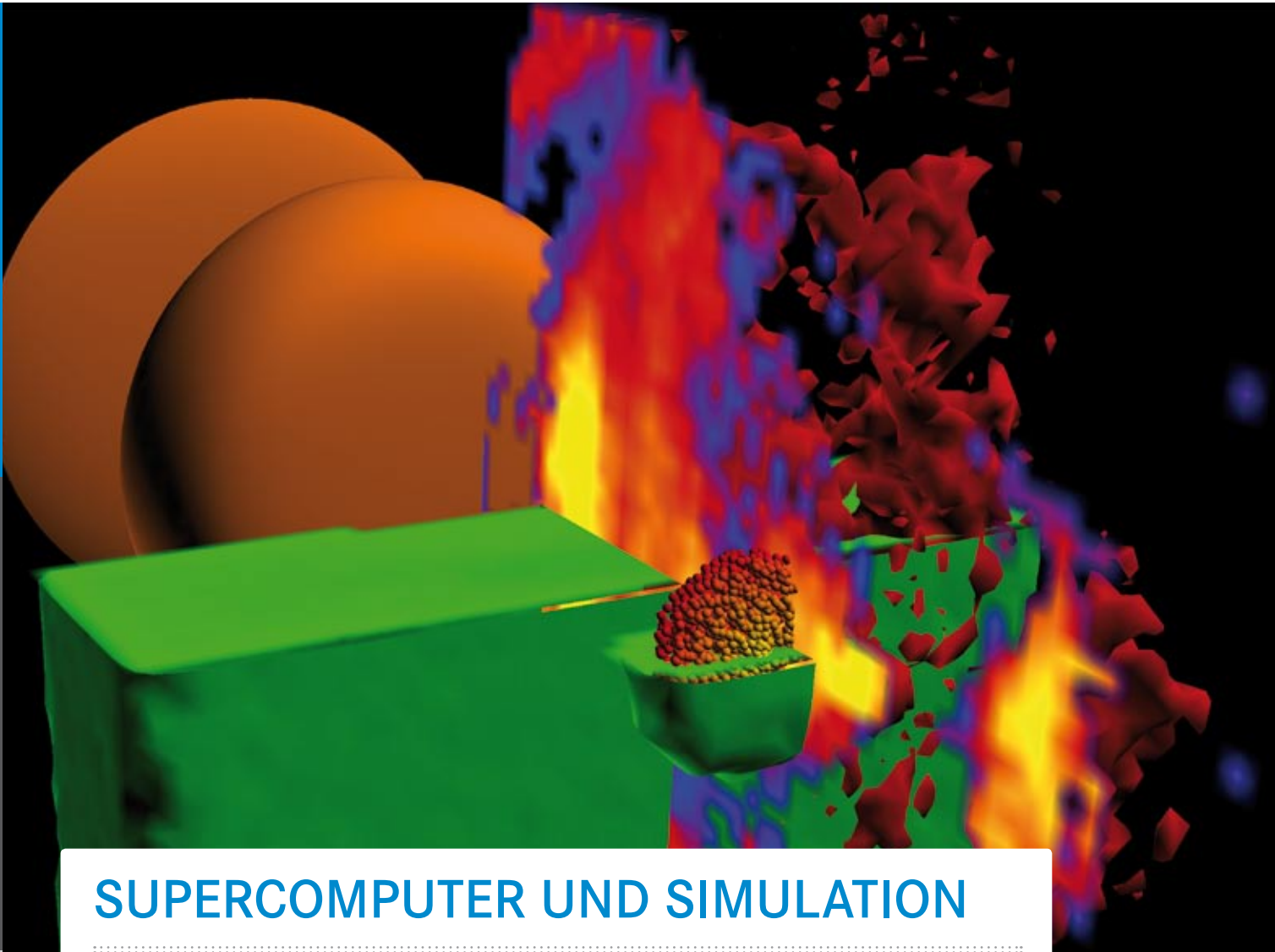


FORSCHEN in Jülich



SUPERCOMPUTER UND SIMULATION

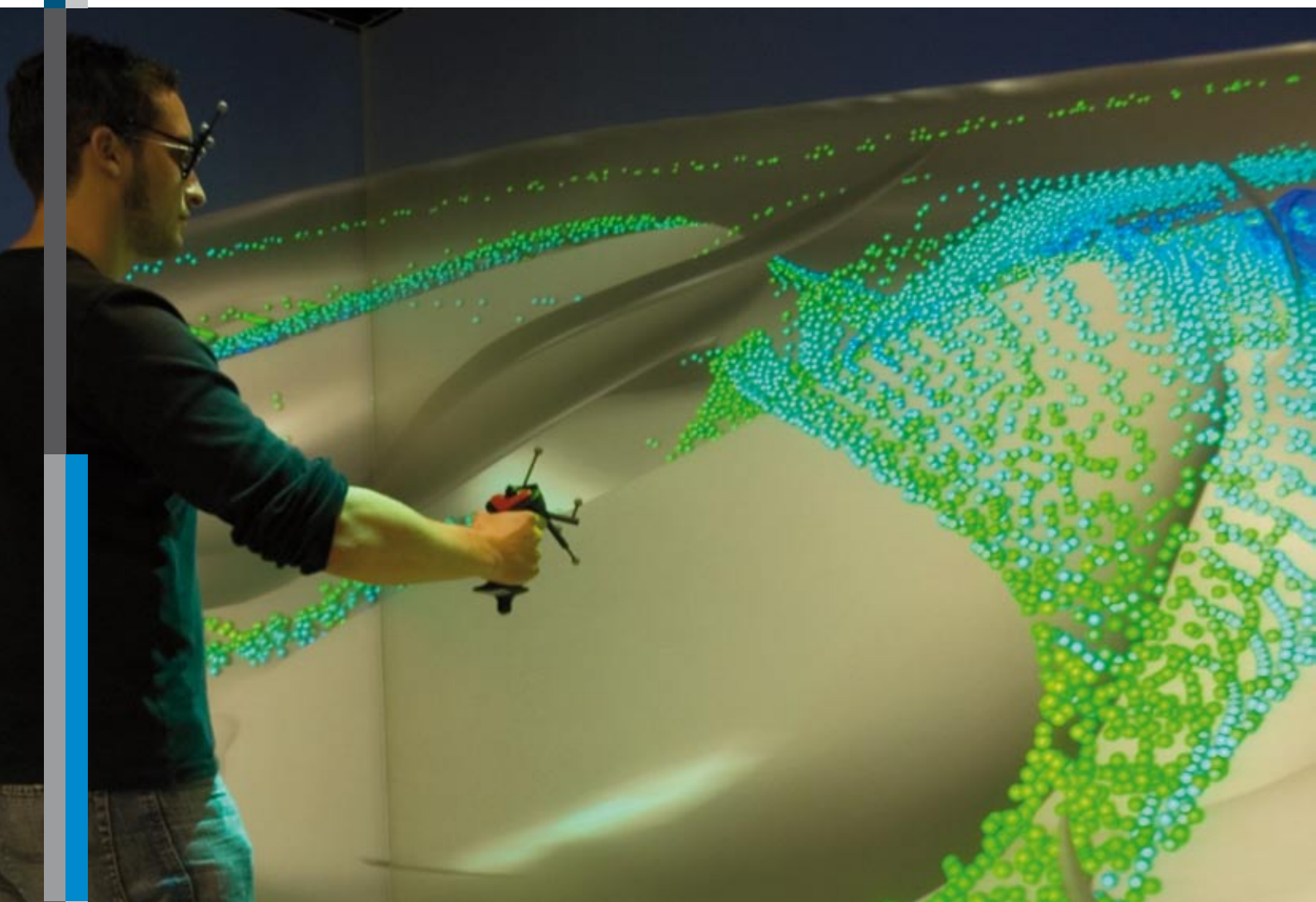
:: ORIGAMI DER PROTEINE

:: SPINS: DER RICHTIGE DREH

:: SCHNELLE RECHNER FÜR BESSERE BLUTPUMPEN

FORSCHEN in Jülich

Das Magazin aus dem Forschungszentrum



Ein Wissenschaftler nutzt eine 3-D-Simulation, um die Atemströmung in der menschlichen Nasenhöhle zu analysieren. Mit dem pistolenähnlichen Objekt in seiner Hand feuert er runde Partikel ab, die sich mit der Strömung bewegen.

