, 32(11):1289-1297, 1977.
3. FASTEST, User Manual, 2006, Institute of Numerical Methods in Mechanical Engineering, TU Darmstadt.
4. Z. Harth, Automated Numerical Shape Optimization of 3-dimensional Flow Geometry Configuratiuons, 2008, TU Darmstadt
5. R. Sieber, Numerische Simulation technischer Strömungen mit Fluid-Struktur-Kopplung, 2002, TU Darmstadt.
6. D.L. Marchisio and R.O. Fox, Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments, *Journal of Aerosol Science*, 36(1):43-73, Januar 2005.
7. S. Kumar and D. Ramkrishna, On the solution of population balance equations by discretization: A fixed pivot technique, *Chemical Engineering Science*, 51(8):1311-1332, April 1996.

Effiziente Berechnung der Aeroakustik im nahen Fernfeld

Stefanie Nowak, Dörte Sternel, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Lärm beherrscht den Alltag. Oft erzeugen turbulente Strömungen diesen Lärm, etwa an Flugzeugen. Um herauszufinden, wie das funktioniert, simulieren Wissenschaftler die Entstehung und Ausbreitung der Geräusche am Computer. Forscher der TU Darmstadt arbeiten zurzeit an einem Verfahren, das diese Simulationen effizienter macht. Sie wollen damit die Ausbreitung des Lärms besser vorhersagen.

Der Anstieg von Lärm aufgrund von Straßen- und Luftverkehr und durch erhöhten Einsatz von Maschinen führt heutzutage vermehrt zu Gesundheitsschäden und einer Abnahme der Lebensqualität. Ein Großteil des Lärms, vor allem in urbaner Umgebung, wird durch turbulente Strömungen verursacht.

Der physikalische Hintergrund der Lärmentstehung durch turbulente Strömungen ist für viele Einsatzgebiete noch nicht ausreichend erforscht. Unter diesem Gesichtspunkt stellen aeroakustische Simulationen, basierend auf zeitaufgelösten Methoden, ein wichtiges Werkzeug zum besseren Verständnis der aerodynamischen Lärmentwicklung dar. Zeitaufgelöste Methoden wie die Direkte Numerische Simulation (DNS) und die Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES) bieten nicht nur die Fähigkeit, Schwankungsgrößen vorherzusagen, die als Quellterme für die aeroakustischen Simulationen benutzt werden können. Sie sind auch wegen ihrer höheren Genauigkeit im Vergleich zur Simulation der Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (Reynolds-Averaged-Navier-Stokes, RANS) sehr vielversprechend.

Diese Methoden benötigen für Konfigurationen von praktischem Interesse eine große Rechenleistung, die der Hessische Hochleistungsrechner (HHLR) zur Verfügung stellt.

Speziell bei kleinen Machzahlen tritt zudem ein Mehrskalensproblem auf, da zum einen die Ausbreitungsgeschwindigkeit, aber auch die strömungsmechanischen Schwankungen und die als Schall abgestrahlten Schwankungen weit auseinander liegen.

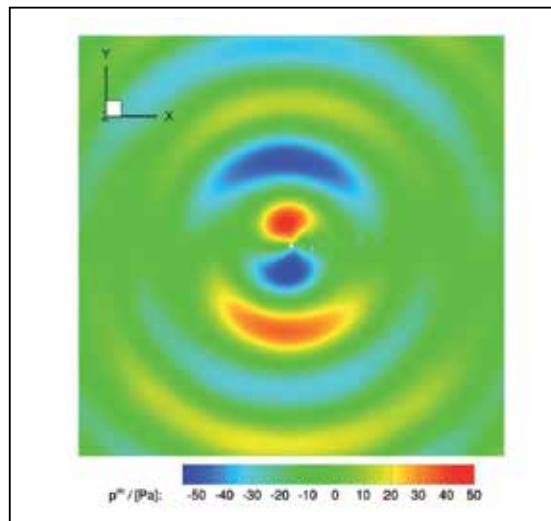


Abbildung 1:
Akustischer Schalldruck einer laminaren Zylinderumströmung

Der numerische Aufwand aeroakustischer Simulationen wächst mit zunehmendem Abstand von Schallquelle und Beobachter. Somit sind bei praxisrelevanten Anwendungen die Grenzen der Leistungsfähigkeit schnell erreicht.

In diesem Projekt soll ein Verfahren entwickelt werden, durch welches aeroakustische Simulationen effizienter berechnet werden und durch die Ausdehnung auf das nahe Fernfeld eine bessere Vorhersage über die Ausbreitung der Schallwellen gemacht werden kann. Die Schallausbreitung wird mit dem Finite-Volumen-Löser FASTEST [1] und einem High-Resolution-Verfahren [3] berechnet.

Das High-Resolution-Verfahren löst hierbei die linearisierten Eulergleichungen (LEE) auf randangepassten, blockstrukturierten Hexaedergittern. Aeroakustische Quellen erhält man durch die zeitabhängig berechnete Strömung, basierend auf der Idee von Hardin und Pope's Viscous Splitting Technique. [2]

Aufgrund der Parallelisierung des Verfahrens sind Berechnungen auf einem Hochleistungsrechner möglich. [4]

Das implementierte Verfahren wird zunächst durch weitere Testfälle validiert. In Abbildung 1 ist der akustische Schalldruck einer laminaren Zylinder-

umströmung dargestellt. In Abbildung 2 folgt die Darstellung der akustischen Quellen, die sich bei turbulenter Strömung durch einen Kanal mit integrierter Blende ausbilden. Hierzu wurde ein Gitter mit 11 Millionen Kontrollvolumen verwendet. Beide Testfälle wurden parallel mit dem HHLR auf 16 CPUs berechnet.

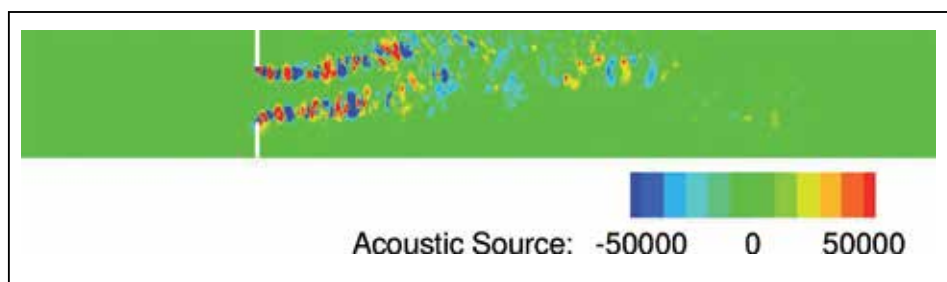


Abbildung 2:
Aeroakustische Quellen eines Kanals mit integrierter Blende

Referenzen:

1. FASTEST Manual, Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Deutschland (2005).
2. J.C. Hardin und D.S. Pope, An Acoustic/Viscous Splitting Technique for Computational Aeroacoustics, Theoret. Comp. Fluid Dynamics, 6, pp. 323-340 (1994).
3. M. Kornhaas, Effiziente numerische Methoden für die Simulation aeroakustischer Probleme mit kleinen Machzahlen, Dissertation, Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2011.
4. D.C. Sternel und M. Kornhaas und M. Schäfer, High-Performance Computing Techniques for Coupled Fluid, Structure and Acoustics Simulations, Competence in High Performance Computing 2010: Proceedings of an International Conference on Competence in High Performance Computing, June 2010, Schloss Schwetzingen, Germany, Springer, 2010.

FSI-basierte Optimierung von Profilen

Nima Aghajari, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Bei vielen technischen Anwendungen treten zwischen Festkörpern und umströmenden Fluiden Wechselwirkungen auf, die den gewünschten Prozessablauf erheblich beeinflussen können. Solche Vorgänge sind als Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) bekannt und seit einigen Jahren Gegenstand intensiver Forschung [1]. Im Fokus der Untersuchungen stehen dabei Wechselwirkungen, die beim Umströmen von Profilstrukturen auftreten, da diese oft die Grundlage komplexer Hochleistungsbauteile wie Turbinenschaufeln, Rotorblätter oder Flugzeugtragflächen bilden.

In diesem Zusammenhang treten Auswirkungen der FSI meist als unerwünschte Begleiterscheinung auf, die den sicheren Betrieb einer Anlage gefährden. Dies kann so weit führen, dass infolge von strömungsseitig hervorgerufenen Schwingungen das komplette Bauteil zerstört wird. Ein bekanntes Beispiel hierfür ist die Tacoma-Narrows-Brücke, die 1940 in Folge von starkem Wind in eine selbstangeregte torsionale Schwingung versetzt wurde und daraufhin einstürzte [2].

Da die komplexen Vorgänge, die bei einer FSI ablaufen, stark von der jeweils betrachteten Problemkonfiguration abhängen, sind für zuverlässige Aussagen über das Verhalten eines Systems experimentelle Versuchsaufbauten unerlässlich. Diese sind jedoch mit einem enormen Kostenaufwand verbunden, weshalb zu Entwicklungszwecken vermehrt auf die numerische Simulation als Hilfsmittel zurückgegriffen wird.

Auf diese Weise können, ausgehend von validierten Berechnungsergebnissen, kostengünstig Parameterstudien durchgeführt werden, um den Einfluss bestimmter Designgrößen auf das Systemverhalten zu bestimmen. Ferner besteht durch die Anwendung geeigneter Optimierungsalgorithmen die Möglichkeit, für einen bestimmten Betriebszustand, die ideal angepasste Konfiguration eines Profils (z.B. Geometrie oder Steifigkeit) vorherzusagen.

Für die Berechnung der FSI ist die Lösung eines gekoppelten Gleichungssystems notwendig. Im Rahmen dieses Projekts kommt für die Lösung der Strömungsgleichungen der Finite-Volumen-basierte Solver FASTEST zum Einsatz, während die Struktur mit dem Finite-Elemente-Code FEAP berechnet wird. Die Kommunikation zwischen beiden Lösern erfolgt per Nachrichtenaustausch über die Programmierschnittstelle MPI.

Bei nahezu allen technischen Profilanwendungen treten turbulente Strömungen auf. Um die turbulenten Skalen, die hierbei auftreten, korrekt zu erfassen, ist eine sehr feine Auflösung des Rechengebiets notwendig. Dies führt aufgrund der zahlreichen Kopplungsiterationen zu teilweise erheblich langen Rechenzeiten, so dass für die Simulation eines FSI-Problems in akzeptabler Zeit eine Parallelisierung der Berechnungscodes unumgänglich ist.

Sowohl FASTEST als auch FEAP sind vollständig parallelisiert. Um den Overhead, der durch die Kommunikation zwischen den Codes entsteht, minimal zu halten, werden mehrere Instanzen beider Codes in einer einzigen MPI-Umgebung gestartet (Multiple-Program Multiple-Data). Der Austausch der Daten erfolgt dann direkt mittels MPI über die Adressierung der jeweiligen Prozesse. Während die Berechnung kleinerer Testfälle noch parallel auf lokalen Workstations ausgeführt werden kann, ist für die Simulation realistischer Anwendung sowohl aus Zeit- als auch aus Speichergründen die Verwendung von Hochleistungsrechnern erforderlich.

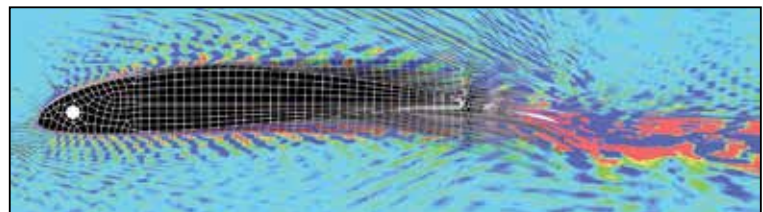


Abbildung 1:

Momentaufnahme der FSI bei einer Profilmströmung; Konturdarstellung der Wirbelviskosität

Referenzen:

1. Dowell, E. H. and Hall, K. C., Modeling of Fluid-Structure Interaction, Annual Review of Fluid Mechanics 33, S. 445-490, 2001.
2. Billah, K. Y. and Scanlan, R. H., Resonance, Tacoma Narrows Bridge Failure, and Undergraduate Physics Textbooks, American Journal of Physics 59 (2), S. 118-124, 1991.

Parallel Non-Linear Finite Elements for Micropolar Continua

Steffen Bauer, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Ob Medizintechnik oder Luft- und Raumfahrt: elektronische Produkte sollen immer kleiner und leichter werden. Die technischen Probleme, die dabei auftreten, lassen sich nur mittels aufwändiger Berechnungen am Computer lösen. Wissenschaftler der TU Darmstadt arbeiten an einer Möglichkeit, die Berechnungen so zu gestalten, dass mehrere Rechner die Probleme der Größen-Effekte parallel bearbeiten und damit schneller lösen.

Non-linear FEM applications, suitable for spatial micropolar configurations undergoing large deformations as proposed in [1,2], entail increased computational effort in comparison to conventional formulations. Non-symmetric global tangent stiffness arrays, a sophisticated numerical treatment of additionally appearing microrotational degrees of freedom and a large set of history variables are main features that challenge an effective computation. Optimization and adaption of algorithms, both on the element and on the solver level, may increase the size of manageable configurations on serial computers. However, the potential of this approach is limited, and the simulation of micropolar structures

with practical relevance and according mesh sizes on serial machines is unlikely to become possible.

Therefore, parallel Finite Elements and the access to a sufficient amount of high-performance computing resources on the HHLR play a pivotal role for our studies. As in-house simulation tool we use a parallelized build of the FE code FEAP. It is based on the parallel data structure suite PETSc and the graph partitioner METIS, and shows good speed-up and scalability. Our current studies concern the application of the parallel framework to realistic problems with size effects with many DOF, such as, e.g., the well-known wire torsion problem [3].

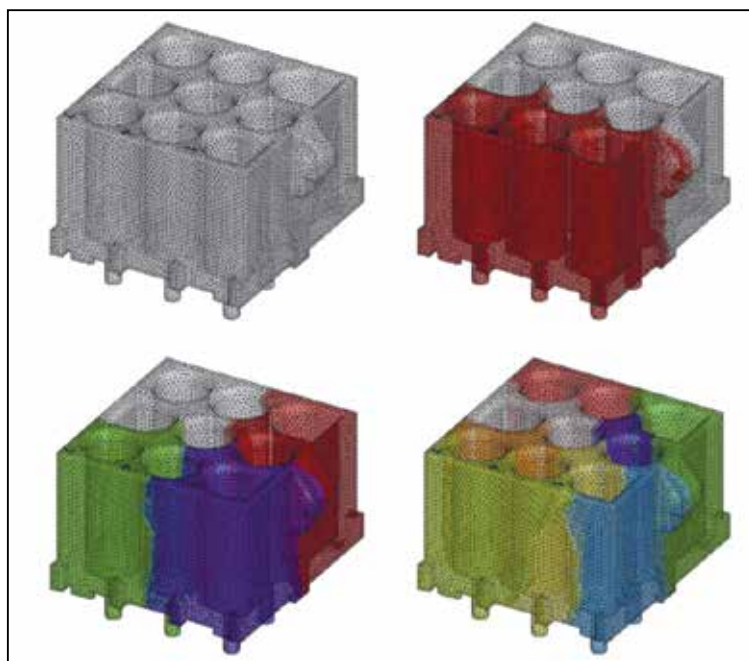


Figure 1:

Complex problem domain discretized with micropolar tetrahedral elements; exemplary partition in 1, 2, 4 and 8 domains.

References:

1. S. Bauer, W.G. Dettmer, D. Perić and M. Schäfer, Micropolar hyper-elastoplasticity: constitutive model, consistent linearization and simulation of 3D scale effects, International Journal of Numerical Methods in Engineering, in press, DOI: 10.1002/nme.4256, 2011.
2. S. Bauer, W.G. Dettmer, D. Perić and M. Schäfer, Micropolar hyperelasticity: constitutive model, consistent linearization and simulation of 3D scale effects, Computational Mechanics, in press, DOI: 10.1007/s00466-012-0679-9, 2012.
3. N. Fleck, G. Muller, M. Ashby and J. Hutchinson, Strain gradient plasticity: theory and experiment,
4. Acta Metallurgica et Materialia, 42(2):475–487, 1994.

Time dependent shape optimization with higher-order surfaces in consideration of FSI

Gerrit Becker, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Der Wind kann eine Brücke so stark zum Schwingen bringen, dass sie einstürzt. Auch Tragflächen von Flugzeugen können bei Wind so stark schwingen, dass sie brechen. Wie heftig eine Brücke oder Tragfläche schwingt, hängt davon ab, wie sie aufgebaut ist. Wissenschaftler der TU Darmstadt setzen sich damit auseinander, wie Bauteile gestaltet sein müssen, damit die gegenseitige Beeinflussung von Struktur und Strömung so wenig Schaden wie möglich anrichtet. Ihre Idee: ein neuer Verformungsansatz für die Optimierung von Formen.

Fluid-structure interactions (FSI) arise in many disciplines and applications, e.g. elastic artery modeling, airfoil flutter or wind loads on structures. Therefore, the significance of efficient numerical methods to solve these problems has increased steadily. Thus, the demand for shape optimization has arisen, e.g. the drag and lift force optimization of airfoils. Throughout the last years, researchers have improved the numerical methods concerning fluid-structure interactions. Efficient codes are available now. Furthermore, in the field of structural mechanics shape optimization is already commercially receivable and fluid mechanics researchers make good progress. However, simulations combining fluid-structure interactions and shape optimizations have not been deeply investigated yet.



Figure 1:
Classification of this project's content within the context of FSI optimization

Therefore, it is aspired to establish shape optimizations within fluid-structure interaction applications. Since the optimal shape is calculated, numerical shape optimization of coupled problems may reduce the costs of time-consuming experiments.

This project proposes a new deformation approach for optimizing shapes. It allows a straightforward application towards coupled problems, i.e. the coupled code's routines for grid deformation and generation are utilized for the shape movement within the optimization process as well. The new method is implemented within the fluid region and works aside the fluid-structure coupling surfaces. Because of the time dependence in fluid-structure interactions, an efficient time dependent

optimization approach needs to be considered. This paper handles the first step towards an efficient FSI optimization (see Fig. 1).

The applied code solves fluid-structure interactions via an implicit partitioned approach. It is based on FASTEST, a parallel multigrid flow solver, utilizing an entirely conservative finite-volume method to solve the incompressible Navier-Stokes equation on a non-staggered, block structured and cell centered grid. Furthermore, FEAP is used as a finite-element based structural solver. The coupling interface is realized via OpenMPI, which sends forces of the flow region to the structural solver and returns resulting deformations. For these, an efficient block-based grid deformation tool is implemented for the fluid region, allowing large grid movements by algebraic and elliptic mesh generation techniques. Furthermore an efficient parallelization of this whole FSI and optimization code is done and absolutely necessary to achieve reasonable computation times.

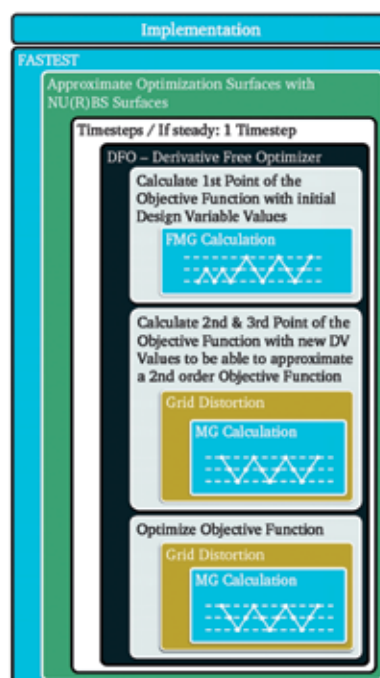


Figure 2:
Implementation into the FSI environment

Der Einfluss des Diskretisierungsschemas auf die Grobstruktursimulation turbulenter Strömungen

Frank Flitz, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Autos sollen möglichst leise fahren. Doch sobald der Fahrtwind sie umströmt, entstehen Geräusche. Um diese Geräusche zu verringern, stellen Forscher die turbulenten Strömungen in Computer-Simulationen nach. Da die Situation für die Simulation vereinfacht werden muss, spiegelt das Simulationsergebnis die Realität nur annähernd wider. Wissenschaftler der TU Darmstadt nutzen für ihre Simulationen nun ein alternatives Verfahren zur Vereinfachung, mit dem sie die Realität genauer abbilden wollen.

Die Akustik turbulenter Strömungen spielt in der Industrie eine wichtige Rolle, zum Beispiel in der Umströmung von Fahrzeugen. Zur Simulation der Schallabstrahlung werden aus der Strömungssimulation die akustischen Quellterme ermittelt. Da diese Quellterme dafür zeitlich aufgelöst vorliegen müssen, eignen sich zur Strömungssimulation nur die Direkte Numerische Simulation (DNS) und die Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES). Die wesentlich weniger rechenintensive Simulation der Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (Reynolds-Averaged-Navier-Stokes, RANS) ist dafür nicht geeignet.

Eine Simulation mittels der sehr rechenintensiven DNS ist bisher nur auf einfachen Geometrien bei geringen Reynoldszahlen möglich. Der Fokus in der Simulation turbulenter Strömungen auf komplexen Geometrien in der Zukunft liegt daher auf der LES. Die Diskretisierungsordnung der bei der LES eingesetzten Standarddiskretisierung CDS verringert sich aber auf verzerrten Gittern, wie sie bei komplexen Geometrien auftreten, von zwei auf eins. Daher wird hier der Einfluss des alternativen Diskretisierungsschemas MuLi [1] untersucht, welches auf verzerrten Gittern keinen Ordnungsverlust aufweist. Zwei Punkte sind bei den Untersuchungen von besonderem Interesse:

Zum Einen ist zu untersuchen, ob die Diskretisierung mit MuLi zu einer genaueren Abbildung der Realität führt. Dies lässt sich bei einer turbulenten Strömung nicht anhand einer Momentaufnahme der Strömungsgrößen beurteilen. Vielmehr müssen diese dafür über einen großen Zeitraum gemittelt werden, um auskonvergierte Mittelwerte der Strömungsgrößen zu erhalten.

Zum Anderen ist die „Glattheit“ der Strömungsgrößen von Interesse. Ist diese nicht gewährleistet, entstehen dadurch künstliche akustische Quellen, welche die Simulation der Schallabstrahlung negativ beeinflussen. Die Diskretisierung mittels CDS neigt unter bestimmten Umständen zu nicht glatten Ergebnissen. Daher ist ein weiterer Schwerpunkt der Untersuchungen das Potential zur Erhöhung der Glattheit durch die Diskretisierung mit MuLi.

Zur Untersuchung der Unterschiede zwischen den Diskretisierungen wird in einem turbulenten Strömungsbereich gezielt eine Gitterverzerrung eingebracht (s. Abbildungen).

Durch den ständigen Zugewinn an Rechenleistung wird es in Zukunft möglich sein, die turbulente Strömung auf komplexen Geometrien instationär zu berechnen. Die Benutzung des HHLR erlaubt es, die zukünftigen Herausforderungen bereits heute anzugehen.

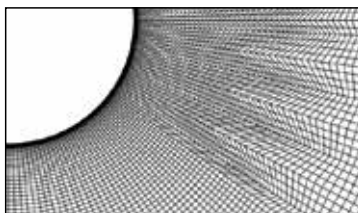


Abbildung 1:
Gezielt verzerrtes Gitter

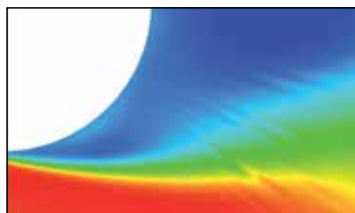


Abbildung 2:
Die Diskretisierung mittels CDS liefert kein „glattes“ Ergebnis

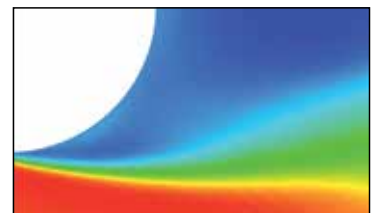


Abbildung 3:
„Glatteres“ Ergebnis durch die Diskretisierung mittels MuLi

Referenz:

1. T. Lehnhäuser, M. Schäfer: Improved linear interpolation practice for finite-volume schemes on complex grids, Int. Journal of Numerical Methods in Fluids, Vol. 83/No. 7, 625–645 (2002).

Diskontinuierliche Galerkin-Methoden mit GPU-Unterstützung

Dr.-Ing. Florian Kummer und Prof. Dr.-Ing. Martin Oberlack
Fachgebiet für Strömungsdynamik, Technische Universität Darmstadt

Wer bei Computer-Strömungssimulationen die Realität möglichst genau abbilden will, muss meist viel Rechenzeit investieren. Wissenschaftler der TU Darmstadt untersuchen neue Möglichkeiten, diese Berechnungen zu beschleunigen. Dazu kombinieren sie die hochgenaue diskontinuierliche Galerkin-Methode mit Graphics Processing Units (GPU), einer Prozessorarchitektur, die ursprünglich 3D-Grafikberechnungen beschleunigte. Einige Simulationen konnten die Darmstädter damit zwanzigmal schneller lösen als auf herkömmlichen Wegen.

In vielen ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen, wie etwa dem Flugzeug- oder Automobilbau, sind strömungsdynamische Fragestellungen von zentraler Bedeutung. Prinzipiell wird das Strömungsverhalten von Gasen oder Flüssigkeiten durch die sogenannten Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben. Eine allgemeine Lösung dieser Gleichungen für eine beliebige Geometrie hat bis heute niemand gefunden. Anstelle dessen werden auf (Groß-)Rechnern Näherungen der ursprünglichen Gleichungen mithilfe numerischer Verfahren gelöst. Man spricht dabei von einer Diskretisierung mit einer gewissen Auflösung. Die Auflösung besagt, wie viele „Messpunkte“ für Geschwindigkeit und Druck in x-, y- und z-Richtung verwendet werden. Sie bestimmt letztendlich die Genauigkeit und den Rechenaufwand der Lösung.

Von zentralem Interesse bei solchen Verfahren ist ihre Fehlerordnung, denn mit dieser Größe wird beschrieben, wie sich der Fehler der Näherungslösung – im Vergleich zur Lösung der ursprünglichen Navier-Stokes-Gleichungen – verhält, wenn die Auflösung des Verfahrens erhöht wird. Man spricht zum Beispiel von einer quadratischen, respektive zweiten Fehlerordnung, wenn der Fehler durch eine Verdopplung der Auflösung auf ein Viertel ($4 = 2^2$) reduziert wird. Dementsprechend wird bei einer kubischen oder dritten Fehlerordnung der Fehler auf ein Achtel ($8 = 2^3$) reduziert, bei einer Fehlerordnung von 4 auf ein 16-tel, usw. Prinzipiell ist also eine möglichst hohe Fehlerordnung erwünscht, um eine möglichst hohe Genauigkeit der Lösung für einen bestimmten Aufwand zu erzielen. Verfahren, die aktuell in der Industrie eingesetzt werden, erreichen meist nur eine quadratische Fehlerordnung. Die diskontinuierliche Galerkin-Methode kann prinzipiell beliebig hohe Fehlerordnungen erreichen. Bei Methoden höherer Ordnung steigt zwar auch der Rechenaufwand, der Zugewinn an Genauigkeit überwiegt dies jedoch bei Weitem.

Graphics Processing Units, oder kurz GPUs, sind eine komplett neue Prozessorarchitektur, die in etwa in den letzten 15 Jahren entstanden ist, mit dem ursprünglichen Zweck, 3D-Grafikberechnungen, etwa in Computerspielen oder auch für CAD zu beschleunigen. Diese einstmal hochspezialisierten Prozessoren wurden im Laufe der vergangenen Jahre immer flexibler, sodass sie mittlerweile für eine ganze Reihe von anderen wissenschaftlichen Fragestellungen geeignet sind. Aktuell etwa sind vier der zehn schnellsten Computer der Welt – insofern diese in der TOP500-Liste registriert sind – mit GPUs ausgestattet. Insbesondere eignen sich GPUs hervorragend für diskontinuierliche Galerkin-Methoden, da die Datenstrukturen des Verfahrens sehr gut zur GPU-Architektur passen.

Das Computerprogramm BoSSS (Bounded Support Spectral Solver) dient der Berechnung mehrphasiger Strömungen. Dabei handelt es sich um Gemische, die sich nicht ineinander lösen, zum Beispiel Wasser in Öl. Die Software ist aber auch für gleichmäßige Fluide wie Luft geeignet. Ziel der am Fachgebiet für Strömungsdynamik der TU Darmstadt seit 2008 durchgeführten Softwareentwicklung sind Strömungssimulationen mithilfe von diskontinuierlichen Galerkin-Methoden in großem Maßstab. Der Programmcode ist auf GPU-Unterstützung ausgerichtet, jedoch nicht zwangsläufig darauf angewiesen. Messungen zeigen, dass durch die Verwendung von GPUs die Berechnung um einen Faktor zwischen 5 und 20 beschleunigt werden kann. Exemplarisch dafür sei die unten abgebildete Simulation einer sogenannten wall-mounted-cube-Konfiguration, welche auf dem GPU Cluster SCOUT des CSC Frankfurt durchgeführt wurde. Für die dargestellte Simulation wurden sechs GPUs simultan verwendet. Ein Ziel künftiger Entwicklungen wird sein, mit etwa 100 GPUs parallel zu arbeiten, um deutlich größere und aufwändigere Rechnungen durchzuführen.

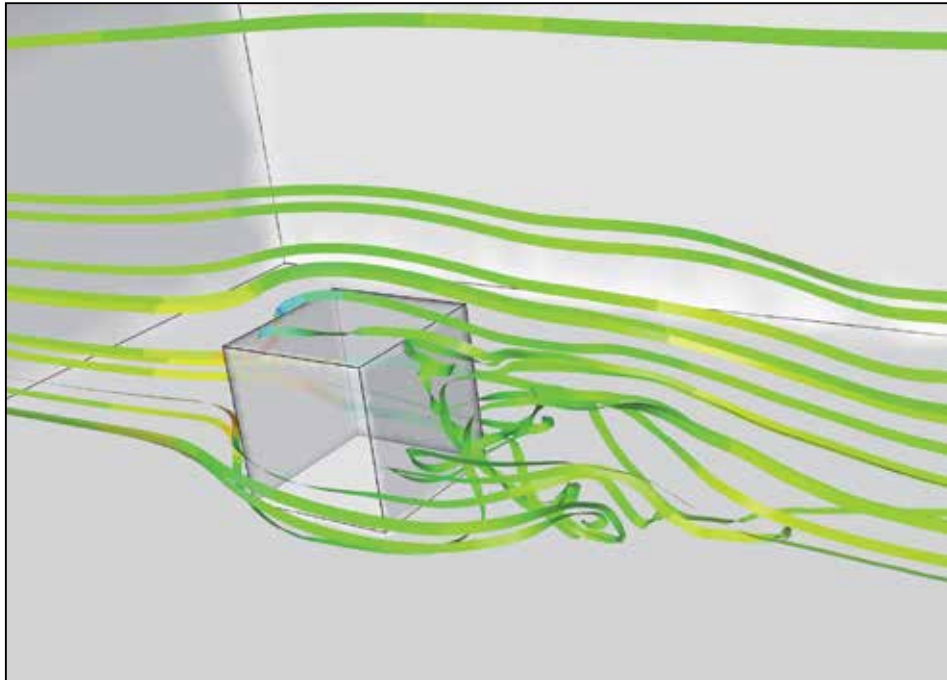


Abbildung 1:
Visualisierung der Umströmung eines Würfels auf einer Oberfläche.

Lokale adaptive Gitterverfeinerung zur Simulation von komplexen Strömungsproblemen

Ulrich Falk, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

So fein wie nötig, so grob wie möglich, lautet das Motto, nach dem Wissenschaftler bei ihren Simulationen handeln müssen. Denn: Je genauer sie ein Szenario darstellen, desto mehr Rechenleistung und Speicherplatz benötigen sie. Die Wissenschaftler bilden die Realität daher nur an den Stellen möglichst genau ab, an denen es für die Rechenergebnisse wichtig ist. Durch dieses Vorgehen können sie auch sehr komplexe Probleme auf parallelen Hochleistungsrechnern simulieren, zum Beispiel die Strömungen in Turbinen.

Die zuverlässige Simulation einer Strömung für technisch relevante Problemstellungen stellt auch heute noch eine große Herausforderung dar, da die auftretenden charakteristischen räumlichen Skalen eine große Bandbreite umfassen. Um auch die kleinsten Skalen mit dem Rechengitter auflösen zu können, muss die Gitterweite sehr fein gewählt werden. Orientiert sich die global gewählte Gitterweite an den lokal auftretenden kleinsten Skalen, führt dies zu einer extrem hohen Anzahl von Gitterpunkten innerhalb des Rechengitters und damit zu einem hohen Speicherbedarf und langen Rechenzeiten. Deshalb ist es sehr wichtig, nur dort ein sehr feines Rechengitter festzulegen, wo es die auftretenden räumlichen Skalen tatsächlich erfordern.

Eine Strategie zur effizienteren Berechnung solcher komplexen Strömungsprobleme, bei denen die charakteristischen räumlichen Skalen eine große Bandbreite umfassen, ist die adaptive Gitterverfeinerung, bei der im Verlaufe der Rechnung die Gitterweite adaptiv an die lokal vorliegenden räumlichen Skalen angepasst wird [1].

Die Methoden zur adaptiven Gitterverfeinerung können in zwei Klassen eingeteilt werden [2]. Methoden, bei denen die Gitterpunktanzahl des Rechengitters konstant bleibt, während sich die räumliche Position in Abhängigkeit der räumlichen Skalen bei der Strömungssimulation verändert, gehören zur r-Klasse der adaptiven Gitterverfeinerung (vgl. Abb. 1).

Methoden, bei denen die räumliche Position der Gitterpunkte des Rechengitters konstant bleiben, während sich die Anzahl der Gitterpunkte bei der Strömungssimulation lokal erhöht, werden der h-Klasse der adaptiven Gitterverfeinerung zugeordnet (vgl. Abb. 2).

Aus der Kombination von Methoden zur adaptiven Gitterverfeinerung, die der r- und h-Klasse

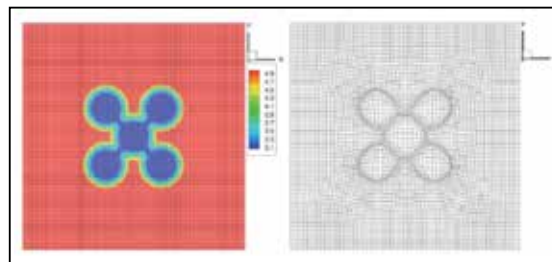


Abbildung 1: Ursprüngliches numerisches Gitter und Modellfunktion zur Steuerung der adaptiven Gitterverfeinerung (links), angepasstes numerisches Gitter (rechts).

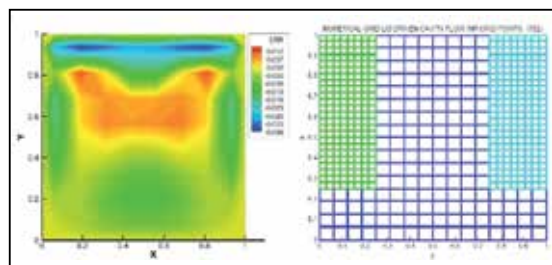


Abbildung 2: Testfall analytische Lid-driven-cavity-Strömung numerischer Fehler bei äquidistantem Gitter (links), angepasstes numerisches Gitter (rechts).

zugeordnet werden können, resultiert ein effizienter Gesamtalgorithmus zur zuverlässigen Simulation einer Strömung für technisch relevante Problemstellungen.

Sehr komplexe Strömungskonfigurationen, wie eine Turbinenbrennkammer, die eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung und einen entsprechenden Bedarf an Arbeitsspeicher und Rechenleistung benötigen, lassen sich derzeit nur auf parallelen Hochleistungsrechnern simulieren. Mit Hilfe der adaptiven Gitterverfeinerung, in Kombination mit dynamischer Lastenverteilung, können Strömungssimulationen in komplexen Strömungskonfigurationen auf parallelen Hochleistungsrechnern effizient durchgeführt werden.

Referenzen:

1. W. G. Habashi, J. Dompierre, Y. Bourgault, D.A. A. Yahia, M. Fortin and M. G. Vallet. Anisotropic mesh adaptation: towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part I: general principles. Int. J. for Numerical Methods in Fluids, 32: 725-744, 2000.
2. C. F. Lange, M. Schäfer, F. Durst. Local block refinement with multigrid flow solver. Int. J. for Numerical Methods in Fluids, 38: 21-41, 2002.

Simulation von Fluid-Struktur-Interaktion in turbulenten Strömungen

Thorsten Reimann, Dörte C. Sternel, Michael Schäfer
Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Die Tragflächen eines Flugzeugs schwingen, wenn der Wind sie umströmt. Sie reagieren also auf die Strömung der Luft und beeinflussen dadurch wiederum die Strömung. Wissenschaftler der TU Darmstadt suchen nach Möglichkeiten, die Wechselwirkungen zwischen turbulenter Strömung und den in dieser Strömung bewegten Objekten auf dem Computer nachzustellen. Bisher ist dieses Feld kaum erforscht.

Die Robustheit und Zuverlässigkeit numerischer Methoden bei der Berechnung physikalischer Phänomene ist heute so weit entwickelt, dass diese einen immer selbstverständlicheren Einsatz in der Praxis industrieller Produktentwicklung finden. Gleichzeitig steigt das Interesse, physikalische Prozesse in der Simulation miteinander zu koppeln, um komplexere Systeme erfassen zu können. Dementsprechend hat, besonders motiviert durch Anwendungsmöglichkeiten insbesondere in der Aeroelastik und der Biomechanik, die Simulation gekoppelter Fluid-Struktur-Systeme seit etwa zehn Jahren besondere Aufmerksamkeit in der ingenieurwissenschaftlichen Forschung erhalten.

Ein weiterhin offenes Problemgebiet ist dabei die in der industriellen Anwendung besonders relevante Turbulenz der mit der Struktur interagierenden Strömung. Während die Modellierung turbulenter Strömung um feste Geometrien nach über vierzig Jahren der Forschung zur Selbstverständlichkeit der Ingenieurspraxis gehört, werfen Simulationen mit bewegten Geometrien neue Probleme auf. Wie kann die für die Strömungssimulation benötigte Gitterqualität bei einer Verzerrung durch Wandbewegung erhalten werden? Welche Turbulenzmodelle sind für den Einsatz in der Fluid-Struktur-Interaktion geeignet, bzw. welche zusätzlichen Anforderungen gibt es und wie kann ihnen entsprochen werden? Wie können die Kosten der sehr rechenintensiven Simulationen in einem vertretbaren Rahmen gehalten werden?

Im Rahmen dieser Fragestellungen wird in diesem Projekt die Simulation eines experimentell vermessenen Testfalls angestrebt. Es handelt sich dabei um einen drehbar gelagerten Zylinder, an dem eine biegbare Platte mit einer Endmasse montiert sind. Dieser Fall zeichnet sich insbesondere durch große Strukturdeformationen und ein komplexes Turbulenz-Transitionsverhalten aus und stellt daher hohe Anforderungen an die Gitterverzerrung und die Turbulenzmodellierung. Die Simulationen sollen mit zwei etablierten Methoden der Berechnung turbulenter Strömung erfolgen: der Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-(RANS-)Simulation und der Grobstruktursimulation.

Zum Einsatz kommt dabei eine am Fachgebiet geschaffene, auf einer Zerlegung des physikalischen Gebiets basierende Simulationsumgebung [1], bestehend aus einem mit der Finiten-Volumen-Methode operierenden Strömungslöser, einem Strukturlöser auf Basis der Finiten-Elemente-Methode, sowie einem Kopplungswerkzeug, welches physikalische Größen zwischen prinzipiell beliebigen Strömungs- und Strukturgittern austauscht.

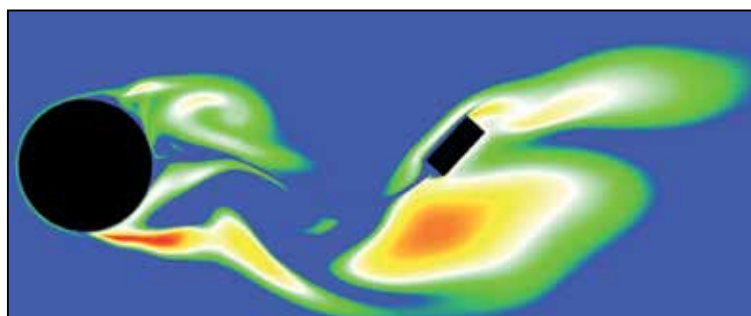


Abbildung 1:
Testfall zur
turbulenten Fluid-
Struktur-Interaktion,
Momentaufnahme
der turbulenten
kinetischen Energie.

Referenzen:

1. M. Schäfer, D. C. Sternel, G. Becker & P. Pironkov: Efficient Numerical Simulation and Optimization of Fluid-Structure Interaction. In: H. J. Bungartz, M. Mehl & M. Schäfer (Hrsg.): Fluid Structure Interaction II, Modelling, Simulation, Optimization, Vol. 73 von Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer 2010.

Vergleich von Lösungsverfahren in der Direkten Numerischen Simulation

Thorsten Reimann, Benjamin Kadoch, Kai Schneider, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Die Berechnung turbulenter Strömungen übersteigt oft die Kapazitäten von Hochleistungsrechnern. Daher verwendet man dafür spezielle Lösungsmethoden. Als besonders schnell gelten Spektralverfahren, die aber in der Regel nur auf sehr einfache Geometrien anwendbar sind. Wissenschaftler der TU Darmstadt und der Université de Provence in Marseille testen derzeit eine neue Art, solche Verfahren so zu erweitern, dass auch turbulente Strömungen in komplexen Geometrien effizient simuliert werden können.

Simulationen von Strömungen basieren in der Regel auf der numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen, welche die Strömungen beschreiben. Handelt es sich um turbulente Strömungen, muss aufgrund der Kleinskaligkeit der turbulenten Strukturen ein erhöhter Rechenaufwand geleistet werden, um die Strömung vollständig darstellen zu können. Da dieser Aufwand schnell die Kapazitäten selbst moderner Hochleistungsrechner sprengen kann, werden solche Strukturen in der Praxis durch einfach zu berechnende Modelle ersetzt, die ihrerseits jedoch Fehler in die Simulation einbringen. Die sogenannte Direkte Numerische Simulation (DNS) verzichtet demgegenüber auf solche Turbulenzmodelle. Sie ist daher auf einfache Problemstellungen beschränkt. Jedoch steigen mit sich erhöhender Kapazität aktueller Rechenanlagen die Bereitschaft und das Bedürfnis, DNS auch für komplexe Geometrien einzusetzen.

Als räumliche Diskretisierungsmethode in der numerischen Strömungssimulation ist die Methode der Finiten Volumen (FVM) etabliert, zu deren Vorzügen die Möglichkeit zur Behandlung komplexer Geometrien zählt. Bei der Durchführung einer DNS werden jedoch häufig sogenannte Pseudo-Spektralverfahren vorgezogen, da sie schneller sind und in der Regel eine höhere Fehlerordnung aufweisen. Jedoch sind sie beschränkt hinsichtlich der Geometrie des Problemgebiets, da in der Regel Periodizität und Orthogonalität des Rechengitters verlangt werden.

In Zusammenarbeit mit der Université de Provence in Marseille wird in diesem Projekt eine dort entwickelte, neuartige Pseudo-Spektralmethode untersucht, die auch die Behandlung komplexer Geometrien beherrschen soll. Die Volume-Penalization-Method (VPM) [1] erfüllt dabei Gitterorthogonalität und -periodizität, indem sie die die Strömung umgebenden Wände in das Rechengebiet einbezieht, ihre Anwesenheit in den Gleichungen aber mit sogenannten Straftermen beaufschlagt, die die Strömung dort praktisch zum Erstarren kommen lassen und die so feste Wände simulieren.

Die bereits für zweidimensionale Turbulenz getestete VPM soll nun anhand eines dreidimensionalen, realistischen und in der Forschungsgemeinde etablierten Testfalls mit der FVM verglichen werden. Dabei sollen Genauigkeit, Geschwindigkeit sowie parallele Effizienz im Vordergrund der Untersuchung stehen. Als Testfall wurde die Strömung über einen zweidimensionalen periodischen Hügel ausgewählt, für die Daten aus einer Referenz-DNS zur Verfügung stehen [2]. Die Simulationen werden auf Gittern unterschiedlicher Größe durchgeführt, um genauere Aussagen über die praktische Einsatzfähigkeit der verwendeten Methoden treffen zu können.

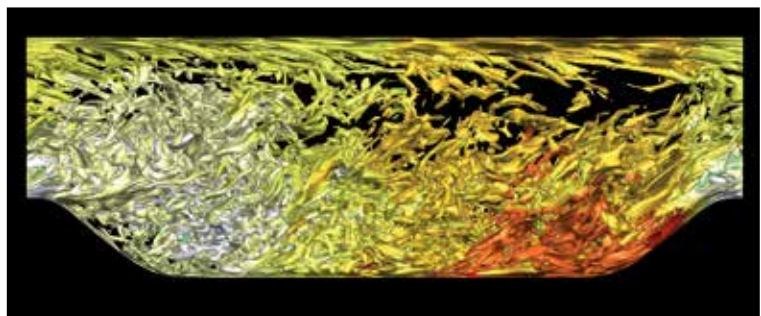


Abbildung 1:
Wirbelstrukturen der 2D-Hügelströmung, eingefärbt mit dem Druck des Fluids.

Referenzen:

1. B. Kadoch, W. J. T. Bos & K. Schneider. The influence of walls on Lagrangian statistics in two-dimensional turbulence. *Physics of Fluids* 23, 2011, 085111.
2. M. Breuer, N. Peller, C. Rapp, & M. Manhart. Flow over periodic hills - Numerical and experimental study in a wide range of Reynolds numbers. *Computers & Fluids* 38, 2009, pp. 433 – 457.

Numerical Modeling of Free Surface Flows on Orthogonal and Non-orthogonal Grids and Improvement of the Surface Tension

Dominik Staab, Dörte Sternel, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Meereswellen, Regentropfen oder Luftströme zum Kühlen elektronischer Bauteile, wo immer unterschiedliche Phasen aufeinander treffen, entstehen sogenannte Interfaces. Könnten Wissenschaftler diese Mehrphasenströmungen besser beschreiben, so könnten sie zum Beispiel die Kühlung von Bauteilen effizienter gestalten. An der TU Darmstadt werden daher gängige „Interface Tracking“ und „Interface Capturing“-Verfahren kombiniert, um die Vorteile beider Ansätze auszunutzen und die Mehrphasenströmungen genauer zu beschreiben.

Free Surface Flows exist in many fields of daily life. Free Surface Flows are fluid flows of more than one species (phases), like water/air or oil/gas. Examples for free surface flows are rivers with bubbles, water waves, cooling air flow of electronic components, and so on. The complexity of these flows is rooted in the capturing of the interface between the phases.

There are several possibilities in dealing numerically with interfaces, which can be divided in “interface tracking” and “interface capturing” techniques.

The volume of fluid method [3] (VOF) is a interface capturing one with a conservative character. It is possible to capture the interface via the volume-fraction function, see figure 1. This function describes the position of the phases. A challenge is the bidirectional coupling, which means the influence of the flow on a bubble but also the influence of the bubble on the flow field.

The pressure jump over the interface of a bubble is balanced with the surface tension. The surface tension term depends on the curvature. That means the curvature has to be computed with a high accuracy. There are some possibilities to gain accurate surface tension. One of these is the refinement of the grid near the interface. That means a higher computation time, unless an r-adaptation is used to move grid points to the interface. So the volume of fluid method has to work for non-orthogonal grids. Another possibility is the use of the level-set method (LS), which is not conservative in mass, but gains a higher accuracy of the surface tension [2]. The level-set method uses the smooth signed distance function (see figure 2) instead of the discontinuous volume-fraction function. It is possible to combine the methods to gain the advantages of both approaches: a mass conservative method with a high accuracy in surface tension [1]. A challenge is the higher computation time, what makes the HHLR indispensable. To compute realistic bubble swarms the Hessian High Performance Computer is necessary.

Figure 1:
Volume-fraction
function of a air
bubble ($\text{frac}=0$)
within water
($\text{frac}=1$)

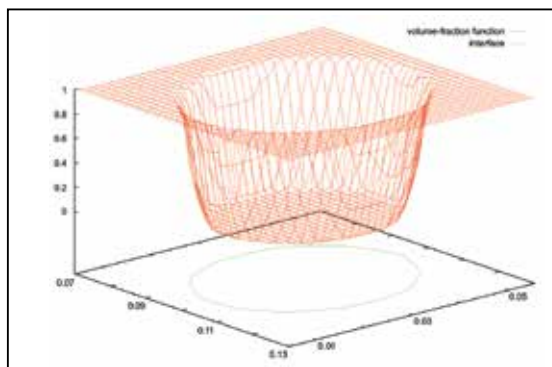


Figure 2:
Level-set function
of a air bubble
within water

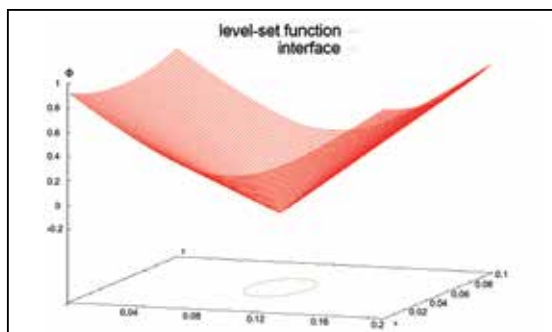
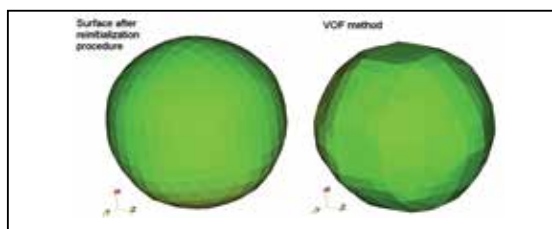


Figure 3:
Bubble shape with
VOF (right) and
improved shape
with LS (left)



References:

1. D. Staab. Improvement of the volume of fluid method by coupling with a re-distancing algorithm for the distance function. Master thesis. Chair of Energy and Power Plant Technology. Technische Universität Darmstadt. Darmstadt. 2010.
2. D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A fast level set method for propagating interfaces. *Journal of Computational Physics*, (118): 269–277, 1995.
3. T. Waclawczyk. Numerical modelling of free surface flows in ship hydrodynamics. Phd thesis, Robert Szwedowski Institute of Fluid Flow Machinery, Polish Academy of Sciences, Gdansk, 2007.

order to reduce the number of design parameters we need a surface description which provides a vast number of possible shapes and is furthermore mathematically differentiable with respect to the shape parameters. To match these requests we use Non Uniform Rational B-Spline (NURBS) surfaces well known from Computer Aided Design (CAD). The calculation of the flow parameters and the according sensitivities are characterized by a high computational effort. In order to achieve acceptable computation times it is inevitable to parallelize the given procedure. On the side of the flow calculation this work is already done and works fine on the HHLR. For the calculation of the sensitivities it is either possible to parallelize the sequential calculation of the sensitivities or to distribute the different equation systems for the varying

parameters to several processors. Furthermore research has been done in the field of hybrid parallelization in order to accelerate the already implemented, communication based MPI approach with an additional parallelization on thread- and loop level using Open Multi-Processing (OpenMP). First promising results have already been obtained encouraging a deeper analysis of this field of interest.

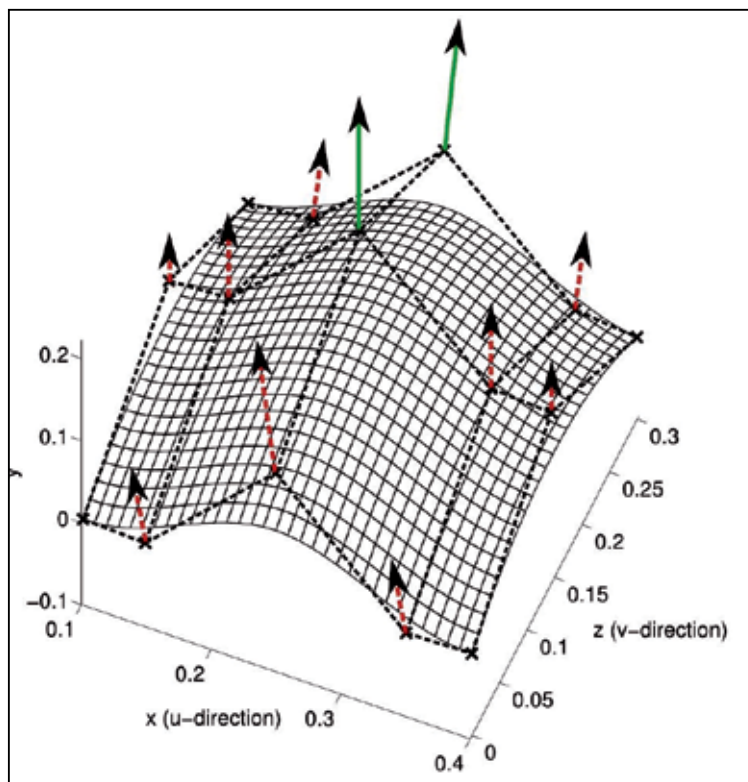


Figure 2: NURBS Surface

Effiziente Sensitivitätsanalyse und Strömungsoptimierung

Dipl.-Math. Julian Michaelis, Prof. Dr. rer. nat. Michael Schäfer
Fachgebiet für numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

Im Fahr- und Flugzeugbau ist der Luftwiderstand für den Spritverbrauch entscheidend. Gut wären daher Geometrien, die windschnittig sind und so den Verbrauch minimieren. Die Entwicklung von Formen mit geringem Luftwiderstand bereitet viel Arbeit, da die Auswirkungen der Designvariationen kaum absehbar sind. Die Forscher müssen prüfen, wie sich das Simulationsergebnis ändert, wenn sie nur ganz leicht an einer Stellgröße schrauben. Wissenschaftler der TU Darmstadt entwickeln ein Programm, das diese Analyse automatisch durchführt. Das spart Zeit.

Im modernen Ingenieurwesen und in der industriellen Entwicklung ist die numerische Simulation von komplexen technischen Strömungen ein erprobtes Feld. Die Simulation ist ein wichtiger Bestandteil als Ergänzung zum physikalischen Experiment, da diese meist kostengünstiger und sicherer ist. Sie kann außerdem Daten liefern, die nur schwierig oder gar nicht messbar sind.

Die Verbesserung und Optimierung von anspruchsvollen Strömungen ist jedoch immer noch eine herausfordernde Aufgabe. Denn trotz ständig steigender Rechenleistungen und immer leistungsfähigeren numerischen Algorithmen, ist es sehr schwierig die Auswirkungen unzähliger Kontrollparameter und Designvariablen im gesamten Strömungsgebiet abzuschätzen. Solche Stellgrößen von außen können die Einstromgeschwindigkeit, die Temperatur bestimmter Bauteile, oder auch die Verformung der gesamten Geometrie sein. Diese

Designparameter beeinflussen direkt oder indirekt die Zustandsgrößen der Strömung (Druck, Strömungsgeschwindigkeiten, turbulente kinetische Energie, etc.). Gerade für die Optimierung eines Bauteils ist es aber unabdingbar, dass die Auswirkungen einzelner Parameter global exakt bekannt sind.

Eine effiziente Möglichkeit einer solchen Sensitivitätsanalyse der Steuervariablen ist die Lösung der sogenannten continuous sensitivity equations. Dieses Gleichungssystem partieller Differentialgleichungen erhält man, wenn man die der Strömung zugrunde liegenden Navier-Stokes-Gleichungen nach den einzelnen Designparametern differenziert. Dabei entsteht für jeden Parameter ein eigenes unabhängiges Gleichungssystem, das es zu lösen gilt. Bei sehr vielen Designvariablen benötigt man daher effiziente und parallelisierbare Methoden um den Rechenaufwand beherrschen zu können.

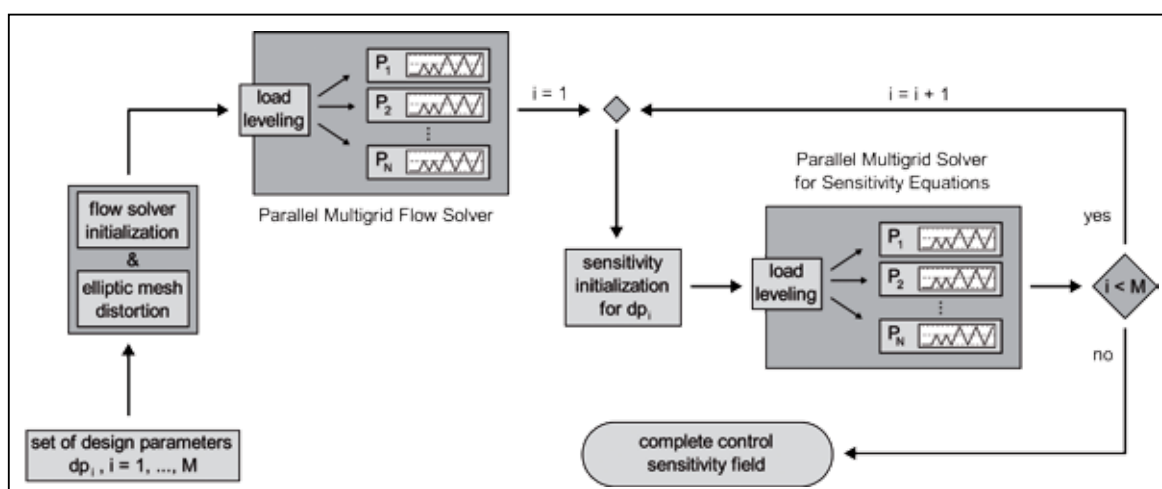


Abbildung 1:
Schematischer Ablauf zur Bestimmung der Sensitivitäten

Eine Implementierung zur Bestimmung der Strömungssensitivitäten ist bereits in den am Institut benutzten Strömungslöser FASTEST eingebaut (siehe Abbildung 1). Dabei werden zunächst die in jedem Fall benötigten Strömungsgrößen einer bestehenden Konfiguration bestimmt, und im Anschluss daran werden die einzelnen Sensitivitätsgleichungen gelöst und so die Strömungssensitivitäten bestimmt.

Bei der Lösung dieser Gleichungssysteme wird das Strömungsgebiet in mehrere kleinere Gebiete aufgeteilt. Diese verkleinerten Probleme werden auf verschiedenen Prozessoren parallel gelöst und die Daten zwischen den benachbarten Gebieten werden von Zeit zu Zeit ausgetauscht. Diese Parallelisierungsstrategie erzeugt einen guten numerischen Speed-Up und garantiert eine gute parallele Effizienz bei der Benutzung mehrerer Prozessoren. [1] Dies wurde insbesondere durch Rechnungen auf dem Hessischen Hochleistungsrechner untersucht und nachgewiesen.

Zusätzlich wird auf jedem dieser parallelisierten Teilgebiete ein geometrisches Mehrgitterverfahren (full approximation scheme) angewendet. Dabei werden mehrere Gitterebenen verwendet um die Fehlerkorrekturgleichung des feinsten numerischen Gitters auf größeren Ebenen zu lösen. Dadurch werden auch niederfrequente Fehler besser gedämpft. Man kann für die vorhandene Implementierung zeigen, dass der numerische Aufwand nur linear mit der Anzahl der Gitterzellen ansteigt. [2]

Für zukünftige Forschungsvorhaben liegt ein großes Augenmerk auf dem Code-Profil und der weiterführenden parallelen Performanceanalyse auf dem HHLR. Außerdem sollen praktische Anwendungen der Sensitivitätsanalyse mit Designparametern im Bereich moderater Anzahl gerechnet werden. Aber auch neue effizienzsteigernde Ideen, wie z.B. die Nutzung einer adaptiven Gitterverfeinerung, können verfolgt werden.

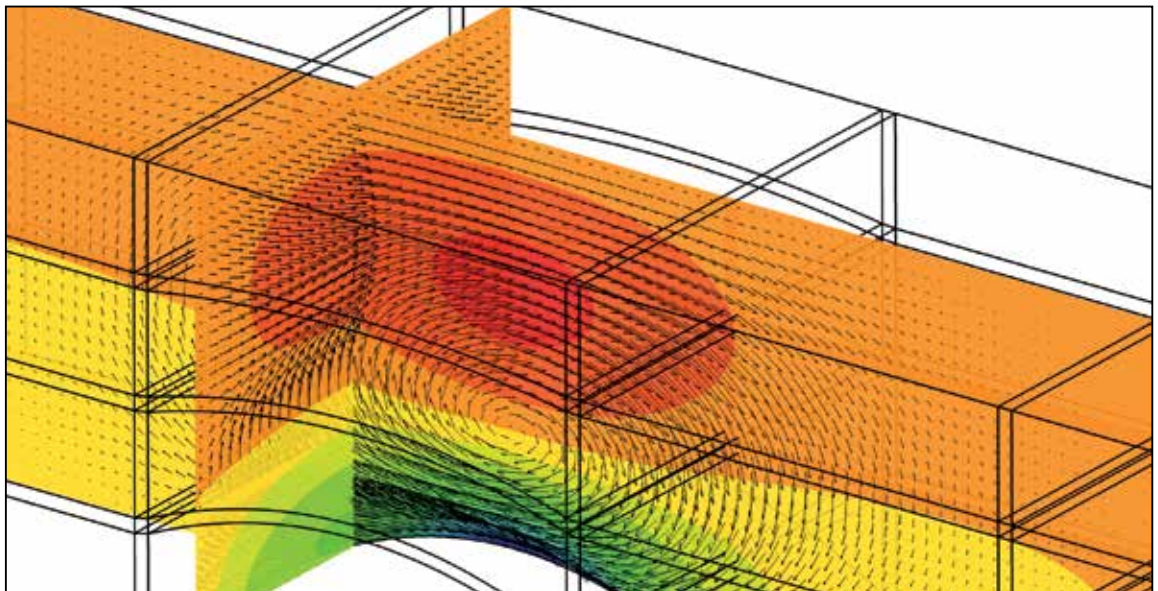


Abbildung 2:
Darstellung der Sensitivität eines Parameters, der die Strömungsgeometrie steuert

Referenzen:

1. Julian Michaelis, Johannes Siegmann und Michael Schäfer: Parallel efficiency of multigrid methods for solving flow sensitivity equations. In Proceedings of CFD and OPTIMIZATION 2011, Antalya, Türkei, 2011.
2. J. Michaelis, J. Siegmann G. Becker und M. Schäfer: Efficiency of geometric multigrid methods for solving the sensitivity equations within gradient based flow optimization problems. In Proceedings of the Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD 2010, Lisbon, Portugal, 2010.

Simulation and Optimization of Thermal Fluid-Structure Interaction in Blade-Disc Configurations of Aircraft Engines

Hannes Lück, Michael Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt

In Flugzeugturbinen muss die thermische Belastung von Scheiben und Schaufeln möglichst genau ermittelt werden, weil die sich dadurch ergebende Lebensdauer maßgeblich die Betriebskosten eines Triebwerks beeinflusst. Wissenschaftler der TU Darmstadt versuchen daher, die nötigen Kopplungseffekte zwischen Turbinenbauteilen und den umgebenen heißen und kalten Gasen durch einen Fluid-Struktur-Interaktionsansatz zu ermitteln.

Several engineering problems cannot be solved accurately by defining the boundary conditions at a fluid-solid interface only one time prior to the simulation. Transient boundary conditions that are recorded over time in one domain and then applied in the other domain can also lead to wrong results. For the so called Fluid-Structure Interaction problems (short FSI), a regular exchange of variables at the interface is necessary to capture the occurring interaction between a solid structure and its surrounding fluid. With regard to the increasing computing power in recent years, the coupled

approach, inhibiting both the fluid and the solid solver, is the adequate choice in comparison to the separated counterpart.

In the turbine stage of aircraft engines, most components are purged by cooling air to resist the hot core flow of around 1600 K that exit the combustors. The supplied cooling air of around 900 K is bled from the core flow in the compressor stages. Hence, this part does not contribute directly to the engine thrust. Likewise, up to 20 % of the core flow is extracted to serve such functions in

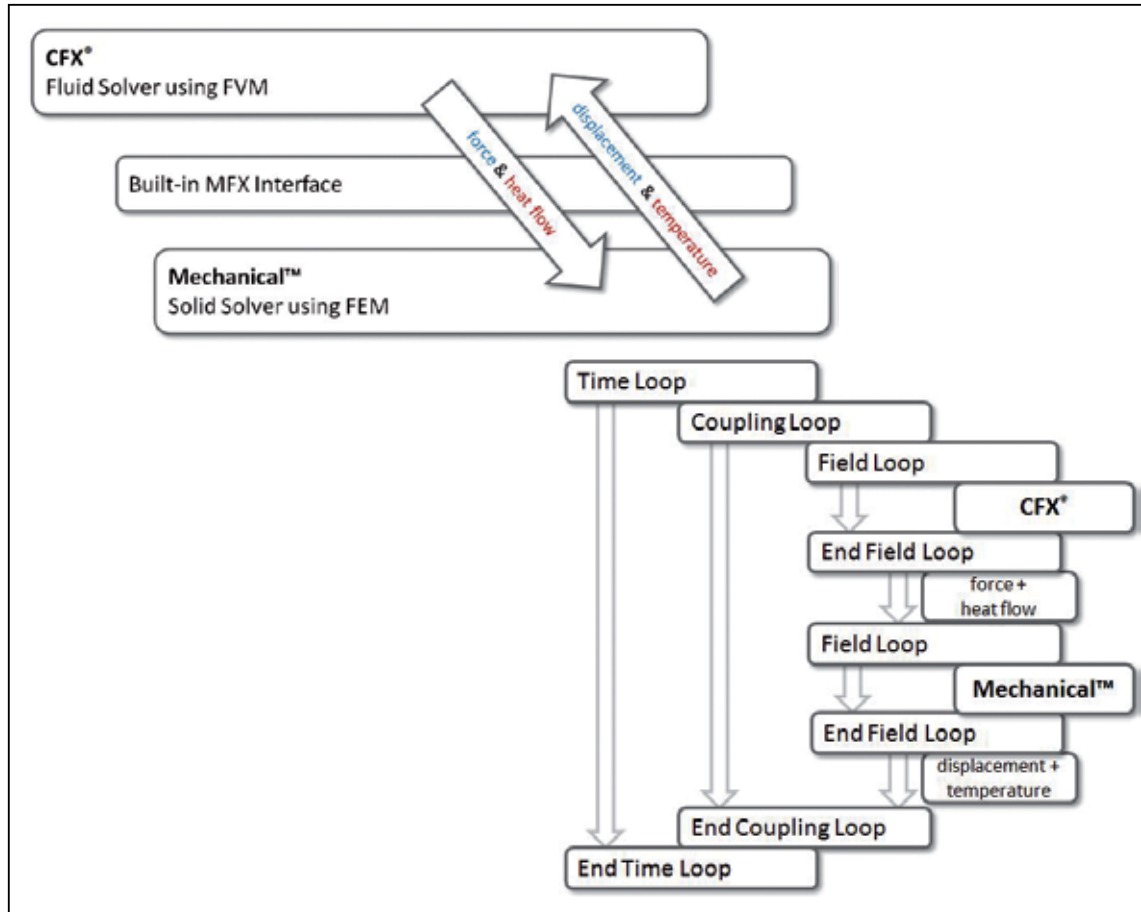


Figure 1:
FSI setup and
iterative coupling in
Ansys

secondary air systems in order to enable a safe operation. Therefore, it is of great interest to minimize such secondary air flows because of their disadvantageous impact on the turbine efficiency. Correspondingly, it is necessary to prove their cooling effect by most accurately determining the correct temperature distribution in the turbine discs. With regard to the experimental results, it has to be proven that the more sophisticated FSI approach and not conventional numerical methods lead to most accurate results.

Especially in transient flight operations like landing or starting maneuvers, certain FSI effects like thermal stresses and deformations set in that cannot be resolved by sequentially applying FEM or CFD codes, i.e. applying predefined boundary conditions. Particularly, the accelerating driving speed of the rotating discs as well as the non-linear temperatures changes in the flow regime can cause FSI effects. In such cases, the FSI approach is superior in predicting the local temperature distribution, since the dynamic leakage of gas seals is covered. This is important, because the leakage characteristics have an influence on the cooling progress in the disc cavities.

Additionally, the FSI approach considers radial deformations both due to centrifugal plus thermal expansion with the influence of the surrounding transient flow regime, which leads to a more accurate representation of the blade tip clearance to the outer casing.

In the employed FSI approach, the compressible Navier-Stokes equations are solved by the Finite-Volume based fluid solver CFX, while Mechanical is used as the Finite-Element based solver for the solid domain. In the ANSYS software environment, both solvers are coupled implicitly by a built-in MFX interface. For optimization purposes, NPSOL from the Stanford University is chosen as the software package for solving the nonlinear constrained optimization problem, which utilizes the sequential quadratic programming algorithm. All aspects of this project demand a highly efficient parallel hardware to run many optimization cycles of a fully coupled FSI approach in a reasonable time. To sum up, a fully coupled FSI approach needs to be adopted on a blade disc configuration from a realistic aircraft turbine to identify the FSI effects. In addition to that, the FSI routine is implemented in an optimization loop, which gives a tool to alternate parameters in the geometry and boundary conditions in a way to minimize phenomena that cause the FSI effects.

CO Prediction in LES of Turbulent Flames with Additional Modeling of the Chemical Source Term

Anja Ketelheun, Johannes Janicka

Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, Technische Universität Darmstadt

Gasturbinen sollen weniger Abgase ausstoßen. Damit dies gelingt, müssen Simulationen entwickelt werden, die alle chemischen Reaktionen einer Verbrennung akkurat beschreiben. Wissenschaftler der Technischen Universität Darmstadt arbeiten erfolgreich daran: Sie haben die Large-Eddy-Simulation so erweitert, dass sie den Ausstoß von Stickoxiden (NO_x) und Kohlenmonoxid (CO) um ein vielfaches besser vorhersagt als bisher.

In today's gas turbine development the reduction of emissions is a key issue. Therefore, accurate numerical predictions are required. Large Eddy Simulation (LES) combined with tabulated chemistry models like Flamelet Generated Manifolds (FGM) has become more popular within the last years due to its growing success in the prediction of unsteady flow and flame behavior. FGM is well suited to represent the fast chemical reactions of major species. However, it is not sufficient to predict the slow evolution of some minor species like nitrogen oxides (NO_x) or carbon monoxide (CO). Therefore, additional transport equations for these species were included in the LES. The chemical source terms of these equations were split into production and consumption of the respective species and tabulated based on mixture fraction and a reaction progress variable. Furthermore, the local flow and flame conditions like the local concentration of the species were taken into account. Previous work by the authors showed very good results for the prediction of NO [1]. In the current project, the model was extended to the prediction of CO. In addition, an investigation of the necessity of an additional time scale describing the slower burnout behavior of CO behind the flame front was carried out, based on the work by Wegner et al. [2]. These models were applied to a turbulent non-premixed methane/hydrogen flame, where the CO concentration is typically highly overpredicted when using the standard FGM model, compared to the experiments.

It turned out that although this time scale separation by Wegner et al. is important for models using infinitely thin flame fronts, the FGM method, together with a sufficient resolution of the computational grid, already resolves large parts of the flame structure such that the additional modeling does not yield significant advantages. Figure 1 shows an instantaneous snapshot of the CO distribution

throughout the flame. The left plot shows the standard model, whereas the right plot shows the significantly lower amount of CO predicted when using the new approach with the solution of a transport equation. Figure 2 shows radial profiles of the time averaged CO mass fraction at different heights above the burner exit. The dots show the experimental results, the dashed line the standard model, the solid black and blue lines the new model with and without post flame zone modeling, respectively. Again, one can well observe the lower amount of CO when applying the new modeling.

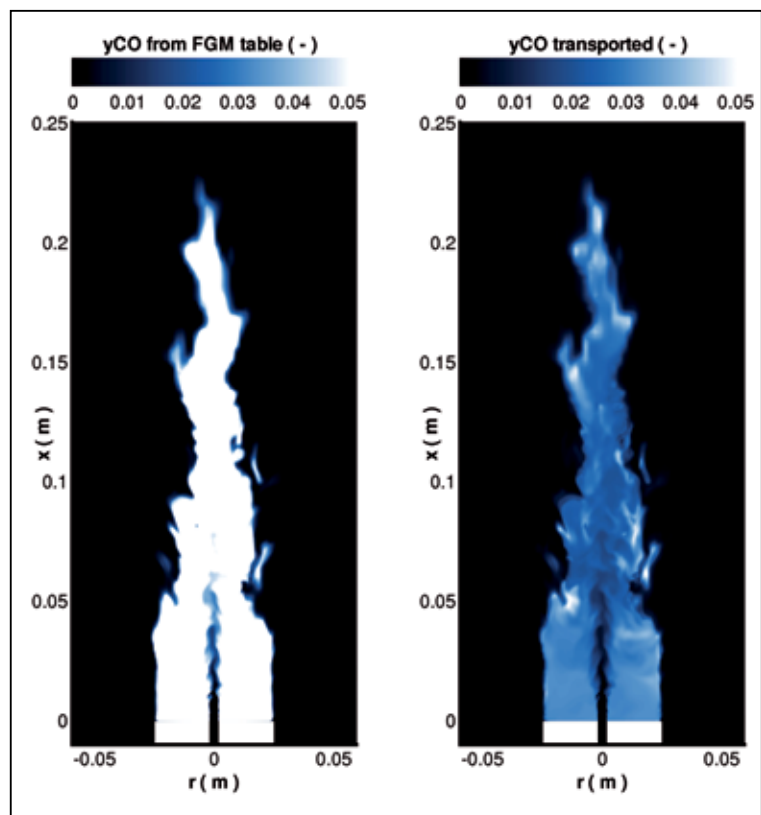


Figure 1: Instantaneous snapshot of the CO mass fraction in a turbulent non-premixed flame. Left: Standard FGM table modeling, right: solution of a transport equation.

The inclusion of the transport equation for CO together with its transported concentration yields a large improvement, compared to the typical overprediction of the CO concentration when using premixed flamelets. These results are an encouraging step towards the development of regime-independent combustion models and the inclusion of minor species and chemical kinetics in the context of LES and tabulated chemistry.

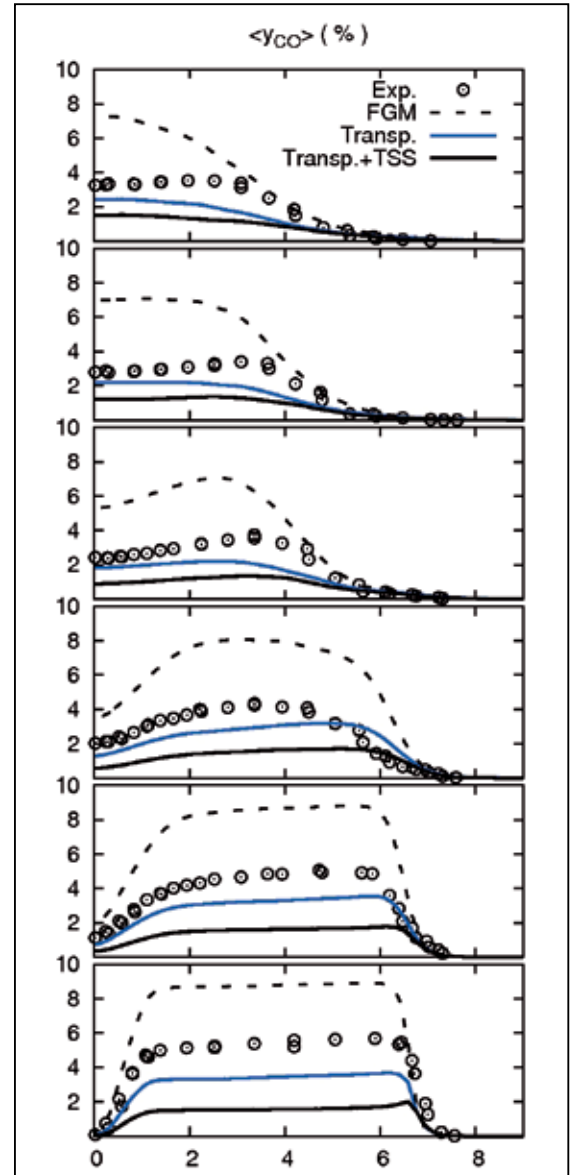


Figure 2:
Time averaged radial profiles of the CO mass fraction at different positions throughout the flame. Symbols: experiments, dashed line: Standard model, black line: radial Reynolds stress components. (red-line: Incompressible LES, Blue-line: Compressible LES and symbols indicate Experiment)

References:

1. Ketelheun et al., Proc. Comb. Inst., Vol. 33(2) pp. 2975-2982, 2011.
2. Wegner et al., J. Eng. Gas Turbines Power, Vol. 133(7), 071502, 2011.

Large Eddy Simulation of Combustion Systems

Kai Aschmoneit, Johannes Janicka
Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, Technische Universität Darmstadt

Um in der Entwicklung von Produkten Zeit und Geld zu sparen, setzt die Industrie zunehmend Computer-Simulationen anstelle von Experimenten ein. Je akkurater die Simulation ist, desto verlässlicher sind die Ergebnisse. In den vergangenen Jahren hat sich die Large Eddy Simulation in der Modellierung der isothermen turbulenten Strömungen bewährt. Wissenschaftler der TU Darmstadt feilen daran, die Ergebnisse der Large Eddy Simulation noch genauer zu machen.

To reduce development periods and costs in the evolution process of an industrial product the Computational Fluid Dynamic (CFD) technique is often used as an auxiliary tool. In the last few years the Large Eddy Simulation (LES) has proven its ability to predict isothermal turbulent flows. Thereby, the flow field is spatially filtered. Compared to state of the art Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) calculations the large, energy containing eddies are resolved by the LES. Only the small, more universal structures are modeled which leads to a significantly improved prediction. Unfortunately, the computational resources needed for LES calculations are very high. Therefore, LES calculations need high performance computers like the HHLR.

Within the Graduiertenkolleg 1344 an unstructured, implicit CFD solver PRECISE-UNS is developed further. In the present work Large Eddy Simulations of complex combustion systems are taken out, showing the prospects of this method.

