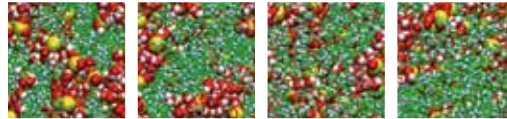


## Center for Computational Sciences and Simulation

### Center for Computational Sciences and Simulation

CCSS – das Center for Computational Sciences and Simulation – bietet seit Mitte 2010 für rund 30 Arbeitsgruppen aus den Fakultäten Biologie, Chemie, Ingenieurwissenschaften, Mathematik und Physik eine Plattform für den Austausch von Kontakten, Erfahrungen und Methoden im Bereich der rechnergestützten Wissenschaften und des wissenschaftlichen Rechnens.

Since mid-2010, CCSS – the Center for Computational Sciences and Simulation – has been offering approximately 30 research groups from the Faculties of Biology, Chemistry, Engineering, Mathematics and Physics a platform on which to exchange contacts, experiences and methods in computational sciences and scientific computing.



## Einführung

Die klassischen zwei Säulen der Natur- und Ingenieurwissenschaften, Theorie und Experiment, wurden in den letzten Jahrzehnten durch eine dritte Säule, die numerischen Experimente, ergänzt. An der Universität Duisburg-Essen findet sich das gesamte Spektrum des wissenschaftlichen Rechnens von der grundlegenden Algorithmenentwicklung bis zur Anwendung moderner Algorithmen und paralleler Rechnertechnologien auf aktuelle Fragestellungen.

Um diese Vielfalt zu bündeln und gleichzeitig die interdisziplinäre Zusammenarbeit in diesen Themenfeldern weiter zu fördern und zu stärken, wurde im Juli 2010 das CCSS gegründet. Mit der Inbetriebnahme des Supercomputers Cray XT6m im Mai/Juni 2010 wurde gleichzeitig eine Arbeitsumgebung zur Verfügung gestellt, die von vielen Mitgliedern des CCSS aktiv in ihrer Forschungsarbeit eingesetzt wird. Mit einer erreichten Leistung von mehr als 26 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde war die Cray XT6m der UDE im Juni 2010 in der TOP-500-Liste der schnellsten Supercomputer der Welt vertreten.

## Forschung

Die am CCSS beteiligten Arbeitsgruppen werden vielfältig unterstützt durch DFG-Sonderforschungsbereiche (Transregio-SFB 60, SFBs 445, 491, 616), -Schwerpunktprogramme (SPPs 1239, 1386, 1486, 1538, 1599) und -Forschergruppen oder auch durch BMBF-Vereinbarprojekte oder andere Förderung.

Die Arbeitsgruppe von Prof. Peter Entel nutzt die massiv parallelen Rechnerplattformen an der UDE bzw. am Jülich Supercomputing Centre (JSC), um hochaktuelle Probleme aus dem Bereich der kondensierten Materie, zum Beispiel im Bereich der Entwicklung neuer magnetischer Speicher-materialien im Nanometerbereich, zu erforschen. Materialien mit Zukunftspotential sind beispielsweise Eisen-Platin Nanopartikelsysteme. In Zusammenarbeit mit den experimentellen AGs von Prof. Heiko Wende und Prof. Michael Farle wurden hartmagnetische Eigenschaften abgedeckter Übergangsmetallcluster untersucht, die

## Introduction

The two classical pillars of natural sciences and engineering, theory and experiment, have been joined in recent decades by a third pillar, numerical experiments. The University of Duisburg-Essen covers the entire scientific computing spectrum, from fundamental development of algorithms to application of advanced algorithms and parallel computing technologies to address current scientific issues.

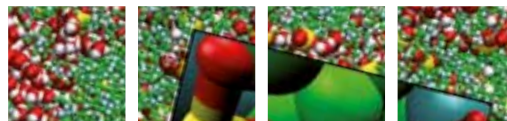
CCSS was founded in July 2010 to bring these different aspects together and at the same time to promote and strengthen interdisciplinary cooperation in these fields. Commissioning of the Cray XT6m supercomputer in May/June 2010 helped to create a working environment which is actively used by many members of CCSS in their research. Performing more than 26 trillion calculations per second, in June 2010 the UDE's Cray XT6m was one of the TOP 500 fastest supercomputers in the world.

## Research

CCSS research groups are supported in many ways by DFG Collaborative Research Centres (Transregional SFB 60, SFB 445, 491, 616), Priority Programmes (SPP 1239, 1386, 1486, 1538, 1599) and Research Units, as well as by BMBF Collaborative Projects and other funding.