Titelbild: Diese Simulation zeigt, was geschieht, wenn Laserpulse auf die Oberfläche eines Festkörpers (grün) treffen. Sie erzeugen dabei unter anderem eine Elektronenwolke (gelb-rot), die nach vorne beschleunigt wird.



Starke Simulationswissenschaft

Computersimulationen bilden neben Theorie und Experiment die dritte Säule der Forschung. Sie ermöglichen Einblicke und Erkenntnisse, die uns aus physikalisch-technischen, finanziellen und ethischen Gründen bislang verwehrt waren. Mit Supercomputern gehen Wissenschaftler dabei sehr unterschiedliche Fragen an: Wie verteilen sich Schad- und Spurenstoffe in der Atmosphäre und wie beeinflussen sie unser Klima? Unter welchen Bedingungen können aus unbelebter Materie einfachste Eiweißmoleküle und somit Bausteine des Lebens entstehen? Warum unterscheidet die Natur zwischen Bild und Spiegelbild? Zu welcher räumlichen Gestalt falten sich fadenförmige Eiweißmoleküle im Körper? Begeben Sie sich zusammen mit den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf Entdeckungsreise und finden Sie Antworten auf diese Fragen im Schwerpunktthema dieses Heftes aus der Reihe „Forschen in Jülich“.

Neben der eigenen Forschung mit und am Supercomputer widmen wir uns im Forschungszentrum Jülich der Aufgabe, Wissenschaftlern Supercomputer der weltweit höchsten Leistungsklasse zur Verfügung zu stellen. Was das konkret bedeutet, erfahren Sie im Beitrag „Der Wettlauf zur Weltspitze“. Die folgenden Artikel schildern, wie wir Methoden und Werkzeuge entwickeln, um die Forscher auf verschiedenen Gebieten der Computational Sciences zu unterstützen. Denn große Rechenkapazität allein führt nicht weiter, man muss sie auch zu nutzen wissen. Der hohe Mehrwert der Jülicher Supercomputer für die Forschung entsteht durch die Kombination der Kompetenz in der Simulationswissenschaft mit dem vielfältigen naturwissenschaftlichen Umfeld.

Weil das Forschungszentrum Jülich nicht in erster Linie auf Prozessoren, sondern auf Köpfe setzt, übernehmen wir auch eine Vorreiterrolle bei der deutschen Forscherausbildung in den Simulationswissenschaften. Gemeinsam mit der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule (RWTH) Aachen betreiben wir die „German Research School

for Simulation Sciences (GRS)“, die Master- und PhD-Studiengänge für exzellente Studentinnen und Studenten sowie für Doktorandinnen und Doktoranden anbietet. Forschungszentrum Jülich und RWTH sind damit zugleich Modell für die Zusammenarbeit zwischen Hochschulen und außeruniversitären Forschungsorganisationen. Die Kooperation mit der RWTH geht dabei noch weit über die GRS hinaus: Die Forschungsallianz JARA (Jülich-Aachen Research Alliance) mitsamt ihrer Sektion Simulationswissenschaften (JARA-SIM) bildet den institutionellen Rahmen für eine langfristige Ausrichtung gemeinsamer Forschungsprojekte.

Im Gauss Centre for Supercomputing (GCS) arbeitet Jülich eng mit den nationalen Höchstleistungsrechenzentren in München und Stuttgart zusammen. Die deutschen Supercomputer-Experten sprechen daher international mit einer Stimme. So vertritt das GCS die deutschen Interessen im Projekt PRACE („Partnership for Advanced Computing in Europe“), das die Grundlagen für eine grenzüberschreitende Supercomputer-Infrastruktur in Europa schafft. Durch die Bündelung des Know-hows der Partner und einen koordinierten Einsatz von Finanzmitteln erhalten Forscher in ganz Europa in Zukunft Zugriff auf Supercomputerleistung auf internationalem Spitzenniveau. Wir bringen uns darüber hinaus in die Gauss-Allianz ein, in die neben dem GCS die deutschen regionalen und themenbezogenen Rechenzentren eingebunden sind. Mit unserem Engagement in dieser Allianz, im GCS und bei PRACE stärken wir nachhaltig den Jülicher Anspruch, Europas führendes Zentrum für Supercomputing und Simulationswissenschaften zu sein, das weltweit keinen Vergleich scheuen muss.

Prof. Dr. Achim Bachem
Vorstandsvorsitzender des
Forschungszentrums Jülich

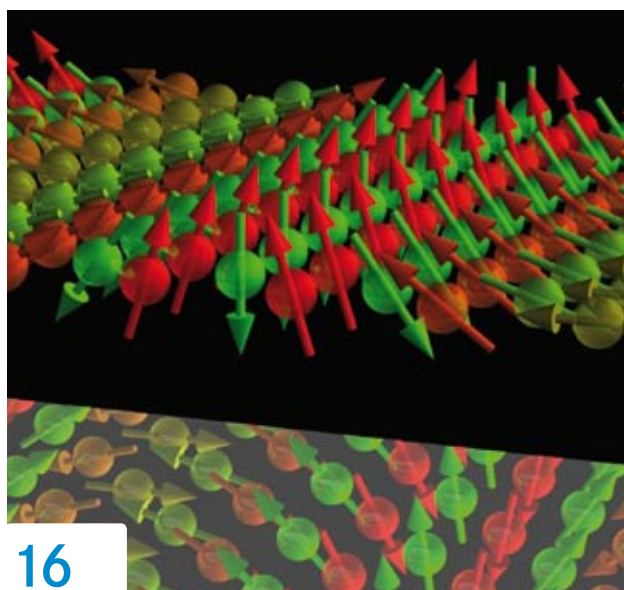
Dr. Sebastian M. Schmidt
Mitglied des Vorstands



12

:: ORIGAMI DER PROTEINE

Wenn ein Blatt Papier geknickt wird, können daraus alle möglichen Figuren entstehen. Auch fadenförmige Eiweißmoleküle falten sich zu sehr unterschiedlichen Gebilden. Die Simulation dieser Faltvorgänge in Jülicher Supercomputern kann helfen, Krankheiten besser zu verstehen.



16

SPINS: DER RICHTIGE DREH

In einer dünnen Manganschicht auf dem Metall Wolfram ordnen sich die Elementarmagnete immer in einer linksdrehenden Spirale an, nie in einer rechtsdrehenden. Jülicher Wissenschaftler fanden dafür die Erklärung und haben nun die möglichen Anwendungen des kuriosen Phänomens im Blick.



29

SCHNELLE RECHNER FÜR BESSERE BLUTPUMPEN

Wissenschaftler optimieren mittels Supercomputer kleine implantierbare Pumpen, mit denen sich der Kreislauf von Patienten stabilisieren lässt. Jülicher Simulationsexperten helfen dabei, die notwendigen Berechnungen schnell und effektiv zu machen.

