

# Forschung im HLRN-Verbund

# 2015

Die Inhalte aller Beiträge und deren Darstellungen liegen in der Verantwortung der jeweiligen Autoren. Alle verwendeten Namen von eingetragenen Marken, Produkten, Services und Logos sind Eigentum ihrer jeweiligen Inhaber.

Der HLRN kann für Interessenten Kontakt zu Autoren einzelner Beiträge herstellen. Anfragen dazu können per E-Mail an

[contact@hlrn.de](mailto:contact@hlrn.de)

gestellt werden oder an die

Geschäftsstelle des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN  
c/o Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Dr. Stefan Wollny  
Takustraße 7, 14195 Berlin  
Telefon: +49 30 84185-310  
Telefax: +49 30 84185-311  
E-Mail: [zulassung@hlrn.de](mailto:zulassung@hlrn.de)

ISBN 978-3-00-051481-4

PDF-Datei dieses Berichts:  
<https://www.hlrn.de/HLRN-Report-2015.pdf>

© 2015 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Herausgeber:  
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Takustraße 7, 14195 Berlin  
Telefon: +49 30 84185-0  
Telefax: +49 30 84185-125  
E-Mail: [info@zib.de](mailto:info@zib.de)

Redaktion:  
Prof. Dr.-Ing. Thomas Rung, Technische Universität Hamburg-Harburg  
Dr. Christian Tuma, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Druck:  
Brandenburgische Universitätsdruckerei und Verlagsgesellschaft Potsdam mbh

## Vorwort des Verwaltungsrates

Der Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) ist ein Zusammenschluss der Länder Berlin, Brandenburg, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein mit dem Ziel, das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Norddeutschland zu fördern und damit insbesondere die Spitzenforschung zu unterstützen.

Viele Wissenschaftsdisziplinen können sich im internationalen Wettbewerb nur durch die Nutzung geeigneter Rechnerinfrastrukturen behaupten. So ist auch eine Vielzahl typisch norddeutscher Spitzenforschungsaktivitäten erst durch die Inbetriebnahme des gemeinsamen Hochleistungsrechnersystems im Jahr 2002 möglich geworden.

Mittlerweile ist dieses System, das aus zwei Komponenten besteht, die am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin (ZIB) und am Rechenzentrum der Leibniz Universität in Hannover (LUIS) installiert worden sind, aus der deutschen Wissenschaftslandschaft nicht mehr wegzudenken.

Aktuell steht den Nutzern bereits die dritte Rechnergeneration HLRN-III zur Verfügung. Derzeit läuft das Verfahren, das in 2018 dessen Ablösung durch einen HLRN-IV ermöglichen soll. Der Ausschuss Forschungsbauten, ein Unterausschuss des Wissenschaftsrates, hat schon positiv über eine Antragskizze entschieden, die im ersten Schritt notwendig ist, um eine Mitfinanzierung des HLRN-IV durch den Bund zu erreichen.

Es sind bereits in 2005 und 2011 Berichte über die wissenschaftlichen Projekte auf dem HLRN-System erschienen. Der HLRN-Verwaltungsrat freut sich, dass nun ein weiterer Projektbericht vorgelegt werden kann. Er wünscht allen Interessierten viel Freude beim Lesen.

Der Erfolg des HLRN-Verbunds ist nur durch das große Engagement vieler Personen möglich geworden, und der Verbund wird auch nur durch dieses Engagement weiterleben können. Der Verwaltungsrat möchte diesen beteiligten Personen, die nicht alle namentlich genannt werden können, ganz herzlich danken. Der Dank des Verwaltungsrates geht an die Technische Kommission und die beiden Betreiberzentren, das LUIS in Hannover und das ZIB in Berlin, die in hervorragender Weise die Realisierung und den Betrieb des Vorhabens „HLRN“ übernommen haben, an die Fachberater, die im unermüdlichen Einsatz überall an den Hochschulen der norddeutschen Länder Wissenschaftler bei der Nutzung des HLRN unterstützen, sowie an den Wissenschaftlichen Ausschuss, der in gewissenhafter Weise dafür Sorge trägt, dass die hohe wissenschaftliche Qualität der Projekte auf dem HLRN gewährleistet wird. Der Dank des Verwaltungsrates geht aber natürlich auch an die Nutzer des HLRN. Ihre Projekte sind es, die das Hochleistungsrechnen in Norddeutschland tragen und von denen eine Auswahl aus allen Fachgebieten in diesem Forschungsbericht dargestellt wird.