Primarily, the TECFLAM [3,4] swirl burner configuration is calculated isothermal. Due to the swirl the flow expands at the outlet of the burner mouth and a recirculation zone forms. Hot exhaust gases are convected back to the fresh unburnt mixture which stabilizes the combustion process. The isothermal LES is able to predict this complex flow field in very good agreement to the experimental data [1], figure 1.

Secondary, a well measured piloted jet diffusion flame [2] is simulated with the Flamelet-Generated Manifold (FGM) approach [5]. The FGM method assumes that a multidimensional, turbulent flame consists of one dimensional laminar flamelets. The FGM model combines a detailed reaction mechanism with the reduction of the combustion process to three dimensions. With this very efficient combustion model excellent results could be achieved [1]. Since in real combustion systems both premixed and diffusion flames are present,

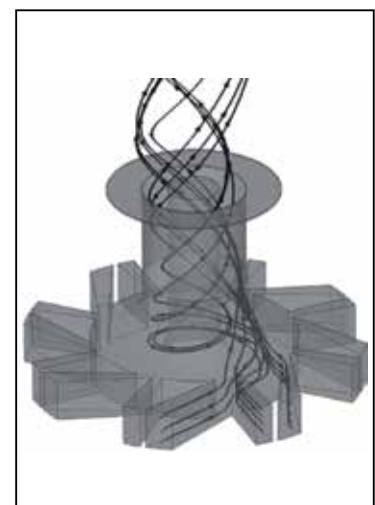
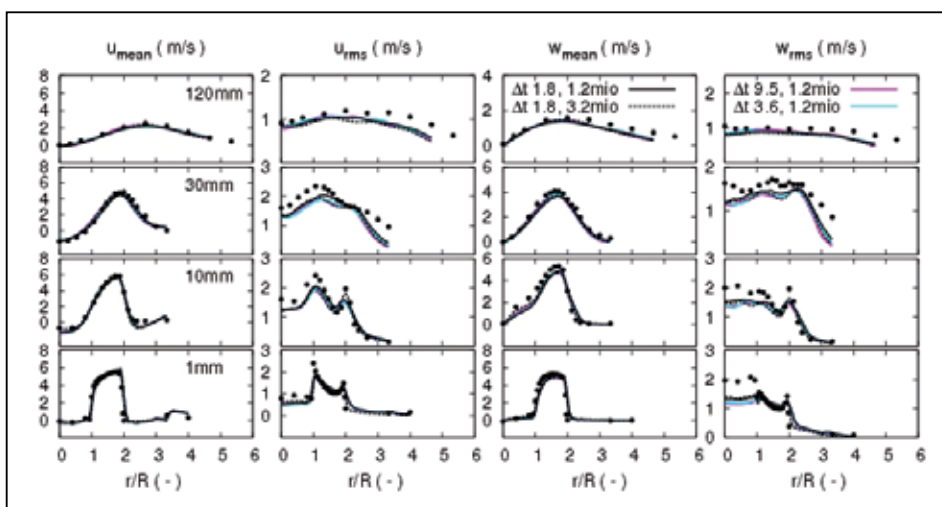


Figure 1:
Radial profiles of the mean axial and tangential velocity and their fluctuations. Comparison of experimental data (symbols) to simulations with varying time step size as well as grid resolution.

the Artificially Thickened Flame (ATF) model will be implemented in the next future to account for premixed combustion.

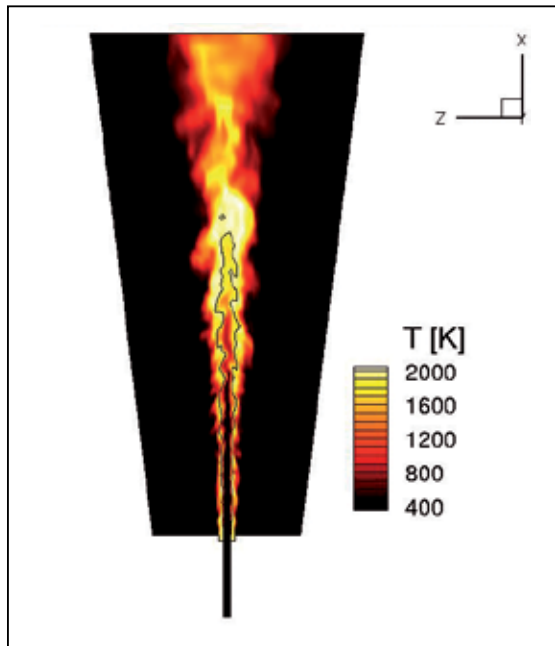


Figure 2:
Instantaneous temperature plot of the Flame D configuration.

References:

1. K. Aschmoneit, G. Kuenne, and J. Janicka, Sensitivity Studies of Large Eddy Simulations of Combustion Systems with an Unstructured Implicit Solver, *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 11, no. 1, 595-596, 2011.
2. R. Barlow, and J. Frank, Piloted CH₄/Air Flames C,D,E, and F - Release 2.1, <http://www.ca.sandia.gov/TNF>, 2007.
3. C. Schneider, Über die Charakterisierung von Turbulenzstrukturen in verdrehten Strömungen, *Fortschritt-Berichte VDI*, Reihe 7 Nr. 456, VDI Verlag, Duesseldorf, 2004.
4. C. Schneider, A. Dreizler, and J. Janicka, Fluid dynamical analysis of atmospheric reacting and isothermal swirling flows, *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 74, no. 1, 103-127, 2005.
5. J.A. van Oijen, *Flamelet-Generated Manifolds: Development and Application to Premixed Laminar Flames*, Eindhoven University Press, Eindhoven, 2002.

Numerical investigation of lean-premixed turbulent flame using combustion LES including thickened flame model

A.Hosseinzadeh
 Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, Technische Universität Darmstadt

Magere vorgemischte Verbrennung setzt weniger Stickoxid (NO_x) frei als nicht-vorgemischte Verbrennung. Sie ist daher für Gasturbinen und andere industrielle Anwendungen von Interesse, bei denen der Ausstoß an Stickoxiden gesenkt werden soll. Allerdings treten bei magerer vorgemischter Verbrennung Instabilitäten auf, die Effizienz und Lebensdauer der Turbine senken. Forscher der TU Darmstadt untersuchen diese Phänomene in Computer-Simulationen. Ihre Ergebnisse tragen dazu bei, die Lebensdauer und Effizienz der Gasturbinen mit reduziertem Ausstoß an Stickoxiden zu erhöhen.

Lean premixed combustion is recently a theme of interest in gas turbines and other industrial applications in an effort towards NO_x emission reduction, which is a result of lower flame temperature comparing to non-premixed flames. However, instabilities occurring in a combustion chamber under lean premixed combustion, may lead to the operation efficiency and life cycle degradation. Thus, Large Eddy Simulation (LES) as an adequate tool can be used to investigate the addressed unsteady phenomena.

In the present work a lean premixed turbulent Bunsen Type flame [1] is numerically investigated using incompressible LES including the dynamic Smagorinsky model for the flow field, the eddy diffusivity model for the scalar flux and thickened flame model coupled with tabulated chemistry for the combustion [2]. The burner is equipped with a square matrix turbulence generator consisting of 32 boreholes, which induce a high turbulent intensity in the reaction zone. The experimental setup parameters are gathered in the following table.

Table 1:
 The parameters of the experiment: Re_D : Reynolds number, Ma_u : Mach number, T_u and T_{in} : temperature of respectively unburnt mixture and air. P indicates the thermal power.

	Re_D	Ma_u	T_u	T_{in}	P
150 mm	41.000	0.046	673 K	300 K	260 kW

The simulated configuration consists of 6.3 million control volumes. The overall simulation time including cold, reacting and statistics collection was approximately 6 weeks using 32 processors. The well known in house code FASTEST 3D, has been used for this investigation.

The Figure 1 shows the time averaged temperature [K] contour from the incompressible LES.

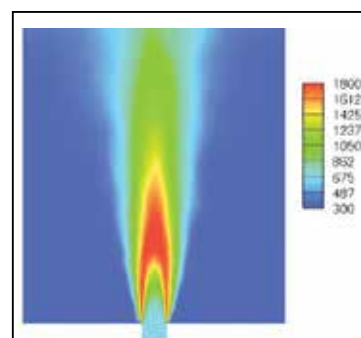


Figure 1:
 Averaged temperature [K] contour.

The Figure 2 shows the time averaged flow and Temperature characteristics for the lean-premixed turbulent Bunsen type flame at several axial distances from the nozzle, comparing experimental data [1] with the results of compressible LES and incompressible LES.

The results of flow characteristics, Temperature and combustion quantities of the investigated configuration show a very good agreement to the experimental data.

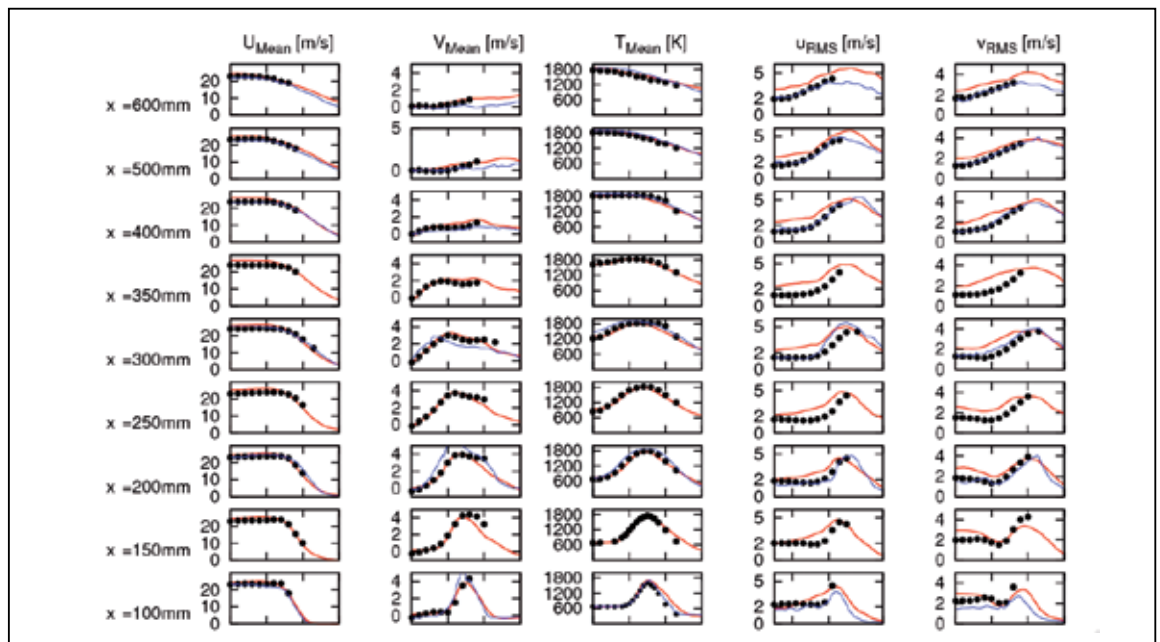


Figure 2:
Time averaged flow and Temperature characteristics for the lean-premixed Turbulent Bunsen type flame at several axial distances from the nozzle. U_Mean and V_Mean are the mean axial and radial velocity. T_Mean is the temperature and U_rms and V_rms are axial and radial Reynolds stress components. (red-line: Incompressible LES, Blue-line Compressible LES and symbols indicate Experiment)

References:

1. Zajadatz, M., Hettel, M., Leuckel, W. Burning velocity of high-turbulence natural gas flames for gas turbine application. In: International Gas Research conference. pp. 793-803.
2. Kuenne, G., Ketelheun, A., Janicka, J.: LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry. In: Combustion and Flame 158. pp. 1750-1767.

LES of premixed methane flame impinging on the non-adiabatic wall

Pradeep Pantangi

Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, Technische Universität Darmstadt

Wände beeinflussen die Verbrennung in Gasturbinen und geschlossenen Brennkammern: So kühlen sie die Flamme ab, verändern den Ausstoß von Schadstoffen oder die Energieleistung. Für das Design moderner Brennkammern und deren Kühlsystemen ist es daher wichtig, die Wechselwirkungen zwischen Wänden und Flammen zu kennen. Wissenschaftler der TU Darmstadt arbeiten daran, die Verbrennung nahe der Wände besser zu beschreiben. Dazu nutzen sie die numerische Strömungsdynamik (computational fluid dynamics, CFD).

In many combustion systems combustion is strongly influenced by the presence of walls which may lead to important modifications of the flame and the wall dynamics: the flame strength is reduced near cold wall surfaces, leading possibly to (partial or total) quenching, while the gas-solid heat flux takes peak values at flame contact. The evaluation of the wall heat fluxes is a key issue in design process of cooling devices and in determining the lifetime of burners. Excess emissions of unburned hydrocarbons in combustion engines have long been attributed to the presence of cool walls. Indeed, the presence of the wall may cause an increase in the pollutant emissions and a degradation of the energy performances. As the questions of pollutant emissions, turbulent fuel-air temperature mixing, flame extinction and wall surface heat transfer are relevant processes to be understood, the flame-wall interaction (FWI) appears as one of the essential issues in modeling not only the turbulent combustion in engines but also wall heat transfer during combustion in combustion systems.

Both modeling combustion and carrying out measurements near wall are challenging. The boundary layer thickness at the wall could be in order of microns. Very few experimental studies are available for numerical validation while LES of premixed combustion remains difficult in this special situation due to the thickness of the premixed flame of about 0.1–1 mm and generally smaller than the LES mesh size [1, 2]. The reduction and tabulation of chemical species behavior prior to LES remains one of the available options that are being investigated to downsize combustion chemistry in order to make it compatible with flow solvers. Efforts to extend the applicability of LES technique to premixed turbulent flame description are pursued here.

To account for near wall kinetic effects and flame stabilization in this work, the flamelet generated manifolds (FGM) method is considered [3]. It is especially extended for non-adiabatic conditions and designed for a suitable coupling to LES. This is achieved by incorporating into the CFD additional filtered transport equations for the reaction progress variable and enthalpy besides the mixture fraction equation and the classical flow governing equations for LES.

The resulting complete model is applied to simulate a laboratory-scale turbulent impinging jet for which comprehensive experimental data are also carrying out in parallel. Thereby a wall impinging flame is generated when a premixed flame is stabilized on a water cooled wall. In a laminar flow environment, the reaction layer propagates against the incoming fluid and a premixed flame is built. In the case of a turbulent flow, the flame is wrinkled by velocity fluctuations and possible vortices formed at near wall due to impinging jet on wall. Flame stabilized by the burnt products passing through fresh gases due to the impinging situation causes converting all axial component velocities into radial components. In the present work focus is put on the development of FGM based LES model for prediction of the overall flow field quantities and species concentrations near the wall.

To analyze and to validate the LES methodology a premixed methane flame impinging on a water cooled wall is simulated. Thereby a lean premixed methane fuel jet is injected through a pipe of diameter 30 mm and impinged on a spherical disk, which is situated at a distance of 30mm from the exit of the burner. The characteristic Reynolds number is 5000. Nitrogen is used as co-flow in order to avoid the interaction between surrounding air and combustion. This case is having 4 million control volumes and simulated using 64 processors on Hessische Hochleistungsrechner

(HHLR) for six weeks including cold, combustion simulations and statics collection to compare against the experimental measurements.

The time averaged temperature contours on a plane passing through the centre of the nozzle are shown in Fig.1. The black line contours in Fig. 1 represents the instantaneous reaction source term location, which represents the flame position. Flame is wrinkled and is reaching very close to the water cooled wall. The temperature drop between the wall and the flame and its influence on the flame position are captured by the model implemented.

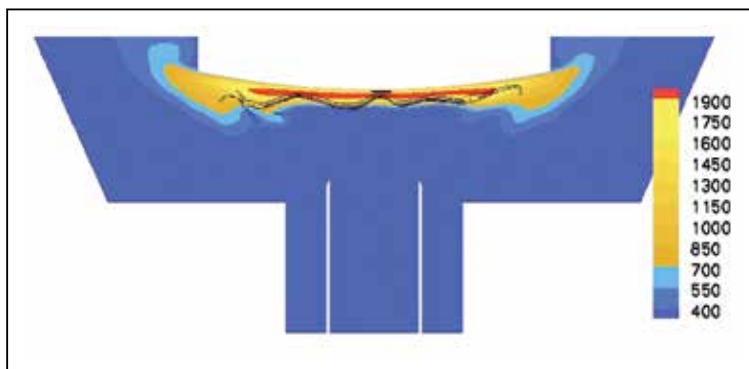


Figure 1:
Averaged temperature [K] contours superimposed by instantaneous reaction source term line contours

Mass fraction of intermediate species CO on two axial positions at two radial positions of $r=0$ and $r=20$ from simulation are compared against the experimental measured data in Figure 2. Y-axis here is the (negative) distance in mm from the impinging wall towards the nozzle exit. The drop of CO mass fraction in front of the flame is captured well at both radial positions. The flame starting position is differed on the centre of axis by 1 mm, though it is able to predict at radial position $r=20$ mm. Overall qualitative results and quantitative results from the model developed and implemented in FASTEST-3D for simulating non-adiabatic flame are encouraging.

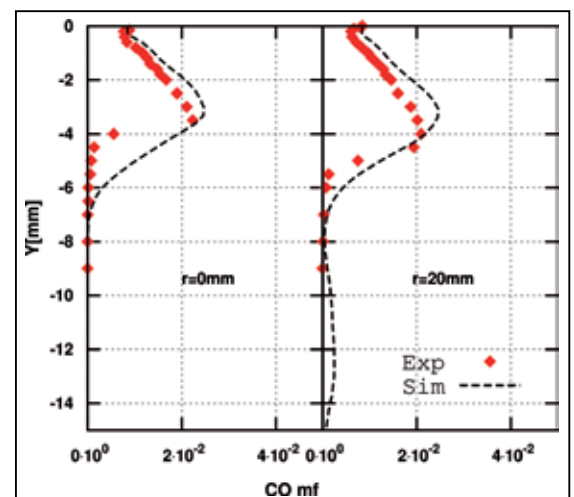


Figure 2:
Comparison of CO species mass fraction from simulation against the measured from at two radial positions

References:

1. Janicka J., and Sadiki. A., 2004, Proc. Combust. Institute, 30: 537-547.
2. Pitsch, H. (2006), Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion, Ann. Rev. Fluid Mech., (38) (2006), pp. 453–482.
3. van Oijen, J.A., de Goey, L.P.H., A numerical study of confined triple flames using a flamelet-generated manifold, Combust. Theory Modelling, 8(1), 141-163, (2004).

Turbulent shear flows

Hannes Brauckmann, Tobias Kreilos, Matthew Salewski, Stefan Zammert und Bruno Eckhardt
Fachbereich Physik, Philipps-Universität Marburg

Our projects concern the transition to turbulence in shear flows without linear instability, such as pipe flow or plane Couette flow, and the properties of turbulent flows between concentric cylinders.

The transition to turbulence in pipe flow has provided scientists with many puzzles, most of them already documented in Osborne Reynolds' famous contributions in 1883. The laminar profile remains stable against small perturbations for all flow rates, but observations show a transition when the flow rate, measured in the dimensionless Reynolds number Re based on diameter and fluid viscosity, exceeds values of about 2000. The identification of coherent structures, the unexpected observation of the transience of the turbulence and the connection to phase transitions in directed percolation networks have gone a long way to resolving the most pressing questions (see Eckhardt 2011 for a summary).

In recent years the spatio-temporal aspects have moved into the focus of attention. In these spatially extended systems it is obvious that it is not necessary to perturb the system everywhere to trigger turbulence. A localized perturbation of sufficient strength should be enough to extract energy from the shear, to grow to full turbulent strength, and to then spread into the neighboring laminar flow. Accordingly, there should be a state intermediate between the decaying one and the growing one which remains marginal: it does not grow to become turbulent, but it also does not return to the laminar solution. Such a state was identified for plane Couette flow (Schneider et al, 2010, and Fig 1).

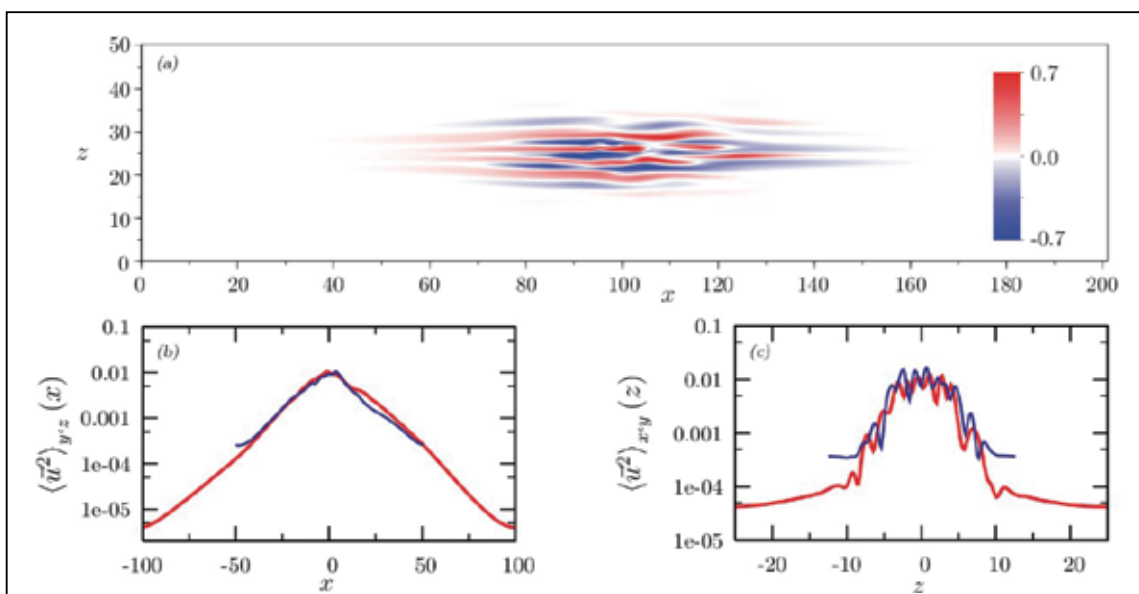


Figure 1:
Localized solution for plane Couette flow. The color code shows the normal velocity in midplane. Frames (b) and (c) show that the localization in the downstream direction is exponential whereas the one in the spanwise direction is even stronger.

A spatial variation of a different kind was discovered in the flow between concentric cylinders (Taylor Couette flow, see Fig 2). When the outer cylinder rotates opposite to the inner cylinder then the region near the inner cylinder is centrifugally unstable, but the one near the outer cylinder is centrifugally stable. Nevertheless, the drag has to be transported uniformly across the gap (Eckhardt et al, 2007), and since laminar flow comes with less

drag than the turbulent one, the flow near the outer cylinder cannot stay stable. The time traces from the calculations reported in Fig 2 reveal that the drag at the outer cylinder shows near periodic switches between bursts of high drag and phases of low drag. The cross sections of the boundaries in Fig 3 confirm that this is connected with different flows near the outer cylinder. There are no noticeable changes near the inner cylinder.

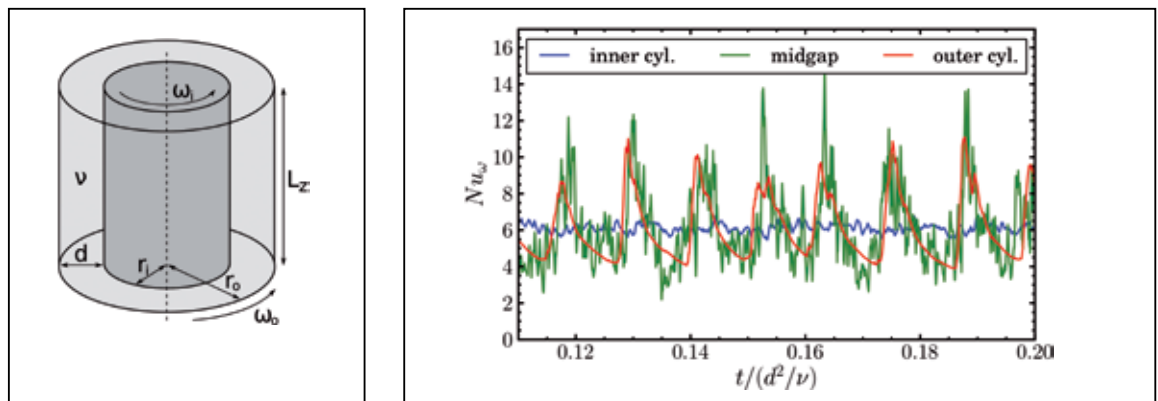


Figure 2:

Taylor Couette flow (left) and turbulent drag for shear Reynolds number 10.000, gap width $\eta=0.71$ and rotation ratio $a=2$. Turbulent drag is measured at the inner cylinder (blue), in the middle of the cell (green) and at the outer cylinder (red). While the drag at the inner cylinder shows only small fluctuations around the mean, the one at the outer cylinder has quasi-regular oscillations with an amplitude almost equal to the mean.

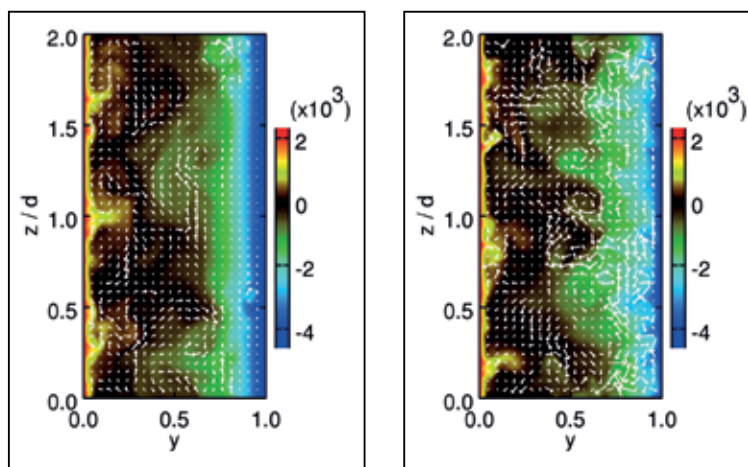


Figure 3:

Cross section of the flow fields during a minimum (left) and a maximum (right) of the drag at the outer cylinder. The vectors are the velocity fields in the r - z -plane, the color coding indicates the azimuthal velocity component perpendicular to the plane. One notes that during the minimum the flow near the outer cylinder is almost laminar, whereas it becomes turbulent near the maximum.

References:

1. B. Eckhardt, D. Lohse and S. Grossmann, Torque scaling in turbulent Taylor-Couette flow between independently rotating cylinders, *J. Fluid Mech.* 571, 221–250 (2007).
2. T.M. Schneider, D. Marinc und B. Eckhardt, Localised edge states nucleate turbulence in extended plane Couette cells, *Journal of Fluid Mechanics* 646, 441–451 (2010).
3. B. Eckhardt, A transition point for turbulence, *Science* 333, 165–166 (2011).

Turbulent Poiseuille Flow with Wall Transpiration: Analytical Study and Direct Numerical Simulation

V.S. Avsarkisov, M. Oberlack, G. Khujadze

Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, Technische Universität Darmstadt

An der TU Darmstadt untersuchen Forscher turbulente Poiseuille-Strömungen mit Verdunstung entlang der Wand. Sie haben ein neues Verfahren entwickelt, diese Strömungen numerisch darzustellen. Ihre Methode liefert ein besseres Ergebnis als die herkömmliche Finite-Differenzen-Methode. Poiseuille-Strömungen treten auf, wenn kleine Mengen an Flüssigkeiten durch dünne Rohre fließen, etwa in chemischen Apparaturen oder der Schmiermitteltechnik, in Pflanzenkapillaren oder Blutgefäßen.

A turbulent plane Poiseuille flow with wall transpiration serves as an interesting and important object of investigation. On the one hand, being homogeneous in streamwise and spanwise directions, it is among relatively simple near-wall flows. On the other hand, it has fundamental properties universal for flows with transpiration and longitudinal pressure gradient. Moreover, it is an example of channel flow with an asymmetric mean velocity profile and a peculiar shear stress distribution when the point of zero shear stress may not coincide with that of maximum mean velocity. The flow geometry is shown on the figure 1. Only one known experimental study of a pressure-driven Poiseuille flow with wall transpiration was performed by [1] (see also [2]). DNS of a turbulent Poiseuille flow was conducted by [3].

The goal of this project is to study numerically and analytically an incompressible, fully developed turbulent Poiseuille flow with wall transpiration i.e. a classical channel flow with an extra transverse velocity with constant flux on the wall.

The project entirely could be summarized in the following tasks:

1. Provide a reference data base using DNS for different Reynolds numbers for wide ranges of transpiration rates and analyze the results.
2. Validate the new turbulent logarithmic scaling law derived from the infinite set of multi-point correlation equations employing the Lie symmetry theory ([4,5]) which is principally different from the classical near-wall log-law.
3. Validate an asymptotic theory for turbulent Poiseuille flow with wall transpiration at high Reynolds numbers. A friction law for Poiseuille flow with transpiration was derived in [6].

The numerical code used in the simulations was originally developed at School of Aeronautics, Technical University of Madrid ([7]).

The spacial discretization uses dealised Fourier expansions in x and z directions and a seven-point

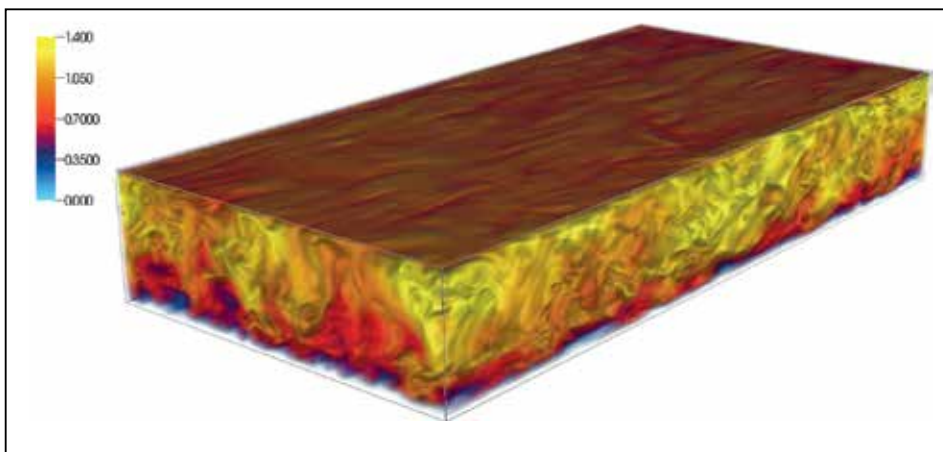


Figure 1:
3D instantaneous velocity field of the channel flow with transpiration. Injection side on the bottom, suction side on the top.

compact finite differences in y ([8]), with fourth-order consistency and extended spectral-like resolution. Compared to the traditional finite difference approximations the scheme, used in this code provides a better representation of the shorter length scales. It has pure central difference form (except near the boundaries), i.e., it has no built-in artificial dissipation. The temporal discretization is third-order semi-implicit Runge-Kutta. The code is MPI parallelized. All calculations have been conducted at Hessian High Performance Computer (HHLR) and HHLR-GU (Hessisches Hochleistungsrechenzentrum der Goethe-Universität) FUCHS cluster.

References:

1. Zhabbasbayev U., Isakhanova G. Developed turbulent flow in a plane channel with simultaneous injection through one porous wall and suction through the other. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 39, 53, 1998.
2. Zhabbasbayev U., Yershin Sh. Developed turbulent flow in a channel with mass exchange through porous walls. *Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*, (ed. Hanjalic K. et. al.) Begell Hous, Inc. pp. 173-180, 2003.
3. Sumitani Y., Kasagi N. Direct numerical simulations of turbulent transport with uniform wall injection and suction. *AIAA Journal*, 33(7), 1220-1228, 1995.
4. Oberlack M., Rosteck A. New statistical symmetries of the multi-point equations and its importance for turbulent scaling laws. *Discrete Contin. Dyn. Syst., Ser. S* 3, 451-471, 2010.
5. Rosteck A., Oberlack M. Lie algebra of the symmetries of the multi-point equations in statistical turbulence theory. *J. Nonlinear Math. Phys.* 18, pp. 251-264, 2011.
6. Vigdorovich I., Oberlack M. Analytical study of turbulent Poiseuille flow with wall transpiration. *Phys. Fluids* 20, 055102-1–055102-9, 2008.
7. Hoyas S., Jimenez J. Reynolds number dependence of the Reynolds-stress budgets in channels. *Phys. of Fluids* 20, 101511-1–101511-8, 2008.
8. Lele S. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *J.Comp. Phys.*, 103, pp. 16-42, 1992.

Drag reduction in plane Couette flow

George Khujadze

Fachgebiet Strömungsdynamik, Technische Universität Darmstadt

Wie lassen sich Turbulenzen in Scherströmungen kontrollieren? Mit dieser Frage setzen sich Wissenschaftler der TU Darmstadt auseinander. Sie entwickeln eine Strategie, mit der sich die Turbulenzen kontrollieren lassen, die unter anderem entstehen, wenn eine Flüssigkeit zwischen zwei Platten hindurchgepresst wird.

It is widely accepted that most high skin-friction regions in near wall turbulent layers are induced by nearby streamwise vortices and streaks [1,2]. Our study draws a new strategy of shear flow turbulence active and passive controls. Based on the study of stochastic forcing [3] another type of simulations were performed using helical type of forcing. All numerical simulations were performed at $Re = 750$ above the critical Reynolds number for the plane Couette flow (Fig. 1). Direct numerical simulations

were performed using a spectral method with Fourier decomposition in the horizontal directions and Chebyshev discretization in the wall-normal direction [4]. Simulations were performed on the IBM computer (Regatta-H) at TU Darmstadt. Simulation parameters: Box $8\pi \times 2 \times 4\pi$, grid $256 \times 97 \times 128$. All physical variables were nondimensionalized on the half-width of the channel and on the half of the velocity difference between the walls.

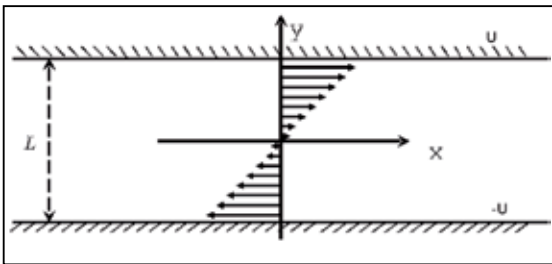


Figure 1:
Sketch of plane Couette flow.

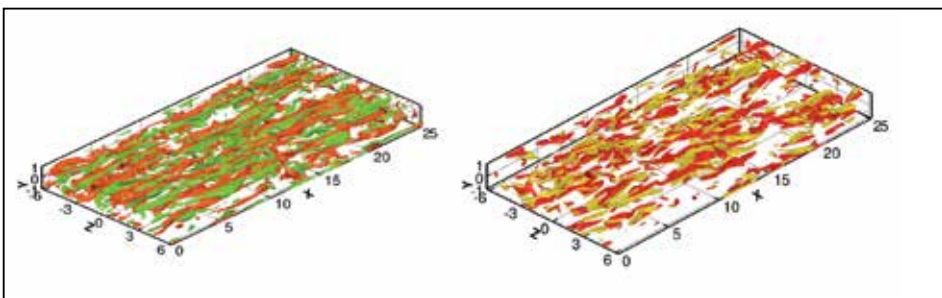


Figure 2:
Wall-normal and spanwise components of vorticity for turbulent Couette flow.

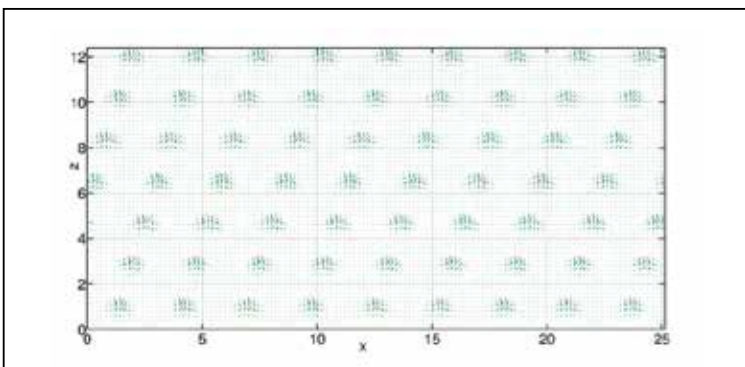


Figure 3:
helical forcing.

In the Fig. 3 the iso-surfaces of the spanwise component of velocity are displayed in the turbulent (top plot) and in the forced (with helical forcing) flow. One can clearly see the appearance of nonzero mean spanwise velocity in the case of forced flow. In this case, iso-surfaces with one sign are mainly located

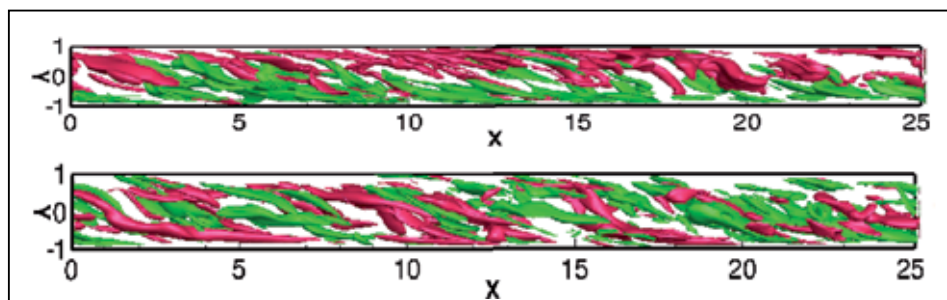


Figure 4:
Iso-surfaces $(-0.18, 0.18)$ of spanwise velocity for turbulent (top plot) and forced flow.

in one half of the flow that means that there is the non-zero mean spanwise velocity.

The aim of this study was to examine the drag reduction at helical forcing of the flow that is designed specially to impose in the flow special perturbations having potentials of transient growth and generation of chiral turbulence. The later is manifested in the appearance of a spanwise mean flow that has nonzero streamwise vorticity. In fact, this flow can be attributed to, so-called, Prandtl's second kind of secondary flow, or, in other words, stress-induced secondary flow.

References:

1. Bagheri, S., Henningson, D. (2011): Transition delay using control theory. *Phil. Trans. R. Soc. A* 369, 1365-1381.
2. Bewley, T. R. (2001): Flow control: new challenges for a new Renaissance. *Progress in Aerospace Sciences* 37, 21-53.
3. Chagelishvili, G., Khujadze, G. (1997): Fluctuation background due to incompressible disturbances in laminar shear flows. *J. Exper. and Theor. Phys.*
4. Skote, M. (2001): Studies of turbulent boundary layer flow through direct numerical simulation. Ph.D. thesis, Royal Institute of Technology.

Elasto-hydrodynamische Mehrkörpersimulation in der motorentechnischen Anwendung

Prof. Dr.-Ing. Adrian Rienäcker
Fachgebiet Maschinenelemente und Tribologie, Universität Kassel

Das Fachgebiet Maschinenelemente und Tribologie der Universität Kassel entwickelt Simulationstechniken zur Modellierung und konstruktiven Vorauslegung struktur- und hydro- bzw. elasto-hydrodynamisch gekoppelter Mehrkörpersysteme mit dem Ziel, zeit- und vor allem kostenintensive Prüfstands- und Feldversuche zu vermeiden. Ein besonderes Interesse des Fachgebietes ist es, auch bei hohem physikalisch genauen Grad der Modellbildung berechnungszeiteffiziente Algorithmen in den eigenentwickelten Simulationswerkzeugen zu erreichen.

Motorische Beanspruchungsanalysen bei benzin- bzw. dieselbetriebenen Verbrennungsmotoren unter realen Lastkollektiven erfordert zeit- und betriebsabhängige Berechnungsalgorithmen, wobei der maßgebende Einfluss durch Wechselwirkungen der gekoppelten Bauteile zu berücksichtigen ist. Um die Aussagesicherheit der Werkzeuge für gekoppelte Tribosysteme zu erhöhen, ist zwingend die Berücksichtigung realer Bauteilgeometrien, deren Materialeigenschaften sowie nichtlineare Lastübertragungsmechanismen durch die Bauteil-Schmierfilm-Interaktion erforderlich.

Die statische und dynamische Beanspruchungsanalyse realer Funktionsgeometrien und die damit verbundene, computergestützte Modellierung erfolgt vorwiegend auf Basis der Finiten-Elemente-Methode, wobei die exakte Abbildung oftmals mehrere hunderttausend bis zu einer Million und mehr Diskretisierungspunkte pro Bauteil erfordert. Die Einbindung der Finite-Elemente-Strukturen in gekoppelte Mehrkörpersysteme auf Basis der statisch-modalen Reduktion der Systemfreiheitsgrade und die damit verbundene Reduzierung zu lösender Gleichungssysteme auf ein vertretbares Maß an Berechnungszeit und Approximationsgrad. Dabei entstehen während der modalen Reduktion vollbesetzte Operatoren, bei denen standardisierte Techniken zur Verringerung des virtuellen Speicherplatzbedarfes nicht angewendet werden können.

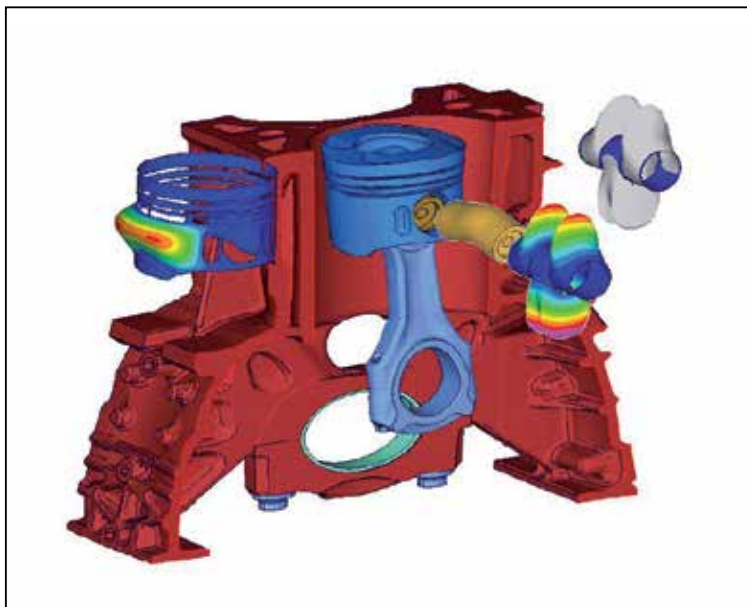
Auch der Einfluss rauer Oberflächen auf die nicht-lineare Bauteil-Schmierfilm-Interaktion wird in Anbetracht einer weiter steigenden Erhöhung der physikalischen Abbildung realer Systeme betrachtet. Effekte von funktionsgefertigten Rauheitsstrukturen können sowohl als Kennfeldlösungen aus Vorab-betrachtungen oder direkt durch Diskretisierung auf Mikroebene in gekoppelte Tribosysteme eingebunden werden.

Im Allgemeinen deuten eine hohe physikalische Modelltiefe und ein damit einhergehend hoher Diskretisierungsgrad der oben genannten Beispiele auf hohe, stetig steigende Berechnungszeiten und einen großen Bedarf an virtuellem Speicherplatz hin. Moderne Verfahren zur statistisch abgesicherten Versuchsplanung (Design of Experiments – DoE) ermöglichen es zurzeit, effektiv Kennfeldlösungen für die Variation von mehreren, untereinander abhängigen Einflussparametern unterschiedlicher Systeme zu untersuchen, deren gegenseitige Wechselwirkungen darzustellen und gezielte Optimierungsmaßnahmen wie bspw. Geometrievariationen oder geänderte Schmierstoffbedingungen vorzunehmen. Die Maßnahmen sind in der heutigen Anwendung fester Bestandteil einer Entwicklungs- und Prozesskette in nahezu jedem Industrieunternehmen und der industriellen sowie universitären Gemeinschaftsforschung.

Am Fachgebiet wurden in den Berichtsjahren 2010 und 2011 insgesamt mehr als zehn Forschungsvorhaben des BMBF, der AiF und der DFG bearbeitet, deren Gesamtfördervolumen mehr als zwei Millionen Euro beträgt. Ein Großteil der Tätigkeiten befasste sich mit der Reduktion der Verlustleistung im Kurbeltrieb durch gezielte Variation von motorentechnischen Einflussgrößen. Dabei wurden hohe physikalische Modelltiefen, verbunden mit hohem Diskretisierungs- und Reduktionsaufwand sowie DoE-Techniken bei den berechnungszeitintensiven Simulationsvariationen eingesetzt.

Der Aufwand an Berechnungszeit kann nur sehr grob auf zirka 1,3 Mio. CPU-Stunden geschätzt werden, aufgeteilt auf zirka 9000 Einzelrechnungen mit insgesamt vier TByte Verbrauch an virtuellem Arbeitsspeicher. Das übersteigt damit jegliches Maß an Ressourcen, die am Fachgebiet zur Verfügung stehen. Der Ausbau des hochschuleigenen Rechenzentrums durch die beantragte, zusätzliche

Ausstattung im Jahr 2009 war in Anbetracht der stetig steigenden Nutzung des HRZ durch weitere Fachbereiche unumgänglich, um die bearbeiteten Forschungsvorhaben in vollem Umfang zu erfüllen. Die durch die bereitgestellten CPU-Kapazitäten erzielten Forschungserkenntnisse dienen direkt dem Fachgebiet als auch indirekt der deutschen Automobilindustrie und deren Zulieferern.



Referenzen:

1. Brandt, S.: Tribologische Charakterisierung deterministischer Oberflächen mittels des Lattice-Boltzmann-Verfahrens und Simulation der Ölemission von Verbrennungsmotoren unter Berücksichtigung der Schmierölformulierung. Dissertation Universität Kassel, 2010.
2. Knoll, G.; Thiemann, W.; Schlerege, F.; von Hollen, P.; Matz, G.; Robota, A.; Krause, S.: Ölemission eines Ottomotors – Verfahrensentwicklung zur Messung und Simulation. MTZ 02/2009 Jahrgang 70, S.166-173.
3. Koch, R.: Elastohydrodynamische Kontaktmodellierung rauer Oberflächen in Mehrkörpersystemen unter nichtisothermen Bedingungen. Dissertation Universität Kassel, ISBN: 978-3-939124-09-2, 2009.
4. Longo, C.: Konzeptionelle Arbeitsschritte im Entwicklungsprozess zur simulationstechnischen Reibungsoptimierung eines Kurbeltriebes. Dissertation Universität Kassel, ISBN: 978-3-939124-11-5, 2010.
5. Schlerege, F.: Kolbenringdynamik - Simulation von Reibung und Verschleiß. Dissertation Universität Kassel, ISBN: 978-3-939124-10-8, 2009.

Finite-Elemente-Simulationen in der Kontinuums- und Festkörpermechanik

Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Ricoeur,
Fachgebiet Technische Mechanik / Kontinuumsmechanik, Universität Kassel

Schlägt Splitt auf die Windschutzscheibe eines Autos, entsteht dort ein kleiner Riss. Wie schnell dieser Riss wächst, hängt unter anderem von der Struktur des Materials ab, aus dem die Scheibe besteht. Forscher der Universität Kassel untersuchen, wie die Mikrostrukturen des Materials die Eigenschaften des gesamten Bauteils beeinflussen. Mit diesem Wissen können sie am Computer Werkstoffe nach Maß entwickeln, in denen zum Beispiel Risse langsamer wachsen.

Schädigungsmechanische Berechnungen mit komplexen Mikrostrukturen

Ziel schädigungsmechanischer Berechnungen ist die Simulation des Anrissverhaltens technischer Strukturen unter kombinierter, z.B. thermomechanischer Beanspruchung. Dabei kommen mikromechanische und phänomenologische Materialgesetze in Verbindung mit numerischen Diskretisierungsverfahren, insbesondere der Methode der Finiten Elemente, zur Anwendung. Um den Einfluss mikrostruktureller Merkmale auf die makroskopischen Eigenschaften zu erforschen, umspannen die entwickelten Modelle mehrere Größenskalen. So werden Vorgänge, die sich auf der Mikroebene des Kristallgitters abspielen und Prozesse, die ursächlich mit der Mesoskala der Kristallite (Mikrorisse oder Einschlüsse) verbunden sind, durch Anwendung von Homogenisierungsmethoden auf die Makroebene des Kontinuums übertragen. Dies ermöglicht in der Anwendung ein gezieltes Mikrostrukturdesign, das sich auf numerische Vorhersagen des Einflusses mikrostruktureller Parameter auf die gewünschten makroskopischen Eigenschaften einer Struktur stützt. Mit anderen Worten können „Werkstoffe

nach Maß“ virtuell, also am Computer entwickelt werden. Hohe Rechenzeiten und damit die Notwendigkeit leistungsfähige Rechencluster einzusetzen, ergeben sich aus der Nichtlinearität der Materialgesetze in Verbindung mit der Mehrskaligkeit der Modelle.

In den Bildern 1 und 2 sind beispielhaft Ergebnisse zweier numerischer Simulationen dargestellt. In Bild 1 wird eine feuerfeste Keramik an einem Teil der Oberfläche (grün) einem wiederholten (zyklischen) Thermoschock unterzogen. Die blauen Zonen repräsentieren teilgeschädigte Bereiche, die roten Zonen stellen vollständig zerstörte Bereiche dar, die im Experiment als Makrorisse in Erscheinung treten. Die Schädigung beginnt demnach zunächst „unsichtbar“ unterhalb der Oberfläche und breitet sich bei zunehmender Zahl der Lastzyklen zur Oberfläche hin aus. In Bild 2 wird Risswachstum auf Basis eines mikromechanisch motivierten Kontinuumschädigungsmodells simuliert. Die helleren Ovale repräsentieren Materialeinschlüsse auf der Nanoebene. Sie führen zur Ablenkung des rot dargestellten Risspfades.

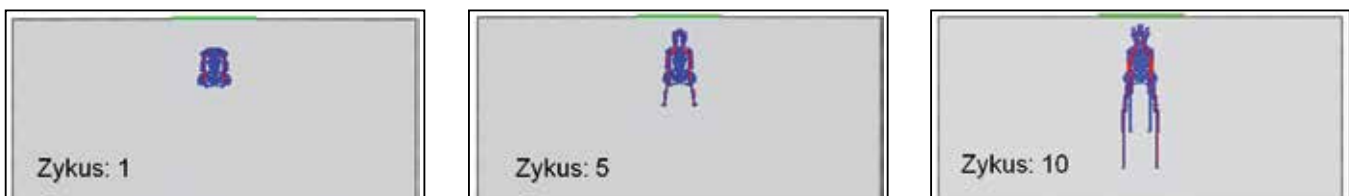


Abbildung 1: Simulation eines zyklischen Thermoschockversuchs, Wärmeeintrag an grünem Teilrand, $q = 42 \text{ MW/m}^2$ Zyklus: 0,5s Last + 2s Pause, blau: Teilschädigung, rot: zerstörte Bereiche



Abbildung 2: Simulation der Wechselwirkung eines Risses (rot) mit Nanoeinschlüssen (helle Ovale) auf der Basis eines mehrskaligen Werkstoffmodells

Bruchmechanische Simulationen des Risswachstums in technischen Strukturen

Ziel bruchmechanischer Berechnungen ist u. A. die Optimierung von Leichtbaustrukturen durch Ausnutzung der Restfestigkeit nach einem Anriss. In der Luftfahrt gilt der Leitsatz: „ein Flugzeug ohne Risse fliegt nicht“. Bei bruchmechanischen Simulationen werden Risse durch freie Oberflächen abgebildet. Die Berechnung von Risswachstum erfordert somit eine kontinuierliche Neugestaltung des betrachteten Körpers. Zur exakten Berechnung der risstreibenden Kraft ist zudem eine adaptive räumliche Diskretisierung des Modells erforderlich, die der Spannungssingularität an der Rissspitze zu jedem Zeitpunkt Rechnung trägt. Insbesondere die Berücksichtigung dynamischer Aspekte des Rissfortschritts erfordert eine rechenzeitintensive, feine Zeitdiskretisierung. In Bild 3 ist das Ergebnis der Wachstumssimulation eines Risses dargestellt, der in einer Zugprobe durch eine Bohrung abgelenkt wird. Die bunte Zone an der Rissspitze deutet die dort vorliegende Spannungssingularität an.

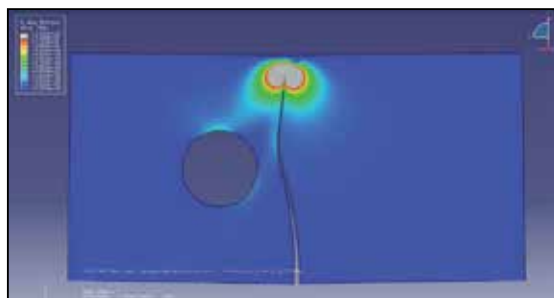


Abbildung 3:
Risspfad in einer Zugprobe, abgelenkt durch eine Bohrung

Mehrskalensimulation multifunktionaler „intelligenter“ Werkstoffe und Strukturen

Als „intelligent“ werden Werkstoffe dann bezeichnet, wenn man die Tatsache, dass verschiedene physikalische Eigenschaften in Wechselwirkung zueinander stehen, technisch nutzt. Ferroelektrische Materialien weisen beispielsweise eine Kopplung mechanischer und elektrischer Feldgrößen auf, wodurch sie für Anwendungen in der Aktuatorik und Sensorik interessant sind. Die Ursache des ausgeprägt nichtlinearen ferroelektrischen und ferroelastischen Effektes liegt in der Kristallstruktur begründet und kann auf der Mesoebene von Kristalliten und Domänen beschrieben werden. Hierzu ist eine mehrskalige Modellbildung erforderlich. Bedingt durch Feldkopplung, Mehrskaligkeit und Nichtlinearität sind Simulationen auf diesem Gebiet sehr rechenzeitintensiv. Bild 4 zeigt die Umgebung einer Elektrode innerhalb eines Stapelaktuators, der beispielsweise bei Kraftstoffeinspritzsystemen zur Anwendung kommt. Die roten Pfeile sind das Ergebnis einer Simulation des Polungsvorganges und weisen in Richtung lokaler elektrischer Polarisation.

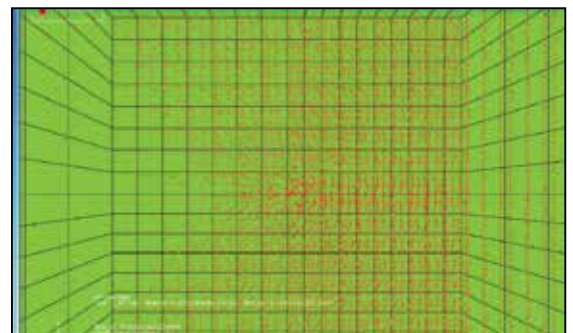


Abbildung 4:
Polarisationsvektoren (rot) an einer Elektrode als Ergebnis der Simulation eines Polungsprozesses

3D-Modellierung elastischer Wellen in anisotropen Medien mit der Elastischen Finiten Integrationstechnik (EFIT)

Prashanth Kumar Chinta, Gregor Ballier, Klaus Mayer, Karl-Jörg Langenberg, B. Witzigmann
Fachgebiet Theorie der Elektrotechnik und Photonik, Universität Kassel

Soll eine Brücke auf Schäden untersucht werden, müssen zerstörungsfreie Methoden wie Ultraschall angewendet werden. Die dabei auftretende elastische Ausbreitung der Wellen im Material ist sehr komplex. Forscher der Universität Kassel machen die Ausbreitung und Streuung elastischer Wellen durch numerische Modellierung anschaulich. Ziel ist es, die Effekte der Ausbreitung und Streuung zu verstehen, um den Zustand eines Bauteils besser beurteilen zu können.

Die Prüfung von Bauteilen aus Holz oder Beton und z. B. Strukturen aus Stahl mit Schweißnähten mit zerstörungsfreien Methoden wie Ultraschall ist von großer Bedeutung, um deren Qualität zu gewährleisten. Die dabei auftretende elastische Wellenausbreitung in inhomogenen und anisotropen Materialien ist wegen der möglichen Kristallorientierungen und der Polarisierung verschiedener Wellenmoden sehr komplex und bei dem Auftreten von Inhomogenitäten nur schwer vorstellbar [1]. Dabei werden die auftretenden Ausbreitungsphänomene mit wachsender Anzahl von unabhängigen Elastizitätskonstanten immer schwieriger verständlich. Die Ausbreitung und die Streuung von elastischen Wellen kann jedoch durch numerische Modellierung anschaulich gemacht werden. Die dreidimensionale Elastische Finite Integrationstechnik (3D-EFIT) [2] ist ein Werkzeug, das zu diesem Zweck für High Performance Computing (HPC) unter Verwendung von Message Passing Interface (MPI) entwickelt wurde.

Als Anwendungsbeispiel dient eine Bauteil mit einer Schweißnaht aus austenitischem Stahl, die eine hexagonale Kristallstruktur besitzt und zwei isotrope Stahlblöcke miteinander verbindet [3]. Wegen der Polarisierung von elastischen Wellen in hexagonalen Kristallstrukturen werden solche Medien als transversal-isotrop bezeichnet. Es existieren hier Quasi-Druckwellen (qP), vertikale polarisierte Quasi-Scher-(qSV) und horizontal polarisierte Scherwellen (SH). Als anregender Prüfkopf wird ein Winkelprüfkopf (MKW45-2) eingesetzt und simuliert, der in den isotropen Teil der Geometrie eine 45°-Scherwelle aussendet. Die Ausbreitung und Streuung der Wellen ist in Form einer Momentaufnahme dargestellt (Bild 1).

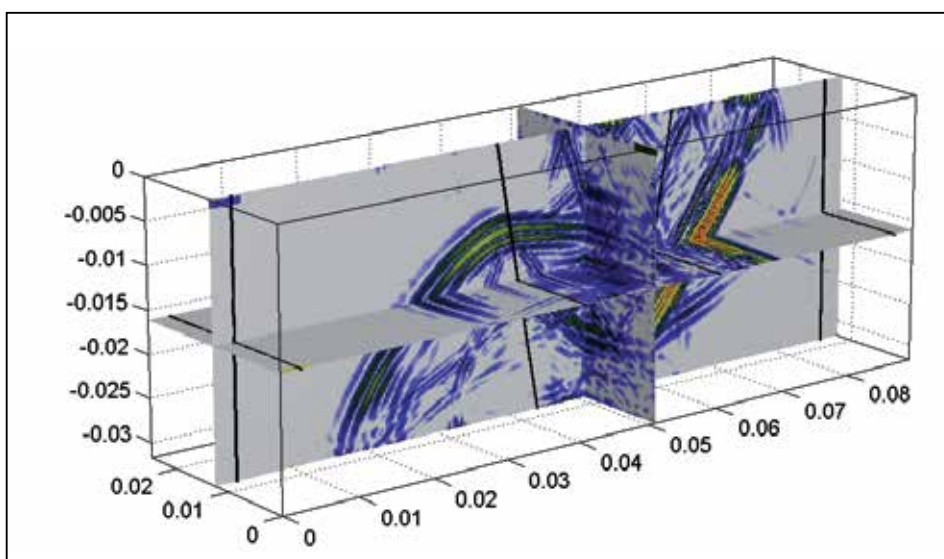


Abbildung 1:
Ausbreitung einer elastischen Welle in dem Modell eines Stahlkörpers mit inhomogen-anisotroper Schweißnaht.

Im Werkstoff Holz existiert ebenfalls eine starke Anisotropie der elastischen Wellenausbreitung. Ziel ist es, die Effekte der Ausbreitung und Streuung zu verstehen, um interaktive inverse Methoden einsetzen zu können [4]. Hierzu wird die elastische Elementarwelle im dreidimensionalen Raum (Greensche Funktion) für orthotrope Materialien (z. B. die Holzart Fichte hat diese Eigenschaft [5]) benötigt. Das Beispiel zeigt die Wirkung einer Punkt-

quelle (f), die im Ursprung $R(0, 0, 0)$ eine Anregung in vertikaler Richtung (hier die z -Richtung) auslöst. Die Form des Signals ist ein Raised Cosine (RC2)-Impuls mit 1 MHz Mittenfrequenz. Eine Momentaufnahme der elastischen Wellenausbreitung ist in Bild 2 dargestellt. Es sind hier die Quasi-Druckwelle (qP), die Quasi-Transversal- (qT) und die Transversalwelle (T) sowie Reflexions- und Modenumwandlungseffekte zu erkennen.

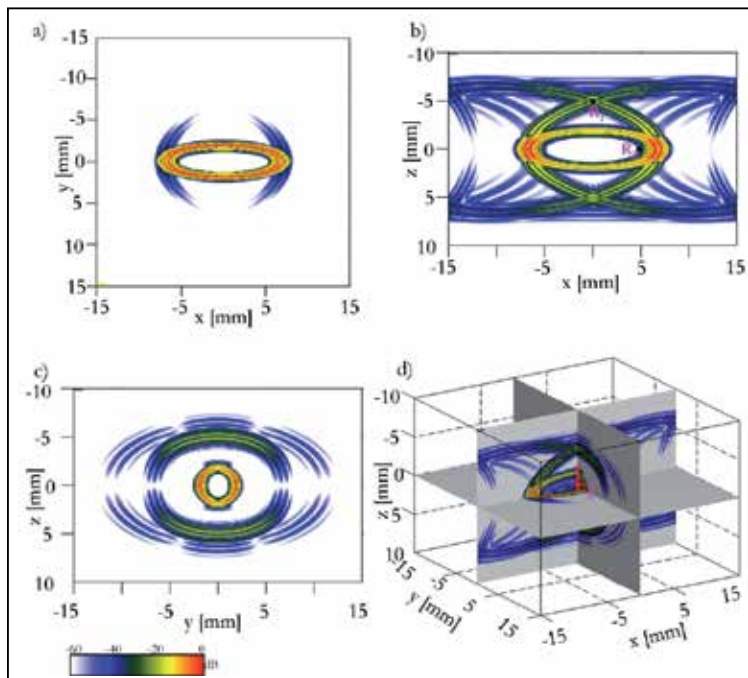


Abbildung 2:
3D-EFIT-Ergebnis: Zeitbereichs-Momentaufnahmen in Ebenen mit gemeinsamem Schnittpunkt im Quellpunkt (a-c) und die räumliche Anordnung der Ebenen im Volumen (d).

Referenzen:

1. Langenberg, K. J., Marklein R., Mayer K.: Theoretische Grundlagen der zerstörungsfreien Materialprüfung mit Ultraschall. Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, München, Germany, 2009.
2. Marklein, R.: Numerische Verfahren zur Modellierung von akustischen, elektromagnetischen, elastischen und piezoelektrischen Wellenausbreitungsproblemen im Zeitbereich basierend auf der Finiten Integrationstechnik, Shaker Verlag, Aachen, Germany, 1997.
3. Chinta P.: Ultrasonic Nondestructive Testing of Inhomogeneous Isotropic and Anisotropic Media: Modeling and Imaging. Dissertation, Universität Kassel, 2012.
4. Krause M., Chinta P. K., Mayer K., Effner U. A. and Mueller S.: NDT of wooden building elements by means of 3D ultrasonic imaging techniques and modeling. International Symposium on Nondestructive Testing of Materials and Structures NDTMS May 15-18, Istanbul, Turkey, 2011.
5. Bucur V.: Acoustics of Wood. 2nd Edition, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, 2006.

Entwicklung von Finite-Element-Modellen zur Analyse des Tragverhaltens hochbelasteter Faserverbund Biegeträger

Marco Schürg, Friedrich Gruttmann,
Fachgebiet Festkörpermechanik, Technische Universität Darmstadt

Ein von der DFG gefördertes Projekt am Fachgebiet Festkörpermechanik des Fachbereichs Bauingenieurwesen und Geodäsie der TU Darmstadt befasst sich mit der Entwicklung von Finite-Elemente-Modellen, die das Tragverhalten hochbelasteter Faserverbund-Biegeträger möglichst genau beschreiben sollen.

Dünnwandige Bauteile aus Faserkunststoffverbunden finden zunehmend Anwendung im konstruktiven Ingenieurbau, zum Beispiel als hochbelastete Biegeträger im Brücken- und Kranbau. Vorteile solcher Werkstoffe gegenüber herkömmlichen Werkstoffen sind beispielsweise hohe Steifigkeiten und Festigkeiten bei geringem Gewicht. Im Gegensatz zu häufig zum Einsatz kommenden Werkstoffen wie Stahl verhalten sich Faserkunststoffverbunde anisotrop. Die mathematische Modellierung des Werkstoffverhaltens wird dadurch aufwändiger und numerisch schwieriger zu handhaben.

Hochbelastete Biegeträger bestehen häufig aus dünnwandigen Profilen, beispielsweise I- und Kasten-Profilen. Dünnwandige Profile neigen aufgrund ihrer Geometrie zu Profilverformungen und Beulen. Daher müssen derartige Versagensarten besonders beachtet werden. Bei dünnwandigen Bauteilen aus Faserkunststoffverbunden sind auch intralaminare und interlaminare Versagensarten zu untersuchen.

Dies bedeutet, dass sowohl geometrische als auch physikalische Nichtlinearität in den zugrundeliegenden Gleichungen berücksichtigt werden müssen. Dies führt zu einem sehr hohen Bedarf an Rechenkapazität, da die im Rahmen der nichtlinearen Finite-Elemente-Methode auftretenden Gleichungen vielfach gelöst werden müssen. Zur Modellierung wurden 4-knotige Schalenelemente verwendet. Die Implementierung erfolgte im nichtkommerziellen Finite-Elemente Programm FEAP.

Abbildung 1 zeigt das Ergebnis einer Stabilitätsuntersuchung in Gleichgewichtspunkten an einem I-Träger. Die Nichtlinearität der Berechnung ist anhand der Last-Verschiebungskurve ersichtlich. Die Abbildung zeigt das halbe System, das Auflager befindet sich am hinteren Ende, am vorderen Ende wirkt die Last. Bei der Diskretisierung ist die Symmetrie des Systems ausgenutzt worden, die Netzfeinheit ist aus den Bildern ersichtlich. Am Auflager ist eine Steife modelliert worden, die

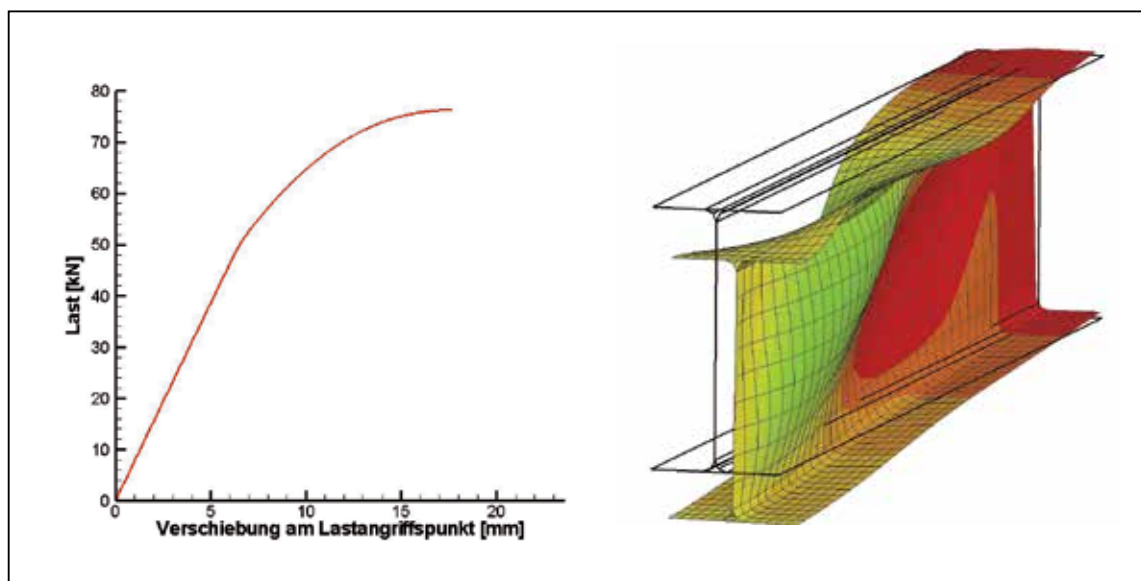


Abbildung 1:
Last-Verschiebungskurve und Verformungsfigur bei einer Stabilitätsuntersuchung an einem I-Träger

auf dem Bild wieder ausgeblendet wurde. Für die Durchführung der Berechnungen wurde das Bogenlängenverfahren ausgewählt.

Abbildung 2 zeigt die Untersuchung des Beulverhaltens eines Kasten-Trägers. In dem besagten Bild ist die Steife in der Darstellung nicht ausgeblendet worden. In der Verformungsfigur sind Beulen zu erkennen. Bei einer bestimmten Last tritt ein Verzweigungspunkt auf. Durch eine aufgebrachte Störkraft gelangt man auf den Sekundärpfad, bei dem sich die Beulen einstellen. In weiteren Berechnungen wurden in dem Projekt kritische Stellen

untersucht, an denen es zu Delamination kommen kann.

Abschließend kann gesagt werden, dass die numerische Simulation mit der Finite-Elemente-Methode insbesondere bei geometrisch und physikalisch nichtlinearen Berechnungen eine sehr hohe Rechenleistung erfordert. Der Bedarf an Rechenleistung geht noch mehr nach oben, wenn, wie geplant, mehrskalige Simulationen durchgeführt werden. Diese koppeln Modellierungen auf der Mikroebene mit Modellen auf der Makroebene.

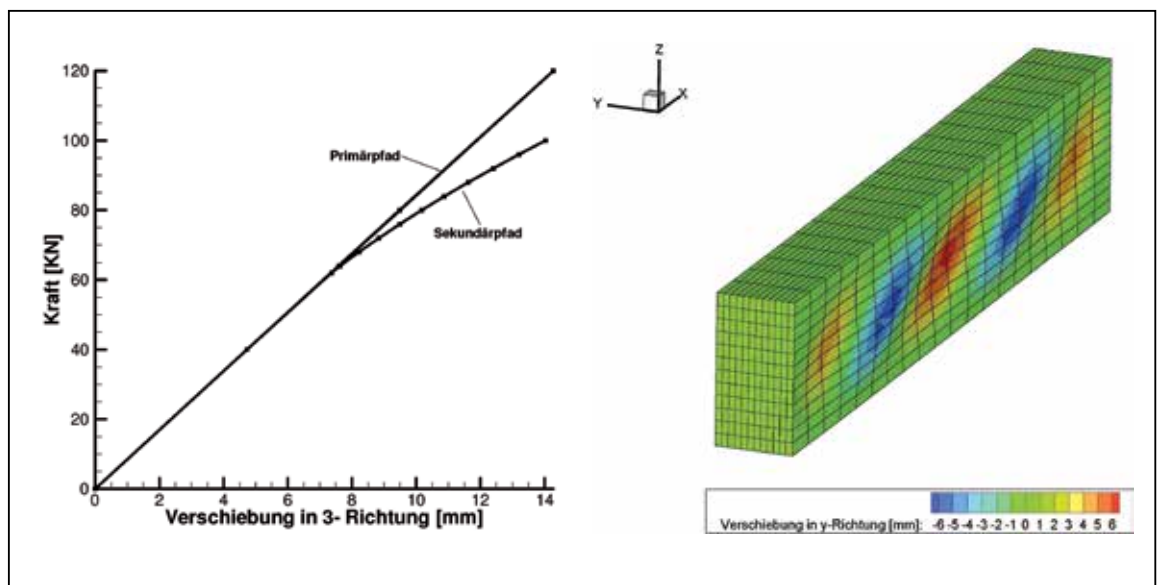


Abbildung 1:
Last-Verbiegungskurve und Verformungsfigur bei einer Beuluntersuchung an einem Kasten-Träger

Referenzen:

1. Schürg M, Wagner W, Gruttmann F: An enhanced FSDT model for the calculation of interlaminar shear stresses in composite plate structures, Computational Mechanics, 44 (6), 765-776, 2009.
2. Gruttmann F, Wackerfuß J, Schürg M: A Coupled Local-Global Model for the Analysis of Interlaminar Stresses in Laminated Shell Structures, Proceedings of the 6th International Congress of Croatian Society of Mechanics ICCSM, Dubrovnik, ISBN 978-953-7539-11-5, 2010.

Simulation of InGaN quantum well LEDs with reduced internal polarization

Zhelio Andreev, Friedhard Römer and Bernd Witzigmann
Computational Electronics and Photonics Group, Universität Kassel

Im Rahmen der DFG-Forschergruppe PolarCoN entwickeln Physiker der Universität Kassel mit Kollegen aus Deutschland und der Schweiz grüne Laserdioden auf Nitrid-Basis. Untersucht werden unter anderem die Polarisierungseffekte in Nitrid-basierten Heterostrukturen. Die bisher existenten grünen Laserdioden auf Galliumnitrid-Basis haben im Vergleich zu den blauen und ultra-violetten Dioden eine sehr geringe Leuchtkraft. Die PolarCoN-Forscher hoffen, auf Nitrid-Basis leistungsstarke grüne Laserdioden herstellen zu können.

Eight research groups across Germany and Switzerland have united under the DFG research group PolarCoN to develop green nitride-based laser diodes. The consortium has received a total of around 2 million Euro in funding from the German Research Foundation and the Swiss National Science Foundation for phase one of the project, which ran to 2011 [1] and is extended now to 2015. Our part in the project is: Physics and Simulation of electro-optical properties in non-polar nitride-based heterostructures. Here, we would like to give a small aspect of the work which in detail is discussed in [2]. Polarization and strain are currently two major challenges for III-nitride based light emitters, in particular for their application as emitters in the green spectral range. For standard growth technology InGaN, AlGaIn, and GaN layers are grown perpendicular to the c-plane, which results in localized polarization charges at the InGaIn/GaN quantum-well (QW) interfaces. As a consequence, the built-in electric fields lead to a spatial separation of electrons and holes in the QW, resulting in a reduced interband optical matrix element. Screening of the polarization charges by injected carriers reduces the electric field in the high injection regime; however, calculations have shown that for LED operation this only works up to Indium levels of approximately 20% [3]. The strategy to realize high efficiency light emitters for higher Indium contents include growth in semi-polar or non-polar crystal orientations [4], introduction of staggered QWs [5], or strain-compensated InGaIn-AlGaIn QW [6].

Our contribution investigates a different approach by means of detailed simulation. The use of quaternary QWs or barriers allows for a reduction of the polarization charges in active regions, which has been confirmed by initial experimental results [7].

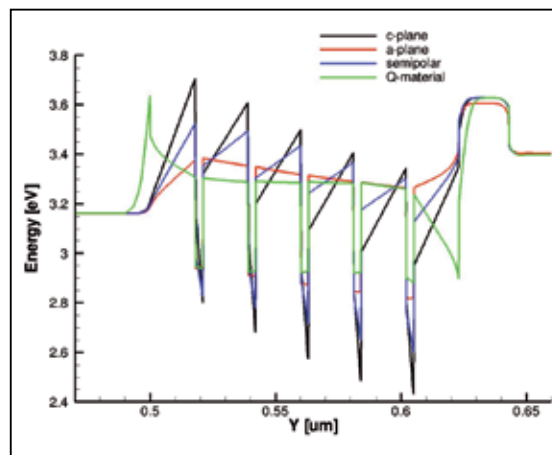


Abbildung 1:
Conduction band edges for LED structures with different internal polarization charges at forward bias of 3.2V

In [2] we present a detailed comparison of standard GaIn/InGaIn structures and quaternary AlInGaIn/InGaIn structures for the use in light emitters. While an experimental realization of such structures is challenging, it is worthwhile to investigate their potential theoretically.

We have implemented the method proposed by William et al. [8] for the estimation of the nonlinear parameters of the quaternary alloys. This includes the bandgap and the spontaneous polarization charge of the quaternary material. Bandgap computation was compared to different methods which show only minor deviation from our results. The polarization charges of the quaternary have been computed using the model proposed by Vurgaftman and Mayer [9] for the total polarization.

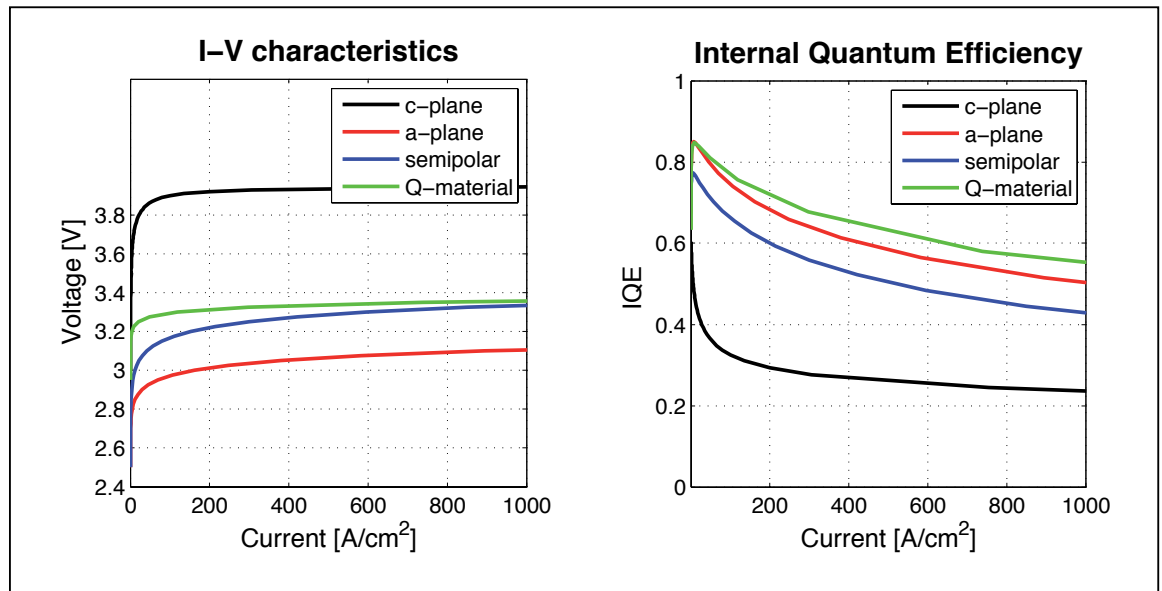


Abbildung 2:
Current-voltage characteristics and internal quantum efficiency of LED structure with different internal polarization charges.

