

# Presse-Information

P220/23  
25. Mai 2023

## **BASF stärkt Forschung und Entwicklung mit leistungsstärkerem Supercomputer**

- **Neuer BASF-Hochleistungsrechner ist der weltweit größte Supercomputer für die industrielle chemische Forschung**
- **Mehr Kapazitäten und Rechenpower für komplexe Modellierungen, virtuelle Experimente und Simulationen**
- **Auch Projekte außerhalb der Forschung und Entwicklung profitieren vom Hochleistungsrechner**

BASF hat an ihrem Standort in Ludwigshafen einen neuen Supercomputer in Betrieb genommen. Dieser löst den aktuellen Supercomputer ab und ist mit einer Rechenleistung von 3 Petaflops deutlich leistungsfähiger als sein Vorgänger mit 1,75 Petaflops.

„Digitale Technologien gehören zu den wichtigsten Instrumenten, um unsere Forschungs- und Entwicklungskompetenzen weiter auszubauen“, sagt Dr. Melanie Maas-Brunner, Mitglied des Vorstands und Chief Technology Officer der BASF. Um beispielsweise aus Tausenden von Möglichkeiten die vielversprechendste Polymerstruktur zu berechnen, brauche es heutzutage überdurchschnittliche Rechenleistungen. „Wir haben in den vergangenen fünf Jahren mit unserem Hochleistungsrechner Curiosity weltweit sehr erfolgreich gearbeitet. So konnten wir die Entwicklungszeit innovativer Moleküle und chemischer Verbindungen deutlich verkürzen und damit die Markteinführung neuer Produkte beschleunigen“, so Maas-Brunner. „Die Rechenkapazitäten reichten aber nicht mehr aus, zudem sind die

Komplexität unserer Forschungsprojekte und damit auch die Anforderungen an den Supercomputer gestiegen. Daher haben wir uns entschieden, in einen neuen Hochleistungsrechner zu investieren.“

Dieser wurde von Hewlett Packard Enterprise (HPE) hergestellt und arbeitet mit Prozessoren (CPUs) von AMD. Neuartig ist sein Kühlkonzept, das auf einer Warmwasserkühlung basiert. Diese nimmt im Supercomputer die Wärme direkt dort auf, wo sie entsteht, und führt sie ab. Dies reduziert den Energiebedarf und damit die Betriebskosten deutlich. Der neue Hochleistungsrechner der BASF, der wie sein Vorgänger Curiosity heißt, ist der weltweit größte Supercomputer, der in der industriellen chemischen Forschung eingesetzt wird. Der Supercomputer, der bislang im Einsatz war, wird von HPE aufgearbeitet und zu mehr als 95 Prozent wiederverwertet.

### **BASF nutzt bei Bedarf zusätzlich Rechenleistung aus der Cloud**

BASF plant zudem, neben dem eigenen Supercomputer vor Ort zusätzlich Rechenleistung aus der Cloud zu nutzen. „Diese Hybridlösung bietet uns die technisch und betriebswirtschaftlich bestmögliche Flexibilität“, so Maas-Brunner. „So können wir sowohl auf Anforderungen reagieren, die besonders viel Rechenleistung benötigen, als auch spezielle Fragestellungen bearbeiten, für die unser eigener Hochleistungsrechner nicht ausgestattet ist.“

### **Supercomputer ermöglicht grundlegend neue Forschungsansätze**

Die Zeitersparnis, die ein Supercomputer als digitales Werkzeug ermöglicht, ist groß. Berechnungen, für die früher circa ein Jahr gebraucht wurde, kann ein Supercomputer in wenigen Tagen durchführen. Dies hat nicht nur die Produktentwicklung verkürzt. „Wir konnten zusätzlich bislang verborgene Zusammenhänge erkennen und verwenden, um vollkommen neue Forschungsansätze voranzutreiben“, sagt Maas-Brunner. „Die Komplexität der Modellierungen, virtueller Experimente und Simulationen nimmt stetig zu und dafür braucht es mehr Rechenleistung. Diese können wir unseren Forscherinnen und Forschern mit dem etwa doppelt so schnellen neuen Supercomputer nun zur Verfügung stellen.“

## **Unternehmensweit im Einsatz seit 2017**

Der Supercomputer Curiosity ist bei BASF seit 2017 im Einsatz. Seitdem erledigt er durchschnittlich mehr als 20.000 Aufträge pro Tag, mehr als 400 Mitarbeitende weltweit nutzen ihn. Im Bereich Personal Care beispielsweise unterstützt der Hochleistungsrechner durch komplexe Simulationen dabei, die Zusammensetzungen von Körperpflegeprodukten besser zu verstehen und exakter vorherzusagen, welche unterschiedlichen kosmetischen Inhaltsstoffe optimal miteinander harmonisieren und die gewünschte Wirkung zeigen. Simulationen helfen auch dabei, Reaktionsprozesse zu planen und zu optimieren. So kann beispielsweise die Verteilung von Stoffen und der Temperatur in einem Reaktor simuliert und auf dieser Basis die Produktion kontinuierlich verbessert werden. Bei der Entwicklung von Pflanzenschutzmitteln identifiziert der Supercomputer durch molekulare Modellierung schon in einer frühen Entwicklungsphase schnell geeignete Verbindungen, die wirksam sind und gleichzeitig über eine gute Umweltverträglichkeit verfügen. Der Supercomputer kommt aber auch bei Projekten außerhalb der Forschung und Entwicklung zum Einsatz. Er hilft unter anderem dabei, Anlagenteile in Produktionsbetrieben strömungstechnisch zu optimieren.

### **Über BASF**

Chemie für eine nachhaltige Zukunft, dafür steht BASF. Wir verbinden wirtschaftlichen Erfolg mit dem Schutz der Umwelt und gesellschaftlicher Verantwortung. Mehr als 111.000 Mitarbeitende in der BASF-Gruppe tragen zum Erfolg unserer Kunden aus nahezu allen Branchen und in fast allen Ländern der Welt bei. Unser Portfolio umfasst sechs Segmente: Chemicals, Materials, Industrial Solutions, Surface Technologies, Nutrition & Care und Agricultural Solutions. BASF erzielte 2022 weltweit einen Umsatz von 87,3 Milliarden €. BASF-Aktien werden an der Börse in Frankfurt (BAS) sowie als American Depositary Receipts (BASFY) in den USA gehandelt. Weitere Informationen unter [www.basf.com](http://www.basf.com).