*Steffen Sprüssel*

Ministerium für Soziales, Gesundheit, Wissenschaft und  
Gleichstellung des Landes Schleswig-Holstein,  
Vorsitzender des Verwaltungsrates des HLRN



## Vorwort der Technischen Kommission

Seit 2001 unterstützt der HLRN-Verbund das Hoch- und Höchstleistungsrechnen für Wissenschaft und Forschung in mittlerweile sieben Bundesländern. Er betreibt für die Spitzenforschung im norddeutschen Raum einen Hochleistungsrechner an den zwei Standorten Leibniz Universität Hannover und Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, der dem stetig steigenden Kapazitätsbedarf in den unterschiedlichen wissenschaftlichen Disziplinen Rechnung trägt. Beginnend mit einer Gesamtleistung von 4 TeraFlop/s des HLRN-I, von 300 TeraFlop/s des HLRN-II steht den Wissenschaftlern derzeit der HLRN-III mit einer Peakleistung über beide Standorte von 2,6 PetaFlop/s zur Verfügung und gehört damit zur Spitzengruppe der deutschen HPC-Systeme.

Mindestens genauso wichtig wie die Bereitstellung der Rechnerressourcen ist die Unterstützung und Beratung der Wissenschaftler durch das überregionale Kompetenznetzwerk des HLRN, das sich ebenfalls stets weiterentwickelt hat. Der effiziente Einsatz von Hoch- und Höchstleistungsrechnern als Instrument für die Wissenschaft ist ohne kompetente Unterstützung der Nutzer nicht mehr denkbar und somit das HLRN-Kompetenznetzwerk so wertvoll. Die Nutzer im HLRN-Verbund können flächende-

ckend und fachbezogen auf Berater und Serviceanbieter zugreifen, die sie für eine erfolgreiche Lösung ihres fachlichen Problems benötigen. Neben den unmittelbar dem HLRN zugeordneten Einrichtungen sind Forschergruppen und Lehrstühle der beteiligten Länder aktiv, um insbesondere die methoden- mit der anwenderspezifischen Forschung zu verknüpfen. Lokale Kompetenzstrukturen auf Länder- und Hochschulebene bilden ebenfalls einen wichtigen Bestandteil im HLRN-Kompetenznetzwerk, da sie den Schritt von der lokalen HPC-Infrastruktur zur Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern befördern.

Der aktuell vorgelegte Bericht über wissenschaftliche Projekte am HLRN belegt sehr eindrucksvoll den Bedarf an HPC-Kapazität und die Bedeutung des Verbundes für die Wissenschaftler in den HLRN-Ländern. Die Verfügbarkeit modernster Hochleistungsrechner und kompetenter Beratung ist dabei essentiell und stellt eine wesentliche Voraussetzung für exzellente Forschung in den betreffenden Ländern dar. Dies ist für alle im HLRN-Verbund aktiv tätigen Kolleginnen und Kollegen und auch speziell für die Technische Kommission Ansporn dafür, unser Konzept zur HPC-Förderung fortzuführen, kontinuierlich weiterzuentwickeln und auszubauen.

*Christa Radloff*

IT- und Medienzentrum der Universität Rostock,  
Vorsitzende der Technischen Kommission des HLRN



