

Dortmunder Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (DoWiR)

Konstituierende Gründungsversammlung

Mittwoch, 09. Mai 2012, 15.30 – 16.30 Uhr, Emil-Figge-Straße 50 / Raum 0.215

Teilnehmerinnen und Teilnehmer:

- Stefan Turek, Mathematik
- Stefan M. Kast, Chemie
- Sven Rahmann, Informatik
- Heinrich Müller, Informatik
- Bernhard Spaan, Physik
- Katharina Morik, Informatik
- Wolfgang Rhode, Physik
- Götz Uhrig, Physik
- Carsten Raas, Physik
- Frithjof Anders, Physik
- Norbert Kockmann, BCI
- Matthias Möller, Mathematik
- Dominik Göttsche, Mathematik
- Franz-Joseph Barthold, Bauwesen
- Christian Meyer, Mathematik
- Andreas Rademacher, Mathematik
- Thorsten Camps, Mathematik
- Jörn Mosler, Maschinenbau
- Andreas Zabel, Maschinenbau
- Sven Odendahl, Maschinenbau
- Christian Becker, Mathematik / ITMC
- Sven Buijssen, Mathematik
- Dirk Ribbrock, Mathematik
- Claus Weihs, Statistik
(vertreten durch Bernd Bischl)
- Roland Winter, Chemie
- Heinz Rehage, Chemie
- Peter Buchholz, Informatik
- Jörg Gehrke, ITMC
- Jan Ziemann, ITMC / Physik
- André Große-Wöhrmann, Mathematik
- Peter Lakshmanan, BCI
- Gerhard Schaldach, BCI
- Damian Pieloth, BCI

Protokoll:

- Magdalena Thöne, Mathematik

Tagesordnung:

1. Begrüßung
2. Motivation und Ideen zur Gründung von DoWiR
3. Gründung von DoWiR (durch Eintragung in die Teilnahmeliste)
4. Diskussion der Satzung
5. Wahl des Vorstandes
6. Diskussion der ersten Schritte und der To-Do-Liste
7. Sonstiges

1. Begrüßung

Herr Turek begrüßt die mehr als dreißig Anwesenden zum ersten Treffen von DoWiR (Dortmunder Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen), dessen Gründung mit dieser Versammlung stattfinden soll.

Er stellt einen Vorschlag für die Tagesordnung vor, der nach einem informellen Auftakt die offizielle Gründung des Zentrums vorsieht, gefolgt von einigen formalen ersten Schritten.

Es bestehen keine Änderungswünsche bezüglich der Tagesordnung. Die Sitzungsleitung wird von Herrn Turek und Herrn Kast übernommen; auch hierzu besteht Konsens. Zusammen mit der Einladung waren Ideen zum Konzept des Zentrums sowie ein erster Entwurf für eine Satzung verschickt worden.

2. Motivation und Ideen zur Gründung von DoWiR

Forschung und Forschungsförderung: Mit dem Dortmunder Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (DoWiR) soll eine Bündelung vorhandener Kompetenzen und Ressourcen im Wissenschaftlichen Rechnen (WR) und High Performance Computing (HPC) in fachlicher, personeller und finanzieller Hinsicht geschehen, um zukünftig das Wissenschaftliche Rechnen zu einem noch effizienteren Werkzeug der Forschung zu machen. Hier gibt es bereits viele Aktivitäten, auf denen aufgebaut werden kann, und es sollen gezielt Forschungs großprojekte aus DoWiR heraus initiiert werden.

Nachwuchsförderung: Das Kompetenzzentrum soll einen wesentlichen Beitrag zur Aus- und Weiterbildung im Umfeld des *Computational Science and Engineering* leisten. Es gibt dezentral bereits Kurse zum Umgang mit MPI oder Kurse zu CUDA, die noch besser vernetzt und gebündelt werden könnten.

Infrastruktur: Das Zentrum will Unterstützung bei der Planung und Verwaltung von Rechnerressourcen für Wissenschaftliches Rechnen an der TU Dortmund und auch im Rahmen der Universitätsallianz Metropole Ruhr (UAMR) bieten. Das vorhandene Knowhow soll noch besser als bisher geteilt werden, gemeinsame Absprachen sollen eine bessere Aufstellung (in) der TU bewirken.