The simulations were done using an in-house developed software called CELS/Quatra. The first part of the simulation includes computation of the strain and polarization effect using material parameters described above. Polarization effects are represented as interface charges at the heterostructure borders. All parameters and properties are computed and used as input in the quantum transport simulator (Quatra). Quatra implements a drift diffusion transport model for the currents inside the structures. Non-radiative recombination of carriers is presented through Shockley-Read-Hall (SRH) and Auger recombination. Simulation results show that the turn-on voltage of non-polar devices is the lowest. This is expected as

this device does not have built-in internal polarization effects. The highest turn on voltage can be seen for the polar device where the internal polarization field is highest.

We investigate how this effect influences the quaternary material device. We see an increase in the turn-on voltage for this device, although there are no polarization charges at the QW-barrier interface. In those devices the built-in polarization is not completely canceled, as there are polarization charges at the barrier-substrate interface. The quantum efficiency is also affected by the built-in charges.

References:

1. <http://www.uni-ulm.de/in/iui-polarcon.html>.
2. Zhelio Andreev, Friedhard Römer, Bernd Witzigmann: Simulation of InGaN quantum well LEDs with reduced internal polarization. In: physica status solidi (a), 1 FEB 2012 DOI: 10.1002/pssa.201100377.
3. F. D. Sala, A. D. Carlo, P. Luigi, F. Bernardini, V. Fiorentini, R. Scholz, and J.-M. Jancu, Appl. Phys. Lett. 74, 2002 (1999).
4. H. Masui, S. Nakamura, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, IEEE Trans. Electron Dev. 57, 88 (2010).
5. H. Zhao, R. A. Arif, and N. Tansu, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 15, 1104 (2009).
6. H. Zhao, R. A. Arif, Y. K. Ee, and N. Tansu, Opt. Quantum Electron. 40, 301 (2008).
7. S. H. Park, D. Ahn, and J. W. Kim, Appl. Phys. Lett. 92, 171115 (2008).
8. C. K. Williams, T. H. Glisson, J. R. Hauser, and M. A. Littlejohn, J. Electron. Mater. 7, 639 (1978).
9. I. Vurgaftman and J. R. Mayer, Electron band structure parameters, in: Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulations, edited by J. Piprek (Wiley-VHC, Weinheim, 2007), chap. 2.

Dataflow-like synchronization in a PGAS programming model

Jens Breitbart, Prof. Dr. Claudia Fohry
Research Group Programming Languages / Methodologies, Universität Kassel

In Hochleistungsrechnern arbeiten viele Rechenknoten parallel an der Lösung eines Problems. Diese Knoten kommunizieren miteinander, um Teillösungen auszutauschen und so das gesamte Problem zu lösen. Je neuer ein Hochleistungsrechner ist, desto mehr Rechenknoten besitzt er. Unklar ist, für wie viele Knoten die gängigen Kommunikationswege noch effizient sind. Informatiker der Universität Kassel arbeiten daher an alternativen Kommunikationswegen. Damit tragen sie dazu bei, dass die Hochleistungsrechner auch in Zukunft schnell arbeiten.

Each of the top ten supercomputers provides more than 1 petaflop of computing power and consists of ten-thousands of nodes each with tenths of cores. Current predictions state that the first exascale system will be deployed in 2018 and is expected to consist of hundreds of thousands or even millions of nodes each with thousands or ten-thousands of cores. Whereas the current supercomputers are often programmed with a combination of MPI for inter-node communication and OpenMP or MPI for intra-node communication, it is unclear if this communication mechanism will scale to the required order. Furthermore, the currently often used OpenMP like fork-join parallelism and bulk synchronous processing like communication pattern is not expected to be able to keep all processors of exascale systems active, but to increase idle time by requiring global synchronization.

A model considered as an alternative is the so-called partitioned global address space (PGAS) model. It assumes a global address space for all nodes in one system in the form that any node can read and write to any memory location. Furthermore the address space is partitioned and each partition is local to a specific node, so the best performance is achieved when threads access local data. There are several ways for synchronization within the PGAS model, e.g. Unified Parallel C (UPC) provides both locks and barriers to synchronize threads among all nodes. The benefit of the PGAS model is, that it allows direct support for remote DMA transfers over network and rather easy programming of distributed memory systems, as one can read data without requiring cooperation with the local program threads.

We investigated a variation of the PGAS model, which extends the model with a pair-wise fine grained automatic synchronization mechanism for which developers do not manually take care of

synchronization. Memory shared by multiple nodes is single assignment and thereby can have two states: memory can contain data, or is uninitialized. A thread reading uninitialized memory is blocked until another thread writes to that memory. A thread writing data automatically wakes up all threads waiting for the written data. In an extreme case one can use this synchronization on bit level, however this would require adding a synchronization bit to every data bit, which is obviously not feasible. We therefore apply this mechanism on batches of data. Furthermore the model oversaturates the available processors with threads, so that in case a thread is waiting for data the system can continue to work. We expect this form of synchronization to be easy to use and debug, as one cannot have a race condition when reading data as data cannot be overwritten. The worst case is a deadlock of a thread reading data that is never written, however debugging such a case is mostly easier than identifying race conditions, as the threads are blocked clearly naming which data dependencies are not satisfied.

We allow distributing batches of single assignment data among all nodes and based on this introduce data structures and data distributions. For example, a matrix can be stored purely local or its data can be distributed among the nodes. We furthermore introduce a special data distribution storing all data on every node for which writing to acts as a broadcast. Gather and scatter are modelled based on assignment of data with different data distributions. Reductions with single assignment are inherent complex, so we introduce special reduction variables following the combining PRAM approach, that is multiple threads write to the same variable and its value can be read as soon as all nodes have written a value. Scan is modelled following a similar approach, except that it is defined on an array to store all results of the scan. All communication algorithms used in MPI collective operations can

be used in our model. We studied the model with a Gauß-Seidel stencil and the bitonic sort sorting algorithm using multiple nodes.

Moreover we developed a proof of concept library implementation of the model. We implemented matrix and vector data structures simulating our model. Our implementation is based on the active messaging implementation of the GASNet library also used for e.g. UPC and Chapel. Our matrix implementations are tile based, so that the synchronization is done based on tiles. Using tiles requires to allow efficient network communication. Due to a limitation of GASNet we could not effectively oversaturate the available nodes with threads and therefore decided to test our implementation on problems with regular memory access patterns only. We decided to use GASNet as a starting point of our work despite this problem, as it is well known and often used. Future work may choose another library or modify GASNet to solve this issue. We implemented the Gauß-Seidel stencil and our performance results showed that this approach scales well for multiple multicore nodes. The techniques used in both the model and the implementation are mostly known and have been implemented previously, yet we expect the overall combination to be unique.

The tests of our implementation have been run at the Cluster in Frankfurt, Germany using up to 8 nodes. Scalability and performance of our programs have been promising and future work will experiment with a higher number of nodes, as a large increase is expected for upcoming supercomputers.

High Performance Computing

Using Virtual Machines

Matthias Schmidt, Roland Schwarzkopf, Bernd Freisleben
Fachbereich Mathematik und Informatik, Philipps-Universität Marburg

Die Installation und Wartung von Software ist eine der Herausforderungen im Hochleistungsrechnen. Um einerseits den Anwendern eines Clusters die Möglichkeit zur Installation eigener Software zu bieten und andererseits den Aufwand für die Administratoren gering zu halten, nutzt die Universität Marburg virtuelle Maschinen. Sie bieten gleich mehrere Vorteile: Die installierte Anwender-Software ist abgeschottet, d.h. ein versehentlicher oder absichtlicher Absturz hat keinen Einfluss auf das Gesamtsystem. Zudem kann ein Administrator Obergrenzen für Ressourcen festlegen und somit die Auslastung des Cluster genauer kontrollieren.

One of the challenges in cluster computing environments is the installation and maintenance of software for job execution. If the software does not require root access to be installed and the user has a local login, the user can log on to each cluster site and manually install the software in his or her user account. This is a painstaking way to install software. Furthermore, if the application depends on special third-party libraries, commercial code or license servers, the installation and setup is even more complicated. Virtualized computing (no matter if in cluster, grid or cloud computing environments) is a promising approach to solve the stated software installation and maintenance problem. It provides advantages for the users of clusters as well as for the administrators.

While jobs in traditional cluster computing use shared resources, virtualized cluster computing encapsulates jobs in virtual execution environments. Users are equipped with their own virtual machines and are able to install custom software with root privileges autonomously into them without the hassle of a job based installation procedure. This enables the user to control the execution environment of his or her jobs, for example by deciding if and when a software is updated, avoiding problems caused by unexpected maintenance by an administrator. Furthermore, users can build multiple virtual machines and select virtual machines on a per job basis, allowing users to use different versions of a software without dealing with version conflicts. Administrators, on the other hand, are freed from software installation procedures. They also benefit from the virtualization techniques, since the users' jobs are shielded inside virtual machines. Thus, badly programmed or malicious applications cannot harm other users' jobs or the cluster itself.

The virtualization technologies developed at the University of Marburg have been used in several research projects, funded by either the

German Federal Ministry of Education and Research (BMBF) or the Hessian Ministry of Higher Education, Research and the Arts (HMWK). All projects use resources of the computing cluster available in Marburg (MaRC).

The aim of the TIMaCS project [5] is to build a monitoring framework that is able to deal with the complexity of new, upcoming computer systems, especially those with several peta-flops. While current monitoring solutions are able to monitor smaller resources, they might not be usable on future-generation systems. TIMaCS tries to overcome this limitation by developing a fast and scalable messaging infrastructure. Attached to the communication bus is a decision engine that is able to start predefined actions in case of an error. Regression test aim at taking preventions actions before an error occurs. In the course of the TIMaCS project, our components for virtualized Grid computing have been extended to comply with requirements of intelligent management, by providing monitoring facilities and a machine-usable interface. Furthermore, techniques for efficient virtual machine storage, maintenance and distribution [1] as well as migration [2] have been developed, specifically targeting clusters without fast shared storage. Finally, the TIMaCS framework has been evaluated and validated on the MaRC cluster.

In the course of the Virtualization and HPC project, different approaches for combining virtualized and non-virtualized cluster computing on a single cluster have been evaluated. The first approach is targeted at dynamically starting virtual machines before executing a job, while the second approach is using a separation of the cluster into a virtualized and a physical part. Both solutions are using the virtualized cluster computing components and are working with out-of-the-box versions of cluster schedulers. Dedicated nodes of the MaRC cluster are used for development and testing.

The PT-Grid project [6] deals with modeling and simulation of plasma to advance plasma technology. In one of the sub-projects, a computational fluid dynamics (CFD) software is used to optimize welding and cutting torches. In particular, time-dependent processes, large parameter studies and automated optimizations have high computational requirements. Different simulation results are shown in Figure 1. The flexible, secure and reliable use of virtualized resources is the goal of this sub-project. In the course of the PT-Grid project, the software components for virtualized grid computing have been extended to comply with requirements of the CFD software

and its commercial users. End-to-end encryption of job data, secure access to the virtual machine for status extraction and computation control as well as simplified virtual machine creation using image derivation have been implemented. The local MaRC cluster has been used to test the components and evaluate the performance of the solution in a virtualized environment.

Further aspects of virtual machine management, such as distribution of virtual machines and security updates in virtual machines, are discussed in recent publications [3], [4].

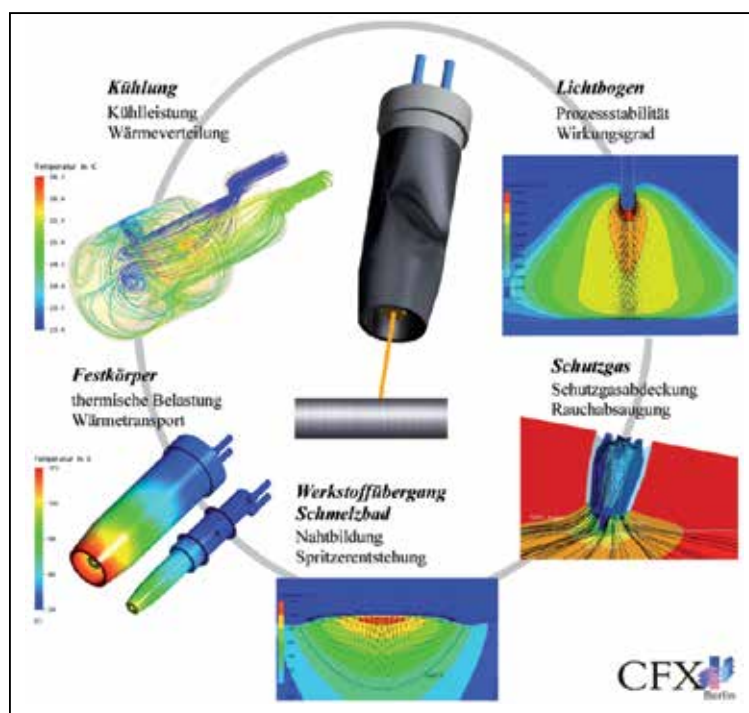


Figure 1:
PT-Grid project: Performing plasma physical
simulations within virtual machines

References:

1. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, N. Fallenbeck, B. Freisleben: Multi-Layered Virtual Machines for Security Updates in Grid Environments. In: Proceedings of 35th EUROMICRO Conference on Internet Technologies, Quality of Service and Applications, pp. 563-570, IEEE Press, 2009.
2. K. Haselhorst, M. Schmidt, R. Schwarzkopf, N. Fallenbeck, B. Freisleben: Efficient Storage Synchronization for Live Migration in Cloud Infrastructures. In: Proceedings of the 19th Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing, pp. 511-518, IEEE Press, 2011.
3. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, C. Strack, B. Freisleben. Checking Running and Dormant Virtual Machines for the Necessity of Security Updates in Cloud Environments. In: Proceedings of the 3rd IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (IEEE CloudCom 2011), pp. 239-246, IEEE Press, 2011.
4. M. Schmidt. Infrastructural Security for Virtualized Grid Computing. In: Dissertation, pp. 1-235, Südwestdeutscher Verlag für Hochschulschriften, ISBN 978-3-8381-3025-5, 2011.
5. TIMaCS Project. TIMaCS Website. <http://www.timacs.de>, 2012.
6. PT-Grid Project. PT-Grid Website. <http://www.pt-grid.de>, 2012.

Content-based Image and Video Analysis

M. Mühling, R. Ewerth, D. Seiler, E. Juhnke, K. Ballafkir, B. Freisleben
Fachbereich Mathematik und Informatik, Philipps-Universität Marburg

Wissenschaftler der Universität Marburg bringen die Bild- und Videoanalyse voran. Sie haben das Programm Videana entwickelt, das die wissenschaftliche Analyse von audiovisuellem Material unterstützt und Medienwissenschaftler davon entlastet, Bilder und Videos manuell mit Anmerkungen zu versehen. Neben Detektoren, die Kamera-bewegungen, Gesichter und Text erkennen, haben sie Konzeptdetektoren erforscht und entwickelt, die semantische Tags wie Auto oder Sport setzen, um die Suche nach Bildern und Videos mit bestimmten Inhalten zu erleichtern.

High performance computing plays an important role in the field of content-based image and video analysis due to the necessary hardware requirements particularly in the field of video retrieval. The high performance cluster MaRC at the University of Marburg has been used to support research efforts of two projects that are related to content-based image and video analysis. The first project funded by the German Research Foundation (DFG) is entitled “Methods and Tools for Computer-Assisted Media Analysis”, and the second project funded by the German Ministry of Education and Research (BMBF) is called “MediaGrid: Distributed Analysis and Use of Media Data”.

The project “Methods and Tools for Computer-Assisted Scientific Media Research” supports media scientists in performing studies associated with film analysis. In this context, the video content analysis toolkit Videana [2] has been developed to support the scholarly analysis of audio-visual material and to relieve media scholars from the time-consuming task of annotating images and films manually. Videana provides state-of-the-art video analysis algorithms for shot boundary detection, camera motion estimation, face detection, audio segmentation, text detection and video OCR, as well as person indexing and speaker clustering. Furthermore, special tools to support media-scientific investigations of user navigation behavior in Google Earth recordings have been incorporated [1].

In addition to these specialized detectors for particular concepts like camera motion, face or text, we have developed generic concept detectors for hundreds of semantic concepts, like car, beach, indoor/outdoor, sunset or violence. These concept detectors are used to automatically assign semantic tags to images and videos in order to facilitate content-based search and navigation (see Figure 1). The resulting index enables an efficient processing of search queries for large-scale multimedia databases

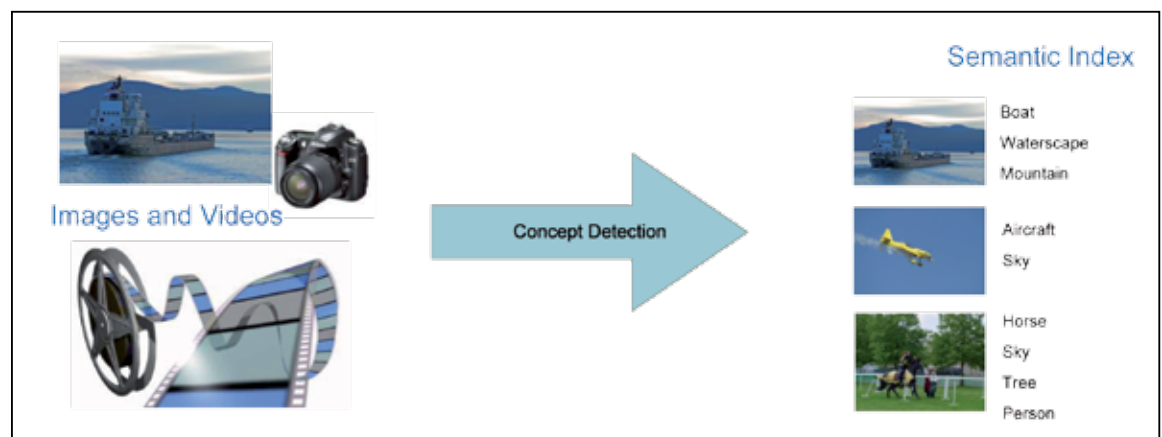
by mapping the query terms to the semantic concepts. Thus, the semantic index serves as an intermediate description to bridge the “semantic gap” between the data representation of images and video shots and their human interpretation. To support complex search queries, the vocabulary of semantic concepts has to cover a wide range of categories including objects, sites, scenes, personalities, events and activities. State-of-the-art visual concept detection systems mainly rely on local image features, such as scale-invariant feature transform (SIFT) descriptors [5]. Similar to the representation of documents in the field of text retrieval, an image or shot can then be represented as a bag of visual words by mapping the local descriptors to a pre-computed visual vocabulary. In this respect, we have analyzed the impact of spatial extents of SIFT descriptors on the quality of visual concept detection [7]. Furthermore, we have leveraged the bag of words approach for audio features to enhance video concept detection and have proposed multiple kernel learning as the appropriate fusion scheme to combine them with state-of-the-art visual features [10]. We have also shown that the additional use of object detection results as an additional input for concept classifiers leads to a clear performance improvement [6][9]. In this context, we have introduced an extension of the random Hough forest for the purpose of multi-class object detection in order to reduce processing time [8]. Another problem in the field of concept detection is the difference in the visual appearance of semantic concepts across different domains, such as news videos and user-generated YouTube videos. To improve the cross-domain capabilities of concept detectors, we have investigated robust and adaptive concept detection approaches [3]. Finally, we have developed a long-term incremental web-supervised concept learning approach [4] that exploits social web resources as training data and thus minimizes the human effort for building concept models.

A new learning framework called Random Savanna has been proposed to deal with noisy and user-tagged web images. The feasibility of building concept models from web resources has been demonstrated for several concept classes.

The evaluations associated with all of these proposals are based on large sets of images and videos, and in some cases several hundreds of visual concepts had to be trained and tested. For these purposes, the MaRC cluster has been used extensively.

We also have participated in the semantic indexing task, also called concept detection or high-level

feature extraction, of the annually held TREC Video Retrieval Evaluation (TRECVID) conference series [11]. This important international event provides a forum for researchers to compare their approaches on a common test bed and discuss video retrieval results. The amount of video data as well as the number of concepts to be detected in the semantic indexing task has been increased every year. Last year, a large set of 346 concepts had to be detected and the data set consisted of 600 hours of Internet archive videos. The intensive use of the computing cluster MaRC allowed us to fully participate and achieve top results in the semantic indexing task with its large computational requirements [6][9].



References:

1. P. Abend, T. Thielmann, R. Ewerth, D. Seiler, M. Mühling, J. Döring, M. Grauer, B. Freisleben, Geobrowsing the Globe : A Geovisual Analysis of Google Earth Usage. In Online Proc. of: Linking GeoVisualization with Spatial Analysis and Modeling (GeoViz), pp. 9-11, 2011.
2. R. Ewerth, M. Mühling, T. Stadelmann, J. Gllavata, M. Grauer, B. Freisleben, Videana: A Software Tool for Scientific Film Studies. Digital Tools in Media Studies, Transcript Verlag Bielefeld, 101–116, 2008.
3. R. Ewerth, M. Mühling, and B. Freisleben, Robust Video Content Analysis via Transductive Learning. ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, scheduled for publication in 2011.
4. R. Ewerth, K. Ballafkir, M. Mühling, D. Seiler, B. Freisleben, Long-Term Incremental Web-Supervised Learning of Visual Concepts via Random Savannas. IEEE Transactions on Multimedia, scheduled for publication in 2012.
5. D. G. Lowe, Distinctive Image Features from Scale-Invariant Keypoints. International Journal of Computer Vision, Vol. 60, No. 2, pp. 91-110, 2004.
6. M. Mühling, R. Ewerth, T. Stadelmann, B. Shi, and B. Freisleben, University of Marburg at TRECVID 2010: Semantic Indexing. In Proc. of the TREC Video Retrieval Evaluation Workshop (TRECVID'10), 2010.
7. M. Mühling, R. Ewerth, and B. Freisleben, On the Spatial Extents of SIFT Descriptors for Visual Concept Detection. In Proc. of the 8th International Conference on Computer Vision Systems, pp. 71-80, 2011.
8. M. Mühling, R. Ewerth, B. Shi, and B. Freisleben, Multi-Class Object Detection with Hough Forests Using Local Histograms of Visual Words. In Proc. of 14th International Conference on Computer Analysis of Images and Patterns (CAIP), pp. 386-393, 2011.
9. M. Mühling, K. Ballafkir, R. Ewerth, and B. Freisleben, University of Marburg at TRECVID 2011: Semantic Indexing. In Proceedings of the TREC Video Retrieval Evaluation Workshop (TRECVID'11), 2011.
10. M. Mühling, R. Ewerth, J. Zhou, and B. Freisleben, Multimodal Video Concept Detection via Bag of Auditory Words and Multiple Kernel Learning. In Proc. of the 18th International Conference on MultiMedia Modeling, pp. 40-50, 2012.
11. A. F. Smeaton, P. Over, and W. Kraaij, Evaluation Campaigns and TRECVID. In Proceedings of the 8th ACM International Workshop on Multimedia information Retrieval, pp. 321–330, 2006.

Adaptive numerical wavelet frame methods for elliptic/parabolic operator equations, inverse problems and stochastic evolution equations

Stephan Dahlke, Ulrich Friedrich, Stefan Kinzel, Dominik Lellek
AG Numerik und Optimierung, Fachbereich Mathematik und Informatik, Philipps-Universität Marburg

Ob Luftströmung, Wärmeleitung oder elektromagnetische Felder: viele Phänomene des Alltags werden in der Mathematik mit partiellen Differentialgleichungen beschrieben. Die meisten dieser Gleichungen lassen sich – wenn überhaupt – nur näherungsweise lösen. Wissenschaftler der Universität Marburg arbeiten an neuen Lösungswegen für partielle Differentialgleichungen. Dabei setzen sie adaptive Wavelet-Verfahren ein. Mit diesen Verfahren bestimmen und approximieren die Forscher gezielt die Teile des Problems, die viel zur Lösung beitragen, und nutzen damit die Rechenzeit effizient.

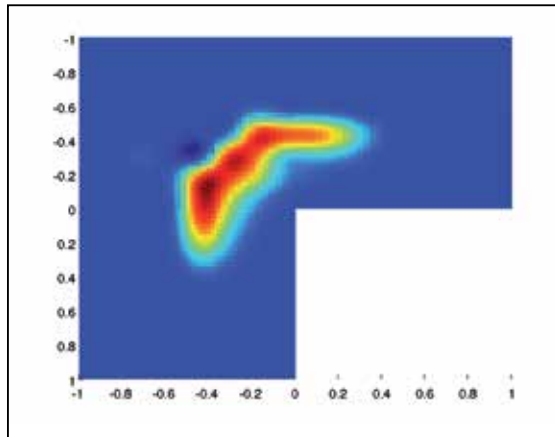
Many real-world phenomena are modelled by partial differential or integral equations. Prominent examples are elliptic equations on domains $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Even in relatively low dimensions, the discretization of the equations usually leads to systems involving millions of unknowns. In such a situation, for the efficient numerical computation of a highly accurate approximate solution, adaptive schemes are often indispensable. In recent years, adaptive methods based on wavelets have been brought into focus. It is known that wavelets are predestined to resolve well local phenomena, such as singularities, while smooth data can be coded with very few coefficients. In different research projects, we have developed, implemented and tested new adaptive wavelet algorithms for the solution of well-posed elliptic and parabolic operator equations. Moreover, another field of our current research is the adaptive solution of inverse (ill-posed) problems and of stochastic evolution equations, respectively.

The starting point of our numerical methods is the construction of a proper wavelet collection spanning the solution space. In order not to be forced to cope with the often complicated construction of a wavelet Riesz basis on a general domain, we have focused on the weaker concept of wavelet frames [3, 4]. Based on this approach, in [9] a new type of parallel adaptive wavelet frame methods has been introduced. These schemes have been successfully tested on the MARC Linux Cluster placed at the Marburg University Computing Center. In particular, it has turned out that these new wavelet algorithms potentially generate significantly sparser approximations than comparable standard finite element methods. In the meantime, these algorithms have been generalized to nonlinear problems, [7, 8], see Figure 1. Splitting the domain into overlapping parametric images of unit cubes and treating the parts in parallel turned out, not only to be feasible but also, to be asymptotically optimal, since the convergence rate realizes the theoretical best

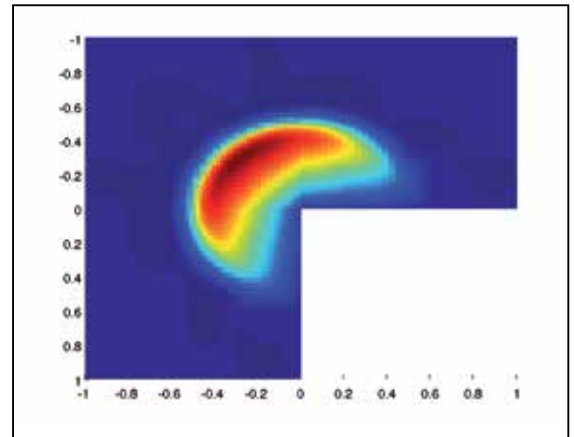
possible rate, see Figure 2. The methods have again been tested on MARC. Another approach to treat complicated domains is to employ newly developed generalized tensor wavelets [1]. These wavelets are based on nonoverlapping domain decompositions combined with suitable extension operators and give rise to potentially very sparse approximations. These tensor wavelets are in particular well-suited for the treatment of highdimensional problems.

Another focus was the efficient numerical treatment of parameter identification problems [5]. Special emphasis was laid on inverse parabolic problems [6]. In that project, recent results on the regularization of ill-posed problems by iterated soft shrinkage were combined with adaptive wavelet algorithms for the forward problem, see Figure 3. The algorithms have been applied to an inverse parabolic problem that stems from the biological problem of determining the critical parameters that describe the mutual interactions of genes in embryos at an early state of development. This problem leads to a nonlinear, vector-valued parabolic partial differential equation. The forward problems were solved using adaptive algorithms that are based on the tensor wavelets mentioned above. The 2D experiments consisted of up to 84 sets of parameters, computed in parallel, and for each experiment 20000 parabolic equations were solved on MARC.

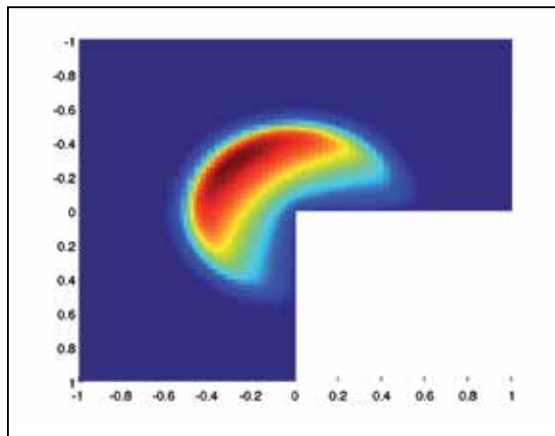
We have also been concerned with the numerical treatment of stochastic elliptic and evolution equations, see Figure 4. Usually, the stochastic components give rise to a dramatic increase of complexity since many simulations need to be performed to obtain a reasonable result. Fortunately these simulations have to be stochastically independent and thus can be done in parallel. Exploiting this situation on MARC reduces the time-consumption drastically. Once again, adaptive algorithms have been used, and the numerical experiments clearly indicate that adaptivity pays [2].



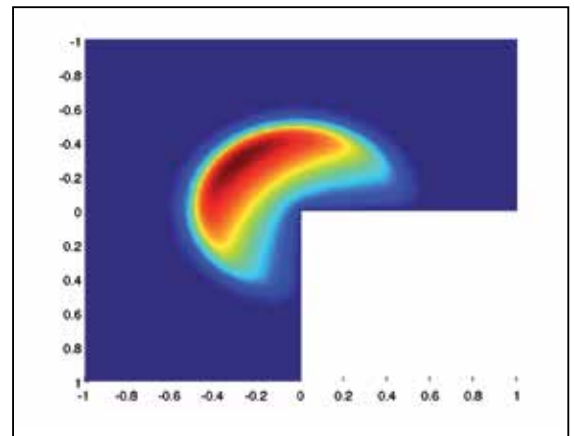
(a) 20 loops



(b) 40 loops



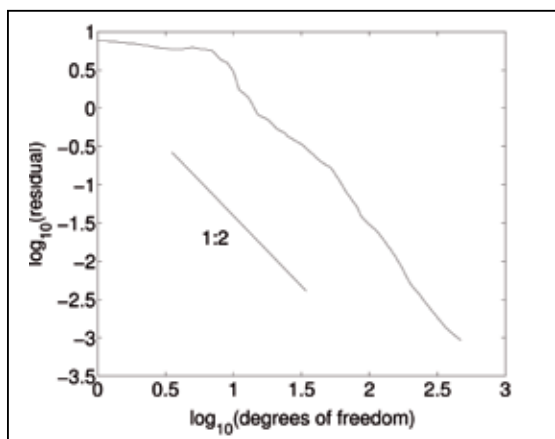
(c) 60 loops



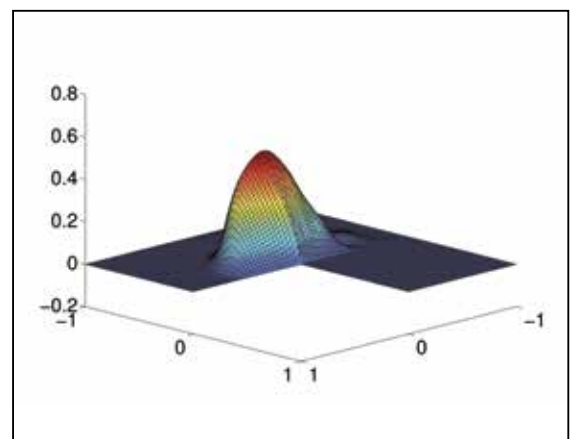
(d) 120 loops

Figure 1:

Solution of a nonlinear elliptic differential equation on the L-shaped domain using an iterative adaptive domain decomposition method.



(a) Convergence rate



(b) One local part

Figure 2:

(a) Convergence rate of a wavelet domain decomposition method for a nonlinear elliptic partial differential equation.

(b) One local part of an approximate solution.

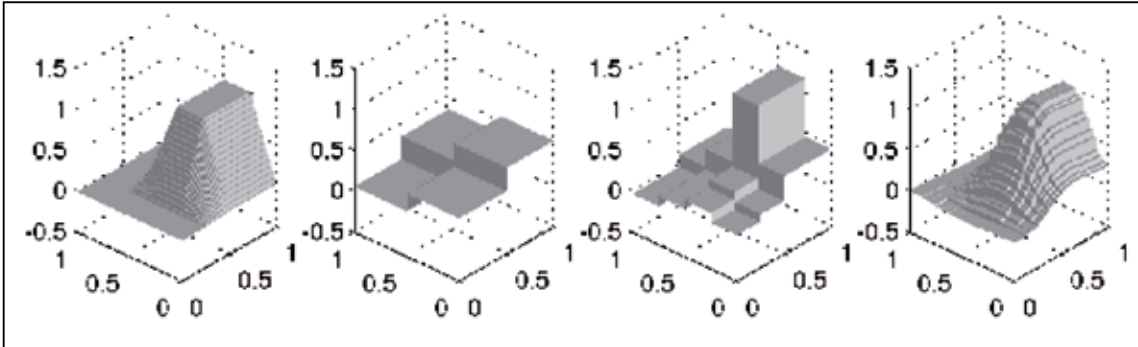
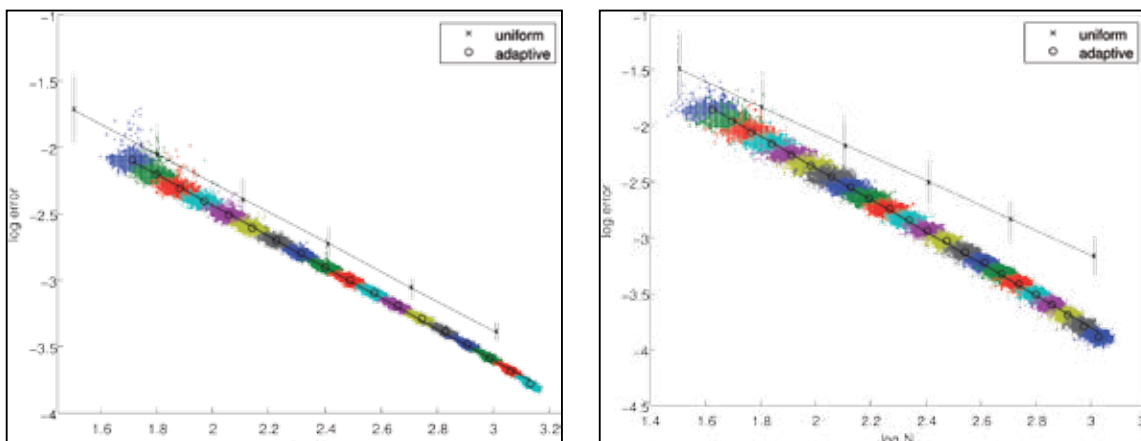


Figure 3:

Parameter reconstruction for an ill-posed problem given by a parabolic PDE in 2 spatial dimensions by means of soft shrinkage. Snapshot at $t = 0.5$. Left to right: Unknown parameter and its reconstructions for different values of the shrinkage parameter $\alpha = 5e-6, 1e-6, 1e-7$.



(a) Random right-hand side f_1

(b) Random right-hand side f_2

Figure 4:

Uniform and adaptive approximation rates of the stochastic Poisson equation with random right-hand sides f_1, f_2 , which are generated based on two different distributions. Here, e.g., every single color reflects 1000 computations.

References:

1. N. Chegini, S. Dahlke, U. Friedrich, R. Stevenson, Piecewise tensor product wavelet bases by extension and approximation rates, Preprint No. 101, DFG-SPP 1324 "Extraction of Quantifiable Information from Complex Systems", to appear in: Math. Comp.
2. P. Cioica, S. Dahlke, N. Döhning, S. Kinzel, F. Lindner, T. Raasch, K. Ritter, R. Schilling, Adaptive wavelet methods for the stochastic Poisson equation, 2011, BIT.
3. S. Dahlke, M. Fornasier, T. Raasch, Adaptive frame methods for elliptic operator equations, Adv. Comput. Math. 27 (1), 27–63, 2007.
4. S. Dahlke, M. Fornasier, T. Raasch, R. Stevenson, M. Werner, Adaptive frame methods for elliptic operator equations: The steepest descent approach, IMA J. Numer. Anal. 27 (4), 717–740, 2007.
5. S. Dahlke, M. Fornasier, T. Raasch, Multilevel preconditioning for adaptive sparse optimization, Math. Comp. 81 (2012), 419–446.
6. S. Dahlke, U. Friedrich, P. Maass, R.A. Ressel, An adaptive wavelet method for parameter identification problems in parabolic partial differential equations, Preprint No. 86, DFG-SPP 1324 "Extraction of Quantifiable Information from Complex Systems", submitted.
7. J. Kappei, Adaptive frame methods for nonlinear elliptic problems, Appl. Anal. 90 (8) 2011, 1323–1353.
8. D. Leliek, Adaptive wavelet domain decomposition methods for nonlinear elliptic equations, Philipps-Universität, FB 12, Bericht 2011–05, to appear in: Numer. Methods Partial Differ. Equations.
9. M. Werner, Adaptive wavelet frame domain decomposition methods for elliptic operator equations, Dissertation, Philipps-Universität Marburg, 2009.

On Whitehead's asphericity conjecture

Stephan Rosebrock
Frankfurt

A 2-complex K is called *aspherical* if its second homotopy group is trivial. This means, every continuous map $f: S^2 \rightarrow K$ is homotopy equivalent to the trivial map where the 2-sphere S^2 is mapped to a single point. The Whitehead-conjecture states that any subcomplex of an aspherical 2-complex is itself aspherical. Whitehead posed this 1941 as a question (see [1]) and it is still open although for many classes of 2-complexes it is known to be true (see [2] for an overview).

Let $P = \langle x_1, \dots, x_n \mid R_1, \dots, R_m \rangle$ be a finite presentation where each relator is of the form $x_i x_j = x_j x_k$. Such a presentation is called a *labeled oriented graph* presentation, or short, LOG-presentation because it is represented by a labeled oriented graph T_P in the following way: For each generator x_i of P , T_P has a vertex labeled x_i and for each relator $x_i x_j = x_j x_k$, T_P has an oriented edge from the vertex x_i to the vertex x_k labeled by x_j . If T_P is a tree we call it a *labeled oriented tree* or LOT and P a *LOT-presentation*. The 2-complex modeled on P will be called a LOG (or LOT)-complex. LOTs are important for the Whitehead-question because of the following Theorem:

Theorem (Howie 1983): Let L be a finite 2-complex and e in L a 2-cell. If L 3-deforms to a single vertex then $L-e$ 3-deforms to a LOT complex K .

This implies that LOT-complexes are good testcases for the Whitehead-conjecture. For a given 2-complex it cannot be decided whether it is aspherical or not. Nevertheless we developed a computer program which runs parallel on the CSC Cluster over three years now which constructs reduced surface diagrams over LOTs. The program

has checked roughly estimated about 150 billion LOTs, only checking those LOTs which are not known to be aspherical by other methods. Certainly none of the LOTs is thereby proven to be aspherical but the program found reduced spherical diagrams over about 100 different LOTs which have a certain more general structure than spherical diagrams which were known before.

In the last two years systematically LOTs which are intervals up to 13 generators were checked. In the future, LOTs which are not intervals will be considered. Also bigger diagrams of small LOTs will be checked more systematically.

A publication, where an example found by the CSC is presented, will appear soon (see [3]). The program is still running on the CSC and may hopefully find a Whitehead-counterexample in the future.

References

1. J.H.C. Whitehead. On adding relations to homotopy groups, Ann. of Math. (2) 42, (1941).
2. S. Rosebrock. The Whitehead-Conjecture - an Overview, Siberian Electronic Mathematical Reports 4; (2007); S. 440 - 449.
3. J. Harlander and S. Rosebrock. On Primeness of Labeled Oriented Trees; to appear in Knot Theory and its Ramifications (2011).

Pruning next-generation sequencing data for microbial fungal community assessment on balsam poplar

Dr. Miklós Bálint,
Biodiversität und Klima Forschungszentrum (BiK-F)

Viele Pflanzen leben in Symbiose mit Pilzen. Die Pilze beeinflussen die Fitness und Evolution der Pflanzen. Wissenschaftler des Biodiversität- und Klima-Forschungszentrums gehen nun der Frage nach, ob Pilze auch die Anpassung von Bäumen an Extremstandorte und Mikroklimata beeinflussen. Ihre Ergebnisse deuten an, dass eine Baumart und die Pilze, die auf den Blättern dieser Baumart wachsen, in koevolutionärer Beziehung stehen, sich also aneinander anpassen. Die Ergebnisse weisen zudem darauf hin, dass die Infektion der Blätter durch Pilze weniger zufällig ist, als bisher gedacht.

Leaf-associated fungi, e.g. foliar endophytes, may have complex effects on the adaptation of host plants, such as conferring tolerance to drought, high salinity, grazing, and to pathogens. We are interested in whether the leaf-associated fungal microbiome plays a role in the adaptation of trees to particular climatic niches. Our model system is balsam poplar, a boreal tree species with a broad distribution in northern North America.

Our results show signals for a coevolutionary relationship between a tree species and its foliar fungal microbiome. The results also suggest that the infection of tree leaves by fungi is far less accidental than previously considered.

We obtained a metagenomic dataset through 454 pyrosequencing (~200.000 reads). Processing next-generation sequencing data is computationally demanding. We applied a novel method (implemented in the AmpliconNoise pipeline, Quince et al. 2011) to filter different sequencing error types in our 454 data. These pruning steps were run on several cores of the CSC. The access to the CSC also facilitated further downstream analyses.

Entwicklung von Methoden und Algorithmen für genomweite Assoziationsstudien

R. Pahl, I. Jarick, H. Schäfer

Institut für Medizinische Biometrie und Epidemiologie, Philipps-Universität Marburg

Tritt ein bestimmter Gen-Abschnitt bei kranken (im Gegensatz zu gesunden) Menschen auffällig häufig auf, könnte dies die Krankheit auslösen. Bei genomweiten Assoziationsstudien wollen Forscher solche Zusammenhänge aufdecken. Sie vergleichen die Erbinformation mehrerer tausenden Menschen, um Teile davon mit einer Krankheit in Verbindung zu bringen. Die Datenmasse, die bei den Studien anfällt, ist enorm. Entsprechend lange dauert es, sie auszuwerten. Forscher der Universität Marburg haben nun eine parallelisierte Version ihres PERMORY-Algorithmus entwickelt, der die Analyse beschleunigt.

Genomweite Assoziationsstudien dienen der Identifikation von genetischen Varianten, die an der Entstehung komplexer Erkrankungen beteiligt sind. Die untersuchten Kollektive umfassen bis zu mehrere tausend betroffene Patienten (Fälle) und Kontrollen im sogenannten Fall-Kontroll-Design, wobei mit Hilfe kommerzieller Chips sehr dichte genetische Markernetze von bis zu 5 Mio. sogenannter SNP-Marker untersucht werden, so dass sich insgesamt außerordentlich umfangreiche Datenstrukturen ergeben.

Ein Schwerpunkt unserer Arbeit lag in der Entwicklung von Verfahren zur Analyse neuer Markersysteme wie Copy Number Variations. Ein zweiter Schwerpunkt war die Weiterentwicklung von schnellen Algorithmen für statistische Permutationstests, die dazu dienen, die statistischen Fehlerrisiken falsch positiver Befunde genomweit zu kontrollieren, ohne dass statistische Verteilungsannahmen gemacht

werden müssen. Es wurde eine parallelisierte Version des PERMORY-Algorithmus entwickelt, der eine weitere erhebliche Beschleunigung der Analyse ermöglicht. Bei der Parallelisierung des PERMORY-Algorithmus haben wir mit der Technischen Hochschule Mittelhessen (Fachbereich Mathematik, Naturwissenschaften und Informatik, Prof. Dr. Th. K. Letschert) im Rahmen einer Bachelor-Arbeit (V.Steiß, B.Sc.) zusammengearbeitet. Weiterhin haben wir die optimalen zweistufigen Designs für genomweite Assoziationsstudien zu Mehrstufendesigns weiterentwickelt, bei denen das volle Markernetz nur in einer Teilstichprobe genotypisiert wird und dieses dann über die einzelnen Stufen auf die interessierenden Marker fokussiert wird, um die Genotypisierungskosten zu reduzieren. Die Berechnung der statistischen Eigenschaften wie Fehlerrisiken 1. und 2. Art und der Studienkosten sowie die Optimierung ist numerisch sehr aufwendig und erfordert hohe Rechnerleistung.

Referenzen:

1. Pahl R, Schäfer H (2010) PERMORY: an LD-exploiting permutation test algorithm for powerful ge-nome-wide association testing. *Bioinformatics* 26(17):2093-2100.
2. Steiß V, Letschert T, Schäfer H, Pahl R (2012) PERMORY-MPI: A program for high-speed parallel permutation testing in genome-wide association studies. *Bioinformatics Applications Note* (under revision).
3. Pahl R, Schäfer H, Müller H-H (2009) Optimal multi-stage designs - a general framework for efficient genome-wide association studies (GWAS). *Biostatistics* 10(2):297-309.
4. Scherag A, Dina C, Hinney A, Vatin V, Scherag S, Vogel CIG, Müller TD, Grallert H, Wichmann H-E, Balkau B, Heude B, Jarvelin M-R, Hartikainen A-L, Levy-Marchal C, Weill J, Delplanque J, Körner A, Kiess W, Kovacs P, Rayner NW, Prokopenko I, McCarthy MI, Schäfer H, Jarick I, Boeing H, Fisher E, Reinehr T, Heinrich J, Rzehak P, Berdel D, Borte M, Biebermann H, Krude H, Rosskopf D, Rimbach C, Rief W, Fromme T, Klingenspor M, Schürmann A, Schulz N, Nöthen MM, Mühleisen TW, Erbel R, Jöckel K-H, Moebus S, Boes T, Illig T, Froguel P, Hebebrand J, Meyre D. (2010) Two New Loci for Body-Weight Regulation Identified in a Joint Analysis of Genome-Wide Association Studies for Early-Onset Extreme Obesity in French and German Study Groups. *PLoS Genetics* 6(4):e1000916.
5. Jarick I, Vogel C, Scherag S, Schäfer H, Hebebrand J, Hinney A, Scherag A (2011) Novel common copy number variation for early onset extreme obesity on chromosome 11q11 identified by a genome-wide analysis. *Human Molecular Genetics* 20(4):840-852.
6. Scherag A, Jarick I, Grothe J, Biebermann H, Scherag S, Volckmar AL, Vogel CI, Greene B, Hebebrand J, Hinney A (2010) Investigation of a genome wide association signal for obesity: synthetic association and haplotype analyses at the melanocortin 4 receptor gene locus. *PLoS One* 5:e13967.

Entwicklung flexibler adaptiver Designs für klinische Studien

S. Irle, H. Schäfer

Institut für Medizinische Biometrie und Epidemiologie, Philipps-Universität Marburg

Klinische Studien, die die Wirksamkeit neuer Therapien überprüfen, müssen exakt geplant werden. Ob Größe der Stichprobe oder Zeitpunkt und Zahl geplanter Zwischenauswertungen: alle Rahmenbedingungen legen die Mediziner von vornherein fest. Bisher waren Fehler in der Planung entweder nicht zeitnah zu korrigieren oder die Mediziner mussten mit ungenauen Korrekturen leben. Forscher der Universität Marburg haben nun eine wegweisende statistische Methode entwickelt, die beides vereint: Ein Höchstmaß an Flexibilität sowie Präzision bei der nachträglichen Änderung der Rahmenbedingungen einer klinischen Studie.

Konfirmatorische klinische Studien dienen der Überprüfung der Wirksamkeit neuer Therapien bzw. dem Wirksamkeitsvergleich von Therapien, wobei die statistischen Fehlentscheidungsrisiken exakt und zuverlässig kontrolliert werden müssen. Mit konventionellen statistischen Methoden (statistische Tests) ist dies nur möglich, wenn das gesamte Design der Studie einschließlich Fallzahl und Nachbeobachtungsdauer im Voraus exakt festgelegt wird.

Wir entwickeln neue flexible statistische Methoden, um ohne Gefährdung der statistischen Fehlerkontrolle Designänderungen im Verlauf der Studie vornehmen und dabei aus den inzwischen gesammelten Daten lernen zu können. Typische Beispiele sind die Neufestlegung der statistischen Fallzahl, wenn sich herausstellt, dass die Effektstärke wesentlich von den in der Planung gemachten Annahmen abweicht, sowie die Änderung von Zeitpunkten und der Zahl eingeplanter Zwischenauswertungen. Bei Überlebenszeitstudien

ergeben sich zusätzliche statistische Anforderungen immer dann, wenn vorläufige Informationen von Patienten, die am Ende der Lernphase noch leben, für die Designänderung herangezogen werden sollen, wie z.B. das frühe radiologisch nachweisbare Ansprechen von Tumoren auf Chemotherapie. Wir haben das sogenannte Conditional Rejection Probability Prinzip (CRP) von Müller und Schäfer dahingehend erweitert, dass auch solche Informationen für die Durchführung von Designänderungen genutzt werden können, ohne die Kontrolle des statistischen Fehlerrisikos I. Art zu gefährden. Zu diesen Arbeiten gehören mathematisch-theoretische Entwicklungen für die mathematische Fundierung der Verfahren bei großen Stichprobenumfängen (Verteilungskonvergenz bestimmter bivariater stochastischer Prozesse). Um die Eigenschaften der Verfahren bei endlichen Stichprobenumfängen zu untersuchen, haben wir umfangreiche Simulationen auf dem MaRC-Cluster durchgeführt.

Referenz:

I. Irle S., Schäfer H. (2012), Interim Design Modifications in Time-to-Event Studies, Journal of the American Statistical Association, Available online, 10 Jan 2012.

Computational Neuroscience: Learning the Optimal Control of Coordinated Eye and Head Movements

Jochen Triesch, Sohrab Saeb, Cornelius Weber
Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Menschen sehen nur in einem Teil des Gesichtsfeldes scharf. Sie tasten die Umgebung daher mit 3 bis 4 Blicksprüngen pro Sekunde ab. Das Gehirn setzt die Einzelbilder zu einem Gesamteindruck zusammen. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies erforschen, wie das Gehirn die Bewegungen der Augen und des Kopfes koordiniert. Ihrem Modell zufolge stellt das Gehirn Optimalitätskriterien auf, die es bei der Koordination anwendet, und lernt schrittweise, welche Bewegungen effektiv sind.

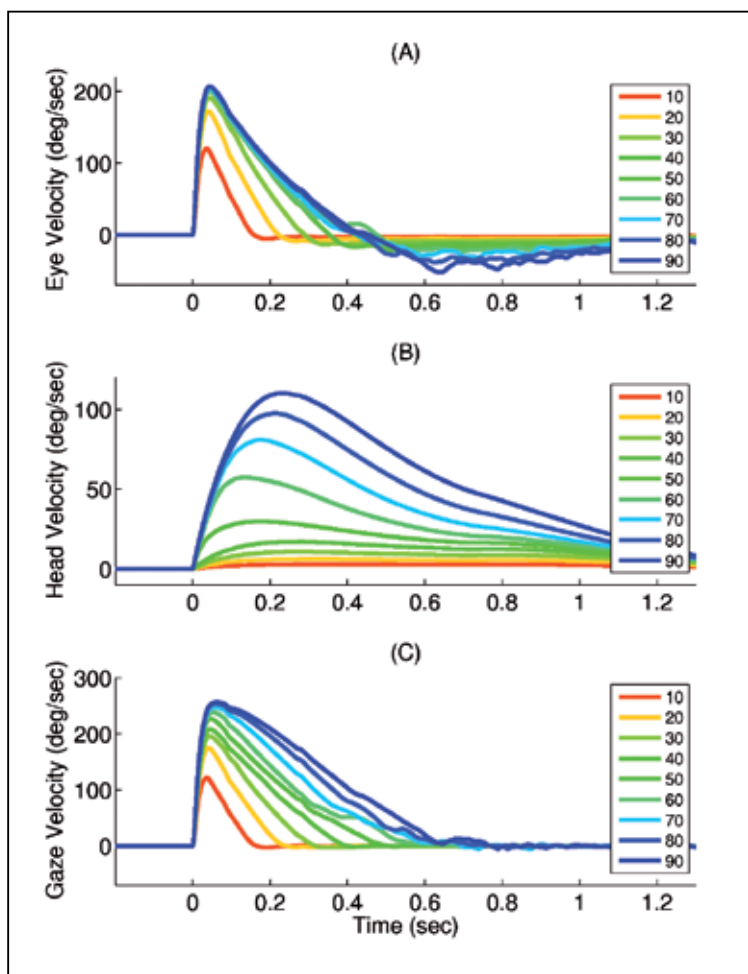


Figure 1:
Velocity profiles generated by the proposed model, for different gaze shift amplitudes in the head-free condition. (A) Eye, (B) head, and (C) gaze velocity profiles. The color codes for different gaze shift amplitudes in degrees (see the legends).

Human beings and many other species redirect their gaze towards targets of interest through rapid gaze shifts known as saccades. These are made approximately three to four times every second, and larger saccades result from fast and concurrent movement of the animal's eyes and head. Experimental studies have revealed that during saccades, the motor system follows certain principles such as respecting a specific relationship between the relative contribution of eye and head motor systems to total gaze shift. Various researchers have hypothesized that these principles are implications of some optimality criteria in the brain, but it remains unclear how the brain can learn such an optimal behavior. We propose a new model that uses a plausible learning mechanism to satisfy an optimality criterion. It uses an open-loop neural controller with a local adaptation mechanism that minimizes a proposed cost function. Simulations show that the characteristics of coordinated eye and head movements generated by this model match the experimental data in many aspects, including the relationship between amplitude, duration and peak velocity in head-restrained and the relative contribution of eye and head to the total gaze shift in head-free conditions. Our model is a first step towards bringing together an optimality principle and an incremental local learning mechanism into a unified control scheme for coordinated eye and head movements. In addition, it predicts the nature of the learning signals. The detailed analysis of the model has been possible by using the CSC computing clusters, where we used up to 64 nodes in parallel to run optimization code to fit model parameters and analyze the model.

Reference:

I. Saeb S, Weber C, Triesch J, 2011 Learning the Optimal Control of Coordinated Eye and Head Movements. PLoS Comput Biol 7(11): e1002253. doi:10.1371/journal.pcbi.1002253

Large-Scale Simulations of Learning in the Brain

Dr. Jörg Lücke

Computational Neuroscience and Machine Learning, Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Das Gehirn besitzt die Fähigkeit, Bilder und Geräusche zu erkennen und zu interpretieren. Kein künstliches System hat das bisher in vergleichbarem Maß erreicht. Denn Lernen wird erst seit Kurzem in künstliche Systeme eingebaut und hat noch nicht die ausgereiften Eigenschaften des Lernens bei Menschen und Tieren erreicht. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies wollen dies ändern. Sie simulieren Lernprozesse, die im Gehirn ablaufen. Dabei erfahren sie, wie Lernen funktioniert. Mit diesem Wissen wollen die Forscher Technik entwickeln, die die parallelen Architekturen in Computer-Clustern nutzt, um aus Daten zu lernen.

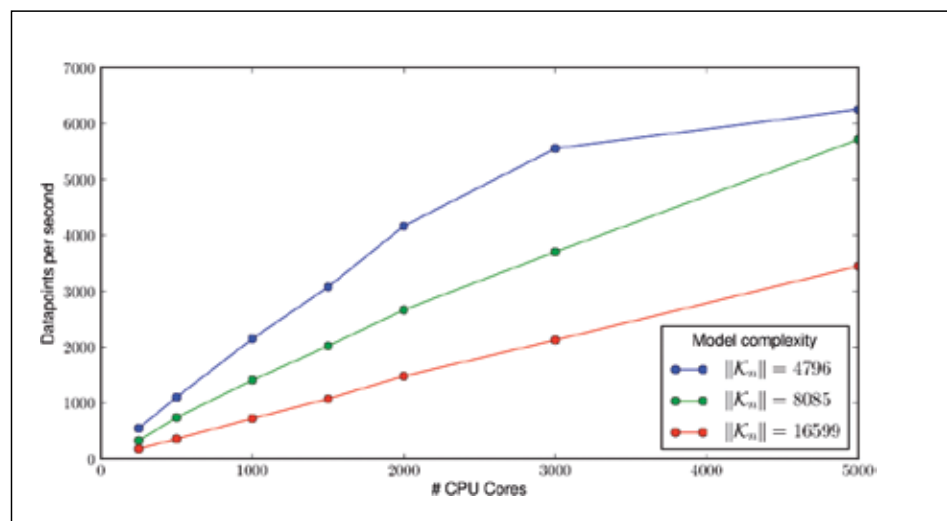
The brain's ability to recognize and interpret images, sounds and other sensory data is unmatched by any artificial system, so far. Much or most of this ability neural brain circuits acquire through a long process of small improvements while being exposed to sensory stimuli. This process we call 'learning', and it has been recognized in recent years as the key to build intelligent systems.

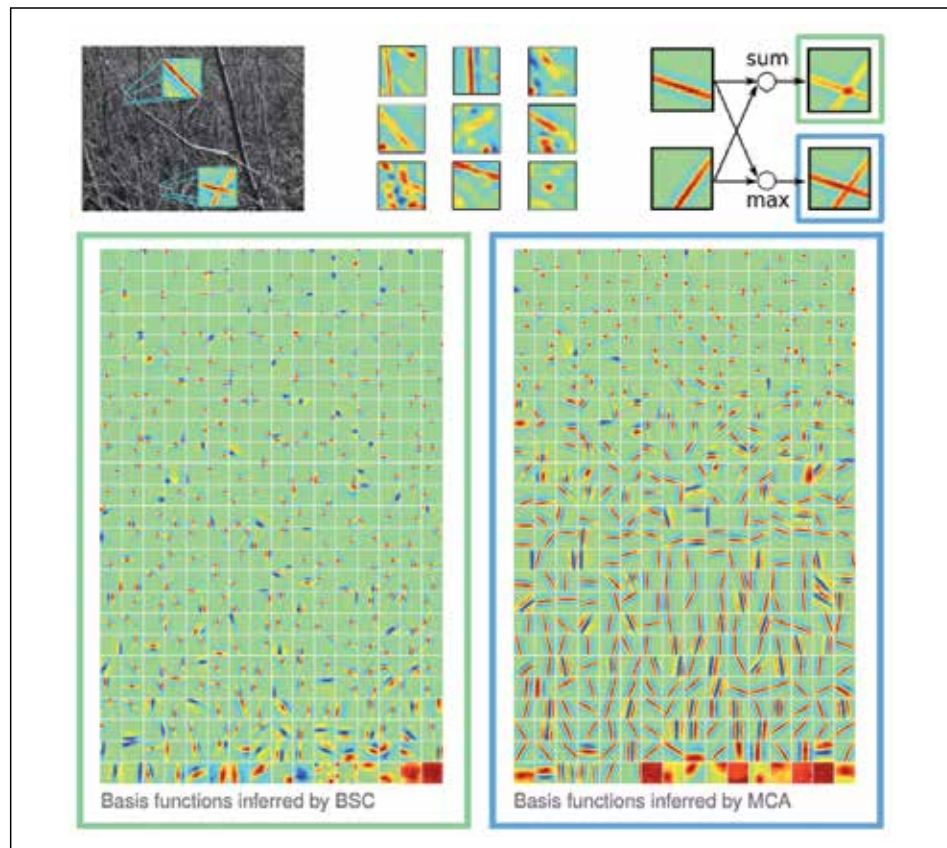
Learning is difficult, however, both in terms of our subjective experience and if analyzed on the ground of modern information theory. Learning to create artificial intelligence is difficult because a lot of processing power is required. By using the large-scale computational facilities of the CSC Frankfurt (Loewe-CSC cluster etc.), such large processing power is provided, however. By combining the provided computational resources with state-of-the-art approaches in the field of Machine Learning, we are able to simulate learning in nervous circuits of the brain. Learning in circuits of the visual cortex that usually requires months or years can in this way be simulated in hours or

days. The results of these simulations give us key insights into the functioning of learning and thus of intelligence as a whole. At the same time, the made experiences allow us to build computer applications that learn to recognize images or other types of data.

Studies of learning using CSC clusters are part of different projects partly funded by the Ministry of Research and Education (project: Bernstein Focus Neurotechnology Frankfurt), the Honda Research Institute in Europe and by the German Research Foundation (DFG). Like the brain, computer clusters combine many parallel elements that work together to learn from data. The challenge is the development of learning technology that is able to exploit this parallel architectures (compare Fig. 1). In some projects, we could understand important functions of brain circuits and can predict the behavior of neurons in the visual cortex (Fig. 2).

In others we make use of the gained insights to build artificial learning systems that perform similar to humans, e.g., in image recognition tasks.





Projects

BMBF project: Bernstein Focus Neurotechnology
Frankfurt

DFG project: LU 1196/4-I: Non-linear Probabilistic

Models Honda-RI/FIAS project: LOROC

References:

1. G. Exarchakis, M. Henniges, J. Eggert, and J. Lücke (2012). Ternary Sparse Coding. International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA), 2012, in press.
2. J. A. Shelton, J. Bornschein, A.-S. Sheikh, P. Berkes, and J. Lücke (2011). Select and Sample < A Model of Efficient Neural Inference and Learning. Advances in Neural Information Processing Systems 24, 2618-2626, 2011.
3. Z. Dai, J. Shelton, J. Bornschein, A.-S. Sheikh, and J. Lücke (2011). Combining approximate inference methods for efficient learning on large computer clusters. Paper at NIPS Workshop: Big Learning.
4. G. Puertas*, J. Bornschein*, and J. Lücke (2010). The Maximal Causes of Natural Scenes are Edge Filters. Advances in Neural Information Processing Systems 23, 1939-1947, 2010. *joint first authorship
5. J. Bornschein, Z. Dai, and J. Lücke (2010). Approximate EM Learning on Large Computer Clusters Paper at NIPS Workshop: Learning on Cores, Clusters and Clouds.
6. J. Lücke and J. Eggert (2010). Expectation Truncation and the Benefits of Preselection in Training Generative Models. Journal of Machine Learning Research 11:2855-2900, 2010.
7. M. Henniges, G. Puertas, J. Bornschein, J. Eggert, and J. Lücke (2010). Binary Sparse Coding. Proc. LVA/ICA 2010, LNCS 6365, 450-457

Simulation of non-native protein ensembles containing disulfide bonds

Prof. Dr. H. Schwalbe, Robert Silvers
Center for Biomolecular Magnetic Resonance, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Proteine sind vielseitige Helfer im Körper des Menschen: Sie verleihen den Zellen Struktur, transportieren Stoffe oder erkennen Signale. Forscher der Universität Frankfurt haben nun herausgefunden, wie die Ausbildung neuer S-S-Bindungen, sogenannte Disulfidbrücken, die Form und Dynamik der Proteinketten beeinflussen. Da zum Beispiel Antikörper aus Proteinketten bestehen, könnte dieses Wissen beitragen, Form und Dynamik von Antikörpern besser zu verstehen. Die Ausbildung der richtigen Disulfidbrücken ist zudem essentiell für die Frage, ob Proteine richtig oder falsch falten. Die Falschfaltung ist verknüpft mit Proteinfaltungskrankheiten, etwa Diabetes Typ-II, Alzheimer und Parkinson.

Scientific background. Intramolecular disulfide bonds play crucial roles in protein folding and stability. Approximately 15% of the total human proteome and ~65% of extracellular, secreted proteins and the extracellular portions of membrane proteins contain disulfide bonds. In oxidative folding, the collapse of hydrophobic residues and formation of disulfides bonds are linked and both restrain the conformational space accessible to unfolded states of proteins, lower their entropy and likely enhance cooperativity in protein folding. NMR spectroscopical data such as residual dipolar couplings (RDCs) report on both dynamics and residual structure. The compactness of the unstructured state can be characterized by diffusion-ordered NMR spectroscopy (DOSY) but also by complementary techniques, notably small-angle X-ray scattering (SAXS). In order to predict structure and dynamics of these state ensembles, theoretical models help to corroborate experimental data. Random coil models describe the polypeptide chain as heteropolymer and can be

used to generate ensembles allowing the simulation of experimental data on a per-residue basis. The following single disulfide mutants ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-HEWL, ISS⁶⁴⁻⁸⁰-HEWL, ISS⁷⁶⁻⁹⁴-HEWL and ISS³⁰⁻¹¹⁵W62G-HEWL were studied by ensemble calculations in order to elucidate the impact of disulfide bonds on structure, dynamic and compactness of polypeptide chains.

Procedure. For the six protein mutants 0SS-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵W62G-HEWL, ISS⁶⁴⁻⁸⁰-HEWL, ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL and ISS⁷⁶⁻⁹⁴-HEWL, in each case 500.000 structures have been generated by the flexible meccano algorithm and subsequently analyzed by PALES and HYDROPRO yielding the residual dipolar coupling and distributions of the radius of gyration (R_g) and hydration (R_h), respectively. The calculation time used for the generation of ensembles greatly correlates with the presence of a disulfide bond and with the loop size of the disulfide bond (Figure 1).

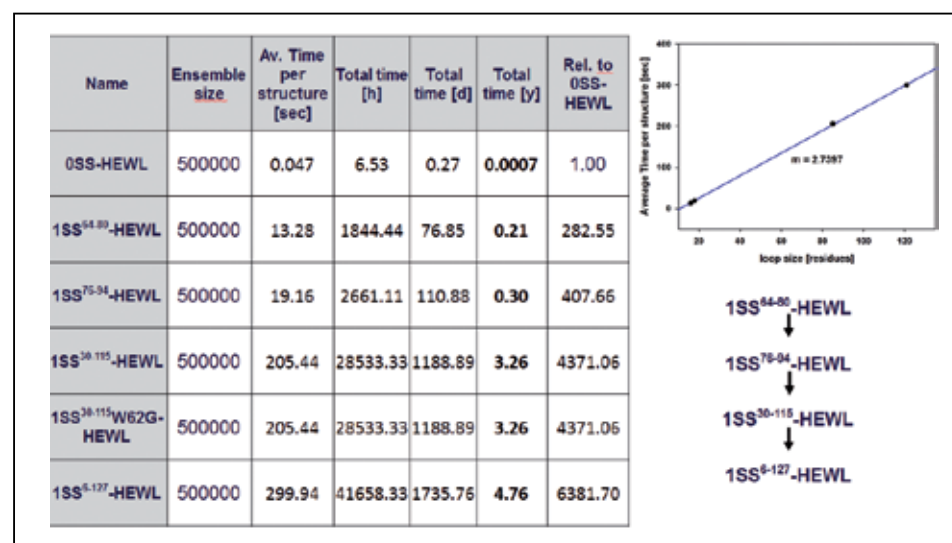


Figure 1: Summary of the ensemble calculations run at the CSC cluster 'Fuchs'. The total time is referenced according to the use of a single core setup with 2.2 GHz. Calculation time is linear proportional to the loop size.

Figure 2:
Simulated residual
dipolar couplings of
OSS-HEWL, ISS⁶⁴⁻⁸⁰-
HEWL, ISS⁷⁶⁻⁹⁴-
HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-
HEWL and
ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL.

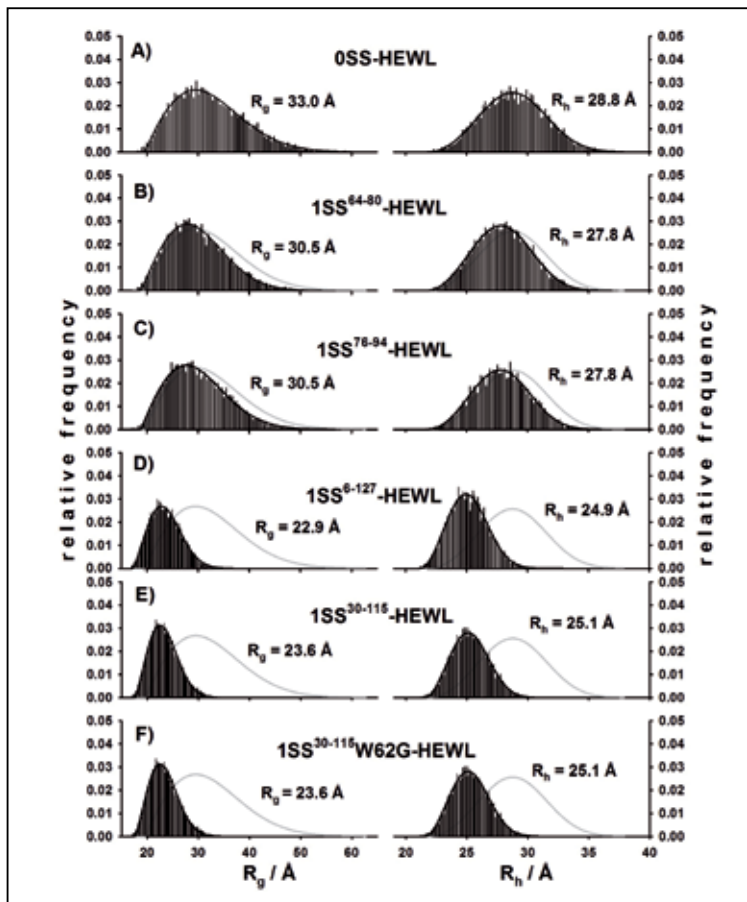
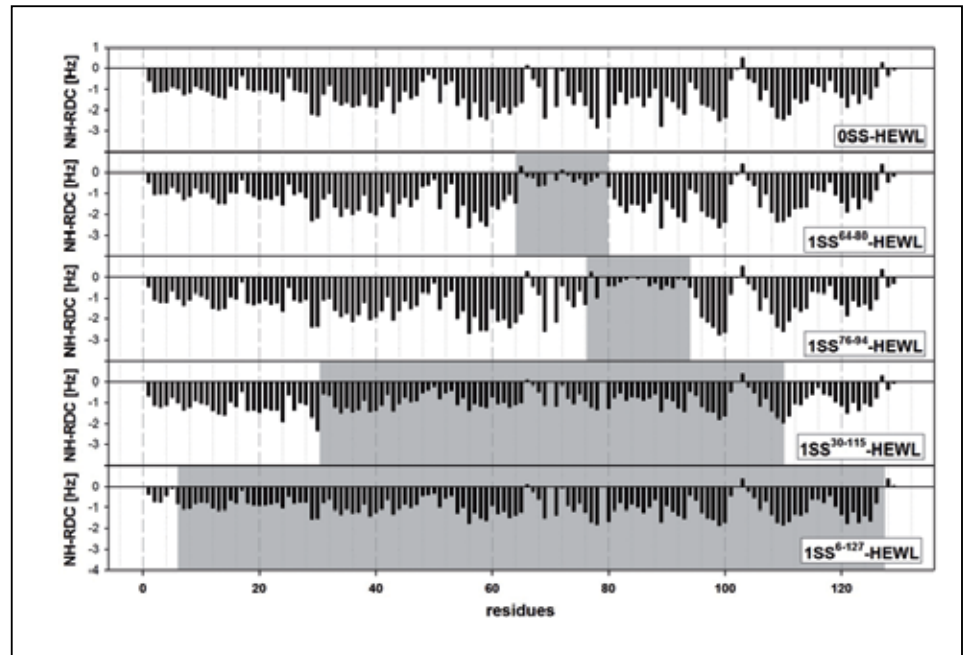


Figure 3:
 R_g and R_h distributions of OSS-HEWL, ISS⁶⁴⁻⁸⁰-HEWL, ISS⁷⁶⁻⁹⁴-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵W62G-HEWL and ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL.

Compared to a single core setup of 2.2 GHz ensemble calculations alone (without subsequent analysis) would have taken around 11.8 years. Access to the CSC cluster 'Fuchs' allowed us to calculate these 3,000,000 structures in less than 14 days.

Results. The residual dipolar couplings for OSS-HEWL, ISS⁶⁴⁻⁸⁰-HEWL, ISS⁷⁶⁻⁹⁴-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-HEWL and ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL are depicted in Figure 2. It was shown that small loop sized disulfide bonds have only local, but distinct influence on the local dynamic and structure, whereas big loop sized disulfide bonds have only minor influence on structure and dynamics of the polypeptide chain. With the aid of ensemble calculations, the impact of disulfide bonds with different loop size on the compactness of non-native protein ensembles could be elucidated (Figure 3). These simulations predict the R_g values of single disulfide mutants to be 7.5%, 7.6%, 30.7% and 28.6% smaller than OSS-HEWL for ISS⁶⁴⁻⁸⁰-HEWL, ISS⁷⁶⁻⁹⁴-HEWL, ISS³⁰⁻¹¹⁵-HEWL and ISS⁶⁻¹²⁷-HEWL, respectively.

Monte Carlo modelling of ion-beam cancer therapy on sub-micron scales

Lucas Burigo, Igor Pshenichnov
Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Beams of carbon nuclei are successfully used in radiation therapy of cancer. However, the carbon nuclei can undergo fragmentation reactions yielding several particles inside the patient. Scientists at the Frankfurt Institute for Advanced Studies estimate the energy deposition by such fragments to objects with size equivalent to the cell nucleus. This helps to estimate the biological effect of neutrons outside the target tumour in view of possible secondary malignancies after carbon-ion therapy.

The project deals with Monte Carlo simulations of complex radiation fields in ion-beam cancer therapy. The aim of the project is to study the stochastic impact of radiation at the level of individual cells. Presently beams of carbon nuclei are successfully used as an advanced method for radiation therapy of cancer. In particular, carbon nuclei provide advantages compared to photons in conformal treatment of tumours [1]. By adjusting the carbon beam energy the region of the Bragg peak can be located inside the tumour; thus providing elevated dose to the tumour compared to surrounding healthy tissues.

Nuclei of therapeutic beams interact with atomic nuclei in tissue leading to production of nucleons and light nuclei in fragmentation reactions [2]. It is expected that radiation fields surrounding therapeutic beams are characterized by nuclear fragments close to the beam axis and by neutrons and protons far from the beam. Therefore, the interactions of primary and secondary particles with tissues should be considered in detail.

Monte Carlo simulation is a convenient method to account for various physical processes, e.g. for ionization energy loss and nuclear reactions, which are relevant to the propagation of beam particles and numerous secondary particles in tissues. The Monte Carlo model for Heavy-Ion Therapy (MCHIT) [3] based on the Geant4 toolkit [4] was created in FIAS to study ion-beam interaction with tissue-like materials. The MCHIT is currently based on the version 9.4 (with patch 02) of Geant4. Due to recent extensions of the MCHIT model simulations of energy deposition to objects with effective size of few micrometers become possible.

A practical way to measure energy deposition to objects equivalent to living cells consists in measurements with a detector known as a

Tissue-Equivalent-Proportional-Counter (TEPC). Since TEPC includes a small (few cm^3) volume filled with low-pressure gas, the distribution of measured lineal energy (microdosimetric spectrum) is equivalent to few-micrometer size tissue-like media representing a single cell with density similar to the water density. Such microdosimetric spectra collected in radiation fields of different particles are directly related to biological effects of corresponding particles.

The MCHIT code for microdosimetry simulations was implemented with the capability to simulate several events in parallel. This is necessary since microdosimetry simulations require modelling of more than 10^8 primary ions in each run. The MCHIT code uses Message Passing Interface (MPI). The resources at the Center for Scientific Computing (CSC) has been used to speed up the simulations. We incorporated the modelling of TEPC into the MCHIT model using the sensitive volume and primitive scoring techniques of Geant4. It is crucial to model properly both the production of secondary electrons and their interactions with gas and the material of the TEPC wall, which is possible with the Geant4 toolkit. The results of simulations are collect in binary ROOT files [5] and then visualized.

A recent experiment at GSI recorded microdosimetry spectra at 18 different positions inside a water phantom irradiated by a 300 MeV/nucleon carbon beam [6]. In order to speed up the simulation when collecting microdosimetry spectra at positions far from the beam axis, we made use of the axial symmetry of the setup. We replace a single TEPC in a simulation run by a ring of identical TEPCs located at the same radius from the beam axis as shown in Table I. The number of counters in each ring and the positions of the rings with respect to the beam were chosen to satisfy the condition that particles produced inside one of the counters or which have

just crossed it should not hit other counters. We found that the MCHIT model is able to reproduce the responses of TEPCs irradiated by carbon nuclei and secondary fragments. MCHIT results successfully reproduce the general trend of microdosimetric spectra as shown in Fig 1. The calculated near-axis lineal energy spectra exhibit peaks between 10 and 100 keV/ μ m, associated with primary nuclei and heavy secondary fragments. Some inconsistencies between theory and experiment are found for the off-axis spectra. The contribution of neutrons to the lineal energy spectra could also be estimated. It is very important to properly evaluate biological effects of such neutrons propagating far from the target tumour volume in view of possible secondary malignancies after carbon-ion therapy [7].

Table 1 – Positions of the TEPC counters inside the water phantom used in MCHIT simulations. TEPCs were grouped into rings with a number of counters in each ring depending on the ring radius. Each TEPC position was modelled in a certain run, marked in the last column.