# Inhalt

<b>Einleitung</b>	1
<b>Projekte aus dem Gebiet der Biologie</b>	
Tau–microtubule interaction resolved by molecular dynamics simulations <i>M. Igaev, F. Sündermann, W. Junge, R. Brandt</i>	4
Varianz-basierte Trennung von funktionellen ribosomalen Komplexen in hochauflösender Kryo-Elektronenmikroskopie <i>J. Loerke, E. Behrmann, C. M. T. Spahn</i>	6
BeesBook: Analysis of Social Networks in Honeybees <i>F. Wario, B. Wild, M. Ziese, B. Laubisch, S. Wichmann, A. Rau, A. Saadeh, T. Ludwig, T. Landgraf</i>	8
<b>Projekte aus dem Gebiet der Chemie</b>	
Quantum–Classical Coupling in Grand-Canonical Adaptive Resolution Simulations <i>A. Agarwal, L. Delle Site</i>	12
Computational Screening of Membrane Channel Selectivity. From Biology to the Design of Selective Pores <i>K. Atkovska, J. Hub</i>	14
Berechnung von Protonentransferpfaden in Cytochrom-C-Oxidase <i>M. Bagherpoor Helabad, P. Imhof</i>	16
Protein–Protein and Protein–DNA Interaction in Hormone Receptors <i>M. Bagherpoor Helabad, P. Imhof</i>	18
Kollektive Phänomene in Lipidmembranen und Blockcopolymeren: Phasenbildung, Fusion, Abschnürung von Vesikeln und Strukturbildung <i>I. A. Barragán-Vidal, M. Fuhrmans, Y. G. Smirnova, G. Zhang, M. Müller</i>	20
All-atom molecular dynamics investigations of the adhesion mechanisms at the contact interface of TiO <sub>2</sub> nanoparticles in films and aggregates <i>L. Colombi Ciacchi, J. Laube, S. Potthoff</i>	22
Theoretical investigation of luminescent defects in diamond <i>P. Deák, B. Aradi, T. Frauenheim</i>	24
Structure and dynamics of ammonium cations in NH <sub>4</sub> -exchanged zeolites <i>M. Fischer, I. Spieß, R. X. Fischer</i>	26
Hydrolysis in dealumination and desilication of zeolite frameworks and hydroxylation of silica surface defects <i>I. Goikoetxea, J. Sauer</i>	28
Verständnis und Kontrolle der Kommunikation in komplexen nanoskopischen Systemen <i>L. Groß, T. Steenbock, C. Herrmann</i>	30
Membrane protein reactions and lipid interactions <i>F. Guerra, S. Lorch, A.-N. Bondar</i>	32
Molecular Dynamic Simulations of the Adsorption of Lysozyme and Chymotrypsin on Silica and Titania <i>N. Hildebrand, S. Köppen, L. Colombi Ciacchi</i>	34
Strukturelle und kinetische Modellierung der GPCR G-Protein Kopplung <i>P. W. Hildebrand, A. S. Rose</i>	36
Neue theoretische Methoden zur Vorhersage von Verteilungskoeffizienten von Pharmazeutika und technisch relevanten Stoffen im System Vesikel/Wasser <i>S. Jakobtorweihen, E. Ritter, D. Yordanova, I. Smirnova</i>	38

Exploring the Conformational Dynamics of mis-paired DNA and its Implications for Recognition by Repair Enzymes <i>N. Kanaan Izquierdo, M. Bagherpoor Helabad, P. Imhof</i> . . . . .	40
Theoretische Untersuchungen zur Kinetik von Vanadiumoxidclustern auf einem Ceroxidfilm <i>T. Kropp, C. Penschke, J. Paier</i> . . . . .	42
Electronic structures and adsorption properties of pyridine derivatives: Effects of substrate and ligand <i>S. Lei, B. Paulus</i> . . . . .	44
Density functional theory studies on the water adsorption and dissociation on iron oxide surfaces <i>X. Li, J. Paier</i> . . . . .	46
Fabrication of 2D magnetic nanostructures via a knowledge-based biomimetic approach <i>S. Lid, S. Köppen, L. Colombi Ciacchi</i> . . . . .	48
Strukturaufklärung doppelwandiger tubularer Farbstoffaggregate <i>J. Megow</i> . . . . .	50
Oligomerisation and Transport Properties of the Photoreceptor Rhodopsin in its Active and Inactive States <i>A. Mey, J. Schöneberg</i> . . . . .	52
Molecular dynamics simulations of motor and proton transport proteins <i>C. Mielack, S. Adam, F. Guerra, S. Lorch, S. Milenkovic, C. Spakowski, A.-N. Bondar</i> . . . . .	54
Antibiotics: Molecular dynamics simulations of the structure and function of lantibiotics <i>A. de Miguel, M. A. Mroginski</i> . . . . .	56
Interaction of water with metal oxide surfaces <i>R. E. Ovcharenko, E. N. Voloshina</i> . . . . .	58
Theoretical Investigation of MgF <sub>2</sub> Surface Structures <i>B. Paulus, C. Müller, Z. Kaawar, E. Kanaki</i> . . . . .	60
Theoretische Untersuchung zu Skutteruditen als thermoelektrische Materialien <i>B. Paulus, L. Hammerschmidt, M. Quennet</i> . . . . .	62
Graphene nanoflakes on Ag(111) and Au(111) surfaces <i>B. Paulus, L. E. Marsoner Steinkasserer</i> . . . . .	64
First-principles investigations of AlO <sub>x</sub> (OH) <sub>y</sub> F <sub>z</sub> bulk and surfaces and their interaction with water <i>B. Paulus, J. H. Budau</i> . . . . .	66
Weak interactions in layered graphene derivatives – a high level <i>ab-initio</i> study <i>B. Paulus, L. E. Marsoner Steinkasserer</i> . . . . .	68
Dichtefunktional-Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität einer Vanadiumoxid-Monolage auf Cerdioxid <i>C. Penschke, T. Kropp, J. Paier</i> . . . . .	70
Electronic flux densities in D <sub>2</sub> <sup>+</sup> and HD <sup>+</sup> molecular ions <i>J. F. Pérez-Torres, B. Paulus</i> . . . . .	72
Theoretical prediction of the structure and Circular Dichroism spectra of ZnO-binding peptides <i>C. Perl, S. Lid, S. Köppen, L. Colombi Ciacchi</i> . . . . .	74
Accurate alkane conversion entropies and models for the dissolution mechanism in zeolites by first principles <i>G. Piccini, F. D. Fischer, J. Sauer</i> . . . . .	76
Theoretical investigations of kesterites as thin film solar cell adsorbers <i>M. Quennet, B. Paulus</i> . . . . .	78
Exploring Thermoelectric Properties of Novel Materials <i>S. Rigamonti, P. Pavone, M. Troppenz, C. Draxl</i> . . . . .	80
„Ab initio“ Molekulardynamik-Simulationen von Ionenpaaren und Peptiden in Wasser <i>B. Schmidt, E. Pluharova, C. Schütte</i> . . . . .	82
Protonation dynamics of phytochromes <i>A. Takiden, M. A. Mroginski</i> . . . . .	84
Biologische Katalyse: Moleküldynamiksimulationen an [NiFe]-Hydrogenasen und Kohlenstoffmonoxid-Dehydrogenasen <i>T. Utesch, M. A. Mroginski</i> . . . . .	86
Functionalization of graphene on metals <i>E. N. Voloshina</i> . . . . .	88