IN DIESER AUSGABE

3 Editorial

:: SCHNAPPSCHÜSSE AUS JÜLICH

6 Forschung im Überblick

Ein Kaleidoskop von Bildern zeigt Höhepunkte aus der Jülicher Forschung – von Luftuntersuchungen bei den Olympischen Spielen über verspanntes Silizium bis hin zu einem einzigartigen Gerät für den Blick ins Gehirn.

:: SCHWERPUNKT

8 Computersimulationen heute und morgen

10 Turbulente Atmosphäre

Jülicher Forscher verfolgen die Spuren von Luftschadstoffen rund um den Globus.

12 Origami der Proteine

Zu welcher räumlichen Gestalt falten sich fadenförmige Eiweißmoleküle? Simulationen liefern die Antwort.

14 Computersimulation ist eine Kunst

16 Spins: Der richtige Dreh

Warum die Natur in manchen magnetischen Materialien zwischen Bild und Spiegelbild unterscheidet.

18 Virtuelle Ursuppe

Hoher Druck, heißes Wasser und Mineralien – unter solchen Bedingungen könnten auf der urzeitlichen Erde Proteine entstanden sein.

:: HIGHLIGHTS

20 Der Wettlauf zur Weltspitze

Ein Blick hinter die Kulissen: Wie der schnellste zivile Supercomputer der Welt im Forschungszentrum Jülich installiert wurde.

24 Die Zukunft des Supercomputing in Jülich

Interview mit Prof. Thomas Lippert, Direktor am Institute for Advanced Simulation und Leiter des Jülich Supercomputing Centre.

26 Mittendrin statt nur davor

Wissenschaftler der Jülich-Aachen Research Alliance tauchen gemeinsam in künstliche, dreidimensionale Welten ein – künftig auch von verschiedenen Orten aus.

29 Schnelle Rechner für bessere Blutpumpen

Jülicher Simulations-Know-how hilft, lebensrettende Blutpumpen zu optimieren.

32 Türen zur Erkenntnis

Die Rechenleistung der Supercomputer ist ständig gestiegen – und mit ihr die Qualität der Simulationen.

34 Nachrichten rund um das Supercomputing

Von Simulationen, die Menschen retten, einer Software für verteiltes Rechnen und einer Eliteschule für den wissenschaftlichen Nachwuchs.

MIKROSKOPIE IN NEUER DIMENSION

Mittels ultrahochauflösender Elektronenmikroskopie ist es gelungen, Abstände von Atomen bis auf wenige Pikometer genau zu messen, berichteten Jülicher Wissenschaftler in der renommierten Fachzeitschrift „Science“. Ein Pikometer ist der Milliardste Teil eines Millimeters. Die Verschiebung von Atomen in dieser Größenordnung entscheidet über viele technisch bedeutsame Materialeigenschaften, etwa über die Fähigkeit, als Halbleiter Strukturen der Nanoelektronik zu tragen oder als Supraleiter nahezu verlustfrei Strom zu leiten.

VERSPANNTES SILIZIUM

Ein innovatives Material aus Jülich soll elektronische Geräte kleiner, schneller und stromsparender machen. Verspanntes Silizium zeichnet sich gegenüber herkömmlichem Silizium durch ein gestrecktes Kristallgitter und verbesserte elektronische Eigenschaften aus. Für die weitere Entwicklung zu einer anwendungsnahen Technologie erhielt das Jülicher Team um Prof. Siegfried Mantl 3,2 Millionen Euro Fördermittel im Rahmen des vom Bundesforschungsministerium bewilligten Verbundprojektes DECISIF und aus der Industrie.



Forschung im Überblick

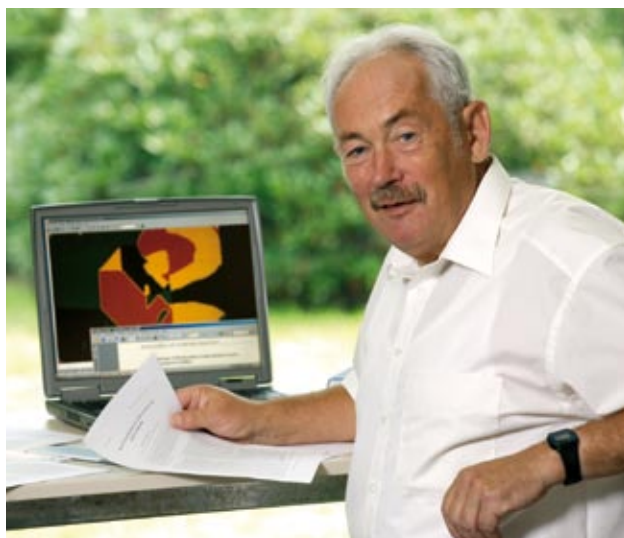
Die Jülicher Forschung mit dem „Werkzeug“ Supercomputer steht im Mittelpunkt dieses Magazins. Jülicher Wissenschaftler sind aber auch auf anderen Forschungsgebieten aktiv und erfolgreich. Einige Momentaufnahmen künden davon.

LINKTIPP

www.fz-juelich.de

ORDEN FÜR DEN NOBELPREISTRÄGER

Der Jülicher Nobelpreisträger Prof. Peter Grünberg erhielt im April 2008 das Große Verdienstkreuz mit Stern des Verdienstordens der Bundesrepublik Deutschland, rund vier Monate später den Verdienstorden des Landes Nordrhein-Westfalen. Bundespräsident Horst Köhler und NRW-Ministerpräsident Jürgen Rüttgers ehrten den Physiker jeweils persönlich. Dieser hatte mit dem Riesenmagnetowiderstand (GMR) 1988 einen Effekt entdeckt, der heute alltäglich in Computern genutzt wird. Mit bisher über fünf Milliarden hergestellten Leseköpfen gibt es statistisch einen GMR-Sensor für jeden Erdenbürger.



FORSCHER VERLASSEN ELFENBEINTURM

„Zur Rolle eines leitenden Wissenschaftlers gehört es inzwischen, zu Kontakten mit den Massenmedien bereit zu sein und seine Forschung öffentlich vorzustellen“, folgert der Jülicher Prof. Hans Peter Peters aus einer von ihm geleiteten Studie, die im Magazin „Science“ veröffentlicht wurde. Insgesamt sind Wissenschaftler mit der journalistischen Berichterstattung über ihre Arbeit zufriedener als das Vorurteil vom „Elfenbeinturm“ vermuten lässt. Rund 40 Prozent der befragten Forscher aus den fünf größten Wissenschaftsnationen finden öffentliche Berichterstattung zudem karriereförderlich.



OLYMPISCHE ATMOSPHÄRE

Jülicher Atmosphärenforscher waren bei den Olympischen Spielen in Peking mit am Start: Prof. Andreas Wahner begleitete eine deutsch-chinesische Messkampagne, die während der Wettkämpfe die Luftqualität in der chinesischen Hauptstadt untersuchte – vom Feinstaub bis zur Belastung mit Aerosolen, Stickoxiden, Ozon und Formaldehyd. Die Auswertung soll zeigen, wie man künftig effizient gegen die Luftverschmutzung vorgehen kann.