Aufgaben und Ziele: DoWiR versteht sich als zentraler Ansprechpartner für methodische Grundlagenforschungen und fachliche Unterstützung bzgl. Konzeption, Analyse und Realisierung von Simulationsmethoden und Werkzeugen des Wissenschaftlichen Rechnens für komplexe Prozesse und Anwendungsprobleme auf Hochleistungsrechnern. Als Kompetenzzentrum in der Nachwuchsförderung ist das Ziel, heterogene Fragestellungen mit methodischen Gemeinsamkeiten im Wissenschaftlichen Rechnen zu behandeln. Zudem soll DoWiR Beratung beim Betrieb und der Nutzung der zentralen HPC-Systeme an der TU Dortmund und in der UAMR sowie Unterstützung beim Betrieb eigener HPC-Installationen bieten.

DoWiR ist dabei ein Interessensverbund und ein virtuelles Zentrum, an dem Interessierte aus verschiedenen Bereichen zusammenwirken.

Herr Spaan bedankt sich im Namen der Anwesenden für die Initiative. Er stellt zudem die Frage in den Raum, ob DoWiR mehr als ein Interessensverbund ist und auch weitere Ziele verfolgt, zum Beispiel um etwa ähnlich wie bei den Ideen des damaligen Clusterantrags DVDS (Data Volume Driven Science)) gemeinsame Ziele in der Forschung zu verfolgen.

Hierzu wird klargestellt, dass auch die Entwicklung und Erarbeitung gemeinsamer Forschungsideen, Projekte und Drittmittelaktivitäten Bestandteil der DoWiR-Aktivitäten sein soll.

Es wird ergänzt, dass für die DoWiR-Initiative vergleichbare Einrichtungen angeschaut wurden, um Ideen, Strukturen etc. auf ihre Übertragbarkeit hin abzuklopfen. Als Beispiele werden das IWR in Heidelberg (Institut für Wissenschaftliches Rechnen), eines der ersten Zentren dieser Art in Deutschland, oder etwa die Zentren in Erlangen und Darmstadt genannt.

Es besteht Einigkeit, dass ausgehend von einem Interessensverbund auch Ziele und Visionen erarbeitet werden sollten, was im Konzept und in den übrigen Unterlagen noch deutlicher herausgearbeitet werden sollen.

Auch bei einem – möglichst rasch geplanten – ersten öffentlichen Auftritt (in Form eines Presseartikels o.ä.) sollte eine Vision bereits deutlich dargestellt werden.

Um DoWiR mit Leben zu erfüllen, soll möglichst bald auch ein erstes Arbeitstreffen durchgeführt werden.

Herr Rehage fragt an, ob es ähnliche Initiativen und Einrichtungen auch an den anderen Universitäten des Ruhrgebiets gibt bzw. ob eine Einbindung oder Zusammenarbeit geplant ist. Herr Turek verweist dazu auf die mit den Unterlagen im Vorfeld verteilte "UAMR-Roadmap", in der für Bochum das ICAMS (Interdisciplinary Center for Advanced Materials Simulation) und für Duisburg-Essen das CCSS (Center for Computational Sciences and Simulation) erwähnt sind, die auf ähnlichen Feldern aktiv sind. Hier erscheinen Kontakte und eine Zusammenarbeit sinnvoll. Beide Einrichtungen sind aber noch nicht so weit ausgebaut wie etwa ähnliche Initiativen in Heidelberg (IWR), Erlangen oder Darmstadt (Forschungszentrum Computational Engineering, angebunden an das dortige Exzellenzcluster).

Im Rahmen der UAMR ist stets die Balance von Zusammenarbeit und Konkurrenz wichtig; dies ist auch auf dem Feld des Wissenschaftlichen Rechnens der Fall.

Primäres Ziel ist es, zunächst innerhalb der TU Dortmund eine "schlagkräftige" Gruppe zu bilden und zu vereinen und mit einer "gemeinsamen Zunge" nach innen und außen zu sprechen.

Es wird dargestellt, dass es im Vorfeld auch bereits Gespräche mit dem Rektorat gegeben hat. Das Rektorat steht der Initiative offen und positiv gegenüber; zugleich hat das Rektorat auch schon einige Wünsche und "Hausaufgaben" formuliert.