The research group of Professor Peter Entel uses the massively parallel computing platforms at the UDE or the Jülich Supercomputing Centre (JSC) in the investigation of contemporary problems in condensed matter physics, e.g. supporting the development of magnetic recording media in the nanometre range. Materials with technological potential in this area include iron-platinum nanoalloys. The hard magnetic properties of respective nanoclusters protected by a transition metal coverage as required for later applications were explored in collaboration with the experimental work groups of Professors Heiko Wende and Michael Farle.

Bild links: Morphologie einer Nafionmembran  
Image left: Morphology of a Nafion membrane



in späteren Anwendungen zum Einsatz kommen könnten.

Ebenfalls mithilfe massiv paralleler Rechner führt die Arbeitsgruppe von Prof. Peter Kratzer sehr aufwändige Berechnungen mit so genannten Hybrid-Dichtefunktionalen durch, um die Eigenschaften von Kohlenstoff-Defekten in ZnO aufzuklären. Dieses Thema soll in einem gemeinsamen Projekt der AGs Entel und Kratzer weiter verfolgt werden.

Die Arbeitsgruppe von Prof. Georg Jansen befasst sich mit der Entwicklung quantenchemischer Methoden zur präzisen Berechnung der Stärke der Wechselwirkungen zwischen Molekülen und deren Anwendung auf experimentell relevante Systeme. Hierbei liegt ein Schwerpunkt auf Verfahren, die die in Chemie und Physik gängigen Dichtefunktionalmethoden um die explizite Erfassung langreichweitiger Elektronenkorrelationseffekte ergänzen. Diese Verfahren sollen mittel- und langfristig dazu dienen, das Verhalten molekular aufgebauter kondensierter Materie *ab-initio*, das heißt im Idealfall ohne Zuhilfenahme experimenteller Informationen beschreiben zu können. Dies soll durch Verwendung quantenchemisch abgeleiteter Modellpotenziale in Molekulardynamik-Simulationen erreicht werden, die zum Beispiel auch für die AGs von Prof. Eckhard Spohr oder Prof. Daniel Hoffmann ein wichtiges Instrument darstellen.

In *ab-initio*-MD-Simulationen der Arbeitsgruppe von Prof. Spohr konnte anhand stark vereinfachter Modelle wassergefüllter Poren in Nafion gezeigt werden, dass bei geeigneter chemischer und physikalischer Struktur der Pore, die durch einen charakteristischen Sulfonat-Sulfonat-Abstand beschreibbar ist, die Protonenbeweglichkeit ab einem bestimmten Wassergehalt analog zur experimentellen Leitfähigkeit in Nafionmembranen sprunghaft zunimmt. Durch Weiterentwicklung der Methodik sollen immer komplexere nanostrukturierte Materialien auf unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen modelliert werden mit dem Ziel, ihre innere Dynamik und chemische Reaktivität zu verstehen.

Massively parallel computers are also used in the Faculty of Physics by Professor Peter Kratzer's group for extremely complex electronic structure calculations of carbon defects in ZnO with the help of hybrid density functionals. This topic is to be pursued further in a joint project between the Kratzer and Entel groups.

The group of Professor Georg Jansen develops quantum chemical methods for the precise calculation of the strength of interactions between molecules and applies them to systems of experimental relevance. The focus lies on methods which extend the popular density functional theory approaches of chemistry and physics with an explicit determination of long-range electron correlation effects. In the medium to long term, these methods are intended to describe condensed molecular matter *ab initio*, i. e. in the ideal case without any help from experimental data. This is to be achieved through the use of model potentials derived from quantum chemistry in molecular dynamics simulations, which also represent an important instrument for the groups of Professor Spohr or Professor Hoffmann.

In Professor Eckhard Spohr's group, *ab initio* molecular dynamics simulations of simplified models of water-filled pores in Nafion are performed. They have been able to show that, given a suitable chemical and physical structure of the pore (as characterized by the average distance between sulfonate groups), a sudden increase in proton mobility occurs above a certain water content. The threshold for this behaviour is similar to the experimentally observed onset of conductivity in Nafion membranes. Future methodological developments are intended to make it possible to model systems of increasing complexity on different time and length scales in an effort to understand the internal dynamics and chemical reactivity of nanostructured materials.

In the "Bioinformatics" research group of Professor Hoffmann, a new computational method for the diagnosis of HIV has been developed, together with other machine learning methods for the analysis of biological sequences. Further computational methods, such as molecular

In der Arbeitsgruppe Bioinformatik von Prof. Hoffmann wurde eine neue, computergestützte Methode für die HIV-Diagnostik entwickelt, sowie weitere maschinelle Lernmethoden zur Analyse biologischer Sequenzen. Mit anderen rechnerischen Methoden, wie zum Beispiel der MD-Simulation, konnten Eigenschaften verschiedener Biomoleküle erklärt oder vorhergesagt werden. In der Weiterentwicklung sollen Biomoleküle mit neuen Eigenschaften für die Biomedizin entworfen und die Evolution und Diversität von Viren und Mikroorganismen auf molekularer Ebene charakterisiert werden.

