

**WAZ.de zur  
Startseite machen**

Dienstag, 31. Dezember 2002

Startseite

WAZ aktuell

Aus den Städten

Politik  
Wirtschaft  
Westen/Ruhrgebiet  
Aus aller Welt  
Sport  
Kultur / TV  
Computer  
Ratgeber  
InfoGrafik

Medien

Wochenende  
Reisejournal

Dienste

Archiv  
Sporttabellen  
Börse  
Finanzen & Tarife  
Postkarten  
Kinoprogramm  
Restaurants

Service

Ticket-Shop  
Leser-Service  
Internet-Zugang

Anzeigen und Märkte

Auto  
Immobilien  
Stellen  
Inserieren  
Anzeigenpreise  
Online werben

Kontakt

Impressum  
Zentralredaktion  
Lokalredaktionen  
Geschäftsstellen  
Anzeigenabteilung  
Der Weg zur WAZ

Extras

Flüchtlingshilfe



## Ein neues Superhirn schwitzt für Chemiker

Er geht nicht ins Fitnessstudio, braucht keine Aufbauges Getränke und doch ist er fix. So fix, dass er eine Rechenaufgabe, für die seine gewöhnlichen Kollegen, na, so bis zu 15 Jahre brauchen, locker in zwei Monaten löst. Hinter einer unscheinbaren Türe ist er daheim, der neue Supercomputer der Ruhr-Universität. Der WAZ gab er gerne eine Audienz.

In den Katakomben der Universität, da wo die Gänge lang und die Orientierungstafeln rar sind, schaffte Prof. Dr. Dominik Marx vom Lehrstuhl für theoretische Chemie das Kunststück, eine Rechenmaschine der Ex-traklasse an Land zu ziehen. Ihre Kraft zieht sie auch aus der Vernetzung mit 60 kleinen Computern. Ständig "füttern" sie die Chemiker mit neuen Aufgaben. Dr. Axel Kohlmeyer betreut fast wie ein Vater den kraftstrotzenden Nachwuchs, der der theoretischen Chemie exklusiv zur Verfügung steht.

Kaum arbeiteten die 152 Rechereinheiten im Gleichtakt, sicherte sich der Schnelle aus Querenburg einen Platz unter den 500 schnellsten Rechnern der Welt, immerhin Platz 302. Für Kenner: Seine Maximalleistung liegt bei 360 GFlops. Der Hauptspeicher bringt es auf 100 Gigabyte mit einer Festplattenspeicherkapazität von 4,3 Terabyte. Wofür brauchen die Chemiker diese gigantische Leistung?

Dr. Kohlmeyer, dessen Job von ihm die Geduld eines Buddhas und die Gutmütigkeit eines Elches verlangt, nimmt sich Zeit, dem Laien eine Vorstellung von der Chemie ohne Bunsenbrenner und Knallgashokuspokus zu geben.

Da ist das tanzende Proton, das er gern auf dem Bildschirm zwischen zwei Sauerstoffatomen zucken lässt. "Warum passiert das?", fragt der Forscher. Was die Praktiker nach der Methode, "Man schüttet etwas zusammen, kocht es und schaut was passiert", meistern, suchen die Theoretiker zu simulieren. Dabei sprengt schon die Teilchenmenge in einem einzigen Glas Wasser das Vorstellungsvermögen und lässt sich nur mit der Sandkörnchen-Metapher in der Sahara vergleichen.

Daher greifen die Theoretiker zu einem Trick. Sie bauen sich ein Modell aus einigen zehn bis tausend Molekülen, füttern den Computer mit deren Eigenschaften, schaffen virtuelle Umweltbedingungen, lassen ihn das Modell rechnen. Die Ergebnisse helfen, die Prozesse, die - um beim Beispiel zu bleiben - in einem Glas Wasser ablaufen, besser zu verstehen.

Doch es geht um mehr als Wasser: Die Grundlagenforschung hilft somit, dass wir alle etwas davon haben. Autokatalysatoren etwa könnten in Zukunft länger und wirkungsvoller arbeiten, wenn andere Metalle verwendet würden. Der Computer bildet die chemischen Prozesse nach. Oder: Ein winziges Stück einer Bakterie wird mit einem virtuellen Skalpell herausgetrennt. Der Computer dient als Mikroskop und macht die von ihm gerechneten Prozesse sichtbar. So schauen die Chemiker in die Garküche der Natur, deren Rezepte sie zu entschlüsseln suchen.