Adaptive Resolution Simulations (GC-AdResS) beyond equilibrium <i>H. Wang, L. Delle Site</i> . . . . .	90
Simulation der Dynamik von Polymersystemen: Strukturbildung in mehrkomponentigen Systemen <i>U. Welling, W. H. Li, J. C. Orozco Rey, L. Schneider, M. Müller</i> . . . . .	92
Understanding metal oxide/water interaction from first principles calculations <i>J. A. Wirth, S. Heiden, P. Saalfrank</i> . . . . .	94
<b>Projekte aus dem Gebiet der Geowissenschaften</b>	
Simulation der Langzeittrends von tidalen Systemen der Westküste von Schleswig-Holstein <i>J. Becherer, H. Burchard, U. Gräwe, H. Rennau, K. Purkiani</i> . . . . .	98
Ausbreitung und Effekte des Schmelzwassers sind maßgeblich durch kleine Strömungswirbel geprägt <i>E. Behrens, C. W. Böning</i> . . . . .	100
Das Agulhasstromsystem   Regionale Bedeutung und Globale Auswirkungen <i>A. Biastoch, M. Scheinert</i> . . . . .	102
Simulation von Klima- und Nährstoffeintragszenarien für das Ökosystem der Ostsee <i>H. Burchard, R. Friedland</i> . . . . .	104
Modellierung früh-diagenetischer Prozesse in den Sedimenten der Ostsee <i>H. Burchard, T. Neumann, H. Radtke</i> . . . . .	106
Plume–Plate interaction in 3D mantle flow – Revealing the role of internal plume dynamics on global hot spot volcanism <i>J. Dannberg, R. Gaßmüller, V. John</i> . . . . .	108
Future evolution of deoxygenation in the Tropical Oceans <i>O. Duteil, A. Oschlies, C. W. Böning</i> . . . . .	110
Veränderungen der atlantischen Zirkulationssysteme in hochauflösenden Ozeanmodellen: Regionale Auswirkungen globaler Klimaprojektionen <i>K. Getzlaff, M. Scheinert, A. Biastoch, C. W. Böning</i> . . . . .	112
Untersuchungen der Bilanzen statistischer Momente der Turbulenz in der atmosphärischen Grenzschicht der Polargebiete bei inhomogener Meereisverteilung <i>T. Gollnik, C. Lüpkes, P. Lemke</i> . . . . .	114
Rekonstruktion des Zustandes der Ostsee für den Zeitraum 1980–2014 <i>U. Gräwe, T. Seifert</i> . . . . .	116
Abschätzung der Sedimenttransporte im gesamten Watt <i>U. Gräwe, H. Burchard</i> . . . . .	118
Darstellung der konvektiven Grenzschicht während Kaltluftausbrüchen in Wetter- und Klimamodellen <i>M. Gryschka, J. Fricke, S. Raasch</i> . . . . .	120
Entrainment and activation of aerosols in shallow cumulus clouds <i>F. Hoffmann, S. Raasch</i> . . . . .	122
Untersuchung der Dynamik und Einschichtung von Einströmen in die zentrale Ostsee <i>P. Holtermann, H. Burchard, L. Umlauf, U. Gräwe</i> . . . . .	124
Understanding the dynamics and change in the Arctic Ocean <i>T. Jung, Q. Wang, S. Danilov, X. Wang</i> . . . . .	126
Ice sheet–ice shelf–ocean interaction in the marginal seas of the Southern Ocean <i>T. Kanzow, R. Timmermann, S. Goeller, M. A. Kasper, Y. Nakayama</i> . . . . .	128
Ozean–Gletscher-Wechselwirkung auf dem Kontinentalschelf Nordost-Grönlands <i>T. Kanzow, J. Schaffer, R. Timmermann</i> . . . . .	130
Numerische Simulation zur Wechselwirkung der Atmosphäre mit der Tragflügelumströmung <i>C. Knigge, S. Raasch</i> . . . . .	132
Einfluss von Remineralisierungsparametern auf globale biogeochemische Ozeanmodelle <i>I. Kriest, A. Oschlies</i> . . . . .	134
Mittelfristige Klimaprognose – The role of the stratosphere for decadal climate prediction <i>U. Langematz, A. Kubin, J. Scheffler</i> . . . . .	136