3. Gründung von DoWiR (durch Eintragung in die Teilnahmeliste)

Nach dem Austausch über Ideen und Ziele des Zentrums besteht Konsens, das Dortmunder Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (DoWiR) tatsächlich zu gründen.

Durch die Eintragung in die Teilnahmeliste wird das heutige Treffen zur formalen Gründungsversammlung von DoWiR.

Die Anwesenden stellen damit die Gründungsmitglieder dar.

Es gab im Vorfeld bereits Rückmeldungen von einigen Interessierten, die an der heutigen Versammlung nicht teilnehmen konnten. Es soll noch eine "Nachmeldefrist" (bis zum Wochenende o.ä.) eingeräumt und organisiert werden, in der sich weitere Interessierte in die Gründungsliste eintragen können, so dass auch sie Gründungsmitglieder des Zentrums sind.

Danach durchlaufen Aufnahmeanträge das durch die Satzung vorgesehene Verfahren.

4. Diskussion der Satzung

Der Entwurf der Satzung orientiert sich an vergleichbaren Zentren resp. deren Satzungen (etwa aus Münster oder Ulm).

Zum vorgeschlagenen Satzungsentwurf gibt es einige Ergänzungs- und Änderungsvorschläge.

Mitgliedschaft:

Die "Definition" der ordentlichen und assoziierten Mitglieder muss noch genauer geklärt werden. Bei ordentlichen (stimmberechtigten) Mitgliedern sollte eine klare Regelung gelten (Leiter/innen von Forschungsprojekten, selbständige Lehraufgaben): Eine Anbindung an entsprechende Fakultätsratsbeschlüsse zur Leitung von Forschungsprojekten etc. ist hier sinnvoll, um die Gruppe außerhalb der Hochschullehrerinnen und Hochschullehrer festzulegen.

Zu den assoziierten Mitgliedern besteht Konsens, dass dieser Kreis sehr großzügig und weit interpretiert werden kann (Studierende, Externe, Stipendiat/inn/en, Emeriti, ...). Hier ist ggf. gemeinsam mit dem Justizariat noch eine Begriffsklärung etwa über "Mitglieder der TU Dortmund" vorzunehmen.

Im § 3 (Mitgliedschaft) soll zudem noch ein Absatz ergänzt werden, der das regelhafte Ausscheiden als Mitglied betrifft, etwa in der Form:

- § 3 (3) Die Mitgliedschaft endet
- (a) auf eigenen Antrag,
 - (b) mit dem Ausscheiden aus der TU Dortmund oder einer DoWiR-Partnereinrichtung.

Vorstand:

Nur ordentliche Mitglieder können in den Vorstand gewählt werden. Es wird darauf hingewiesen, dass die Abwahlmehrheit (Zweidrittelmehrheit) zur Abwahl des/der Vorsit-

zenden bei einem fünfköpfigen Vorstand de facto eine Mehrheit von 80 % bedeutet. Es besteht Zustimmung, hier hohe Hürden zu verlangen, so dass darin kein Nachteil gesehen wird.

Satzungsänderungen:

Es fehlen noch Regularien für Satzungsänderungen.

Beirat:

Die Einrichtung und Bestellung eines Beirats soll ebenfalls durch die Satzung vorgesehen werden. Ein Beirat (oder Scientific Council) gibt einer solchen Einrichtung mehr Gewicht und auch eine größere Sichtbarkeit und verbessert die (bundesweite) Vernetzung und Verankerung. Zudem ist ein Blick auf die Ideen und Aktivitäten eines solchen Zentrums durch ein externes Beratungsgremium immer wieder sehr hilfreich und kann wichtige Impulse liefern.

Ziele und Visionen:

Die Ziele und Visionen des Zentrums sollten in Form einer Präambel o.ä. der Satzung vorangestellt werden, um diese Ideen weiter zu verdeutlichen.

Die vorliegende Satzung wird als vorläufige Ordnungsfassung betrachtet; es wird die Aufgabe des Gründungsvorstands sein, diese Satzung weiter zu erarbeiten und dann demnächst den Mitgliedern zur Verabschiedung vorzulegen.

