

## SkaSim – Skalierbare HPC-Software für molekulare Simulationen in der chemischen Industrie

*Monday 14 December 2015 15:50 (30 minutes)*

Durch den Einsatz von kraftfeldbasierten Molekulardynamik (MD) Simulationen sind zahlreiche praxisrelevante Probleme in den Ingenieurwissenschaften erstmals der Modellierung und Simulation zugänglich. Auf der Grundlage physikalisch sinnvoller molekularer Wechselwirkungen können technisch relevante Systeme sicher und zuverlässig analysiert werden. Die industrielle Entwicklung neuer Produkte und ressourceneffizienter Verfahren wird sich durch den Einsatz höchstskalierbarer molekularer Simulationen grundlegend verändern. Dadurch wird es Unternehmen der chemischen Industrie ermöglicht werden, molekulare Simulationen zur Lösung ingenieurwissenschaftlicher Aufgaben effizient anzuwenden und zunehmend Experimente zu ersetzen. Dabei müssen Genauigkeiten wie in hochwertigen realen Experimenten erzielt werden. Voraussetzung für den Erfolg sind hierbei optimierte molekulare Modelle, sowie eine extreme Effizienz der Simulation in jeder Hinsicht, die nur durch eine abgestimmte Entwicklung von Modellen, Simulationsmethoden und Software erreicht werden kann. Dieses Projekt erforscht höchstparallele MD und neue Methoden für die hochparallele mathematische Optimierung. Diese Ansätze fließen in die Verbesserung der molekularen Modelloptimierung und Simulation. Der anwendungsseitige Fokus liegt auf der Vorhersage von Eigenschaften reiner Stoffe, dem realen Gemischverhalten fluider Phasen und der Untersuchung von nanoskaligen Prozessen, sowie auf der Entwicklung darauf basierender neuer Methoden im Bereich fluider Phasengrenzen und Nukleation in reagierenden Systemen.

Auf die Lösung dieser Aufgaben ist das interdisziplinäre SkaSim-Konsortium hervorragend vorbereitet: Das Verbundprojekt wird durch das Bundesrechenzentrum HLRS in Stuttgart koordiniert. Beteiligt sind zwei führende Unternehmen der chemischen Industrie BASF und Solvay, die KMUs Eurotechnica und DDBST, international anerkannte Universitätsinstitute der Ingenieurwissenschaften (TU Kaiserslautern und Universität Paderborn) und des wissenschaftlichen Rechnens (TU München), die forschungsstarke Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, der Supercomputerhersteller Cray und die beiden Fraunhofer-Institute ITWM und SCAI. Die molekulare Modellierung und Simulation ist eine Schlüsseltechnologie der chemischen Industrie der Zukunft. Das Projekt SkaSim wird es ermöglichen, auf diesem Gebiet eine Spitzenposition zu erreichen und zu halten.

**Primary author:** Dr GLASS, Colin (HLRS, University of Stuttgart)

**Presenter:** Dr GLASS, Colin (HLRS, University of Stuttgart)

**Track Classification:** BMBF 3. HPC-Call