Quantification of uncertainties of solar induced climate variability (SOLIC) <i>U. Langematz, B. Ayarzagüena, M. Kunze</i> . . . . .	138
Simulation und Vorhersagbarkeit des gegenwärtigen Klimas <i>M. Latif, W. Park, J. Harlass, G. Zhou</i> . . . . .	140
Climatic evolution in the marginal seas of the Northwest Pacific Ocean since the last glacial period until present day: Changes in the formation of North Pacific Intermediate Water and their implications on the Pacific realm <i>G. Lohmann, P. Scholz, X. Gong, L. Lembke-Jene, R. Tiedemann</i> . . . . .	142
Numerische Untersuchungen zum Mineralstaubkreislauf für quartäre und rezente Klimazustände <i>U. Merkel, M. Schulz</i> . . . . .	144
Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction (SHARP) <i>S. Meul, S. Oberländer-Hayn, C. Gellhorn, U. Langematz</i> . . . . .	146
Verbesserung der Vorhersagefähigkeit eines gekoppelten Ozean-biogeochemischen Modells für die Nord- und Ostsee durch Datenassimilation <i>L. Nerger, S. N. Losa, W. Hiller</i> . . . . .	148
Schwankungen des tropischen Regengürtels während des mittleren Miozäns <i>M. Prange, A. Frigola, M. Schulz</i> . . . . .	150
Hochaufgelöste Grobstruktursimulationen der diabatischen Grenzschicht im Stadtgebiet von Macau <i>S. Raasch, M. Keck, T. Gronemeier</i> . . . . .	152
Arctic Climate Change Simulations with the HIRHAM Regional Climate Model <i>A. Rinke, H. Matthes, I. Hebestadt, K. Dethloff</i> . . . . .	154
Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstruments SCIAMACHY <i>A. Rozanov, K. Weigel, W. Lotz, M. Vountas, J. P. Burrows</i> . . . . .	156
Variability of poleward transports in the eastern boundary current of the Southeast Atlantic <i>M. Schmidt, V. Mohrholz, L. Siegfried</i> . . . . .	158
Evaluation of the multi-resolution global climate model ECHAM6–FESOM <i>D. Sidorenko, T. Jung, S. Danilov, H. F. Gößling, T. Rackow, J. Schröter, D. Sein, T. Semmler, Q. Wang, X. Wang, C. Wekerle</i> . . . . .	160
Solar cycle effects on climate and their modulation by decreasing solar activity and climate change (SOMOSA) <i>T. Spiegl, U. Langematz, R. Klein</i> . . . . .	162
Turbulenzmessungen über heterogenen Landoberflächen implizieren Unsicherheiten bei der Bestimmung des Oberflächen–Atmosphäre-Austauschs <i>M. Sühring, S. Raasch</i> . . . . .	164
Hochauflösende Modellstudien zur Erhöhung des Flächenenergieertrags in Windparks durch neuartige Anlagen- und Parkregelungskonzepte <i>L. Vollmer, M. Bromm, G. Steinfeld</i> . . . . .	166
Development of a New European Wind Atlas <i>B. Witha, M. Dörenkämper, G. Steinfeld, L. Vollmer</i> . . . . .	168
<b>Projekte aus dem Gebiet der Ingenieurwissenschaften</b>	
Overset LES zur numerischen Untersuchung aerodynamischer Lärmquellmechanismen <i>P. Bernicke, R. A. D. Akkermans</i> . . . . .	172
Skalenauflösende Simulationen von Strömungsgeräuschen <i>N. Buchmann, R. A. D. Akkermans</i> . . . . .	174
Hochwertige Turbulenzmodellierung für Anwendungen der Flugzeugaerodynamik <i>R.-D. Cécora, R. Radespiel</i> . . . . .	176
Poröse Medien mit definierter Porenstruktur in der Verfahrenstechnik <i>E. Dück, Y. Ma, G. Brenner</i> . . . . .	178
Investigation of Highly Loaded, Over-the-Wing Installed Turboprop Inlets for High-Lift Aircraft <i>J. Friedrichs, C. Atalayer</i> . . . . .	180
DSMC-Simulation einer verdünnten Edelgasströmung innerhalb eines Kaltgas-Arcjets <i>T. Frieler, R. Groll</i> . . . . .	182