Die Entwicklung hochskalierbarer numerischer Algorithmen auf Basis von Gebietszerlegungsverfahren ist ein Forschungsschwerpunkt am Lehrstuhl für Numerische Mathematik von Prof. Axel Klawonn in Essen. Bei der Entwicklung numerischer Simulationsverfahren und -software für Probleme aus der Struktur- und Biomechanik ist ein Softwareökosystem entstanden, mit dem auch auf der Cray XT6m der UDE erfolgreich parallele Simulationen nichtlinearer, fast inkompressibler Elastizitätsprobleme aus dem Bereich der Arterioskleroserecherche durchgeführt werden konnten. Prof. Klawonn und Dr. Oliver Rheinbach haben dabei eng mit Prof. Schröder vom Institut für Mechanik der UDE in Essen sowie Prof. Raimund Erbel und Dr. med. Dirk Böse vom Westdeutschen Herzzentrum des Universitätsklinikums Essen zusammen gearbeitet.

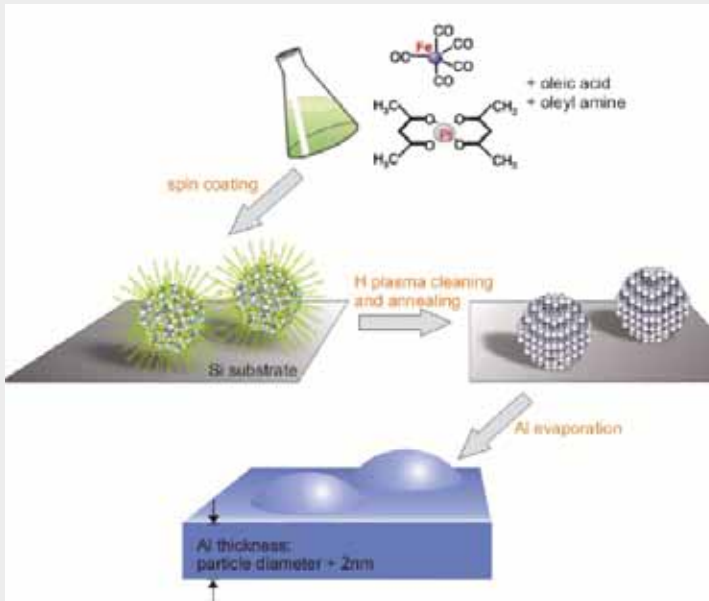
Im Rahmen eines von Prof. Jörg Schröder und Dr. Daniel Balzani betreuten Teilprojekts der DFG-Forschergruppe „Microplast“ wird am Institut für Mechanik die Finite-Element-Simulation von mikroheterogenen Stählen unter Verwendung von direkten Homogenisierungsverfahren untersucht. Hierfür werden statistisch ähnliche repräsentative Volumenelemente (SSRVEs) durch Lösung eines Optimierungsproblems basierend auf statistischen Maßen der Mikrostruktur konstruiert. Für die Erweiterung auf die Konstruktion von dreidimensionalen SSRVEs werden reale Stahl-Mikrostrukturen verwendet, die am Institut von Prof. Dierk Raabe des Max-Planck-Instituts für Eisenforschung GmbH in Düsseldorf analysiert



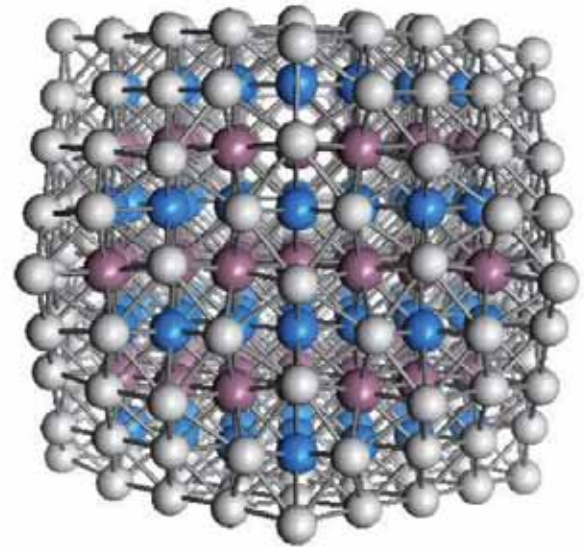
*Mitglied des Vorstands / Member of the executive board:  
Prof. Dr.-Ing. Andreas Kempf*

dynamics simulations, have been used to rationalize or predict biomolecular properties. In the future, biomolecules with novel properties will be developed for biomedical applications, and the evolution and diversity of viruses and micro-organisms will be characterized at the molecular level.