DER DUFT DES ADLERHOLZES

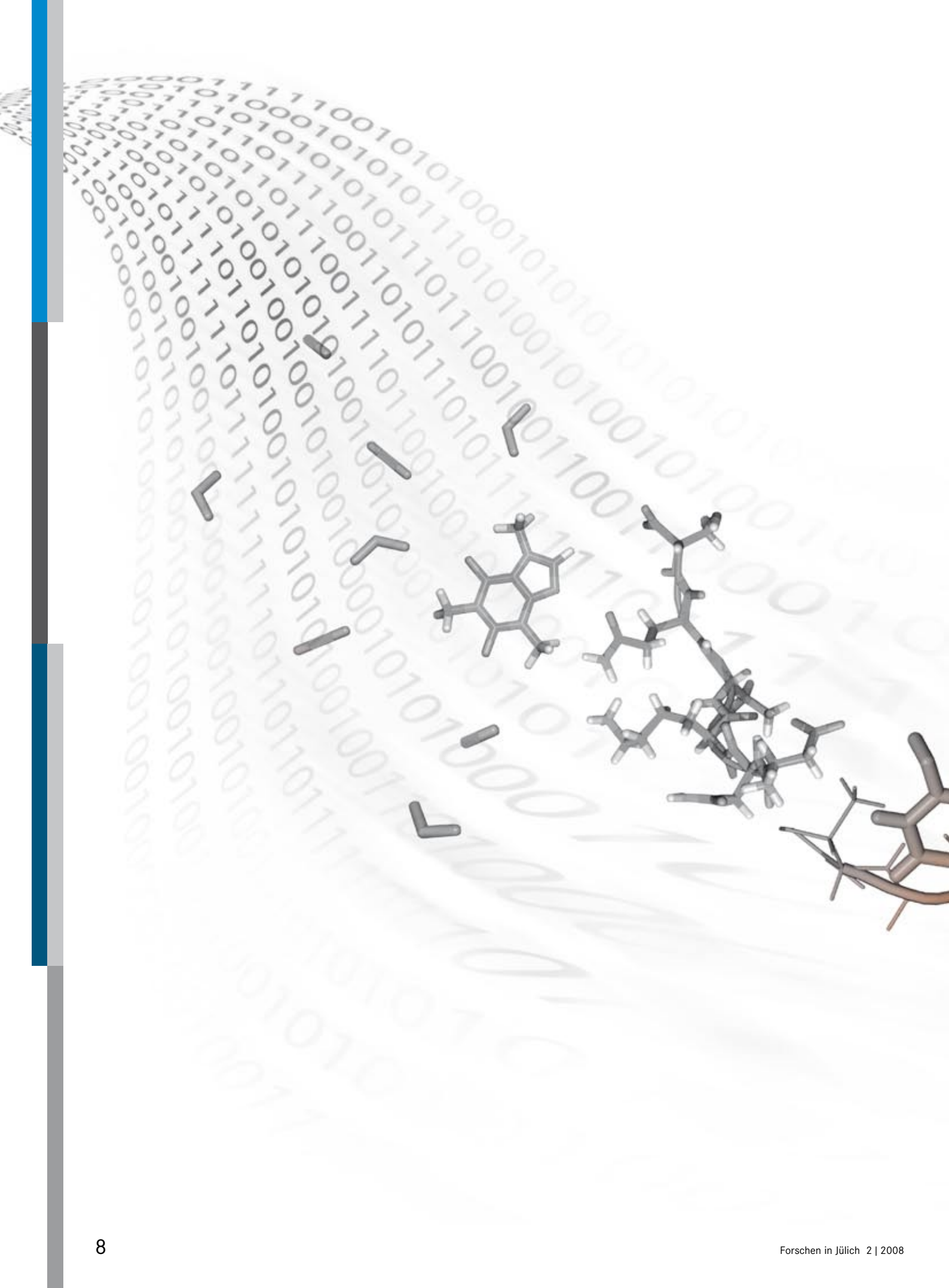
Die Nachfrage nach illegal geschlagenem Adlerholz ist hoch: Bis zu 10 000 Dollar bringt ein Kilo des Tropenholzes. Sein orientalisch duftendes Harz steckt in Cremes und Parfums. Jülicher Wissenschaftler untersuchen in einem nun gestarteten Langzeitprojekt in Indonesien, ob gleichwertiges Adlerholz forstwirtschaftlich angebaut werden kann.

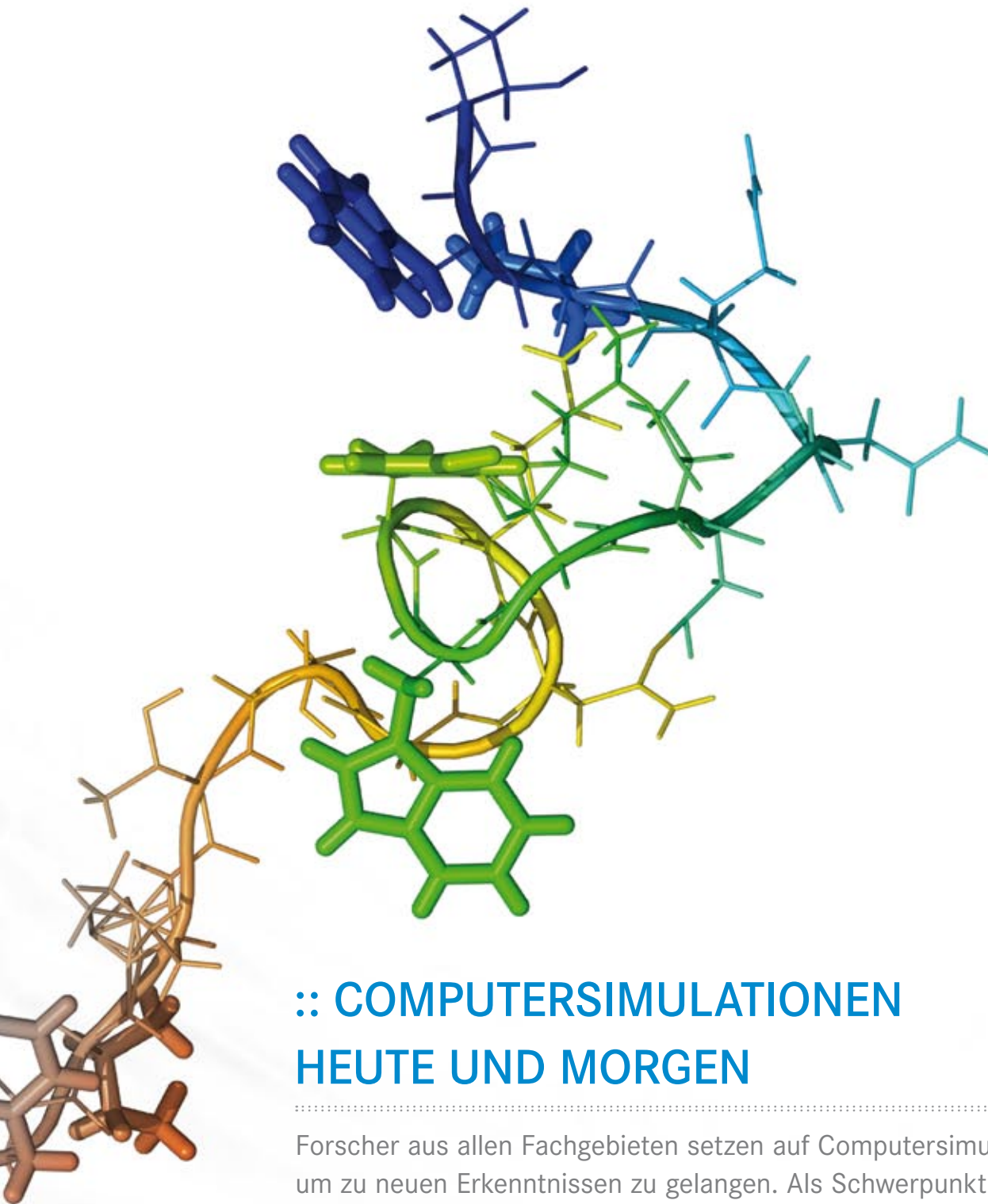


GENAUER BLICK INS HIRN

Anfang 2009 ist es soweit: In Jülich wird nach zweijähriger Vorbereitung ein weltweit einzigartiges Großgerät den Betrieb aufnehmen, das Strukturen und Stoffwechselvorgänge des Gehirns mit bisher unerreichter Genauigkeit abbildet. Es ist ein Kombisystem, bestehend aus einem Magnetresonanztomographen (MRT) und einem Positronenemissionstomographen (PET). Die Magnetspulen des MRT erzeugen ein Magnetfeld von 9,4 Tesla – fast 200 000-mal so stark wie das der Erde.