3D Simulation einer kompressiblen Edelgasströmung innerhalb eines thermischen Lichtbogentriebwerks <i>J. Gomez, R. Groll</i> . . . . .	184
Untersuchung aerodynamischer Installationseffekte eines UHBR-Triebwerks in Überflügel-Position an einer Hochauftriebskonfiguration <i>C. Heykena, J. Friedrichs</i> . . . . .	186
Direct numerical simulation of turbulent flow in porous media <i>Y. Jin, M.-F. Uth, A. Kuznetsov, H. Herwig</i> . . . . .	188
Numerische Simulation von Strömungs- und Wärmetransportvorgängen auf strukturierten Oberflächen in Plattenwärmeübertragern mit runder Bauform <i>N. Kornev, J. Turnow</i> . . . . .	190
Study of the flow in the gap between the ship hull and the river bottom in shallow water using a hybrid URANS-LES method <i>N. Kornev, I. Shevchuk</i> . . . . .	192
Lebensdauervorhersage für Düsenstrukturen unter Strömungsbelastungen <i>D. Kowollik, M. C. Haupt</i> . . . . .	194
Entwicklung und Validierung einer neuartigen strukturbasierenden Methode zur künstlichen Generierung von Einstromrandbedingungen für LES <i>H. Kröger, N. Kornev</i> . . . . .	196
TARGETS. Targeted Advanced Research for Global Efficiency of Transportation Shipping <i>J. Kröger, T. Rung</i> . . . . .	198
KISIKOS – Kinetische Simulation komplexer Strömungen <i>K. Kucher, Y. Wang, M. Geier, M. Krafczyk</i> . . . . .	200
Numerische Untersuchung des Verhaltens von Längswirbeln an Tragflügeln in Hochauftriebskonfiguration <i>T. Landa, R. Radespiel</i> . . . . .	202
Viskose Mehrkörper-Hydrodynamik für Offshore-Schlepper im Seegang <i>X. Luo, F. Matin, T. Rung</i> . . . . .	204
Numerical Simulation of Engine-Inlet Stall with Algebraic DDES and RSM as Underlying RANS Model <i>R. Radespiel, D. G. François</i> . . . . .	206
Efficiency Improvement of Active Blowing in Coandă-Flaps through the Generation of Three-Dimensional Longitudinal Vortices <i>R. Radespiel, D. G. François</i> . . . . .	208
Entwicklung eines analytischen Modells zur Berechnung von Gesamtreibmomenten an Wälzlagerungen unter Ölschmierung <i>H. Schwarze, X. Si</i> . . . . .	210
Aeroelastische Analysen von Flügeln mit aktiver Zirkulationskontrolle <i>K. Sommerwerk, M. C. Haupt</i> . . . . .	212
Instationäre Aerodynamik von Tragflügeln bei kleinen Reynoldszahlen II <i>R. Wokoeck, R. Radespiel</i> . . . . .	214
GranFlow – Modellierung der Bewegung verflüssigter granularer Ladung <i>W. R. Wriggers, T. Rung</i> . . . . .	216
Numerical Simulation of Cavitation Erosion using Coupled Euler-Lagrange Models <i>S. Yakubov, T. Maquil, T. Rung</i> . . . . .	218
<b>Projekte aus dem Gebiet der Physik</b>	
Simulation korrelierter Elektronen- und Ionendynamik atomarer Cluster in intensiven Femtosekunden XUV-Laserfeldern <i>M. Arbeiter, T. Fennel</i> . . . . .	222
Double Parton Distributions <i>G. Bali, L. Castagnini, S. Collins, M. Diehl, M. Engelhardt, J. Gaunt, B. Gläbke, A. Sternbeck, A. Schäfer</i> . . . . .	224
Spherical Couette dynamos <i>A. Barik, J. Wicht, U. R. Christensen, A. Tilgner</i> . . . . .	226