Radius (mm)	Depth (mm)	TEPC's position	Number of counters in the ring	Run notation
0	50	0 cm, plateau	1	III
0	179.1	0 cm, peak	1	II
0	275	0 cm, tail	1	I
20	50	2 cm, plateau	4	III
20	179.1	2 cm, peak	4	II
20	275	2 cm, tail	4	I
100	50	10 cm, plateau	24	I
100	179.1	10 cm, peak	24	I
100	275	10 cm, tail	24	I

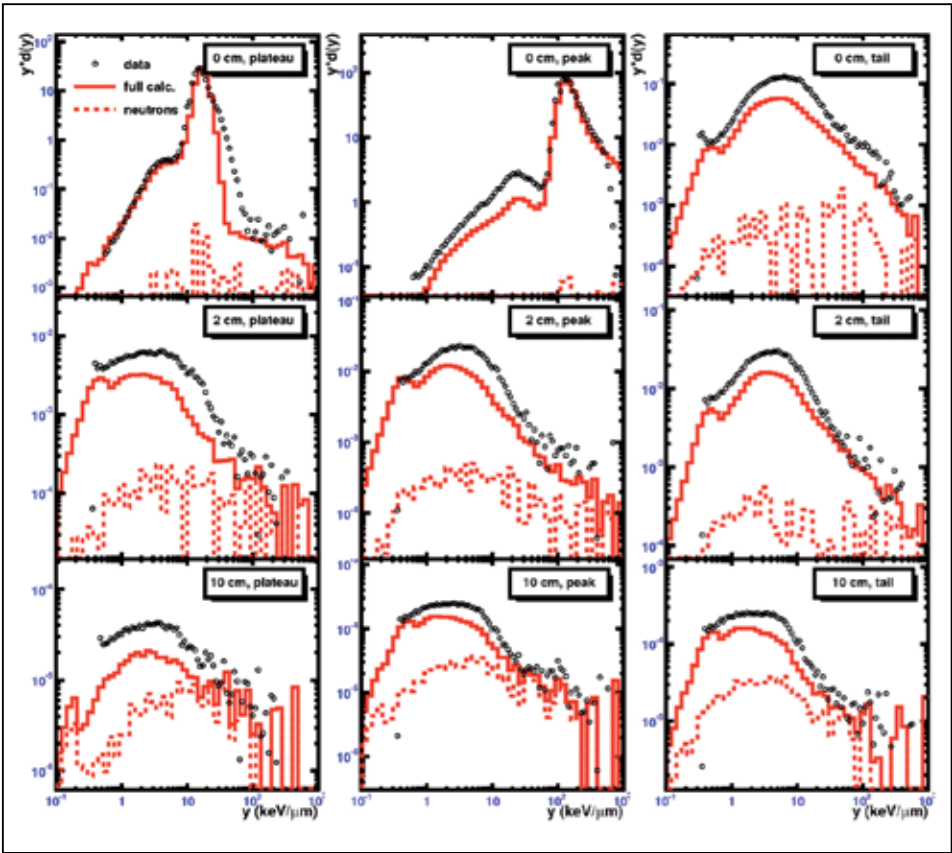


Figure 1: Microdosimetry spectra in water phantom irradiated by ^{12}C 300 A MeV nuclei calculated with MCHIT. Full lines stands for spectra due to all particles while dashed lines stands for contributions only due to neutrons. Points present experimental data [5].

References:

1. U. Amaldi, G. Kraft, Rep. Prog. Phys. 68 (2005) 1861.
2. I. Pshenichnov et al., Nucl. Instr. Meth. B 268 (2010) 604.
3. I. Pshenichnov et al., Phys. Med. Biol. 50 (2005) 5493.
4. J. Allison et al., IEEE Transact. Nucl. Sci. 53 (2006) 270.
5. R. Brun, F. Rademakers, Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A 389 (1997) 81.
6. G. Martino et al., Phys. Med. Biol. 55 (2010) 3441.
7. D. Newhauser, M. Durante, Nature Rev. Cancer 11 (2011) 438.

Phase transformations in fullerenes

A. Hussien, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, and W. Greiner
Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Fullerene sind Kohlenstoff-Verbindungen, die wie ein Fußball aufgebaut sind. Im Inneren hohl, bieten sie viel Platz, um Radikale einzufangen, die Zellen schädigen und damit Krebs hervorrufen. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies untersuchen das Fulleren C_{60} in Computer-Simulationen. Je besser die Forscher wissen, wie sich das Fulleren verhält, desto besser kann es im Kampf gegen den Krebs eingesetzt werden, etwa in der Ionenstrahl-Therapie.

Ion beam therapy offers the possibility of excellent dose localization for treatment of malignant tumors, minimizing radiation damage in normal tissue, while maximizing cell-killing within the tumor. We have investigated formation and fragmentation of C_{60} as a general process of phase transition. In order to do this, we have developed a topologically-constrained forcefield and conducted extensive molecular dynamics simulations within the C_{60} - C_2 channel.

Results of the simulations show that C_{60} experiences a phase transition at 5855 K. At this T the system continuously oscillates between a fullerene cage and a gaseous phase consisting of C_2 and small carbon fragments. These oscillations signify dynamic phase coexistence and correspond to consecutive fragmentation and assembly of the carbon cage. To the best of our knowledge, our work is the first where the processes of fragmentation and formation of a fullerene are observed several times in the course of the simulation.

We have also constructed a statistical mechanics model that accounted for entropic corrections and the effect of pressure on the phase transition. Assuming local thermo-dynamic conditions, we correlated our results to generalized temperature and pressure conditions found in arc-discharge experiments and obtained the dependence of the phase transition temperatures on pressure.

Taking into account in the statistical mechanics model the thermodynamics conditions in experiments, we have obtained for the C_{60} a phase transition temperature of 3800-4200K corresponding to a pressure of 10-100 kPa in good agreement with experimental results. The novelty of the present work is in the fact that it treats the fullerene formation process as a carbon gas - fullerene cage phase transition.

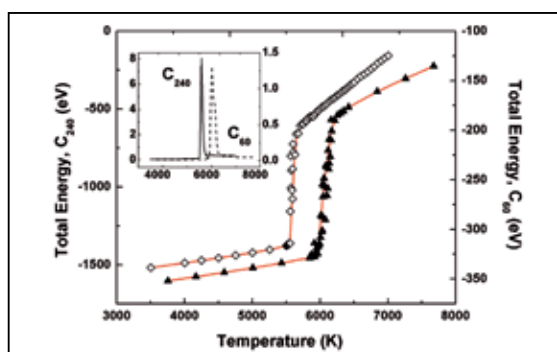


Figure 1:
Caloric curves and heat capacity plots (inset) for C_{60} (black triangles) and C_{240} (open diamonds).

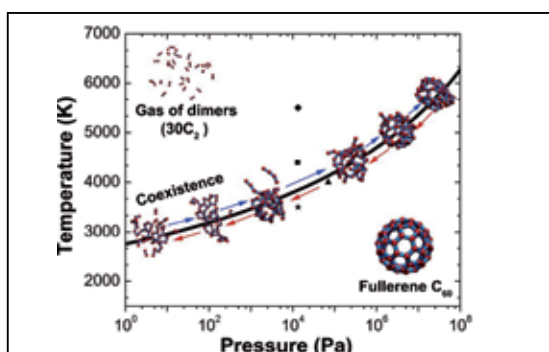


Figure 2:
The curve separates the region where the system can be found in either a cage (below the line) or a gaseous state (above it).

References:

1. A. Hussien, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, Thermodynamic of carbon Gas-Fullerene Transition, in Conf. Series 17th Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics (Oberurg, Austria, January 24 - 29, 2010), pp. 237-240, ISBN 978-3-902719-52-2, Innsbruck University press (2010).
2. A. Hussien, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, W. Greiner, Phase transition, formation and fragmentation of fullerenes, Europ. Phys. J. D 52 207-217, (2010).
3. A. Hussien, Phase Transitions in Carbon-based nanoclusters as seen via molecular dynamics simulations. Dissertation, FIAS and Goethe-Universität Frankfurt am Main (2010).

Multiscale Approach to the Physics of Ion Beam Cancer Therapy: Thermo-Mechanical Pathways of DNA Damage

A.V. Yakubovich¹, A.V. Solov'yov¹, W. Greiner¹, and E. Surdutovich²

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² Oakland University, Michigan, USA

Mit Ionenstrahlen behandeln Ärzte ganz gezielt Krebstumore, denn die Ionenstrahlen entfalten ihre zerstörerische Kraft erst, wenn sie im Körper auf den Tumor treffen. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies gehen der Frage nach, wie die Ionen bei Ihrer Ausbreitung die DNA schädigen. Dabei haben sie herausgefunden, dass die Ionen Wärme erzeugen, die sich in einer winzigen Stoßwelle fortbewegt, und dadurch Bindungen der DNA schädigen kann.

The multiscale approach to the radiation damage induced by irradiation with ions is aimed to the phenomenon-based quantitative understanding of the scenario from incidence of an energetic ion on tissue to the cell death. This approach joins together many spatial, temporal, and energetic scales involved in this scenario. The success of this approach will provide the phenomenological foundation for ion-beam cancer therapy, radiation protection in space, and other applications of ion beams. Main issues addressed by the multiscale approach are ion stopping in the medium, production and transport of secondary particles produced as a result of ionization and excitation of the medium, interaction of secondary particles with biological molecules, most important with DNA, the analysis of the induced damage, and evaluation of probabilities of subsequent cell survival or death. This approach is interdisciplinary, since it is based on physics, chemistry and biology. Moreover, it spans over several areas within each of these disciplines.

A number of different agents cause DNA damage as a consequence of irradiation. These include interactions of a DNA molecule with secondary electrons, holes and free radicals. Within this project we discuss the DNA damage due to thermal and mechanical effects which accompany the ion propagation. We have performed full-atom molecular dynamics simulations of the heat spike in the water medium caused by a heavy ion in the vicinity of its Bragg peak. High rate of energy transfer from an ion to the water molecules leads to the rapid increase of temperature in the vicinity of the ion trajectory. As a result of an abrupt increase of the temperature we observe the formation of the nanoscale shock wave propagating through the medium. We investigate the thermomechanical damage caused by the shock wave to the nucleosome located in the vicinity of heavy ion trajectory. We observe the substantial deformation of the DNA secondary structure. We show that the produced shock wave can lead to the thermomechanical breakage of the DNA backbone covalent bonds and present estimates for the number of such strand breaks per one cell nucleus.

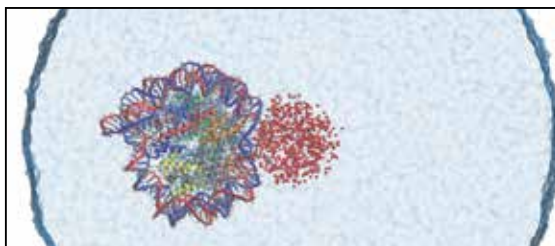


Figure 1:

Structure of the nucleosome 150 fs after the carbon ion propagation. Water molecules initially located within 1 nm from the ion's track are shown by spheres. It is seen as substantial distortion of the nucleosome structure caused by the propagation of the shock wave.

References:

1. A.V. Yakubovich, E. Surdutovich and A.V. Solov'yov, 'Atomic and Molecular Data Needs for Radiation Damage Modeling: Multiscale Approach', AIP Conf. Proc. 1344, 230-238 (2011).
2. A.V. Yakubovich, E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, 'Thermomechanical Damage of Nucleosome by the Shock Wave Initiated by Ion Passing Through Liquid Water', Nucl. Instrum. Meth. B, doi:10.1016/j.nimb.2011.10.069 (2011).

Dynamics of biomolecules: DNA Unzipping

A.V. Yakubovich¹, A.V. Solov'yov¹, S.N. Volkov², and E.V. Paramonova³

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Ukraine

³ Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Russia

Am Frankfurt Institute for Advanced Studies wurde in Molekulardynamik-Simulationen (MD) untersucht, wie sich Teile der DNA-Helix in wässriger Umgebung trennen. Wenn die Wissenschaftler verstehen, wie die DNA sich unter der Einwirkung einer äußeren Kraft trennt und wieder zusammensetzt, können sie versuchen, diese Mechanismen zu beeinflussen. Damit könnten dann Krankheiten bekämpft werden, die dadurch entstehen, dass sich Teile der DNA falsch trennen oder falsch zusammenbauen.

All-atom molecular dynamics (MD) simulations of DNA duplex unzipping in a water environment were performed. The investigated DNA double helix consists of a Drew-Dickerson dodecamer sequence and a hairpin (AAG) attached to the end of the double-helix chain. The considered system is used to examine the process of DNA strand separation under the action of an external force. This process occurs in vivo and now is being intensively investigated in experiments with single molecules. The main results of our simulations at the CSC show: The DNA dodecamer duplex is consequently unzipped pair by pair by means of the steered MD. The unzipping trajectories turn out to be similar

for the duplex parts with G·C content and rather distinct for the parts with A·T content. It is shown that during the unzipping each pair experiences two types of motion: relatively quick rotation together with all the duplex and slower motion in the frame of the unzipping fork. In the course of opening, the complementary pair passes through several distinct states: (i) the closed state in the double helix, (ii) the metastable preopened state in the unzipping fork and (iii) the unbound state. The performed simulations show that water molecules participate in the stabilization of the metastable states of the preopened base pairs in the DNA unzipping fork.

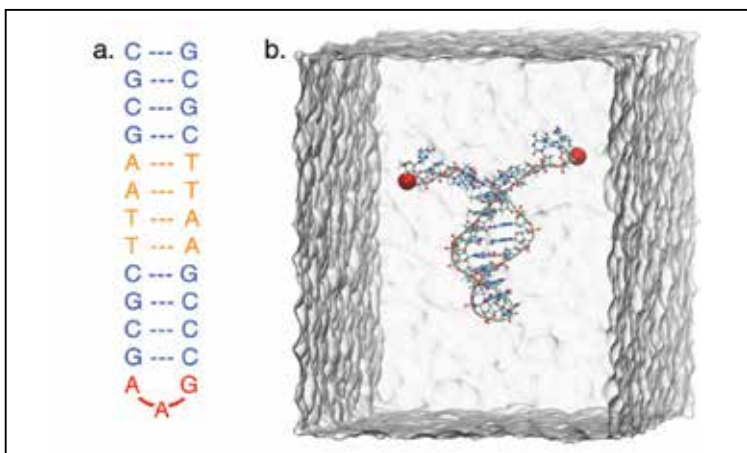


Figure 1:
DNA duplex constructed from a Drew-Dickerson dodecamer with hairpin AAG: (a) nucleotide content in DD-h; (b) additional external force applied to the opposite phosphate groups of different strands (shown by red spheres) that drives the directed unzipping process of dsDNA.

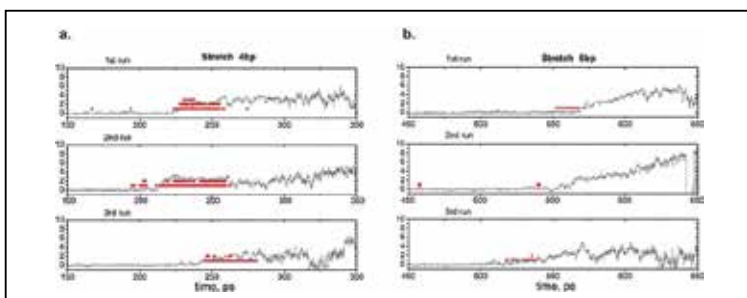


Figure 2:
Base stretching coordinate (in angstrom) and the number of water molecules that link the bases in the unzipping pair. the directed unzipping process of dsDNA.

Reference:

I. S.N. Volkov, E.V. Paramonova, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, 'Micromechanics of Base Pair Unzipping in the DNA Duplex', J. Phys.: Condens. Matter 24 035104 (2012).

Das facettenreiche Modell Erde

Prof. Bodo Ahrens, Prof. Thomas Hickler
Biodiversität und Klima Forschungszentrum (BiK-F), Frankfurt am Main

Die Arbeitsgruppen der Professoren Bodo Ahrens und Thomas Hickler am Biodiversität und Klima Forschungszentrum (BiK-F) befassen sich mit der Modellierung des Erdsystems. In den Jahren 2010 und 2011 haben sie zum Beispiel untersucht, wie sich Brände auf die Vegetation in der Savanne auswirken und wie Trockenheit die Sterblichkeit von Bäumen beeinflusst. Für die Rechnungen wurde das Linuxcluster „Fuchs“ verwendet, da sie große Kapazitäten erfordern, zumeist parallel auf vielen Prozessoren.

Verbinden eines regionalen Ozeanmodells mit einem Klimamodell

Das Hauptaugenmerk unserer Mittelmeerforschung liegt auf der regionalen Wechselwirkung zwischen Ozean und Atmosphäre. Von Interesse sind die unterschiedlichen Zeitskalen in diesem System. Die Wetterlagen der Atmosphäre entwickeln sich innerhalb weniger Tage bis Wochen. Der Ozean verfügt durch die Tiefenwasserbildung über ein längerfristiges Gedächtnis, so dass die Wechselwirkung mehrere Jahrzehnte umfassen kann. Das vollgekoppelte Ozean-Atmosphärenmodell ist ein wichtiges Hilfsmittel, um eine genauere zeitliche und räumliche Analyse der Wechselwirkung durchzuführen.

Es wurde an der Kopplung eines Ozeanmodells für das Mittelmeer mit dem atmosphärischen Modell gearbeitet. Um die Kommunikation zwischen beiden Programmen zu vereinfachen, wurde ein drittes Programm benutzt, ein sogenannter Koppler. Dieser interpoliert die Daten, die zwischen den Modellen ausgetauscht werden sollen, sowohl räumlich als auch zeitlich. Um dieses System anwendbar zu machen, werden die Programme aneinander angepasst und das Ergebnis entsprechend überprüft.

Einfluss von Feuer auf die Vegetation

Feuer spielen eine große Rolle bei der Speicherung von Kohlenstoff und der Freisetzung von CO₂. In Savannengebieten beeinflussen sie die Vegetation entscheidend. Es gibt unterschiedliche Methoden menschlich und natürlich verursachte Feuer in einem dynamischen Vegetationsmodell zu simulieren. Um den Einfluss dieser Methoden auf die simulierte Vegetation zu untersuchen, wurden mehrere Simulationen durchgeführt. Diese werden zurzeit evaluiert und validiert.

Waldsterben durch Trockenheit

Bäume haben eine sehr lange durchschnittliche Lebenserwartung. Bei einer starken und/oder länger anhaltenden Trockenheit sterben jedoch mehr Bäume als üblich. Um den Einfluss der Trockenheit auf die modellierte Baumsterblichkeit zu untersuchen, wurden Berechnungen mit einem Vegetationsmodell durchgeführt.

Einfluss verschiedener Klimadatensätze auf ein Vegetationsmodell

Es gibt verschiedene Datensätze des globalen Klimas. Diese haben zum Teil unterschiedliche räumliche und zeitliche Auflösungen. Außerdem weisen sie regional deutliche Unterschiede und Variabilitäten auf. Der Einfluss, den diese Unterschiede auf ein Vegetationsmodell haben, wurde hierbei untersucht.

Auswirkungen des Klimawandels in der Türkei

Um den potentiellen Einfluss des Klimawandels auf Wald- und Buschbrände in der Mittelmeer-Region zu untersuchen, startete 2011 ein internationales Projekt mit türkischer, britischer und deutscher Beteiligung. In diesem Rahmen wurden verschiedene Modellsimulationen mit einem dynamischen Vegetationsmodell durchgeführt.

Kohlendioxid-Emissionen durch geänderte Landnutzung

Es ist wissenschaftlicher Konsens, dass das Klima durch menschlich verursachte CO₂-Emissionen beeinflusst wird. Und es wird angenommen, dass der Mensch durch Landnutzungsänderungen (hauptsächlich Landwirtschaft) bereits seit 10.000 Jahren das Klima verändert hat. Um die CO₂-Emissionen seit etwa dem Ende der letzten Eiszeit zu untersuchen, wurden die letzten 10.000 Jahre mit einem Vegetationsmodell simuliert.

Global water resources in a changing world

Petra Döll

AG Hydrologie, Institut für Physische Geographie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Mensch und Natur brauchen Wasser zum Leben. Doch die natürlichen Süßwasserressourcen sind begrenzt. Wissenschaftlerinnen der Goethe-Universität Frankfurt erforschen deshalb, wie sich das Verhalten der Menschen auf den Wasserkreislauf und die Wasserressourcen auswirkt. Sie haben das Modell WaterGAP entwickelt, das die Ressourcen und ihre Nutzung auf der globalen Skala berechnet. Ihre Einschätzung: Der Klimawandel wird die Wasservorräte stärker beeinflussen als die bisherigen Eingriffe in die Natur, etwa durch den Bau von Staudämmen.

To achieve a sustainable development of the planet Earth, water resources need to be managed well. This requires an assessment of the current water situation, an understanding of historic developments and the generation of scenarios of the future. A global-scale freshwater assessment helps to understand the global water system and how it is impacted by humans, as in a globalized world, freshwater assessments can no longer be restricted to the river basin scale. To support these tasks, we have developed the global-scale water model WaterGAP that computes both water resources and water use with a spatial resolution of $0.5^\circ \times 0.5^\circ$ (55 km at the equator), and we keep improving the model.

As a first step towards a global-scale analysis of climate change impacts on freshwater ecosystems, we recently used WaterGAP to quantify the impact of climate change on five ecologically relevant river flow indicators. We simulated monthly time series of river discharge with a spatial resolution of 0.5 degrees (Döll and Zhang 2010). Four climate change scenarios based on two global climate models and two greenhouse gas emissions scenarios were evaluated. We compared the impact of climate change by the 2050s to the impact of water withdrawals and dams on natural flow regimes that had occurred by 2002. Climate change was computed to alter seasonal flow regimes significantly

(i.e. by more than 10%) on 90% of the global land area (excluding Greenland and Antarctica), as compared to only one quarter of the land area that had suffered from significant seasonal flow regime alterations due to dams and water withdrawals. Due to climate change, the timing of the maximum mean monthly river discharge will be shifted by at least one month on one third on the global land area, more often towards earlier months (mainly due to earlier snowmelt). Dams and withdrawals had caused comparable shifts on less than 5% of the land area only. By the 2050s, climate change may have impacted ecologically relevant river flow characteristics more strongly than dams and water withdrawals have up to now. Emissions scenario B2 leads to only slightly reduced alterations of river flow regimes as compared to scenario A2 even though emissions are much smaller. The differences in alterations resulting from the two applied climate models are larger than those resulting from the two emissions scenarios. Based on general knowledge about ecosystem responses to flow alterations and data related to flow alterations by dams and water withdrawals, we expect that the computed climate change induced river flow alterations will impact freshwater ecosystems more strongly than past anthropogenic alterations.

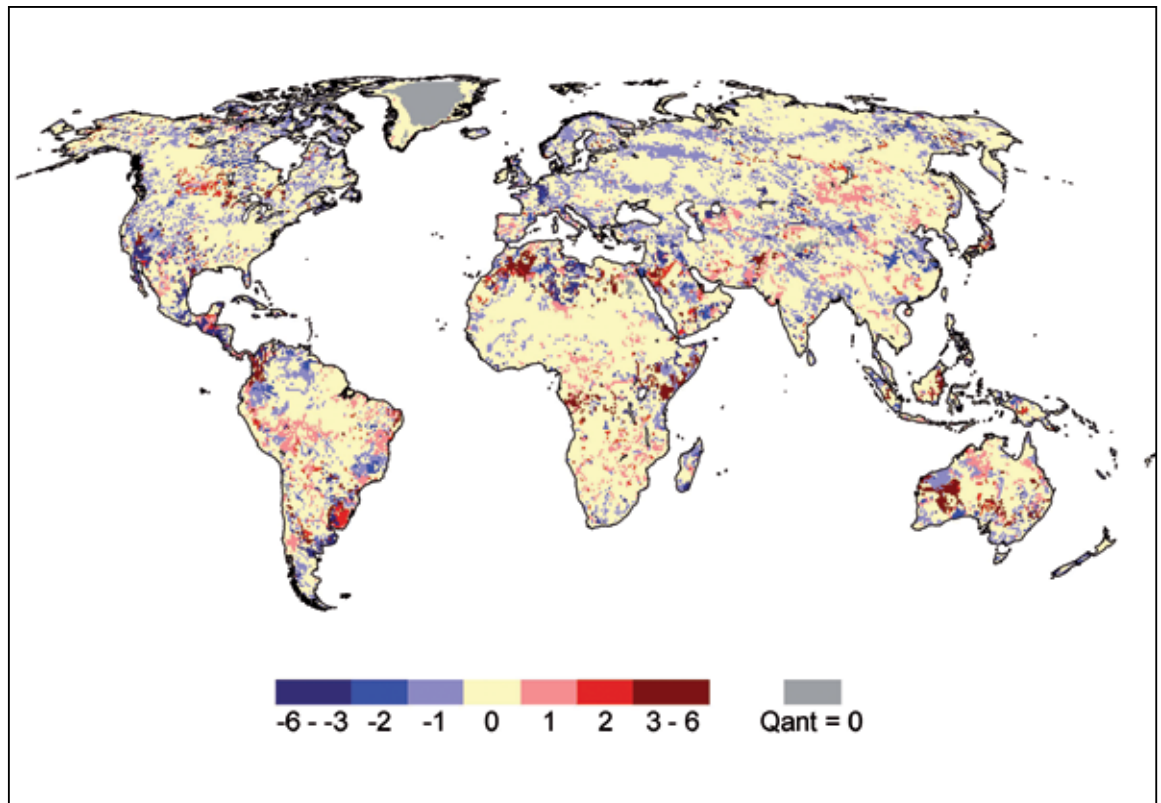


Figure:

Shift of calendar month with maximum due to climate change, comparing the period 2041-2070 to the period 1961-1990 (HadCM3 climate model output used as input to WaterGAP).

We have improved the capacity of WaterGAP to assess the human impact on freshwater resources by establishing, for the first time, a global data set of groundwater and surface water use, differentiating between water use for irrigation, livestock, cooling of thermal power plants and households (Döll

et al. 2011). Based on this data set, the impact of groundwater withdrawals on groundwater storage, and possible groundwater depletion can be assessed. Modelling results were compared to gravity data from remote sensing (from GRACE satellite mission).

References:

1. Döll, P., Hoffmann-Dobrev, H., Portmann, F.T., Siebert, S., Eicker, A., Rodell, M., Strassberg, G., Scanlon, B. (2011): Impact of water withdrawals from groundwater and surface water on continental water storage variations. J. Geodyn. (in press).
2. Döll, P., Zhang, J. (2010): Impact of climate change on freshwater ecosystems: a global-scale analysis of ecologically relevant river flow alterations. Hydrol. Earth Syst. Sci., 14, 783-799.

Wasser für die Zukunft sichern

Stephanie Eisner, Ellen Kynast
Center for Environmental Systems Research, Universität Kassel

Die Forschungsgruppe „Globale und Regionale Dynamiken“ (GRID) beschäftigt sich mit globalen und regionalen Aspekten des globalen Wandels und dessen Auswirkungen auf Umwelt und Gesellschaft. Der Schwerpunkt der Wassergruppe liegt dabei auf der Wasserproblematik. Mehrere aktuelle Projekte beinhalten Fragen zur Verfügbarkeit und zur Nutzung des Wassers sowie zum Auftreten extremer hydrologischer Ereignisse wie Hochwasser oder Dürre. Sie setzen sich zudem mit der künftigen Wassersituation auseinander.

Die Arbeit der GRID Gruppe behandelt zahlreiche Aspekte in Zusammenhang mit globalen und regionalen Fragestellungen des globalen Wandels und dessen Auswirkungen auf Umwelt und Gesellschaft. Der Schwerpunkt der Wassergruppe liegt dabei auf Fragestellungen zur Wasserproblematik. Mehrere aktuelle Projekte beinhalten Fragen zur Wasserverfügbarkeit, zur Wassernutzung, zum Auftreten extremer hydrologischer Ereignisse (Hochwasser, Dürre) und setzen sich mit der künftigen Entwicklung der Wassersituation auseinander.

Hierfür wird das integrierte globale Wassermmodell WaterGAP (Water – Global Assessment and Prognosis, Döll et al. 2003; Alcamo et al. 2003) eingesetzt, welches aus drei Teilmodellen besteht:

- 1) einem Wasserbilanzmodell zur Simulation des terrestrischen Wasserkreislaufs,
- 2) einem Wassernutzungsmodell zur Abschätzung von Wasserentnahmen und konsumptiver Wassernutzung der Sektoren verarbeitende Industrie, Haushalte, Landwirtschaft und thermische Energieproduktion, und 3) einem Wasserqualitätsmodell zur Bewertung der qualitativen Eignung verfügbarer Wasserressourcen für bestimmte Verwendungszwecke.

Für die aktuelle Modellversion, WaterGAP3, wurde die räumliche Auflösung global von 30 Bogenminuten (0.5°) auf 5 Bogenminuten (1/12°) erhöht. Dies ermöglicht eine detailliertere Abbildung hydrologisch relevanter Prozesse, geht jedoch sowohl mit einem enormen Anstieg der Rechenkapazitäten (CPU-Zeit) als auch mit erhöhtem Massenspeicherbedarf einher.

Darüber hinaus fokussiert globale hydrologische Forschung zunehmend auf Extremereignisse (Hochwasser, Dürren), für deren Simulation und Analyse sowohl die Modelltreiber (Klimazeitreihen) als auch die Ausgabegrößen in täglicher Auflösung vorge-

halten werden müssen. Dies führt zusätzlich zu einer Vervielfachung des Massenspeicherbedarfs.

Um die Rechengeschwindigkeit von WaterGAP3 zu erhöhen, wird es auf dem Linuxcluster der Universität Kassel betrieben, wobei verschiedene Parallelisierungskonzepte zum Einsatz kommen (Leopold et al. 2006). Während eines Modellaufs werden die Berechnungen zum einen mittels Master/Slave-Kommunikation, implementiert mit MPI, auf mehrere Prozessoren verteilt. Zum anderen werden zur Datenparallelisierung innerhalb eines Slave-Prozesses mittels OpenMP mehrere Threads erzeugt.

Im Berichtszeitraum 2010/2011 wurde WaterGAP insbesondere in den durch das 6. Forschungsrahmenprogramm der EU geförderten Projekten WATCH und SCENES eingesetzt, die im Folgenden näher beschrieben werden.

WATCH

Im integrierten Projekt WATCH (Water and Global Change) wirkten verschiedene Fachdisziplinen aus der Hydrologie, der Wasserbewirtschaftung und Klimatologie zusammen, um die aktuellen, globalen Wasserressourcen zu analysieren und quantifizieren, und um eine integrative und nachhaltige Bewirtschaftung der zukünftigen Wasserressourcen zu ermöglichen (Harding et al. 2011; Haddeland et al. 2011). Dabei wurden vor allem die Auswirkungen des globalen Wandels betrachtet, damit die Unsicherheiten bei der Abschätzung zukünftiger Wassermengen und die dadurch bedingte Verwundbarkeit auch im Hinblick auf sozioökonomische Aspekte berücksichtigt werden können. Die Untersuchungen wurden mit Hilfe eines neu entwickelten, integrativen Modellrahmens durchgeführt.

Die inhaltlichen Arbeiten des CESR konzentrierten sich hauptsächlich auf das Arbeitspaket

„Abschätzung der Verwundbarkeit der globalen Wasserressourcen“ und „Bevölkerungs- und Landnutzungswandel“. Es wurden umfangreiche Rechnungen mit dem WaterGAP Modell durchgeführt, um die vorhandenen Wasserressourcen des 20. Jahrhunderts zu ermitteln und die Vulnerabilität der Wasserressourcen im 21. Jahrhundert zu bewerten. Weiterhin wurden Daten bezüglich des vergangenen, aktuellen und zukünftigen Wasserbedarfs sowohl für die Landwirtschaft und Industrie als auch für die privaten Haushalte bereitgestellt.

SCENES

Im Rahmen von SCENES wurden Szenarien der Wasserressourcen Europas bis zum Jahre 2050 entwickelt und analysiert (Duel & Meijer 2011). Diese pan-europäischen Szenarien umfassten ganz Europa und die daran angrenzenden Regionen, womit ein Gebiet vom Mittelmeer, inkl. der nordafrikanischen Anrainerstaaten, bis hin zum Ural bearbeitet wird. Die Szenarien stellen eine Grundlage für die langfristige strategische Planung der europäischen Wasserressourcen dar, sollen die Aufmerksamkeit von Entscheidungsträgern und anderer Institutionen auf eventuell auftretende Probleme richten und

können Flussgebietsmanagern helfen, die regionalen und lokalen Wasserpläne zu überprüfen.

Hierfür wurden im SCENES kombinierte qualitative und quantitative Szenarien eingesetzt. Die qualitativen Szenarien (storylines) beschreiben, wie sich Wasserressourcen in den unterschiedlichen Regionen Europas bis 2050 entwickeln könnten. Die quantitativen Szenarien, produziert mit Hilfe von Modellen, ergänzten die storylines indem sie numerische Informationen zur Verfügung stellen und mögliche Tendenzen und Dynamiken aufzeigen, die in den storylines nicht offensichtlich wurden.

Die Hauptaktivitäten der GRID-Gruppe erfolgten im Arbeitspaket „Modelle und Methoden“ (WP3), in welchem mit Hilfe von Modellen quantifizierte Szenarien für den pan-europäischen Raum produziert wurden. Diese wurden z.B. zur Indikatorenbildung verwendet. Es kamen die großskaligen Modelle WaterGAP3 und LandSHIFT zum Einsatz, die eine Abbildung der Zukunft bezüglich Wasserressourcen und Landnutzungsänderungen projizieren.

Referenzen:

1. Alcamo, J., Döll, P., Henrichs, T., Kaspar, F., Lehner, B., Rösch, T. & Siebert, S. (2003): Development and testing of the WaterGAP2 global model of water use and availability. *Hydrological Sciences Journal* 48:317-337.
2. Döll, P., Kaspar, F. & Lehner, B. (2003): A global hydrological model for deriving water availability indicators: model tuning and validation. *Journal of Hydrology* 270:105–134.
3. Duel, H. & Meijer, K. (2011): Socio-economic and environmental impacts of future changes in Europe's freshwater resources. D4.6: main report. Deltares, Delft, the Netherlands.
4. Haddeland, I., Clark, D.B., Franssen, W., Ludwig, F., Voß, F., Arnell, N.W., Bertrand, N., Best, M., Folwell, S., Gerten, D., Gomes, S., Gosling, S.M., Hagemann, S., Hanasaki, N., Harding, R., Heinke, J., Kabat, P., Koirala, S., Oki, T., Polcher, J., Stacke, T., Viterbo, P., Weedon, G.P. & Yeh, P. (2011): Multimodel estimate of the global terrestrial water balance: setup and first results. *Journal of Hydrometeorology* 12:869–884.
5. Harding, R., Best, M., Blyth, E., Hagemann, S., Kabat, P., Tallaksen, L.M., Warnaars, T., Wiberg, D., Weedon, G.P., van Lanen, H., Ludwig, F. & Haddeland, I. (2011): WATCH: Current knowledge of the terrestrial global water cycle. *Journal of Hydrometeorology* 12:1149–1156.
6. Leopold, C., Süß, M. & Breitbart, J. (2006): Programming for Malleability with Hybrid MPI-2 and OpenMP: Experiences with a Simulation Program for Global Water Prognosis. *European Conference on Modelling and Simulation* (pp.665-670). Bonn.

Soil moisture sensitivity simulations over the Indian region

Shakeel Asharaf, Bodo Ahrens

Institute for Atmospheric and Environmental Sciences, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Für langfristige Wetter-Vorhersagen sind Klimasystemmodelle unerlässlich, die auch die Landoberfläche adäquat beschreiben. Zu diesem Schluss kommen Wissenschaftler der Universität Frankfurt. Sie haben untersucht, wie sich die Feuchtigkeit des Bodens auf den Wasserkreislauf auswirkt. Ihre Studie zeigt, dass die Stärke der vorhergesagten Monsun-Niederschläge in Indien stark davon abhängt, wie feucht der Boden vor der Monsunsaison ist, und dadurch die lokale Luftfeuchtigkeit und Niederschlagseffizienz beeinflusst werden. Ihr Fazit: Nur wenn Klimasystemmodelle solche regionalen Einflüsse beachten, lassen sich langfristige Wittertrends besser ermitteln.

1 Introduction

Nowadays, with development of vastly more powerful computing resources and sophisticated modeling techniques it is possible to run climate models in a high resolution mode. High resolution models demonstrate considerable skill in predicting local circulation driven by local topography and land surface variations, which were often missed or not resolved by coarse resolution operational global models.

Our present work focuses on the investigation of the soil moisture-precipitation (S-P) feedback processes over the Indian region. For this purpose, the simulations were carried out with the non-hydrostatic limited-area climate model COSMO-CLM [1] on the high performance computing platform at CSC (Center for Scientific Computing), Frankfurt.

2 Experimental design

As model input, the initial and lateral boundary conditions are taken from the ERA-Interim reanalysis. In the present study, the model horizontal resolution is set to 0.25° with 32 vertical layers. The simulation domain encompasses the entire Indian region (Fig. 1). More details about the model are given at the community website (<http://www.clm-community.eu/>). In order to assess the influence of soil moisture, we have performed several simulation experiments: a reference simulation (CTL) for the period 1989 to 2008 and perturbed simulations. These latter simulations are initialized each year on the 2nd of April with the CTL state, but with perturbed soil moisture: the WET run is initialized with a soil two times wetter than in the CTL simulation, the DRY run is initialized two times drier (perturbations are limited by the field capacity and the wilting point of the soil type). The perturbed experiments are driven by the same lateral boundary condition as CTL. Therefore, these experiments explain the soil water initialization impacts on the model simulations at the regional scale, as well as at the Indian summer monsoon scale.

3 Results and discussion

A spin-up time of one year is discarded in the subsequent analyses to avoid initialization errors. In order to assess the regional water cycle, we have divided the Indian domain into four sub-regions: East (E), West (W), Central (CE), and North (N), as depicted in the Fig. 1.

The sensitivity of summer monsoon rainfall with response to the change in initial soil moisture is shown in Fig. 2(a,b). The WET initialization increases precipitation in general. Pronounced changes are over the western and northwestern parts of India. These regions are relatively arid and dry. The mean precipitation change in WET with respect to the CTL experiment is about 6.5 % (+14 mm/month) in the eastern analysis region E, while this is larger than 29 % over the western analysis region W. The precipitation change displays a remarkable regional contrast. It illustrates that the drier region W is more sensitive than the wetter region E to a wetter soil initialization. The change pattern is similar in the DRY experiment, but in general with opposite sign and weaker in magnitude. The precipitation maps are consistent with the simulated Bowen ratio map (not shown).

The precipitation changes in the sensitivity experiments WET and DRY are investigated quantitatively. To determine whether they result from the changes in local evapotranspiration (surface effect), external moisture sources (remote effect), or in the precipitation efficiency, we decompose the following equation (similar to [2] following their eq. (8) and (9)):

$$\Delta P = \underbrace{\Delta \chi (ET + IN)}_{\text{Efficiency effect}} + \underbrace{\chi \Delta ET}_{\text{Surface effect}} + \underbrace{\chi \Delta IN}_{\text{Remote effect}}$$

where the Δ -terms indicate differences between the perturbed and the control simulations. The recycling ratio $\beta = ET/(ET + IN)$ and precipitation efficiency

Table 1:
Changes in areal averaged (JJAS, 1990 to 2008) water budgets and single precipitation process terms for each analysis domain between the perturbed and the control simulations. The efficiency effect, remote effect and surface effect as defined in eq. are also shown.

Region	ΔP WET-CTL (mm/month)			ΔP DRY-CTL (mm/month)			ΔET (mm/month)		ΔIN (mm/month)	
	Efficiency effect	Remote effect	Surface effect	Efficiency effect	Remote effect	Surface effect	WET-CTL	DRY-CTL	WET-CTL	DRY-CTL
E	9.8	3.1	1.3	2.3	-5	-0.7	7.4	-3.5	14	-29
W	10.1	-3.2	0.6	-3.3	1.5	-0.1	8.3	-1.2	-47	23
N	11.5	-8	2.9	-0.2	1	-0.9	14.3	-4.3	-38	3.7
CE	1.5	-3.3	0.5	-2.3	-0.9	0	4	0	-19	-10

Figure 1:
Simulation domain and analysis domains N, W, CE and E. The shading indicates the model orography.

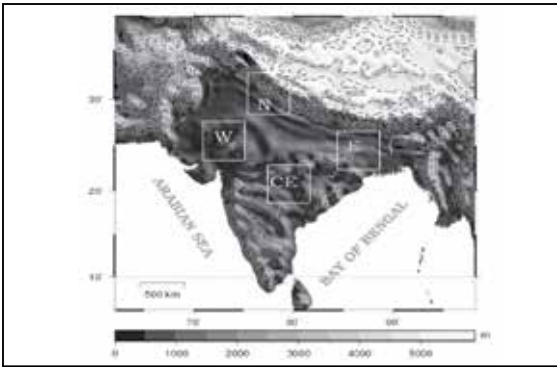
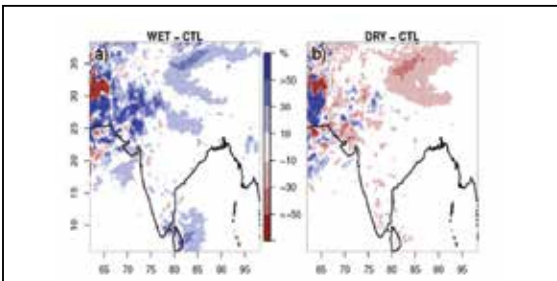


Figure 2:
Average summer monsoon (JJAS, 1990 to 2008) differences (WET-CTL and DRY-CTL) of (panels a, b) precipitation (in percent) with respect to CTL.



$\chi = P/(ET + IN)$ are calculated following [2], where ET is evapotranspiration, IN influx, and P precipitation in the analysis regions as depicted in Fig. 1.

On average, the efficiency effect is largest and increases in experiment WET throughout all regions (Tab.1). The efficiency effect is negative on average in the regions CE, N, and W, but positive in region E in the DRY experiment. In E moisture convergence is slightly increasing in both perturbation experiments (1 to 3 mm/month) and thus efficiency is increasing (in the model the convective parameterizations is triggered by moisture convergence). The remote effect, this is the change in moisture influx, is in most

years balancing the efficiency effect, but is somewhat smaller than the efficiency effect. The remote effect is negative in the regions E and CE in DRY (Tab. 1). In the regions W and N, a positive remote effect is prominent in case DRY and negative in case WET, respectively. The surface effect is largest in absolute values in region N on average. A perusal of the yearly time series (not shown) shows that the surface effect has a minor impact on annual time scale, but, of course, the evapotranspiration change is the trigger of the remote and the efficiency effect.

4 Conclusions

Soil-moisture precipitation feedback processes were investigated through perturbation simulations with the regional climate model COSMO-CLM. The simulations were analysed over the Indian sub-continent for the period 1990 to 2008. The study indicates that monsoonal precipitation can be strongly influenced by pre-monsoonal soil-moisture perturbation, and therefore quality of seasonal forecasts with numerical models depends strongly on model initialization. The locally available atmospheric moisture is affected by changes in the surface and the remote effects. Additionally, the resulting monsoonal precipitation is dependent on the complementing changes in precipitation efficiency. Therefore, a well balanced model is necessary for a useful description of the S-P feedbacks. Small systematic errors in one part of the model or in the initialization might yield spurious trends in long term forecasts and climate projections through feedbacks.

Acknowledgement

The authors acknowledges funding from the Hessian Initiative for the Development of Scientific and Economic Excellence (LOEWE) through the Biodiversity and Climate Research Centre (BiK-F), Frankfurt am Main. Access to and support in using COSMO-CLM was supplied by the COSMO-CLM Community. The author thanks the Center for Scientific Computing (CSC) of the Goethe University Frankfurt and the German High Performance Computing Centre for Climate and Earth System Research (DKRZ) for supporting part of the calculations.

The wave-turbulence interaction in breaking atmospheric waves

Ulrich Achatz and Mark Fruman
Institut für Atmosphäre und Umwelt, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Die Bewegung der Luft in der Atmosphäre wird durch langsame, großräumige Strukturen dominiert. Dennoch spielen kleine, schnelle Bewegungen, z.B. in Form sogenannter Schwerewellen eine wichtige Rolle. Werden die Schwerewellen instabil, dann brechen sie, vermischen die Luftschichten und beeinflussen die großräumigen Bewegungsstrukturen. Wissenschaftler der Universität Frankfurt analysieren daher das Brechen der Schwerewellen. Fortschritte in der Wettervorhersage und in Klimarechnungen hängen wesentlich vom Verständnis dieser Prozesse ab.

The circulation in the atmosphere is dominated by slow, large scale motion driven by the rotation of the Earth and the seasonal cycle of heating by the sun. Nevertheless, relatively fast and small-scale features in the form of so-called gravity waves play an important role. Forced by tropical convection, by changing wind patterns, and by the interaction between winds and topography, these disturbances propagate long horizontal distances and throughout the entire depth of the atmosphere. When gravity waves become unstable due to changing environmental conditions, especially in the middle and upper atmosphere, they “break” and deposit momentum to the large-scale circulation. Breaking gravity waves also play an important role in mixing processes in the oceans.

Several aspects of the global circulation cannot be explained nor reproduced in climate simulations without accounting for the effect of gravity wave breaking. The details of the wave breaking process and the resulting small scale turbulence involve time scales from seconds to hours and spatial scales from tens of metres to tens of kilometres. It is thus a demanding problem for both observational and computational investigation. The representation of small-scale turbulence in wave-breaking simulations and of wave breaking in weather and climate simulations represent two of the important parameterization problems in atmospheric science. This project consists of detailed analysis of gravity-wave breaking using linear instability theory together with high-resolution numerical simulations.

An earlier study by Achatz (2007) looked at the primary instabilities of a class of low-frequency gravity waves called inertia-gravity waves and the extent to which the instabilities lead to turbulence. The latter is a two-dimensional problem which can be carried out on a serial computer. Fig. 1 shows the buoyancy field (related to the vertical displacements of air parcels from their resting positions) from one

such two-dimensional simulation of a vertically propagating inertia-gravity wave with wavelength 3 km and period of 8 hours perturbed by a leading linear instability mode. Within 20 minutes the field has become turbulent.

It is well known that there are essential differences between two- and three-dimensional turbulence (although the turbulence in the two-dimensional gravity wave simulations is of an intermediate character, sometimes called “2.5-dimensional”), and gravity-wave breaking in the atmosphere and ocean is a three-dimensional process. Fruman and Achatz (2012) consider the stability of the two-dimensional breaking events to disturbances in the third dimension, so-called “secondary instabilities”, and thus the initial three-dimensionalization of the turbulence. Fig. 2 shows one component of the horizontal wind field from a two-dimensional simulation of a breaking 6 km inertia-gravity wave together with the regions most unstable to three-dimensional perturbations.

The next step is fully resolved three-dimensional simulations of breaking inertia-gravity waves. An important by-product of the primary and secondary instability calculations is an estimate of the characteristic length scales of the gravity wave breaking process. This is crucial for the design of the three-dimensional simulations. Since the secondary instabilities tend to have length scales an order of magnitude smaller than the gravity wave itself, the three-dimensional simulations can be made far more computationally efficient. That being said, the direct numerical simulation (DNS) of a breaking inertia gravity wave is a daunting task, requiring on the order of several hundred million grid points and tens of thousands of discrete time steps and therefore a highly parallelized code and calculating platform. In order to be able to run three-dimensional simulations of different cases, one needs a “Large-Eddy Simulation” (LES) scheme. Such models may be run at coarse spatial and temporal

resolution with the effects of unresolved scales of motion parameterized. As part of a collaboration with the group of Stefan Hickel at the TU München, we are using the INCA model based on the Adaptive Local Deconvolution Method (ALDM) (Hickel et al. 2006). Fig. 3 shows the three-dimensional part of the buoyancy from an INCA simulation performed

at CSC initialized with the breaking wave from Fig. 1 perturbed by its leading secondary instability.

Upcoming work will compare two- and three-dimensional DNS and LES of gravity waves with a wide range of parameters, with the long-term goal of improving the way the breaking of such waves is parameterized in weather and climate models.

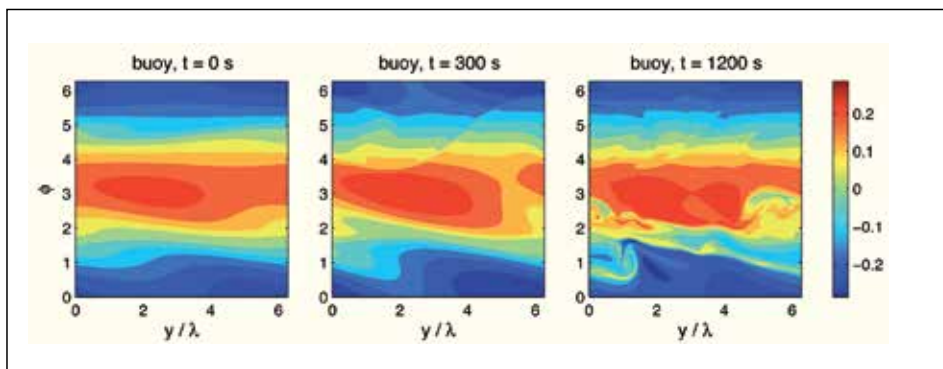


Figure 1: Three snapshots (at times 0, 5 min and 20 min) of the buoyancy field (in m/s^2) from a nonlinear 2.5-dimensional simulation of a 3 km inertia-gravity wave perturbed by a leading primary instability mode. Axes represent length normalized by basic state wavelength and primary perturbation wavelength.

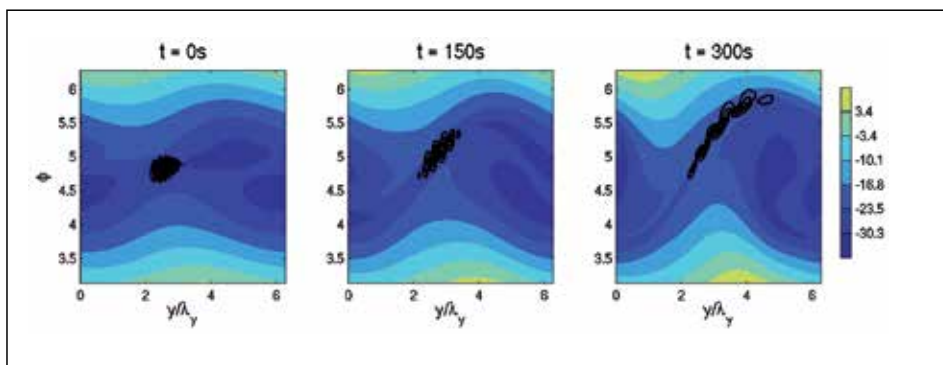


Figure 2: Transverse component of horizontal wind in m/s (colours) from a breaking 6 km inertia-gravity wave with vertical wind from a leading linear secondary instability mode (black contours) (from Fruman and Achatz, 2012). Axes are as in Fig. 1.

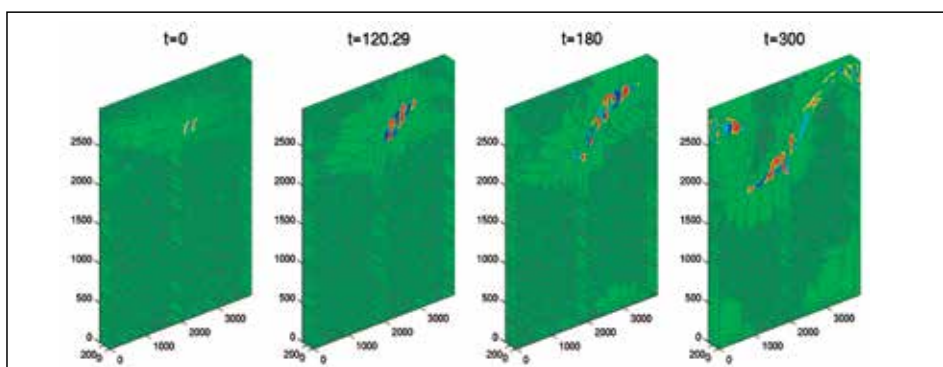


Figure 3: Departure of the three-dimensional buoyancy (in m/s^2) from horizontal mean in early stages of an LES simulation of a breaking 3 km inertia-gravity wave performed at CSC. Axes are in metres.

References:

1. Achatz, U., 2007: The primary nonlinear dynamics of modal and nonmodal perturbations of monochromatic inertia-gravity waves. *J. Atmos. Sci.*, 64, 74-95.
2. Fruman, M. D. and U. Achatz, 2012: Secondary instabilities in breaking inertia-gravity waves. *J. Atmos. Sci.*, 69, 303-322.
3. Hickel, S., N.A. Adams, and J. A. Domaradzki, 2006: An adaptive local deconvolution method for implicit LES. *J. Comp. Phys.*, 213, 413-436.

Structure-property relations of minerals and related compounds studied by DFT-based atomistic model calculations

Bjoern Winkler, Yonggang Yu, Victor Vinograd
FE Mineralogie, Institut für Geowissenschaften, Goethe-Universität, Frankfurt am Main

Wissenschaftler der Universität Frankfurt haben eine neue Methode entwickelt, thermodynamische Eigenschaften von Mischkristallen zu berechnen. Dazu werden die Energien von Kristallen mit Defekten mit Modellrechnungen bestimmt. Danach können Vorhersagen gemacht werden, welche Strukturen die Mischkristalle haben. Ihre Berechnungen tragen unter anderem dazu bei, den Aufbau der Erde und Vorgänge im Erdinneren besser zu verstehen.

The group of B. Winkler studies structure-property relations of inorganic compounds by density functional theory based calculations. The computationally intensive quantum-mechanical calculations and Monte Carlo simulations are aimed at constraining the thermodynamic properties of geochemically and petrologically important phases (solid solutions) such as Ca, Mg, Sr, Mn-carbonates, Eu- SO_4 - and SeO_4 -bearing carbonates, Sr, Ba, Ra, Pb-sulphates, garnets of pyrope-majorite series, various mixed oxides of (Zr, Hf, Si, Ti) O_2 composition, Ti-bearing zircons, perovskites and post-perovskites within the MgSiO_3 - Al_2O_3 system and various MgSiO_4 phases with Mg-Fe substitution. The results have been reported in several publications [1-6] and at internal meetings. Also, these computational projects are part of international collaborations funded by the BMBF, Helmholtz Society, DFG, and Alexander von Humboldt Foundation. Most importantly, the access to the CSC clusters has permitted us to develop a new method of thermodynamic description of solid solutions, which is based on studying energies of defect incorporation in supercells of pure mineral phases [1]. The method allows prediction of ordered intermediate compounds within a given isostructural solid solution. The recent high-light is the prediction of a new ordered phase in the celestite-anglesite, SrSO_4 - PbSO_4 binary (Fig. 1).

The second current highlight involves the understanding of the $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$ polymorphs, including olivine (α -phase), wadsleyite (β -phase) and ringwoodite (γ -phase), which are thought to be the most abundant mineral phases in the Earth's upper mantle and transition zone ($> 60\%$ in volume according to the pyrolite compositional model [7]). The phase equilibria properties in this binary system (α - β - γ) are expected to play a dominant role in determining fine features of the seismic-discontinuities in density and sound velocity at the 410-km depth (~ 13.4 GPa, due to the α - β transition) and the 520-km depth (~ 17.9 GPa, possibly having contributions from the β - γ transition) [2]. These fine features including the sharpness of the phase transformation (corresponding to the width of the 410-km and 520-km discontinuity), when combined with seismic observations, help distinguish causes of the upper mantle discontinuities and give constraints to the mineralogical model for the Earth's transition zone.

The electronic structures of the two end members (Mg_2SiO_4 and Fe_2SiO_4) have been calculated based on the density functional theory (DFT) [3], using both the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA). For Fe_2SiO_4 , DFT plus self-consistent Hubbard-U method has been employed to obtain the correct

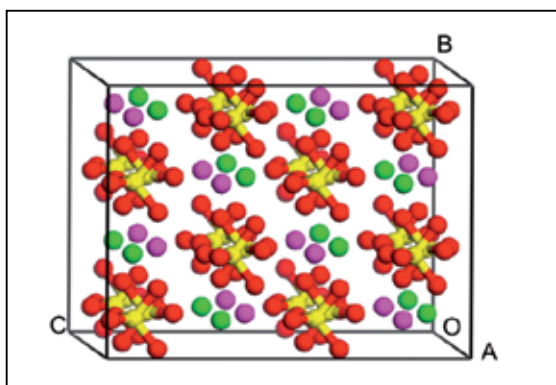


Abbildung 1:
The ordered structure of $\text{SrPb}(\text{SO}_4)_2$ (space group $P2_1/c$) which is predicted to be stable relative to the mechanical mixture of SrSO_4 and PbSO_4 . Green and pink balls represent Sr and Pb atoms, respectively; the aggregates of yellow and red balls are the SO_4 tetrahedra.

phase transition sequence under compression. Atomic structures and magnetic structures of Fe_2SiO_4 including fayalite (anti-ferromagnetic), Fe-wadsleyite (ferromagnetic) and Fe-spinel (anti-ferromagnetic) have been carefully studied. The vibrational density of states for Mg_2SiO_4 was calculated based on the density functional perturbation theory. Those of Fe_2SiO_4 were obtained using the virtual crystal approximation in which the force constant matrices of Fe_2SiO_4 were approximated by those of Mg_2SiO_4 . To obtain the Gibbs free energy of end members, we used the quasiharmonic approximation. Finally the ideal solution model was used to determine the phase equilibria.

Our study is the first theoretical determination of the high-pressure phase equilibria in $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$, free of any experimental input and the agreement with the previous experimental study [4] is highly encouraging (Fig. 2).

The research presented here was funded by the German Science Foundation, BMBF, and the Helmholtz Society. YY is grateful for a fellowship from the Humboldt foundation

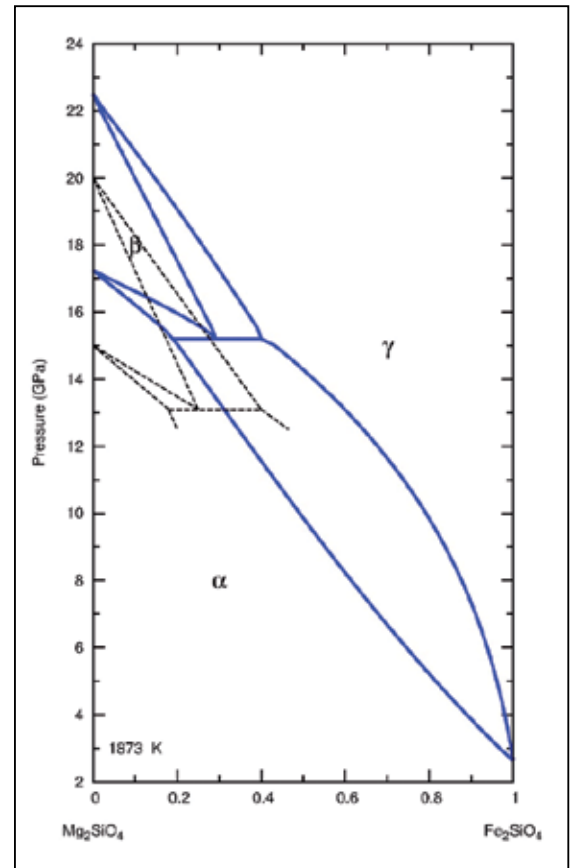


Abbildung 2:

Comparison of the experimentally determined [10] and computed phase diagram in the system $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$. Predictions such as these allow us to better understand seismic discontinuities in the deep Earth.

References:

1. Vinograd V.L., Sluiter M.H.F., and Winkler B. (2009) Subsolidus phase relations in the CaCO_3 - MgCO_3 system predicted from the excess enthalpies of supercell structures with single and double defects. *Physical Review B*, 79:10420 – 104209.
2. Kulik D.A., Vinograd V.L., Paulsen N., and Winkler B. (2010) (Ca, Sr) CO_3 aqueous-solid solution systems: From atomistic simulations to thermodynamic modelling. *Physics and Chemistry of the Earth*, 35: 217-232.
3. Vinograd V.L., Paulsen N., Winkler B., and van de Walle A. (2010) Thermodynamics of mixing in the ternary rhombohedral carbonate solid solution $(\text{Ca}_x\text{Mg}_y\text{Mn}_{1-x-y})\text{CO}_3$ from atomistic simulations. *CALPHAD*, 34:113-119.
4. Vinograd V.L. and Winkler B. (2010) An efficient cluster expansion method for binary solid solutions: Application to the halite-silvite, NaCl - KCl , system. In R. Wentzcovitch and L. Stixrude, editors, *Theoretical and computational methods in mineral physics: applications to geophysics*. Reviews in Mineralogy and Geochemistry, volume 71, pages 451-475. MSA
5. Yu Y.G., Wentzcovitch R.M., Vinograd V.L., Angel R.J. (2011) Thermodynamic properties of MgSiO_3 majorite and phase transitions near 660 km depth in MgSiO_3 and Mg_2SiO_4 : A first principles study. *J. Geophys. Res.* 116: B02208.
6. Vinograd, V.L., Dymshits, A.M., Winkler, B., Bobrov, A.V. (2011) Computer simulation of Na-bearing majoritic garnet. *Doklady Earth Sciences*, 441: 1508-1511
7. W. F. McDonough and S.-s. Sun. The composition of the earth. *Chemical Geology*, 120:223–253, 1995.
8. Dziewonski, A.M., Anderson, D.L., 1981. Preliminary reference Earth model. *Phys. Earth Planet. Inter.* 25, 297–356.
9. W. Kohn and L. J. Sham. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 140:1133 – 1138, 1965.
10. T. Katsura and E. Ito. The system Mg_2SiO_4 - Fe_2SiO_4 at high pressures and temperatures: Precise determination of stabilities of olivine, modified spinel, and spinel. *J. Geophys. Res.*, 94:15663–15670, 1989.

Thermal conductivity and thermal rectification in carbon-nanotube-based materials

Mohammad Alaghemandi, Frédéric Leroy, Elena Algaer, Michael C. Böhm, and Florian Müller-Plathe
Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie and Center of Smart Interfaces, TU Darmstadt

Kohlenstoff-Nano-Röhrchen könnten den Wärmeschutz revolutionieren: Zum einen leiten sie die Wärme besser als Metalle. Zum anderen strömt die Wärme schneller von einem dicken Ende des Röhrchens zum dünnen als umgekehrt. Forscher der TU Darmstadt wollen diese Eigenschaften besser verstehen und im Alltag nutzbar machen. Gelänge es, könnte man Wärme mithilfe der Kohlenstoff-Nano-Röhrchen effizienter transportieren, etwa in Wohnräume oder aus der Ummantelung elektronischer Schaltungen.

Carbon nanotubes (CNTs) have extremely high thermal conductivities, far beyond that of the best metallic conductors such as silver. Therefore, they are potential ingredients in situations where high-thermally conducting materials are needed, for example in the packaging of electronic circuits, whose excess heat must be efficiently removed. In contrast to metals, their thermal conductivity is almost entirely due to lattice vibrations or phonons. Electrons hardly contribute to the heat conduction.

However, their thermal peculiarities do not end at the high conductivity. They show a non-Fourier behavior: Their thermal conductivity is not merely a material constant, as for ordinary conductors, but it depends on the length of the nanotube, too. Longer CNTs have a higher thermal conductivity. This experimental finding was not only confirmed by our simulations but also explained. The high thermal conductivity results from long-wavelength phonons and long waves only fit into long CNTs.

Another peculiarity is the fact that CNTs, which have been externally coated with a dense material so their diameter increases from one side to the other, show the remarkable feature of thermal rectification. The heat flows easier and faster from the thick to the thin end than in the reverse direction. The difference of thermal conductivities in both directions amounts to around 10%. If this could be increased, one could imagine energy harvesting buildings: during the day, a house could accumulate heat due to fast heat flow. During the night, the release of the heat to the outside would be much slower. Such walls would contribute to energy conservation. Another analogy is obvious: If the heat flow in one direction were significantly lower than in the other, we would have the thermal equivalent of an electrical diode. And if a diode can be built, a transistor can be built, too. This would open the way to compute with heat flow. We have

studied the effect by molecular dynamics simulations of suitably modified CNTs. The effect has not only been corroborated. We have also contributed to its explanation: The fact that rectification is found in classical-mechanical molecular dynamics means that no quantum mechanics is needed to understand it, but arguments about the transmission of waves in gradient materials suffice. Incidentally, we predict by simulation that there should be also other nanostructures that show thermal rectification, for example junctions between CNTs and graphene sheets.

Finally, there has been a great interest to harness the high thermal conductivity of CNTs in practical materials by embedding them into polymers. The hope was that the thus prepared nanocomposites would have thermal conductivities several orders of magnitude higher than ordinary unfilled plastics with only a small fraction of CNTs added. This hope has failed. Researchers observe an increase by a factor of 2 or 3 over a virgin polymer and they need several percent of CNTs in the composite to achieve even these values. Our molecular dynamics (see Figure) calculations show why this is the case. We have ruled out the possibility that the long-wavelength phonons in the CNTs are damped by the surrounding polymer. This is not the case; the longitudinal phonons, which are responsible for conducting heat, continue unabated. The bottleneck for heat conduction is the interface between polymer and CNT, which offers a high resistance to heat transport. The effect is that not much of the heat in the polymer, which needs to flow from the hot to the cold side, finds its way into the CNT. And the little heat, which manages to enter a CNT, may travel a large distance in it very quickly, but it has difficulty leaving the CNT at the other end. The everyday analogy is a fast highway whose accesses are blocked by construction work. Can we suggest a way of improving the thermal conductivity of CNT-based nanocomposites? Our

simulations indicate a careful yes. There is little point to continue with the present approach of simply mixing polymer and CNTs. Instead, a possibility might be to chemically graft polymer chains onto the CNTs, which mix intimately with the surrounding polymer and provide a better thermal coupling between the two phases.

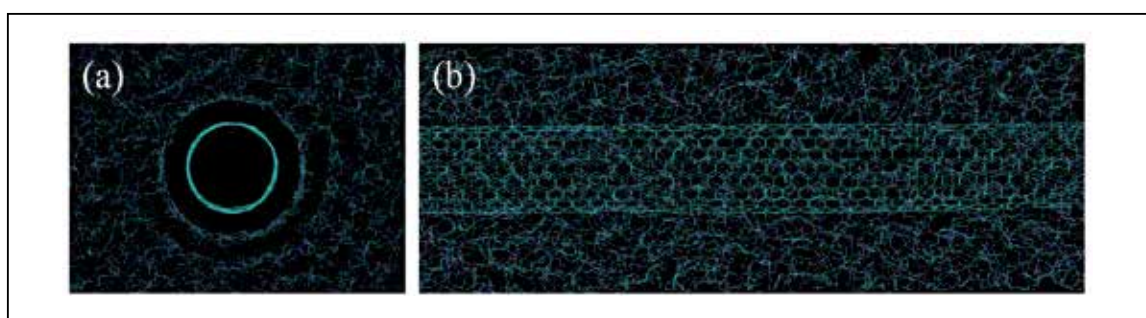


Figure 1:

A carbon nanotube is embedded in a matrix of amorphous polyamide-6,6. Our molecular calculations indicate the reason why such nanocomposites have much lower thermal conductivities than expected.

References:

1. "Thermal rectification in mass-graded nanotubes: a model approach in the framework of reverse non-equilibrium molecular dynamics simulations", M. Alaghemandi, F. Leroy, E. Algaer, M. C. Böhm, and F. Müller-Plathe, *Nanotechnology* 21, 075704 (2010). [DOI:10.1088/0957-4484/21/7/075704]
2. "Thermal rectification in nanosized model systems: A molecular dynamics approach", M. Alaghemandi, F. Leroy, F. Müller-Plathe, and M. C. Böhm, *Phys. Rev. B* 81, 125410 (1–12) (2010). [DOI: 10.1103/PhysRevB.81.125410]
3. "Correlation between thermal conductivity and bond length alternation in carbon nanotubes: A combined reverse nonequilibrium molecular dynamics - Crystal orbital analysis", M. Alaghemandi, J. Schulte, F. Leroy, F. Müller-Plathe, and M. C. Böhm, *J. Comput. Chem.* 32, 121–133 (2011). [DOI: 10.1002/jcc.21605]
4. "Thermal Conductivity of a Carbon Nanotube – Polyamide-6,6 Composite: Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations", M. Alaghemandi, M. C. Böhm, and F. Müller-Plathe, *J. Chem. Phys.* 135, 184905 (2011). [DOI: 10.1063/1.3660348]
5. "Thermal Conductivity and Thermal Rectification in Carbon Nanotubes: Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations", M. Alaghemandi (Dissertation, TU Darmstadt, 2010).

The influence of nanostructures on the static wetting properties of solid surfaces

Frédéric Leroy, Claudia Schwartzkopff and Florian Müller-Plathe

Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie and Center of Smart Interfaces, TU Darmstadt

Bei der Selbstreinigung von Glasscheiben spielt die Oberflächenspannung an der Grenze zwischen Wasser und Scheibe eine große Rolle. So wichtig diese Energie für Benetzungseigenschaften ist, so schwer lässt sie sich messen. Chemiker der TU Darmstadt haben einen Algorithmus entwickelt, der diese Oberflächenspannung bestimmt. Zudem haben sie in Simulationen untersucht, wie sich die Rauigkeit auf die Benetzungseigenschaften des nanostrukturierten Materials auswirkt.

The general framework of this report deals with the quantitative description of the wetting properties of interfaces between liquids and soft or solid substrates. Adhesion between two surfaces, spreading of a painting or self-cleaning of surfaces are typical examples of wetting phenomena. In these phenomena, the interactions at the interface between the substrate and the liquid play a central role. Wetting features of surfaces at much smaller length-scales are important, too. For example, polymer nanocomposites are materials where particles of which dimensions are of a few nanometers are embedded in a polymer matrix. In order to improve the properties of the polymer material, the nanoparticles must be homogeneously dispersed. Here again, the interactions at the interface between the nanoparticles and the polymer largely contribute to determine the characteristics of the composite material.

The last decade has witnessed the development of experimental techniques which have enabled the preparation of materials involving nanoparticles or the production of surfaces exhibiting heterogeneity patterns at the nanometre scale. The implementation of both chemical and topography heterogeneities may be controlled. It is expected and it has already been shown experimentally that surfaces exhibiting these patterns may enhance their wetting properties in comparison with materials with lower levels (i.e. larger length-scales) of heterogeneity. For example, nanostructured surfaces with an appropriate chemical composition yield amphiphobic materials. These materials are able to repel both water and oily fluids and are therefore of high technological interest. Despite these developments, the precise understanding of how nanostructures generally influence the wetting properties of surfaces remains largely unexplored both experimentally and theoretically.

A key quantity in this context is the solid-liquid surface free energy of a given solid-liquid interface. The sign and the magnitude of this thermodynamic quantity provide with an unambiguous measure of the strength of the interaction between a fluid and a solid at equilibrium. However, no experimental method has yet been able to directly measure this key quantity. We have contributed theoretically to the issue of determining solid-liquid surface free energies. To that end, we have employed statistical mechanics to derive and implement an algorithm that allows these quantities to be computed by means of molecular dynamics simulations. In addition, we have performed simulations of nanometer sized droplets to understand how roughness can stabilize these objects that have been observed experimentally only very recently.

Equipped with the tools mentioned above, we have studied the influence of nanometer scale roughness on the wetting properties of extended non-polar surfaces interacting with water. We assessed whether continuum thermodynamics could capture the variations observed in our calculations at the nanometer scale. The limits of the validity of the continuum approximation have been identified. Surprisingly, we found that only surfaces exhibiting very superficial defects and roughness patterns that generate too strong confinement of water yield deviations from the continuum predictions, though weak in magnitude.

Our results indicate that the static wetting properties of nanostructured materials can be quantified by means of a continuum approach. Our work also provides with a precise understanding of what drives the behaviour of macroscopic quantities such as the surface free energies in the light of microscopic information dealing with the behaviour of molecules at the interfaces.

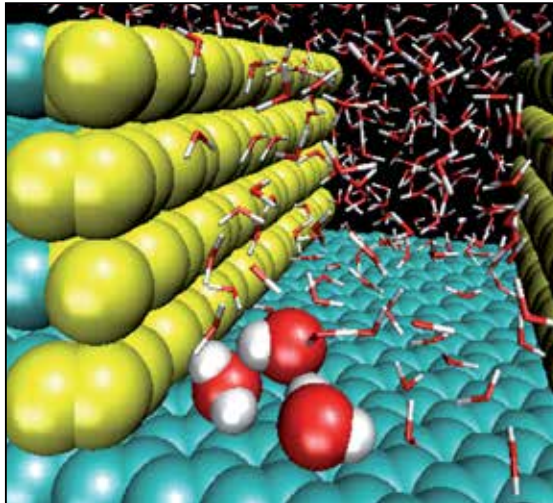


Figure 1:
Water molecules in a nanometer sized cavity

There are several possible extensions to our work. 1) We aim to generalize our approach to address the wetting properties of materials such as spherical nanoparticles or carbon nanotubes. 2) We plan to address the wetting properties of surfaces such as polar surfaces or polymer substrates. 3) We intend to study other liquids than water such as ionic liquids. 4) It is our will to implement our numerical approach in the framework of mesoscopic models so that we can address the behaviour of polymer systems.

References:

1. "Solid-liquid surface free energy of Lennard-Jones liquid on smooth and rough surfaces computed by molecular dynamics using the phantom-wall method", Leroy F and Müller-Plathe F, J. Chem. Phys. 133, 044110 (2010). <http://dx.doi.org/10.1063/1.3458796>
2. "Rationalization of the behavior of solid-liquid surface free energy of water in Cassie and Wenzel wetting states on rugged solid surfaces at the nanometer scale", Leroy F and Müller-Plathe F, Langmuir 27, 637-645 (2011). <http://dx.doi.org/10.1021/la104018k>
3. "Characterization of nanometer-sized droplets on smooth and rugged surfaces by molecular dynamics simulations" C. Schwartzkopff (Bachelorarbeit 2011)
4. "Can Continuum Thermodynamics Characterize Wenzel Wetting States of Water at the Nanometer Scale?", F. Leroy and F. Müller-Plathe, submitted to J. Chem. Theo. Comp.

Two Experimental Studies on Self-Assembled Monolayers

M. Kind

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

One of our main research interests regards self-assembled monolayers (SAMs) of organic thiolates or selenolates on coinage metals. Such systems have numerous applications in nanotechnology [1,2].

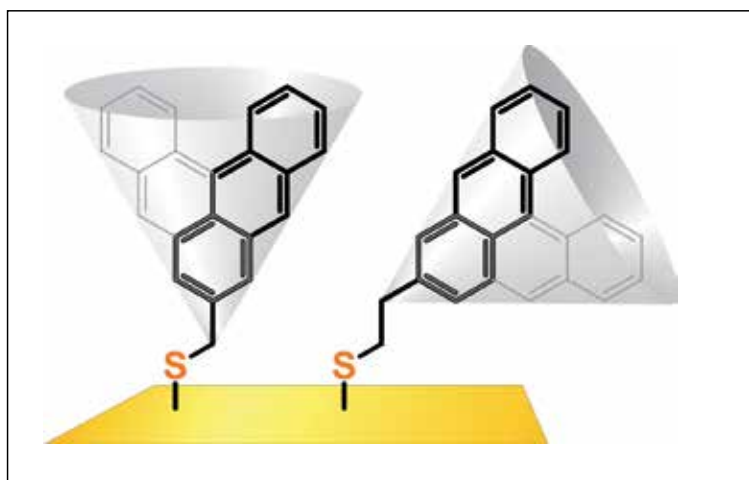
To investigate the properties of functionalized surfaces, we employ a plethora of surface-analytical methods. Infrared absorption-reflection spectroscopy (IRRAS) plays a major role among these, since it can be used not only to identify the chemical species the investigated layers consist of. Additionally, it gives information on the degree of order of the molecules and even on their orientation relative to the substrate surface normal.

A vital precondition for the correct interpretation of the IRRAS data of SAMs is the accurate assignment of vibrational modes and the identification of the directions of their related transition dipole moments relative to the molecular axis. Density functional theory (DFT) calculations of isolated organic thiols or selenols make a valuable help in interpreting experimental infrared spectra. During the period 2010-2011, we used the CSC cluster to calculate vibrational spectra of a couple of molecules that were used to prepare monolayers on gold and silver surfaces. Combined with several other surface-analytical methods, IRRAS experiments were employed to fully characterize two newly synthesized kinds of SAMs with interesting properties. The results of these studies were published in renowned scientific journals:

I. "Compensation of the Odd-Even Effects in Aromatic Self-Assembled Monolayers by Nonsymmetric Attachment of the Aromatic Part" [3]

Simple n-alkanethiolate SAMs as well as more complicated monolayers built from molecules with one or more phenyl rings connected to the sulfur atom via a varying number of methylene spacers exhibit an "odd-even" effect: molecules with an odd number of methylene spacers have a different tilt angle and form SAMs with a different lateral order than molecules with an even number of methylene spacers. This effect is markedly reduced in SAMs built from organothiols with a nonsymmetrical attachment of an aromatic part (in this study an anthracene unit) to the alkylic chain.

The orientation of the anthracene-substituted alkanethiolate molecules with respect to the substrate surface was obtained by using near-edge x-ray absorption fine structure (NEXAFS) spectroscopy and IRRAS in combination with DFT calculations.

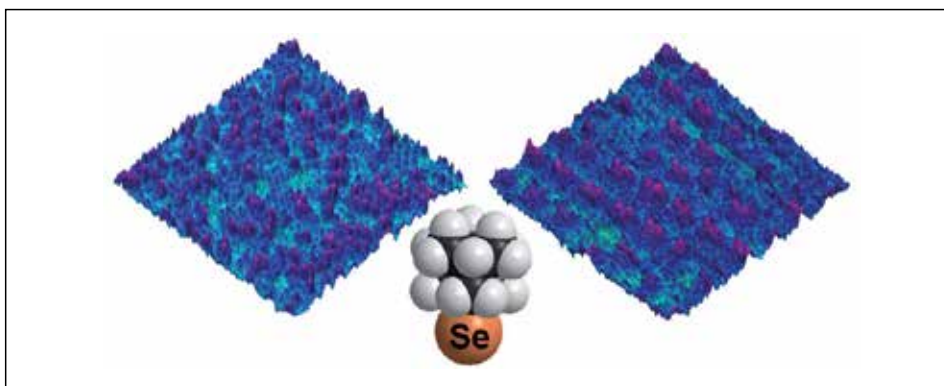


2. “Dynamic Double Lattice of 1-Adamantane-selenolate Self-Assembled Monolayers on Au{111}” [4]

The structures of organothiolate or -selenolate SAMs on surfaces of coinage metals like gold are defined by the interaction between the layer forming molecules and the interaction of the anchoring groups with the substrate surface. The aim of this study is a deeper understanding of the selenolate-gold interaction. For this purpose, attractive interactions between adjacent molecules in the monolayer were minimized by choosing very bulky organic moieties, i.e. adamantyl.

Using scanning tunneling microscopy (STM), two binding modes with different conductivities were found in the 1-adamantanselenolate monolayer. Experiments at elevated temperatures revealed that the SAM molecules are mobile and can rearrange to rows of highly conductive dimers surrounded by less conductive molecules.

