



Weitere HP2C-Projekte und deren Hauptinitiatoren

Materialwissenschaft

Elektronen in Molekülen und Festkörpern

Die Dichtefunktionalstheorie (DFT) ist eine der wichtigsten Modellierungsmethoden in der Materialwissenschaft, Festkörperphysik und Chemie. Der BigDFT -Code löst die quantenmechanischen Gleichungen im Rahmen der Dichtefunktionalstheorie und ermöglicht somit die Bestimmung fast aller physikalischen und chemischen Eigenschaften von neuen Materialien. BigDFT verwendet neuartige mathematische Funktionen, sogenannte wavelets, um die elektronischen Wellenfunktionen und die elektronische Ladungsverteilung darzustellen. Ein wichtiges Anwendungsgebiet von BigDFT ist die Vorhersage von noch unbekanntem Nanomaterialien.

BigDFT – Large Scale Density Functional Electronic Structure Calculations in a Systematic Wavelet Basis Set; Stefan Goedecker, Professor an der Universität Basel

Genauere Simulation quantenmechanischer Effekte

MAQUIS ist ein weiteres wichtiges Projekt aus der Festkörperphysik, in dem mit exakter Simulation aller quantenmechanischer Effekte ungewöhnliche und technologisch interessante Eigenschaften von Materialien simuliert werden.

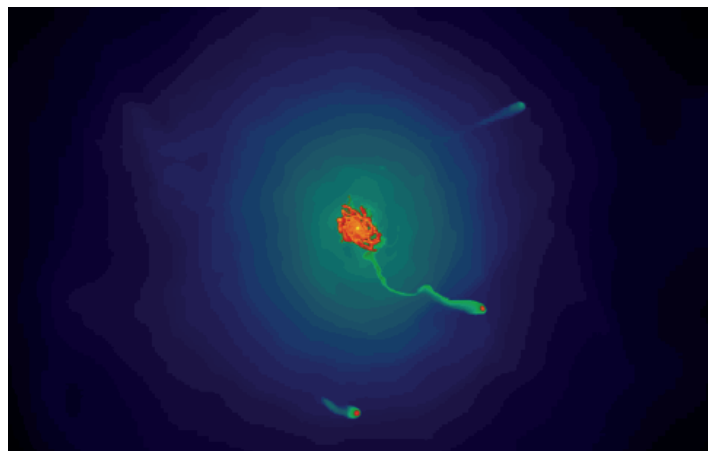
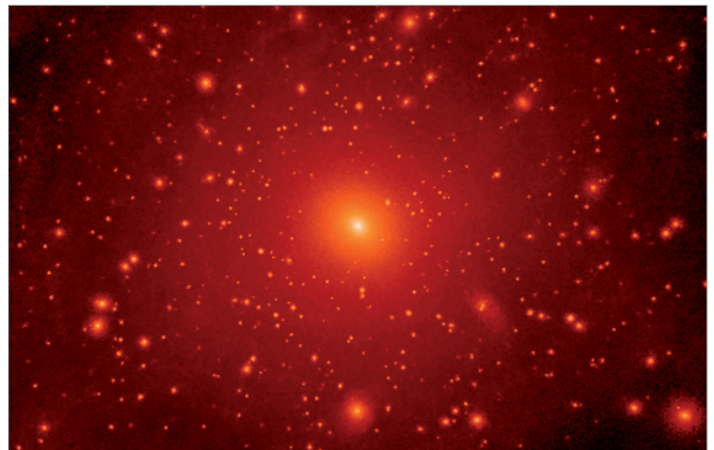
MAQUIS – Modern Algorithms for Quantum Interacting Systems; Thierry Giamarchi, Professor an der Universität Genf

Astrophysik

Sternenexplosionen

Supernovae – Sternenexplosionen – sind Schlüsselereignisse, durch deren Erforschung die Entstehung der schweren Elemente und ihre Verteilung im Universum genauer erklärt werden kann. Doch weder sind die Explosionsmechanismen gut verstanden noch ist es einfach, eine Sternenexplosion in einem Computermodell naturgetreu nachzubilden. Erschwert wird dies durch das reichhaltig verknüpfte Zusammenwirken von vielen physikalischen Einzelprozessen unter extremen Temperaturen und Materiedichten, welche nur in astrophysikalischen Explosionen erreicht und erforscht werden können. Indem das Team sich bei der Entwicklung seiner Algorithmen nun auf die als «wesentlich» erachteten Prozesse konzentriert, soll es gelingen, zuverlässige Modelle, auch in realistischen drei Dimensionen, auf dem Computer zu berechnen.