Transportphänomene und Nichtgleichgewicht in stark korrelierten Materialien <i>M. Behrmann, A. Hampel, R. Richter, C. Piefke, L. Boehnke, F. Lechermann</i> . . . . .	228
Elektronische Korrelation und Spin–Bahn-Kopplung in strukturierten Perowskit-Schichtsystemen <i>M. Behrmann, C. Piefke, F. Lechermann</i> . . . . .	230
First-principle simulations of classical and quantum charged-particle systems <i>M. Bonitz, T. Ott</i> . . . . .	232
Leading-order hadronic contribution to $g-2$ from 2+1+1 flavour lattice QCD <i>F. Burger, G. Hotzel, K. Jansen, M. Müller-Preussker, M. Petschlies</i> . . . . .	234
Lattice QCD at non-zero temperature: taking charm and strange quarks into account <i>F. Burger, M. Müller-Preussker</i> . . . . .	236
Flavor Physics from the Lattice <i>A. Chambers, R. Horsley, Y. Nakamura, H. Perlt, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Shanahan, H. Stüben, A. Thomas, R. Young, J. Zanotti</i> . . . . .	238
The running coupling <i>M. Dalla Brida, P. Fritzsche, T. Korzec, A. Ramos, S. Schaefer, R. Sommer, H. Simma, S. Sint, F. Stollenwerk, U. Wolff</i> . . . . .	240
First-principles study of topological spin textures at surfaces <i>B. Dupé, F. Otte, S. Meyer, M. Böttcher, S. Heinze</i> . . . . .	242
Nonequilibrium dynamical mean-field calculations for ultrafast dynamics in strongly correlated systems <i>M. Eckstein, K. Balzer</i> . . . . .	244
Imaging and switching the magnetic state of molecular magnets on surfaces <i>P. Ferriani, F. Otte, S. Heinze</i> . . . . .	246
Effects of charm-like quarks in lattice QCD <i>J. Finkenrath, F. Knechtli, B. Leder, R. Sommer, F. Stollenwerk</i> . . . . .	248
Encounters of neutron stars <i>E. Gafton, C. Lämmerzahl, L. Linsen, S. Rosswog, E. Tejeda</i> . . . . .	250
Numerical Simulations of Large $N$ Yang–Mills gauge theories <i>M. Garcia, S. Schaefer, R. Sommer</i> . . . . .	252
<i>A priori</i> and <i>a posteriori</i> testing of subgrid-scale closures in compressible MHD turbulence <i>P. Grete, D. G. Vlaykov, W. Schmidt, D. R. G. Schleicher</i> . . . . .	254
3D radiation transfer models of stars and exoplanets <i>P. Hauschildt</i> . . . . .	256
Study of the pion mass splitting in twisted mass lattice QCD <i>K. Jansen, B. Kostrzewa, M. Müller-Preussker, C. Urbach</i> . . . . .	258
Untersuchung der Plasmaumgebung des Kometen 67P/Churyumov–Gerasimenko <i>C. Koenders, C. Götz, K.-H. Glaßmeier</i> . . . . .	260
Modelling star and planet formation with the FLASH code <i>B. Körtgen, D. Seifried, R. Banerjee, E. Vázquez-Semadeni</i> . . . . .	262
First-principles investigations of functionalized semiconductor nanostructures <i>M. Lorke, T. Frauenheim</i> . . . . .	264
Numerical Plasma Simulations of Celestial Bodies for Comparisons with Satellite Data <i>U. Motschmann, P. Meier, W. Exner, Y. Vernisse, J. A. Riouset, H. Comişel</i> . . . . .	266
Monte-Carlo-Berechnung von Vertex-Funktionen der Gitter-QCD in der Landau-Eichung <i>M. Müller-Preussker, A. Sternbeck</i> . . . . .	268
Atomistische elektromagnetische Simulation ultraschneller Nichtgleichgewichtsdynamik laserangeregter Nanoplasmen <i>C. Peltz, T. Fennel</i> . . . . .	270
Collisionless shocks and turbulence in nonthermal sources of radiation <i>M. Pohl, I. Rafighi</i> . . . . .	272
Lagrangian Studies of Incompressible Turbulence in Plasmas <i>J. Pratt, A. Busse, W.-C. Müller</i> . . . . .	274