5. Wahl des Vorstandes

Es besteht Konsens, dass alle Teilnehmerinnen und Teilnehmer der Gründungsversammlung (aktives) Wahlrecht zur Wahl des Vorstandes haben, da die Satzung noch in Bearbeitung ist und auch die genaue Abgrenzung zwischen ordentlichen und assoziierten Mitgliedern noch zu klären ist.

Für den fünfköpfigen Vorstand werden vorgeschlagen:

- Franz-Joseph Barthold, Bauingenieurwesen
- Stefan M. Kast, Chemie
- Katharina Morik, Informatik
- Wolfgang Rhode, Physik
- Stefan Turek, Mathematik

Weitere Vorschläge liegen nicht vor.

Über den Vorschlag wird schriftlich abgestimmt.

Der Vorschlag wird **einstimmig** (ohne Enthaltungen) angenommen.

Auf Befragen erklären alle fünf Kandidat/inn/en, dass sie die Wahl annehmen. Damit ist der **erste DoWiR-Vorstand** gewählt.

6. Diskussion der ersten Schritte und der To-Do-Liste

Erste Schritte des Kompetenzzentrums werden vorgestellt und diskutiert.

Die Schritte sind auf verschiedenen Ebenen zu erledigen:

- innerhalb des Zentrums

Eine DoWiR-Homepage soll aufgebaut werden, ein Info-Brief soll erstellt werden.

Die Diskussion über die DoWiR-Ziele und –Strukturen wird fortgesetzt.

- innerhalb der TU Dortmund

Die Gründung des Zentrums muss entsprechend kommuniziert werden, gegenüber dem Rektorat und dem Referat für Hochschulkommunikation (Pressesprecherin), und in Absprache resp. mit diesen zusammen auch gegenüber der weiteren Hochschulöffentlichkeit und der allgemeinen (wissenschaftlichen) Öffentlichkeit.

Es ist eine Bedarfsanalyse zur Planung zukünftiger Rechnerressourcen (Hardware, Software, Tools, Infrastruktur) vorzunehmen. Dies ist auch einer der Wünsche des Rektorats an die DoWiR-Gruppe, da derartige Informationen sowohl für die weitere Arbeit des Zentrums als auch für die weitere Entwicklung der TU im Bereich der IT von Bedeutung sind (z.B. Weiterentwicklung LiDo /LiDong).

Vor einer Bedarfsanalyse ist die Erfassung des IST-Zustandes aus der Sicht der Anwesenden essentiell. Hierzu und zu den Mitgliedern und Aktivitäten allgemein sollte ein Datenstamm innerhalb von DoWiR aufgebaut werden.

Bereits vorhandene Kurse und Lehrveranstaltungen zum Wissenschaftlichen Rechnen sollen zusammengestellt und koordiniert werden; weitere Angebote sollen gemeinsam entwickelt werden (MPI, OpenMP, CUDA, OpenCL, Visualisierung, etc.).

Für den Austausch untereinander sollen später "DoWiR-Praxisforen" eingerichtet werden, um Methodiker/innen und Anwender/innen in einen intensiveren Austausch zu bringen.

- innerhalb der Ruhrallianz

DoWiR will auch im Rahmen der UAMR an der Koordination der Aktivitäten zum Wissenschaftlichen Rechnen und zum High Performance Computing mitwirken und dabei als gleichberechtigter Partner fungieren. Hierzu liefert auch die "Roadmap" aus dem Konzept einige Stichpunkte.

Abhängig von der Bedarfsanalyse sollen auch Gespräche zur (gemeinsamen) Beteiligung in der Gauß-Allianz neu aufgenommen werden.

Der Vorstand erhält von der Gründungsversammlung den Auftrag, die Satzung gemäß der heutigen Vorschläge und Diskussionen zu ergänzen und zu überarbeiten, so dass auf der nächsten Mitgliederversammlung die Satzung verabschiedet werden kann. Insbesondere die Überlegungen zur Einrichtung eines Beirats sollen weiter konkretisiert werden.

7. Sonstiges

Weitere Wortmeldungen liegen nicht vor.

Herr Turek dankt allen Beteiligten für ihre engagierte Mitwirkung und kündigt an, dass relativ bald zur ersten ordentlichen Mitgliederversammlung des Zentrums eingeladen wird.

