

Pressemitteilung

Universität Duisburg-Essen

Beate Kostka M.A.

12.07.2010

<http://idw-online.de/de/news379039>

Forschungs- / Wissenstransfer, Kooperationen
Chemie, Informationstechnik, Mathematik, Physik / Astronomie, Wirtschaft
überregional



UDE: Einweihung des neuen Supercomputers am 16.07.

Am 16. Juli wird an der Universität Duisburg-Essen (UDE) der neue Supercomputer Cray XT6m offiziell eingeweiht (10 Uhr, Campus Duisburg, Gebäude LE, Raum 105). Gleichzeitig fällt der Startschuss für das neue Zentrum für wissenschaftliches Rechnen an der UDE (Center for Computational Sciences and Simulations, CCSS).

Mit dem neuen Cray-XT6m-Superrechner erreicht die UDE-Ausstattung die Kategorie von Spitzen-Universitäten. Sie gehört damit zu den sieben deutschen Unis im Top500-Ranking der weltweit schnellsten Forschungsrechner. Er verfügt über mehr als 4.000 Rechnerkerne und eine Maximalleistung von 31 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde (31 TeraFlops).

Davon profitieren vor allem Forschergruppen des wissenschaftlichen Rechnens in der Mathematik, Informatik, Biologie, Physik, Chemie, Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften sowie der Medizin. Vernetzt sind die disziplinübergreifenden Kooperationen im CCSS, das die Aktivitäten bündelt und neue Anwendungsfelder mit hochaktuellen Fragestellungen erschließt.

Wie bewegen sich Millionen kleinster Teilchen?

Genutzt wird das Rechnersystem vor allem für die Entwicklung paralleler Algorithmen und die aufwändige Berechnung der elektronischen Struktur und molekularen Dynamik von Nanomaterialien. Ebenso wird es bei struktur- und biomechanischen Untersuchungen eingesetzt. Simuliert werden Prozesse, die durch die Bewegung von Millionen kleinster Teilchen zustande kommen, ebenso wie elektronische Eigenschaften von dünnen Schichten und Clustern, die aus Hunderten von Atomen bestehen. Damit können dann Aggregations- und Alterungsprozesse in magnetischen Materialien, an Oberflächen oder in Materialien, die Millionstel Millimeter groß sind, untersucht werden.

Die mit dem Rechner durchgeführten Simulationen tragen ganz wesentlich zum atomistischen Verständnis von Struktur und Reaktivität in den Nanowissenschaften, der Energietechnik und ganz allgemein den Materialwissenschaften bei. Ein weiteres Anwendungsfeld ist die Simulation der Eigenschaften von deformierbaren Materialien wie z.B. Arterien, oder von Flüssigkeiten und Gasen, die Nanoteilchen enthalten, und die z.B. bei der Verbrennung oder der Verarbeitung von Nanopartikeln entstehen.

Zusammenarbeit mit den Ruhrgebietsunis

Aber auch in der Lehre will das CCSS Akzente setzen. Es unterstützt die Qualifizierung der Nachwuchswissenschaftler ebenso wie die Graduiertenausbildung. Vorgesehen ist auch eine enge Zusammenarbeit innerhalb der Universitätsallianz Metropole Ruhr (UAMR).

Weitere Informationen: Prof. Dr. Eckhard Spohr, Tel. 0201/183-2360, eckhard.spohr@uni-due.de

Redaktion: Beate H. Kostka, Tel. 0203/379-2430

URL zur Pressemitteilung: <http://www.uni-due.de/ccss>

D