IRRAS in combination with DFT calculations was used to confirm the identity of the SAM forming molecules and to obtain their orientation relative to the gold surface.



References:

1. J.C. Love, L.A. Estroff, J.K. Kriebel, R.G. Nuzzo, G.M. Whitesides, *Chemical Reviews* 2005, 105, 1103-1169.
2. M. Kind, C. Wöll, *Progress in Surface Science* 2009, 84, 230-278.
3. J. Dauselt, J. Zhao, M. Kind, R. Binder, A. Bashir, A. Terfort, M. Zharnikov, *Journal of Physical Chemistry* 2011, 115, 2841-2854.
4. J. N. Hohman, M. Kim, B. Schüpbach, M. Kind, J. C. Thomas, A. Terfort, P. S. Weiss, *Journal of the American Chemical Society* 2011, 133, 19422-19431.

Laser Induced Acoustic Desorption

A.V. Yakubovich¹, A.V. Solov'yov¹, and I.V. Solov'yov²

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² UIUC, Urbana, USA

Mit Molekulardynamik-Simulationen untersuchen Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies, wie Lysin-Aminosäuren von Nickel-Folien abdampfen. Dazu simulieren sie die Laser-induzierte akustische Desorption (LIAD) am Computer. Bei diesem Verfahren wird die Rückseite einer hauchdünnen Metallfolie durch einen Laserpuls bestrahlt, der sie zum Schwingen bringt. Das regt die Biomoleküle dazu an, sich von der Folie zu lösen. Die Simulationen zeigen, dass die Beschleunigung der Folie beeinflusst, wie schnell die Aminosäuren abdampfen.

Laser induced acoustic desorption (LIAD) is a procedure of gentle lifting of large neutral biomolecules into the gas phase. In LIAD experiments the biomolecules are deposited on a surface of a relatively thin ($\sim 10\mu\text{m}$) metallic foil. The back surface of the foil is irradiated by the laser pulse. The energy of the laser is adsorbed by the material of the foil which consequently causes the propagation of acoustic and thermal waves. The propagating waves induce vibration of the foil material which stimulates the emission of biomolecules from the foil surface to the gas phase.

By means of molecular dynamics simulations we have investigated the desorption process of lysine amino acids from the surface of the nickel foil. The desorption rate of the amino acids as a function of the surface acceleration has been analysed. It was shown that the desorption rate has an exponential dependence on the value of the substrate acceleration. The final group velocities of the desorbed molecules were analysed. It was shown that in the coordinate frame moving with the speed of the substrate at the initial moment of time, the velocities of the molecules are inversely proportional to the substrate acceleration.

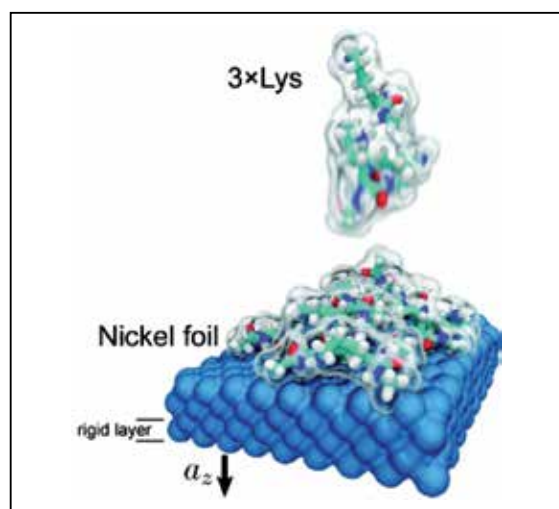


Figure 1:
Evaporation of a cluster of several lysine residues from the surface of a nickel foil. The evaporation is caused by the foil acceleration.

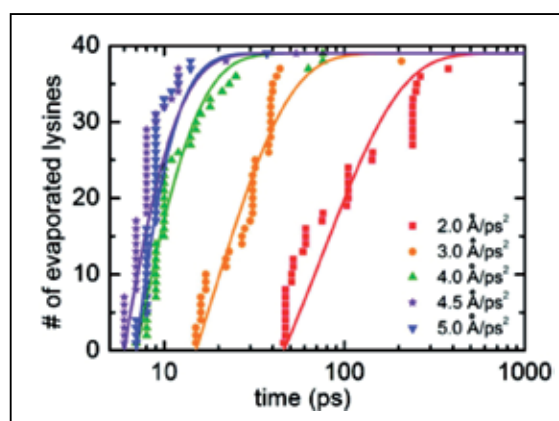


Figure 2:
The number of evaporated lysine residues as a function of time after the start of nickel foil acceleration. Symbols show the results of molecular dynamics simulations corresponding to different values of foil acceleration. Solid lines show the theoretical curves corresponding to the results of molecular dynamics simulations. The legend indicates the values of acceleration used in the simulations.

References:

1. V.V. Dick, I.A. Solov'yov and A.V. Solov'yov, 'Fragmentation pathways of nanofractal structures on surfaces', Phys. Rev. B 84, 115408 (2011).
2. V.V. Dick, 'Mechanism of Nano-Fractal Structure Formation and Post-Growth Evolution', Dissertation, Goethe-Universität Frankfurt am Main (2011).

Fractals on a Surface

A.V. Solov'yov¹, V. Dickl, I.V. Solov'yov² and C. Bréchnac³

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² UIUC, Urbana, USA, ³ CNRS, France

Hauchdünne Beschichtungen auf Sonnenbrillen oder Solarzellen sollen möglichst glatt sein. Dazu müssen die Teilchen beim Beschichten gleichmäßig aufgetragen werden. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies untersuchen in Computer-Simulationen, wie sich die Teilchen auf der Oberfläche anordnen. Sie prüfen, wie die Anordnung hinzukommender Teilchen durch die Temperatur des Materials, die bereits angelagerten Teilchen sowie die Bindungsenergie zwischen Teilchen und Untergrund beeinflusst wird.

We developed a theoretical tool for studying post-growth processes occurring in nanofractals grown on a surface. A method was developed which accounts for the internal dynamics of particles in a fractal. We demonstrated that particle diffusion and detachment controls the shape of the emerging stable islands on a surface.

It was shown that the morphology of islands on a surface is mainly governed by the characteristic time needed for the newly deposited particles to reach the growth region (nucleation time) and by the characteristic time needed for a particle to find an optimum position within an island (rearrangement

time). To get an in depth understanding of the self-organization and fragmentation processes on a surface we have investigated how various essential parameters of the system influence the diffusion of clusters on a surface. In particular, we considered the cluster size, the binding energy between clusters and the substrate and the temperature. We considered different scenarios of fractal post-growth relaxation and analyzed the time evolution of the island's morphology. The result of calculations were compared with available experimental observations, and experiments in which the post-relaxation of deposited macrostructure can be probed were suggested.

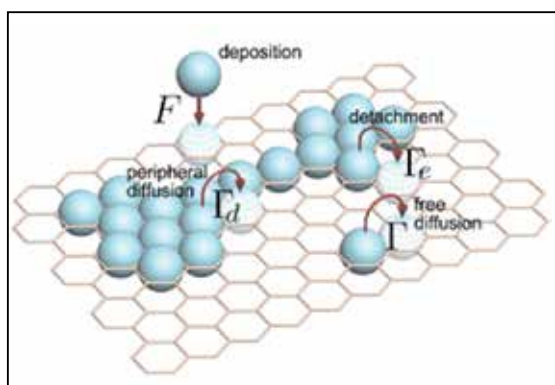


Figure 1:
Arrangement of deposited particles on a surface. The important processes which govern pattern formation on a surface are indicated by arrows: F is the particle deposition rate, Γ is the diffusion rate of a free particle, Γ_d is the diffusion rate of a particle along the periphery of an island, and Γ_e is the detachment rate of a particle from the island.

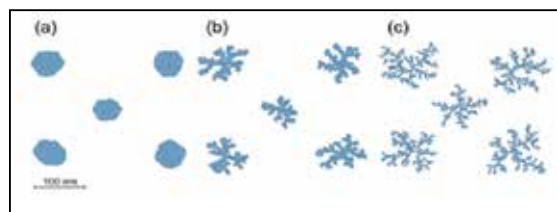


Figure 2:
Formation of islands with different morphologies on a surface during the particle deposition process: (a) formation of compact islands (low particle deposition rate); (b) formation of fractals with thick branches (intermediate particle deposition rate); (c) formation of the fractal structures with thin branches (fast particle deposition rate).

References:

1. V.V. Dickl, I.A. Solov'yov and A.V. Solov'yov, 'Fragmentation pathways of nanofractal structures on surfaces', Phys. Rev. B 84, 115408 (2011).
2. V.V. Dickl, 'Mechanism of Nano-Fractal Structure Formation and Post-Growth Evolution', Dissertation, Goethe-Universität Frankfurt am Main (2011).

Chemical order and local structure of the lead-free relaxor ferroelectric $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$

Melanie Gröting, Silke Hayn, Karsten Albe
Fachgebiet Materialmodellierung, Technische Universität Darmstadt

Ferroelektrika sind Materialien mit einer spontanen, schaltbaren elektrischen Polarisation. Sie sind piezoelektrisch und können als elektromechanische Aktoren oder Sensoren eingesetzt werden. Materialwissenschaftler der TU Darmstadt arbeiten daran, umweltfreundliche, bismuthhaltige Substitutionswerkstoffe mit verbesserten Eigenschaften zu entwickeln, welche die etablierten bleihaltigen Perowskite ersetzen können. Bei der Vorhersage der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen spielen Elektronenstrukturechnungen eine wichtige Rolle.

$\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ (NBT) is a model relaxor ferroelectric with two different cations (Na^+ and Bi^{3+}) on the A-site of the perovskite structure. NBT-based materials show extraordinarily high strains and are amongst the most promising candidates to substitute the toxic $\text{PbZr}_{1/2}\text{Ti}_{1/2}\text{O}_3$ (PZT) in piezoelectric applications. Especially, recent results on $\text{N} \text{ Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3\text{-BaTiO}_3\text{-K}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{NbO}_3$ (NBT-BT-KNN) solid solutions revealed promising piezoelectric properties.^[1,2]

The origin of this material's relaxor behavior is still controversial, but in B-site mixed perovskites it is generally associated with heterovalent disorder.^[3] NBT has aliovalent cations on the A-site (Na^+ and Bi^{3+}) in the exact ratio 1:1. For B-site mixed perovskites chemical ordering is generally understood.^[4] Order, commonly rock-salt (III)-order, occurs when the charge difference between the cation species occupying the same crystallographic site is $\Delta q \geq 2$.

In contrast, A-site ordering is much less common. There exist only a few examples where A-site order is experimentally found. Examples can be found in a review recently published by King and Woodward.^[5] They show that A-site order commonly occurs in {001}-layers, but that charge differences between the cations of $\Delta q \geq 2$ are not sufficient to cause ordering. Systematic oxygen vacancies, vacancies in the A-sublattice or B-site ordering are necessary to stabilize chemical A-site order in mixed perovskites.

In order to gain insights into the chemical ordering tendency, its driving force and the consequences for the local structure we investigated six different cation configurations in $2 \times 2 \times 2$ (pseudo)cubic perovskite supercells using total energy calculations based on electronic density functional theory. We calculated total energies of the different Bi/Na-orders in ideal cubic perovskite structures and in relaxed structures, the results are shown in Fig. 1 (contributions from ionic and cell shape relaxation

are given separately). In the ideal perovskites the different configurations reveal only small variations in total energy of less than 120 meV, with 110-order being the most favored and 001-order being the most unfavored order type. Taking structural relaxations into account the maximal difference is almost doubled (220 meV). The most stable structure now is the layered 001-configuration, while the rock-salt ordered system III becomes the most unfavored one.

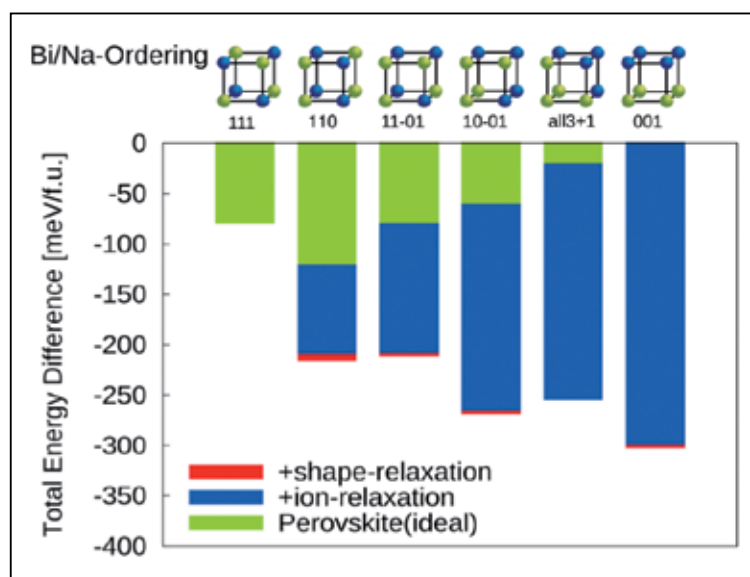


Figure 1: Total energies from DFT calculations in ideal perovskite (green) and relaxed structures (blue and red). The total energy of the ideal perovskite 001 is set to zero. Energy changes from cell shape relaxation (red) are very small.

In the perovskite structure oxygen is quasi-octahedrally coordinated by Bi/Na- and Ti-atoms, with two Ti-atoms in the apical positions of the octahedron at a distance of $a/2$ and four Bi/Na-atoms in the equatorial positions at a distance of $a\sqrt{2}$, resulting in six possible oxygen environments characterized by the Bi/Na-coordination: $4 \times \text{Na}$, $4 \times \text{Bi}$, $1 \times \text{Bi}/3 \times \text{Na}$, $3 \times \text{Bi}/1 \times \text{Na}$, and $2 \times \text{Bi}/2 \times \text{Na}$ in cis-

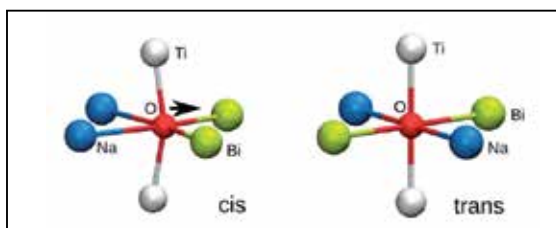


Figure 2:
Oxygen environments in the $2\text{xBi}/2\text{xNa}$ (cis)- and $2\text{xBi}/2\text{xNa}$ (trans)-coordination. The cis-coordination allows relaxation of the oxygen anion while the trans-coordination does not.

or trans-coordination, the latter two are shown in Fig. 2. Oxygen ions are expected to displace, if there are significant differences in size, charge or bond strength of the coordinating cations and if the oxygen ion is not an inversion center. Hence, among the six possible coordinations, there are three where no displacement of the oxygen ion is possible (inversion symmetry), namely 4xNa , 4xBi and $2\text{xBi}/2\text{xNa}$ (trans), one coordination where displacing is severely facilitated $2\text{xBi}/2\text{xNa}$ (cis), while in $3\text{xBi}/1\text{xNa}$ and $1\text{xBi}/3\text{xNa}$ smaller displacements

towards the Bi ions can occur. These displacements can help to release local stresses and to compensate local charge imbalances, thus stabilizing certain configurations. Local ionic displacements are observed mainly on the oxygen sublattice in the exact way postulated by Knapp,^[6] while almost no displacements on the two cation sublattices are observed. Moreover structural relaxation can reverse the stability of the considered configurations with respect to the ideal perovskite structure. In the rock-salt ordered structure all oxygen anions are in the $2\text{xBi}/2\text{xNa}$ (trans) coordination, which explains why this configuration does not relax at all. We report for the first time on displacive disorder on the oxygen sublattice, which up to now has been neglected in experimental studies and should be investigated in more detail in future research.

In order to identify the driving force for these oxygen displacements we present partial densities of state in Fig. 3, before and after relaxation of the chemical configuration 001 in comparison with 111. It can be seen that upon relaxation additional Bi 6s-states

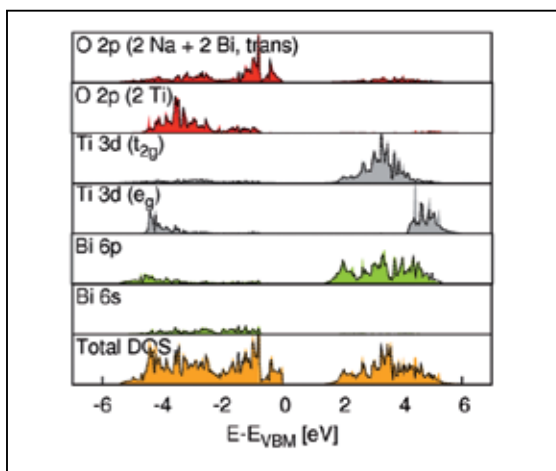
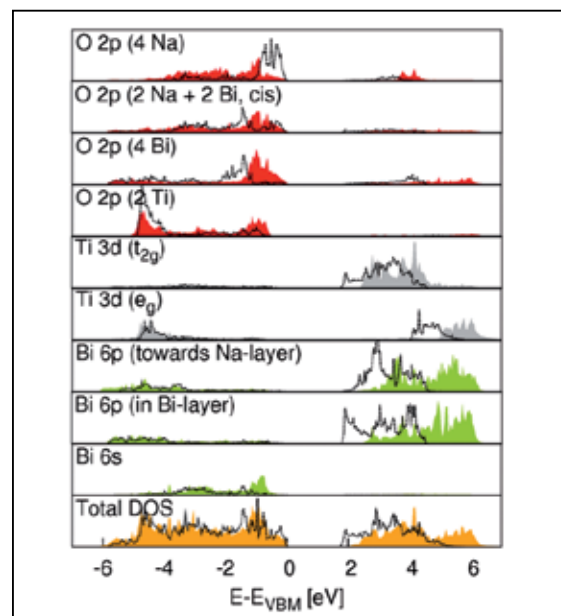


Figure 3:
Densities of states of chemical configurations 111 (left) and 001 (right) before (black dotted line) and after relaxation (filled). Energies are given relative to the valence band maximum. On structural relaxation - possible in all structures except the 111 configuration - band gaps are enlarged and changes especially of the Bi 6s- and O 2p-state densities occur.



arise at the top of the valence band. Although the maximum of 6s-states stays below the valence band around -10.0 eV, there is a significant increase of the state density in the anti-bonding region above -2 eV, these states mix with both the Bi 6p-states and the O 2p-states, which is characteristic for the formation of a stereochemically active Bi^{3+} lone pair.^[7] This hybridization of Bi 6sp–O 2p states leads to a considerable energy gain, which increases the stability especially of structures with layers of high Bi-concentrations in {001}-planes. This kind of planes was considered by Kreisel et al. to explain the diffuse scattering patterns indicative for Guinier-Preston-Zones.^[8]

Generally, chemical ordering will occur if there is a decisive energy difference between a most favored ordered configuration and other structures and if this energy difference is higher than the entropy contribution of mixing. We find an energy difference of 34 meV between the two most stable structures with 001- and 10-01-order.

The entropy contribution of mixing to the free energy in the disordered state can be approximated by the configurational entropy of an ideal solution with $x_{\text{Bi}}=x_{\text{Na}}=0.5$ by

$$-T\Delta S = -k_B T [-x_{\text{Bi}} \ln x_{\text{Bi}} - x_{\text{Na}} \ln x_{\text{Na}}]$$

This approximation gives a lower limit for the ordering temperature, since the ideal solution model is overestimating the mixing entropy. At sintering conditions the energy equivalent $T\Delta S$ is more than twice the obtained energy difference between the most stable ordered states, thus the disordered state is favored over all ordered states. The critical temperature is about 570 K. Chemical long-range ordering can therefore be ruled out, but short-range ordering with alternating layers of Bi and Na along $\langle 001 \rangle$ -directions is still possible to occur. Thus, depending on synthesis conditions, different degrees of short-range order can be expected.

Referenzen:

1. W. Jo, T. Granzow, E. Aulbach, J. Rödel, D. Damjanovic, J. Appl. Phys., 105 (2009) 094102.
2. J. Rödel, W. Jo, K. T. P. Seifert, E. M. Anton, T. Granzow, D. Damjanovic, J. Amer. Cer. Soc. 92 (2009) 1153-1177.
3. A. A. Bokov, Z. G. Ye, J. Mat. Sci. 41 (2006) 31-52.
4. P. K. Davies, H. Wu, A. Y. Borisevich, I. E. Molodetsky, L. Farber, Ann. Rev. Mat. Res. 38 (2008) 369-401.
5. G. King, P. M. Woodward, J. Mat. Chem. 20 (2010) 5785-5796.
6. M. C. Knapp, P. M. Woodward, J. of Sol. State Chem. 179 (2006) 1076-1085.
7. L. A. Olsen, J. Lopez-Solano, A. Garcia, T. Balic-Zunic, E. Makovicky, J. Sol. Stat. Chem. 183 (2010) 2133-2143.
8. J. Kreisel, P. Bouvier, B. Dkhil, P. A. Thomas, A. M. Glazer, T. R. Welberry, B. Chaabane, M. Mezouar, Phys. Rev. B 68 (2003) 014113.
9. M. Gröting, S. Hayn, K. Albe, Chemical order and local structure of the lead-free relaxor ferroelectric $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$, J. Solid State Chem., 184 (2011) 2041.

Crystal structure prediction for molecular compounds using force-field and quantum-mechanical approaches

Sonja M. Hammer, Edith Alig, Lothar Fink, Martin U. Schmidt
Fachbereich Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Possible crystal structures were predicted for ethyl-tert-butylether (ETBE, a gasoline additive which acts as an octane booster (anti-knock agent)), with global lattice energy minimisations using the force-field approach. All frequent space-groups were tested, and the lattice-parameters were optimised simultaneously with the atomic positions. 39 crystal structures were found within a narrow energy range of 0.5 kJ/mol above the global minimum. To prove the predictions, low-temperature crystallisation experiments were carried out at 80 - 160 K. The crystal structure was determined from X-ray powder data. ETBE crystallises in $C2/m$, $Z = 4$ with molecules on mirror planes. The ETBE molecule adopts a

trans conformation with a torsion angle $(CH_3)_3C-O-C-C$ of 180° , as predicted. The experimental structure corresponds with high accuracy to the predicted structure with energy rank 2, which has an energy of 0.13 kJ/mole above the global minimum and is the most dense low-energy structure.

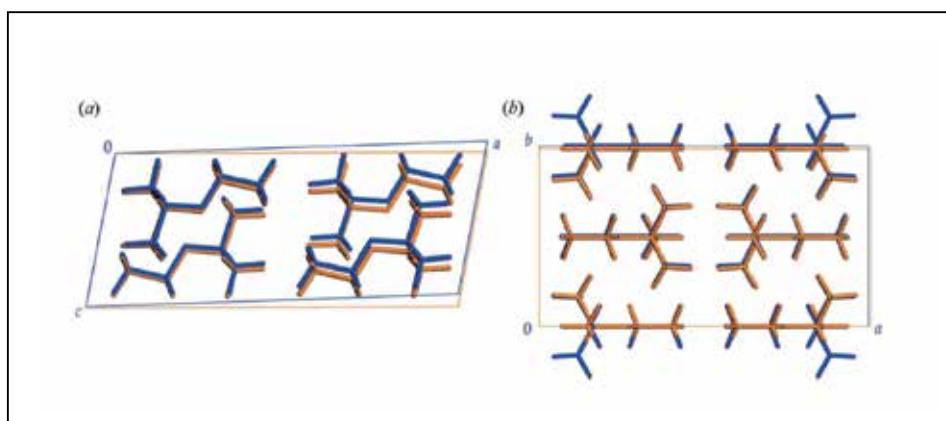


Figure 1:

The Figure shows a comparison of the structure predicted by lattice-energy minimization with rank 2 (blue) with the crystal structure determined from X-ray powder data (orange). (a) View along the b axis; (b) view along the c axis.

Reference:

Sonja M. Hammer, Edith Alig, Lothar Fink, Martin U. Schmidt: "Predicted and experimental crystal structures of ethyl-tert-butyl ether", *Acta Crystallogr.* 2011, B67, 155-162.

Structures and Stabilities of Group-13 Adducts $(\text{NHC})_2(\text{E}_2\text{Hn})$ ($\text{E} = \text{B} - \text{In}$)

Holzmann, Nicole^{1,2}; Stasch, Andreas²; Jones, Cameron³; Frenking, Gernot¹

¹Fachbereich Chemie, Philipps-Universität Marburg, ²holzmann@staff.uni-marburg.de, ³School of Chemistry, Monash University, Melbourne, Australien

Chemiker der Universität Marburg untersuchen die Stabilität und Struktur von Addukten der Stoffgruppe 13, also von Stoffen, die aus den Elementen Bor (B), Aluminium (Al), Gallium (Ga), Indium (In) oder Thallium (Tl) entstehen.

Very recently, we reported about a novel reaction where a stable dimericmagnesium(I) compound LMgMgL (L = bulky guanidinate) is hydrogenated by a complex $\text{NHC}(\text{AlH}_3)$ (NHC = N-heterocyclic carbene) yielding a doubly hydrogen bridged $\text{LMg}(\mu\text{-H})_2\text{MgL}$. [1]

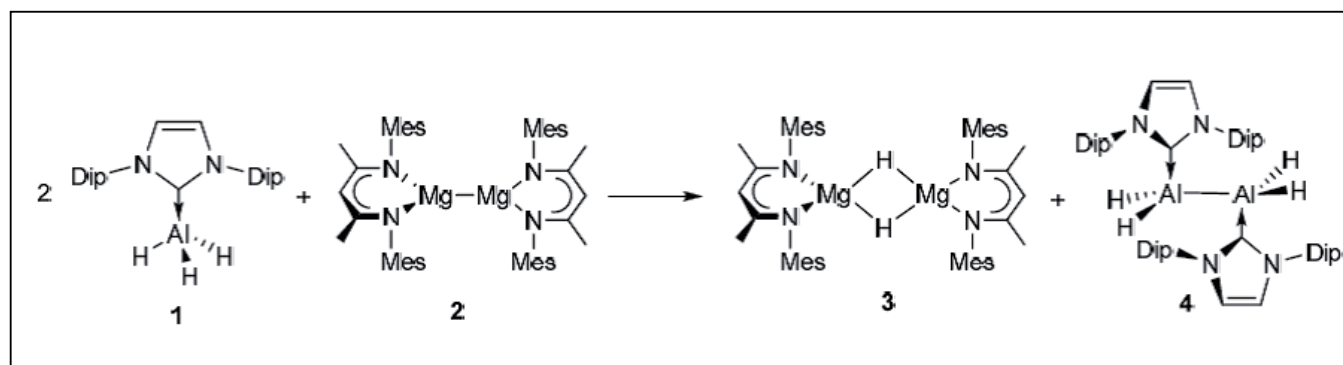


Figure 1:
Hydrogenation reaction of compound LMgMgL with NHC-AlH_3 .

The hydrogenation could be reversed by treating $\text{LMg}(\mu\text{-H})_2\text{MgL}$ with potassium. An interesting side product of this reaction is the stable adduct $(\text{NHC})_2(\text{Al}_2\text{H}_4)$ where the elusive dialane Al_2H_4 is stabilized by two NHC ligands. This is a nice example where application oriented research and fundamental science concomitantly harvest interesting results.

The driving force for the hydrogenation of LMgMgL is the dimerization of the complex $\text{NHC}(\text{AlH}_3)$ with simultaneous hydrogen loss yielding the dialane adduct $(\text{NHC})_2(\text{Al}_2\text{H}_4)$ and H_2 .

It would be helpful to know if there are related systems which could be employed for the reaction shown above but where the dihydrogen release is energetically more feasible. In order to aid in the search for suitable compounds we carried out quantum chemical calculations for the parent systems of group-13 homologues, $(\text{NHC})(\text{EH})_3$, which yield the complexes $(\text{NHC})_2(\text{E}_2\text{H}_4)$ where $\text{E} = \text{B}, \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ upon loss of H_2 .

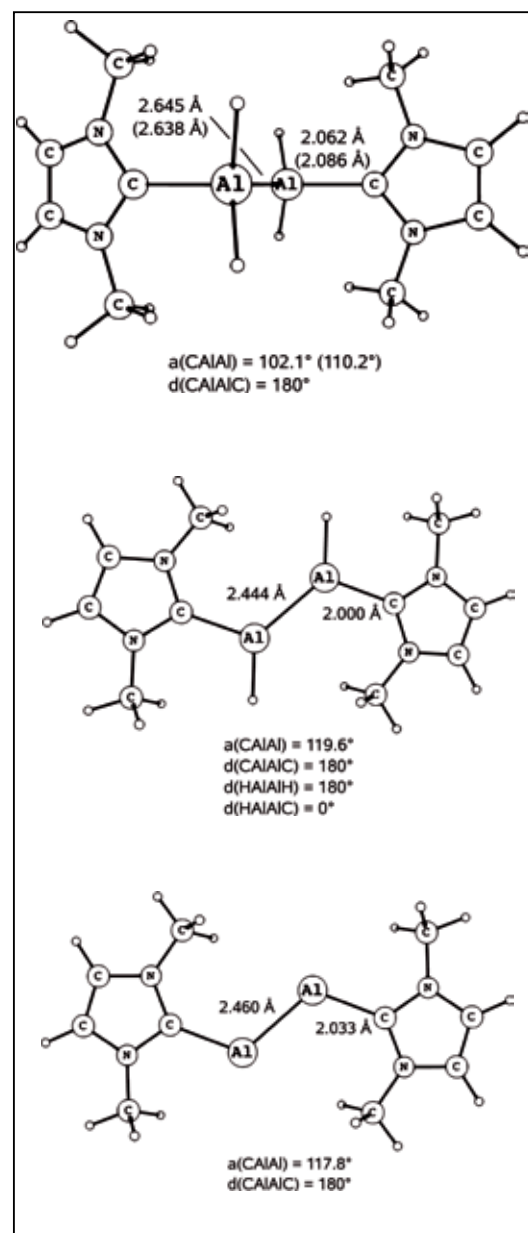


Figure 2: Minimum structures of $(\text{NHC})_2(\text{Al}_2\text{H}_4)$, $(\text{NHC})_2(\text{Al}_2\text{H}_2)$ and $(\text{NHC})_2(\text{Al}_2)$ at RI-BP86/def2-TZVPP level. Experimental values [1] in parentheses. Further eliminations of hydrogen yielding the adducts $(\text{NHC})_2(\text{E}_2\text{H}_n)$ where $n = 0, 2$ were also investigated. [2]

References:

1. Bonyhady, S.J.; Collis, D.; Frenking, G.; Holzmann, N.; Jones, C.; Stasch, A., *Nature Chem.* 2010, 2, 865-869.
2. Holzmann, N.; Stasch, A.; Jones, C.; Frenking, G., *Chem. Eur. J.* 2011, 17, 13517-13525.

Theoretical Study on the Carbonylation of Carbenes

Catharina Goedecke, Gernot Frenking
Fachbereich Chemie, Philipps-Universität Marburg

Carbene sind instabile Kohlenstoff-Verbindungen, die eine hohe Reaktivität aufweisen. Einige Carbene binden Kohlenmonoxid, andere nicht. Chemiker der Universität Marburg simulieren die Reaktionen der Carbene am Computer. Sie wollen herausfinden, woran es liegt, dass einige Carbene Kohlenstoff aufnehmen, andere nicht.

Both triplet and transient singlet carbenes are known to react with carbon monoxide to form the corresponding ketenes. [1] In contrast, stable N-heterocyclic carbenes (NHCs) with a singlet ground state do not react with CO,[2] which can be explained by the destabilizing effects of σ -acceptor substituents like nitrogen on ketenes. [3] Alkylaminocarbenes, however, have been reported to react readily with carbon monoxide,[4] and N,N-diamidocarbenes can be carbonylated reversibly. [5]

This raises the question which carbenes undergo carbonylation reactions and what effects the substituents at the carbene center have on the reaction energies. To this end singlet-triplet gaps of various carbenes and dissociation energies of the corresponding ketenes have been calculated with DFT and perturbation methods. [6]

The results agree with experimental data, and confirm the relative instability of diaminoketenes, thus explaining the reactivity of NHCs. A strong correlation between singlet-triplet gaps and ketene dissociation energies, caused by analogous substituent effects at the central carbon atom, can be observed.

References:

1. D. Bourissou, Chem. Rev. 2009, 109, 3333–3384.
2. D. A. Dixon, A. J. Arduengo, Tetrahedron Lett. 1995, 36, 645–648.
3. T. T. Tidwell, J. Am. Chem. Soc. 1991, 113, 6021–6028.
4. G. Bertrand, Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 3488–3491.
5. C. W. Bielawski, J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 16039–16041.
6. C. Goedecke, G. Frenking, J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 3557–3569.

Structure and Dynamics of Clusters and Fullerenes

A.V. Solov'yov¹, A.V. Korol¹, A.V. Verkhovtsev¹, W. Greiner¹, R.G. Polozkov², V.K. Ivanov², and D. Poenaru³

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² St. Petersburg State Polytech. Univ., Russia, ³ Nat. Inst. Phys., Romania

Forschern des Frankfurt Institute for Advanced Studies ist es gelungen, die elektronische Struktur des Edelgas-Fulleren-Komplexes Ar@C₆₀ mithilfe der Hartree-Fock-Methode widerspruchsfrei zu bestimmen. Ar@C₆₀ besteht aus einem Kohlenstoffgerüst, das wie ein Käfig ein Argon-Atom umschließt.

A self-consistent Hartree-Fock calculation of electronic structure of noble gas endohedral fullerenes (A@C₆₀) was carried out for the first time [1,2]. All electrons of the encaged atom and 240 delocalized electrons of C₆₀ were considered simultaneously within unified electronic configuration. It was shown [3,4] that the account of the non-local exchange interaction within the Hartree-Fock approximation leads to the significant modification of the 3p and 4d shells as opposed to

the local exchange interaction within the local density approximation. As a result of the modification the redistribution of the electronic density of the 3p and 4d shells appears and causes the accumulation of the additional positive charge in the vicinity of the encaged atom and the additional negative charge on the fullerene core.

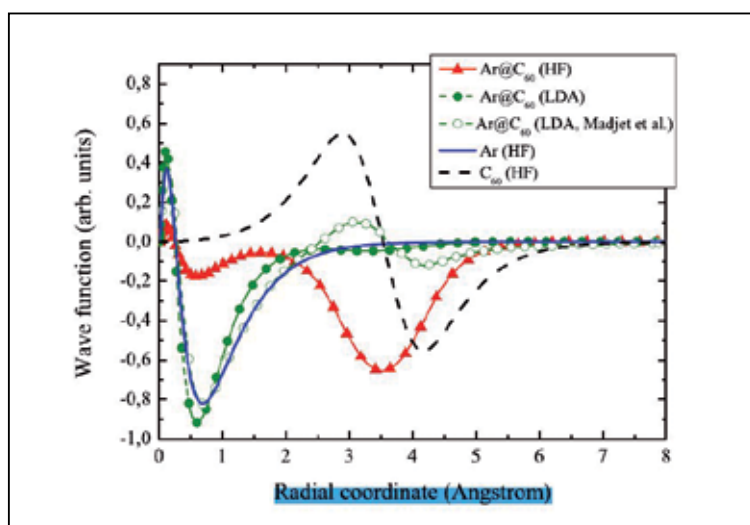


Figure 1:

The 3p wave function in free Ar atom (solid line), in pristine C₆₀ (dashed line) and in Ar@C₆₀ calculated within the HF approximation (line with triangles) and the LDA (filled-circled line). Results of the LDA calculation performed by Madjet et al. (2007) are also presented (open-circled line).

References:

1. A.V. Verkhovtsev, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, 'Investigation of electronic structure of noble gas endohedral fullerenes', Science and Technology Bulletin of Saint Petersburg State Polytechnic University, issue No 1(116), 61-70 (2011) (in Russian).
2. A.V. Verkhovtsev, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, 'Self-consistent Hartree-Fock approach to electronic structure of endohedral fullerenes', International Conference 'Advanced Carbon Nanostructures (ACN 2011)' Book of Abstracts, p. 311 (St. Petersburg, Russia, July 4-8, 2011).
3. A.V. Verkhovtsev, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, 'Role of Exchange Interaction in Self-Consistent Calculations of Endohedral Fullerenes', Nucl. Instrum. Meth. B, in press (2011) (see also arXiv:1108.0918v1).
4. A.V. Verkhovtsev, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, Self-consistent description of endohedral fullerenes' electronic structure within the Hartree-Fock and the local density approximations, The Fifth International Symposium 'Atomic Cluster Collisions (ISACC 2011)' Book of Abstracts, p. 76 (Berlin, Germany, July 20-25, 2011).

Quantum Chemical Calculations on divalent Carbon(0) Compounds and on their analogues of group 14 and 15

Susanne Klein, Gernot Frenking
Fachbereich Chemie, Philipps-Universität Marburg

Mit über 20 Millionen kohlenstoffhaltigen Verbindungen ist Kohlenstoff eines der vielseitigsten Elemente im Periodensystem. In den meisten dieser Verbindungen sind die Kohlenstoffatome vierwertig. Aber es gibt einige Ausnahmen: das dreiwertige Kohlenstoffatom in Kohlenmonoxid und die zweiwertigen C-Atome in Carbenen. Wissenschaftler der Universität Marburg untersuchen, wie die Stabilitäten zustande kommen und was sie unterscheidet. Ihre Studie zeigt, dass auch eine analoge Bindungssituation zu großen Unterschieden in den Eigenschaften dieser Moleküle führen kann.

With over 20,000,000 carbon containing compounds the element carbon is one of the most versatile elements in the periodic system. In most of these compounds the carbon atoms are tetravalent. But there are some exceptions: the trivalent carbon atom in carbon monoxide and the divalent carbon atoms in carbenes, which became famous through the stable N-heterocyclic carbenes synthesised by Arduengo. [1] Additionally to that carbon atoms can also be stabilised by two σ -donor ligands which could be shown before. [2], [3] The general formula of these molecules, which is shown in figure 1, shows that the four valence electrons of the carbon atom remain at this atom and form two lone pairs.

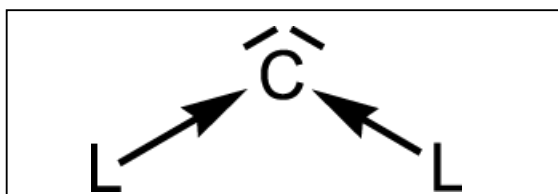


Figure 1:
General formula of a carbene $L \rightarrow C \leftarrow L$, where L are two σ -donor ligands

Experimentally known examples of such molecules are the carbodiphosphoranes and the carbodicarbenes. The bonding situation of the carbodiphosphoranes, which have been known since 1961, [4], [5], [6] was extensively discussed in the literature. [7] The Lewis structures shown in

figure 2 have been used in the past to describe the different reactivities of the carbodiphosphoranes. Theoretical and experimental studies [8] were able to prove that the description as carbenes is the most convenient one. The studies initiated the synthesis of the carbodicarbenes, [9] which are carbenes, too.

Unlike the allenes and cumulenes most of the carbenes are non-linear because of the existence of the two lone pairs. The existence of the two lone pairs can be proved by the shape of the isosurfaces of the two highest lying occupied orbitals HOMO and HOMO-1 and by NBO analysis. Furthermore the molecules with are able to bind two molecules of a Lewis acid due to the existence of two lone pairs. So the calculation of the second proton affinity or the stability of the complexes with two molecules of a Lewis acid like BH_3 or $AuCl$ can be used as hints for the carbene character of a molecule.

The calculations have been performed with DFT (BP86) and post-Hartree-Fock methods (MP2 and SCS-MP2) using the def2-SVP and the def2-TZVPP basis sets. For the bonding analyses the Kohn-Sham orbitals and the results of the NBO analysis were investigated.

The possibility of extending the bonding model of carbenes as donor-stabilised divalent carbon(0) compounds was investigated for other molecules than carbodiphosphoranes and carbodicarbenes.

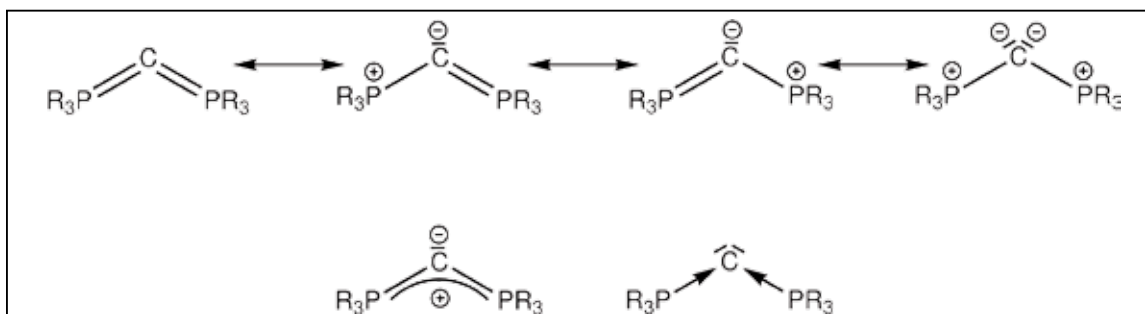


Figure 1:
Lewis structures of carbodiphosphoranes

The borderline between this class of molecules on one hand and allenes and carbenes on the other hand is investigated.

Carbodiamines $R_3N \rightarrow C \leftarrow NR_3$ can also be classified as carbenes since they exhibit high second proton affinities and bind two BH_3 or $AuCl$ molecules even stronger than the carbodiphosphoranes, although the stability with regard to the dissociation of these molecules into a carbon atom and two amines or ammonia, respectively, is much lower than for the carbodiphosphoranes. By analysing the bonding situation and the calculation of proton affinities it could also be demonstrated that carbon atoms can also be stabilised by two sulfanes, two sulfinines or one sulfane and one phosphine. The carbodiyliides $Cp^*E-C-ECp^*$ and $Cp^*E-C-ECp^{*i}$ with $E = B - Ti$ represent carbenes, as proven by bonding analysis and calculating the second proton affinities.

In addition to carbon heavier atoms of the group 14 can be stabilised by two σ -donor ligands[10] as well. Based on the Kohn-Sham orbitals, the NBO analysis, and the first and second proton affinities the bonding model of the tetrelones $L \rightarrow E \leftarrow L$ ($E = Si - Pb$) can be verified for the tetreldisulfanes, tetreldisulfinines and the tetreldiyliides $Cp^*E'-E-E'Cp^*$ with $E' = B - Bi$. Finally, the analogous group 15 compounds were

studied. The E^+ -cations of the elements $E = N - Bi$ can be stabilised by two σ -donor ligands. These complexes can be classified by bonding analysis as carbene analogues. Due to the positive charge, these molecules are significantly weaker double Brønsted bases but the ability to bind two $AuCl$ molecules shows that these molecules can be used as four-electron-donors. To get rid of the positive charge of these molecules the atoms of the group 15 elements are covalently bound to a group R and additionally stabilised by one σ -donor ligand. Without a positive charge of the molecule the first and second proton affinities become larger and are comparable to the ones of the carbenes.

In general, the reactivity of the molecules is determined by the element E , the donor and acceptor capabilities of the ligands, the steric demand of ligands and covalently bound group, and the charge of the molecules. The different donor-stabilised atoms and atomic ions show that an analogous bonding situation can still lead to big differences in the properties of these molecules. The classification of molecules into bonding models can be a useful tool to explain reactivities, however chemistry does not always allow a clear separation between several models.

References:

1. A. J. Arduengo, R. L. Harlow, M. Kline, *J. Am. Chem. Soc.* 1991, 113, 361.
2. R. Tonner, *Zweiwertige Kohlenstoff(0)-Verbindungen: Quatenchemische Studien zur Bindungssituation und Reaktivität von Carbodiphosphoranen und Analoga*, Dissertation, Philipps-Universität Marburg 2007.
3. S. Klein, *Zweiwertige Kohlenstoff(0)-Verbindungen: Quatenchemische Untersuchungen an Carbodicarbenen und deren Analoga*, Diplomarbeit, Philipps-Universität Marburg 2008.
4. F. Ramirez, N. B. Desai, B. Hansen, N. McKelvie, *J. Am. Chem. Soc.* 1961, 83, 3539.
5. C. N. Matthews, G. H. Birum, *Acc. Chem. Res.* 1969, 2, 373.
6. A. T. Vincent, P. J. Wheatley, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1972, 617.
7. (a) W. C. Kaska, D. K. Mitchell, R. F. Reichelderfer, *J. Organomet. Chem.* 1973, 47, 391. (b) H. Schmidbaur, *Nach. Chem. Tech. Lab.* 1979, 27. (c) H. J. Bestmann, *Pure Appl. Chem.* 1980, 52, 771. (d) D. G. Gilheany, *Chem. Rev.* 1994, 94, 1339. (e) K. Kubo, N. D. Jones, M. J. Ferguson, R. McDonald, R. G. Cavell, *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 5314.
8. (a) W. Petz, C. Kutschera, M. Heitbaum, G. Frenking, R. Tonner, B. Neumüller, *Inorg. Chem.* 2005, 44, 1263. (b) R. Tonner, F. Oxler, B. Neumüller, W. Petz, G. Frenking, *Angew. Chem.* 2006, 118, 8206; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 8038. (c) R. Tonner, F. Oxler, B. Neumüller, W. Petz, G. Frenking, *Angew. Chem.* 2007, 119, 5357; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 5263. (d) M. M. Deshmukh, S. R. Gadre, R. Tonner, G. Frenking, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, 10, 2298. (e) R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2008, 14, 3260. (f) R. Tonner, G. Heydenrych, G. Frenking, *Chem. Phys. Chem.* 2008, 9, 1474. (g) R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2008, 14, 3273. (h) R. Tonner, G. Frenking, *Organomet.* 2009, 28, 3901. (i) W. Petz, F. Oxler, B. Neumüller, R. Tonner, G. Frenking, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2009, 2009, 4507. (j) G. Frenking, R. Tonner, *Pure Appl. Chem.* 2009, 81, 597. (k) S. Klein, R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2010, 16, 10160. (l) S. Klein, G. Frenking, *Angew. Chem.* 2010, 122, 7260; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 7106. (m) W. Petz, G. Frenking, *Carbodi-phosphoranes and Related Ligands*, Springer Berlin Heidelberg, 2010, Ausgabe 30, 49–92.
9. C. A. Dyker, V. Lavallo, B. Donnadiou, G. Bertrand, *Angew. Chem.* 2008, 120, 3250.
10. (a) N. Takagi, R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2011, submitted. (b) N. Takagi, T. Shimizu, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2009, 15, 3448. (c) N. Takagi, T. Shimizu, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* 2009, 15, 8593.

A theoretical study on the adsorption of GaP-precursors on the Si(001)(2x1)-surface

Phil Rosenow and Ralf Tonner
Fachbereich Chemie and Materials Science Centre, Philipps-Universität Marburg

Chemiker und Materialwissenschaftler der Universität Marburg untersuchen die Anlagerung von Galliumphosphid (GaP) auf Silizium. Das Material eröffnet die Möglichkeit, Laser auf Silizium aufzubringen. Damit ist es für die Industrie sehr interessant, denn es könnte neue Wege in der Datenverarbeitung weisen.

In a collaborative work with experimental colleagues at the Materials Science Centre (Marburg) the adsorption of GaP-precursors on silicon[1-3] is currently investigated using plane-wave density functional methods (PBE including dispersion with VASP). These materials are of current academic and technological interest due to their ability to provide access to lasers on silicon.[4] Thus, they will be closely investigated in the newly established graduate research training group (DFG) "Functionalisation of semiconductors" in Marburg from 2012 on.

Table 1:
Adsorption energies for the second adsorbate on a surface pre-covered by the first adsorbate for different adsorption sites relative to the most stable site in kJ/mol.

Ist adsorbate 2nd adsorbate Site	PtBu PtBu	PtBuH PtBuH	P P	PH PH	PH2 PH2	Ga Ga	GaH GaH	GaH2 GaH2	PtBu Ga
A1	9.83	4.73	0.85	0.33	2.09	0.00	0.57	1.28	19.34
A2	9.55	4.43	0.87	0.33	2.08	0.05	0.54	1.23	19.34
A3	6.57	13.66	0.99	0.49	1.87	1.60	0.00	0.71	11.87
A4	73.69	62.29	4.24	4.13	0.82	1.58		2.66	0.00
A5	10.09	17.07	1.02	0.07	1.61	1.41	0.71		12.10
A6	9.47	4.40	0.86	0.34	2.06	0.07	0.38	1.19	19.39
B1	9.72	3.29	0.87	0.34	2.10	0.03	0.57	1.28	19.34
B2	9.06	3.83	0.88	0.30	2.06	0.11	0.49	1.28	19.22
B3	9.79	21.45	0.00	0.00	0.00	1.65	0.22	0.00	10.41
B4	9.24	3.96	0.88	0.33	2.06	0.10	0.40	1.28	19.40
C1	-	-	-	-	-	-	-	-	19.33
C2	-	-	-	-	-	-	-	-	19.19
C3	0.00	1.78	-	-	-	-	-	-	17.05
C4	6.25	0.00	-	-	-	-	-	-	15.87
C5	-	-	-	-	-	-	-	-	19.42

So far, the thermochemistry of the gas-phase decompositions of Triethylgallium (GaEt_3) and tert-Butylphosphine (PtBuH_2) and the distribution of adsorbed species on the surface has been explored (Table I). The thermochemical calculations showed that under reaction conditions the β -hydrogen elimination is the favoured decomposition pathway for both molecules. Also, the decomposition of the thereby formed EH_3 -compounds is exergonic in the presence of hydrogen radicals. As can be expected, adsorbed species with bulky ligands block adsorption sites adjacent to the first adsorption site for further adsorbates (Fig. 1). Small adsorbed species such as atoms or diatomic molecules show almost no discrimination for the second adsorption step.

Further work will include the analysis of the bonding situation of the bond between surface and adsorbate and the adsorption behaviour with increased coverage. [5]

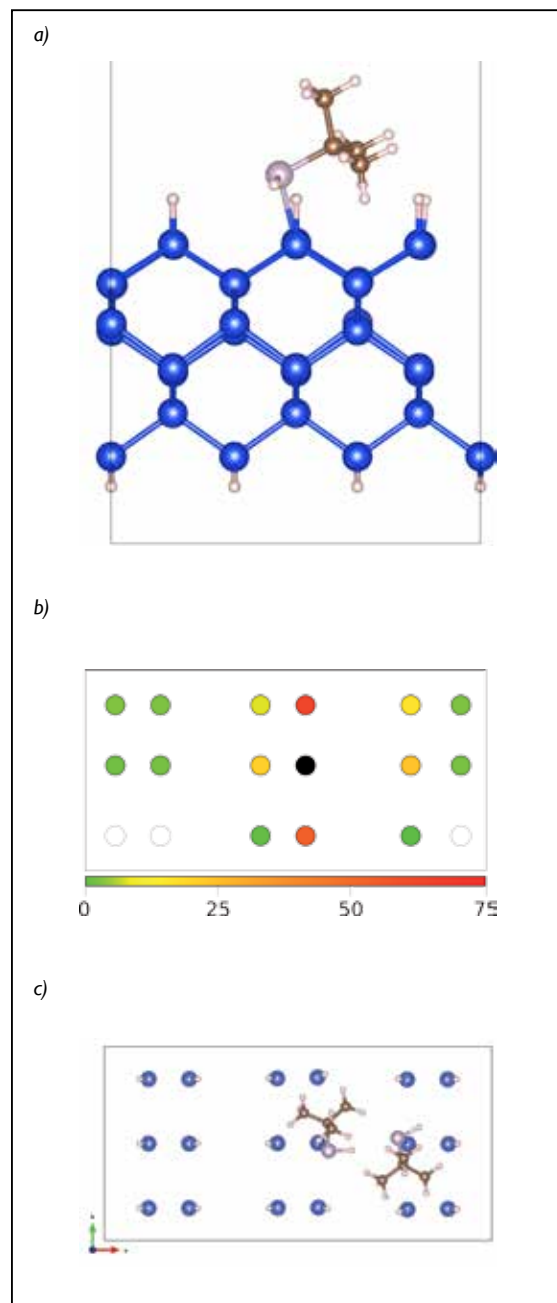


Figure 1:

- a) Adsorption mode of PtBuH on the $\text{Si}(001)(2 \times 1)$ surface;
b) colour code for site preference of second adsorption;
c) adsorption mode for second molecule of PtBuH .

References:

1. Kunert, B.; Volz, K.; Koch, J.; Stolz, W. Appl. Phys. Lett. 2006, 88, 182108.
2. Kunert, B.; Volz, K.; Koch, J.; Stolz, W. J. Cryst. Growth 2007, 298, 121.
3. Nemeth, I.; Kunert, B.; Stolz, W.; Volz, K. J. Cryst. Growth 2008, 310, 4763.
4. Liang, D.; Bowers, J.E. Nat. Photonics, 2010, 4, 511.
5. Beyer, A.; Rosenow, P.; Tonner, R.; Volz, K., in preparation.

Vibrational Davydov-Splittings and Collective Mode Polarizations in Oriented Organic Semiconductor Crystals

T. Breuer¹, M. Celik², P. Jakob^{1,3}, R. Tonner*^{2,3}, G. Witte*^{1,3}

¹Department of Physics ²Department of Chemistry and ³Materials Science Centre, Philipps-Universität Marburg

Wissenschaftler der Universität Marburg haben die Schwingungseigenschaften von hoch geordneten kristallinen organischen Halbleiter-Schichten untersucht, die geordnet auf den Unterlagen aus Kaliumchlorid (KCl) und Natriumfluorid (NaF) gewachsen sind. Dazu nutzten sie Transmissions-Infrarot-Spektroskopie und Dichte-Funktional-Theorie (DFT). Ihre Ergebnisse liefern wichtige Hinweise für zukünftige Studien zu Struktur und Ladungstransport in organischen Halbleitern und zur Validierung von theoretischen Ansätzen zur Modellierung von Schwingungsspektren.

Vibrational properties of highly ordered crystalline perfluoropentacene (PFP) films epitaxially grown on KCl(100) and NaF(100) substrates have been studied by means of transmission infrared spectroscopy and density functional theory. The different molecular orientations adopted by PFP on both substrates (standing vs. lying) and their epitaxial ordering enable precise polarization-resolved measurements along individual crystallographic directions and thus allow an unambiguous experimental determination of the polarizations of the IR modes.

Computations of the vibrational spectra beyond the single-molecule approximation were employed at the periodic dispersion-corrected density functional level (PBE-D2PBC with VASP) and compared to non-periodic calculations (PBE/def2-TZVPP). Thereby, a detailed mode assignment based on vibrational energies and polarization information was attained (Fig. 1).

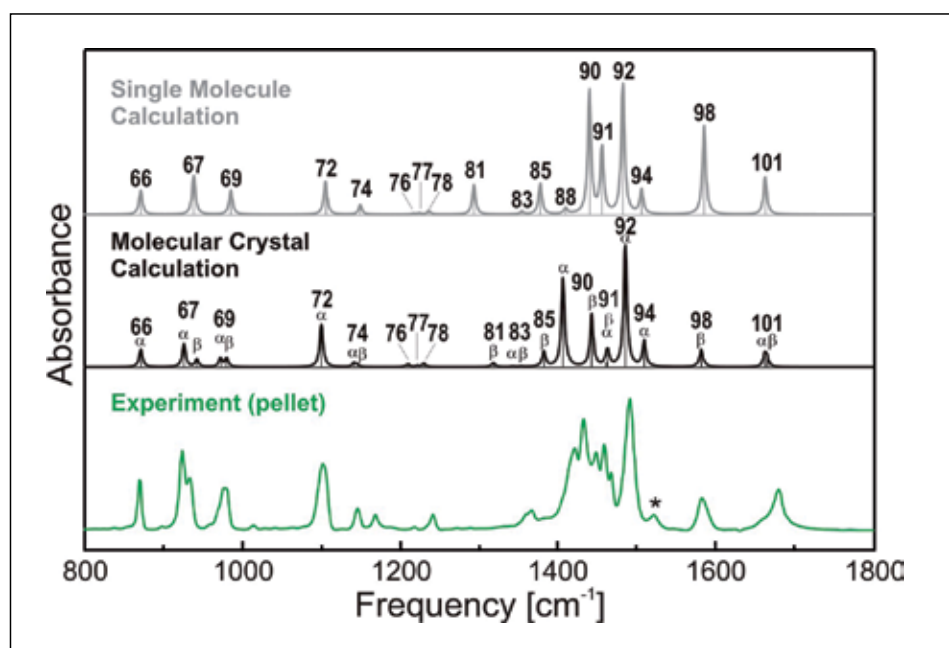


Figure 1:

Comparison of experimental (KBr-pellet) and computed IR-spectra for free molecule (PBE/TZ) and molecular crystal (PBE-D2PBC) of PFP. Davydov splittings are designated with α and β for the respective mode. All calculated mode frequencies have been scaled by a factor of 1.0147 and the modes have been convoluted by Lorentzian (HWHH = 5 cm^{-1}) to provide a realistic comparison with the experimental data. An impurity band is designated by *.

A microscopic explanation for the experimentally observed Davydov splitting of some modes and the IR-inactivity of others was derived (Fig. 2), based on the mutual coupling of the dynamical dipole moments of the two molecules within the unit cell. Experimentally observed modes not covered by our theoretical analysis have been identified as combination bands of IR-active modes coupled to

totally symmetric modes of similar displacement patterns. These findings have important implications for future studies on structure and charge transport in organic semiconductors and the validation of theoretical approaches to the modelling of vibrational spectra.

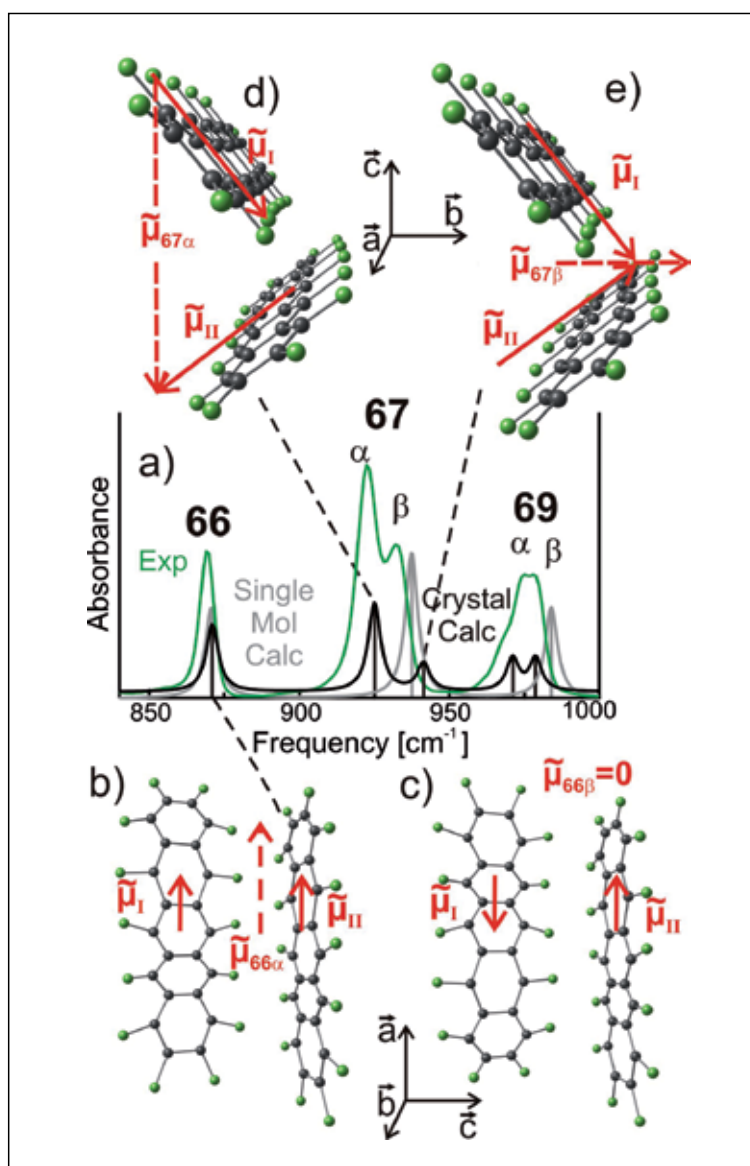


Figure 2:

Fig. 2.a) Magnification of experimental (KBr pellet) and computed IR spectra for molecule (PBE/TZ) and molecular crystal (PBE-D2_{PBC}) of PFP with directions in the molecular crystal; dynamical dipole moment of both molecules in the unit cell for calculated mode 66 (panel b), the IR-inactive combination (panel c) and the Davydov-split IR-active mode 67 (panel d+e). factor of 1.0147 and the modes have been convoluted by Lorentzian (HWHH = 5 cm⁻¹) to provide a realistic comparison with the experimental data. An impurity band is designated by *.

References:

1. Breuer, T.; Witte, G. Phys. Rev. B, 2011, 83, 155428.
2. Breuer, T.; Celik, M.; Jakob, P.; Tonner, R.; Witte, G. manuscript submitted.

Surface Chemical Bonding: Implementing and testing an EDA algorithm for periodic systems

Marc Raupach and Ralf Tonner
Fachbereich Chemie and Materials Science Centre, Philipps-Universität Marburg

Die Energie-Dekompositions-Analyse (EDA) zeigt, wie Bindungspartner in chemischen Bindungen wechselwirken, etwa in molekularen Systemen. Wissenschaftler der Phillips Universität Marburg untersuchen mit dieser Methode erstmals die Wechselwirkungen zwischen Oberflächen und darauf angelagerten Teilchen. Dazu haben sie bestehende Methoden weiterentwickelt und an einfachen Systemen getestet. Zukünftige Anwendungen werden interessante Halbleiteroberflächen umfassen.

The Energy Decomposition Analysis (EDA) is of ongoing interest to the chemical community because of the detailed insight into chemical bonding interactions between two or more fragments. It has been extensively used in the past for molecular systems.[1] However, up to now there has been no application of the EDA method to understand the chemical bonding in extended systems, especially surface-adsorbate interactions, apart from a pilot study.[2]

In the previous study, the periodic EDA algorithm developed by Philipsen and Baerends was applied to interactions of small molecules with metal surfaces. [2] It allowed the formulation of an intermediate wavefunction (Ψ^0) which is of main interest for all energy terms of an EDA (Fig. 1), and accounted for the so-called relief energy, which arises due to the interaction between molecular orbitals and extended bands at the Fermi level (Fig. 2).

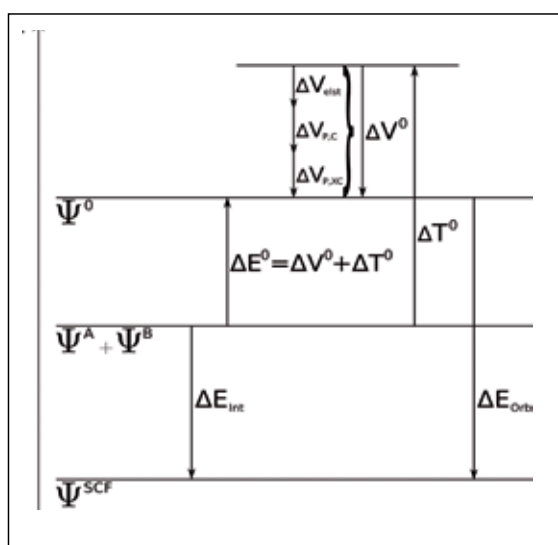


Figure 1:
Introduction of the energy terms calculated with the EDA algorithm for extended systems.

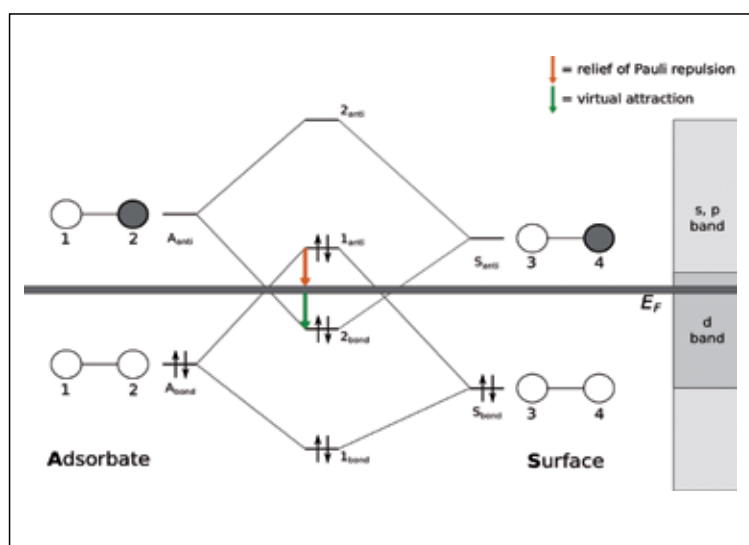


Figure 2:
Schematic interaction between molecular orbitals and bands at the Fermi level. Reproduced based on Fig. 3 in reference [2].

In this study, we aim to implement the calculation of the following energy terms for periodic systems: pseudo classical electrostatic interaction ΔV_{elst} , Pauli repulsion ΔE_{Pauli} and a more detailed orbital interaction energy ΔE_{orb} . This extends well beyond the previous pilot implementation and is carried out in close collaboration with the ADF developer group in Amsterdam.

First benchmark calculations for molecular systems in a large simulation box (Xe_2 and $\text{Mo}(\text{CO})_6$) were performed with a development version of the BAND-module of ADF2010.02. We used the SVWN functional with a triple-zeta all-electron basis set (TZ2P) and included scalar relativistic effects applying the ZORA-approach. To validate this periodic calculation, we calculated the EDA-terms also in a non-periodic approach with the standard ADF program package.

Table 1 presents the EDA results for the fragmentation of a Xenon dimer (at a fixed distance) into two Xenon atoms while Table 2 presents the data for a fragmentation of $\text{Mo}(\text{CO})_6$ into CO and $\text{Mo}(\text{CO})_5$. Our code delivers results for these test systems in close agreement with the established non-periodic code. The discrepancies in case of $\text{Mo}(\text{CO})_6$ indicate that some terms which are now summed up in the Coulomb interaction term (ΔV_{elst}) should be transferred to $\Delta V_{\text{Pauli,Coul}}$. This is one of the current tasks for further development of the project.

Ongoing work focuses on a more accurate calculation of the pseudo-classical electrostatic interaction, an extension to spin-unrestricted fragmentation schemes and an algorithm to split the term ΔE_{orb} into orbital-resolved contributions. Furthermore, the benchmark systems will be extended to surface-adsorbate complexes, which are the main focus of our research group.

Table 1:

EDA energy terms (SVWN/TZ2P, scalar ZORA) in kcal mol⁻¹ for the fragmentation $\text{Xe}_2 \rightarrow 2 \text{Xe}$ at a bond distance of $d(\text{Xe-Xe}) = 2.5 \text{ \AA}$.

	ADF (non-periodic)	BAND (periodic)
ΔE_{Pauli}	+254.47	+253.59
ΔV_{Elst}	-127.40	-127.75
ΔE^0	+127.07	+125.83
ΔE_{Orb}	-40.43	-40.25
ΔE_{Int}	+86.64	+85.58
ΔT^0	+1857.33	+1865.91
$\Delta V_{\text{Pauli,Coul}}$	-1436.48	-1445.30
$\Delta V_{\text{Pauli,XC}}$	-166.37	-167.01

Table 2:

EDA energy terms (SVWN/TZ2P, scalar ZORA) in kcal mol⁻¹ for the fragmentation $\text{Mo}(\text{CO})_6 \rightarrow \text{Mo}(\text{CO})_5 + \text{CO}$. SVWN, scalar ZORA, TZ2P.

	ADF (non-periodic)	BAND (periodic)
ΔE_{Pauli}	+91.58	+122.60
ΔV_{Elst}	-77.04	-108.65
ΔE^0	+14.54	+13.94
ΔE_{Orb}	-72.73	-72.47
ΔE_{Int}	-58.19	-58.52
ΔT^0	+646.67	+644.87
$\Delta V_{\text{Pauli,Coul}}$	-450.39	-417.75
$\Delta V_{\text{Pauli,XC}}$	-104.70	-104.51

References:

1. Frenking, G.; Wichmann, K.; Fröhlich, N.; Loschen, C.; Lein, M.; Frunzke, J.; Rayon, V. M. *Coord. Chem. Rev.* 2003, 238, 55.
2. Philipsen, P. H. T.; Baerends, E. J. *J. Phys. Chem. B* 2006, 110, 12470.

Mechanism of Ammonia Formation by Metal-Ligand Cooperative Hydrogenolysis of a Nitrido Complex

B. Askevold,^{1,3} J.T. Nieto,^{1,3} S. Tussupbayev,² M. Diefenbach,² E. Herdtweck,¹ M.C. Holthausen,^{2,*} S. Schneider^{1,3,*}

¹ Department Chemie, Technische Universität München

² Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

³ Future address: Department Chemie und Pharmazie, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.

Die Welternährung hängt von Kunstdüngern ab, die aus Ammoniak hergestellt werden. Von der Natur inspiriert, verbinden Chemiker mittlerweile sehr erfolgreich Stickstoff (N₂) und Wasserstoff (H₂) mit Hilfe von Metall-Komplexen zu Ammoniak. Diese Prozesse, darunter das Haber-Bosch-Verfahren, verschlingen über ein Prozent des weltweiten Energiebedarfs. Chemiker der Goethe-Universität Frankfurt arbeiten daran, über metallzentrierte Stickstoff-Spaltung eine direkte Vereinigung von Stickstoff und Wasserstoff zu Ammoniak herbeizuführen.

Bioinspired hydrogenation of N₂ to ammonia experienced remarkable success in recent years [1–3]. This process is achieved with metal complexes in solution at ambient conditions, but is limited to a stepwise nitrogen protonation/reduction sequence. In contrast, the highly desirable direct hydrogenation

with H₂ remains scarce. In analogy to the heterogeneously catalyzed Haber-Bosch process, such a reaction is conceivable via metal-centered N₂ splitting and subsequent hydrogenolysis of the nitrido ligands to ammonia.

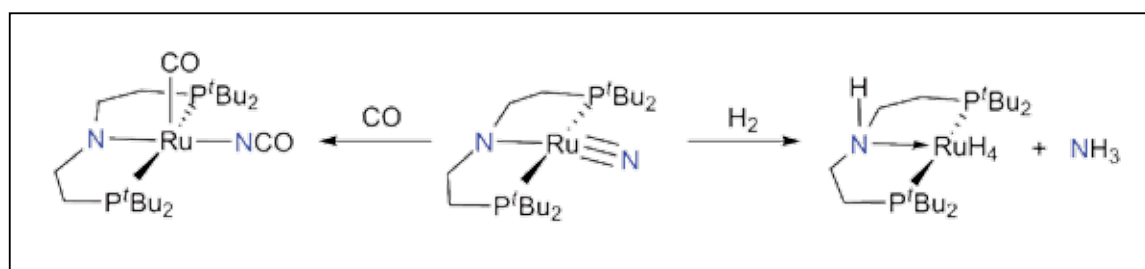


Figure 1:
Ruthenium(IV)–nitrido-mediated N–C coupling (left) and hydrogenolysis (right).

In a combined experimental and quantum-chemical study, a ruthenium(IV) nitrido complex has been synthesized, and the high nucleophilicity of the nitrido ligand has been demonstrated by unusual N–C coupling with π -acidic CO (Fig. 1 left). This transformation constitutes the first instance of the direct reaction of nitrido complexes with carbon monoxide. Furthermore, the terminal nitrido ligand undergoes facile hydrogenolysis with H₂ at ambient conditions to produce ammonia in high yield (Fig. 1 right). Mechanistic details of these reactions are evaluated by quantum-chemical means. The results

obtained show that the isocyanate is formed via direct attack of the CO molecule at the nitride ligand ($\Delta G^\ddagger_{298} = 12.7 \text{ kcal mol}^{-1}$). In the initial step of nitride hydrogenolysis, however, the PNP pincer ligand plays a key role in the rate determining heterolytic hydrogen splitting (Fig. 2): H₂ is added across the ruthenium-amido bond ($\Delta G^\ddagger_{298} = 26.4 \text{ kcal mol}^{-1}$), while alternative H₂ addition pathways involve substantially higher barriers. Hence, pincer-ligand cooperativity assists both H₂ activation and reductive proton transfer to the nitride ligand.

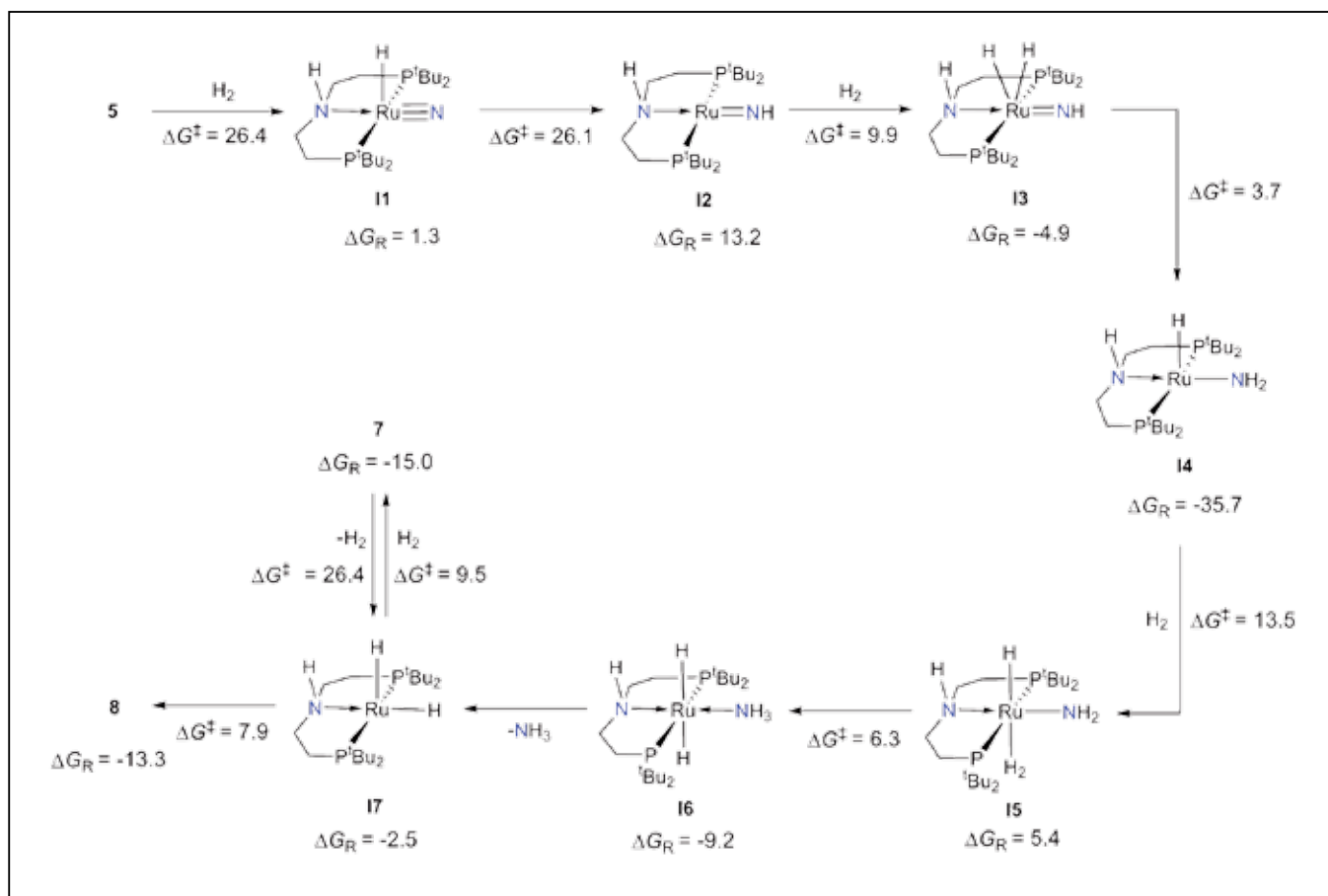


Figure 2:

Computed lowest free-energy pathway for the hydrogenolysis of nitrido complex **5**. PBE/def2-SVP(PP) relative free energies of reaction (ΔG_R) and relative free energies of activation (ΔG[‡]) for the individual steps after standard-state correction in kcal mol⁻¹

This work was published in *Nature Chem.* 3, (2011), 532-537.

References:

1. Pickett, C. J., Talarmin, J. *Nature* 317, (1985), 652–653.
2. Yandulov, D. V., Schrock, R. R. *Science* 301, (2003), 76–78.
3. Arashiba, K., Miyake, Y., Nishibayashi, Y. *Nature Chem.* 3, (2011), 120–125.

DFT Study on the Mechanism of Main-Chain Boron-Containing Oligophenylenes via Ring-Opening Polymerization of 9-H-9-Borafluorene

Zheng-Wang Qu, Max C. Holthausen

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

*Incorporation of boron atoms as Lewis-acidic centres into organic π -electron materials is a powerful approach to modifying the optical and electronic properties of the parent systems for a broad range of practical applications. In this work, a combined experimental and theoretical study was performed on the mechanism of ring-opening polymerization of 9-H-9-borafluorene ($\text{H}_8\text{C}_{12}\text{BH}$; **5**), which can be generated in situ from the H/Br exchange reaction between 9-Br-9-borafluorene and Et_3SiH in benzene or hexane solvent (Figure 1).*

The 9-H-9-borafluorene contains an antiaromatic central borole ring with a reactive B–H bond, which opens various possible reactions through B–H–B three-center, two-electron bond formation, B–H to B–C addition, and B–C to B–C addition around the boron-center. Significant driving forces are provided by the formation of intramolecular double B–H–B bridges and the release of antiaromaticity by opening the central borole ring.