The development of highly scalable numerical algorithms based on domain decomposition methods is one of the research topics of Professor Axel Klawonn and his group in Essen. The development of numerical simulation methods and software for problems from structural and biomechanics has led to a software ecosystem that can successfully be used for parallel simulations of nonlinear, nearly incompressible elasticity problems originating from the field of atherosclerosis. These simulations have been successfully carried



Schematische Darstellung (links) der Probenpräparation metallischer (oxid und ligandenfreier) Fe-Pt Partikel dekoriert mit Al (rechts)



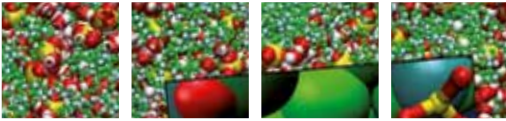
Schematic representation (left) of the sample preparation (oxidized and ligand free) of the Al decorated Fe-Pt particles (right)

werden. Ein Abgleich der Simulationen mit experimentellen Daten wird in Kooperation mit Thyssen-Krupp Steel AG untersucht. Obwohl durch den Einsatz der SSRVEs geringere Komplexitäten erreicht werden, erfordert eine effiziente Simulation den Einsatz massiv paralleler Rechner wie der Cray XT6m.

„So genau wie nötig, so effizient wie möglich“ ist das Konstruktionsprinzip der so genannten „Quasikontinuumsmethode“. Sie investiert als atomistisch-basierte Finite-Element-Methode nur in den mechanisch hochbeanspruchten Zonen von metallischen Kristallen die Genauigkeit einer vollatomaren Auflösung. PD Dr. Bernhard Eidel, Institut für Mechanik von Prof. Schröder, verwendet diese adaptive Methode auch für die Analyse von Schädigung und Versagen von Bauteilen mit Mikrometer-Abmessungen. Simulationen auf noch größeren Längenskalen sollen zukünftig helfen, für die Mikrosystemtechnik relevante Anwendungen zu erschließen.

out on the Cray XT6m at the UDE. The simulations are part of a research collaboration between Professor Klawonn and Dr. Oliver Rheinbach with Professor Jörg Schröder of the Institute of Mechanics at the UDE in Essen and Professor Raimund Erbel and Dr. med. Dirk Böse from the West German Heart Center at Essen University Hospital.

At the Institute of Mechanics, Professor Jörg Schröder and Dr. Daniel Balzani are working on a subproject of the DFG “Microplast” Research Group, with a focus on the finite element simulation of micro-heterogeneous steels using direct homogenization schemes. For this purpose, statistically representative volume elements (SSRVEs) are being constructed by solving an optimization problem based on statistical analysis of the microstructure. The extension of this method to three-dimensional SSRVEs requires real steel microstructures, which are analyzed in the group of Professor Dierk Raabe at the Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH in Düsseldorf. The comparison of the simulations with experimental



Der Schwerpunkt der Forschungsarbeiten am Institut für Schiffstechnik, Meerestechnik und Transportsysteme (ISMT) liegt auf dem Gebiet der numerischen Hydrodynamik und der Fluid-Struktur-Wechselwirkungen. So werden zum Beispiel bei der Vorhersage der wirkenden aero- und hydrodynamischen Kräfte auf Schiffe im Elbrevier zur Ermittlung der erforderlichen Schlepperleistung numerische Simulationen der viskosen Strömung durchgeführt, die später bei der Wahl der Schlepperleistungen herangezogen werden können.

Fragestellungen aus dem Bereich der Statistischen Physik fernab vom Gleichgewicht standen im Mittelpunkt der Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe von Prof. Dietrich Wolf. Im Rahmen des SFB 616 konnte eine kontroverse Frage hinsichtlich der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Reibungskraft, die eine magnetische Spitze bei ihrer Bewegung entlang einer ebenfalls magnetischen Oberfläche abbremsst, geklärt werden. Die dazu nötigen umfangreichen massiv parallelen Simulationen der klassischen Spindynamik großer Systeme wurden in Jülich am John-von-Neumann Institut für Computing (NIC) und auf der hiesigen CRAY durchgeführt.