Damit der Supercomputer das schafft, kommt die Maschine ganz schön ins Schwitzen. Kein Wunder, verbraucht der Rechner in seiner vier Meter langen Schrankwand doch locker die Energie eines Einfamilienhauses. Eine Klimaanlage hält die Temperatur im Raum niedrig. Ohne diese Kühlung würde die Raumtemperatur pro Minute um ein Grad steigen. "Erwärmt sich der Rechner auf über 80 Grad gibt es ein Problem", so Kohlmeyer. Streikt die Anlage wird in der Leitwarte Alarm ausgelöst.

Wenn die anderen feiern, Tannenbäume besingen und Silvester-Knallwerk entzünden, gönnt sich der Formel-1-Bolide unter der Rechnern keine Pause.

## BOCHUM

### WETTER

Bochum, 31.12.2002

Heute:  1° CMorgen:  8° CÜbermorgen:  9° C

Das Wetter in Ihrer Stadt:

 **GO**[Deutschlandwetter interaktiv](#)

### BLICK NACH ...

#### WATTENSCHIED

##### Altarife gehen baden: Stadt hebt Badpreise an

Die alten Preise gehen baden, die neuen bekommen Oberwasser: Erwachsene und Jugendliche ab 16 Jahren zahlen im neuen Jahr in den städtischen...

#### HERNE

##### Privatleute halten sich bei Krediten zurück

Die Sparkasse, mit 63 500 Privat- und 12 500 Geschäftskonten unangefochtener Platzhirsch unter den Banken in Herne, beendet das "Krisenjahr..."

#### HATTINGEN

##### Hund sorgt für eine wunderbare Freundschaft

Krise, nichts als Krise: Die Konjunktur lahm, der Handel stöhnt, die Arbeitslosigkeit wächst, die Abgaben steigen. Ist die Stimmung...

### KINOPROGRAMM

Der Kinosucher fürs Ruhrgebiet - hier erfahren Sie, welcher Film wo läuft. Schnell und übersichtlich.

Ort

Termin

Dienstag

**GO**

- 1.Wort markieren
- 2.Button anklicken
- 3.Erklärung erscheint!

Wenn immer eine Operation abgeschlossen ist, wartet schon ein neuer Auftrag in der Warteschlange.

Gemütlich daheim sitzt der Computervater derweil und kann, vielleicht nach dem Festessen, mal schauen, ob sein Ziehhind auch brav arbeitet. Ein, zwei Mausklücke - und da liegen die Karten, dank Internet, offen. Das hat der Mensch ihm voraus - Schlitzohrigkeit und Trägheit sind im Programm nicht vorgesehen.

30.12.2002 Von Michael Weeke

Weitere Meldungen

- > **Getötete Frau - U-Häftling (23) schweigt eisern**
- > **Ruhr-Uni schickt ab 2003 alle Sinologie-Studenten nach China**
- > **"Zum Glück ist der blaue Mond untergegangen"**
- > **Acht Jahre Haft für Räuber aus dem Rotlicht**
- > **Ein neues Superhirn schwitzt für Chemiker**
- > **BO Rück-Blick . . . mit Jürgen Boebers-Süßmann Tel: 966 1436**
- > **Herber Charme inklusive**
- > **Förderverein kümmert sich um Bochumer Orgeltage**
- > **U-Bahn-Rampe an der Hans-Böckler-Straße**

ARTIKEL VERSENDEN

ARTIKEL DRUCKEN

AUSFL

Wohn

Ein sta

SERVI

> Ver  
Hoci

> VRI  
Für

> Bar  
Reis

> Das  
Tele

KONT

Redakt  
redakt

[Startseite](#) [Politik](#) [Wirtschaft](#) [Westen/Ruhrgebiet](#) [Aus aller Welt](#) [Sport](#) [Kultur/TV](#)  
[Computer](#) [Ratgeber](#) [Wochenende](#) [Reisejournal](#) [Archiv](#) [Sporttabellen](#) [Börse](#)  
[Postkarten](#) [Ticket-Shop](#) [Leser-Service](#) [Internet-Zugang](#) [Auto](#) [Immobilien](#) [Stellen](#)  
[Inserieren](#) [Anzeigenpreise](#) [Online werben](#) [Impressum](#) [Zentralredaktion](#)  
[Geschäftsstellen](#) [Anzeigenabteilung](#) [Weg zur WAZ](#)

Die Inhalte auf dieser und den übrigen Seiten sowie die Gestaltung der Seiten unterliegen dem Urheberrecht der Zeitungsverlagsgesellschaft E. Brost und J. Funke GmbH & Co. Die Verbreitung ist nur mit schriftlicher Genehmigung des Verlages zulässig. Dies gilt auch für die Aufnahme in elektronische Datenbanken und Vervielfältigung auf CD-ROM.