Experimentally, monitoring of the reaction by NMR spectroscopy at room temperature in C_6D_6 reveals that **5** forms a meta-stable asymmetric dimer (**5**)₂ (Figure 2) under these conditions. Addition of 1 equivalent of pyridin to (**5**)₂ leads to the clean formation of the pyridine adduct **5•py**. Likewise, (**5**)₂ can be employed in hydroboration reactions, as evidenced by its transformation with 0.5 equivalents of tert-butyllacetylene, which gives the double hydroboration product **9** in almost quantitative yield. (**5**)₂ is not long-term stable in benzene solution. Addition of pyridine to aged reaction mixtures allowed the isolation of the adduct **10•py2** of a ring-opened dimer of **5**. Storage of a hexane solution of 9-Br-9-borafluorene and Et_3SiH for 1–2 weeks at room temperature leads to the formation of crystals of a ring-opened pentamer **11** (preparative yields are obtained after 1–4 months). The polymer main-chain of **11** is reinforced by four intrastrand B–H–B three-center, two-electron bonds. Apart from the main product **11**, minor amounts of closely related oligomers carrying different chain ends are also isolated, i.e., **12** and **13**. When the reaction between 9-Br-9-borafluorene and Et_3SiH is carried out in refluxing toluene, the cyclic dimer **14** can be obtained in a crystalline yield of 25%. The compounds **9**, **10•py2**, **11**, **12**, **13**, and **14** have been

structurally characterized by X-ray crystallography.

DFT calculations on conceivable isomers of (**5**)₂ and a comparison of calculated and experimentally determined ^1H , ^{13}C , and ^{11}B NMR shift values lead to the conclusion that (**5**)₂ is not a classical dimer $\text{H}_8\text{C}_{12}\text{B}(\mu\text{-H})_2\text{BC}_{12}\text{H}_8$, but contains one B–H–B three-center, two-electron bond together with a boron-bridging phenyl ring. The entire reaction pathway leading from **5** to **10**, **11**, **12**, **13**, and **14** has been thoroughly elucidated by DFT calculations, and we propose a general mechanistic scenario applicable for ring-opening polymerization reactions of 9-borafluorenes. As example, in Scheme 3, the channel (A) shows the formation of important intermediates (**5**)₂ and **10**, while the channel (B) shows the formation of cyclic dimer **14**. The close interplay between experiment and theory is essential to understand the complete mechanism.

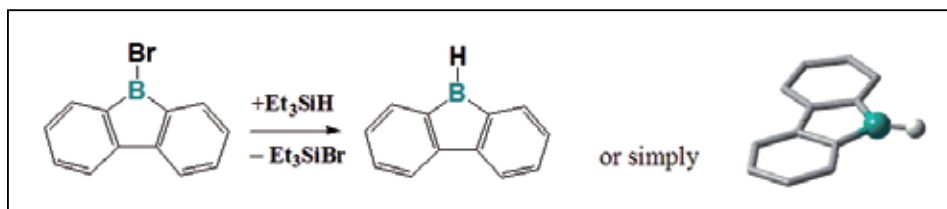


Figure 1:
In situ generation
of **5** by H/Br
exchange reaction.

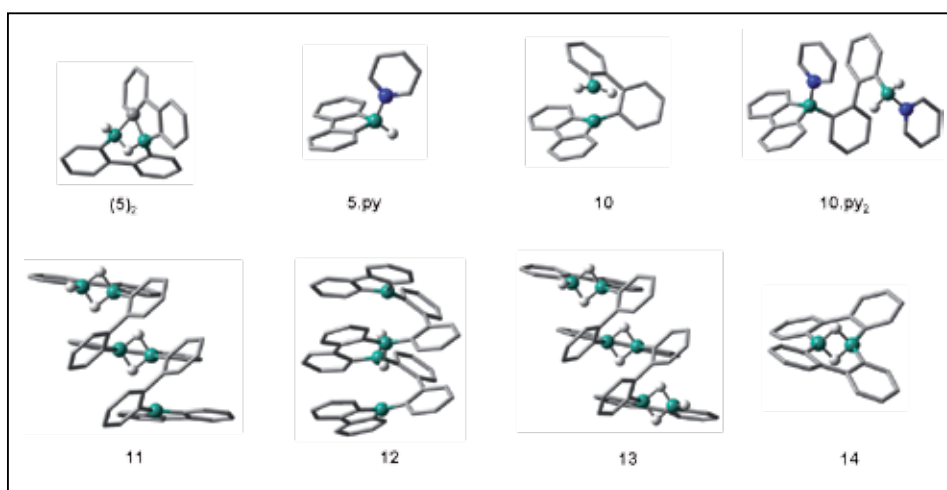


Figure 2:
The predicted
structures at DFT
B3LYPD/TZVP
level.

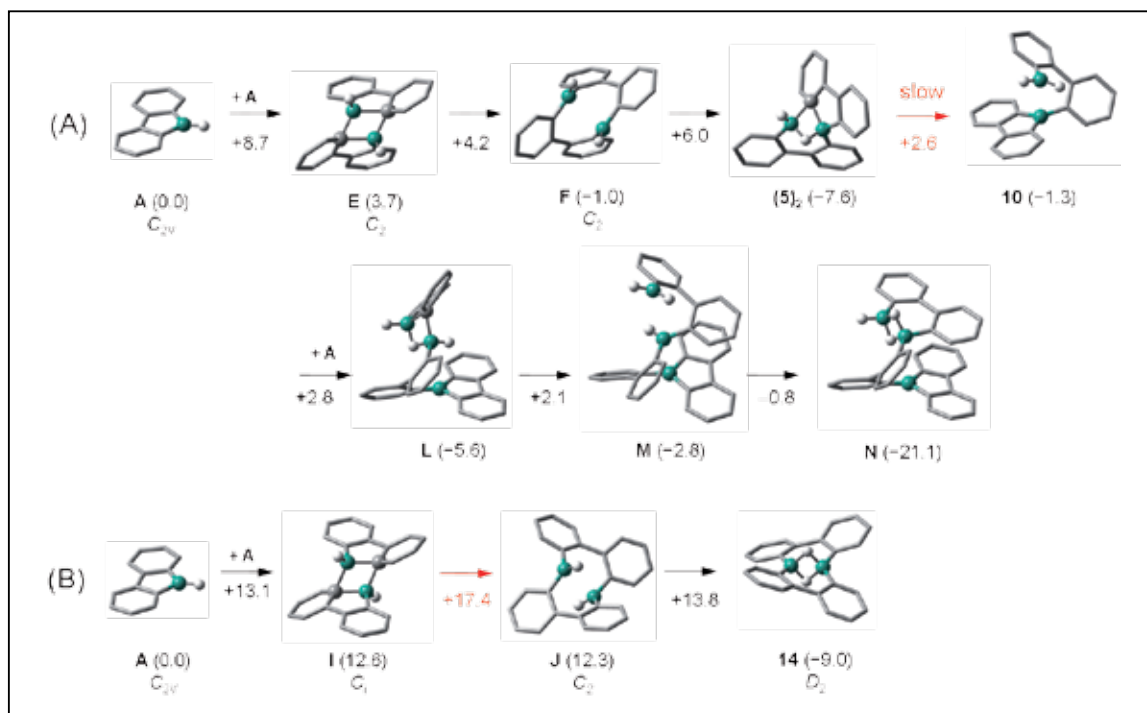


Figure 3:
The free energy paths for the **(5)**₂, **10** and **14** formation.

This work was published in *J. Am. Chem. Soc.* 133, (2010), 4596.

Mechanistic Details on the Reactivity of Trimethylamine with Chlorodisilane

Andor Nadj and Max C. Holthausen

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Ob Mikroelektronik, Photovoltaik- oder optoelektronische Bauelemente: die Anwendung von Silanen wächst und damit das Interesse an der Chemie dieser Silizium-Wasserstoff-Verbindungen. Derzeit verfügbare Roh-Silane sind explosiv und teuer. Chemiker der Goethe-Universität Frankfurt suchen daher nach Alternativen.

The chemistry of silanes is a field of growing interest due to applications in microelectronic, photovoltaic and optoelectronic devices. The production of electronic and mechanical structures mostly follows the top down approach (that is, miniaturizing by applying the same principles for smaller and smaller features), which is restricted by, e.g., the diffraction limit of light. Another approach as a part of the collaboration project in "NanoBiC" is to establish alternative new precursors not only for the deposition of homogeneous silicon films, but also for the directed formation of micro- and nanometer structures (bottom up approach). Currently available silane precursors (SiH_4 or the higher

homologs Si_2H_6 and Si_3H_8) are extremely explosive and/or expensive. Consequently, the development of efficient routes to improved silane precursors constitutes a highly rewarding research goal. In this context, the amine-induced disproportionation of perchlorosilanes like Si_2Cl_6 and Si_3Cl_8 to yield neo- $\text{Si}_5\text{Cl}_{12}$ is a particularly intriguing reaction (Fig. 1). It provides quantitative access to the neo-pentasilane core, which already carries an $\text{Si}(0)$ center and thus represents an appealing building block for the design of new precursor materials. The details of the amine-induced disproportionation reaction in Fig. 1 were unclear for decades. Urry et al. suggested a silylene to be involved as a key intermediate [1].

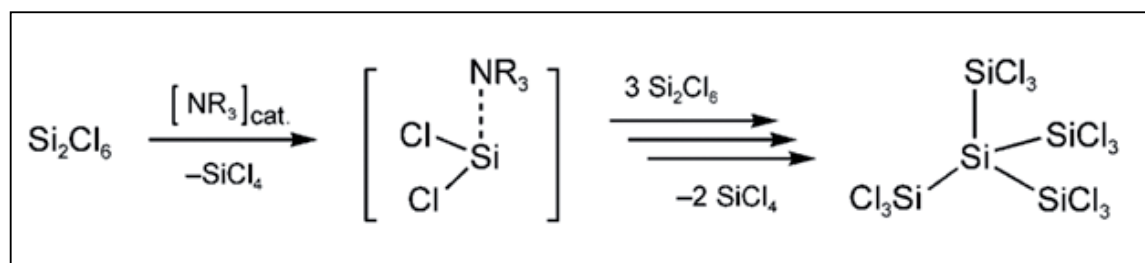


Figure 1:
Selective formation of neo- $\text{Si}_5\text{Cl}_{12}$ from Si_2Cl_6 and NMe_3 .

Recently, in a combined quantum chemical and experimental study we showed that the reaction indeed involves a base-stabilized dichlorosilylene [2] (Fig. 2).

For further insights into the underlying reaction mechanism, we analyzed relevant pathways by

using quantum chemical calculations. The calculated reaction pathways showed a selective formation of neo-Si₅Cl₁₂, which is in line with the experiments. Newest calculated results indicate that the reactivity of the silylene is controlled by the nature of the Lewis donor base, which provides a promising building block for new silane precursors.

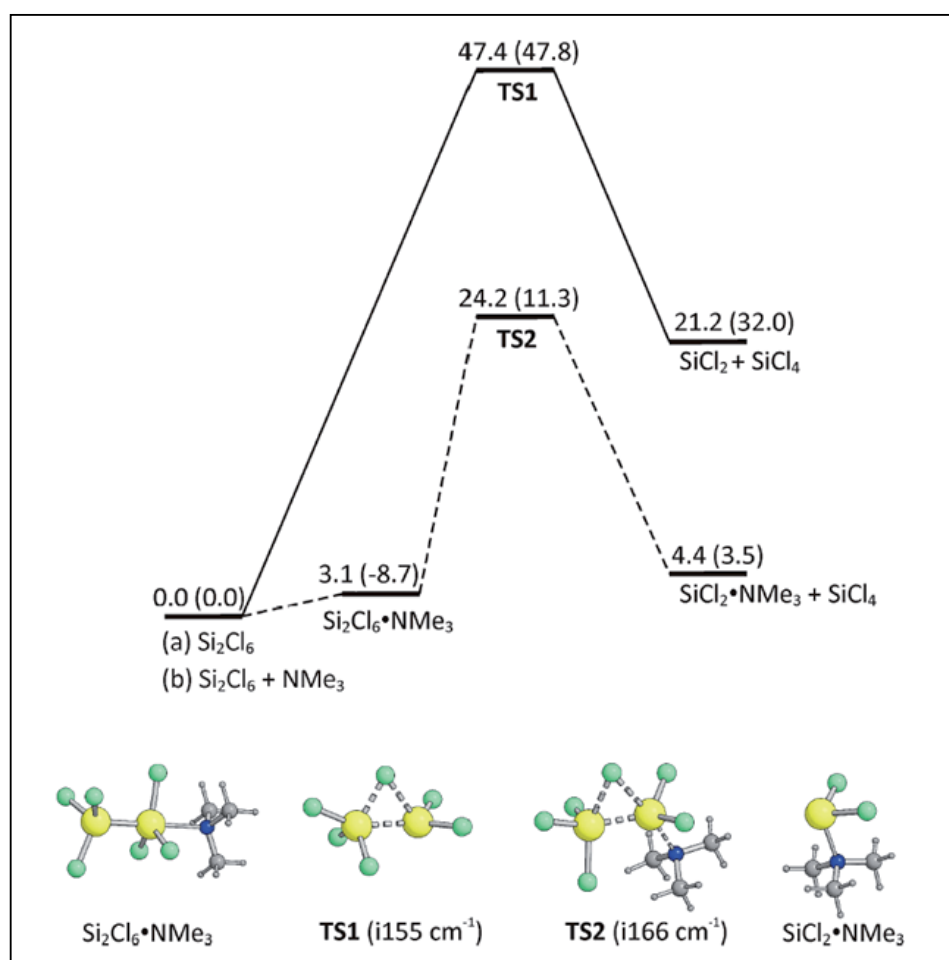


Figure 2: Computed reaction profiles for the formation of base-free SiCl₂ from Si₂Cl₆ (solid lines) and in the presence of NMe₃ (dashed lines). B3LYP-D2/SVP results; free energy differences ΔG²⁹⁸ (ΔH⁰ in parentheses) are given in kcal•mol⁻¹ relative to the separated reactants.

References:

1. G. Urry, J. W. Nuss, *J. Inorg. Nucl. Chem.* 26 (1964) 435.
2. F. Meyer-Wegner, A. Nadj, M. Bolte, N. Auner, M. Wagner, M. Holthausen, H. W. Lerner, *017* (2011) 4715.

Determination of the Conformation of the 2'OH Group in RNA by NMR Spectroscopy and DFT Calculations

Puneet Gupta, Sandor Tüllmann, Max C. Holthausen

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Die Ribonukleinsäure (RNA) setzt beim Menschen unter anderem Erbinformationen in Eiweiße um und transportieren sie. Struktur und Funktion der RNA sind vielfältig. Die Hydroxyl-Gruppe in der RNA beeinflusst die Anordnung der RNA-Bausteine und ermöglicht katalytische Aktivitäten. Allerdings verringert sie auch die chemische Stabilität der RNA. Chemiker der Goethe-Universität Frankfurt bestimmen theoretisch die Anordnung der Hydroxyl-Gruppe und deren Einfluss auf die Orientierung der RNA-Bausteine. Dazu haben sie eine neue Methode entwickelt.

In contrast to DNA, RNA exhibits pronounced functional, structural, and chemical diversity, which has been considered essential for the evolution of the RNA world [1]. The presence of the 2'OH group in RNA induces a change in the predominant sugar

conformation and provides catalytic activity, but at the same time it reduces the chemical stability of RNA [2]. It is therefore of considerable interest to determine the conformation of the 2'OH group (Fig. 1).

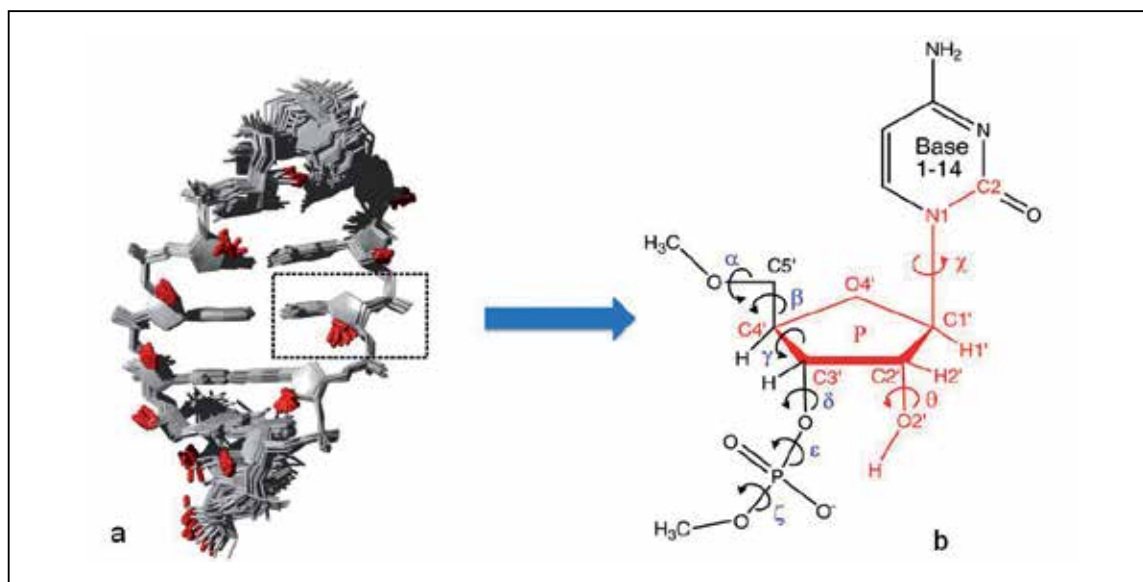


Figure 1: (a) Solution structure of 14-mer RNA [3]. (b) Nucleotide-like structure as a model for DFT calculations

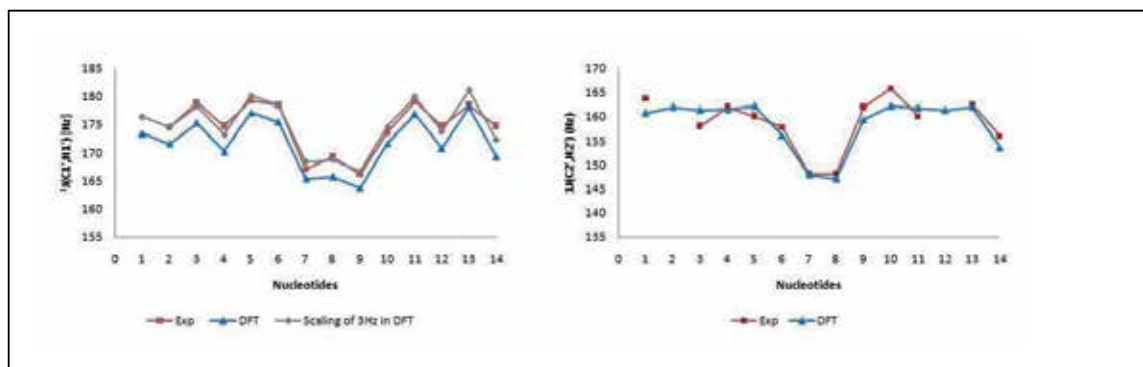


Figure 2: Experimental and DFT calculated $^1J(C1',H1')$ and $^1J(C2',H2')$ couplings in 14 nucleotides present in 14-mer RNA

Based on the interpretation of $^1J(\text{C},\text{H})$ coupling constants we suggested a general method for the conformational analysis of sugar pucker modes and nucleobase orientations as well as for the determination of 2'OH group conformations in large RNAs. In order to dissect the multiple conformational dependencies of $^1J(\text{C},\text{H})$ in RNA, we compared experimental NMR couplings with DFT-calculated couplings (Fig. 2). In the DFT calculations, 14 nucleotide-like model structures were generated from the coordinates of the solution structure of the 14mer RNA hairpin (Fig. 1) [2]. Structure optimizations and coupling constants

were calculated at the B3LYP/TZVP(PCM) level of theory using the Gaussian03 software package. The influence of 2'OH group orientations for fixed sugar and nucleobase conformations was investigated by systematic scans of the 2'OH group orientation. The results revealed in fact that the 2'OH group orientation has an appreciable influence on $^1J(\text{C},\text{H})$ coupling constants. A chart of the $^1J(\text{C},\text{H})$ coupling constants is predicted for the four nucleobases assuming either a syn or an anti orientation for both sugar conformations (C3'-endo or C2'-endo), respectively (Fig. 3). This chart represents a useful tool for determining RNA conformation.

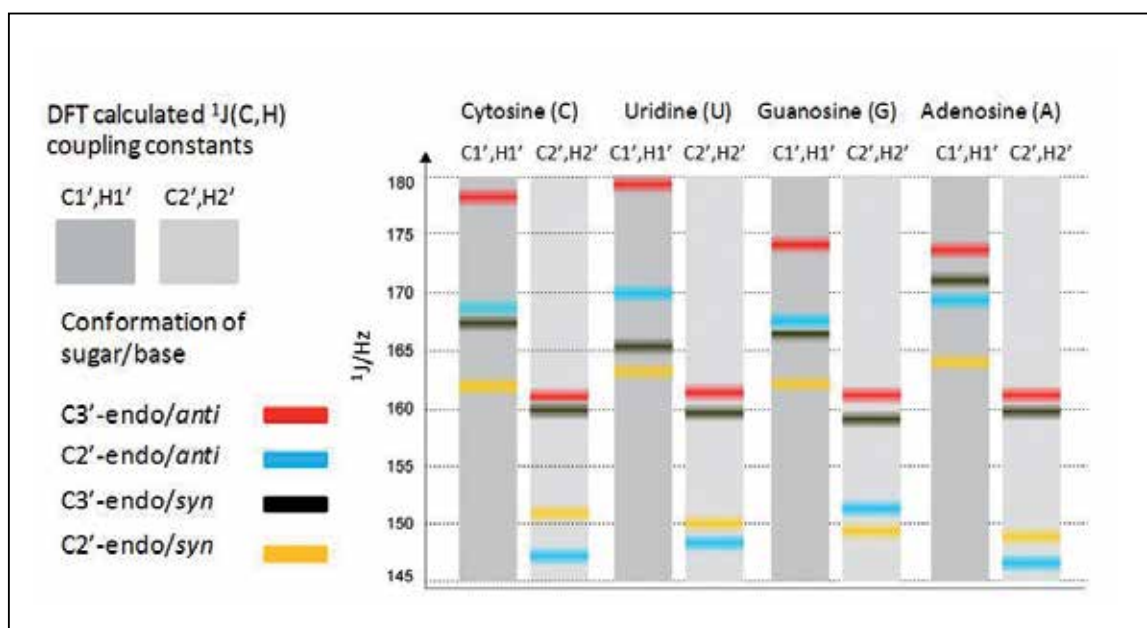


Figure 3:
DFT-based chart of $^1J(\text{C},\text{H})$ for mostly populated nucleotides in any larger RNA

This work was published in *Angew. Chem. Int. Ed.*, 50, (2011), 5397.

References:

1. W. Gilbert, *Nature*, 319, (1986), 618.
2. M. Egli, S. Portmann, N. Usman, *Biochemistry*, 35, (1996), 8489.
3. S. Nozinovic, B. Fürtig, H.R.A. Jonker, C. Richter, H. Schwalbe, *Nucleic Acids Res.*, 38, (2010), 683.

Quantum Chemical Assessment of the Bond Energy of CuO^+

E. Rezabal,¹ J. Gauss,² J. M. Matxain,³ R. Berger,⁴ M. Diefenbach,⁵ and M. C. Holthausen⁵

¹ NanoBioSeparations Group, POLYMAT (UPV/EHU), Spain; ² Institut für Physikalische Chemie, Gutenberg-Universität Mainz; ³ Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea and Donostia International Physics Center (DIPC), Spain; ⁴ Clemens-Schöpf Institut für Organische Chemie und Biochemie, Technische Universität Darmstadt; ⁵ Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Kupfer beschleunigt biologische Reaktionen mit Sauerstoff, ist also ein Katalysator. Bei der Sauerstoffanreicherung in Enzymen und synthetischen Systemen wird ein-kernigen Kupfer-Oxiden $[\text{CuO}]^+$ eine treibende Rolle zugeschrieben. Chemiker der Goethe-Universität Frankfurt untersuchen die für den Sauerstoff-Transfer ausschlaggebenden Bindungsenergien dieser Spezies. Ihre Berechnungen lassen vermuten, dass die wahren Bindungsenergien an der unteren Grenze der experimentell ermittelten Werte liegen.

Copper, along with iron, dominates the field of biological oxygen chemistry and plays important roles in homogeneous and heterogeneous catalysis [1–3]. Of particular current interest are mononuclear $[\text{CuO}]^+$ species, which have tentatively been suggested as catalytically active oxygenation agents in enzymes and synthetic systems [4]. Here, the inherent lability of the $\text{Cu}^+ - \text{O}$ bond has fundamental implications for the unique oxygenation reactivity of related active sites comprising this building block.

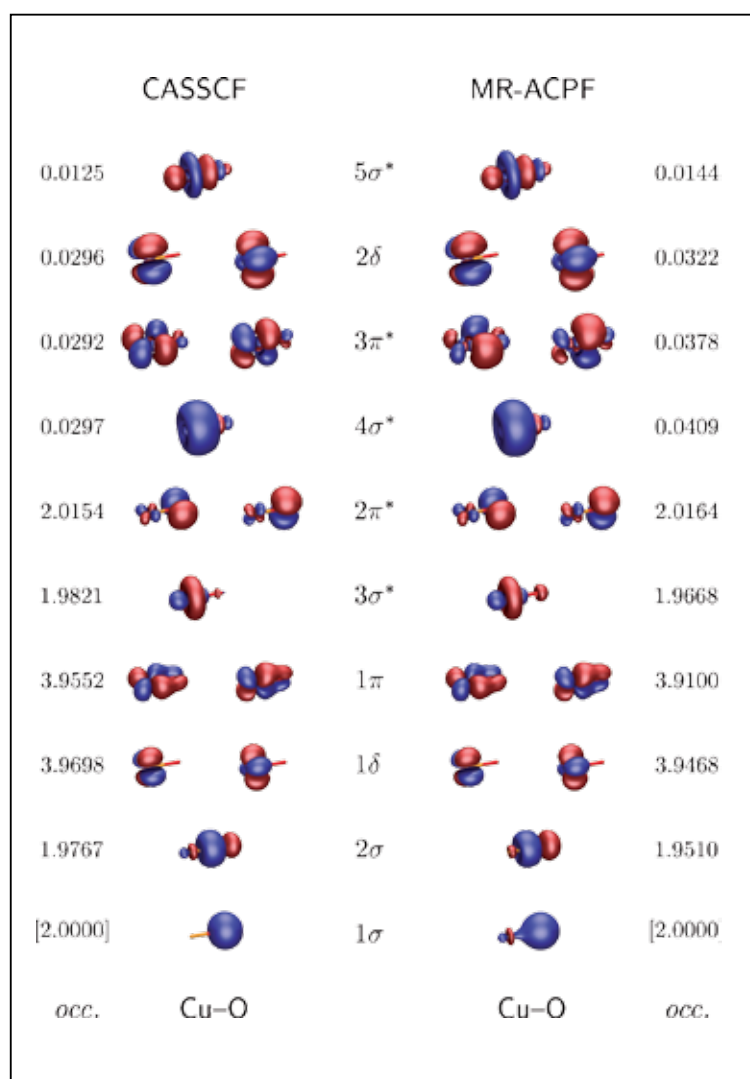
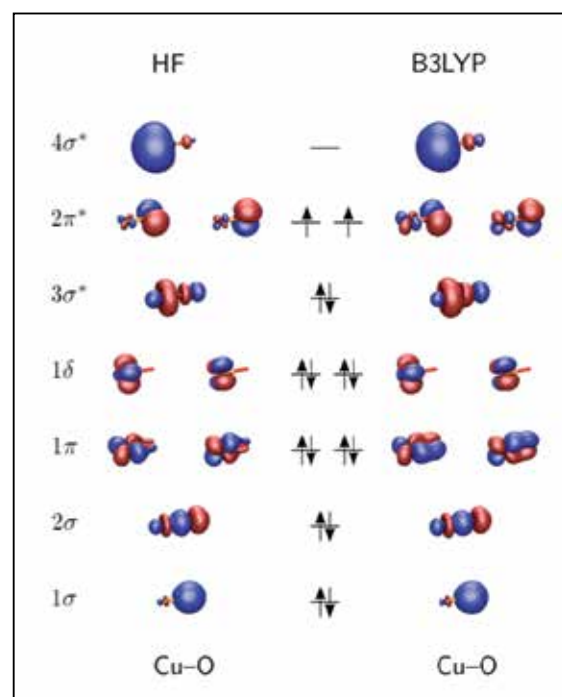


Figure 1:

Qualitative MO scheme for the valence space of CuO^+ ($^3\Sigma^-$ ground state). MOs shown were obtained by Hartree-Fock, density-functional theory, complete active space and multi-reference configuration interaction calculations (from left to right) using a triple-zeta basis; the isosurfaces are plotted at $0.05 a_0^{-3/2}$, the enumeration of orbitals includes only valence orbitals.

In this work a detailed study on the dissociation energy and spectroscopic parameters of CuO⁺ has been carried out by means of several highly correlated post-Hartree–Fock methods including coupled cluster (CC) theory, multireference configuration interaction (MRCI) type expansions applying the averaged coupled pair functional (MR-ACPF), and Quantum Diffusion Monte Carlo (DMC). All approaches suggest a binding energy somewhat lower than the current experimental value of 31.1 ± 2.8 kcal mol⁻¹ [5]. They more or less agree, however, on dissociation energies (D_e) of 26.0 kcal mol⁻¹ (CCSD(T)), 25.8 kcal mol⁻¹ (CCSDTQ), 25.6 kcal mol⁻¹ (DMC), and 24.1 kcal mol⁻¹ (MR-ACPF) at the respective best estimates, which is encouraging in view of the disaccording data published thus far. The electronic ground state configuration can be classified as a π -type axial biradical, and the close analogy to the $^3\Sigma_g^-$ high-spin ground state of dioxygen has been inferred. In its $^3\Sigma^-$ ground state, however, CuO⁺ represents a molecule with a single π -bond without a δ -bond (see Fig. 1).

In our rigorous multireference ansatz, the reference coefficient of the leading root amounts to 0.930 and that of the next lower roots to less than 0.062. Thus, use of a single reference approach representing the leading root appears well justified for a description of the $^3\Sigma^-$ ground state wavefunction. With an adequately balanced configuration space, the results from size extensive multireference CI expansions nicely validate the single-reference CCSD(T) data in terms of the description of both the ground state reference wavefunction as well as the atomic and molecular properties. A sufficiently flexible active

space in the MRCI procedure is, however, essential for a coherent description of the electronic ground state, an indicator of which is also the non-negligible population of the 3π and 2δ orbitals (see Fig. 1).

We have shown that, in contrast to earlier studies [6], single-reference schemes provide a valid description of the electronic ground state. A satisfactory representation of the Cu–O bond relies on the inclusion of perturbative triple excitations and on a basis set size beyond quadruple-zeta quality. All in all, our most accurate calculations result in a dissociation energy somewhat lower than the experimental value, and we suggest that the true dissociation energy is close to the lower boundary of the experimental value.

This work was published in *J. Chem. Phys.*, 134, (2011), 064304.

References:

1. P. Spuhler, M.C. Holthausen, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 42, (2003), 5961.
2. D. Schröder, H. Schwarz, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 34, (1995), 197.
3. N. Kitajima, Y. Moro-Oka, *Chem. Rev.*, 94, (1994), 737.
4. S. Hong, A.K. Gupta, W.B. Tolman, *Inorg. Chem.*, 48, (2009), 6323.
5. M.T. Rodgers, B. Walker, P.B. Armentrout, *Int. J. Mass Spectrom.*, 182/183, (1999), 99.
6. Y. Nakao, K. Hirao, T. Taketsugu, *J. Chem. Phys.*, 114, (2001), 7935.

Novel Light Sources: Crystalline Undulator and Crystalline-Undulator-based Gamma-Laser

A. Kostyuk¹, A.V. Korol¹, A.V. Solov'yov¹, W. Greiner¹, H. Backe², W. Lauth², U. Uggerhoj³, V. Guidi⁴, and S. Connell⁵

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² Mainz University, Germany, ³ Aarhus University, Denmark

⁴ Ferrara University, Italy, ⁵ Johannesburg University, South Africa

Investigation of the feasibility of constructing a new powerful source of high-energy (0.1 – 1 MeV) monochromatic electromagnetic FEL-like radiation by a bunch of ultra-relativistic particles channelling through a periodically bent crystal (crystalline undulator, CU). Potential applications include plasma, nuclear and solid state physics, molecular biology, medicine and technology.

A patent for a hard x- and gamma-ray laser has been published [1]. It combines a CU with a conventional undulator. A beam of ultrarelativistic charged particles becomes spatially modulated in the conventional undulator so that it contains a harmonic with a period equal to the wavelength of the radiation of the CU. Due to this harmonic, the radiation process in the CU becomes coherent. A simulation of 855 MeV electron channeling in Silicon has been performed with a new computer code. The dechanneling lengths for (100), (110) and (111) crystallographic planes have been estimated. The dependence of the intensity of the channeling radiation (ChR) on the crystal dimension along the beam has been calculated. A good agreement with recent experimental data is observed [2]. The behaviour of a modulated positron beam in a planar crystal channel is investigated. The evolution of the particle distribution is described by means of the Fokker-Planck equation. A detailed analysis of the equation has been performed. It is demonstrated that the beam preserves its modulation at sufficiently

large penetration depths which allows using a crystalline undulator as a coherent source of hard x- and gamma-rays. This result is of crucial importance for the theory of the CU based gamma -laser [3]. Channelling of 855 MeV electrons along bent Si (110) crystallographic plane is studied within the Monte Carlo approach. The definitions of the dechanneling length and the asymptotic acceptance are formulated in a form suitable for the Monte Carlo procedure. The dependence of these quantities on the crystal bending is studied [4].

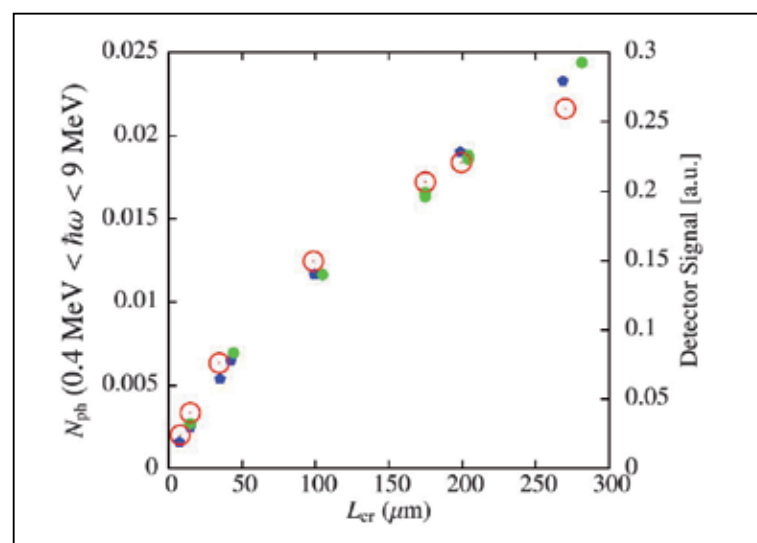


Figure 1:
Intensity of ChR as function of the crystal thickness. Open circles - the simulation, filled circles - experimental data.

References:

1. W. Greiner, A.V. Korol, A. Kostyuk, A.V. Solov'yov, Vorrichtung und Verfahren zur Erzeugung elektromagnetischer Strahlung, German patent, DE: 10 2010 023 632.2, published on Dec 15, 2011.
2. A. Kostyuk, A. Korol, A. Solov'yov, W. Greiner, Planar Channeling of 855 MeV Electrons in Silicon: Monte-Carlo Simulations, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 44, 075208 (2011).
3. A. Kostyuk, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner, Demodulation of a Positron Beam in a Bent Crystal Channel, Nucl. Instrum. Meth. B 269, 1482-1492 (2011)
4. A. Kostyuk, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner, Monte Carlo Simulations of Electron Channelling a Bent (110) Channel in Silicon, arXiv:1104.3890.

Development of Computer Tools for Graphical Processors

A.V. Yakubovich, V. Dickl, A.V. Solov'yov, and S. Schramm
Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Mit Molekulardynamik-Simulationen stellen Forscher das Zusammenspiel von Biomolekülen, atomare Cluster oder Kohlenstoff-Nanostrukturen nach. Die Leistungsfähigkeit der Berechnungen ist durch die verfügbaren Computer-Ressourcen begrenzt. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies haben das von ihnen entwickelte Software Paket „MBN-Explorer“ so umgebaut, dass es zusätzlich auch auf Grafikprozessoren (GPUs) arbeitet. Einfache molekular-dynamische Berechnungen laufen damit bis zu 100 Mal schneller als bei einer CPU-Implementierung.

The aim of extension of MBN Explorer code for GPU-based calculations is to exploit the advantages of a novel superiorly fast computational devices - special graphical cards available at novel supercomputer center LOEWE-CSC.

All-atom molecular dynamic simulation is widely used as computational approach to study the behavior of various complex molecular systems such as biomolecules, atomic clusters, carbon nanostructures and others at an atomistic level of detail. The capabilities of such simulations are limited by available computer resources. State-of-the-art graphics processing units (GPUs) can perform over 500 billion arithmetic operations per second, a tremendous computational resource that can now be utilized for general purpose computing as a result of recent advances in GPU hardware and

software architecture. In simple molecular dynamic calculations the GPU-accelerated implementations are observed to run 10 to 100 times faster than equivalent CPU implementations.

We have extended the software package MBN Explorer that being developed at our group for almost a decade in order to get use of GPU facilities. Now MBN Explorer is capable of performing calculations on graphical processors. The “GPU-branch” of MBN Explorer includes a specific force fields for modeling the carbon-based materials, metal clusters and carbon-metal systems, treating composite alloys of transition metals.

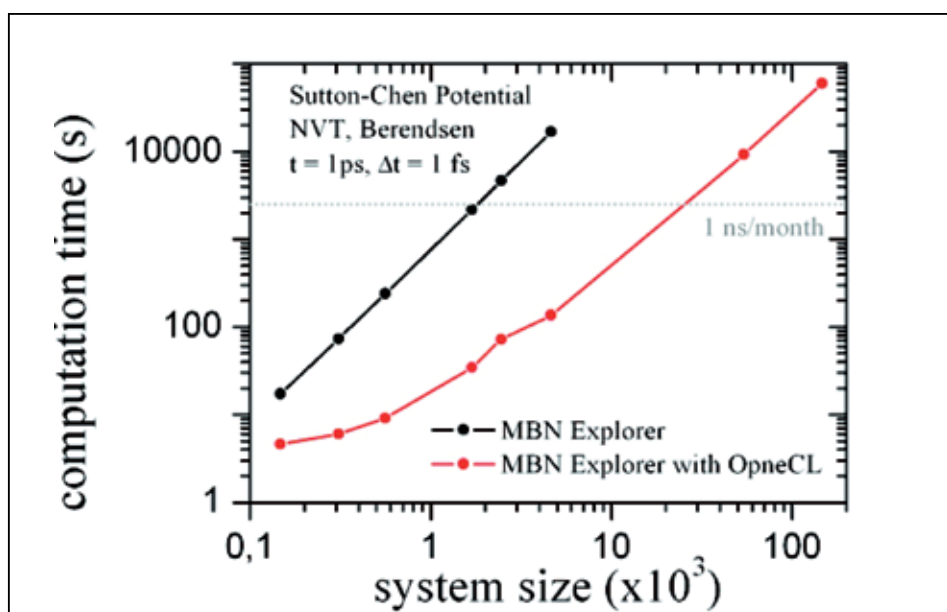


Figure 1:
Performance of the OpenCL version of MBN Explorer as compared to the conventional CPU version of the code. For systems consisting of more than 1 thousand of particles the computational advantage of the OpenCL version can be more than 100 times.

Monte Carlo modeling of neutron production and transport in spallation targets

Yury Malyshkin¹, Igor Pshenichnov^{1,2}, Igor Mishustin^{1,3}, and Walter Greiner¹

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies, Goethe-Universität Frankfurt am Main, Germany, ² Institute for Nuclear Research, Russian Academy of Science, Russia, ³ Kurchatov Institute, Russian Research Center, Russia

Eine der wichtigsten Anwendungen der Hochenergie-Beschleuniger ist, Neutronen zu produzieren, die zum Beispiel für Neutronenstreuung und Materialforschung genutzt werden. Wissenschaftler am Frankfurt Institute for Advanced Studies simulieren die Produktion der Neutronen am Computer. Dazu haben sie eine spezielle Software namens MCADS (Monte Carlo für Accelerated Driven Systems) entwickelt.

One of the most important applications of high-energy accelerators is to produce neutrons in proton-induced spallation reactions on extended targets made of heavy materials. In this way neutron spallation sources operate, see, e.g., [1] and [2], providing neutrons for neutron scattering experiments and material research. Neutrons produced by energetic protons can be also used to maintain a chain of nuclear fission reactions in a subcritical assembly of an accelerator-driven system (ADS) for nuclear waste incineration [3, 4]. In all such cases the neutron flux around the spallation target has to be thoroughly quantified.

We study the possibility of neutron production by proton beam in fissile targets, e.g. made of uranium, and compare it with the case of non-fissile one. It is reasonable to use Monte Carlo method for solving this complex task. A dedicated software called MCADS (Monte Carlo for Accelerated Driven Systems) was created in FIAS. MCADS is based on the Geant4 toolkit (C++ library) [5], which is widely employed in basic physics research to simulate the propagation of particles and nuclei in extended media. Due to its universality and flexibility the Geant4 toolkit is used to build simulation software for various applications including nuclear, particle and accelerator physics, medical physics (e.g. particle cancer therapy and positron emission tomography), radiation protection and dosimetry, space research. With a wide use of the toolkit, its manifold validation is ensured by a feedback from users to toolkit developers.

For the first step we tested fission simulation with the Bertini, Binary and INCL/ABLA models which are incorporated in Geant4. So far there was no any detailed validation of fission process modeling by Geant4 with these models. A set of simulation with thin targets made of ^{238}U was performed. Mass distributions of nuclear fragments, fission cross sections and neutron multiplicity were obtained and compared with recent experimental data [6]. As an

example, the mass distribution of fission fragments in the uranium target irradiated by 63-MeV proton beam is shown in Fig. 1. We found that INCL/ABLA intranuclear cascade model provides better description of measured neutron yields compared to other cascade models available in Geant4. We recommend to use this model when the accuracy of fission processes simulation is important.

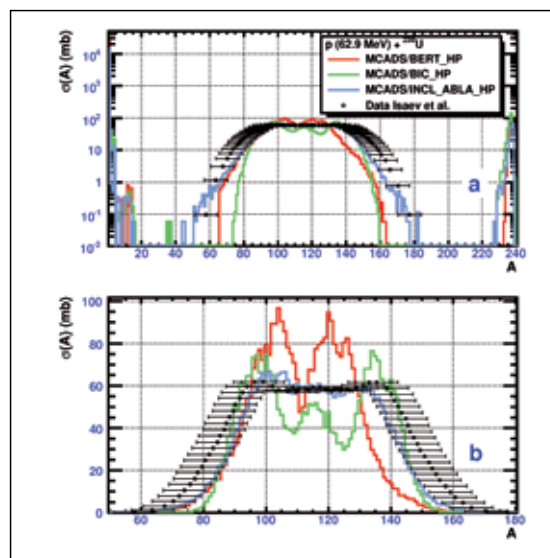


Figure 1: Mass distribution of nuclear fragments produced in inelastic interactions (a) and only in fission reactions (b) of 62.9 MeV protons with the uranium (^{238}U) target. Results of simulation using different models and experimental data [6] are presented.

The next stage of our investigation is the comparison of fissile and non-fissile targets as sources of neutrons. We consider monolithic targets made of tungsten and uranium. Both targets have cylindrical shape with radius of 10 cm and length of 20 cm. The comparison of neutron yields, energy deposition, space and time distributions of neutron flux calculated with MCADS for tungsten and uranium targets makes possible to evaluate the influence of fission on the performance of the spallation targets. We obtained that neutron production in the uranium target is three times more

than in the tungsten one. Though fission leads to the increased heat deposition in the uranium target, the "thermal cost" of a single neutron production is found to be comparable to the corresponding value calculated for tungsten. Due to the enhanced production of neutrons in fissile targets calculated per beam proton, a less powerful accelerator can be used to reach the same level of neutron flux.

The energy spectrum of produced neutrons, spatial and time characteristics of neutron leakage from the target as well as distributions of neutron flux and heat deposition inside the target were calculated. As an example the correlation between the leakage time and energy of neutrons leaving from the uranium target following the impact of a single 600 MeV proton is shown in Fig. 2. The main part of neutrons have the energies between 0.1 and 3 MeV and they leave the target within the first 40 ns after the proton impact.

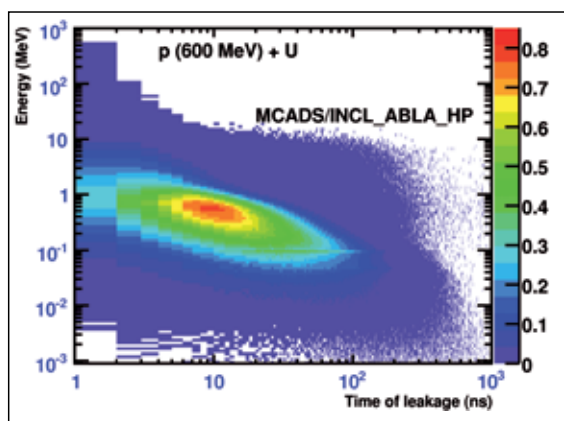


Figure 2:
Correlation between the leakage time and energy of neutrons leaving the uranium target following an impact of a single 600 MeV proton.

The time distribution of neutrons leaving the target following the impact of a single beam proton is predicted to be wider for the uranium target compared to the tungsten one. However, the time distribution of neutrons leaving spallation targets irradiated by a synchrotron or by a linac is only marginally affected by the propagation time of fast neutrons inside the spallation target. This is because of a characteristic beam pulse duration (<0.1 ms) of such accelerators is much longer compared to the migration time (<10 ns) of fast neutrons in the target. However, in the facilities aimed at high-resolution time-of-flight measurements and using very short beam pulses (below 10 ns), the time distribution of neutron flux will be essentially different from the beam pulse shape. The time structure of neutron production is also investigated for the case of hypothetical instabilities of a continuous beam. These instabilities are modeled by a pulsed proton beam with a high duty cycle of 50% and various spill durations (see Fig. 3).

Optimization studies regarding the neutron flux and energy deposition are in progress.

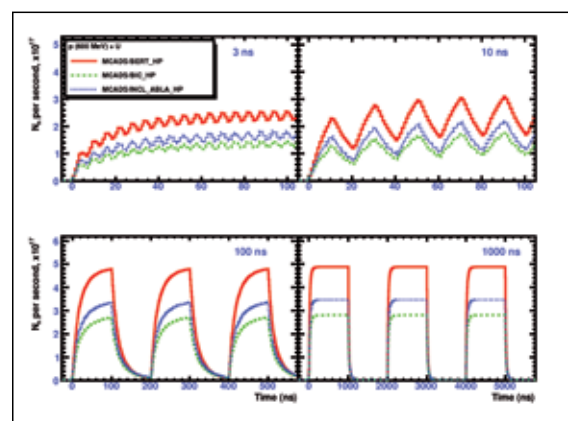


Figure 3:
Time dependence of the neutron flux from the uranium target irradiated by a 1 mA 600 MeV proton beam with a 50% duty cycle and spill durations of 3, 10, 100 and 1000 ns.

References:

1. ISIS pulsed neutron and muon source at the Rutherford Appleton Laboratory in Oxfordshire, <http://www.isis.stfc.ac.uk/>.
2. Spallation Neutron Source (SNS) at Oak Ridge National Laboratory (ORNL), <http://myrrha.sckcen.be/>.
3. MYRRHA: Multi-purpose hybrid research reactor for high-tech applications, <http://myrrha.sckcen.be/>.
4. B. Thomauske et al., Aachen Nuclear Safety Reports (ANSR) I, (2001).
5. J. Allison et al. (Geant4 Collaboration), Geant4 developments and applications, IEEE Trans. Nucl. Sci. 53 (2006) 270.
6. S. Isaev et al., Nuclear Physics A, 809, (2008) 1-29.

The Ground State and the Optical Response of Graphene

Johanna Grönqvist and Tineke Stroucken

Department of Physics and Material Sciences Center, Philipps-Universität Marburg

Graphen, ein modifizierter Kohlenstoff, ist ein starkes, flexibles Material. Die Tatsache, dass Graphen im Grundzustand keine Bandlücke aufweist, erschwert jedoch die Anwendung, etwa in Transistoren. Wissenschaftler der Universität Marburg haben berechnet, dass die Stärke der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Material den Grundzustand des Graphens bestimmt und damit das optische Verhalten. Ein Ergebnis: Bringt man Graphen auf ein anderes Material auf, verändert sich das optische Verhalten. Das eröffnet neue Einsatzgebiete für Graphen.

We are investigating ways to describe the ground state of graphene, a new material of enormous scientific interest [1]. As a material, graphene is very strong and flexible. The electrons in graphene behave, in some respects, like massless particles. One great setback for using graphene e.g. in transistors, is the fact that graphene in its ground state is commonly perceived to be without a band gap.

We use a microscopic many-body theory to describe the ground state in a self-consistent manner. Our approach is similar to the use of the semiconductor Bloch equations [2], which have been used successfully to study a range of microscopic phenomena in semiconductors. Our approach gives us equations for the ground state. Building on that, the same microscopic approach also gives us a way to simulate the light-matter interaction, which allows us to give theoretical predictions for measurable optical spectra [3].

It turns out, in our studies, that the strength of the electron-electron interaction in the material is crucial for the nature of the ground state [4], and in extension, for the behavior of the optical response [3]. As the central feature, a band gap opens up when the coupling is strong enough. The strength

of the electron-electron interaction is governed by the effective behavior of the electrons amongst themselves (i.e., screening), but also, interestingly, by the immediate surroundings of the graphene sheet. This opens up the possibility to change the optical response by depositing, or growing, the graphene sheet on top of different materials.

We solve the equations for the ground state numerically, together with equations for the screening by the electron plasma. When iterating these two sets of equations systematically, we arrive at a self-consistent description of the ground state in graphene.

References:

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
2. H. Haug and S. W. Koch, Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors (World Scientific, Singapore, 2009).
3. T. Stroucken, J. H. Grönqvist, and S. W. Koch, Optical response and ground state of graphene, Phys. Rev. B 84, 205445 (2011).
4. J. H. Grönqvist, T. Stroucken, G. Berghäuser, and S. W. Koch, Wannier excitons signaling strong Coulomb coupling in graphene, arXiv:1107.5653.

Phonon-assisted luminescence of polar semiconductors

Christoph N. Böttge, Mackillo Kira, Stephan W. Koch
Department of Physics and Material Sciences Center, Philipps-Universität Marburg

Ob Leuchtdioden, Mikroprozessoren oder Solarzellen: Halbleiter sind in der Industrie gefragt. Wissenschaftler der Universität Marburg untersuchen, wie sich mikroskopisch kleine Hohlräume im Halbleiter auf die phonon-gestützte Photolumineszenz auswirken.

Due to its highly polar nature, the strong interaction between electrons and longitudinal-optical (LO) phonons in ZnO gives rise to pronounced phonon sidebands in the luminescence spectra.^{1–7} Since the LO phonons have a discrete energy, phonon-assisted processes can create multiple replicas, i.e., sidebands (PSBs) at distinct frequencies below the original excitonic resonance.^{2, 6, 8}

To investigate the influence of a semiconductor microcavity on the phonon-assisted photoluminescence, we develop a consistent microscopic theory and expanded the quantum-optical semiconductor-luminescence equations^{9–11} by fully including phonon-assisted processes. In extension to our earlier work,^{2, 8} this approach allows us to compute both spontaneous and stimulated emission at the excitonic resonance and its first sideband. Additionally to our numerical studies, we develop an analytic model to describe the main features of phonon-assisted luminescence in a cavity.¹²

In another project, we investigate the origin of exciton-phonon interaction in polar semiconductors. The relative contributions of Fröhlich coupling and deformation potential scattering are identified by analyzing experimentally measured phonon-assisted luminescence using a rigorous many-body approach. Our experiment-theory comparison demonstrates that phonon scattering is significantly influenced by many-body interactions. Fröhlich interaction can be strongly suppressed for excitons even when it dominates electronic single-particle scattering. The results show that deformation potential scattering dominates the exciton-phonon interaction in ZnO, whereas Fröhlich interaction prevails in CdS, and both coupling mechanisms yield almost equal contributions in ZnS.¹³

References:

1. W. Y. Liang and A. D. Yoffe, Phys. Rev. Lett. 20, 59 (1968)
2. T. Feldtmann, M. Kira, and S. W. Koch, Phys. Status Solidi B 246, 332 (2009)
3. S. J. Xu, S.-J. Xiong, and S. L. Shi, J. Chem. Phys. 123, 221105 (2005)
4. C. F. Klingshirn, Phys. Status Solidi B 202, 1521 (1997)
5. L. Li, H. Yang, G. Qi, J. Ma, X. Xie, H. Zhao, and F. Gao, Chem. Phys. Lett. 455, 93 (2008)
6. S. Ramanathan, S. Bandyopadhyay, L. K. Hussey, and M. Munoz, Appl. Phys. Lett. 89, 143121 (2006)
7. R. Kuhnert and R. Helbig, J. Lumin. 26, 203 (1981)
8. T. Feldtmann, M. Kira, and S. W. Koch, J. Lumin. 130, 107 (2010)
9. M. Kira, F. Jahnke, W. Hoyer, and S. W. Koch, Prog. Quantum Electron. 23, 189 (1999)
10. M. Kira, F. Jahnke, and S. W. Koch, Phys. Rev. Lett. 81, 3263 (1998)
11. M. Kira and S. W. Koch, Prog. Quantum Electron. 30, 155 (2006)
12. C. N. Böttge, M. Kira, and S. W. Koch, Phys. Rev. B, submitted (2012)
13. A. Chernikov, V. Bornwasser, M. Koch, S. Chatterjee, C. N. Böttge, T. Feldtmann, M. Kira, S. W. Koch, T. Wassner, S. Lautenschläger, B. K. Meyer, and M. Eickhoff, Phys. Rev. B 85, 035201 (2012)

Simulationen für quantitative Auswertungen von transmissionselektronenmikroskopischen Daten von gemischten III/V-Halbleiter-Heterostrukturen

R. Fritz, A. Beyer, B. Haas, K.I. Gries und K. Volz
Fachbereich Physik und WZMW der Philipps Universität Marburg

Je besser die Struktur von Laserdioden und Solarzellen ist, desto mehr Leistung bringen diese Bauteile. Wissenschaftler der Universität Marburg vergleichen die Bilder, die Transmissions-Elektronenmikroskope (TEMs) von der Struktur der Halbleiter liefern, mit Computer-Simulationen. Sie wollen die Produktion gemischter III/V-Halbleiterstrukturen möglichst gut überprüfen und verstehen, um das Material möglichst effizient herzustellen.

Bauelemente wie Laserdioden und Solarzellen auf Basis der III/V-Halbleiter sollten für höchste Leistungsfähigkeit und Effizienz von hervorragender struktureller Qualität sein. Darüber hinaus lässt sich beim epitaktischen Wachstum durch Einstellen der chemischen Zusammensetzung neben den atomaren Abständen im Kristallgitter auch gezielt die energetische Bandlücke des Materials beeinflussen. Dafür genügen bereits sehr geringe Anteile anderer Atomsorten der Gruppen III bzw. V im Wirtskristall.

Moderne Transmissions-Elektronenmikroskope (TEMs) erlauben einen detaillierten Blick auf und in die strukturellen Eigenschaften der vielschichtigen Halbleiter. Hier ermöglicht insbesondere das Raster-TEM (STEM) die Korrelation unterschiedlichster Messungen zu der im Mikroskop exakt steuerbaren Position des fein gebündelten Primär-Elektronenstrahls auf der Probe. Damit lassen sich die Signale mit subatomarer Genauigkeit ihrem Ursprungsort auf der Probe zuordnen.

Zur quantitativen Messung der chemischen Zusammensetzung des Materials eignet sich neben Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie (EELS) speziell die Verwendung eines ringförmigen Dunkelfeld(ADF)-Detektors. Dieser detektiert in hohen Winkelbereichen (high angle - HA) hauptsächlich Elektronen, die thermisch diffus an Kristallgitterschwingungen, Phononen gestreut wurden. Wegen des starken Einflusses der Kernladungszahl des Probenmaterials auf die gestreute Intensität bezeichnet man diese HAADF-STEM-Methode auch als Z-Kontrast-Abbildung. In den Abbildungen ist atomare Auflösung und intuitiv eine qualitative Interpretation möglich. Durch einen Vergleich mit den Ergebnissen von teils sehr zeitaufwendigen Computersimulationen wird es außerdem möglich quantitative Aussagen über die Zusammensetzung des Materials zu treffen.

Im Gegensatz zu EELS erscheint wegen seiner hohen Sensitivität auf bereits geringe Änderungen der Kernladungszahl, also der Probenzusammensetzung, die Anwendung der Z-Kontrast-Abbildung auf gemischte III/V-Halbleiter-Materialien sehr aussichtsreich.

Im Rahmen dieses Projekts werden daher HAADF-STEM-Untersuchungen an verschiedenen gemischten III/V-Halbleitern vorgenommen (u.a. am JEM2200FS der HU Berlin), darunter auch verdünnt Stickstoff-haltige Materialien wie Ga(NAs) und Ga(NP). Die hier eingebauten N-Atome reduzieren die durchschnittliche Kernladungszahl des Materials, sorgen aber trotzdem für einen unerwarteten, deutlich hellen Kontrast gegenüber reinem GaP oder GaAs gleicher Dicke. Dies kann quantitativ verstanden werden, wenn der Einfluss der N-Atome mit vergleichsweise kleinem kovalenten Radius auf die umliegenden Atompositionen in den Simulationen Berücksichtigung findet.

Hierfür wurde STEMsim, ein paralleles Matlab-Programmpaket zur Simulation von Z-Kontrast-Abbildung, um die Relaxation der Atompositionen im Kristallgitter erweitert, wodurch der wichtige Einfluss der statischen Verschiebungen der Atome bestätigt und quantitativ untersucht werden kann. Zur Simulation stehen verschiedene Näherungen zur Verfügung (Blochwellen-Rechnung, Multislice-Verfahren, Frozen-Lattice und Frozen-Phonon), um die Rechenzeit im HPC-Cluster MaRC der Uni Marburg auf ein akzeptables Maß zu reduzieren, ohne jedoch im Endergebnis auf relevante Genauigkeit verzichten zu müssen.

Für verlässliche Simulationsergebnisse, die sich quantitativ mit den experimentellen Kontrasten vergleichen lassen, sind neben den erwähnten Korrekturen für das Kristallmodell auch weitere

im Mikroskop zur Messung eingestellte Parameter nötig. So wird zur direkten Vergleichbarkeit mit den Simulationsergebnissen die experimentell gefundene Intensität auf die Intensität des Primärelektronenstrahls normiert, was durch einen Scan des HAADF-Detektors ermöglicht wurde. Desweiteren konnten der Konvergenzwinkel des Primärelektronenstrahls bestimmt und außerdem ein maximaler Akzeptanzwinkel des Objektivlinsensystems gefunden werden, wodurch ein maximaler Streuwinkel bei der Abbildung definiert ist. Durch systematische Untersuchungen konnte weiterhin gezeigt werden, welchen Einfluss die inhomogene Sensitivität des Detektor-Szintillators auf die quantitative Untersuchung haben kann, wenn dies nicht ebenfalls Berücksichtigung in der Auswertung findet. Im weiteren Verlauf des Projekts sollen neben N-haltigen Materialien auch B-haltige Strukturen quantitativ analysiert und eine etwaige Proben-Dickenabhängigkeit des Z-Kontrasts von N- bzw. B-haltigen Materialien experimentell überprüft werden. Ebenfalls geplant ist die Untersuchung gemischter III/V-Halbleiter mit einem Anteil an Bi-Atomen, deren kovalenter Radius und deren Kernladungszahl deutlich größer sind. Damit wird ein umfassender Überblick über das Z-Kontrast-Verhalten ternärer III/V-Halbleiter auf Basis von GaAs bzw. GaP gegeben werden, worauf weitere Untersuchungen komplexerer Materialien aufbauen können. Für die hierfür notwendigen weiteren Simulationsreihen gemischter Halbleitermaterialien wird die neue Umgebung des Marc2-Cluster mit mehr CPU- und RAM-Leistung beste Voraussetzungen liefern für die quantitative Auswertung der Messergebnisse am neuen doppelt Aberrations-korrigierten Raster-TEM JEOL 2200FS Hochleistungselektronenmikroskop am WZMW der Uni Marburg.

Terahertz-Spektroskopie von Halbleitern

Lukas Schneebeli, Benjamin Breddermann, Andrea Klettke, Mackillo Kira, Stephan W. Koch
Fachbereich Physik und Wissenschaftliches Zentrum für Materialwissenschaften, Philipps-Universität Marburg

Wissenschaftler der Universität Marburg befassen sich intensiv mit Terahertz-Spektroskopie. Dabei handelt es sich um eine Analysemethode, bei der man sich die Eigenschaften der Licht-Materie-Wechselwirkung zahlreicher Materialien bei Anregung mit Terahertz-Strahlung zunutze macht, um detaillierte Informationen über Zusammensetzung und Materialeigenschaften zu erhalten. Die Terahertz-Spektroskopie dient auch zur technologischen Anwendung in der Biologie und Medizin.

Elektromagnetische Strahlung im Terahertz-Bereich ist spektral zwischen dem Infrarot- und Mikrowellen-Bereich, also bei nicht optisch sichtbaren Frequenzen angesiedelt. Nachdem in der Vergangenheit zunächst das technische Problem bestand, hinreichend leistungsfähige Terahertz-Quellen und entsprechende Detektionsmethoden im Wellenlängenbereich der Terahertz-Strahlung zu finden, sind in den letzten Jahren immense Fortschritte auf diesem Gebiet zu verzeichnen, sodass mittlerweile schon vielfältige Anwendungsmöglichkeiten entwickelt wurden.

Unsere Arbeitsgruppe hat ein Konzept entwickelt, wie man Terahertz-Spektroskopie zur Untersuchung von Exzitonen in Halbleitern einsetzen kann, wie beispielsweise nachzulesen in dem Übersichtsartikel [1].

Ein wesentliches Merkmal der Terahertz-Spektroskopie ist ihre besondere Eignung zum Nachweis und zur Analyse korrelierter Vielteilchenzustände in Halbleitern. Aktuell besteht diesbezüglich ein Forschungsschwerpunkt in Untersuchungen zur Dynamik exzitonicer Korrelationen und zu Photoluminiszenzeffekten unter Terahertz-Einfluss. Hierzu werden auch experimentelle Daten analysiert mit dem Ziel, durch möglichst mikroskopische Modellrechnungen eine optimale Übereinstimmung von Experiment und Theorie zu erreichen. Entsprechende Veröffentlichungen zu diesen Untersuchungen sind in Vorbereitung oder zum Teil bereits eingereicht.

Weitere zurückliegende und laufende Untersuchungen beschäftigen sich beispielsweise mit kollektiven Anregungen im zweidimensionalen Elektronengas (Plasmonen), mit der Bildungs- und Zerfallsdynamik exzitonicer Zustände unter verschiedenen Bedingungen sowie mit nichtlinearen Terahertz-Effekten. Desweiteren gehört zu den aktuellen Forschungsgegenständen auch die Untersuchung und mikroskopische Modellierung der zugrundeliegenden Streumechanismen in mithilfe von THz-Strahlung optisch angeregten Halbleiterstrukturen, wie Halbleiter-Quantenfilmen. In diesem Zusammenhang richtet sich besonderes Augenmerk auf die Analyse der entsprechenden Verbreiterungs- und Dephasierungseffekte in den resultierenden Absorptionsspektren.

Microscopic Calculation of Intersubband Absorption in Semiconductor Heterostructures

Siemen Kühl and Stephan W. Koch
Department of Physics and Material Sciences Center, Philipps-Universität Marburg

Laserdioden könnten mehr Leistung bringen, wenn weniger Ladungsträger in der Diode verloren gingen. Wissenschaftler der Universität Marburg arbeiten daran, diese Verluste zu reduzieren. Gelingt es Ihnen, können Laser mit höherer Leistung gebaut werden.

To develop and design semiconductor-laser devices, it is necessary to perform a detailed analysis of their properties. Therefore, we use a many-particle theory based on microscopic equations of motion. This theoretical approach involves two steps: The starting point is the calculation of the single-particle bandstructure, where we apply the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -method which is based on perturbation theory [1]. Here, the corresponding dipole- and Coulomb-matrix elements which are used for the microscopic calculations are also computed numerically. To find appropriate input parameters, we only need the material parameters and the structural layout (focussing on long wavelength heterostructures). On this basis, the semiconductor-Bloch equations for intersubband transitions (in analogy to the interband case discussed in Ref. [2]) are solved to determine the intensity of absorption. Summing up, the microscopic quantities allow us to evaluate the macroscopic absorption properties of the quantum well.

The aim is to understand how intersubband absorption effects the laser efficiency. Furthermore, this procedure leads to an optimization problem. Our interest is to develop and perform design studies to reduce the carrier losses due to intersubband absorption by varying structural parameters to achieve a better laser performance.

References:

1. W.W. Chow and S.W. Koch, Semiconductor-Laser Fundamentals, Springer, 1999.
2. H. Haug and S.W. Koch, Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors, World Scientific, 2009.

Phonon-Squeezing: Vorläufer für nicht-thermisches Schmelzen in Silizium

Prof. Dr. Martin Garcia,
Fachgebiet Festkörper und Ultrakurzzeitphysik, Universität Kassel

Mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen hat Tobias Zier in seiner Diplomarbeit die Strukturveränderung von Silizium nach Anregung mit einem ultrakurzen Laserpuls untersucht. Ultrakurz heißt in diesem Sinne im Femtosekundenbereich, wobei eine Femtosekunde 0.000000000000001 Sekunden beträgt. Die bisher erhaltenen Ergebnisse lassen sich wie folgt zusammenfassen.

Femtosekundenlaserpulse können genutzt werden um praktisch instantan Bindungen in Festkörpern, wie Silizium, zu manipulieren, indem sie ein sehr heißes Elektronenplasma erzeugen. Bei genügend hohen Laserfluenzen kann es sogar vorkommen, dass einige Gitterschwingungen (Phononen) instabil werden. Dies hat zur Folge, dass nun Kräfte auf die Atome wirken, die die Kristallstruktur (Silizium kristallisiert in der gleichen Struktur wie Diamant) innerhalb weniger 100 Femtosekunden (fs) zerstören. Dieses Phänomen nennt man nichtthermisches Schmelzen. Es wurde schon in einigen Halbleiterelementen experimentell nachgewiesen. Es ist aber immer noch nicht bekannt, welcher physikalische Prozess bei Fluenzen unterhalb des Schmelzens den Kristall dominiert. Durch die Ergebnisse unserer Berechnungen fanden wir heraus, dass in Silizium die Raumtemperatur-Phononen thermisch zusammengequetscht werden („phonon squeezing“). Ursache für diesen Effekt ist die plötzliche Abschwächung der inter-atomaren Bindung. Bei näherer Betrachtung unserer Simulationen fiel auf, dass sich die Atome in den ersten Schritten des nichtthermischen Schmelzens in dieselbe Richtung bewegen, wie beim phonon squeezing (Abbildung 1). Dies zeigt an, dass phonon squeezing ein Vorläufer für nicht-thermisches Schmelzen in Silizium ist.

Der nächste Schritt in dieser Untersuchung wird die Simulation und das tiefere Verstehen des nichtthermischen Schmelzens sein.

Zur Berechnung der Simulationen wurden in Spitzenzeiten ca. 60 Kerne des ITS Kassel genutzt, wovon wir auf jeweils 12 parallel gerechnet haben. Im Schnitt waren es ca. 20 Prozessoren im Monat die für diese Rechnungen benutzt worden sind. Die Rechenzeiten unserer Berechnungen schwanken zwischen Kontrollrechnungen, die ungefähr einen bis zwei Tage in Anspruch nehmen bis hin zu Simulationen, die trotz Parallelisierung bis zu 2 Monate dauern.

Die Abbildung zeigt die atomaren Bewegungen der ersten 600 fs nach der Anregung mit einem ultrakurzen Laserpuls für unterschiedliche Fluenzen an. a) zeigt die root-mean-square Verschiebung zu der Gleichgewichtslage als eine Funktion der Zeit. b) zeigt eine Projektion auf 2D der atomaren Positionen einer beliebigen Rechnung.

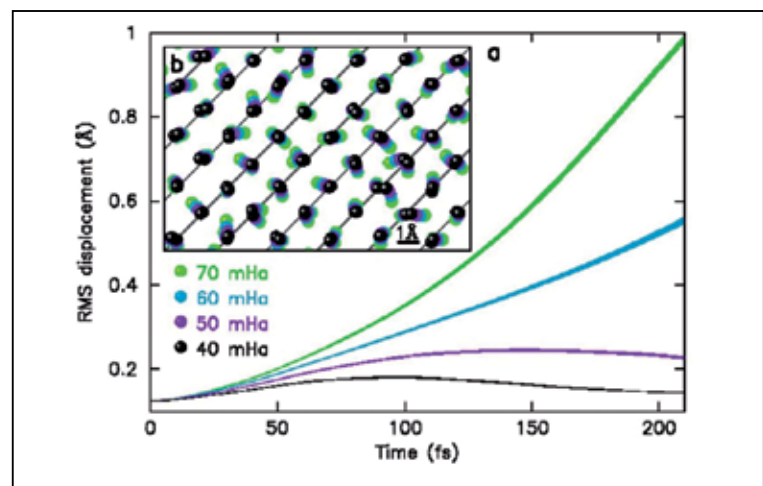


Abbildung 1:
Ausbreitung einer elastischen Welle in dem Modell eines Stahlkörpers mit inhomogen-anisotroper Schweißnaht.

Dichtematrix-Funktional-Theorie für das Anderson-Modell

Waldemar Töws, Prof. Dr. G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Physiker der Universität Kassel haben eine Dichtematrix-Funktional-Theorie (DMFT) für das Einzelverunreinigungs-Anderson-Modell formal entwickelt, in der Form eines Computerprogramms implementiert und mit exakten numerischen Methoden verglichen. Damit wollen sie nun das zentrale Austausch- und Korrelations-Energie-Funktional besser verstehen. Zudem wollen sie das Modell zum Studium realistischer und allgemeiner Gittermodelle nutzen, in denen die elektronische Korrelation eine ausschlaggebende Rolle spielt.

Die Herangehensweise besteht darin, die Wellenfunktion durch die Ein-Teilchen-Dichtematrix $\gamma_{ij\sigma}$ bezüglich Gitterplätzen ij und Spin σ als Basisvariable des Vielteilchenproblems zu ersetzen. Wie in allen Dichte-Funktional-Methoden ist es wesentlich, akkurate Näherungen des fundamentalen Wechselwirkungsfunktionals $W[\gamma]$ herzuleiten. Zu diesem Zweck benutzten wir einen Zwei-Niveau-Ansatz, der explizit nur das Verunreinigungsorbital und einen einzelnen Symmetrie-angepassten Leitungsband-Zustand enthält. Hiermit erhielten wir eine einfache analytische Funktionalabhängigkeit der Wechselwirkungsenergie auf der Basis von exakten Resultaten. Es ließ sich zeigen, dass die so hergeleitete Zwei-Niveau-Näherung (ZNN) exakt in zwei wichtigen entgegengesetzten Grenzen ist, nämlich in einem total entarteten Leitungsband und einem Leitungsband mit zwei weit getrennten diskreten Niveaus.

Als Anwendung der ZNN betrachteten wir zunächst ein- und zweidimensionale spin-unpolarisierte Systeme. Mittels numerischer Simulationen am IT-Servicezentrum konnten verschiedene Grundzustands-Eigenschaften wie zum Beispiel die Grundzustands-, kinetische und Coulomb-energien, die Verunreinigungsvalenz und die lokalen Momente studiert werden. Die Abbildung zeigt die Wechselwirkungsenergie des Grundzustands W_{gz} als Funktion der Coulombrepulsion U . Diese und andere DMFT-Ergebnisse beweisen, dass die ZNN eine effiziente Methode zur Beschreibung von Systemen mit schwachen bis hin zu starken Korrelationen ist. In dem zweiten Teil der Arbeit wurde die ZNN auf spin-polarisierte Systeme erweitert. Dies erlaubt es uns, Systeme mit einer ungeraden Anzahl von Elektronen, den Einfluss eines äußeren Magnetfeldes und Spinanregungen zu untersuchen. Als Beispiel zeigt das Innere der Abbildung die niedrigste Singlet-Triplet-Anregungsenergie, die maßgebend die sogenannte Kondotemperatur bestimmt.

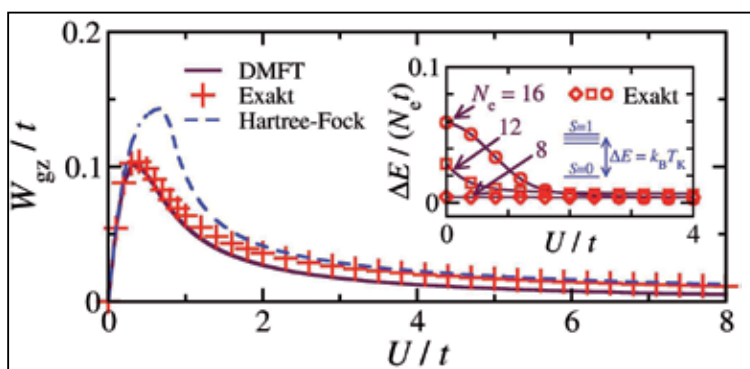


Abbildung 1: Wechselwirkungsenergie des Grundzustandes W_{gz} eines halbgefüllten $N = 12$ Orbital-Anderson-Rings als Funktion der Coulombrepulsion U . DMFT-Ergebnisse werden mit exakten Lanczos-Diagonalisierungen und Hartree-Fock-Berechnungen verglichen. Im Inneren ist die Singlet-Triplet-Energielücke für $N_e = 8, 12$ und 16 Elektronen dargestellt (aus Ref. [2]).

Referenzen:

1. W. Töws, Entwicklung und Anwendung der Dichtematrix-Funktional-Theorie für das Anderson-Modell, Diplomarbeit, Universität Kassel, Germany (2009).
2. W. Töws and G. M. Pastor, Lattice density-functional theory of the single-impurity Anderson model: Development and applications, Phys. Rev. B 83, 235101 (2011).

Magnetische Verunreinigungen in Nanodrähten

Dr. Matthieu Saubanère, Prof. Dr. G.M. Pastor
 Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Materialien ändern ihre Eigenschaften, wenn sie auf wenige Nanometer geschrumpft werden. Teilweise bewirken dies die starken Wechselbeziehungen der Elektronen in den Atomen, etwa beim Magnetismus. Wissenschaftler der Universität Kassel untersuchen, wie sich magnetische Verunreinigungen in Nanodrähten auf deren Eigenschaften auswirken.

Strong electron-correlation effects and in particular magnetism are among the most interesting and challenging topics in nanoscience. The unconventional properties of magnetic impurities in metal hosts reflect the competition between the tendency of electrons to delocalize, in order to minimize their kinetic energy, and the resulting local charge fluctuations, which increase the Coulomb-repulsion energy and which favor the formation of localized states. This competition depends so critically on the magnetic coupling between impurity and host electrons, that small magnetic energy gaps appear in the low-energy spectrum. Even the magnetic nature of the ground state is difficult to predict. Therefore, a remarkable low- temperature magnetic behavior is observed. A detailed understanding of this problem can be achieved by using quantum mechanical numerical method implemented on high performance computers.

The purpose of this work is to investigate the properties of magnetic impurities in nanowires in the framework of Hohenberg-Kohn-Sham's

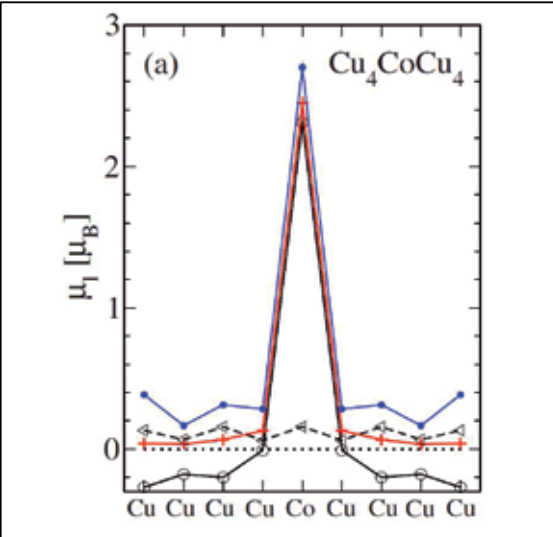


Figure 1:
 Local magnetic moment in Co doped Cu wires.

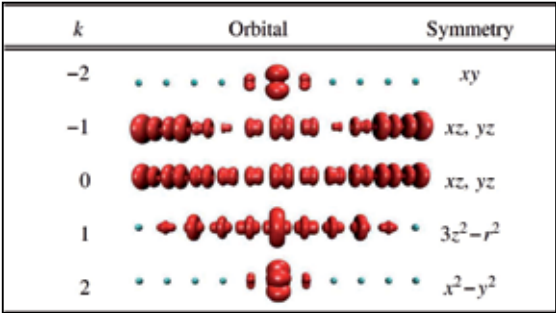


Figure 2:
 Illustration of the charge-density of down electron in orbitals having an energy close to the Fermi level in Co₅CoCu₅ wire.

(HKS) density-functional theory (DFT). One of the qualitatively most important outcomes of our calculations is that the optimal total spin S_z is not minimal but one above minimal. According to HKS-DFT this is a consequence of a reduction of the local atomic moment at the impurity, rather than the result of magnetic screening. In fact, as shown in the figure, the coupling between the impurity moment and the induced moments at the metal host is ferromagnetic-like. The results for the local density of electronic states at the impurity atoms confirm that the impurity moments are largely dominated by the d-electron contributions. Moreover, a 100% minority-spin polarization of the electronic states at the Fermi energy is observed. As illustrated in the Table, a more detailed analysis of the corresponding d wave functions reveals a remarkable correlation between the rotational symmetry and the degree of delocalization of the impurity states. These predictions should be detectable in STM experiments.