Ein weiteres Thema betrifft Sinterprozesse (SFB 445) und Elektromigration (SFB 616), das heißt die Drift von Oberflächenatomen unter dem Einfluss von Gradienten im (elektro-)chemischen Potenzial. Eine umfangreiche Studie über den Einfluss der kristallinen Fehlorientierung zweier Nanopartikel auf deren Koaleszenz konnte abgeschlossen werden. Sie basiert auf einem neu entwickelten Hybridalgorithmus, der die kinetische Monte-Carlo Simulation der Atomdiffusion mit der Starrkörperdynamik der Schwerpunkts- und Rotationsfreiheitsgrade der Partikel kombiniert. Im Rahmen des SPP 1386 wurde diese Forschungsthematik in Zusammenarbeit mit der experimentellen Gruppe von Dr. Gabi Schierner und Prof. Roland Schmechel erweitert: Die Probenpräparation zur thermoelektrischen Optimierung von Siliziumnanopulver geschieht durch stromassistierte Verdichtung.

Ebenfalls mit kinetischen Monte-Carlo Simulationen werden Koagulationsprozesse, die zur

## Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler

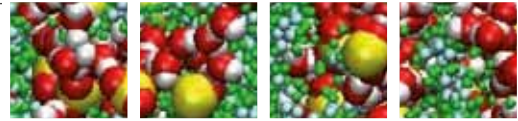
### Researchers

- Prof. Dr. Burak Atakan
- Dr.-Ing. Daniel Balzani
- Prof. Dr.-Ing. Friedrich-Karl Benra
- Dr. Heidi Böhm
- Dr.-Ing. Hans-Josef Dohmen
- Prof. Dr.-Ing. Bettar Ould el Moctar
- Prof. Dr. Peter Entel
- Prof. Dr. Heinz H. Gonska
- Prof. Dr. Ulrich Görtz
- Dr. Markus Gruner
- Prof. Dr. Thomas Guhr
- Prof. Dr. Wilhelm Heinrichs
- Prof. Dr. Daniel Hoffmann
- Dr. Fred Hucht
- Prof. Dr. Georg Jansen
- Prof. Dr.-Ing. Andreas Kempf
- Prof. Dr. Axel Klawonn (Kooperation)
- Jun.-Prof. Dr.-Ing. Wojciech Kowalczyk
- Prof. Dr. Jürgen König
- Prof. Dr. Peter Kratzer
- Prof. Dr. Einar Kruis
- Dr.-Ing. Udo Lantermann
- Prof. Dr. Wolfram Luther
- Prof. Dr. Patrizio Neff
- Prof. Dr. Josef Pauli
- Dr. Oliver Rheinbach
- Prof. Dr. Arnd Rösch
- Dr. Rudi Schäfer
- Prof. Dr.-Ing. Dieter Schramm
- Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder
- Prof. Dr. Rüdiger Schultz
- Prof. Dr. Christof Schulz
- Prof. Dr. Eckhard Spohr
- Dr.-Ing. Irenäus Wlokas
- Prof. Dr. Dietrich Wolf

data is investigated in cooperation with Thyssen-Krupp Steel AG. Although the application of SSRVEs decreases complexity, efficient simulation demands the use of high-performance computers like the Cray XT6m.

“As accurate as necessary, as efficient as possible” can be seen as the construction principle behind the so-called Quasi-Continuum (QC) Method. In this atomistic-based finite-element method, full-atomic resolution and accuracy is invested only in highly loaded regions of metallic crystals. PD Dr. Bernhard Eidel at the Institute of Mechanics (Professor Jörg Schröder) also uses this adaptive method for the analysis of damage and failure mechanisms in structures and components on the length-scale up to some microns. In the future, simulations on even larger length scales are intended to open the door to relevant applications in microsystems technology.

The main focus of research at the Institute of Ship Technology, Ocean Engineering and Transport



