

Nobel-tasoista tutkimusta CSC:n supertietokoneilla

23.10. 14:19 (päivitetty 14:33) — Kalevi Nikulainen

Suomen järeä laskentateho on on haluttua maailman huipputekijöiden keskuudessa. Tieteen tietotekniikan keskuksen CSC:n superkoneet ovat myös olleet apuna Nobel-palkittujen työssä.

Esimerkiksi kemian tämänvuotisen Noble-palkinnon saaja **Gerhard Ertl** teki 2000-luvun alussa tiivistä yhteistyötä Teknillisen korkeakoulun tutkijaryhmän kanssa.

TKK:n tutkijat **Tapio Ala-Nissilä** ja **Petri Salo** mallinsivat vetyatomien käyttäytymistä platinametallipinnalla Cray T3E- ja IBMSC-superkoneilla. Ohjelmistoina oli Finger sekä tutkijoiden omat ohjelmat. IBMSC:ssä töitä ajettiin 32 prosessorilla.

Esimerkiksi vuonna 2002 laskenta-aikaa kului noin 40 000 laskentayksikköä eli yhdellä prosessorilla aikaa olisi mennyt vuosi. 32 prosessorilla työn läpimenoaika oli noin 11 vuorokautta.

TKK:n Fysiikan laboratorion COMP-huippuyksikön tutkijat professori Ala-Nissilä ja dosentti Salo työskentelevät akatemiaprofessori **Risto Niemisen** johtamassa Suomen Akatemian tutkimuksen huippuyksikössä COMP:ssa, jossa mallinnetaan laajasti nanoskaalan ilmiöitä.

Tutkimustyön tulokset on julkaistu vuosina 2002 ja 2003 Physical Review Letters- ja Physical Review B -julkaisusarjoissa.

Nobel-komitea siteeraa näitä tutkimustuloksia näkyvästi raportissaan perustellessaan tämänvuotisen Nobel-palkinnon myöntämistä.

Nobel-raportissa esitelty tutkimus on tehty yhteistyössä TKK:n, yhdysvaltalaisen Brownin yliopiston ja Berliinin Fritz-Haber-instituutin kanssa.

Tutkimuksessa keskityttiin vetyatomien käyttäytymisen tutkimiseen platinametallipinnalla. TKK:n ja Brownin tutkijaryhmät kehittivät kvanttimekaanisten laskujen pohjalta

mallin, jonka avulla voitiin selittää professori Ertlin ryhmän havaitsemat kokeelliset ilmiöt.

Erityisesti keskityttiin vedyn kvanttimekaaniseen luonteeseen, jonka selvittämiseksi tehtiin laajamittaisia teoreettisia laskuja tieteen tietotekniikan keskuksen CSC:n supertietokoneilla Suomessa.

Vaikka tutkimus on luonteeltaan perustutkimusta, on sillä tärkeitä sovelluksia muun muassa tulevaisuuden katalyyttimateriaaleja ja vetyyn perustuvia energiatuottomuotoja kehitettäessä.

Ala-Nissilä on myös Brownin yliopiston ylimääräinen fysiikan professori. Brownin yliopistosta mukana ollut professori Ying on aiemmin tehnyt yhteistyötä muun muassa vuonna 1998 kemian Nobel-palkinnon voittaneen professori Walter Kohnin kanssa, jonka kehittämä niin sanottu tiheysfunktionaaliteoria on keskeisessä roolissa myös tässä projektissa tehdyissä teoreettisissa laskuissa.

<http://www.digitoday.fi/tiede-ja-teknologia/2007/10/23/nobel-tasoista-tutkimusta-cscn-supertietokoneilla/200726385/66>