References

- Electronic and magnetic properties of Co and Ni impurities in Cu wires: First-principles investigation of local moment formation in one dimension, Matthieu Saubanère, J. L. Ricardo-Chávez, and G. M. Pastor; Phys. Rev. B 82, 054436 (2010).
- First principles theoretical study of complex magnetic order in transition-metal nanowires, M. Saubanère, M. Tanveer, P. Ruiz-Díaz, and G. M. Pastor; Phys. Status Solidi B 247, 2610-2620 (2010).

Spindichtewelleninstabilität in Nanodrähten aus Übergangsmetallen

M. Tanveer, Dr. Pedro Ruiz Díaz, Prof. Dr. G.M. Pastor
Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Damit Speichermedien im Miniaturformat funktionieren, muss das verwendete Material auch auf Nanoebene stabil ferromagnetisch sein. Die winzigen Stabmagnete in den Atomen, die Spins, müssen sich also stabil in die gleiche Richtung ausrichten lassen. Wissenschaftler der Universität Kassel erforschen, wie sich Nanodrähte aus Übergangsmetallen im Hinblick auf den Ferromagnetismus verhalten.

The stability of ferromagnetism in 3-d transition-metal (TM) nanostructures is a property of central importance in both basic and applied material physics. Previous study have shown that the effective exchange coupling between local magnetic moment at different atoms i and j are most sensitive to dimensionality. It is therefore most interesting to investigate the nature of the magnetic order in low dimensional system and particular in nanowires. Fig.1 shows the model of spin spirals in nanowire as a function of the wave vector q along the direction of wire.

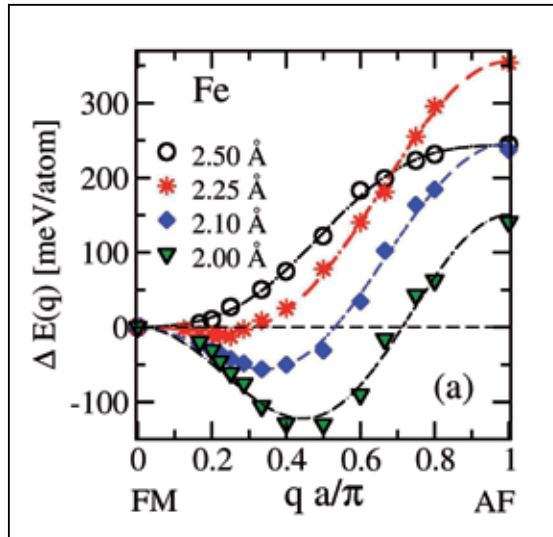


Figure 1:
Frozen-magnon energy in Fe nanowires with various interatomic distances as a function of spin-spiral wave vector q .

The change in energy for interatomic distances $a = 2.0$ to 2.25 Å imply that the ferromagnetic order in the Fe wires and that is replaced by a non-collinear spin-spiral arrangement while for larger interatomic distances the ferromagnetic order is more stable. A more detailed analysis of the magnetic interactions J_{ij} for a local perspective shows that the spiral instability is triggered by a competition between nearest-neighbor (NN) and next-nearest neighbor interactions.

Moreover, we have investigated the stability of the spin-density wave in zigzag chains and spin-ladders. We observed that the zigzag chains have the ferromagnetic stable ground state whilst the ladders chains tend to favour the formation of spin-density wave. Similar behaviour is observed in Mn, V and Co wires, the stability of the spin-spiral states tends to decrease for large d-band filling (e.g., Co and Ni) and for large interatomic distances.

References:

1. First principles theoretical study of complex magnetic order in transition-metal nanowires, I. Saubanère, M. Tanveer, P. Ruiz-Díaz, and G. M. Pastor, Phys. Status Solidi B 247, 2610-2620 (2010).
2. Spin spiral-density-wave in 3d transition-metal (TM) chains: First-principles calculation, I. Tanveer, P. Ruiz-Díaz, and G. M. Pastor, to be published.

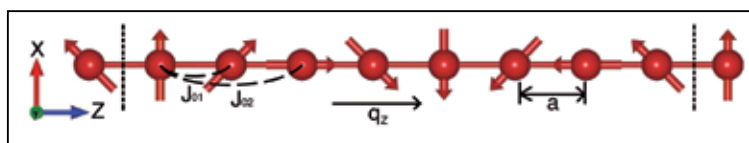


Figure 2:
Schematic illustration of the unit cell for a spiral spin-density wave having a wave vector $q = (0, 0, \Pi/4a)$ and spin polarization within the xz -plane.

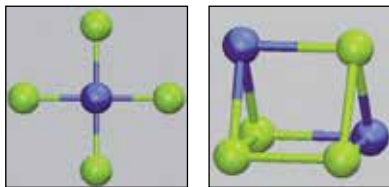
Magnetismus, Struktur und chemische Ordnung in kleinen FeRh-Legierungsclustern

Dr. J. Molkath, Prof. Dr. G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

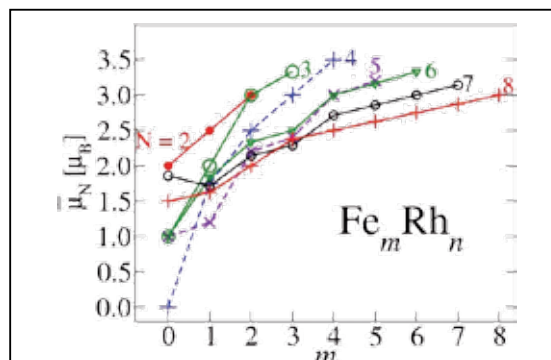
Legierungen spielen seit vielen Jahren eine wichtige Rolle in Wissenschaft und Industrie. Wissenschaftler der Universität Kassel erforschen die strukturellen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften kleiner Cluster aus Eisen und Rhodium. Den Zusammenhang zwischen Struktur, chemischer Ordnung und magnetischem Verhalten berechnen sie als Funktion der Größe und Zusammensetzung. Die Physiker wollen herausfinden, wie sich das Verhalten der winzigen Legierungscluster für technologische Zwecke nutzen lässt.

Alloying elements with complementary qualities has been a major route in material development since the antiquity. In this project we investigate the structural, electronic and magnetic properties of small Fe_mRh_n clusters having $N = m+n \leq 8$ atoms in the framework of a generalized-gradient approximation to density-functional theory. The correlation between structure, chemical order, and magnetic behavior is analyzed as a function of size and composition in view of tailoring their physical behavior for specific technological purposes. Examples of some of the considered geometries are given below.

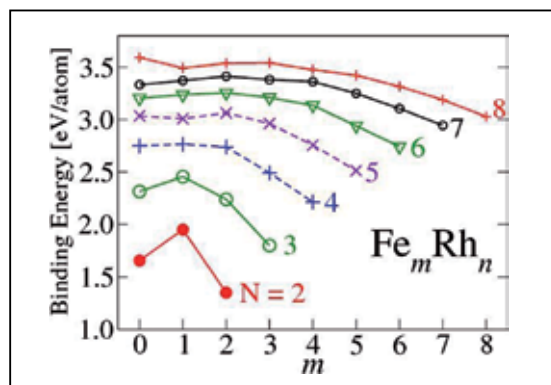


The 3d-3d and 3d-4d transition metal alloys are extremely interesting since they open the possibility of combining the high stability of 3d magnetism with the stronger spin-orbit interaction and resulting magnetic anisotropy energies of the heavier 4d or 5d elements. FeRh in particular shows a very rich phase diagram in the thermodynamic limit whose size dependence deserves special attention.

The calculations show that the bonding resulting from FeRh nearest neighbor pairs is stronger than RhRh or FeFe bonds. For the rich Fe concentration, when the number of weaker FeFe bonds dominates, one observes that binding energy decreases with

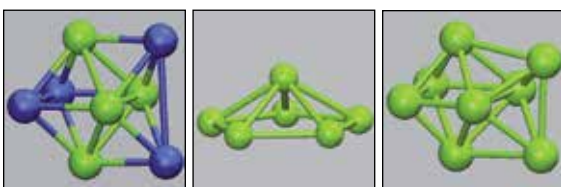


Average magnetic moment per atom as a function of number of Fe atoms (m)



Binding energy as a function of number of Fe atoms (m)

increasing m . The average magnetic moments increase monotonically, more or less linearly, with the number of Fe atoms. This is a consequence of the larger Fe local moments and the underlying ferromagnetic like magnetic order. Notice, in particular, the enhancement of the magnetic moments of the pure clusters in particular for Fe_N ($m=N$), which go well beyond $3\mu_B$, the value corresponding to a saturated d-band in the d^7s^1 configuration. In contrast, the moments of pure Rh_N are far from saturated except for $N = 2$ and 7.



Further details may be found in the reference below. First principles study of magnetism, structure and electronic properties in small Fe-Rh alloy clusters, Phys. Rev. B. (2012), in press. An extension of this work concerning the other materials and optimization methods is currently underway.

Nicht kollineare magnetische Ordnung in Nanostrukturen aus Übergangsmetallen

Dr. Pedro Ruiz Díaz, Prof. Dr. G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Speicherchips werden immer kleiner. Auf der Suche nach Material, das die Miniaturisierung ermöglicht, untersuchen Wissenschaftler die magnetischen Eigenschaften von Übergangsmetallen auf der Nanometerskala. Sie müssen verstehen, wie Magnetismus in kleinen Teilchen und niedrig-dimensionalen Systemen funktioniert, um winzige Speicher zu bauen. Forscher der Universität Kassel arbeiten an einer Theorie, die den Magnetismus in Übergangsmetall-Nanostrukturen beschreibt.

In past years, the magnetic properties of transition metals (TM's) at the nanoscale have been the subject of a remarkable research activity in both basic and applied materials science. Besides the fundamental interest of magnetism in small particles and low-dimensional systems, these investigations are motivated by various potential technological applications, such as high-density recording media, memory devices, or spin electronics.

As dimensionality and size are reduced, the constraints between the local moments are removed and could favor the development of low-symmetry complex magnetic structures. Moreover, the tendency to antiferromagnetic (AF) order and the presence of triangular loops in compact structures generates magnetic frustrations that may easily yield complex arrangements of the local magnetic moments. In this context, transition-metal nanostructures based on antiferromagnetic materials such as Cr and Mn, or atoms showing weak ferromagnetism, such as Fe and Rh, appear to be appealing.

In solids, noncollinear (NC) magnetic structures have long been identified experimentally and theoretically. In the case of nanostructures, for small sizes, recent methodological and technical developments have opened the way to investigate noncollinearity of magnetic nanostructures in the framework of density-functional theory (DFT) or within the single-band models.

However, in the case of large complex low-symmetry nanostructures (e.g., deposited or embedded nanoparticles, alloy clusters, extended surface nanostructures), the involved numerical effort it is often so important that it makes the calculations unfeasible. Therefore, it is important to develop alternative calculation methods and alternative electronic in order to complement the progress in this field.

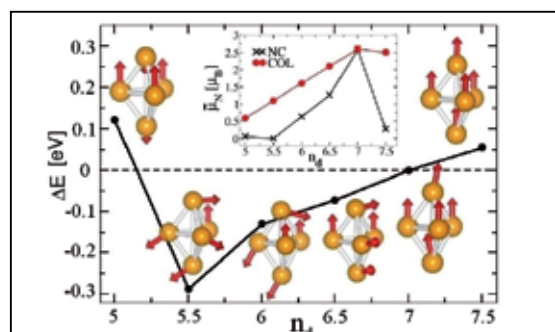
The purpose of this work is to develop, implement and apply a local electronic theory of noncollinear magnetism in transition-metal nanostructures. As a representative examples we consider clusters having $N < 13$ atoms with different geometries and d-band fillings. In particular, we aim to determine the onset of noncollinear magnetism as a function of the relevant exchange interaction parameter J/J_b (J_b refers to the bulk exchange integral). In this way, the local environmental dependence of several magnetic solutions is investigated [5].

In general, as expected, we have found a trend that indicates that noncollinear magnetism becomes stable for d-band filling values close to the half d-band filling value (Mn- and Cr-like systems).

Moreover, we also found that structural Jahn-Teller distortions can significantly affect the magnetic order. Remarkably, our results are in good agreement with previous results using other electronic-structure approaches.

As a example we show the relative energy of a 5-atom cluster for different magnetic configurations as a function of the d-band filling. The energy is referred to the collinear (ferromagnetic) solutions, meaning that noncollinear magnetic solutions are more stable for negative values ($\Delta E = E_{NC} - E_C$).

Figure 1: Band-filling dependence of the magnetic order in Fe_5 . The ground-state magnetic configurations are illustrated. The curve corresponds to the difference of electronic energies between the noncollinear (NC) and collinear. Magnetic configurations $\Delta E = E_{NC} - E_C$. The average magnetic moment μ_N as a function of n_d is shown in the inset.



Reference:

I. P. Ruiz-Díaz, R. Garibay-Alonso, J. Dorantes-Dávila and G.M. Pastor, Phys. Rev. B 84, 024431 (2011).

Magnetische Wechselwirkungen zwischen Co-Atomen und Clustern auf Pt-Oberflächen

Lucila Juarez-Reyes, Prof. Dr. G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Die Eigenschaften magnetischer Nanostrukturen hängen stark vom Wechselspiel zwischen Nano-Objekt und unterliegendem Material ab. So magnetisiert auf einem stark polarisierbaren, fast magnetischen Metall ein einzelnes magnetisches Atom die Atome in seiner Umgebung. Wissenschaftler der Universität Kassel untersuchen die magnetische Kopplung von Kobalt-Atomen auf einer Platin-Unterlage. Ihre Berechnungen zeigen unter anderem, dass sich die magnetische Wechselwirkung nicht einfach als Summe der Paar-Kopplungen ergibt.

The properties of magnetic nanostructures deposited at surfaces depends to a large extent on the electronic coupling between the nano-object and the substrate [1]. The substrate can influence the collective behavior of ensembles of deposited particles by mediating indirect exchange interactions between them [2,3]. At the surfaces of highly polarizable nearly magnetic metals, a single magnetic atom can cause the magnetic polarization of a large number of atoms in the neighborhood of the impurity [4]. This is the source of an additional magnetic coupling between impurities at short distances.

In this work we investigate the magnetic coupling of cobalt atoms deposited at the Pt(110) surface in the limit of high surface coverage and the effects of structural relaxation on these couplings. The calculations have been performed at the ITS of the University of Kassel by using the density functional theory approach implemented in the Vienna ab initio simulation package (VASP)[1]. Within this approach an infinite system is represented by consecutive periodic replicas of the original unit cell. The study of interactions between deposited particles requires large computational effort since the periodic cell needs to be large in order to allow different magnetic orientations avoiding interactions with further images. High surface coverages can be studied by different arrangement of the adsorbates in relatively smaller supercells within a restricted degree of disorder. We have considered four high coverage particle arrangements for which the coupling at low coverage is known. An example of the studied configurations is sketched in the figure.

Our calculations show that for all considered configurations the magnetic coupling favors the ferromagnetic alignment of the adsorbates. In particular the coupling is larger for pairs located in consecutive rows. The main reason for this is the large hybridization of Co with the Pt atoms in

the row between them. This hybridization causes a large magnetic polarization of these atoms when the impurities are ferromagnetically coupled. In contrast, the effect is suppressed for an antiferromagnetic configuration. Remarkably, the magnetic coupling is enhanced at least by a factor ten times larger than the result extrapolated from low concentrations. One concludes that this magnetic interaction cannot be represented as a simple sum of pair couplings. The main reason for this is the enhancement of magnetic polarization through the whole substrate, which depends non linearly on the number of atoms or clusters per surface unit (i.e surface coverage). Another interesting observation is that the magnetic coupling increases significantly as a result of the relaxation of the structure, since the bond distances between adatoms and substrate are strongly reduced. This bond contractions increase the hybridizations and further enlarge the magnetic polarization of the surface. As a result the magnetic coupling between the adsorbates increases. A detailed account of our investigations will be published elsewhere [2].

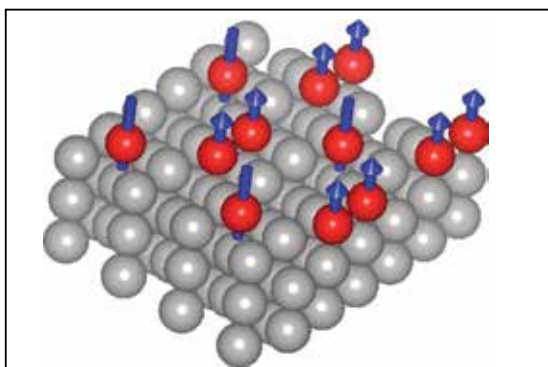


Abbildung 1:

Band-filling dependence of the magnetic order in Fe₅. The ground-state magnetic configurations are illustrated. The curve corresponds to the difference of electronic energies between the noncollinear (NC) and collinear. Magnetic configurations $\Delta E = E_{NC} - E_C$. The average magnetic moment μ_N as a function of n_d is shown in the inset.

References

1. <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp>. 2. L. Juarez and G.M. Pastor (unpublished).

Phase transitions in large clusters of transition metals

A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, and S. Schramm
Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)

Nanopartikel von Übergangsmetallen, wie Eisen, Kupfer oder Zink, beeinflussen die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen, ohne selbst in die Reaktion einzugehen. Sie dienen also als Katalysatoren. Wissenschaftler des Frankfurt Institute for Advanced Studies simulieren die thermodynamischen Eigenschaften dieser katalytischen Nanoteilchen am Computer. Sie wollen herausfinden, wie Nanoröhrchen darauf wachsen.

Nanoparticles of transition metals are utilized in various electronic and optical devices, serve as catalytic agents in chemical reactions. The aim of this project is to extend our knowledge on the phase transitions in the nanoparticles of the size of several nanometers. These transitions can be of the first order (melting) or the second order transitions associated with the change of the crystal symmetry. The finite size of the system adds an additional "degree of freedom" to the conventional thermodynamic equations - the number of particles in the cluster. We investigate thermodynamic properties of the clusters under the variation of temperature and cluster size. Better understanding of the properties of metallic clusters can provide additional insights into the understanding of

one of the most intriguing processes of modern nanotechnology - the process of nanotube growth on catalytic nanoparticles.

Using many-body Sutton-Chen, Gupta and Finnis-Sinclair potentials we perform the molecular dynamics simulations of the metallic clusters consisting of tens of thousands of atoms. We investigate the dependence of the phase transition properties of the cluster on their size. We investigate the evolution on the parameters of the phase transition (surface premelting, broad-width of the transition, latent heat) as the cluster size approaches the bulk limit. The calculations are performed on graphical processing units on the LOEWE-CSC cluster using a special version of the MBN Explorer software package.

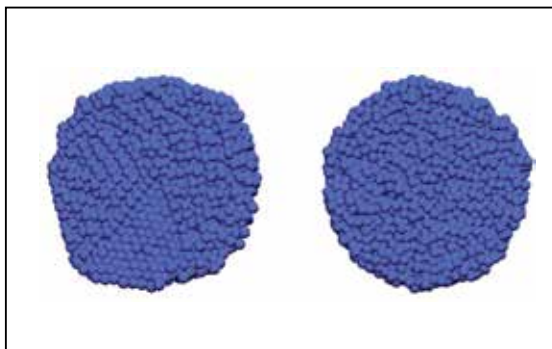


Figure 11:
Structure of Ni₈₂₇₁ cluster just below (left) and above (right) phase transition temperature $\sim 1100\text{K}$.

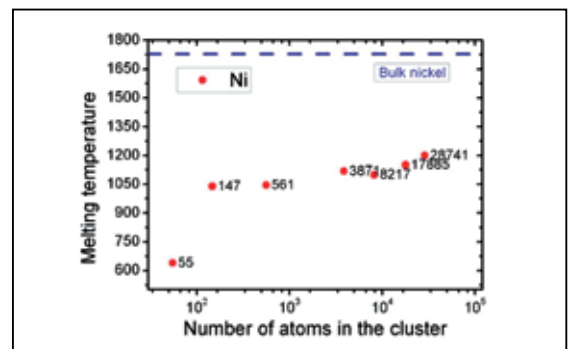


Figure 12:
Melting temperatures of large nickel clusters calculated using many-body Sutton-Chen potential.

Simulation der Laseranregung von BN-Nanotubes

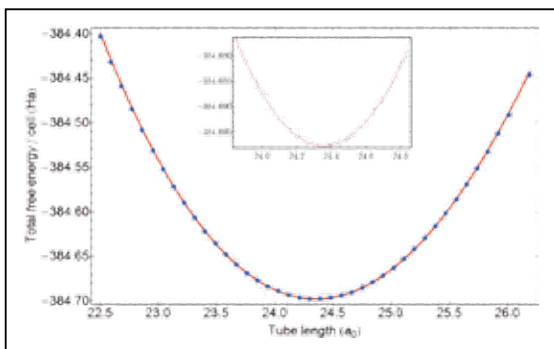
Prof. Dr. Martin Garcia,
Fachgebiet Festkörper und Ultrakurzzeitphysik, Universität Kassel

Im Rahmen seiner Diplomarbeit hat Bernd Bauerhenne Simulationen durchgeführt, um die strukturelle Antwort von BN-Nanoröhrchen auf ultrakurze, intensive Laseranregung zu untersuchen. Um die Anregung des (5,0) zigzag BN-Nanotubes mit einem ultrakurzen Laserpuls theoretisch basierend auf der Dichtefunktionaltheorie zu studieren, wurden einige Rechnungen auf dem Cluster durchgeführt. In allen Rechnungen wurde eine kubische Einheitszelle mit periodischen Randbedingungen und 60 Atomen betrachtet, die den (5,0) zigzag BN-Nanotube formten.

1. Bestimmung der optimalen Zellgröße

Zunächst muss die optimale Einheitszellengröße bestimmt werden. Dazu wird für verschiedene Größen der Einheitszelle (d.h. die Einheitszelle zusammen mit den enthaltenen Atomen wird in allen Raumrichtungen gleichermaßen auf die vorgegebene Größe skaliert) eine Relaxationsrechnung mit dem FIRE-Algorithmus durchgeführt, um für die jeweilige Größe die optimalen Atompositionen und die optimale freie Energie zu bestimmen. Aus den erhaltenen freien Energien wurde durch einen Fit mit der Murnaghan Gleichung die optimale Einheitszellengröße bestimmt. Hier wurden 42 Relaxationsrechnungen durchgeführt. Jede dieser Rechnungen verwendete vier Prozessoren und dauerte etwa 2000 Minuten.

Die nachfolgende Abbildung zeigt den Fit zusammen mit den berechneten freien Energien in Abhängigkeit von der Einheitszellenlänge bzw. Tubulänge:



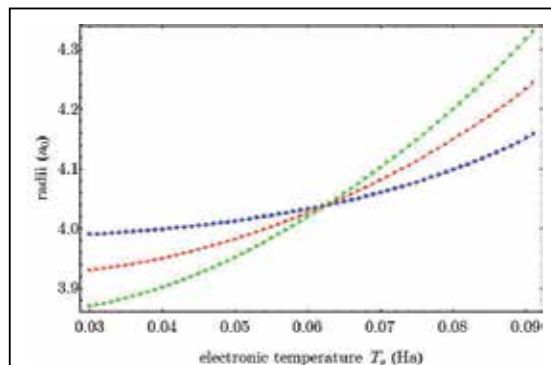
2. Optimale Strukturbestimmung in Abhängigkeit von der elektronischen Temperatur

Beginnend mit der Einheitszelle, deren Größe aus dem oben genannten Murnaghan-Fit entnommen wurde, wurden für verschiedene elektronische Temperaturen erneut mittels FIRE-Algorithmus die optimalen Atompositionen ermittelt. Hier wurden 61 Rechnungen mit jeweils 4 Prozessoren durchge-

führt. Eine Rechnung dauerte insgesamt etwa 2000 Minuten.

Aus den berechneten optimalen Atompositionen wurde der Durchschnitts B-, N- und Gesamtradius in Abhängigkeit von der elektronischen Temperatur ermittelt.

Die nachfolgende Abbildung zeigt das Resultat (grün: B-Radius, blau: N-Radius, rot: Gesamtradius):



3. Verifizierung des verwendeten Gitters

Um zu überprüfen, ob das verwendete Gitter für das Hartree-Potential in den durchgeführten Berechnungen fein genug gewählt worden ist, wurde für mehrere verschiedene feine Gitter bei einer konstanten elektronischen Temperatur von 1 mHa beginnend mit derselben Einheitszelle wie im vorherigen Abschnitt die optimalen Atompositionen mittels FIRE-Algorithmus berechnet. Hier wurden 24 verschiedene feine Gitter betrachtet. Jede Rechnung verwendete 4 Prozessoren und dauerte im Mittel 4500 Minuten.

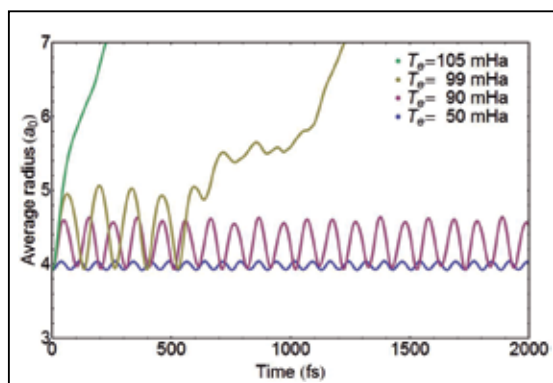
Die optimalen Atompositionen der verschiedenen Gitter wurden miteinander verglichen. Es zeigte sich, dass das gewählte Gitter in Ordnung ist.

4. MD-Simulationen der Laseranregung

Beginnend mit der optimal skalierten Einheitszelle und den zugehörigen optimalen Atompositionen wurde für verschieden starke Laseranregungen die Bewegungen der Atome berechnet. Dabei wird die Laseranregung durch Hochsetzen der elektronischen Temperatur modelliert. Hier wurden 20 Rechnungen durchgeführt. Jede Rechnung verwendete vier Prozessoren und dauerte etwa 6800 Minuten.

Aus den erhaltenen Atompositionen wurde das Verhalten des Durchschnittsradius des Nanotubes im Laufe der Zeit für alle berechneten elektronischen Temperaturen bestimmt.

Die nachfolgende Abbildung zeigt die Resultate für ausgewählte elektronische Temperaturen:



Der Nanotube zeigt eine periodische Gitterschwingung für nicht zu große Laseranregungen. Ab einer elektronischen Temperatur von 96 mHa wird der Nanotube zerstört.

5. Bestimmung der Gitterschwingungseigenmoden

Für verschiedene elektronische Temperaturen wurden die Phononen (=Gitterschwingungseigenmoden) bestimmt. Dazu muss für jede betrachtete elektro-

nische Temperatur die dynamische Matrix berechnet und diagonalisiert werden. Zur approximativen Berechnung der dynamischen Matrix muss folgendes getan werden: In einer DFT-Rechnung werden die Kräfte auf alle Atome berechnet, wenn ein Atom in einer der drei Raumrichtungen aus seiner Ruhelage ausgelenkt wurde. Dies muss für alle 60 Atome und alle drei Raumrichtungen in positive und negative Richtung durchgeführt werden. Damit werden für die Berechnung der dynamischen Matrix für eine gegebene elektronische Temperatur 360 Rechnungen nötig. Hier dauerte jede Rechnung unter Verwendung von zwei Prozessoren nur etwa zehn Minuten. Dies wurde für zehn verschiedene elektronische Temperaturen wiederholt.

Das Heranziehen der Atombewegungen aus den MD-Simulationen für eine bestimmte elektronische Temperatur, das Setzen des Schwerpunktes auf 0, das Subtrahieren der optimalen Atompositionen bei der gewählten elektronischen Temperatur und die Projektion der erhaltenen Atomdifferenzvektoren auf die Phononen bei dieser elektronischen Temperatur liefert, dass nur drei Moden durch den Laser angeregt werden: Der radiale breathing Mode, der radiale buckling Mode und der longitudinale bond stretching Mode.

Die Frequenzen dieser Moden nehmen bei stärkerer Laseranregung ab. Zurzeit wird versucht, ob man diese drei Moden durch den Einsatz mehrerer Laserpulse kontrollieren kann.

Referenzen:

1. Janicka J., and Sadiki. A., 2004, Proc. Combust. Institute, 30: 537-547.
2. Pitsch, H. (2006), Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion, Ann. Rev. Fluid Mech., (38) (2006), pp. 453–482.
3. van Oijen, J.A., de Goey, L.P.H., A numerical study of confined triple flames using a flamelet-generated manifold, Combust. Theory Modelling, 8(1), 141-163, (2004).

Phase transformations in fullerene-based nanowires

A.V. Solov'yov¹, B. Johnson², J. Geng³, and I.A. Solov'yov⁴

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² Cambridge, UK, ³ Bolton, UK, ⁴ UIUC, Urbana, USA

Leicht, stabil, leitfähig – diese Eigenschaften machen Kohlenstoff-Nanoröhrchen zu begehrten Bausteinen, etwa in der Elektronik oder im Bau von Sportgeräten. Das Problem der Nanodrähte: Sie wachsen auf Metallen wie Kupfer oder Eisen, sind dadurch mit Metallteilchen verunreinigt. Wissenschaftler haben nun einen Nanodraht aus C₆₀-Fullerenen gezüchtet. Die C₆₀-Fullerene, winzige Fußbälle aus Kohlenstoff, weisen ähnliche Strukturen und Eigenschaften auf wie die Kohlenstoff-Nanoröhrchen. Da der neue Nanodraht zudem frei von Metallen ist, könnte er für winzige Bio-Anwendungen attraktiver sein als die Kohlenstoff-Nanoröhrchen.

Two forms of carbon, fullerenes and carbon nanotubes, are closely related having structural commonality of the sp² frameworks. The nanotubes have been widely investigated for the last decade as one-dimensional nanomaterials, but fullerene 1D nanostructures presently only represent laboratory curiosities.

We showed the formation of a C₆₀-based nanowire polymer made by first growing the corresponding crystalline nanowire through a solution phase of C₆₀ followed by a topochemical polymerization in the solid state. This new material can be potentially important for nanotechnology because of its low dimensionality, high surface area, large length-to-width ratio, crystalline and molecularly cross-linked fullerene-based nanostructure. In comparison with carbon nanotubes, fullerene 1D nanopolymers could be even more attractive in electronic and photonic applications especially for bio-applications as the bio-compatible and totally free from any metal material. This clearly contrasts the carbon nanotubes, the growth of which is catalyzed by transition metal nanoparticles, and from which by no means all the metal can be removed by a post-purification process.

We demonstrated that the nanopolymer emerges in a course of a phase transition driven by forming and breaking covalent bond. Because the reactive monomers are preorganized in the crystalline unit cell at a distance commensurate with the repeat distance in the final polymer, the application of thermal or photochemical energies to the nanowires induces polymerization. The studied host (C₆₀) and guest (1,2,4-trimethylbenzene) nature of the polymerization allowed us to suggest a general host-guest route to the synthesis of new types of fullerene-based nanopolymers composed of different organic monomers and fullerenes. In order to understand the polymerization pathway we have employed gas chromatography, mass spectrometry and ¹³C nuclear magnetic resonance spectroscopy to investigate the nature of the bonds formed during the polymerization process. Theoretical analysis based on detailed calculations of the reaction energetics and structural analysis provided an in-depth understanding of the polymerization pathway.

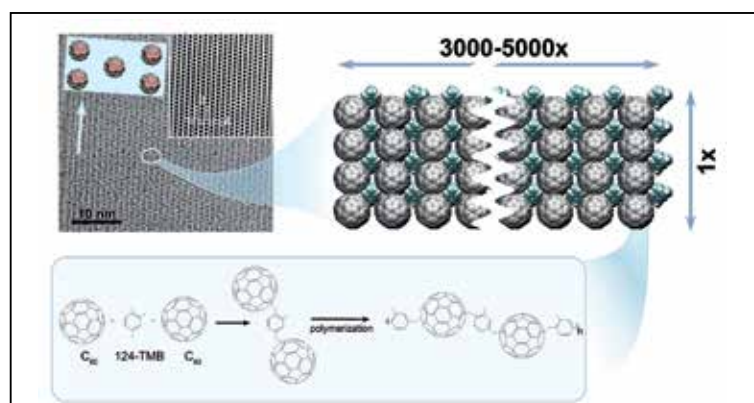


Figure 1:
Polymerization transformation in the C₆₀-based nanowire.

References:

1. J. Geng, I.A. Solov'yov, D.G. Reid, P. Skelton, A.E.H. Wheatley, A.V. Solov'yov, B.F.G. Johnson, Fullerene-based one-dimensional crystalline nanopolymer formed through topochemical transformation of the parent nanowire, *Phys. Rev. B* 81, 214114 (2010).

Photo-induced processes in nanostructures:

Photo-processes in clusters

A.V. Solov'yov¹, V.K. Ivanov², J.-P. Connerade³, and A. Müller⁴

¹ Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), ² St. Petersburg State Polytech. Univ., Russia, ³ Imperial College, UK

⁴ Justig-Liebig-Universität Giessen, Germany

Ein Team aus internationalen Forschern untersucht die Abstrahlung von Photoelektronen in Natrium-Clustern. Ihre Simulationen zeigen die dominante Rolle der Vielteilcheneffekte bei der Abstrahlung der Photoelektronen.

A consistent many-body theory based on the jellium model is applied for the description of angular resolved photoelectron spectra of metal clusters anions [1,2]. The results of calculations demonstrate the dominant role of the many-body effects in the formation of angular distributions of photoelectrons emitted from sodium clusters and are in a good

agreement with recent experimental data of von Issendorff et al. (Science 323, 1323 (2009)). The comparison of theory and experiment has been performed for the photoionization of Na_7^- and Na_{19}^- .

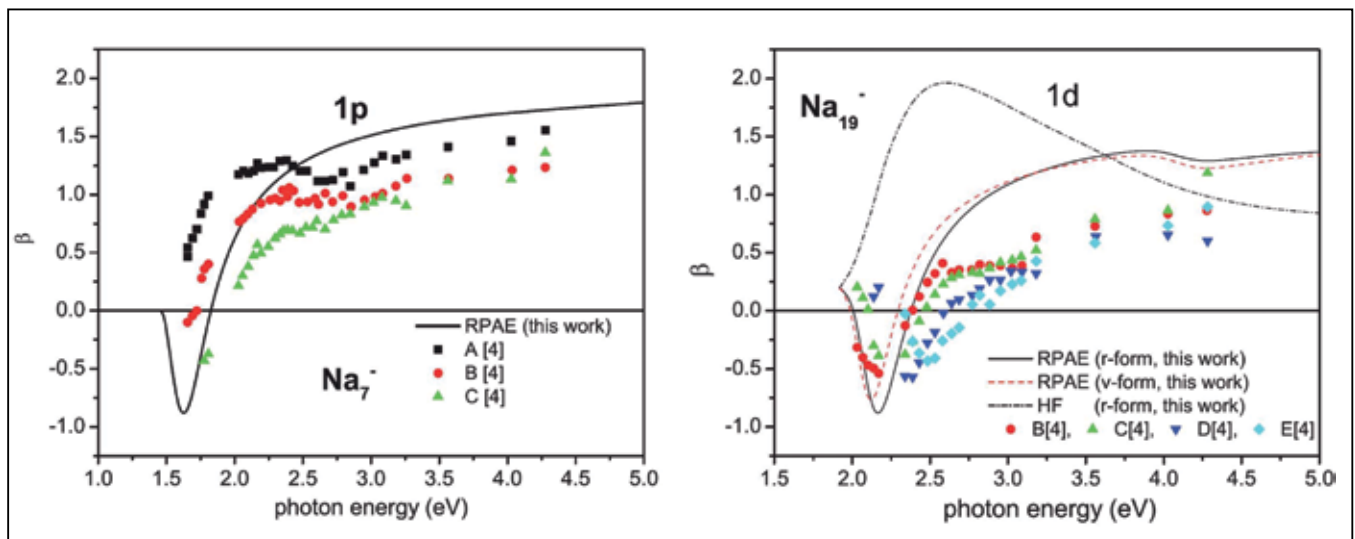


Figure 1:

Angular anisotropy parameter for the partial PI cross section of Na_7^- and Na_{19}^- clusters versus photon energy. Experimental data from von Issendorff et al. (2009, 2010).

References:

1. R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Solov'yov, Many-body theory for angular resolved photoelectron spectra of metal clusters, Phys. Rev. A 81 021202 (2010).
2. R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, Theoretical study of the angular distribution of photoelectrons in photoionization of metallic clusters, Science and Technology Bulletin of Saint Petersburg State Polytechnic University, issue No 1044, pp. 75-80 (2010) (in Russian).

Orbital-dependent exchange-correlation energy functionals

Johannes Hofmann, Robert Manteufel, Eberhard Engel
Center for Scientific Computing, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dichtefunktionaltheorie hat sich über die vergangenen 20 Jahre zur Standardmethode für die ab-initio Beschreibung von Molekülen und Festkörpern entwickelt. Diese Entwicklung beruht wesentlich auf der Einführung der sogenannten Generalized Gradient Approximation zur Beschreibung des effektiven Austausch-Korrelationspotentials. Diese Näherung versagt jedoch bei einer ganzen Reihe von Materialien. Wissenschaftler der Universität Frankfurt untersuchen daher alternative Ansätze.

The success of density functional theory is based on the quality of the present standard approximation for the exchange-correlation (xc) energy functional, the generalized gradient approximation (GGA). However, just as the older local density approximation (LDA), the GGA fails for important classes of materials, as for instance highly correlated solids. A systematic improvement over the GGA is offered by xc-functionals which depend on the Kohn-Sham (KS) orbitals, rather than just on the density. In this formalism, the exchange energy can be treated exactly (EXX), which solves the long-standing self-interaction problem in the LDA and GGA. As a consequence, one e.g. obtains a Rydberg series of unoccupied states for neutral atoms, implying the existence of negative atomic ions. Applications to solids point at an improved description of the band gaps of semiconductors.

In the present project several aspects of the EXX approach to solids have been investigated:

1. The general perception of improvement by the EXX approach had been questioned by the first full-potential linearized-augmented-plane-wave (LAPW) calculations with the EXX [1]. In many cases the LAPW band gaps turned out to differ substantially from the EXX values published earlier, which were mostly based on pseudopotential (PP) calculations. The discrepancy between PP and LAPW data was attributed to the missing core-valence interaction in the PP approach. In a previous part of this project [2] it had been shown by plane-wave-based all-electron calculations that the neglect of the core-valence interaction in PP-EXX calculations does not affect the valence and conduction bands of diamond and lithium in any relevant way. In the the present period this study was extended to the semiconductors Ge, GaAs, ZnS and CdS [3]. Increasing the valence spaces in the corresponding PP-EXX calculations beyond the

corresponding standards essentially confirmed the older EXX-results, thus questioning the conclusion of [1]. However, at the same time it was found that for solids with semi-core states accurate PP-EXX results can only be obtained by inclusion of the semi-core states in the valence space. This is illustrated in the following Table where the convergence of the band gap E_g at the Γ -point of Ge with the size of the valence space is listed (also given is the plane-wave cut-off energy as a measure of the computational demand).

Valence space	4s4p	3d4s4p (standard)	3s3p3d4s4p
Cut-off energy (Ry)	60	160	360
$E_g(\Gamma)$ (eV)	2.12	1.66	1.90

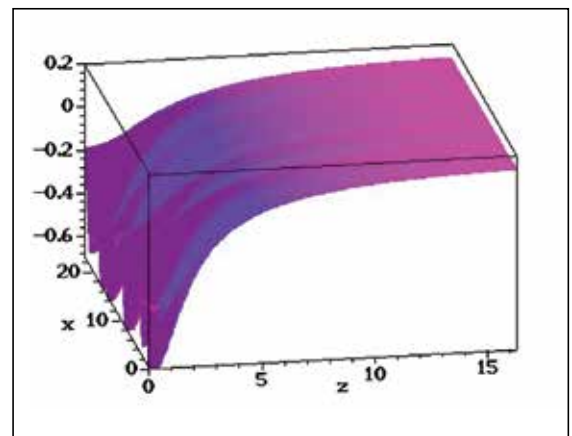
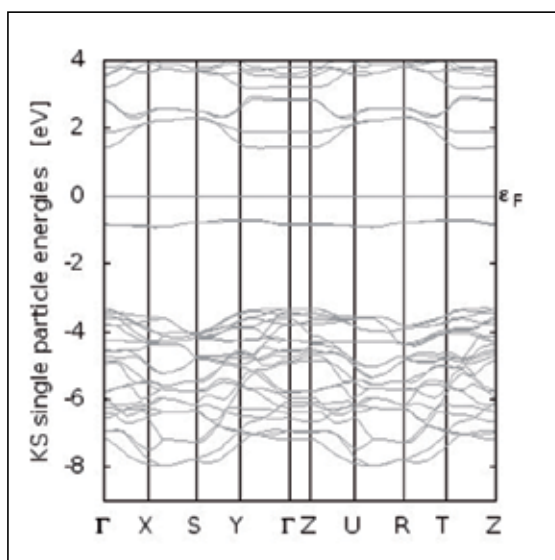
2. In another part of this project it had already been demonstrated [4] that the EXX approach yields insulating ground states for some prototype transition metal oxides, for which the conventional density functionals incorrectly predict metallic ground states. This study has been continued during the last two years by application of the EXX approach to TiOCl, the high-Tc parent compound CaCuO₂ and ZnO [5-7]. In all three cases LDA and GGA fail to produce a band gap, while the EXX corrects this deficiency. As an example, Fig.1 shows the band structure of TiOCl. The observed gap of 2.1 eV is in good agreement with the experimental result of 2 eV. In addition, it has been shown that the Krieger-Li-Iafrate approximation, which is frequently used to speed up EXX calculations, fails for the transition metal oxides [8].

3. More recently, the project has been extended to surfaces of solids. Prototype EXX calculations for Graphene (in the supercell

approach) show the characteristic $-1/z$ -dependence of the total potential in the direction perpendicular to the surface (i.e. the Graphene sheet), in contrast to LDA and GGA calculations. This result is a consequence of the correct $-1/z$ -dependence of the exact exchange potential (plotted in Fig. 2 – all axes in a.u.). The EXX thus promises to provide ab-initio potentials for the description of electron scattering at surfaces.

EXX calculations for solids with large valence spaces or large unit cells are still extremely challenging, due to the high computational demands resulting

from the solution of the integral equation which determines the EXX potential (as is obvious from the discrepancies between [1] and [2,3]). This is true in particular for full-potential calculations without any approximation for the Green's function, which determines the response of the system (the response enters into the integral equation). EXX calculations for solids therefore require substantial computing resources, which, for the present project, have been provided by the HPC clusters of the CSC at Goethe University Frankfurt.



References:

1. S. Sharma, J.K. Dewhurst, and C. Ambrosch-Draxl, Phys. Rev. Lett. 95, 136402 (2005).
2. E. Engel, Phys. Rev. B 80, 161205(R) (2009).
3. E. Engel, to be published (2012).
4. E. Engel and R.N. Schmid, Phys. Rev. Lett. 103, 036404 (2009).
5. R. Manteufel, Master thesis, Goethe-University Frankfurt (2010).
6. J. Hofmann, Bachelor thesis, Goethe-University Frankfurt (2011).
7. J. Hofmann, R.Manteufel, E. Engel, to be published (2012).
8. E. Engel and R. M. Dreizler; Density Functional Theory: An Advanced Course (Springer, Berlin, 2011).

Ultrakalte Atome in optischen Gittern

Walter Hofstetter, Liang He, Bernd Schmidt, Daniel Cocks, Andrii Sotnikov, Ulf Bissbort, Yonqiang Li, Julia Wernsdorfer, Michael Buchhold, Eva Katharina Rafeld, Jan Pohlmann
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

In unserer Arbeitsgruppe wird an verschiedenen Themen aus dem Bereich der theoretischen Physik der kondensierten Materie geforscht. Der Schwerpunkt unsere Forschung liegt auf ultrakalten Gasen in optischen Gittern. Insbesondere studieren wir mehrkomponentige bosonische und fermionische Gase, Bose-Fermi-Mischungen, ungeordnete Systeme, dipolare Gase, Quantenpunkte und topologische Isolatoren.

In einer **zweikomponentigen Bose-Bose-Mischung** haben wir den auf Entmagnetisierung beruhenden Kühlungseffekt untersucht und entdeckt, dass es möglich ist, analog zum Pomeranchuk-Effekt in ^3He , das System durch Erhitzen von der suprafluiden Phase in den Mott-Isolator zu überführen [2]. Um das Phasendiagramm auch bei endlichen Temperaturen berechnen zu können, benutzen wir eine Weiterentwicklung des Gutzwiller-Ansatzes, die bosonische dynamische Molekularfeldtheorie [6, 8].

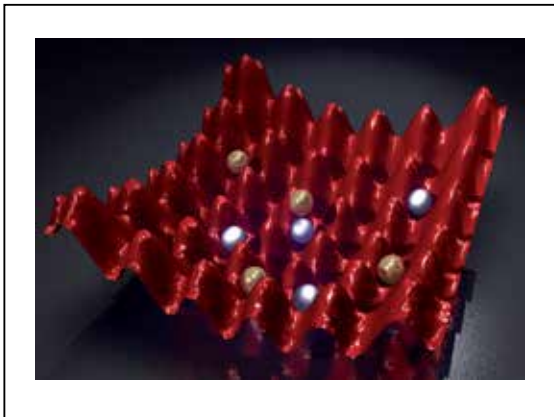


Abbildung 1:
Optisches Gitter mit ultrakalten Atomen

Des Weiteren haben wir den Einfluss von **Unordnung** auf ultrakalte Atome in optischen Gittern untersucht [3, 9, 18, 22, 23, 26, 28]. Wir haben unter anderem das vollständige paramagnetische Grundzustandsphasendiagramm mit Hilfe der statistischen dynamischen Molekularfeldtheorie berechnet. Dabei zeigt sich, dass es einen direkten Phasenübergang vom normalen Mott-Isolator, der durch Korrelationen erzeugt wird, zum Anderson-Mott-Isolator gibt, der durch Unordnung induziert wird.

In Systemen **zweikomponentiger Fermionen** interessieren wir uns für Effekte von Entropie und Suprafluidität, sowohl im spinausgeglichene Fall als auch bei endlicher Magnetisierung [16], unterschiedlichen Tunnelraten der Komponenten und

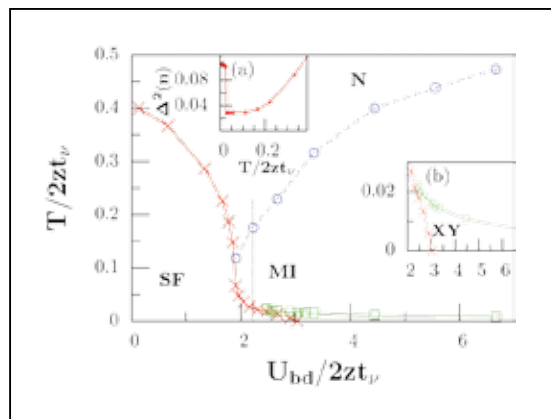


Abbildung 2:
Phasendiagramm für endliche Temperaturen eines zweikomponentigen bosonischen Gases in einem kubischen Gitter bei halber Füllung für jede Komponente [2].

in der Gegenwart inhomogener Fallenpotentiale [21]. Für die numerische Simulation verwenden wir hier unter anderem sogenannte Continuous-Time-Quantum-Monte-Carlo-Algorithmen in Kombination mit dynamischer Molekularfeldtheorie.

Neben den zweikomponentigen Systemen haben wir auch **3-Spezies-Fermionen** im Gitter untersucht [11,15]. Eine zentrale Frage war hierbei, wie sich 3-Teilchen-Verluste auf die Stabilität der Phasen auswirken. Wir konnten zeigen, dass die 3-Teilchen-Verluste die sogenannte Farbsuprafluidität stabilisieren. Hierbei tritt ein 3-komponentiger suprafluider Ordnungsparameter auf. Wenn keine 3-Teilchen-Verluste vorliegen, wird jedoch ein trionischer Zustand bevorzugt. Für die numerische Simulation haben wir neben der dynamischen Molekularfeldtheorie hier auch variationelle Monte-Carlo-Techniken eingesetzt.

Ein weiterer exotischer Zustand der Materie, der ebenfalls in optischen Gittern realisiert werden kann, ist das **Suprasolid**. Ein solches konnten wir durch Berechnungen für dipolare und damit langreichweitig wechselwirkende Fermionen nachweisen

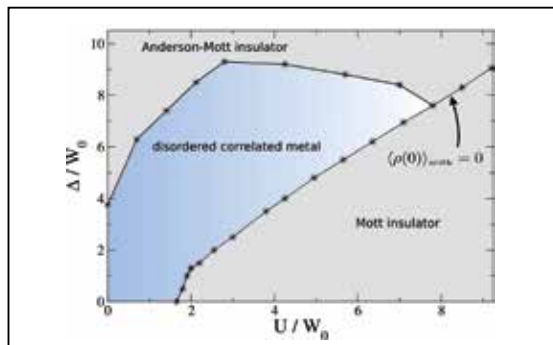


Abbildung 3:
Paramagnetisches Grundzustands-Phasendiagramm des halb gefüllten Anderson-Hubbard-Modells mit statistischer dynamischer Molekularfeldtheorie berechnet [9].

[12]. Wir haben das Schmelzen des Suprasolids bei Erhöhung der Temperatur studiert und das Phasendiagramm bei endlicher Temperatur und fester Füllung berechnet, um die Parameter zu bestimmen, für die man möglicherweise ein Suprasolid im Experiment beobachten kann. Zur Berechnung haben wir eine Verallgemeinerung der dynamischen Molekularfeldtheorie benutzt, welche eine ortsabhängige Selbstenergie zulässt [21].

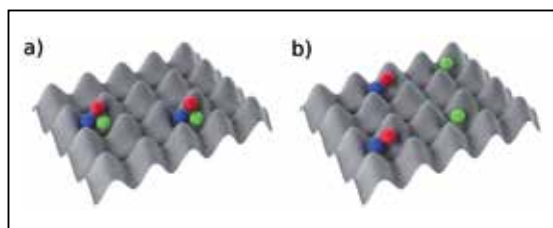


Abbildung 4:
Skizze der Phasen (a) ohne und (b) mit 3-Teilchen-Verlusten [11].

Für eine **Bose-Fermi-Mischung** konnten wir mit unseren numerischen Rechnungen experimentelle Ergebnisse bestätigen und erklären. Dazu haben wir eine Erweiterung der dynamischen Molekularfeldtheorie auf Bose-Fermi-Mischungen verwendet [24]. So konnten wir das im Experiment beobachtete Maximum im kondensierten Anteil bei verschwindender Bose-Fermi-Wechselwirkung erklären [14].

Ein weiteres Gebiet unserer Forschung sind **topologische Isolatoren**. Obwohl nicht leitend in ihrem Inneren, weisen topologische Isolatoren stromtragende Zustände auf ihrem Rand auf, die immun gegen Störstellen sind. Uns interessiert hier, wie sich Wechselwirkungen auf die Randzustände auswirken und wie die Zustände aussehen, wenn anstatt harten Rändern weiche Randpotentiale vorhanden sind.

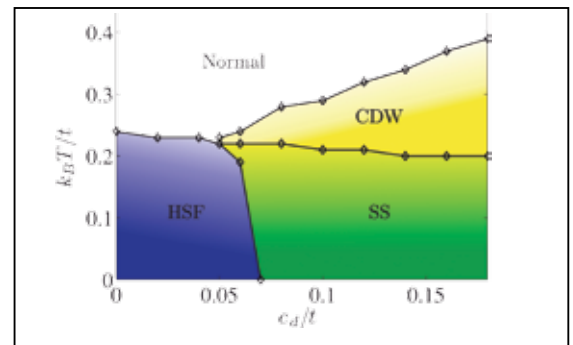


Abbildung 5:
Phasendiagramm dipolarer Fermionen. Zur Erklärung siehe [12].

Projektrelevante Publikationen

1. K. Byczuk, J. Kunes, W. Hofstetter, D. Vollhardt, arXiv:1110.32.
2. Y. Li et al., arXiv:1109.0568, accepted for publication in Phys. Rev. A.
3. J. Wernsdorfer, G. Harder, U. Schollwöck, W. Hofstetter, arXiv:1108.6057.
4. U. Bissbort, F. Deuretzbacher, W. Hofstetter, arXiv:1108.6047.
5. B. Kubala et al., arXiv:1108.6047.
6. M. Snoek, W. Hofstetter, arXiv:1007.5223.
7. F. May, M. R. Wegewijs, W. Hofstetter, Beilstein J., Nanotechnol. 2011, 2, 693-698.
8. Y. Li, M. R. Bakhtiari, L. He, W. Hofstetter, Phys. Rev. B 84, 144411 (2011).
9. D. Semmler, K. Byczuk, W. Hofstetter, Phys. Rev. B 84, 115113 (2011).
10. M. Buchhold, U. Bissbort, S. Will, W. Hofstetter, Phys. Rev. A 84, 023631 (2011).
11. A. Privitera et al., Phys. Rev. A 84, 021601(R) (2011).
12. L. He, W. Hofstetter, Phys. Rev. A 83, 053629 (2011).
13. U. Bissbort et al., Phys. Rev. Lett. 106, 205303 (2011).
14. M. Snoek, I. Titvinidze, I. Bloch, W. Hofstetter, Phys. Rev. Lett. 106, 155301 (2011).
15. Titvinidze et al., New J. Phys., 13 035013 (2011).
16. M. Snoek, I. Titvinidze, W. Hofstetter, Phys. Rev. B 83, 054419 (2011).
17. Privitera, W. Hofstetter, Phys. Rev. A 82, 063614 (2010).
18. D. Semmler et al., Phys. Rev. B 82, 235115 (2010).
19. P. P. Orth et al., Phys. Rev. B 82, 144423 (2010).
20. A. S. Zyazin et al., Nano Lett. 2010, 10, 3307-3311.
21. E. Gorelik et al., Phys. Rev. Lett. 105, 065301 (2010).
22. K. Byczuk, W. Hofstetter, D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B 24, 1727 (2010).
23. U. Bissbort, R. Thomale, W. Hofstetter, Phys. Rev. A 81, 063643 (2010).
24. I. Titvinidze, M. Snoek, W. Hofstetter, New J. Phys. 12 (2010) 065030.
25. A. Isidori, et al., Phys. Rev. B 81, 235120 (2010).
26. K. Byczuk et al., Eur. Phys. J. Special Topics 180, 135 (2010).
27. J. Wernsdorfer, M. Snoek, W. Hofstetter, Phys. Rev. A 81, 043620 (2010).
28. D. Semmler, K. Byczuk, W. Hofstetter, Phys. Rev. B 81, 115111 (2010).

Stirred, not shaken:

How to make an ultracold atomic cocktail with vortices

Harmen J. Warringa

Frankfurt Institute of Advanced Studies (FIAS), Frankfurt am Main, Germany & Institute for Theoretical Physics,
Goethe-Universität Frankfurt am Main

A two-component atomic Fermi gas forms a superfluid at a temperature that is of order nano-Kelvin. By computing its phase diagram scientists at the Frankfurt Institute of Advanced Studies have obtained the detailed conditions under which vortices are formed in such a gas.

In the last two decades a considerable experimental and theoretical effort has been made to investigate the behavior of ultracold atomic gases. These ultracold gases are very attractive systems to study for several reasons. First of all, at very low temperatures fundamental quantummechanical effects become very pronounced, leading to novel physical behavior. Moreover, experiments on these gases are very versatile, customizable, and controllable. Finally, accurate predictions for the behavior of these gases can be made using quantum field theory. Together it allows one to use these gases to investigate fundamental quantummechanical effects under different circumstances systematically and in great detail.

Motivated by recent experiments [1, 2], we have investigated a particular atomic gas consisting of fermionic atoms [3, 4]. The gas is a so-called two-component Fermi gas, in which each of the components is composed of atoms trapped in a particular hyperfine state. As has been observed in experiment, such a gas can form a superfluid when it is cooled to nano-Kelvin temperatures. A superfluid is a very interesting state of matter, since it is a fluid that can flow with hardly any friction. It therefore displays behavior that is very different from ordinary fluids.

In experiment the atoms are trapped in an optical potential to keep them together. In our calculations we have considered a cylindrical symmetric optical potential that has infinite extension in the longitudinal direction and results in harmonic confinement in the transverse direction. We allow this trap to rotate around its longitudinal axis with a certain angular frequency. At very low temperatures one then obtains a superfluid in a rotating container.

If a normal fluid is put in a rotating container, it will rotate like a rigid body at the same rotation

frequency as the container. A superfluid in a rotating container behaves completely different. For very small rotation frequencies it will stay completely at rest. Then above a certain rotation frequency, a vortex will appear at the center of the superfluid. A vortex is a point in the superfluid in which the superfluid becomes a normal fluid. Furthermore, there is a flow of atoms around the vortex that is quantized. For larger rotation frequencies more vortices can be formed, they will form a vortex lattice.

It turns out that the density of atoms is somewhat lower at the center of a vortex than away from it. By making absorption image of the cloud of atoms, one can therefore locate the vortices. In this way vortices have been observed in the two-component Fermi gas [1, 2].

In experiment one can study the two-component Fermi gas in a large parameter space. One can vary the strength of the interactions between the two components, the number of atoms in each of the two components, the rotation frequency of the trap, and the temperature. For the first time ever, we have computed the region in this parameter space in which one or more vortices are formed [4]. We have summarized our results in several phase diagrams.

As an example of our results we show in Fig. 1 the zero temperature phase diagram in the plane of rotation frequency and scattering length for a particular number of atoms per unit of length. The scattering length is a measure for the strength of the interactions, larger negative scattering lengths mean stronger interactions. In this diagram it can be seen when the system of atoms exhibits superfluidity without vortices (dark gray area) and when superfluidity with one or more vortices is formed (light gray area). In the white area the whole system is predicted to be a normal gas. Below the

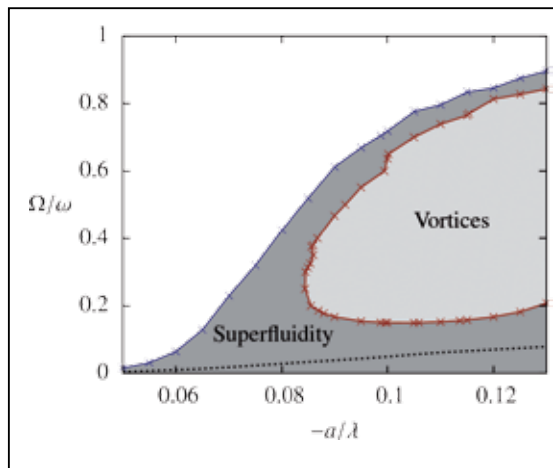


Figure 1:
Phase diagram of the rotating two-component Fermi gas in the plane of rotation frequency Ω and scattering length a , at zero temperature, equal number of atoms in each component, and in total 1000 atoms per unit harmonic oscillator length λ in the longitudinal direction.

dotted line the whole system forms a superfluid, but above it, the system contains a superfluid core with a normal gas near the edges.

To obtain our results we had to solve a functional equation, the so-called Bogoliubov-de Gennes (BdG) equation self-consistently for many different values of the external parameters. Our unknowns were several one-dimensional functions that depended on

radius: the order parameter for superfluidity, and the number density of each of the two components. To solve the BdG equation we have written a program in MATLAB. Typically finding one solution took about one day using four nodes on the FUCHS cluster. In order to compute a phase diagram, like the one in Fig. 1, we needed to obtain about 1000 solutions of the BdG equation. Hence such a calculation would have been absolutely impossible without a good computing cluster.

So far vortices have been observed in the two-component Fermi gas, but the complete phase diagram has not been measured yet. Our predictions can directly be compared to a future experimental determination of the phase diagram.

In the future we plan to extend our analysis to different fermionic atomic gases. For example to gases in which the components have unequal mass, gases that have more than two components and gases which exhibit different kind of interactions. One expects these gases to become superfluid at low enough temperatures, but this has not been observed so far. Since vortices are the hallmark of superfluidity, their observation is key to establish superfluidity. Calculations that predict the conditions under which these vortices are formed are thus very useful for the search for superfluidity in these other fermionic gases.

References:

1. M.W. Zwierlein et al., Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas, *Nature* 435, 1047 (2005).
2. M.W. Zwierlein et al., Fermionic Superfluidity with Imbalanced Spin Populations, *Science* 311, 492 (2006)
3. H. J. Warringa and A. Sedrakian, Vortex formation in a rotating two-component Fermi gas, *Phys. Rev. A* 84, 023609 (2011).
4. H.J. Warringa, Phase diagram of the rotating two-component Fermi gas including vortices, arXiv:1201.2856 (2012).

Phasen in Sternmaterie

Arbeitsgruppe: Nikolaus Löbl, Joachim Maruhn, Michael Morlang, Bastian Schütrumpf
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Wissenschaftler der Universität Frankfurt untersuchen Kernmaterie mit hohen Dichten, wie sie in der inneren Kruste von Neutronensternen sowie kurz nach Beginn des Kollapses einer Supernova vorkommt. Bei diesen hohen Dichten (nahe der Sättigungsdichte von Kernen) ist die Kernmaterie nicht mehr nahezu kugelförmig, wie bei Kernen im Atomverbund. Sie nimmt stattdessen zylindrische (Spaghetti) plattenförmige (Lasagne) oder noch außergewöhnlichere Formen an. Man nennt diese Form der Kernmaterie „Pasta“-Phasen.

Für die Untersuchung dieser Materie benutzen wir die Time-Dependent-Hartree-Fock Näherung. Der Vorteil gegenüber anderen Methoden ist, dass diese TDHF gute Ergebnisse für "normale" Kernmaterie zeigt, wobei hier schon viele quantenmechanische Eigenschaften in der Theorie enthalten sind. Z.B. enthält TDHF im Gegensatz zur Molekuldynamik bereits das Pauliprinzip, das hier korrekt berechnet wird. Auch die benutzte Skyrme-Kraft Sly6 zur Beschreibung der Wechselwirkung ist speziell für neutronenreiche Materie wie in Neutronensternen konzipiert. Desweiteren kann man mit TDHF die Zeitentwicklung der Systeme betrachten.

Erste Untersuchungen zur Beschreibung der "Pasta"-Phasen von Kernmaterie wurden durchgeführt. Dazu wurde eine Anzahl von Alpha-Teilchen mit thermischer Geschwindigkeitsverteilung in einen Kubus mit periodischen Randbedingungen gesetzt und mit einem Neutronenhintergrund ergänzt. Die Zeitentwicklung führte dann innerhalb von einigen tausend fm/c zu einem gut definierten thermischen Gleichgewicht. So wurde mit Hilfe des CSC-Clusters ein Phasendiagramm der Materie erstellt (s. Abbildung). Man sieht hier, dass die Materie nicht auf wenige Formen beschränkt ist, sondern eine Vielzahl exotischer Konfigurationen auftreten, die mit Minkowskifunktionalen eindeutig zugeordnet werden können.

Diese Rechnungen sind natürlich recht aufwendig und man wird kaum mehr als 100 Alpha-Teilchen simulieren können; trotzdem bieten sie eine Möglichkeit, Fragestellungen zu beantworten, die mit statischen Methoden nicht zugänglich sind. Bereits eine der im Phasendiagramm durchgeführten Rechnungen dauert ca. 1-4 Tage. Da für alle gezeigten Punkte im Diagramm eine bzw. zukünftig mehrere Rechnungen

zur besseren Statistik durchgeführt werden müssen, ist dies ohne ein Großrechner nicht zu schaffen.

Zukünftig müssen noch weitere Fragen beantwortet werden: Welche Rolle spielen dynamische Fluktuationen? Gibt es an der Nähe der Phasengrenzen ein Fluktuieren zwischen den verschiedenen Konfigurationen? Wie ist die Stabilität der "Pasta"-Strukturen? Welche Schwingungen können sie ausführen ohne zu zerreißen? Dies öffnet das neue Gebiet der Schalenstruktur und der kollektiven Moden solcher Strukturen. Welche Rolle spielt der Neutronenhintergrund? Denkbar wäre auch eine Untersuchung von Reaktionen schwerer Kerne in einem solchen Neutronenhintergrund.

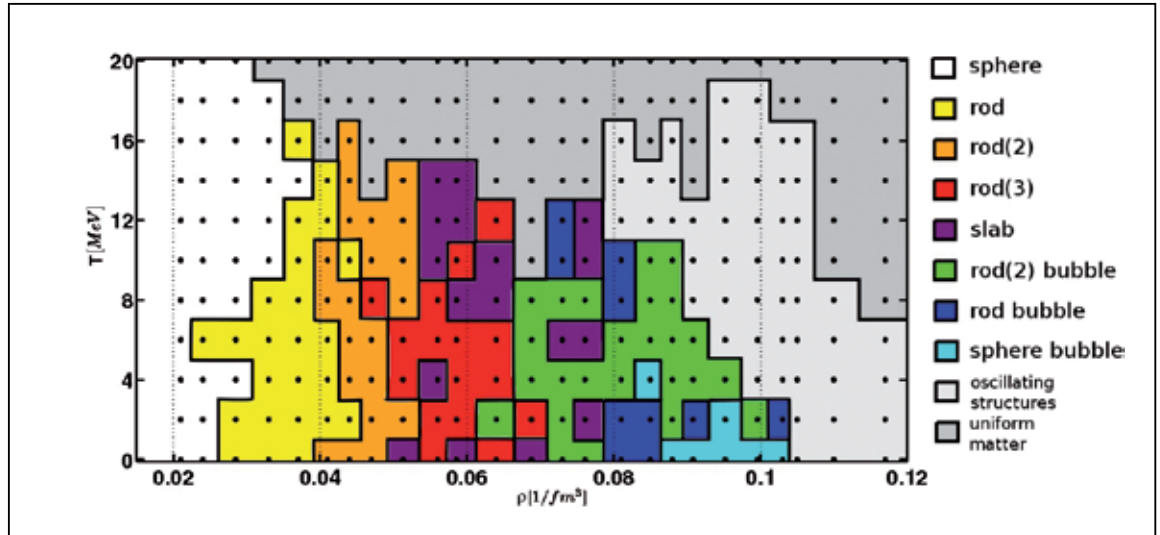


Abbildung 1: "Spaghetti"-Struktur

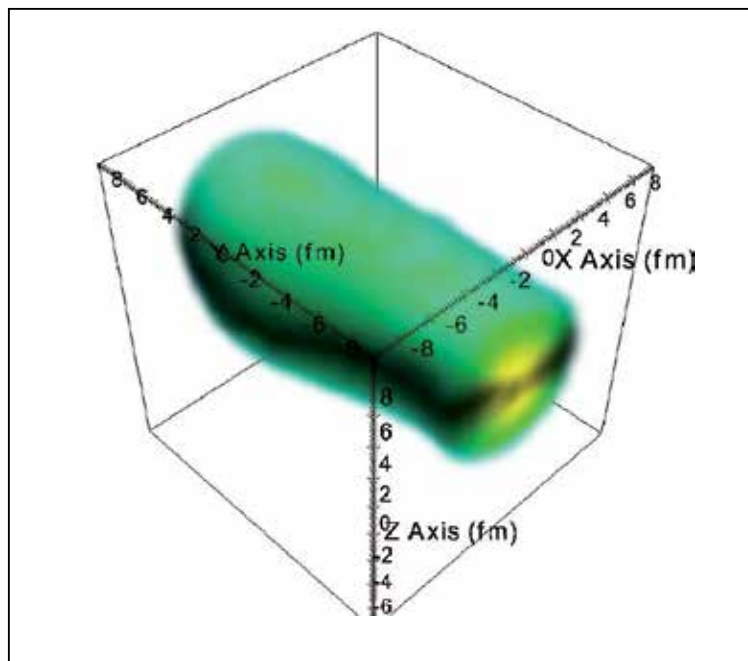


Abbildung 2: Phasendiagramm der Kernmaterie

Frühe Evolution des quark-gluonischen Plasmas in kinetischer Transporttheorie und dissipativer Hydrodynamik

Andrej El, Ioannis Bouras, Carsten Greiner
Goethe-Universität Frankfurt am Main

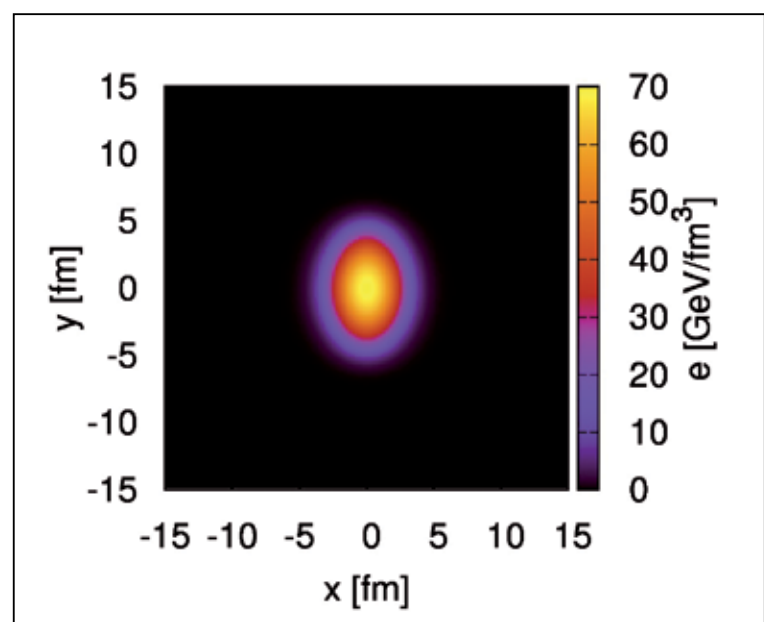
Für die Erforschung der Dynamik der Kernmaterie in hochenergetischen Schwerionenkollisionen sind dissipative Hydrodynamik und kinetische Transporttheorie die meistbenutzten theoretischen Werkzeuge. Beide Ansätze haben ihre Schwächen in der Modellierung von Teilaspekten. Forscher der Universität Frankfurt verknüpfen daher beide Ansätze, um bessere Ergebnisse zu erhalten.

Dissipative Hydrodynamik und kinetische Transporttheorie werden verwendet um die frühe Phase unmittelbar nach einer Schwerionenkollision zu untersuchen. Diese Phase, in welcher Quarks und Gluonen, die elementaren Konstituenten von Nukleonen, in einem ungebundenen Zustand existieren, ist ein Zustand extremer Dichten, Temperaturen sowie deren Gradienten.

Die anfänglichen starken Gradienten führen in hydrodynamischen Rechnungen, insbesondere bereits bei moderaten Viskositäten $\eta/s \sim 0.2$, zu nicht vertrauenswürdigen Resultaten, denn starke Gradienten bedeuten oft formellen Zusammenbruch hydrodynamischer Theorie und führen zu Instabilitäten in der numerischen Implementierung. Um die Verwendung hydrodynamischer Formalismen überhaupt zu ermöglichen werden für die verwendeten Anfangszustände starke Einschränkungen gesetzt. Um eine stabile Lösung zu erhalten werden die anfänglichen lokalen Gradienten ausgeschmiert und ein lokales Gleichgewicht vorausgesetzt. Für die Initialisierung der Geschwindigkeitsprofile existiert kein fundierter Ansatz, was in den meisten Fällen in der Wahl der trivialen Lösung – d.h. verschwindenden Geschwindigkeitsprofilen – resultiert. Zusätzlich darf die Anfangszeit für die hydrodynamischen Rechnungen nicht zu klein sein, weil sie zu einer starken Expansionen in longitudinaler Richtung führt was wiederum in Instabilitäten der hydrodynamischen Lösungen resultieren kann. Die Anfangszeit muss daher so angesetzt werden, dass die Lösung stabil ist.

Die kinetische Transporttheorie unterliegt nicht diesen starken Einschränkungen in der frühen Phasen von Schwerionenkollisionen. Transportmo-

delle wie die partonische Kaskade BAMPS können dazu verwendet werden die für die Hydrodynamik nicht zugängliche frühe Phase der Schwerionenkollisionen zu modellieren. So können Anfangsbedingungen für hydrodynamische Rechnungen generiert werden, welche frei von heuristischen Annahmen sind. Dazu wird zu einem gewählten Zeitpunkt die gesamten makroskopischen Observablen (Komponenten des Energie-Impuls Tensors und Teilchen Vierer-Vektors) aus BAMPS extrahiert und zur Initialisierung der hydrodynamischen Rechnungen verwendet werden. Es gilt zu untersuchen welchen Einfluss die in BAMPS vorgenerierten Anfangsbedingungen auf die experimentell zugänglichen Observablen, wie elliptischer Fluss v_2 sowie höhere Fourier-Koeffizienten und Teilchenspektren, haben. Ein Effekt auf v_2 ist zu erwarten da das kollektive Verhalten im Form des anisotropen Flusses sich in der frühen Phase entwickelt.



Eine solche Verknüpfung zwischen BAMPS und dissipativer Hydrodynamik erfordert eine hohe Präzision der Transportrechnungen, denn statistische Schwankungen in generierten Profilen werden können sehr schnell zur Entwicklung einer Instabilität in der hydrodynamischen Lösung führen. Ein typisches Energieprofil für den Anfangszustand der Quark-Gluon-Plasmaphase ist in Abb. 1 gezeigt. Für die typische Viskosität des Quark-Gluon-Plasma $\eta/s \sim 0.2$ beträgt die mittlere freie Weglänge ungefähr 0.3 fm. Da die Zellengröße in kinetischen Transportrechnungen deutlich kleiner als dieser Wert sein muss, folgt daraus sowie aus der Geometrie der Abb. 1 dass Anzahl der Zellen in der transversalen Ebene bei mindestens 1000 liegen muss. Die longitudinale Richtung benötigt ebenfalls mindestens 100 Zellen, somit beläuft sich die gesamte Zahl auf 10^6 Zellen mit der Abmessung $0.3 \times 0.3 \times 0.3 \text{ fm}^3$. Die maximale Teilchendichte in Abb. 1 beträgt 30 fm^{-3} und so kann man die gesamte Teilchenzahl in der Box auf 10^6 schätzen. Damit die Energieprofile in der Tat so "glatt" aussehen, wie in Abb. 1 dargestellt, d.h., um statistische Fluktuationen zu unterdrücken, muss die Teilchenzahl jedoch künstlich erhöht werden. Diese Erhöhung der Teilchenzahl – bekannt als die "Testteilchenmethode" – führt letztendlich

zu einem beachtlichen Verbrauch an rechnerischen Kapazitäten. Diese stehen uns in Form des CSC Clusters zur Verfügung. Die nahtlose Verknüpfung zwischen der partonischen Kaskade BAMPS und dissipativer Hydrodynamik wird eine neuartige und spannende Entwicklung auf dem Gebiet hochenergetischer Schwerionenforschung darstellen.

Referenzen:

1. Dissipation, Collective Flow and Mach Cones at RHIC.
I. Bouras, A. El, O. Fochler, J. Uphoff, Z. Xu, C. Greiner. Jun 2009.
Invited talk at Conference: C09-03-14.
e-Print: arXiv: 0906.2675 [hep-ph]
2. Investigation of shock waves in the relativistic Riemann problem:
A Comparison of viscous fluid dynamics to kinetic theory.
I. Bouras, E. Molnar, H. Niemi, Z. Xu, A. El, O. Fochler, C. Greiner, D.H. Rischke. Jun 2010. Published in Phys.Rev. C82 (2010) 024910 e-Print: arXiv:1006.0387 [hep-ph]

Ultra relativistic Quantum Molecular Dynamics on Manycore Architectures

Jochen Gerhard, Dr. Bjoern Baeuchle, Prof. Dr. Volker Lindenstruth, Prof. Dr. Marcus Bleicher
Goethe-Universität Frankfurt am Main

1.) A Numerical Stability Analysis of UrQMD on LOEWE-CSC

An aim of world's biggest experiments, like LHC at CERN and also FAIR at the GSI at Darmstadt, is to gain information about matter in its primitive state. Heavy ions are collided under highest energies to recreate a state, which existed within the beginning of the universe. The UrQMD package simulates this collisions respecting both relativistic and quantum effects. For its calculations a vast selection of experimental Data, such as particle masses and widths, are used. These experimental Data, however, can only be measured with a finite preciseness. It is therefore of great interest to calculate the impact of measurement errors on the resulting UrQMD simulations. To do systematical analyses we've used the LOEWE-CSC supercomputer to accomplish simulations with UrQMD. By the use of metaprogramming we have performed an exhaustive combinatorial search in the parameter space. Thus we explore systematically how a variation of the before mentioned parameters influences the results obtained from the UrQMD model. To stay clear of statistical errors it is necessary to compute up to 10'000 events per investigated variation, leading to an overall very computational demanding calculation.

2.) Worldline Numerics (external project [HGS-HIRe Abroad] with Dr. Thomas Fischbacher at the University of Southampton) arXiv:1110.5936v1 [hep-th]

Quantum field theoretic effects are inherently challenging to model; a key problem is that taking quantum fluctuations into account requires integrating over processes that violate the classical equations of motion.

Almost all naive approaches to perform this integration turn out to be computationally intractable for quite fundamental reasons, so a number of independent sophisticated theoretical tools keep on being developed and refined to address this problem.

One approach to the calculation of Casimir forces is based on the Worldline approach developed by Gies, Klingmüller, Langfeld and Moyaerts. In the Worldline formalism the calculation of contributions to the total energy (or force) can be performed independently for each grid point. Also, for each grid point, the contribution of each loop to the energy (or force) does not depend on the contribution of the other loops. Thus the problem is easily seen as being perfectly suited to GPU computing. As the worldline method is a probabilistic approach, the accuracy of the calculations can be increased (within reasonable limits dictated by computational effort) by increasing the number of grid points, number of loops, and the number of points per loop in an appropriate way.

When implementing Worldline Numerics on GPU hardware, one has to investigate on certain constraints of GPU programming: as e.g. the memory hierarchy, and the strong bias towards floating point calculations.

Because the memory per GPU is quite small, we have used parallel computation on up to 400 GPUs of LOEWE per investigated geometry.

Die Spuren des Quark-Gluon-Plasmas

Arbeitsgruppe Prof. Harald Appelshäuser
Institut für Kernphysik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Kernphysiker der Universität Frankfurt arbeiten am ALICE-Experiment am Teilchenbeschleuniger des CERN mit. Auf dem LOEWE-CSC stellen sie die Teilchenkollisionen nach, um Experimente zu validieren und vor auszuplanen. Sie suchen Spuren des Quark-Gluon-Plasmas (QGP), also der Materie, die während der frühen Phase des Universums existierte. Wenn sie die Eigenschaften des QGP entschlüsseln, verstehen sie nicht nur die elementaren Teilchen, sondern erhalten auch Impulse für kosmologische Modelle.