:: COMPUTERSIMULATIONEN HEUTE UND MORGEN

Forscher aus allen Fachgebieten setzen auf Computersimulationen, um zu neuen Erkenntnissen zu gelangen. Als Schwerpunkt dieses Magazins finden sich vier Beispiele dafür: Wissenschaftler erforschen die Atmosphäre und das Klima, biologisch wichtige Substanzen, grundlegende Materialeigenschaften sowie chemische Vorgänge, die im Labor nicht nachstellbar sind. Dabei nutzen sie die ständig steigende Rechenleistung der Jülicher Supercomputer. So können die Forscher in Zukunft komplexere Vorgänge und Strukturen untersuchen – ein Fortschritt, den diese Grafik symbolhaft zeigt: als Zahlenkolonnen, dem zunächst die Moleküle einfacher Gase und schließlich das komplette Modell eines Eiweißes entspringen.



Turbulente Atmosphäre

Luftschadstoffe reisen um die Welt. Wie weit sie kommen, hängt davon ab, wie schnell sie bei chemischen Prozessen abgebaut werden. Jülicher Forscher folgen mit ihren Supercomputern den Spuren der Gase und ermitteln, wie die Luftverschmutzung das Klima beeinflusst.

Wenn über Europa die Luft nicht rein ist, so sind daran nicht zwingend die Europäer schuld. Denn der Wind trägt etwa die Abgase nord-amerikanischer Autofahrer und Fabriken bis zu uns. Verschmutzte Luft macht weder an den Grenzen von Ländern noch an denen von Kontinenten Halt. „Wer ist also wann und wo für die Luftverschmutzung verantwortlich? Solange diese Frage nicht beantwortet werden kann, ist es schwierig, entsprechende Gegenmaßnahmen zu entwickeln“, sagt Dr. Martin Schultz. Der Experte vom Jülicher Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre (ICG) weiter: „Satellitenbeobachtungen und andere Messungen geben da einen wertvollen Fingerzeig, können aber nicht überall und zu jeder Zeit Daten liefern.“

Den einzigen Ausweg aus dem Dilemma bieten Computersimulationen, die den Weg der Schad- und Spurengase

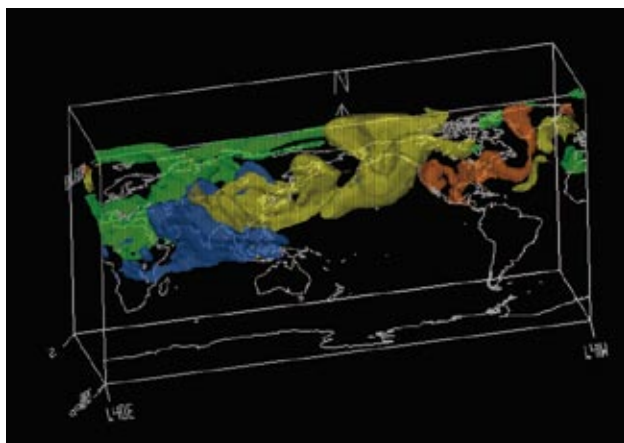
in der Atmosphäre nachvollziehen. Das klingt simpel, ist es aber nicht: Ausgangspunkt sind staatliche Berichte darüber, wie viel Abgase im jeweiligen Land ausgestoßen werden. Die Forscher müssen dann sämtliche chemischen Vorgänge in der Luft berücksichtigen, bei denen die Schadstoffe umgewandelt oder abgebaut werden. Außerdem gilt es, den Einfluss des Windes, der Sonnenstrahlung und der Temperatur zu berücksichtigen.

VON EUROPA NACH ASIEN

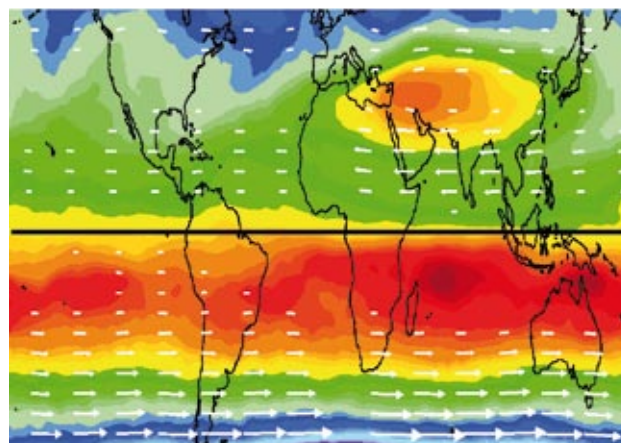
Das Team um Schultz hat deshalb geschickt ein existierendes Computermodell zur Simulation der chemischen Prozesse in der Troposphäre, der untersten Schicht der Atmosphäre, mit dem globalen Klimamodell ECHAM5 gekoppelt. „Damit können wir zeigen, wie die europäischen, die amerikanischen oder die asiatischen Emissionen die Verteilung von Schadstoffen in



Wetterballons liefern Atmosphärenforschern wichtige Daten. Doch mit ihnen allein lässt sich der Weg von Luftschadstoffen nicht verfolgen.



Diese Simulation zeigt beispielhaft, wie sich Emissionen des Luftschadstoffs CO aus europäischen (grün), nordamerikanischen (orange), südasiatischen (blau) und ostasiatischen (gelb) Quellen in der Atmosphäre verteilen.



Simulation mit dem Jülicher Computermodell CLaMS: Zu sehen ist die asiatische Monsunzirkulation über dem Himalaya, in deren Kern troposphärische Luft – erkennbar am hohen CO-Gehalt (rot) – schnell aufwärts transportiert wird.

der Atmosphäre beeinflussen“, erläutert Schultz. Die Forscher haben sich dabei unter anderem mit Kohlenmonoxid – CO – befasst. Der Luftschadstoff CO beeinflusst indirekt die Konzentration der Treibhausgase in der Atmosphäre und damit das Klima. Mit ihm lassen sich die Reisewege von Spurengasen gut verfolgen, da er erst nach ein bis zwei Monaten abgebaut wird. In dieser Zeit kann ein Luftpaket einmal die Welt umrunden. Ein Ergebnis der Simulation: CO aus europäischen Quellen wird meist in bodennahen Luftschichten über Asien in Richtung Osten transportiert, kann aber vor allem im Winter auch die Luft über weiten Teilen der Arktis verschmutzen.