Er schließt die Sitzung und dankt allen Beteiligten für ihr Kommen.

Ende der Sitzung: 09.05.2012, 16.30 Uhr

Protokoll: Magdalena Thöne

Sitzungsleitung:

Stefan Turek, Mathematik

Stefan M. Kast, Chemie

Grunddaten der Gründungsmitglieder des Dortmunder Zentrums für Wissenschaftliches Rechnen (DoWiR):

Name	Fakultät / Einrichtung	Arbeitsgebiet	Funktion	Email
Stefan Turek	Mathematik	Numerik, Wiss. Rechnen	Prof.	ture@featflow.de
Stefan M. Kast	Chemie	Theor. Phys. Chemie	Prof.	stefan.kast@tu-dortmund.de
Sven Rahmann	Informatik	Bioinformatik	Prof.	sven.rahmann@tu-dortmund.de
Heinrich Müller	Informatik	Graphische Systeme	Prof.	mueller@is7.cs.uni-dortmund.de
Bernhard Spaan	Physik	Teilchenphysik	Prof.	Bernhard.Spaan@tu-dortmund.de
Katharina Morik	Informatik	Künstliche Intelligenz	Prof.	katharina.morik@tu-dortmund.de
Wolfgang Rhode	Physik	Astroteilchenphysik	Prof.	Wolfgang.Rhode@tu-dortmund.de
Götz Uhrig	Physik	Quanteninformation, Festkörpertheorie	Prof.	goetz.uhrig@tu-dortmund.de
Carsten Raas	Physik	Festkörpertheorie	Wiss. Ang.	carsten.raas@tu-dortmund.de
Frithjof Anders	Physik	Festkörpertheorie	Prof.	frithjof.anders@tu-dortmund.de
Norbert Kockmann	BCI	Apparatedesign	Prof.	Kockmann@bci.tu-dortmund.de
Matthias Möller	Mathematik, LS 3	Angewandte Mathematik und Numerik	AR	Matthias.Moeller@math.tu-dortmund.de
Dominik Göddeke	Mathematik, LS 3	Hardware-orientierte Numerik, Wiss. Rechnen, HPC	JProf.	Dominik.Goeddeke@math.tu-dortmund.de
Franz-Joseph Barthold	Bauwesen, NMI	Numerische Methoden, Struktur-optimierung	Prof.	franz-joseph.barthold@tu-dortmund.de
Christian Meyer	Mathematik, LS X	Angewandte Mathematik, Optimierung	Prof.	cmeyer@math.tu-dortmund.de
Andreas Rademacher	Mathematik, LS X	Adaptive Finite Elemente Methoden	AR	Andreas.Rademacher@tu-dortmund.de
Thorsten Camps	Mathematik, LS X	Finite Elemente Methoden	AR	Thorsten.Camps@tu-dortmund.de
Jörn Mosler	Maschinenbau	Finite Elemente Methoden	Prof.	joern.mosler@udo.edu
Andreas Zabel	Maschinenbau, ISF	Simulation von Zerspanprozessen	Oberingenieur	zabel@isf.de

Name	Fakultät / Einrichtung	Arbeitsgebiet	Funktion	E-Mail
Sven Odendahl	Maschinenbau, ISF	Simulation von Zerspanprozessen	Wiss. Ang.	odendahl@isf.de
Christian Becker	Mathematik / ITMC	Numerik, HPC	Wiss. Ang.	cbecker@math.tu-dortmund.de
Sven Buijssen	Mathematik	Hardware-orientierte Numerik, Wiss. Rechnen, HPC	Wiss. Ang.	Sven.Buijssen@tu-dortmund.de
Dirk Ribbrock	Mathematik	Numerik, HPC	Wiss. Ang.	Dirk.Ribbrock@math.tu-dortmund.de
Claus Weihs	Statistik	Computergestützte Statistik	Prof.	weihs@statistik.tu-dortmund.de
Roland Winter	Chemie	Simulation in der Biophysikalischen Chemie	Prof.	roland.winter@tu-dortmund.de
Heinz Rehage	Chemie	Kolloidchemie	Prof.	heinz.rehage@tu-dortmund.de
Peter Buchholz	Informatik	Modellierung und Simulation	Prof.	peter.buchholz@tu-dortmund.de
Jörg Gehrke	ITMC	HPC, Grid	Wiss. Ang.	joerg.gehrke@tu-dortmund.de
Jan Ziemann	ITMC / Physik	HPC, Grid, MC Simulationen	Wiss. Ang.	jan.ziemann@tu-dortmund.de
André Große-Wöhrmann	Mathematik, LS X	Finite Elemente Methoden, Modelladaptivität	Wiss. Ang.	Andre.Grosse-Woehrmann@tu-dortmund.de
Peter Lakshmanan	BCI, SM	Strömungssimulation	Ang.	Peter.Lakshmanan@bci.tu-dortmund.de
Gerhard Schaldach	BCI, MV	Strömungssimulation	Ang.	G.Schaldach@bci.uni-dortmund.de
Damian Pieloth	BCI, MV	Strömungssimulation	Ang.	Damian.Pieloth@bci.tu-dortmund.de