Our group participates in the ALICE experiment at the CERN-LHC. A main focus of our research activities is the search for signatures of the quark-gluon plasma (QGP), a state of matter in which quarks and gluons, the elementary constituents of hadronic matter, can be regarded as quasi-free particles. Measuring the properties of the QGP is not only important for our understanding of these elementary particles but also provides important input for cosmological models, as such a state of matter existed during the early stage of the universe.

We employ the LOEWE-CSC resources to analyse aggregated data, test new analysis software and, most of all, run simulations with high statistics. 2 Master students, 5 Ph.D. students and 2 Post-docs from our group are working on this cluster.

Due to the large size of the data samples recorded by ALICE and other LHC experiments, most of the analysis activities are run distributed on the LHC-Grid, which the LOEWE-CSC also is a part of. However, it is crucial to test the analysis software on sub samples of the data on short time scales.

We are currently adapting an analysis framework developed at GSI, which enables us to run analyses of aggregated full data sets locally on the LOEWE-CSC. This helps

not only to speed up individual iterations of the data analysis, but also allows for more detailed studies than with the shared resources of the grid. The size of such samples is typically on the order of several Terabyte, a full analysis pass will only need about 24h, as compared to several days

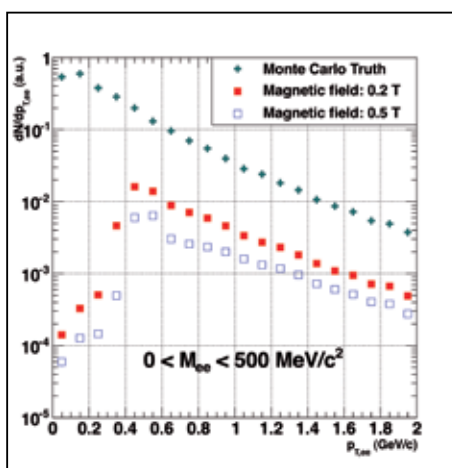
on the Grid. With the resources available, students can thereby quickly improve their software.

Our key application of the Loewe-CSC is the simulation of particle collisions and the response of the full experiment. This is not only necessary for the validation of existing analyses but it also provides crucial input for the planning of future data taking and upgrade programs.

Such a simulation comprises the generation of a realistic particle collision, the propagation of these particles through a detailed simulation of the detector setup and the reconstruction of the event from the simulated output. This procedure typically needs 5 hours of CPU time and 14 MB of disk space per 100 events and can be trivially parallelized. Typically several million of such events are needed to deduce meaningful conclusions.

We are currently investigating the impact of different magnetic field settings in the central barrel of ALICE on the measurement of electron-positron pairs. These are a unique probe for all stages of ultra-relativistic collisions, as they do not undergo strong interactions and have the potential to yield direct information from a QGP-phase.

For our study of proton-proton collisions we have used the nominal field setting of 0.5 T as well as reduced settings of 0.2T and 0.15T. About 16 million events have so far been simulated per field setting. The comparison shows that not only the significance of the dielectron measurement can be improved by about a factor of 3 but also that it will be possible to measure particles at very low momenta, where a possible signal from the QGP would be expected to contribute strongest. Figure 1 shows first results from the analysis of these simulations: The expected measured particle spectra for two field settings are compared to the ideal transverse momentum distribution.



Schwere Quarks in ultrarelativistischen Schwerionenkollisionen

Jan Uphoff¹, Oliver Fochler¹, Zhe Xu² und Carsten Greiner¹

¹ Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main, Germany

² Physics Department, Tsinghua University, Beijing, China

Charm- und Bottom-Quarks entstehen in anfänglichen harten Nukleon-Nukleon-Stößen oder zu Beginn der Quark-Gluon-Plasma-Phase, da hier die Energiedichte noch groß genug ist, solch massive Teilchen zu erzeugen [1]. Durchqueren die Quarks das produzierte Medium, liefern die dabei auftretenden Interaktionen wertvolle Informationen über das Medium. Da zudem die Anzahl der Charm- und Bottom-Quarks während der Evolution des Mediums und der Hadronisierung erhalten bleibt, sind sie hervorragend geeignet, die Anfangsphase des Quark-Gluon-Plasmas zu untersuchen.

Bei der Hadronisierung werden Charm-(Bottom-) Quarks zu D-(B-)Mesonen, die wiederum zu Elektronen und anderen Teilchen zerfallen können. Der experimentell gemessene elliptische Fluss v_2 und nuklearer Modifikationsfaktor R_{AA} dieser Elektronen von schweren Quarks [2–4] sind vergleichbar mit denen von leichten Hadronen, anders als durch den “dead cone effect” [5–6] erwartet.

Mit dem partonischen Transportmodell BAMPS wurde bereits intensiv die Produktion von schweren Quarks in ultrarelativistischen Schwerionenkollisionen untersucht [1,7–10]. Während am RHIC die Anzahl der sekundär produzierten Charm-Quarks vernachlässigbar ist, liegt deren Anteil am LHC bei etwa 10 – 50 % der gesamten Charm-Quarks. Die sekundäre Produktion von Bottom-Quarks hingegen ist sowohl am RHIC als auch am LHC vernachlässigbar.

Von größter Bedeutung für das Verständnis von Schwerionenkollisionen sind die Wechselwirkung und besonders der Energieverlust von schweren Quarks in dem Medium. Momentan wechselwirken schwere Quarks in BAMPS über binären Kollisionen mit den restlichen Teilchen des QGPs [8–11]. Der Wirkungsquerschnitt für diese Prozesse wurde mit perturbativer QCD in führender Ordnung errechnet. Da dieser für lange Reichweiten divergent ist, muss er mit einer Abschirmungsmasse reguliert werden, welche von der Ordnung der Debye-Masse ist. Der Vergleich mit Rechnungen mit harten thermischen Schleifenkorrekturen zeigt, dass der genaue Wert der Abschirmungsmasse etwa nur ein Fünftel der Debye-Masse beträgt [11–13]. Zudem ist in BAMPS für diesen Prozess auch die laufende Kopplung der QCD implementiert, welche in vielen anderen Modellen als konstant angenommen wird. Der Vergleich mit BAMPS-Resultaten für den elliptischen Fluss und nuklearen Modifikationsfaktor von schweren Quarks mit den experimentellen Daten vom RHIC und LHC ist sehr viel versprechend

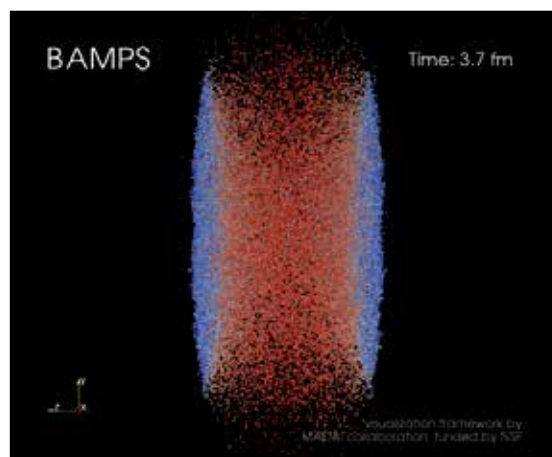


Abbildung 1:
Simulation einer Schwerionenkollision am LHC mit BAMPS

[9,11,14]. Allein mit binären Kollisionen kann ein großer Anteil der beiden Observablen beschrieben werden. Allerdings fehlt noch der zusätzliche Beitrag durch radiative Prozesse, welcher den restlichen Anteil an den Observablen erklären könnte. Die Implementation dieser Prozesse für schwere Quarks soll in naher Zukunft vollzogen werden. Sie ergänzen BAMPS in idealer Weise, da radiative Prozesse bereits für leichte Teilchen implementiert sind. Am LHC bietet sich weiterhin zum ersten Mal die Möglichkeit nicht nur mit Elektronen von schweren Quarks, sondern auch mit D-Mesonen und Muonen von schweren Quarks zu vergleichen. Besonders D-Mesonen haben den einmaligen Vorteil, dass sie nur von Charm-Quarks stammen, wodurch das erste Mal im Experiment zwischen Charm- und Bottom-Quarks unterschieden werden kann [14]. Hier wird es besonders spannend sein, die BAMPS-Ergebnisse für Charm- und Bottom-Quarks getrennt mit experimentellen Daten zu vergleichen und somit Rückschlüsse über den Einfluss der Masse zu ziehen. Höchst interessant ist auch das Verhalten von J/ψ -Mesonen in dem Quark-Gluon-Plasma. Rechnungen aus der Gittereichtheorie weisen darauf hin, dass diese schweren Zustände aus Charm- und Anti-

charm-Quarks zu einem gewissen Grad im Medium überleben können [15]. Nur wenn die Temperatur zu sehr ansteigt, schmelzen sie im QGP. Bei nicht allzu hoher Temperatur ist es sogar möglich J/ψ -Mesonen wieder durch ein Charm- und Anticharm-Quark zu erzeugen. Aus diesem Wechselspiel zwischen Dissoziation und Regeneration können interessante Rückschlüsse über die Eigenschaften des produzierten Mediums gezogen worden, wie zum Beispiel der Temperatur. In BAMPS wurden bereits die relevanten Prozesse und Effekte eingebaut und erste Studien bei RHIC-Energien angefertigt [10]. Dies soll in Zukunft weiter ausgebaut werden und auf LHC-Energien übertragen werden.

References:

1. J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, Phys. Rev. C82 (2010) 044906, [1003.4200].
2. STAR Collaboration, B. I. Abelev et al., Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 192301, [nucl-ex/0607012].
3. PHENIX Collaboration, A. Adare et al., Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 172301, [nucl-ex/0611018].
4. PHENIX Collaboration, A. Adare et al., 1005.1627.
5. Y. L. Dokshitzer and D. E. Kharzeev, Phys. Lett. B519 (2001) 199–206, [hep-ph/0106202].
6. R. Abir, C. Greiner, M. Martinez, M. G. Mustafa, and J. Uphoff, 1109.5539.
7. J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, J. Phys. Conf. Ser. 230 (2010) 012004, [1004.4091].
8. J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, J. Phys. Conf. Ser. 270 (2010) 012028, [1008.1995].
9. J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, Nucl.Phys. A855 (2011) 444–447, [1011.6183].
10. J. Uphoff, K. Zhou, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, 1104.2437.
11. J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, Phys.Rev. C84 (2011) 024908, [1104.2295].
12. P. B. Gossiaux and J. Aichelin, Phys. Rev. C78 (2008) 014904, [0802.2525].
13. A. Peshier, 0801.0595.
14. O. Fochler, J. Uphoff, Z. Xu, and C. Greiner, 1107.0130.
15. A. Mocsy and P. Petreczky, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 211602, [0706.2183].

Kollektives Verhalten, Energieverlust und Jet-Rekonstruktion in partonischen Transportsimulationen von hochenergetischen Schwerionenkollisionen

Oliver Fochler¹, Florian Senzell, Zhe Xu², Carsten Greiner¹

¹ Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

² Physics Department, Tsinghua University, Beijing, China

In Experimenten am Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) und am Large Hadron Collider (LHC) entsteht bei Kollisionen hochenergetischer Atomkerne das sogenannte Quark-Gluon-Plasma. Wissenschaftler der Goethe-Universität Frankfurt setzen das selbst entwickelte mikroskopische Transportmodell BAMPS (Boltzmann Approach to Multi-Parton Scatterings) [1] ein, um die Eigenschaften des Quark-Gluon-Plasmas zu untersuchen. Die Verwendung eines mikroskopischen Transportmodells ermöglicht dabei die detaillierte Untersuchung der zeitlichen Entwicklung verschiedener Observablen bei gleichzeitiger Berücksichtigung der Dynamik des Systems.

Ein Schwerpunkt der hier beschriebenen Studien liegt auf der gleichzeitigen Untersuchung des nuklearen Modifizierungsfaktors, R_{AA} , und des elliptischen Flusses, v_2 , im Rahmen eines gemeinsamen und konsistenten Modells. Durch diese Möglichkeiten, verschiedenste Aspekte und Observablen des heißen partonischen Mediums auf einer gemeinsamen und wohldefinierten theoretischen Grundlage untersuchen zu können, leisten Transportmodelle im Allgemeinen und BAMPS im Speziellen einen unverzichtbaren Beitrag zum Verständnis der Dynamik des Quark-Gluon Plasmas. Gleichzeitig sind derartige Simulationen jedoch äußerst rechenaufwendig, da die vollständigen Streuhistorien von größenordnungsmäßig 10^5 bis 10^6 Teilchen simuliert werden müssen. Dies gilt um so mehr, als in BAMPS nicht nur elastische Zwei-Teilchen-Interaktionen sondern auch konsistent Produktions- und Annihilationsprozesse enthalten sind, die für die schnelle Thermalisierung des Systems [1] und die niedrige Viskosität des Mediums [2] eine entscheidende Rolle spielen. Der Einsatz leistungsstarker Rechencluster ist hier unverzichtbar.

Der nukleare Modifizierungsfaktor, R_{AA} , quantifiziert den Einfluss des Mediums auf die Anzahl der produzierten Teilchen bei gegebenen Transversalimpulsen, indem mit den erwarteten Werten aus entsprechend skalierten Proton-Proton-Kollisionen verglichen wird. In Schwerionenkollisionen am RHIC und LHC wird eine Unterdrückung von Teilchen mit hohem Transversalimpuls gemessen. Dieses sogenannte Jet Quenching wird üblicherweise einem partonischen Energieverlust der Jets beim Durchqueren des Mediums zugeschrieben. Der elliptische Fluss hingegen charakterisiert kollektive Eigenschaften dieses Mediums, primär bei niedrigen und mittleren Transversalimpulsen. Quantifiziert wird der elliptische Fluss, eine Anisotropie in der Impulsverteilung der gemessenen Hadronen, mittels des Koeffizienten v_2 einer Fourier-Zerlegung der Winkelverteilung relativ zur Reaktionsebene.

Experimentell beobachtet wird in nicht-zentralen Schwerionenkollisionen ein positiver und deutlich von Null verschiedener Wert für v_2 , was eine starke Kollektivität des Mediums und eine äußerst effektive Umsetzung der anfänglichen räumlichen Anisotropie in eine Anisotropie im Impulsraum indiziert.

Das Transportmodell BAMPS kann die Zentralitätsabhängigkeit des integrierten elliptischen Flusses sehr erfolgreich beschreiben [3], wofür vor allem die inelastischen $2 \leftrightarrow 3$ Interaktionen eine wichtige Rolle spielen, die auch zu einer schnellen Thermalisierung und einer geringen Viskosität führen [2]. Ursprünglich ausschließlich für gluonische Freiheitsgrade entwickelt, wurde das Modell kürzlich auch auf leichte Quarks ausgeweitet. Die Auswirkungen dieser zusätzlichen Freiheitsgrade werden derzeit untersucht [4].

Der Energieverlust, den hochenergetische Partonen in einem mittels des Transportmodells BAMPS simulierten Medium erfahren, wurde bereits eingehend untersucht. Dabei lag der Fokus vor allem auf detaillierten Studien [5] des komplexen Zusammenspiels zwischen kinematischen Effekten, dem Gunion-Bertsch Matrixelement, das den inelastischen Prozessen in BAMPS zugrunde liegt, und der Modellierung des Landau-Pomeranchuk-Migdal-Effekts (LPM-Effekt), ein Kohärenzphänomen bei induzierter mehrfacher Gluonabstrahlung. Solche Studien hochenergetischer Partonen im statischen Medium ermöglichen ein Verständnis der im Transportmodell ablaufenden Prozesse und bereiten den Weg für die Anwendung in vollständig dynamischen Simulationen von Schwerionenkollisionen. Darauf aufbauend werden systematische Untersuchungen des nuklearen Modifizierungsfaktors in simulierten Schwerionenkollisionen bei RHIC- und bei LHC-Energien durchgeführt, insbesondere im Hinblick auf das Zusammenspiel mit der Beschreibung des kollektiven Verhaltens des Mediums anhand des elliptischen Flusses [4,5].

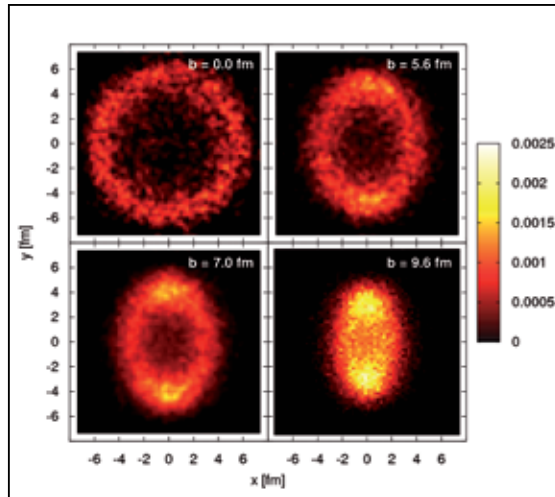


Abbildung 1:
Illustration des geometrischen Ursprungs von Gluonen und Quarks die das simulierte Medium (Au+Au bei 200 AGeV, verschiedene Kollisionsparameter) mit einem Transversalimpuls von mehr als 10 GeV verlassen.

Die experimentellen Gegebenheiten am LHC erlauben inzwischen Analysen des Energieverlust und des Verhaltens sehr hochenergetischer Teilchen, die weit über den nuklearen Modifizierungsfaktor hinaus gehen. Insbesondere die Methode der sogenannten Jet-Rekonstruktion verspricht hier weitreichende Einblicke in die zugrunde liegenden Mechanismen. Die im Detektor gemessenen Hadronen werden dabei mittels ausgefeilter Algorithmen anhand ihrer Position in Rapidität und Azimutalwinkel gruppiert, so dass die Energie des ursprünglichen hochenergetischen Partons rekonstruiert werden kann. Die Rekonstruktion solcher Jets ermöglicht einen bis dato unerreicht unmittelbaren Zugriff auf die Eigenschaften der in den frühesten Kollisionen erzeugten hochenergetischen Partonen.

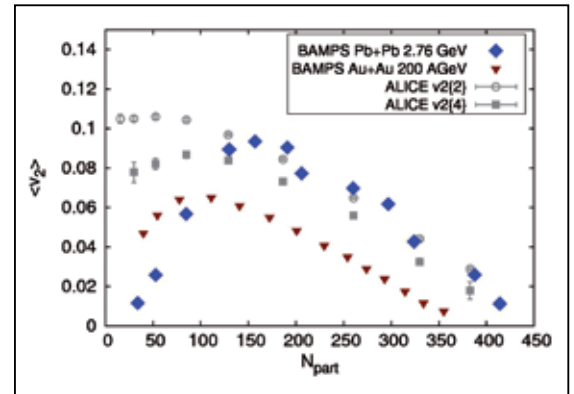


Abbildung 2:
Zentralitätsabhängigkeit des integrierten elliptischen Flusses in Simulationen von Pb+Pb Kollisionen bei 2.76 ATeV (LHC) verglichen mit experimentellen Ergebnissen und verglichen mit Simulationen von Au+Au bei 200 AGeV (RHIC).

BAMPs bietet hier wertvolle Möglichkeiten, den Prozess der Jet-Rekonstruktion detailliert zu studieren. Da die vollständige Evolution aller Teilchen in der partonischen Phase im Modell nachvollzogen werden kann, eignet es sich bestens zur systematischen Untersuchung der Effizienz verschiedener Rekonstruktions-Algorithmen. Auch die Sensitivität der auf rekonstruierten Jets basierenden Observablen hinsichtlich der Modellierung des zugrunde liegenden Energieverlusts kann unter Berücksichtigung der vollen Dynamik des Systems untersucht werden. Solch systematische Studien sind unerlässlich für die Einordnung der experimentellen Ergebnisse. Erste Ergebnisse zeigen eine bemerkenswerte Übereinstimmung der durch Energieverlust und Absorption im Medium verursachten Asymmetrie in sogenannten Di-Jet-Ereignissen zwischen BAMPs-Simulationen und Messungen der LHC-Experimente CMS und ATLAS.

Referenzen:

1. Z. Xu and C. Greiner, Thermalization of gluons in ultra relativistic heavy ion collisions by including three-body interactions in a parton cascade, Phys. Rev. C71, 064901 (2005).
2. Z. Xu and C. Greiner, Shear viscosity in a gluon gas, Phys. Rev. Lett. 100, 172301 (2008).
3. Z. Xu and C. Greiner, Elliptic flow of gluon matter in ultra relativistic heavy ion collisions, Phys. Rev. C79, 014904 (2009).
4. Oliver Fochler, Jan Upho, Zhe Xu, and Carsten Greiner, Jet quenching and elliptic flow at RHIC and LHC within a pQCD-based partonic transport model, J.Phys.G, G38:124152 (2011).
5. O. Fochler, Z. Xu and C. Greiner, Towards a unified understanding of jet quenching and elliptic flow within perturbative QCD parton transport, Phys. Rev. Lett. 102, 202301 (2009); O. Fochler, Z. Xu and C. Greiner, Energy loss in a partonic transport model including bremsstrahlung processes, Phys.Rev. C82, 024907 (2010).

Space-time evolution of the electromagnetic field in relativistic heavy-ion collisions

V. P. Konchakovski ¹, E. L. Bratkovskaya ^{2,3}, W. Cassing ¹, V. D. Toneev ^{3,4}, and V. Voronyuk ^{3,4}

¹ ITP, University of Giessen, Germany; ² ITP, University of Frankfurt, Germany; ³ FIAS, Frankfurt, Germany; ⁴ JINR, Dubna, Russia

In großen Teilchenbeschleunigern, etwa am Cern, untersuchen Wissenschaftler was passiert, wenn Teilchen mit sehr hoher Geschwindigkeit aufeinanderprallen. Wissenschaftler in Hessen erforschen mithilfe der Mathematik, wie die elektromagnetischen Felder, die dabei entstehen, die Dynamik Teilchen beeinflussen und wie sich diese geändert Dynamik wiederum auf das elektromagnetische Feld auswirkt. Ihre Ergebnisse finden sie in Computersimulationen an den Hochleistungsrechnern in Hessen.

In dense QCD matter in the presence of an external magnetic field and/or topological defects, a spontaneous creation of axial currents may happen. The presence of a magnetic field also favors the formation of spatially inhomogeneous spiral-like quark condensate configurations at low temperatures and non-zero chemical potentials. The influence of a constant magnetic field on possible color-superconducting phases (the color Meissner effect) has also actively been discussed. A clarification of such phenomena by experimental observations requires e.g. the production of QCD matter in relativistic heavy-ion collisions where in non-central reactions strong electromagnetic fields are created by the charged four-current of the spectators.

We study the space-time evolution of electromagnetic fields formed in relativistic heavy-ion collisions. The Hadron String Dynamics (HSD) transport approach, which solves Kadanoff-Baym equations and treats the nuclear collisions in terms of quasiparticles with a finite width, is used as a basis of our considerations. In our approach the dynamical formation of the electromagnetic field, its evolution during a collision and influence on the quasiparticle dynamics as well as the interplay of the created electromagnetic field and back-reaction effects are included simultaneously. The set of transport equations is solved in a quasiparticle approximation by using the Monte-Carlo parallel ensemble method. To find the electromagnetic field, a space-time grid is used. The quasiparticle propagation in the retarded electromagnetic field is calculated as:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

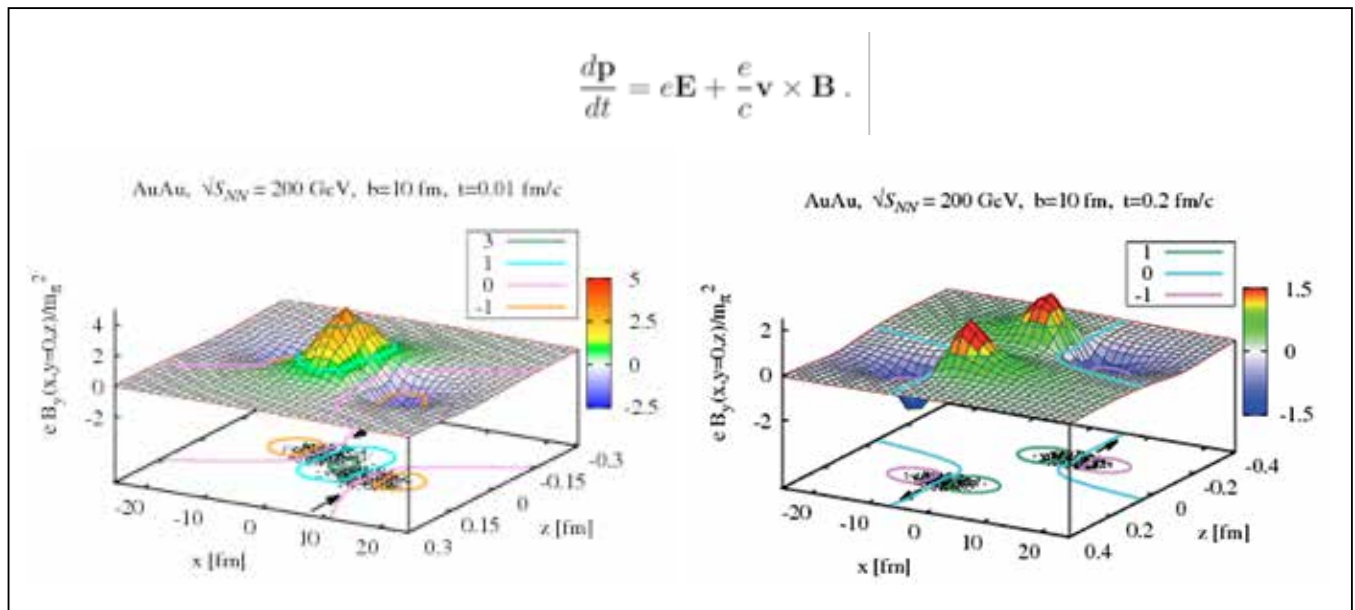


Figure 1:

Time dependence of the spatial distribution of the magnetic field B_y at times t created in Au+Au ($\sqrt{s} = 200$ GeV) collisions with the impact parameter $b = 10$ fm. The location of spectator protons is shown by dots in the $(x-z)$ -plane. The level $B_y = 0$ and the projection of its location on the $(x-z)$ plane is shown by the solid lines.

The time evolution of $eB_y(x, y=0, z)$ for Au+Au collisions for the colliding energy $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV at the impact parameter $b = 10$ fm is shown in Figure 1. If the impact parameter direction is taken as the x axis (as in the present calculations), then the magnetic field will be directed along the y -axis perpendicularly to the reaction plane (z - x). The geometry of the colliding system at the moment considered is demonstrated by points in the (z - x) plain where every point corresponds to a spectator nucleon. It is seen that the largest values of eB_y , $5m_\pi^2$ are reached in the beginning of a collision for a very short time corresponding to the maximal overlap of the colliding ions. Note that this is an extremely high magnetic field, since $m_\pi^2 \approx 1018$ gauss. The first panel in Fig. 1 is taken at a very early compression stage with $t = 0.01$ fm/c. The next panel shows configuration of the magnetic field at the time $t = 0.2$ fm/c. Then, the system expands (note the different z -scales in the different panels of Fig. 1) and the magnetic field decreases. For $b = 0$ the overlap time is maximal and roughly given by $2R/\gamma_c$ which for our case is about 0.15 fm/c. For peripheral collisions this time is even shorter.

Globally, the spatial distribution of the magnetic field is evidently inhomogeneous and Lorentz-contracted along the z -axis. At the compression stage there is a single maximum which in the expansion stage is splitted into two parts associated with the spectators. In the transverse direction the bulk magnetic field is limited by two minima coming from the torqued structure of the single-charge field. See references [1, 2] for more details.

References:

1. V. Voronyuk, V. D. Toneev, W. Cassing, E. L. Bratkovskaya, V. P. Konchakovski and S. A. Voloshin, Phys. Rev. C 83, 054911 (2011).
2. V. D. Toneev, V. Voronyuk, E. L. Bratkovskaya, W. Cassing, V. P. Konchakovski and S. A. Voloshin, arXiv:1112.2595 [hep-ph].

A unified quark-hadron model for the study of nuclei, nuclear matter, and neutron stars

R. Negreiros, P. Rau, T. Schürhoff, J. Steinheimer, S. Schramm
FIAS and CSC, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Eines der wichtigsten Ziele in der heutigen Kernphysik ist die Bestimmung der Zustandsgleichung hadronischer Materie. Frankfurter Forscher haben eine allgemeine Theorie entwickelt, die hadronische Materie, Quark-Materie und nukleare Eigenschaften bei hohen Temperaturen und Dichten beschreibt. Mit diesem Ansatz untersuchen sie sowohl Schwerionen-Kollisionen als auch die Eigenschaften von Neutronensternen. Dabei haben die Physiker unter anderem bestimmt, wie Neutronensterne abkühlen.

One of the major goals in contemporary nuclear physics is the determination of the equation of state of hadronic matter over a wide range of conditions. This includes the regimes of high temperature, density, isospin, as well as strangeness. Extreme temperatures are obtained in the fireball created by ultra-relativistic heavy-ion collisions, where a phase of quarks and gluons can be obtained. High densities and extreme isospin can especially be reached in the interior of neutron stars, whereas systems with large isospin, but normal ground state matter densities, are represented by atomic nuclei with large neutron access towards the neutron-drip line.

We developed a theoretical approach that can describe nuclear properties as well as hadronic and quark matter at high temperatures and densities. Within this general approach we studied the phenomenology of heavy-ion collisions, as well as the properties of neutron stars and exotic nuclei.

In very computer-intensive studies we optimized interaction parameters by fitting the binding energies of all known atomic nuclei with our model.

Fig. 1 shows the result for studies of the properties and behavior of neutron stars within this approach. We solved the heat transport equations for the star and could thus determine the cooling of the neutron star via neutrino emission. Assuming that the observed cooling neutron stars have a relatively small mass, one can obtain a good agreement with the data.

We studied extensively the phase diagram of the strongly interacting matter. Fig. 2 shows the result for the crossover to deconfinement quark matter starting from hadronic degrees of freedom and to the chirally restored phase. At small temperatures and high densities one can observe a first-order phase transition with a 2nd order critical end point. We also implemented the corresponding equation of state in 3-dimensional hydrodynamic simulations of ultra-relativistic heavy-ion collisions.

In further studies within this model approach and comparing results with different models we studied the driplines of normal and hyper-nuclei, investigating the possibility of the existence of extremely heavy uranium isotopes.

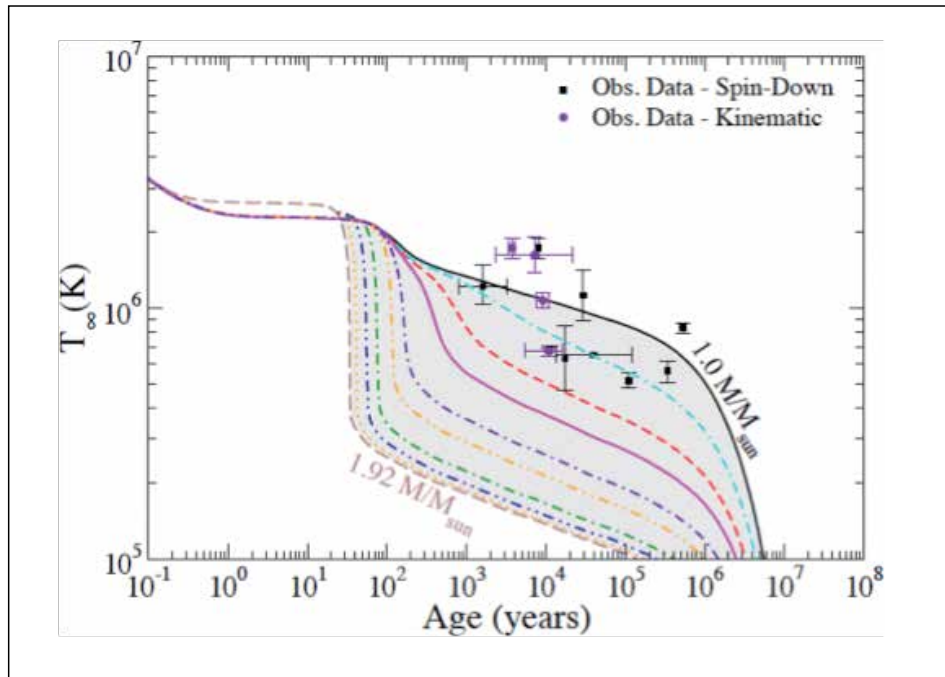


Figure 1:
Description of the
cooling of neutron
stars. Comparison
of the model
and observed
temperatures
and star ages
show agreement
assuming that the
observed stars are
rather light of the
order of 1 solar
mass.

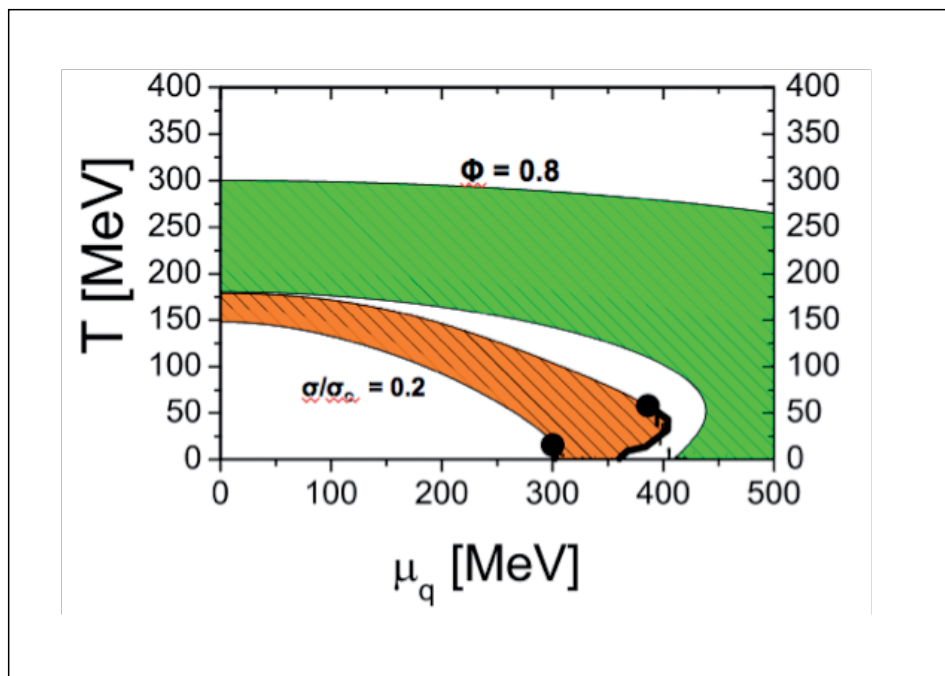


Figure 2:
Phase diagram
as function of
temperature and
quark chemical
potential.
The green
band shows the
deconfinement
phase transition
whereas the
orange area
represents the
chiral symmetry
restoration. The
solid lines and
points show
first-order phase
transitions and
critical end-points.

References:

1. J. Steinheimer, S. Schramm and H. Stöcker, "The hadronic SU(3) Parity Doublet Model for Dense Matter; its extension to quarks and the strange equation of state," Phys. Rev. C 84 (2011), 045208.
2. J. Steinheimer, S. Schramm and H. Stöcker, An Effective chiral Hadron-Quark Equation of State, J. Phys. G 38 (2011) 035001.
3. T. Schürhoff, S. Schramm and V. Dexheimer, Neutron stars with small radii – the role of delta resonances, Astrophys. J. 724 (2010) L74.
4. R. Negreiros, V. A. Dexheimer and S. Schramm, Modeling Hybrid Stars with an SU(3) non-linear sigma model, Phys. Rev. C 82 (2010) 035803.

Beam dynamics studies

M. Droba, A. Almomani, L.P. Chau, D. Noll, R. Tiede, U. Ratzinger
Institut für Angewandte Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Physiker der Universität Frankfurt befassen sich mit der Strahldynamik in Teilchenbeschleunigern. Sie untersuchen zum Beispiel in speziellen Fällen gefangene Elektronenwolken und deren Anwendung. Sie forschen zudem an neuen Modellen der Teilchenbeschleunigung auf Laser-Protonen-Basis. Um die Systeme unter realistischen Bedingungen zu untersuchen, sind detaillierte numerische Simulationen nötig. Die dabei anfallenden Datenmassen kann nur ein Hochleistungsrechner bewältigen.

Beam dynamics studies in the particle accelerator research affording large computational effort are performed within the framework of the HHLR-GU (Hessisches Hochleistungsrechenzentrum der Goethe-Universität). Main topics are:

- optimization of the proposed linear particle accelerator scheme of the FRANZ project [1] under high current condition
- investigation of the trapped electron plasma columns in Gabor-Lenses [2] especially for parameter sets leading to the so called diocotron instabilities and their influence on beam focusing properties
- study of the novel particle acceleration scheme based on Laser proton generation within the LIGHT collaboration [3].

Detailed numerical simulations with a huge number of macroparticles (up to 10^7) are needed to study the proposed schemes under realistic conditions. New simulation codes are under development and will use high performance computing on massive parallel clusters. The SWARM-Optimization technique in multidimensional parameter space was already developed and will be applied on the proton beam dynamics through the complete accelerator structure of FRANZ.

The numerical investigation of the pure electron plasmas confined inside the cylindrical trap called Gabor-Lens helps to understand the physical processes, the rotational equilibria and the useful parameter space of this focusing device. An example of the simulation results for a trapped electron cloud dynamics in two cases are shown on Fig.1.

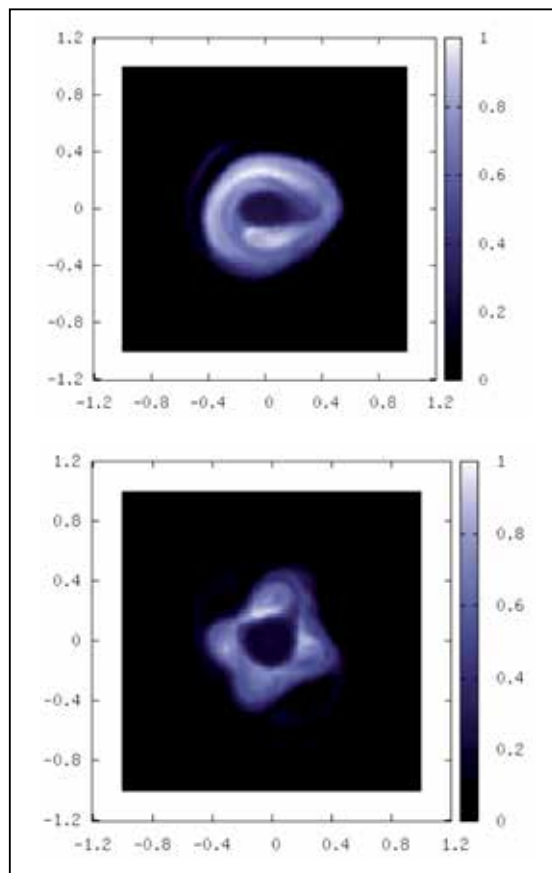


Figure 1:
Two examples of a trapped electron column (rotational equilibria) inside of the Gabor-Lens. Left and right picture differ in confining magnetic field level. Transverse coordinates and particle densities are given in normalized units.

Within the scope of the LIGHT collaboration, the 3D simulation code LASIN was developed for multi-species (electrons, protons and ions) beam tracking through a solenoidal magnetic field with high space charge forces and at rapidly varying geometric bunch dimensions (from 10 μm to 5 cm transversely along a longitudinal drift of about 50 cm). The magnetic field is calculated by the Biot-Savart solver using a numerical integration scheme from a given distribution of current elements. At every exact particle position at a given time step, the B-field is calculated accordingly.

In case of space charge forces, the charge density is integrated on a cylindrical mesh from a particle distribution by PIC (Particle-In-Cell) techniques. Afterwards, the Poisson equation is solved numerically by the iteration method BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Method-Stabilized) on the mesh resulting in the potential distribution. For the tracking algorithm the electric field is interpolated

at the particle position. A symplectic middle step scheme in Cartesian coordinates is used to follow the particle motion in given fields. Typically, 50 processors and up to 10^7 macroparticles are used in proton tracking simulations from the laser target (TNSA) to the CH accelerating structure. For optimization purposes and memory requirement reduction the sparse format of stored vectors and matrices is used.

Detailed investigation showed how the trapped on axis electron column influences the beam focusing (arrows in Fig. 2) and spectral distribution of the proton pulse in the first 40ps after generation at the target by a laser pulse. The momentum exchange between the species is present and results in a distribution splitting in phase space. This is a major factor for injection into a proposed CH-structure for further post-acceleration. As a consequence an optimized CH-linac was designed. Overall 72% transmission was reached in simulation from the target position to the end at energies of 40MeV.

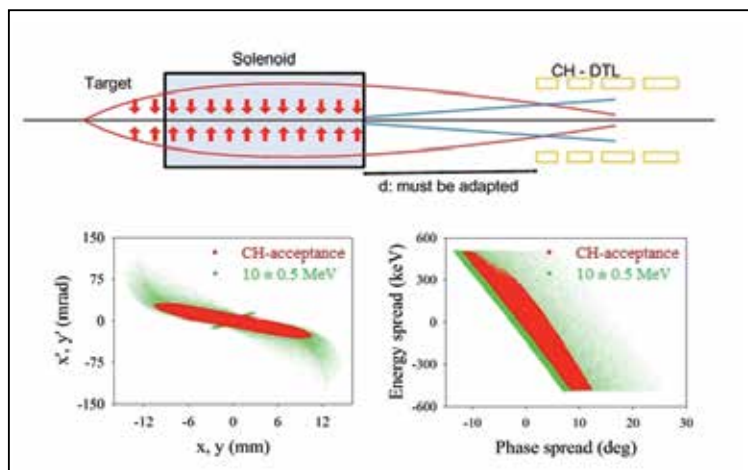


Figure 2:

Schematic view (up) of the matching section for a laser generated pulse by TNSA techniques. The generated pulse is focused by the magnetic solenoid and matched to the CH postaccelerator structure. Results of the multi-species simulation at the injection point to the CH-Structure are shown below: The transversal (left) and longitudinal (right) phase space distributions of the proton pulse.

References:

1. U. Ratzinger et al., Proc. IPAC 10, Kyoto, Japan (2010), p. 597.
2. O.Meusel, PhD Thesis (2006).
3. A.Almomani et al., Proc. IPAC 11, San Sebastian, Spain (2011), p. 2558.

Nonequilibrium chiral fluid dynamics including dissipation and noise

Prof. Marcus Bleicher, Dr. Marlene Nahrgang, Jan Steinheimer, Prof. Igor Mishustin
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Die starke Wechselwirkung hält die Teilchen im Atomkern zusammen. Experimente in Teilchenbeschleunigern, etwa am CERN, machen es möglich, die starke Wechselwirkung im Detail zu erforschen. Dadurch erlangen die Wissenschaftler tiefere Einblicke in die Materie, die im Universum Mikrosekunden nach dem Urknall existierte. Physiker der Universität Frankfurt erforschen die starke Wechselwirkung mithilfe von Computer-Simulationen. Sie wollen Wege schaffen, die starke Wechselwirkung mit weniger Aufwand zu erforschen als im Teilchenbeschleuniger.

Within the group of Prof. Dr. Bleicher, numerical simulations to understand the fundamental theory of the strong interaction have been performed. The strong interaction, also called Quantum-Chromo-Dynamics (QCD) is the interaction that binds the atomic nuclei together. Accelerator facilities like CERN, the GSI Helmholtz Center and the upcoming FAIR facility in Darmstadt allow to explore the various facets of QCD in great detail. These studies will allow to gain deeper insights into the matter that existed in the universe micro seconds after the big bang or nowadays in compact stellar objects, like neutron stars.

To plan the experimental programs and to interpret the experimental data large scale computer simulations are needed to connect the observed final state particles with the initial state of the reaction. The main research questions addressed are the hadronization of the Quark-Gluon-Plasma and the chiral phase transition. To this aim, we have developed numerical simulations to explore these fundamental questions. The simulations were run on the LOEWE-CSC and the CSC compute clusters funded in parts by the LOEWE initiative of the State of Hesse.

Nonequilibrium chiral fluid dynamics including dissipation and noise

We developed a consistent theoretical approach for the study of nonequilibrium effects in chiral fluid dynamics within the framework of the linear sigma model with constituent quarks. Treating the quarks as an equilibrated heat bath we used the influence functional formalism to obtain a Langevin equation for the sigma field. This allowed us to calculate the explicit form of the damping coefficient and the noise correlators. For a selfconsistent derivation of both the dynamics of the sigma field and the quark fluid we have employed the 2PI (two-particle

irreducible) effective action formalism. The energy dissipation from the field to the fluid was treated in the exact formalism of the 2PI effective action where a conserved energy-momentum tensor can be constructed. We derived its form and discussed approximations generating additional terms in the energy-momentum balance of the entire system. Next, we investigated the nonequilibrium evolution of the sigma field coupled to a fluid dynamic expansion of a hot fireball to model the chiral phase transition in heavy-ion collisions. The dissipative processes and fluctuations were allowed under the assumption that the total energy of the coupled system is conserved. We used the linear sigma model with constituent quarks to investigate the effects of the chiral phase transition on the equilibration and excitation of the sigma modes. The quark fluid acts as a heat bath in local thermal equilibrium and the sigma field evolves according to a semiclassical stochastic Langevin equation of motion. The effects of supercooling and reheating in a first order phase transition were observed when the sigma field relaxed to equilibrium with the quark fluid. Nonequilibrium fluctuations at the first order phase transition led to an increase in the intensity of sigma fluctuations in comparison to a scenario with a critical point.

Production of hypermatter in relativistic heavy-ion collisions

The investigation of hypernuclei allows to answer many fundamental questions. First of all, studying the structure of hypernuclei helps to understand the structure of conventional nuclei too. These studies lead to an extension of the nuclear chart into the strangeness sector. Second, hypernuclei provide a bridge between traditional nuclear physics (dealing with protons and neutrons) and hadron physics.

Strangeness is an important degree of freedom for the construction of QCD motivated models of strong interactions. And last but not least, strange particles are abundantly produced in nuclear matter at high densities, which are realized in the core of neutron stars. The only way to describe realistically these physical conditions is to study the hyperon interactions in laboratory, and select theoretical models which pass the careful comparison with experimental data. To this aim we have studied the formation of large hyper-fragments in relativistic heavy-ion collisions within two transport models, DCM and UrQMD. Our goal was to explore a new mechanism for the formation of strange nuclear systems via capture of hyperons by relatively cold spectator matter produced in semi-peripheral collisions. We investigated basic characteristics of the produced hyper-spectators and evaluate the production probabilities of multi-strange systems. Advantages of the proposed mechanisms over an alternative coalescence mechanism were analysed. We also discussed how such systems can be detected taking into account the background of free hyperons. This investigation is important for the development of new experimental methods for producing hyper-nuclei in peripheral relativistic nucleus-nucleus collisions, which are now underway at GSI and are planned for the future FAIR facility.

Dimuon radiation within a (3+1)d hydrodynamic+cascade model

We analyzed dilepton emission from hot and dense matter using a hybrid approach based on the Ultrarelativistic Quantum Molecular Dynamics (UrQMD) transport model with an intermediate

hydrodynamic stage for the description of heavy-ion collisions at relativistic energies. During the hydrodynamic stage, the production of lepton pairs was described by radiation rates for a strongly interacting medium in thermal equilibrium. In the low mass region, hadronic thermal emission was evaluated assuming vector meson dominance including in-medium modifications of the rho meson spectral function through scattering from nucleons and pions in the heat bath. In the intermediate mass region, the hadronic rate was essentially determined by multi-pion annihilation processes. Emission from quark-antiquark annihilation in the quark gluon plasma was taken into account as well. When the system is sufficiently dilute, the hydrodynamic description breaks down and a transition to a final cascade stage was performed. In this stage dimuon emission was evaluated as commonly done in transport models. Focusing on the enhancement with respect to the contribution from long-lived hadron decays after freezeout observed at the SPS in the low mass region of the dilepton spectra, the relative importance of the different thermal contributions and of the two dynamical stages is investigated. We found that three separated regions can be identified in the invariant mass spectra. Whereas the very low and the intermediate mass regions mostly receive contribution from the thermal dilepton emission, the region around the vector meson peak is dominated by the cascade emission. Above the rho-peak region the spectrum is driven by QGP radiation. Analysis of the dimuon transverse mass spectra revealed that the thermal hadronic emission shows an evident mass ordering not present in the emission from the QGP.

References:

1. Nonequilibrium chiral fluid dynamics including dissipation and noise, Marlene Nahrgang, Stefan Leupold, Christoph Herold, Marcus Bleicher, May 2011, 22 pp., Published in Phys.Rev. C84 (2011) 024912, DOI: 10.1103/PhysRevC.84.024912.
2. Production of spectator hypermatter in relativistic heavy-ion collisions, A.S. Botvina, K.K. Gudima, J. Steinheimer, M. Bleicher, I.N. Mishustin, May 2011, 28 pp., Published in Phys.Rev. C84 (2011) 064904.
3. Dimuon radiation at the CERN SPS within a (3+1)d hydrodynamic+cascade model, E. Santini, J. Steinheimer, M. Bleicher, S. Schramm, Feb 2011. Published in Phys.Rev. C84 (2011) 014901, DOI: 10.1103/PhysRevC.84.014901.

Lattice QCD on LOEWE-CSC

Matthias Bach, Professor Dr. Owe Philipsen, Prof. Dr. Volker Lindenstruth, Dr. Lars Zeidlewicz, Christopher Pinke
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Quarks und Gluonen sind die Bausteine der Atomkerne und werden durch die Quantenchromodynamik (QCD) beschrieben. Abhängig von Einflüssen wie Temperatur oder Druck verhalten sich die aus diesen Teilchen aufgebauten Systeme unterschiedlich. So bilden sie bei sehr hohen Temperaturen, wie kurz nach dem Urknall, das Quark-Gluon-Plasma. Phasendiagramme fassen diese Eigenschaften zusammen. Um das Phasendiagramm von QCD zu erforschen, sind enorme Rechenkapazitäten nötig. Wissenschaftler der Universität Frankfurt haben ein Programm geschrieben, das die Struktur der Hochleistungsrechner besser nutzt, und so die Rechenschritte effizienter ausführt.

Quantum Chromodynamics (QCD) is the known theory of the strong force and a part of the Standard Model of particle physics. In addition, QCD is relevant for physics investigated in state-of-the-art collider experiments, carried out presently at the LHC at CERN or in the near future at FAIR. Of particular interest is the phase diagram of QCD. For example, at high temperatures it is known that hadronic matter undergoes a phase transition from confinement to deconfinement (quark gluon plasma). The nature of this transition is not known, and its clarification is one goal of the experiments already mentioned. Since QCD is strongly at the scale of the transition, a non-perturbative approach is needed.

Lattice QCD (LQCD) provides a first principle access. Here, QCD in continuous spacetime is replaced by a discretized version, where spacetime points are separated by the lattice spacing a . LQCD can then be solved using computational methods. In order to obtain QCD results, simulations are carried out at various values of a and the results are extrapolated to the continuum limit, $a = 0$. LQCD is well established, for example mesonic masses have been predicted to a high precision in accordance with experiment. There is a certain freedom in choosing the lattice version of QCD. Since QCD and LQCD match only in the continuum limit, lattice artifacts are present in a simulation. The magnitude of these effects can be different for various lattice theories. Within the tmft collaboration (twisted mass, finite temperature) we employ the so-called twisted mass Wilson fermions. With parameters chosen accordingly, these show no lattice artifacts to leading order in a .

Investigating QCD at non-physical parameters is a promising approach to determine its phase diagram, because observations made here allow to extrapolate to the physical point (see Columbia Plot, which shows the phases of QCD with varied

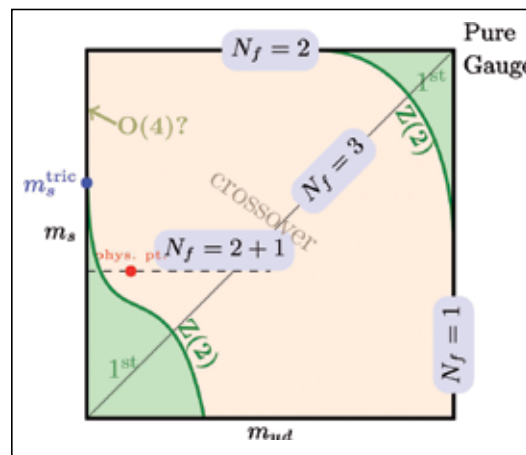


Fig 1: Columbia Plot

quark masses). A point of particular interest is the chiral limit, where the quarks have no mass (upper left corner in Columbia Plot). If the transition in this region would be of second order in the $O(4)$ universality class, it would favor a critical endpoint (CEP) in the physical world. However, this point is not directly accessible by lattice simulations and therefore a rigorous proof has not been given yet (although many model studies support this scenario). Clarifying this issue is the central point of our current efforts [1].

It has to be pointed out that present lattice simulations require an enormous amount of computing power. They consist of sampling the phase space using Hybrid Monte Carlo techniques, where the fermion matrix has to be inverted many times. The fermion matrix is a sparse quadratic matrix, typically of size of 108 times 108. Its inversion can most effectively be done with Krylov space solvers and appropriate pre-conditioning techniques, however it is by far the most time-consuming part of the algorithm. Simulating at smaller quark masses requires the more iterations of the solver. Big computing clusters like the LOEWE-CSC are therefore an essential tool, where a lot of Central Processing Units (CPUs)

can be used in a parallel fashion to carry out the computations [2].

Apart from that, the LOEWE-CSC offers also one Graphic Processing Unit (GPU) per node. GPUs offer a very promising performance per cost ratio which has come into focus also within the lattice community over the last years. However those solutions predominantly focus on NVIDIA hardware. To enable full utilization of the AMD based LOEWE-CSC cluster, and to establish a solid base to utilize future architectures, we are working on an OpenCL based LQCD application [3]. OpenCL is a vendor independent programming language for parallel programming. This allows us to program for the LOEWE-CSC cluster while retaining compatibility with NVIDIA based clusters and CPU-only systems. This will also allow support of future GPU-like architectures by Intel, so we can focus on performance optimization instead of code portage. In addition the platform independence of OpenCL enables us to write code that utilizes

all parts of a hybrid system without too much code duplication in implementations for different platforms.

Aiming at building a versatile LQCD solution we have first focused on achieving optimum performance for the core routines on LOEWE-CSC. Following careful analysis of the characteristics of the memory controller of the AMD GPUs we can achieve more than 60 double precision Gflops in the dslash calculation, the main part of the fermion matrix for a wide range of lattice sizes, a competitive performance with other NVIDIA-only solutions. As the problem is entirely memory-bandwidth bound further optimizations, improving the achieved Gflops at constant memory-bandwidth utilization, are possible and will be investigated. The lessons learned in optimizing the dslash part of the application will now allow us to build a full performance-optimized Lattice-QCD solution that will show efficient utilization of the LOEWE-CSC cluster and future systems.

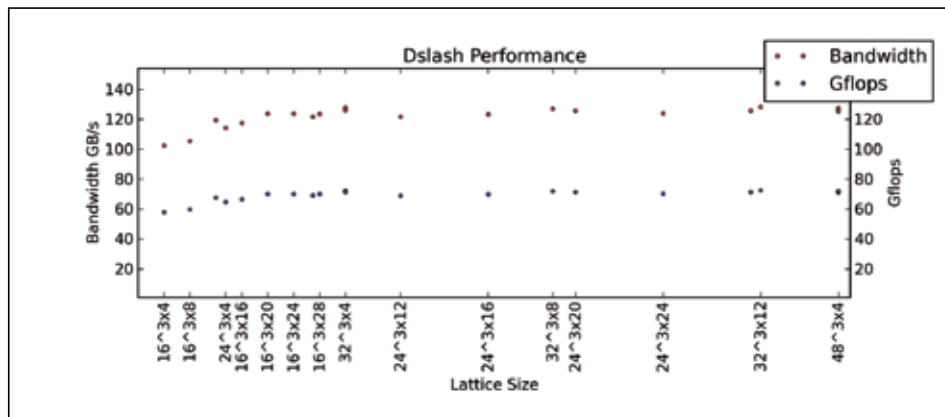


Fig 2: Performance of Dslash for various lattice sizes

References:

1. Philipsen, O et. al., The thermal QCD transition with two flavours of twisted mass fermions (2011) [arXiv:1102.4530].
2. Jansen, K. and Urbach, C., tmLQCD: a program suite to simulate Wilson Twisted mass Lattice QCD, Comput. Phys. Commun. 180 (2009) 2717.
3. Bach, M. et. al., LatticeQCD using OpenCL (2011) [arXiv:1112.5280].

Polyakov-loop effective theory on FUCHS-CSC

Dr. Michael Fromm, Dr. Jens Langelage, Dr. Stefano Lottini, Professor Dr. Owe Philipsen
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Die starke Wechselwirkung, die unter anderem die Bausteine der Atome zusammenhält, beschreiben Wissenschaftler mithilfe der Quantenchromodynamik (QCD). Lösen können sie die zugehörigen Formeln nur näherungsweise. Dazu müssen sie das Problem vereinfachen. Wissenschaftler der Universität Frankfurt haben eine neue effektive Theorie entwickelt, die die Quantenchromodynamik so löst.

So far, the most successful non-perturbative framework to calculate predictions from QCD is represented by its formulation on the lattice. Instead of dealing with a continuum space-time, one works on a discrete set of points, separated by a distance a . This allows for numerical simulations at different lattice spacings, which can be extrapolated to the continuum. Almost everything we know of the phase structure of QCD, i.e. which state matter presents itself in at a given choice of temperature, density, etc., is a result coming from *Lattice QCD*.

A realistic calculation in Lattice QCD is typically carried on by extensive use of state-of-the-art powerful computing facilities. If we want to describe a system with a nonzero baryon density (as realised in heavy-ion collisions, for instance the upcoming FAIR experiments – in particular the CBM experiment), the so-called *sign problem* arises. At non-zero density the fermion determinant is complex and cannot be used as a probability measure for Monte Carlo simulations. Currently only approximate techniques are available to circumvent this problem, which are valid for small densities. For this reason effective-theory approaches have been developed. These involve designing and/or deriving simplified theories that retain the features of full QCD as much as possible, while curing or at least weakening the sign problem.

In this project we have derived a novel Polyakov-loop effective theory [1] from the full lattice formulation of QCD by means of a combined *strong-coupling* and *hopping-parameter expansion*. The resulting effective theory is three-dimensional and its only variables are the *Polyakov loops*. The theory is valid at finite

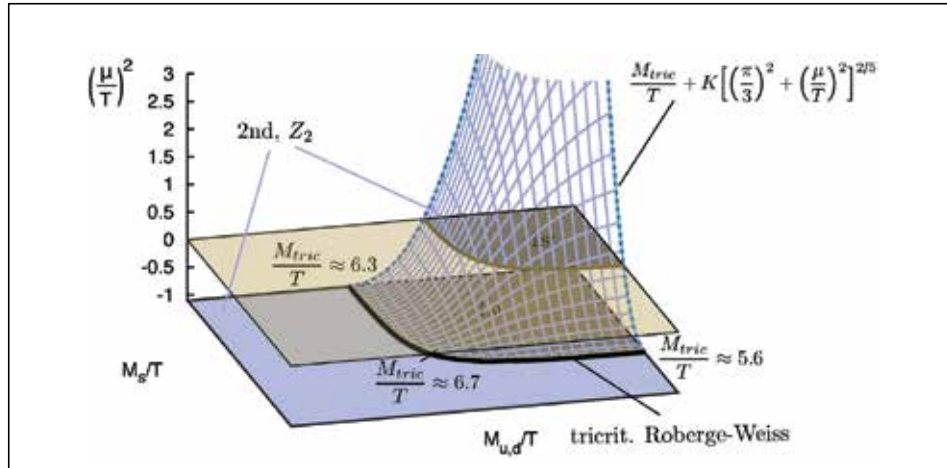
temperature and density with heavy quarks. It is able to give predictions (within 10% percent accuracy) for the location and the nature of the deconfinement phase transition between the hadronic phase and the *quark-gluon plasma*.

In particular, the effective theory has a much weakened sign problem, which can be either solved entirely by a reformulation in a flux representation, or simply simulated by brute force with agreeing results. As a first application we have calculated the weakening of the deconfinement phase transition with lighter quark masses and chemical potential for all values of the chemical potential.

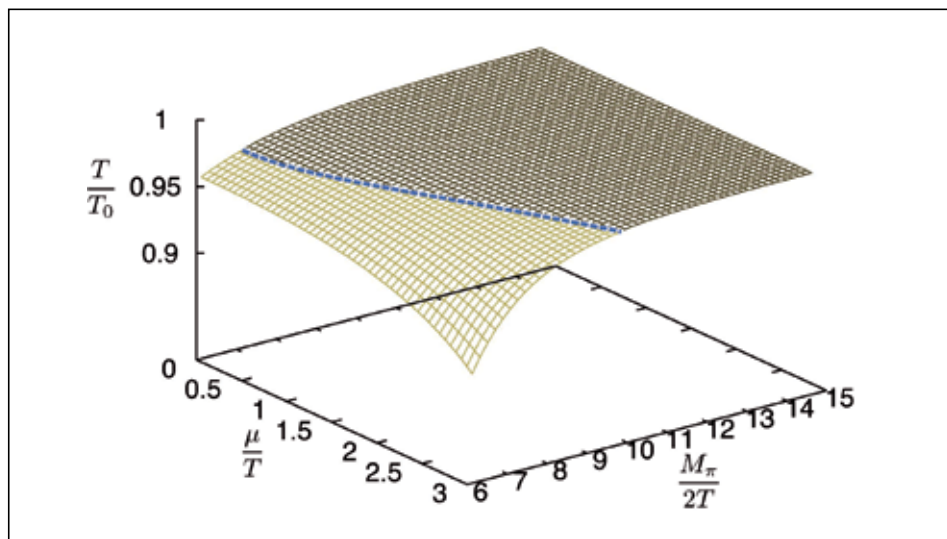
This permits a complete coverage of parameter space for heavy quarks and to make definite statements about the order of the deconfinement phase transition as a function of those parameters.

The numerical analysis of the phase space of the theory was performed on the FUCHS-CSC cluster and is planned to continue: the low-temperature regime still has to be systematically explored, and some of the higher-order corrections to the theory have yet to be included. In particular we would like to extend the analysis to lighter quarks.

So far, about 50.000 machine-hours of overall computation on the FUCHS have been employed to obtain the present results.



Nature of the transition at varying up,down quark mass, strange quark mass and (on the vertical axis) chemical potential for the Polyakov-loop effective theory. The surface represent a second-order transition; on the inside the transition is first-order, and on the outside it is an analytic cross-over.



Phase space of the theory with two "flavours" of quarks (up and down only). The horizontal axes are the pion mass and the chemical potential, the vertical axis is the temperature. Above the surface we have quark-gluon plasma. Along the blue line the transition is second-order.

References:

1. O. Philipsen et al., 'Centre symmetric 3d effective action for thermal SU(N) Yang-Mills from strong-coupling series', JHEP 1102:057 (2011) [arXiv: 1010.0951 (hep-lat)]; 'The QCD deconfinement transition for heavy quarks and all baryon chemical potentials', JHEP 1201:042 (2012).

Computation of transport coefficients on the LOEWE-CSC

Prof. Dr. Owe Philipsen, Christian Schäfer
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main

Das Quark-Gluon-Plasma beschäftigt Physiker weltweit. Es ist ein Materiezustand, der kurz nach dem Urknall existierte. Erzeugt wird diese Materie heute bei Kollisionen in Teilchenbeschleunigern wie dem LHC oder RHIC. Die Forscher simulieren das Quark-Gluon-Plasma auch am Computer, um seine Eigenschaften zu untersuchen. Das erfordert viel Rechenleistung.

At the Brookhaven National Laboratory (BNL) scientists have created a new state of matter [1]. With the Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) gold ions have been accelerated to relativistic velocities and smashed together. At the impact temperature rises to about four trillion degrees Celsius and matter forms the quark-gluon plasma (QGP). This new state of matter is also a research topic at the Large Hadron Collider (LHC) at CERN

The special feature of the quark-gluon plasma is the absence of confinement which describes the fact that colour charged particles can not be isolated. Furthermore comparison of the experimental data with hydrodynamic models (compare with figure 1) shows that the quark-gluon plasma behaves like an almost perfect fluid as shown in [2].

This fact allows using a theoretical treatment of the quark-gluon plasma in the framework of relativistic hydrodynamics. Although hydrodynamics can describe the evolution of the quark-gluon plasma, its basic parameters, the transport coefficients, must be measured experimentally or computed from the underlying microscopic theory.

The fundamental theory describing quarks and gluons is quantum chromodynamics which is part of the standard model of particle physics and deals with the strong force. In [3] a connection between relativistic hydrodynamics and quantum chromodynamics has been established which allows the computation of selected transport coefficients from first principles.

The strong coupling in quantum chromodynamics impedes the usual approach of a perturbative expansion in the coupling constant solving the

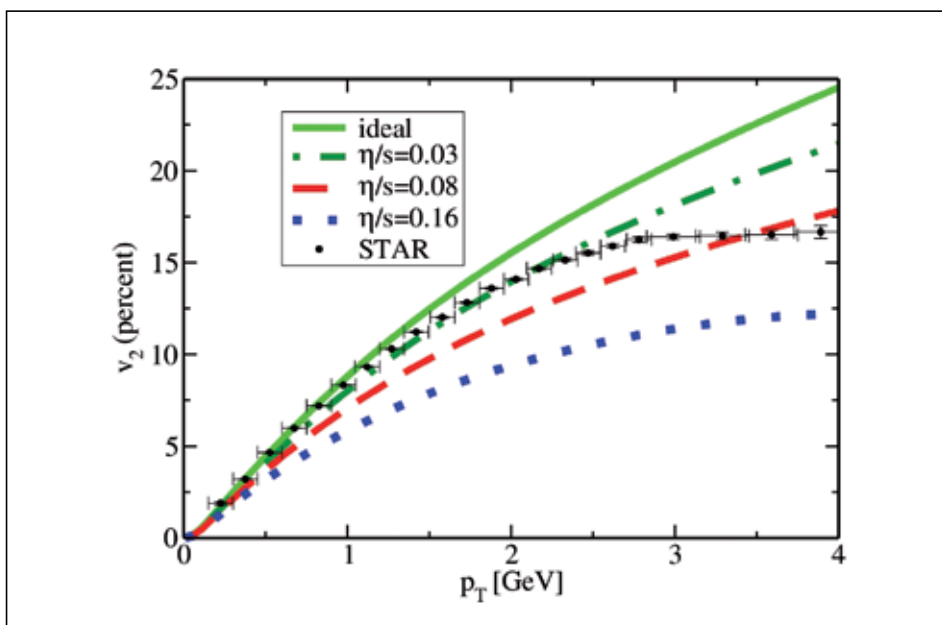


Fig 1: Elliptic flow of the quark-gluon plasma as a function of transverse momenta measured in the STAR experiment at RHIC in comparison to relativistic hydrodynamics models with different parameters.

equations of motion. An alternative access is provided by Monte Carlo simulations of lattice quantum chromodynamics. There spacetime is discretized by introducing a hypercubic lattice with periodic boundary conditions. In the limit of vanishing lattice spacing the continuum theory is reproduced. A different extent of spatial and temporal directions tunes the size of temperature and coupling constant, respectively.

The determination of transport coefficients in lattice quantum chromodynamics is non-trivial and indirect, because a euclidean lattice does not allow computation of real time quantities. This can be circumvented by transferring the relevant observable, the energy-momentum-tensor correlator, to momentum space. The extraction of transport coefficients requires small momenta compared to the system's temperature. Since small momenta correspond to large spatial extent, very large lattices are required.

The introduction of an anisotropic lattice where spatial and temporal lattice spacing differ from each other ease this aspect. Additionally we neglect quarks and work with a pure Yang-Mills theory which also reduces the numerical effort. This is physically justified due to the fact that gluons are the dominating modes in the computation of transport coefficients.

Nevertheless, to enable numerical computations high performance computing (HPC) is a necessary element in this research. Only HPC-clusters like the LOEWE-CSC provide the required computing power, memory and the ability to parallelize tasks.

A further gain in computing power can be obtained by using graphics processing units (GPUs). They offer a very promising performance per cost ratio which has also come into focus within the lattice community over the last years.

Our group has developed an OpenCL code for lattice quantum chromodynamics exploiting the LOEWE-CSC's GPUs. In the near future the GPU-specific progresses concerning optimization of the matrix inversion [4] can be transferred to the Monte Carlo algorithm and thus the GPUs can also be utilized to compute transport coefficients at maximum performance.

References:

1. Miklos Gyulassy; The QGP discovered at RHIC; 2004.
2. Paul Romatschke, Ulrike Romatschke; Viscosity Information from Relativistic Nuclear Collisions: How Perfect is the Fluid Observed at RHIC?; Phys.Rev.Lett. 99 2007.
3. Paul Romatschke, Dam Thanh Son; Spectral sum rules for the quark-gluon plasma; Phys.Rev. D80 2009.
4. Matthias Bach et. al. , LatticeQCD using OpenCL (2011).

Dynamical equilibration of the strongly-interacting parton matter

Collaborators: V. Ozvenchuk¹, O. Linnyk⁴, M. Gorenstein^{1,3}, W. Cassing⁴, E. Bratkovskaya^{1,2}

¹ Frankfurt Institute for Advances Studies, ² Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität, Frankfurt am Main, Germany, ³ Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Kiev, Ukraine, ⁴ Institut für Theoretische Physik, Justus-Liebig-Universität Giessen.

Scientists at the Frankfurt Institute for Advanced Studies study kinetic and chemical equilibration in 'infinite' parton-hadron matter within the Parton-Hadron-String Dynamics (PHSD) transport approach, which is based on generalized transport equations on the basis of the off-shell Kadanoff-Baym equations for Green's functions in phase-space representation.

The basis of the partonic phase description is the dynamical quasiparticle model (DQPM) matched to reproduce lattice QCD results

– including the partonic equation of state – in thermodynamic equilibrium. The transition from partonic to hadronic degrees of freedom is described by covariant transition rates for fusion of quark-antiquark pairs or three quarks (antiquarks), obeying flavor current conservation, color neutrality as well as energy-momentum conservation.

The 'infinite' matter is simulated within a cubic box with periodic boundary conditions initialized at various values for baryon density (or chemical potential) and energy density. The size of box is

fixed to 9^3 fm^3 . We start with light (u ; d) and strange quarks, antiquarks and gluons with random space positions and the momenta distributed exponentially, but *not with equilibrium* distribution.

A sign for chemical equilibration is the stabilization of the numbers of partons of the different species in time for $t \rightarrow \infty$. In Fig. 1(a) we show the particle abundances of the u , d , s quarks+antiquarks and gluons as functions of time for system initialized at energy density of 1.1 GeV/fm^3 .

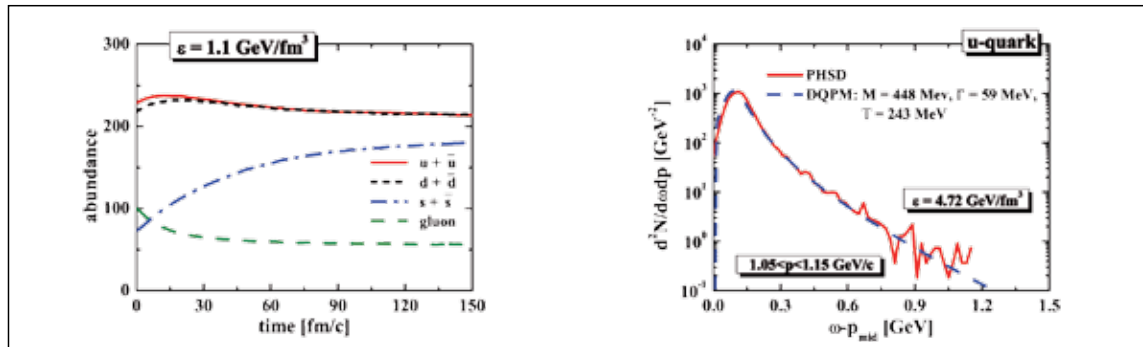


Figure 1:

(a) Abundances of the u (solid red), d (short-dashed black), s (dash-dotted blue) quarks+antiquarks and gluons (dashed green) as a function of time for system initialized at energy density of 1.1 GeV/fm^3 .

(b) The spectrum of u quarks (antiquarks) for system initialized at energy density of 4.72 GeV/fm^3 from the PHSD simulations (solid red) in comparison to the DQPM model (dashed blue).

Choosing the momenta of the partons in the narrow interval $|\mathbf{p}| \in [p_-, p_+]$ we construct the distribution of partons with given energy and momentum as

$$\frac{dN_{g(q,\bar{q})}}{d\omega dp} = \frac{V d_{g(q,\bar{q})}}{2\pi^3} |p_{mid}|^2 \omega p_{g(q,\bar{q})}(\omega, p_{mid}) n_{B(F)}(\omega/T),$$

where $p_{mid} = (p_+ - p_-)/2$. In Fig. 1(b) we show $d^2N/d\omega dp$ quarks obtained by the PHSD simulations of infinite partonic system as initialized at energy density of 4.72 GeV/fm^3 . For comparison, we present on the same plot the DQPM assumption for the respective distribution. We find a good agreement between the DQPM distribution and the result of the microscopic simulations.

Reference:

V. Ozvenchuk, E. Bratkovskaya, O. Linnyk, M. Gorenstein, W. Cassing, arXiv:1101.0218v1 [nucl-th].

Dileptons from the strongly interacting quark-gluon plasma (sQGP)

O.Linnyk^{1,3}, E.L.Bratkovskaya^{1,2}, V.Ozvenchuk², J.Manninen^{1,3}, W.Cassing³, C.M.Ko⁴

¹ Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt am Main, Germany, ² Frankfurt Institute for Advanced Studies, Germany,

³ Institut für Theoretische Physik, Justus Liebig Universität Gießen, Germany, ⁴ Cyclotron Institute and Department of Physics and Astronomy, Texas A&M University, College Station, Texas, USA

We address dilepton production in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}=200$ GeV by employing the parton-hadron-string dynamics (PHSD) off-shell transport approach [3,4,6].

Within the PHSD one solves generalized transport equations and consistently describes the full evolution of a relativistic heavy-ion collision [2]. We calculated the dilepton radiation from partonic interactions through the reactions of quark-antiquark with and without the gluon bremsstrahlung in the final state as well as through the gluon Compton scattering reactions in the early stage of relativistic heavy-ion collisions. Note that the differential cross sections for electromagnetic radiation were calculated with the same propagators as those incorporated in the PHSD transport approach [1]. By comparing our calculated results [3,4] to the data, we have studied the relative importance of different dilepton production mechanisms and addressed in particular the “PHENIX puzzle” of a large enhancement of dileptons in the mass range from 0.15 to 0.6 GeV as compared to the emission of hadronic states. Similar to our findings at SPS energies [5], we find that the

partonic dilepton production channels are visible in the intermediate-mass region between the ϕ and J/Ψ peaks [3,4,6,9]. Our studies have demonstrated that the observed excess in the low mass dilepton regime cannot be attributed to partonic productions as expected earlier. Thus the “PHENIX puzzle” still has no explanation from the theoretical approaches so far. The solution has to be relegated to the experimental side. In fact, the STAR collaboration has taken independent dilepton data for centralities different from the PHENIX measurements and also with different detector acceptances. Our calculations allow to match with the different experimental conditions and thus to provide a ‘theoretical link’ between the different measurements. To this extent, we have provided our predictions for the conditions of the STAR experiment, which happen to be in a rough agreement with the preliminary data [4].

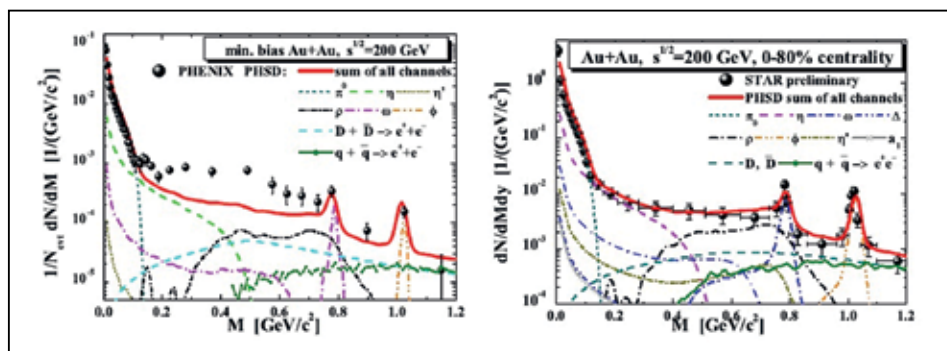


Figure 1:
The PHSD results p for the mass differential dilepton spectra in case of inclusive Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}}=200$ GeV in comparison to the data from PHENIX (left pannel) and STAR (right pannel) Collaborations.

References:

1. O. Linnyk, J.Phys.G G38 (2011) 025105.
2. E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, V.P. Konchakovski, O. Linnyk, Nucl.Phys. A856 (2011) 162-182.
3. O. Linnyk, W. Cassing, E.L. Bratkovskaya, J. Manninen, Nucl.Phys. A855 (2011) 273-276.
4. O. Linnyk, W. Cassing, J. Manninen, E.L. Bratkovskaya, C.M. Ko, arXiv:1111.2975, Phys. Rev. C (in print).
5. O. Linnyk, E.L. Bratkovskaya, V. Ozvenchuk, W. Cassing, C.M. Ko, Phys.Rev. C84 (2011) 054917.
6. J. Manninen, E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, O. Linnyk, Eur.Phys.J. C71 (2011) 1615.
7. O. Linnyk, E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, J.Phys.Conf.Ser. 316 (2011) 012028.
8. O. Linnyk, E.L. Bratkovskaya, J. Manninen, W. Cassing, J.Phys.Conf.Ser. 312 (2011) 012010.
9. J. Manninen, E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, O.Linnyk, J.Phys.Conf.Ser. 270 (2011) 012039.
10. O. Linnyk, E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, PoS BORMIO2011 (2011) 029.