Doch Schad- und Spurengase verteilen sich nicht nur von Süd nach Nord oder West nach Ost, sondern auch von unten nach oben. „Luftverschmutzungen gelangen in den Tropen in hohe Luftschichten über 16 Kilometer, die ansonsten isoliert von unteren Schichten sind. Das gilt beispielsweise auch für die FCKW, die wesentlich für die Entstehung des Ozonlochs über den Polen sind“, erläutert Dr. Rolf Müller vom ICG. Er simuliert mit Hilfe des Jülicher Computermodells CLaMS die chemischen Vorgänge in der Stratosphäre. In mittleren geographischen Breiten beginnt dieser Teil der Atmosphäre rund zehn bis zwölf Kilometer über dem Erdboden und damit knapp oberhalb der üblichen Flughöhe

von Passagierflugzeugen. CLaMS nutzt Daten der Wetterdienste an den Knotenpunkten eines virtuellen Gitters, das den Erdball umhüllt. Gefüttert mit Informationen über Windrichtung, Temperatur und Druck, verfolgt der Computer den Pfad einzelner stratosphärischer Luftpakete, die rund 100 Kilometer voneinander entfernt sind. Die Konzentration der Spurengase im jeweiligen Luftpaket verändert sich dabei aufgrund der simulierten chemischen Prozesse ständig.

Als vor kurzem bei der Auswertung von Satellitendaten erstmals auffiel, dass sich gelegentlich geringe Mengen Blausäure (HCN) in der Stratosphäre über den Tropen einfänden, konnte CLaMS erfolgreich die Verteilung dieses Spurengases nachstellen. „Das giftige HCN hat in diesen geringen Konzentrationen keine direkten Auswirkungen. Wenn man jedoch versteht, wie das HCN in die Stratosphäre gelangt, so versteht man auch besser die Transportwege anderer Spuren- und Schadgase“, ist Müller überzeugt. HCN, das bei Bränden in den Tropen entsteht, steigt demnach bei speziellen Windverhältnissen bis zur Unterkante der Stratosphäre auf. Die Jülicher Modellrechnungen weisen darauf hin, dass es dann hauptsächlich durch recht langsame und stetige Vermischung in die Stratosphäre eingetragen wird – und nicht etwa sporadisch mit Hilfe der gewaltigen tropischen Gewittertürme.

Künftig wollen die Forscher um Müller den Abstand der simulierten Luftpakete verringern und mit CLaMS den tropischen Spurengaseintrag in die Stratosphäre über mehrere Jahre hinweg genauer verfolgen. „So etwas könnten wir uns gar nicht vornehmen, würde uns nur die gleiche Rechenleistung zur Verfügung stehen wie vor zehn Jahren“, sagt Müller.

BESSERE VORHERSAGEN

Ähnliches gilt für das Team um Schultz: „Modelle, die den Zusammenhang zwischen Luftverschmutzung und Klima berücksichtigen, können wir erst seit Kurzem rechnen – dank neuer Supercomputer-Generationen. Und wir erweitern unser Modell nun sogar um die chemischen Vorgänge in der Stratosphäre, die wir bislang auch aus Gründen fehlender Rechenleistung nicht einbeziehen konnten“, so Schultz. Er ist sich sicher, dass dadurch die Klimavorhersagen noch zuverlässiger werden. Diese Überzeugung teilt er mit den anderen Experten des Weltklimarates IPCC, der 2007 mit dem Friedensnobelpreis ausgezeichnet wurde. Mit den Resultaten ihrer Simulationen werden die Jülicher Forscher erneut einen wertvollen Beitrag zum nächsten Weltklima-Report liefern, der voraussichtlich im Jahr 2013 Politikern, Unternehmern und der breiten Öffentlichkeit Ausmaß und Folgen des künftigen Klimawandels vor Augen führen wird.

Frank Frick



Origami der Proteine

Je nachdem, wie ein Blatt Papier gefaltet wird, können daraus alle möglichen Figuren entstehen: ein Frosch, ein Kranich oder ein Elefant. Ebenso bilden sich aus fadenförmigen Eiweißmolekülen durch Faltungen dreidimensionale Strukturen. In dieser Form können die Proteine im Körper wichtige Funktionen übernehmen. Die Simulation dieser Faltvorgänge in Jülicher Supercomputern kann womöglich helfen, Krankheiten besser zu verstehen und Ansatzpunkte für Therapien zu finden.

Langgestreckte Muskelproteine, Y-förmige Antikörper und kompliziert geformte Enzyme mit Taschen und Vertiefungen – Eiweiße haben je nach ihrer Aufgabe unterschiedliche Gestalt. Dabei bestehen sie alle aus einer Kette kleiner Bausteine – den Aminosäuren. Deren Eigenschaften und damit die Kräfte, die zwischen ihnen wirken, bestimmen im Zusammenspiel mit dem umgebenden Wasser die Form eines Eiweißmoleküls. Wie dramatisch sich ein Fehler auswirkt, zeigt das Beispiel der Prion-Proteine: Eine falsche Faltung führt bei Kühen zum Rinderwahnsinn, bei Schafen zu Scrapie und beim Menschen zur tödlichen Creutzfeldt-Jakob-Krankheit.

Mit experimentellen Methoden lässt sich die Form vieler Eiweißketten nur umständlich und kostenintensiv ermitteln, auch wenn die genaue Aminosäureabfolge bekannt ist. Der einfachere Ansatz ist es daher oft, aus den physikalischen Eigenschaften der aneinandergereihten Bausteine die Faltung der Kette zu errechnen – ab initio, wie die Wissenschaftler sagen. Aber weil ein Protein oft aus vielen Hundert Aminosäuren besteht, ist das extrem rechenintensiv. Man braucht dafür einen Supercomputer wie den Jülicher JUGENE. Und man braucht eine kluge Strategie für die Simulation, wie sie Prof. Adam Liwo von der Universität Gdansk (Danzig) entwickelt hat.

Er geht von einem „grobkörnigen“ Ansatz aus. Dafür bezieht er nicht alle einzelnen Atome des Proteins in die Berechnungen ein, sondern zunächst nur die wichtigsten Wechselwirkungen jeder Aminosäure. „Man kann das mit zwei Strategien beim Pilzesuchen vergleichen“, erläutert Liwo: „Entweder man kämmt systematisch jeden Quadratzentimeter des Geländes durch, einschließlich sandiger Stellen und Tümpel. Oder man sucht zunächst unter Bäumen, wo Pilze erfahrungsgemäß wachsen.“ Die erste Strategie entspräche der Berechnung aller Atome. „Sie ist zwar genauer, aber sie nimmt die ganze Pilzsaison in Anspruch“, sagt Liwo. Die Beschränkung auf

interessante Stellen führt sehr viel schneller zu einem Korb voller Pilze – oder zu einer Vorstellung, wie ein Eiweiß geformt ist. Erst danach nimmt Liwo wichtige Regionen des Moleküls genauer ins Visier und simuliert sie Atom für Atom. Noch klappt das nicht hundertprozentig genau, aber die virtuellen Moleküle kommen der Natur immer näher.

Den Simulationen liegt das Prinzip zugrunde, dass eine Eiweißkette unter natürlichen Bedingungen die Form annimmt, deren Energiegehalt am niedrigsten ist – so wie Wasser sich in einer Vertiefung sammelt, statt von selbst über den Rand zu fließen. Wenn die Forscher die Kräfte berechnen wollen, die dem Eiweiß seine Form geben, nutzen sie zunächst die grundlegenden Gesetze der Physik, um ein Kräftefeld zu konstruieren. Die Simulation wird mit einigen kleinen Proteinen, deren Faltungsschritte und natürliche Form aus Experimenten bekannt sind, gleichsam trainiert.