SUPERNOVA – Productive 3D Models of Stellar Explosions; Matthias Liebendörfer, Professor an der Universität Basel



«Dank HP2C konnten wir unsere Modelle der Bildung von Galaxien verbessern und weiterentwickeln», sagt Romain Teyssier. Das Kosmologie-Forschungsteam der Universität Zürich ist nun in der Lage, sowohl die Dynamik der noch zu beobachtenden Dunklen Materie (oberes Bild) als auch die Entwicklung der sichtbaren Materie zu simulieren, die sich in eine realistische rotierende Scheibe wie beispielsweise unsere Milchstrasse verdichten (siehe Zentrum unteres Bild). (Bild: Cosmology group George Lake, Universität Zürich)

**Entstehung des Kosmos**

Das Projekt verfolgt das Ziel, die Formation und Entwicklung grossräumiger Strukturen und Galaxien im Universum zu modellieren. Ausgehend von den Anfangsbedingungen, die durch die kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung direkt beobachtet werden können, lassen die Wissenschaftler ihr virtuelles Universum sich über 13 Milliarden Jahre unter der Einwirkung des Gravitationsgesetzes und den Gesetzen der Fluidmechanik entwickeln. Simulationen der Entstehung und Entwicklung des Kosmos sind von essentiellen Interesse für die Wissenschaft, da sich mit ihnen die Modelle der Wissenschaftler testen lassen. Nur mit Simulationen lässt sich überprüfen, ob astronomische Beobachtungen mit Ergebnissen der zugrundeliegenden physikalischen Gesetze übereinstimmen.

COSMOLOGY – Computational Cosmology on the Petascale; George Lake, Professor an der Universität Zürich

Medizin**Das Herz-Kreislauf-System**

Die Wissenschaftler verfolgen das Ziel, die Elektrophysiologie und Mechanik des Herzens in Kombination mit dem Blutkreislauf zu simulieren. Die Simulationen sind für die Praxis von physiologischem und pathologischem Nutzen. Sie sollen eine verbesserte Diagnostik bei Gefässerkrankungen ermöglichen, chirurgische Eingriffe besser planbar machen und bis hin zu einer besseren Behandlung und Heilung von entzündlichen Gefässerkrankungen führen.

CARDIOVASCULAR/LIVE5 – HPC for Cardiovascular System Simulations; Alfio Quarteroni, Professor an der EPF Lausanne

Das Ohr simulieren

Ziel ist es, das menschliche Ohr basierend auf realistischen biophysikalischen Grundlagen zu simulieren, um damit etwa bessere Hörgeräte entwickeln zu können.

EAR MODELING – Numerical Modeling of the Ear: Towards the Building of new Hearing Devices; Bastien Chopard, Professor an der Universität Genf

Biologie**Natürliche Selektion**

Die Selektion nach Darwin erklärt die Anpassung lebender Organismen an ihre Umwelt. Um die Spuren der Selektion in einem Genom identifizieren zu können, müssen die Wissenschaftler Zeichen von seltenen kleinen Ereignissen finden. Typischerweise sind das adaptive Veränderungen, die vor zehn Millionen Jahren oder gar mehreren hundert Millionen Jahren in wenigen Prozenten eines Proteins stattgefunden haben. Um die Selektionsereignisse in Zehntausenden von Genen von Hunderten von Genomen identifizieren zu können, braucht es ein effizientes Scannen der Daten mit Hilfe von Supercomputern. Das Selectome-Projekt optimiert hierfür in HP2C die Software. **SELECTOME – Selectome, looking for Darwinian Evolution in the Tree of Life;** Marc Robinson-Rechavi, Professor an der Universität Lausanne

Klima**Wie wirkt sich der Klimawandel auf die Alpen aus?**

Mit zunehmendem Kenntnissgewinn werden die Klimamodelle immer komplexer. Gleichzeitig sind jedoch lokal hochauflösende Modelle von Bedeutung, um beispielsweise die Auswirkungen des Klimawandels auf die Alpenregion besser zu verstehen. Das Projekt verfolgt durch die Überarbeitung oder das Ersetzen von bestehenden Codes und Algorithmen das Ziel, dass von ETH Zürich und MeteoSchweiz genutzte regionale Wetter- und Klimamodell COSMO-CCLM effizienter zu machen und auf neue Computerarchitekturen anzupassen.

Cosmo-CCLM – Regional Climate and Weather Modeling on the Next Generations High-Performance Computers: Towards Cloud-Resolving Simulations; Isabelle Bey, Executive Director von C2SM (Center for Climate Systems Modeling) an der ETH Zürich

Genauere Wetterprognosen

Das OPCODE-Projekt ist eng mit COSMO verbunden und soll in erster Linie die lokale Wettersimulationen voranbringen. Im Rahmen des Projekts sollen unter anderem für COSMO noch ausstehende essentielle Entwicklungen für eine Umsetzung der Modelle auf neueste Computerarchitekturen mit Grafikprozessoren durchgeführt werden.

OPCODE – Operational COSMO Demonstrator; Oliver Fuhrer, MeteoSchweiz