## Ausgewählte Publikationen Selected Publications

- Alaghemandi, M., E. Spohr (2011): Molecular dynamics investigation of the thermo-responsive polymer poly (N-isopropylacrylamide) (PNIPAAm), *Macromol. Theory Simul.* 20, 0000.
- Antoniak, C., M.E. Gruner, M. Spasova, A.V. Trunova, F.M. Römer, A. Warland, B. Krumme, K. Fauth, P. Entel, H. Wende (2011): A guideline for atomistic design and understanding of ultrahard nanomagnets, *Nature Commun.* 2, 528.
- Böhm, H., A. Emelianov, A. V. Eremin, C. Schulz, H. Jander (2011): On the effect of molecular and chemically bonded hydrogen addition on carbon particle formation in  $C_3O_2$  pyrolysis behind shock waves, *Combust. Flame*, in press.
- Boese, A.D., H. Forbert, M. Masia, A. Tekin, D. Marx, G. Jansen (2011): Constructing simple yet accurate potentials for describing the solvation of HCl/water clusters in bulk Helium and nanodroplets, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 14550.
- Dybowski, J.N., D. Heider, D. Hoffmann (2010): Prediction of co-receptor usage of hiv-1 from genotype, *PLoS Comput Biol* 6 (4) e1000743.
- Klawonn, A., O. Rheinbach (2010): Highly scalable parallel domain decomposition methods with an application to biomechanics, *Z. Angew. Math. Mech. (ZAMM)* 90, No. 1, 5.
- Kruis, F.E., J. Wei, T. van der Zwaag, S. Haep (2011): Computational fluid dynamics based stochastic aerosol modeling: Combination of a cell-based weighted random walk method and a constant-number Monte-Carlo method for aerosol dynamics, *Chemical Engineering Science*, in press, doi:10.1016/j.ces.2011.10.040.
- Schröder, J., D. Balzani, D Brands (2011): Approximation of random microstructures by periodic statistically similar representative volume elements based on lineal-path functions, *Arch Appl Mech* 81, 975-997.
- Stuehle, S., D. Wendt, H. Jakob, W. Kowalczyk (2011): Numerical simulation of hemodynamics in the ascending aorta induced by different aortic cannulas, *Minimally Invasive Therapy & Allied Technologies*, 20, 125.
- Wu, H., A. Stroppa, S. Sakong, S. Picozzi, M. Scheffler, P. Kratzer (2010): Magnetism in C or N-doped MgO and ZnO: Density functional study of impurity pairs, *Phys. Rev. Lett.* 105, 267203.

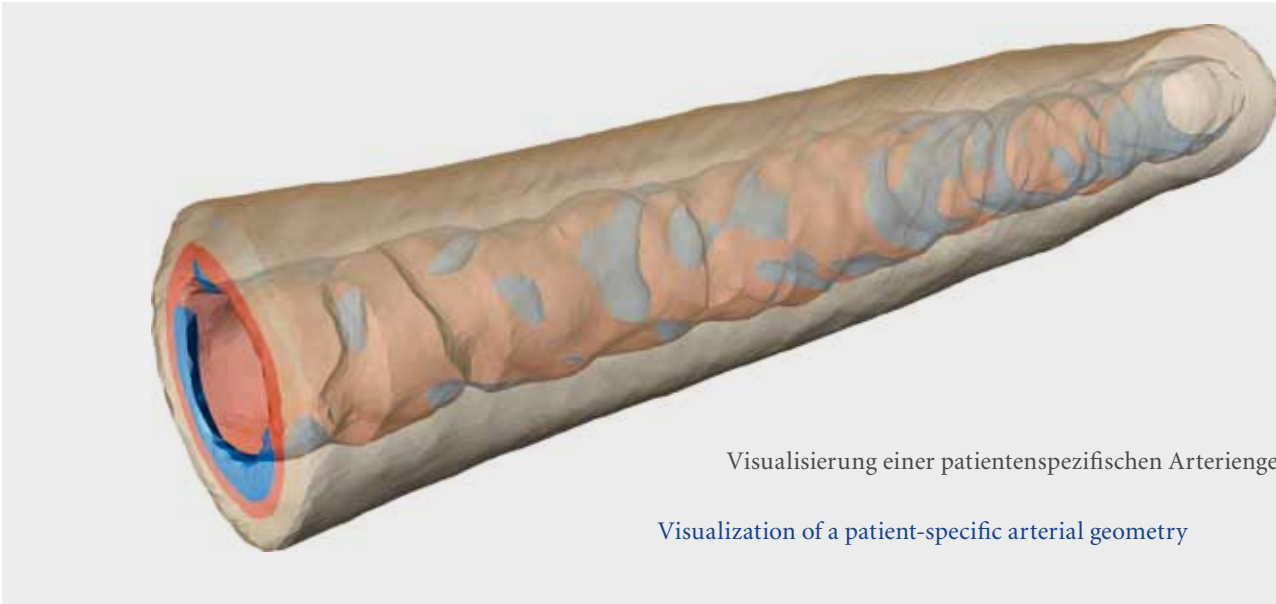
Nanopartikelbildung führen, in der Arbeitsgruppe von Prof. Einar Kruis untersucht. Für diese sehr rechenintensiven Simulationen werden kostengünstige GPUs (Graphikprozessoren) genutzt, die sich durch ein hohes Maß an Parallelisierung auszeichnen, allerdings auch neue Algorithmen

Systems (ISMT) is on the fields of computational hydrodynamics and fluid-structure interaction. For example, computational fluid dynamics is being used to predict the aero and hydrodynamic forces acting on ships navigating the river Elbe. The objective of this project is to calculate coefficients of the drag and lateral forces of selected ships for various angles of attack. The developed software will later form the basis for estimating tug power.