Mit diesen Informationen gefüttert, spielt der Supercomputer alle möglichen Abfolgen der Faltschritte durch und sagt die Gestalt unbekannter Eiweiße voraus. „Inzwischen gelingt das schon für Ketten aus mehr als 300 Aminosäuren“, berichtet Liwo. Demnächst will er sich lange Muskelproteine vornehmen, und auch Enzymkomplexe, die aus mehreren Unter-einheiten mit jeweils 200 bis 500 Aminosäuren bestehen.

TRAUMHAFTE RECHENLEISTUNG

Mit einem so leistungsstarken Rechner wie JUGENE sei das zu realisieren, versichert Liwo. Er lässt seine Simulationen in Jülich laufen, „weil dort der größte Multiprozessor-Rechner in Europa steht, und Jülich ein exzellentes Forschungszentrum ist“. Außerdem arbeitet er auch an Supercomputern in den USA und an einem kleinen Rechner im heimischen Gdansk. „Der Appetit wächst mit dem Essen“, kommentiert er den ständig wachsenden Bedarf an Rechenkapazität. „In den 80-er Jahren habe ich für meine Doktorarbeit mit einem russischen RIAD-Rechner langwierig die Gestalt eines kleinen Peptids aus neun Aminosäuren berechnet – heutzutage eine Übungsaufgabe, die meine Studenten in zwei Stunden lösen.“ Und noch vor fünf Jahren habe er von der Simulation einer Eiweißkette mit 500 Gliedern nicht einmal geträumt,

sagt Liwo. Inzwischen hält er es für möglich, sogar ganze Bereiche der zellulären Maschinerie – also das Zusammenwirken mehrerer Proteine – zu simulieren. Ein passendes Werkzeug dafür könnten die europäischen Supercomputer der Petaflop-Klasse sein, die Jülich und seine Partner im Verbund PRACE entwickeln.

GEMEINSAME PROJEKTE

Der Kontakt zwischen Liwos Arbeitsgruppe und dem Forschungszentrum Jülich geht auf eine umfassende Initiative aus dem Jahr 2004 zurück. Hervorragenden Forschern aus den neuen EU-Ländern wurde damals der einfache Zugang zu



Computerberechnungen zeigen, wie sich ein wichtiger Teil eines menschlichen Proteins faltet. Der Faltvorgang hat auf dem ersten Bild (links) dieser Sequenz bereits begonnen, auf dem Bild rechts nimmt der Proteinabschnitt seine endgültige Form an.

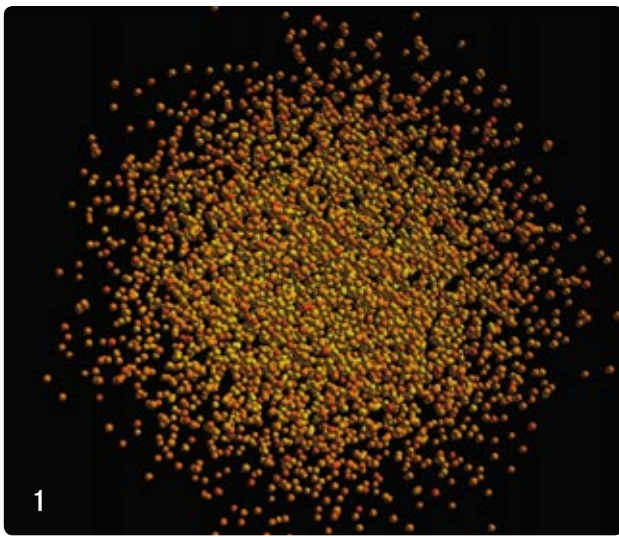
den Jülicher Rechnern angeboten, zu den gleichen Bedingungen wie deutschen Forschern. „Wir haben uns damit den sehr guten theoretischen Wissenschaftlern in Osteuropa geöffnet und diese konnten auf unsere ausgezeichnete Infrastruktur zugreifen“, berichtet Dr. Norbert Attig vom Jülich Supercomputing Centre. „Davon haben alle Seiten in Europa profitiert.“ Schnell entwickelten sich große gemeinsame Projekte.

„Die aufwändigen Simulationen der Proteinfaltung boten sich dann für Berechnungen auf den Supercomputern JUBL und JUGENE an“, erinnert sich Norbert Attig. „Denn sie erfordern zum einen sehr viel Rechenzeit, zum anderen lassen sie sich gut auf viele Prozessoren verteilen.“ Also ein Fall für JUGENE mit seinen mehr als 65 000 Prozessoren. Der Antrag

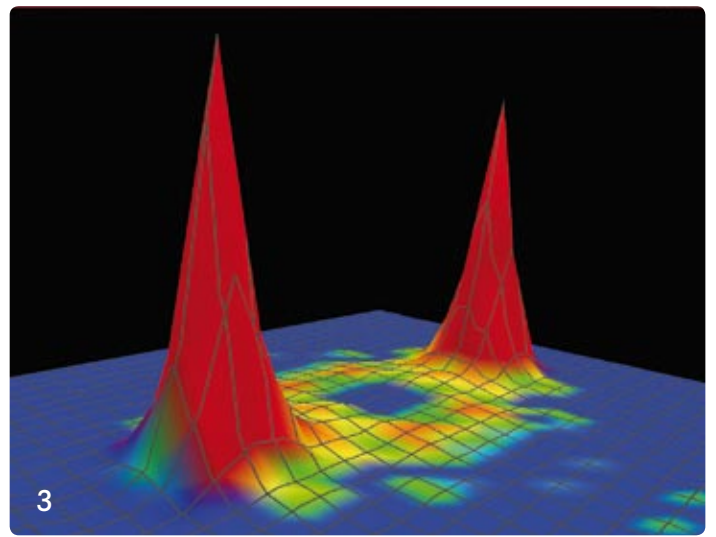
der Arbeitsgruppe aus Gdansk wurde von dem unabhängigen Gutachterrät des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) – der Einrichtung, die die Rechenzeit auf Supercomputern der Helmholtz Gemeinschaft verteilt – exzellent bewertet. Seitdem bringt der Jülicher Superrechner virtuelle Eiweißketten in Form.

Das Origami der Eiweißmoleküle im Supercomputer sei keineswegs eine akademische Spielerei, betont Liwo. So könnten die Simulationen helfen, das Verklumpen von Proteinen bei der Alzheimer-Erkrankung zu verstehen oder Ansatzpunkte für Medikamente zu finden. Ein weiteres Ziel ist, die Wechselwirkungen von Proteinen und Genen zu erfassen – eine zentrale Aufgabe beispielsweise in der Krebsforschung.

