



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

Forschung im HLRN-Verbund 2011

HLRN-Website:

www.hlrn.de

PDF-Datei dieses Berichts:

www.hlrn.de/twiki/pub/NewsCenter/Publications/HLRN-Report-2011.pdf

Der Inhalt der Einzelbeiträge und deren Darstellung liegt in der Verantwortung der jeweiligen Autoren. Der HLRN kann für Interessierte Kontakt zu Autoren von Beiträgen herstellen. Anfragen richten Sie bitte an die E-Mail-Adresse contact@hlrn.de oder an die

Geschäftsstelle des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN

c/o Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Dr. Manfred Stolle

Takustraße 7, 14195 Berlin

Telefon: +49(0)30-84185-310

Telefax: +49(0)30-84185-311

E-Mail: zulassung@hlrn.de

Impressum:

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und
Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

c/o Takustraße 7, 14195 Berlin

Telefon: +49(0)30-84185-0

Telefax: +49(0)30-84185-125

E-Mail: board@zib.de

Redaktion und Konzept:

Prof. Dr. Volkard Linke, Freie Universität Berlin

Prof. Dr.-Ing. Thomas Rung, Technische Universität Hamburg-Harburg

Dr. Matthias Läuter, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Dr. Wolfgang Baumann, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Gestaltung:

Dr. Bernhard Bandow, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

Druck:

Rabe KG Buch- und Offsetdruck, Berlin

© 2011 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin,
Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

ISBN 978-3-00-034131-1

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Chemie	3
Theoretische Untersuchung multivalenter Wechselwirkungen <i>D. Mollenhauer, B. Paulus</i>	4
Ab-initio-molekulardynamische Simulationen des Protonentransfers in Aminosäuren und kleinen Peptiden <i>B. Schmidt, T. Frigato, Ch. Schütte</i>	6
Periodic density functional theory calculations of methanol and vanadium oxide aggregates cerium oxide: geometrical electronic structures, vibrational properties, reactivity <i>C. Popa</i>	8
Moleküldynamiksimulation an licht- und spannungsabhängigen Enzymen <i>M.A. Mroginski, S. Kaminski, T. Utesch</i>	10
Quanteneffekte in Lithium-basierten Wasserstoffspeicher-Materialien <i>D. Sebastiani</i>	12
Theoretische Untersuchung von MgF ₂ -Oberflächen <i>C. Müller, B. Paulus</i>	14
Redox-Active MOF-5 Isotypes: Novel Entatic State Catalysts? <i>A. Mavrantakis, J. Sauer</i>	16
Selective oxidation of propane by vanadium oxide sites supported on silica <i>J.W. Liu, F. Mohamed, J. Sauer</i>	18
The interaction of Au with γ -Al ₂ O ₃ surfaces <i>G. Feng, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Sauer</i>	20
Ab Initio MD study of the solvation structure and EPR spectrum of Fremy's salt in water-methanol solutions <i>D. Sebastiani</i>	22
Hybrid Hartree-Fock/Dichtefunktionaltheoriestudie zur Rolle von Ceroxid in der oxidativen Dehydrogenierung von Methanol auf geträgertem Vanadiumoxid <i>J. Paier</i>	24
Molecular dynamics simulations of motor and proton transporter proteins <i>A.-N. Bondar</i>	26
Graphene on ferromagnetic surfaces and its functionalization with water and ammonia <i>E. Voloshina, B. Paulus, Yu. Dedkov</i>	28
Defect engineering in TiO ₂ – from bulk to nanostructures <i>P. Deák, B. Aradi</i>	30
First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tripeptides on Titanium Dioxide Surfaces <i>W. Friedrichs, W. Langel, L. Colombi Ciacchi, S. Köppen</i>	32
Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces <i>D. Gabel, K. Karki, D. Roccatano</i>	34
Kollektive Phänomene in Lipidmembranen: Dynamik und die Rolle von Peptiden bei Porenbildung und Fusion <i>M. Müller, K.Ch. Daoulas, M. Fuhrmans, M. Hömberg, G. Marelli</i>	36
Simulation der Dynamik von Polymersystemen: Gleiten von Tröpfchen auf deformierbaren Oberflächen und Kinetik der Strukturbildung in mehrkomponentigen Systemen <i>M. Müller, A. Galuschko, F. Léonforte, M. Mülayim, N. Tretyakov</i>	38