Continuous-time quantum Monte-Carlo simulations of the low-temperature dynamics of Heavy Fermion systems <i>T. Pruschke</i> . . . . .	276
Ab-initio-Berechnungen der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen <i>R. Redmer, A. Becker, M. Bethkenhagen, D. Cebulla, M. French, C. Kellermann, K.-U. Plagemann, M. Schöttler, B. Witte</i> . . . . .	278
Correlation and Interaction Effects in Low Dimensional Systems <i>M. Rösner, G. Schönhoff, M. Schüler, S. Barthel, T. O. Wehling</i> . . . . .	280
Turbulenz in Galaxienhaufen <i>W. Schmidt, J. F. Engels, J. C. Niemeyer</i> . . . . .	282
Nahfeld-induzierte Phasen- und Richtungssteuerung der Photoemission von Nanokugeln <i>L. Seiffert, T. Fennel</i> . . . . .	284
From single-swimmer motion to collective patterns under gravitational field: A particle-based hydrodynamic study <i>H. Stark, A. Zöttl, M. Maurer</i> . . . . .	286
First-principles Simulationen der elektronischen und optischen Eigenschaften von heterostrukturierten quasi-zweidimensionalen Dichalcogeniden <i>C. Till, S. Khachadorian, R. Gillen</i> . . . . .	288
Partial melting and the thermo-chemical evolution of terrestrial planets <i>N. Tosi, A.-C. Plesa, C. Hüttig, M. Laneuville</i> . . . . .	290
Numerical geodynamic modelling of a mantle plume under La Réunion and its interaction with large-scale 3D mantle flow <i>M. Weber, E. Bredow</i> . . . . .	292
Computational prediction and control over optoelectronic properties in novel 2D semiconductors by defect and interface engineering <i>L. Zhou, M. Lorke, T. Frauenheim</i> . . . . .	294
<b>Projekte aus dem Gebiet der Methodenentwicklung</b>	
Distributed branch-and-cut methods to solve up to now intractable optimization instances <i>M. Grötschel, T. Koch, Y. Shinano</i> . . . . .	298
Hochskalierende Datenassimilation: Methoden zur Kombination von numerischen Modellen mit Beobachtungsdaten auf Höchstleistungsrechnern <i>W. Hiller, L. Nerger</i> . . . . .	300
Transition from symbolic equations to HPC implementations in OpenCL <i>T. Kramer, M. Noack</i> . . . . .	302
Selecting the right memory allocator may more than double the speed of your program <i>A. Reinefeld, T. Schütt, R. Döbbelin</i> . . . . .	304
Studying the impact of process placement and oversubscription on three important HLRN codes (BQCD, CP2K, MOM5) on the Cray XC40 <i>A. Reinefeld, T. Steinke, F. Wende</i> . . . . .	306
Many-Core HPC Computing: Preparing HPC Applications for Future Supercomputer Architectures <i>F. Wende, M. Noack, T. Schütt, T. Steinke</i> . . . . .	308
<b>Anhang</b>	
Organisationsstruktur des HLRN . . . . .	312
Das HLRN-Kompetenznetzwerk . . . . .	313
Konfiguration des HLRN-III-Systems . . . . .	315
<b>Autoren</b>	319