Questions in the field of statistical physics far away from the subject of equilibrium were the focus of the research activities of the group of Professor Dietrich Wolf. As part of SFB 616, they were able to clear up a controversial question regarding the velocity dependency of the friction force that decelerates a magnetic tip as it moves along a magnetic surface. The necessary massively parallel simulations of the classical spin dynamics of large systems were carried out in Jülich at the John-von-Neumann Institute for Computing (NIC) and on the local Cray at UDE.

Another research issue relates to sintering processes (SFB 445) and electromigration (SFB 616), i. e. the drift of surface atoms under the influence of gradients in the (electro) chemical potential. An extensive study on the influence of the crystalline misorientation of two nanoparticles on their coalescence was completed in this area. It is based on a newly developed hybrid algorithm that combines the kinetic Monte-Carlo simulation of atomic diffusion with the rigid-body dynamics of gravity and rotational degrees of freedom of particles. As part of SPP 1386, this research topic has been extended in collaboration with the experimental group of Dr. Gabi Schierring and Professor Roland Schmechel, with sample preparation for thermoelectric optimization of silicon nanopowder being performed by power-assisted compaction.

Kinetic Monte-Carlo simulations are also applied in the group of Professor Einar Kruis in the simulation of coagulation processes leading to nanoparticle formation. These computationally intensive simulations are performed with the help of low-cost GPUs (graphic processors), which allow massive parallel computations but also require new algorithms. The Monte Carlo and CFD methods



Visualisierung einer patientenspezifischen Arteriengeometrie

Visualization of a patient-specific arterial geometry

erfordern. In einem weiterführenden Projekt werden in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen die Monte-Carlo Methoden mit CFD-Methoden zur Kontrolle der Produkteigenschaften bei der Nanopartikel-Synthese kombiniert. Neben dem Institut für Nanostrukturtechnik (NST) und dem IUTA ist auch das Institut für Verbrennung und Gasdynamik (IVG) daran beteiligt.

Der Lehrstuhl von Prof. Andreas Kempf simuliert reaktive, turbulente Mehrphasenströmungen. Dazu werden physikalische Modelle entwickelt, in Software implementiert und im Vergleich zu Experimenten validiert. Zum Einsatz kommen neben kommerziellen und freien Programmen auch Eigenentwicklungen, die sich besonders für den Einsatz auf Hochleistungsrechnern eignen. So wurden mit dem Programm PsiPhi bereits massiv parallele Simulationen mit mehr als 100 Millionen Elementen durchgeführt. Wesentliches Ziel der Arbeiten ist die Optimierung von Verbrennungsvorgängen.

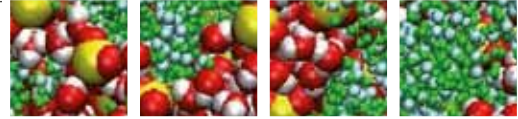
Darüber hinaus werden am IVG durch eine enge Kooperation von Experiment, Modellbildung und Simulation in den Gruppen von Prof. Christof Schulz, Prof. Kempf, Dr. Irenäus Wlokas und Dr. Heidi Böhm Mechanismen von chemischen Reaktionen bei hohen Temperaturen

are being combined in a follow-up project with other groups to monitor the product properties in nanoparticle synthesis. The Institute for Technology of Nanostructures (NST) is collaborating here with IUTA and the Institute for Combustion and Gasdynamics (IVG).

Professor Andreas Kempf's research group simulates turbulent reactive multi-phase flows by developing physical models which are implemented in computer programs and validated by comparison with experimental data. The group uses commercial software products, open source software and developments of their own which are particularly suited to applications on high performance computers. So far, massively parallel simulations with in excess of 100 million computational cells have already been performed with the PsiPhi program. The group's ultimate aim is to optimize combustion processes.

The IVG also investigates mechanisms of high-temperature gas-phase reactions with close interaction between experiments, modelling and simulation in the groups of Professor Christof Schulz, Professor Andreas Kempf, Dr. Irenäus Wlokas, and Dr. Heidi Böhm. Applications of these mechanisms range from combustion processes to the synthesis of tailored nanomaterials





untersucht. Anwendungsfelder reichen von Verbrennungsprozessen bis zur Synthese von Nanopartikeln in der Gasphase. Die Arbeiten zielen auf die Simulation von Einzelschritten von Zündvorgängen und motorischen Verbrennungsprozessen sowie die Unterstützung der Nanopartikelsynthese auch im Entwurf von neuen Anlagenkonzepten.