Geowissenschaften	41
Planetenentwicklung und Leben	
<i>U. Langematz, M. Kunze, A. Hamann-Reinus</i>	42
Atmosphärische Dynamik und Chemie terrestrischer Exoplaneten	
<i>H. Rauer, M. Godolt</i>	44
Project on Solar Effects on Chemistry and Climate including Ocean Interactions (ProSECCO)	
<i>U. Langematz, A. Kubin</i>	46
Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction (SHARP)	
<i>U. Langematz, S. Meul, S. Oberländer</i>	48
Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY	
<i>K. Weigel, W. Lotz, M. Vountas</i>	50
Global and regional ocean-ice simulations using FESOM: Toward applications with variable resolution and regional focus	
<i>P. Lemke, Q. Wang, D. Sidorenko, S. Danilov, J. Schröter, L. Nerger</i>	52
Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen	
<i>G. Jung, M. Prange, M. Schulz</i>	54
Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung	
<i>W. Hiller, N. Rakowsky, S. Harig, A. Fuchs</i>	56
Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation: Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte Klimaschwankungen	
<i>M. Prange, H. Liu, M. Schulz</i>	58
Der Effekt submesoskaliger Turbulenz auf den Gasaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre	
<i>C. Eden</i>	60
Simulation von Zukunftsszenarien für das Ökosystem der Ostsee	
<i>T. Neumann, I. Kuznetsov, R. Friedland</i>	62
Ausbreitungswege von Nährstoffen und Zeitskalen von Nährstofftransporten in der Ostsee	
<i>H. Radtke, Th. Neumann</i>	64
Dichteströmungen in Hervey Bay (Australien)	
<i>U. Gräwe</i>	66
Regionale Anpassungsstrategien für die deutsche Ostseeküste (RADOST)	
<i>U. Gräwe, H. Burchard</i>	68
Simulation von Luftströmungen in Städten mit innovativen Turbulenzmodellen	
<i>S. Raasch, M. Letzel</i>	70
Auswirkungen des prognostizierten Klimawandels auf die Sediment- und Hydrodynamik im Ostfriesischen Wattenmeer	
<i>J.-O. Wolff, K.A. Lettmann, S. Grashorn</i>	72
Grobstruktursimulationen zum Einfluss der Turbulenz in Wolken auf das Tropfenwachstum	
<i>S. Raasch, T. Franke</i>	74
Darstellung der konvektiven Grenzschicht während Kaltluftausbrüchen in Wetter- und Klimamodellen	
<i>M. Gryschka, J. Kampmeyer</i>	76
Numerische Simulation zur Wechselwirkung der Atmosphäre mit der Tragflügelumströmung	
<i>S. Raasch, C. Helmke</i>	78
Entwicklung und Validierung eines Grobstruktursimulationsmodells zur Berechnung der Strömungsverhältnisse inner- und außerhalb von Offshore-Windparks	
<i>G. Steinfeld</i>	80
Hochauflösende Grobstruktursimulationen atmosphärischer Grenzschichtturbulenz	
<i>R. Heinze, S. Raasch</i>	82
Auswirkungen des Klimawandels auf die Zirkulation des Atlantischen Ozeans	
<i>E. Behrens, C.W. Böning</i>	84
Investigating the role of ocean ventilation in anthropogenic CO ₂ uptake and sequestration via Green functions	
<i>A. Oschlies, I. Kriest</i>	86
Einfluss von Remineralisierungsparametern auf globale biogeochemische Ozeanmodelle	
<i>A. Oschlies, I. Kriest</i>	88