n=33

Im Nachgang der Gründungsversammlung kamen hinzu (Stand: 14.05.2012, n=21):

Name	Fakultät / Einrichtung	Arbeitsgebiet	Funktion	Email
Bernd Bischl	Statistik	Computergestützte Statistik	Wiss. Ang.	bischl@statistik.tu-dortmund.de
Andreas Menzel	Maschinenbau	Mechanik	Prof.	andreas.menzel@udo.edu
Peter Ehrhard	BCI / Strömungsmechanik	CFD	Prof.	p.ehrhard@bci.tu-dortmund.de
Uwe Schwiegelshohn	ET/IT	Grid und Cloud Computing	Prof.	uwe.schwiegelshohn@udo.edu
Jan Kierfeld	Physik	Weiche Materie, Biologische Physik	Prof.	kann.kierfeld@tu-dortmund.de
Dirk Biermann	Maschinenbau, ISF	Simulation von Zerspanprozessen	Prof.	biermann@isf.de
Tim Ricken	Bauwesen	Mechanik	Prof.	tim.ricken@tu-dortmund.de
Katja Ickstadt	Statistik	Mathematische Statistik und biometrische Anwendungen	Prof.	ickstadt@statistik.tu-dortmund.de
Michael Schmolders	ITMC	Zentrale Server	Administration	Michael.Schmolders@tu-dortmund.de
Heribert Blum	Mathematik	Wissenschaftliches Rechnen	Prof.	heribert.blum@math.tu-dortmund.de
Petra Mutzel	Informatik	Algorithm Engineering	Prof.	petra.mutzel@cs.uni-dortmund.de
Heike Trautmann	Statistik	Computergestützte Statistik	Postdoc	trautmann@statistik.tu-dortmund.de
Olaf Mersmann	Statistik	Computergestützte Statistik	Wiss. Ang.	olafm@statistik.tu-dortmund.de
Uwe Ligges	Statistik	Datenanalyse und statistische Algorithmen	JProf.	ligges@statistik.tu-dortmund.de
Jörg Rahnenführer	Statistik	Statistische Methoden in der Genetik und Chemometrie	Prof.	rahenfuehrer@statistik.tu-dortmund.de
Carsten Strohmann	Chemie	Anorganische Chemie / Hauptgruppenchemie	Prof.	mail@carsten-strohmann.de

Name	Fakultät / Einrichtung	Arbeitsgebiet	Funktion	Email
Gabriele Kern-Isberner	Informatik	Information Engineering	Prof.	gabriele.kern-isberner@cs.uni-dortmund.de
Jan Jürjens	Informatik	Software Engineering	Prof.	jan.jurjens@cs.tu-dortmund.de
Petra Kersting	Maschinenbau / ISF	Modellierungsmethoden für Spanende Fertigung	JProf.	petra.kersting@isf.de
A. Erman Tekkaya	Maschinenbau / IUL	Umformtechnik und Leichtbau	Prof.	Erman.Tekkaya@iul.tu-dortmund.de
Andreas Liening	Wirtschafts- und Sozialwissenschaften	Wirtschaftswissenschaften und Ökonomische Bildung	Prof.	andreas.liening@uni-dortmund.de

Überblick über die Gründungsmitglieder nach Fakultäten / Einrichtungen, Funktion / Status und Geschlecht

