

cfgauss weltrekordverdächtig

> 20/21

Die Arbeitsgruppe Festkörper-Theorie am Institut für Theoretische Physik beschäftigt sich mit Fragen stark korrelierter Elektronen. Häufig sind genaue Antworten nur numerisch und unter massivem Computer-Einsatz zu erzielen. Ein wesentlicher begrenzender Faktor ist dabei der verfügbare Hauptspeicher.

Seitdem das Rechenzentrum im Dezember 2001 den Compute-Server cfgauss (eine COMPAQ ES45) installiert hat, sind wir in der Lage, Rechnungen durchzuführen, die bis dato an der TU Braunschweig nicht möglich waren, und auf diese Weise wesentliche offene Probleme zu lösen. Insbesondere haben wir in den letzten Monaten in Zusammenarbeit mit der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg das Verhalten von zweidimensionalen Quanten-Spin-Systemen in hohen Magnetfeldern berechnet. Hierbei wurde das von Jörg Schulenburg entwickelte Programm-Paket spinpack eingesetzt.

In der nebenstehenden Grafik ist im Hintergrund das größte untersuchte Problem skizziert. Der Gesamtzustandsraum hat die Dimension $2^{36} \approx 6,9 \cdot 10^{10}$. Bei Quanten-Spin-Modellen nutzt man zuerst S^z -Erhaltung und Spin-Inversions-Symmetrie. Der größte Unterraum tritt dann für $S^z = 2$ auf und hat immer noch die Dimension $\binom{36}{16} \approx 7,3 \cdot 10^9$. Unter Aus-

nutzung räumlicher Symmetrien lässt sich dies schließlich im vorliegenden Fall auf eine komplexe Dimension $1\,217\,985\,978 \approx 1,2 \cdot 10^9$ reduzieren. Für diese Dimension war der kleinste Eigenwert einer dünn besetzten Matrix zu bestimmen, wobei wir ein Verfahren verwendet haben, das auf Vorschlägen von C. Lanczos (um 1950) basiert.

Für das Lanczos-Verfahren mussten 2 Vektoren der komplexen Dimension $\approx 1,218 \cdot 10^9$ im Hauptspeicher gehalten werden, was zusammen mit weiteren Hilfsdaten zu einem Speicherbedarf von 25 GByte führte. Da die beiden größten Knoten der cfgauss 32 GByte Hauptspeicher besitzen, war dies gerade noch möglich. Die dünn besetzte Matrix musste allerdings auf Festplatte ausgelagert werden (in komprimierter Form 132 GByte Plattenplatzbedarf).

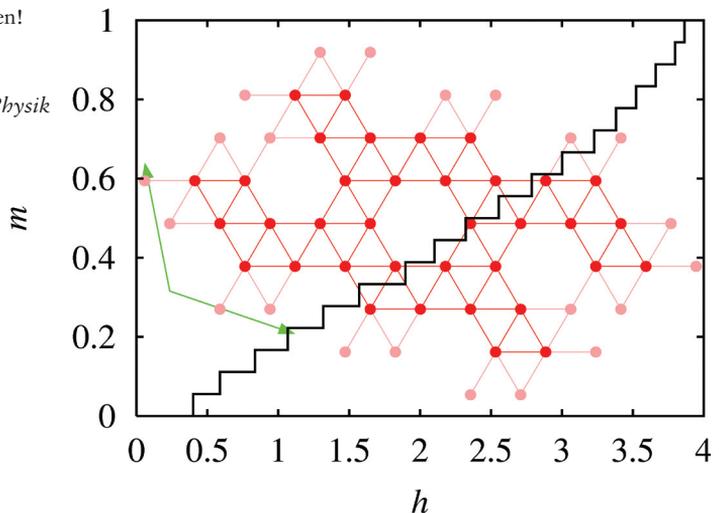
Nach mehrfacher Anpassung der Konfiguration und etwa 7 Tagen Laufzeit auf 4 Prozessoren hielten wir dann endlich das Ergebnis in Händen. (Es ist die größte Rechnung, die in die schwarze Kurve im Vordergrund der Grafik eingeht).

Rechentechnisch bedeutet dies einen Weltrekord, da es sich hierbei um die größte (komplexe) Dimension handelt, auf die in der Problemklasse reiner Quanten-Spinsysteme jemals ein Verfahren vom Lanczos-Typ erfolgreich angewendet wurde!

Stolz sind wir auf diese Rekordleistung auch, weil es sich bei der cfgauss eigentlich „nur“ um einen Rechner mittlerer Größe handelt. Ob wir an der TU Braunschweig in Zukunft weiter an der Weltspitze dabei sein können, wird also auch davon abhängen, ob die rechtzeitige Beschaffung eines Nachfolgers gelingt.

An dieser Stelle wollen wir vor allem dem Rechenzentrum zu der erfolgreichen Beschaffung der cfgauss gratulieren und Josef Schüle ganz herzlich für die technische Unterstützung bei der Durchführung dieser großen Rechnungen danken!

*Andreas Honecker,
Institut für Theoretische Physik
a.honecker@tu-bs.de*



Im Hintergrund: Die 36 dunkelroten Punkte geben Plätze für Spins $S=1/2$ an, Linien antiferromagnetische Kopplungen der Stärke 1. Grüne Pfeile und hellrote Punkte verdeutlichen periodische Randbedingungen. Im Vordergrund die auf diesem Gitter für das Heisenberg-Modell berechnete Magnetisierungskurve $m(h)$.