Ventilation der Sauerstoffminimumzonen in den tropischen Ozeanen <i>F.U. Schwarzkopf, C.W. Böning</i>	90
Simulation des vergangenen, heutigen und zukünftigen Klimas <i>M. Latif, N.S. Keenlyside</i>	92
Ingenieurwissenschaften	95
Numerische Simulation der Aktiven Strömungsbeeinflussung auf einer Hochauftriebskonfiguration <i>T. Höll, F. Thiele</i>	96
Fluidik-Elemente zur aktiven Strömungskontrolle <i>J. Sesterhenn, M. Lemke</i>	98
Numerische Simulation und Analyse einer Stator-Kaskade mit aktiver Strömungskontrolle <i>C. Gmelin, M. Steger, E. Wassen, F. Thiele</i>	100
Optimal control to reduce supersonic jet-noise with porous media <i>J. Schulze, J. Sesterhenn</i>	102
Untersuchung und Beeinflussung von Breitbandlärm in Turbomaschinen mit neuartigen hybriden Simulationsverfahren <i>B. Greschner, F. Thiele</i>	104
Further development of DES for the simulation of complex turbulent flows <i>C. Mockett, B. Greschner, L. Wang, F. Thiele</i>	106
Untersuchung und Beeinflussung des Breitbandlärms von Triebwerksdüsen durch Modifikation der Düsenkante <i>D. Eschricht, F. Thiele</i>	108
Numerische Untersuchungen der Strömung von Kristallschmelzen beim Czochralski-Verfahren <i>R. Fornari</i>	110
Numerical Investigation of Noise Generation and Reduction in Turbofan Engines <i>M. Steger, U. Michel, F. Thiele</i>	112
Numerische Simulation und Analyse der Interaktion von Strömung und Schall in einem stehenden Verdichterringgitter <i>R. van Rennings, M. Steger, K. Ehrenfried, F. Thiele</i>	114
Numerical Simulation of the Flow around a Generic Vehicle Using Active Flow Control <i>S. Eichinger, F. Thiele, E. Wassen</i>	116
Untersuchungen zur Reduzierung des turbulenten Widerstands durch wellenförmige Lamellen <i>F. Kramer, E. Wassen, F. Thiele</i>	118
Oxidized silicon nanowires as biomolecular sensors: <i>ab initio</i> structural and electronic analysis <i>L. Colombi Ciacchi</i>	120
Computational Combinatorial Materials Science study to optimize the band gap for metal-oxide based materials for their usage in photoelectrolysis cells <i>L. Mädler, T. Heine</i>	122
3D Modeling of Hydrothermal Plumes <i>M. Walter, Y. Tao</i>	124
Thermalgetriebene Vermischung turbulenter Konvektionsströmungen in einem geschlossenen Container <i>R. Groll, C. Zimmermann</i>	126
Bestimmung der Rolldämpfung moderner Schiffsförmungen mit Hilfe von experimentellen und numerischen Untersuchungen komplexer Strömungsvorgänge <i>M. Abdel-Maksoud, S. Handschel, J.P. Soproni</i>	128
Entwicklung und Implementierung der hybriden RANS LES Modelle zur Berechnung der Strömung im Heckbereich von Schiffen <i>N. Kornev, A. Taranov, E. Shchukin, M. Walter</i>	130
Untersuchung der physikalischen Mechanismen zur Erhöhung des Wärmeüberganges auf Delenoberflächen <i>J. Turnow, N. Kornev, E. Hassel</i>	132
Untersuchung von reaktiven turbulenten Mischungsvorgängen bei hohen Schmidt-Zahlen mit besonderer Berücksichtigung der Mikromischung <i>M. Walter, N. Kornev, E. Hassel</i>	134

Simulation des Überziehens von Triebwerkseinlaufströmungen mit fortschrittlichen Turbulenzmodellen <i>R. Radespiel, A. Probst</i>	136
Dreidimensionale Strömungssimulation einer gesamten Flugzeugturbine zur Untersuchung der Einflüsse von Temperaturunregelmäßigkeiten am Eintritt auf den Abgasstrahl <i>J. Seume, R. Adamczuk</i>	138
Unsteady Work Optimized Turbine <i>J. Seume, M. Biester, M. Henke</i>	140
Reynolds-Spannungs-Modellierung für komplexe 3D-Strömungsprobleme in der Flugzeug-Aerodynamik <i>R. Radespiel, R.-D. Cécora</i>	142
Berechnung von instationären Strömungen in Hochleistungsradialventilatoren <i>G. Brenner, Y. Yang, A. Lucius</i>	144
Numerical Simulation of Jet Actuation over Swept High Lift Airfoil <i>R. Radespiel, S. Mahmood</i>	146
Zeitaufgelöste Simulation von abgelösten Strömungen in Strömungsmaschinen mit Turbulenz auflösenden Modellen <i>G. Brenner, A. Lucius</i>	148
Numerische Simulationen zur Wirkungsweise laserinduzierter Beeinflussungsmethoden für Hochgeschwindigkeitsgrenzschichten <i>R. Radespiel, D. Heitmann</i>	150
Systemspezifische Schmierfilmdissipation in den radialen und axialen Lagerstellen von Abgasturboladern unter realen Betriebsbedingungen mit unterschiedlichen Ölzuführungsrandbedingungen <i>J. Seume, H. Rätz</i>	152
Numerical Investigation of Interference Effects of the Horizontal and the Vertical Tail Planes on Transport Aircraft <i>R. Radespiel, V. Nallapula</i>	154
Physik	157
Berechnung eichvarianter Greenscher Funktionen in der Gitter-QCD mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen <i>M. Müller-Preussker, E.-M. Ilgenfritz, A. Sternbeck</i>	158
Determination of upper and lower Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model <i>M. Müller-Preussker, K. Jansen</i>	160
Twisted Mass-Gitter-QCD bei endlicher Temperatur <i>M. Müller-Preussker (für die tmfT-Kollaboration)</i>	162
Precision charm physics with $N_f = 2$ dynamical quarks <i>R. Sommer, U. Wolff</i>	164
B-physics from lattice QCD <i>A. Shindler (for the European Twisted Mass Collaboration)</i>	166
Skalierungsgesetze für die Manteldynamik in Exoplaneten <i>J. Oberst, L. Noack</i>	168
Functionalization of semiconductor nanowires <i>A.L. da Rosa, N.H. Moreira, Th. Frauenheim</i>	170
Verschmelzung von Neutronensternen <i>C. Lämmerzahl, S. Rosswog</i>	172
Magnetic fields in galaxy clusters <i>C. Lämmerzahl, M. Brueggen</i>	174
3D Strahlungstransport & Rechnungen mit dem PHOENIX/3D Code <i>P. Hauschildt</i>	176
Ab initio Theorie elektronischer und magnetischer Störstellen in Graphen und verwandten Materialien <i>A. Lichtenstein, T. Wehling</i>	178
Lattice QCD at Physical Quark Masses <i>G. Schierholz</i>	180