### **Kooperationen und Internationales**

Arbeitsgruppen des CCSS sind eingebunden in zahlreiche Kooperationen mit anderen Institutionen. So arbeiten die AGs von Prof. Wolfram Luther und Prof. Josef Pauli gemeinsam mit industriellen Partnern im Projekt SILENOS® (Steel Inclusion Level Evaluation by Numerical Optical Systems). Die Arbeitsgruppe um Prof. Wojciech Kowalczyk ist aktiv an dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Kooperations-Projekt: „FEToL – Eine fehlertolerante Umgebung für peta-scale MPI-Löser“ beteiligt. Weitere Kooperationen gibt es sowohl innerhalb der UAMR, hier zum Beispiel durch die AG von Prof. Schröder, aber auch mit internationalen Partnern, so arbeitet zum Beispiel die AG von Prof. Spohr mit Partnern in Italien, Irland und Lettland zusammen.

### **Perspektiven**

Unter Federführung von Prof. Andreas Kempf bemüht sich das CCSS um eine Erweiterung des erfolgreich betriebenen Cray-XT6m-Hochleistungsrechners der Universität.

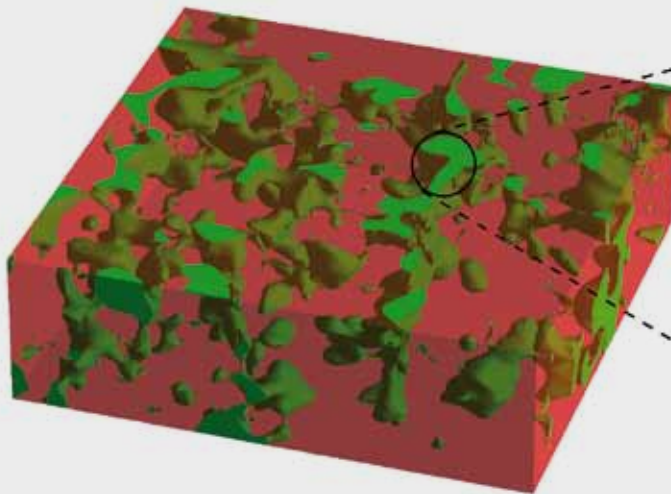
in the gas phase. Research also investigates elementary steps in ignition and in-cylinder processes in combustion engines and supports the design of new synthesis facilities for nano-materials.

### **Cooperation and International News**

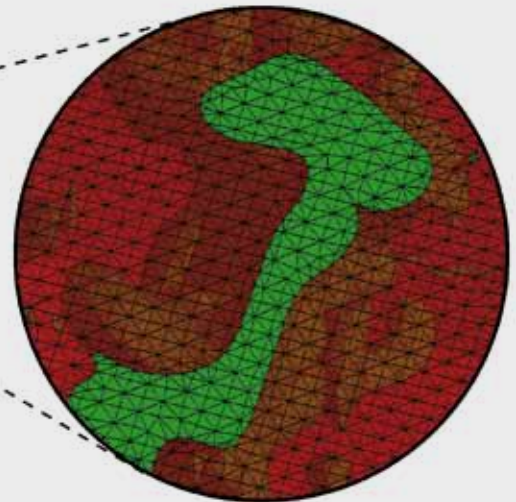
CCSS research groups are involved in numerous collaborations with other institutions. The groups of Professor Wolfram Luther and Professor Josef Pauli are working with industrial partners on the SILENOS® (Steel Inclusion Level Evaluation by Numerical Optical Systems) project. The group of Professor Wojciech Kowalczyk is actively involved in the cooperation project “FEToL – A fault-tolerant environment for peta-scale MPI-solvers”, funded by the Federal Ministry for Education and Research (BMBF). Other collaborations are taking place both within the UAMR, for example through Professor Schröder’s group, and with international partners, as is the case between Professor Spohr’s group and partners in Italy, Ireland and Latvia.

### **Outlook**

Under the leadership of Professor Andreas Kempf, CCSS is currently working on an extension of the Cray XT6m high-performance computer in successful operation at the University of Duisburg-Essen.



Finite Element Diskretisierung einer realen Stahl-Mikrostruktur in Kooperation mit Prof. Dierk Raabe vom Max-Planck Institut für Eisenforschung und Thyssen-Krupp Steel AG



Finite element discretization of a three-dimensional steel microstructure in cooperation with Prof. D. Raabe of the Max-Planck Institut für Eisenforschung and Thyssen-Krupp Steel AG

## Kontakt

### Contact



Center for Computational  
Sciences and Simulation

Center for Computational Sciences and Simulation  
Center for Computational Sciences and Simulation

**Dr. Holger Gollan**

Geschäftsführer Managing Director

Schützenbahn 70  
45127 Essen

☎ +49 (0) 201 / 183 - 3904

@ ccss@uni-due.de

🌐 <http://www.uni-due.de/ccss>