Komplexer metallischer Magnetismus stark korrelierter Übergangsmetalloxide <i>F. Lechermann</i>	182
Ab-initio-Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen <i>R. Redmer, M. French, B. Holst, W. Lorenzen, A. Becker, K.-U. Plagemann, C. Trötschler</i>	184
Nichtlineare Licht-Materie-Dynamik in finiten Vielteilchensystemen: Cluster in intensiven IR-, VUV-, und XUV-Laserfeldern <i>Th. Fennel, J. Köhn, M. Arbeiter, Ch. Peltz</i>	186
Adsorption of Organic Molecules on Wide-Gap Insulators <i>W. Chen, C. Tegenkamp, H. Pfnür</i>	188
Numerische Plasmasimulationen von Himmelskörpern <i>U. Motschmann, H. Kriegel, S. Wiehle</i>	190
Untersuchung der Plasmaumgebung des Kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko <i>K.-H. Glaßmeier, C. Koenders</i>	192
Numerical simulations of an infalling subcluster: A comparative study <i>W. Schmidt, J. Schulz, E. Lévêque</i>	194
Quanten-Monte-Carlo für korrelierte Quantensysteme im und abseits des thermischen Gleichgewichts <i>Th. Pruschke, A. Honecker, S. Fuchs, A. Kalz, A. Dirks</i>	196
First principle simulations of classical and quantum charged-particle systems <i>M. Bonitz, K. Balzer, S. Bauch, T. Ott</i>	198
Nichtkollinearer Magnetismus auf Oberflächen durch Spin-Bahn-Kopplung <i>S. Schröder, P. Ferriani, S. Heinze</i>	200
Untersuchung strukturregulierender Parameter für kurze und lange Chromatinfasern durch Monte-Carlo-Simulationen <i>G. Wedemann</i>	202
Methodenentwicklung	205
MR-Search: Ein Framework für massiv-parallele Graphensuche mit MapReduce <i>A. Reinefeld, T. Schütt, R. Maier</i>	206
Effiziente Nutzung heterogener Manycore-Systeme <i>A. Reinefeld, Th. Steinke, K. Peter, S. Borchert</i>	208
Distributed branch-and-cut methods to solve previously intractable optimization instances <i>M. Grötschel, Y. Shinano</i>	210
Hochskalierende Datenassimilationsverfahren zur Kombination von numerischen Modellen mit Beobachtungsdaten <i>W. Hiller, L. Nerger</i>	212
Skalierbarkeit globaler Simulationen zur Bestimmung der weltweiten Zirkulation <i>W. Hiller, K. Fieg, S. Harig, J. Schröter, S. Danilov</i>	214
Effiziente Generierung interaktiv nutzbarer 3D-Filme aus massiv-parallelen Simulationen <i>S. Olbrich, M. Vetter</i>	216
Anhang	219
Organisationsstruktur des HLRN	220
Technik des HLRN-II-Systems	221