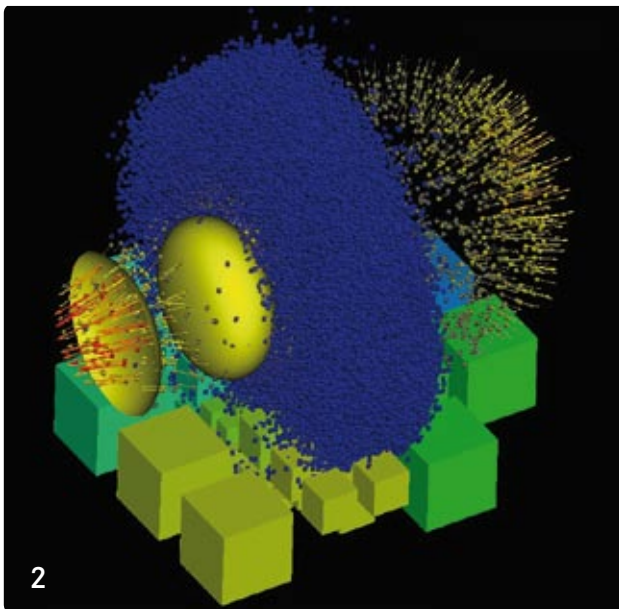
Wiebke Rögener



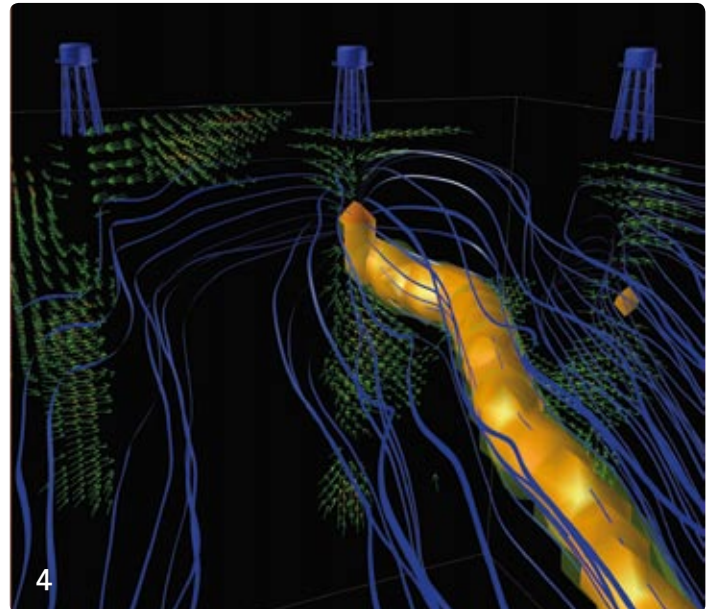
1



3



2



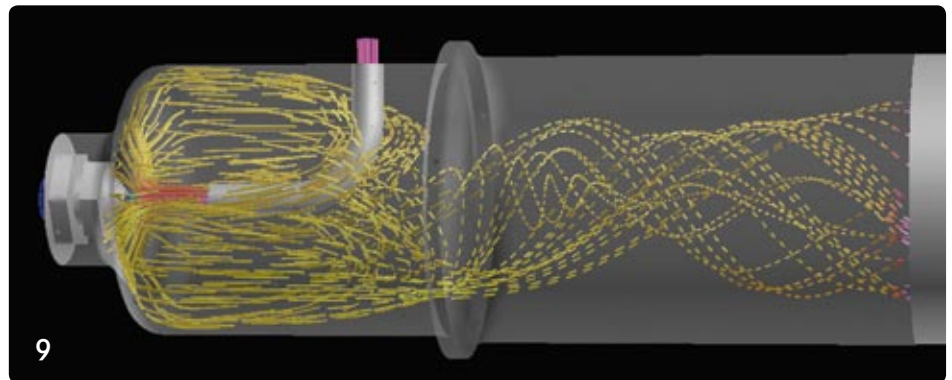
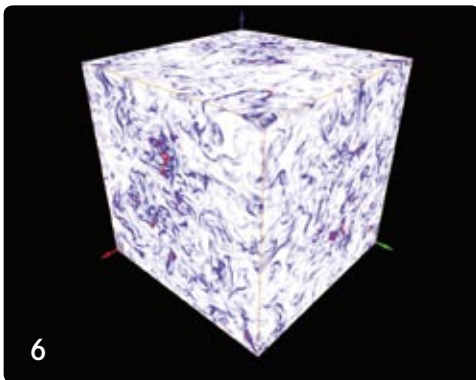
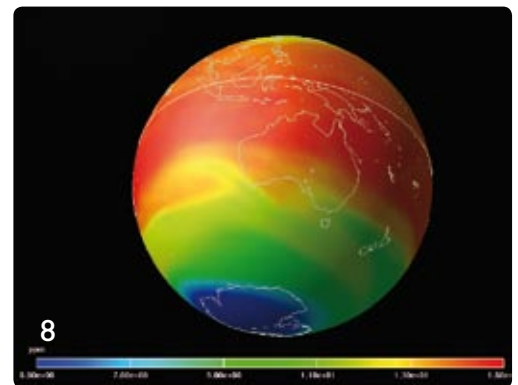
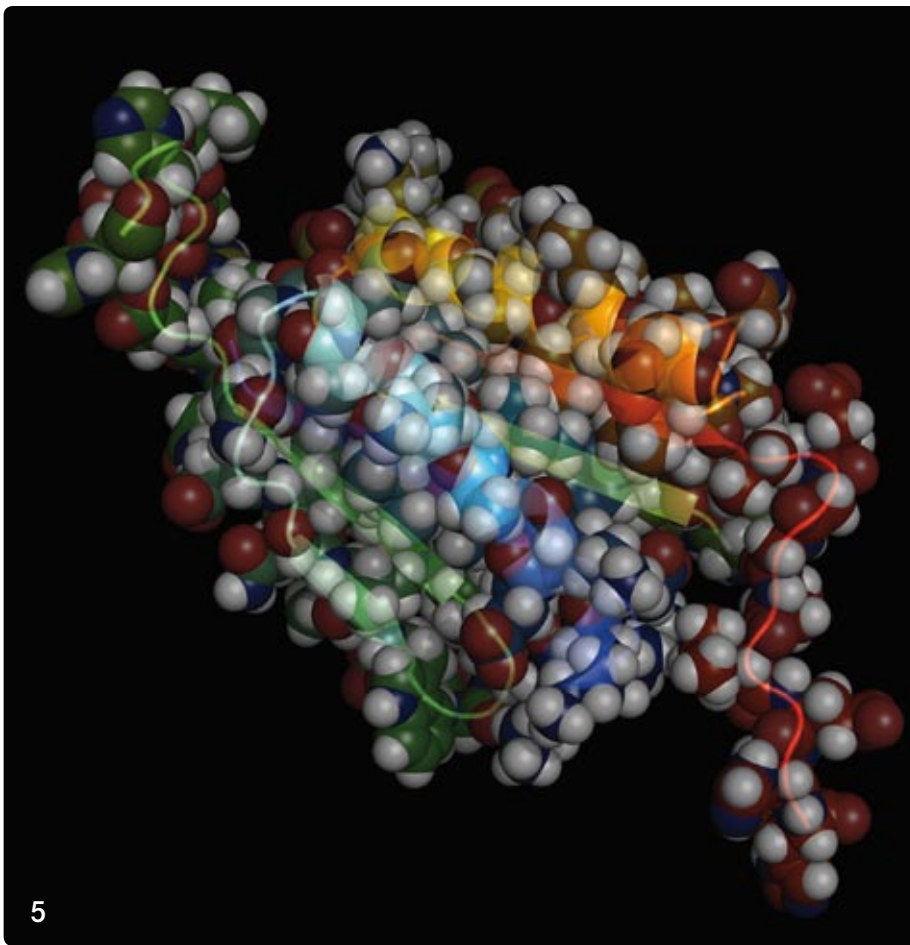
4

Computersimulation ist eine Kunst

Der Supercomputer hat sich zu einem universellen Instrument der Forschung entwickelt, ist etwa virtuelles Teleskop, Reagenzglas und Mikroskop zugleich. Wenn man die Kunst beherrscht, ihn richtig zu nutzen, liefern die Simulationen darauf wichtige Erkenntnisse – und manchmal Bilder, die eine Augenweide sind.

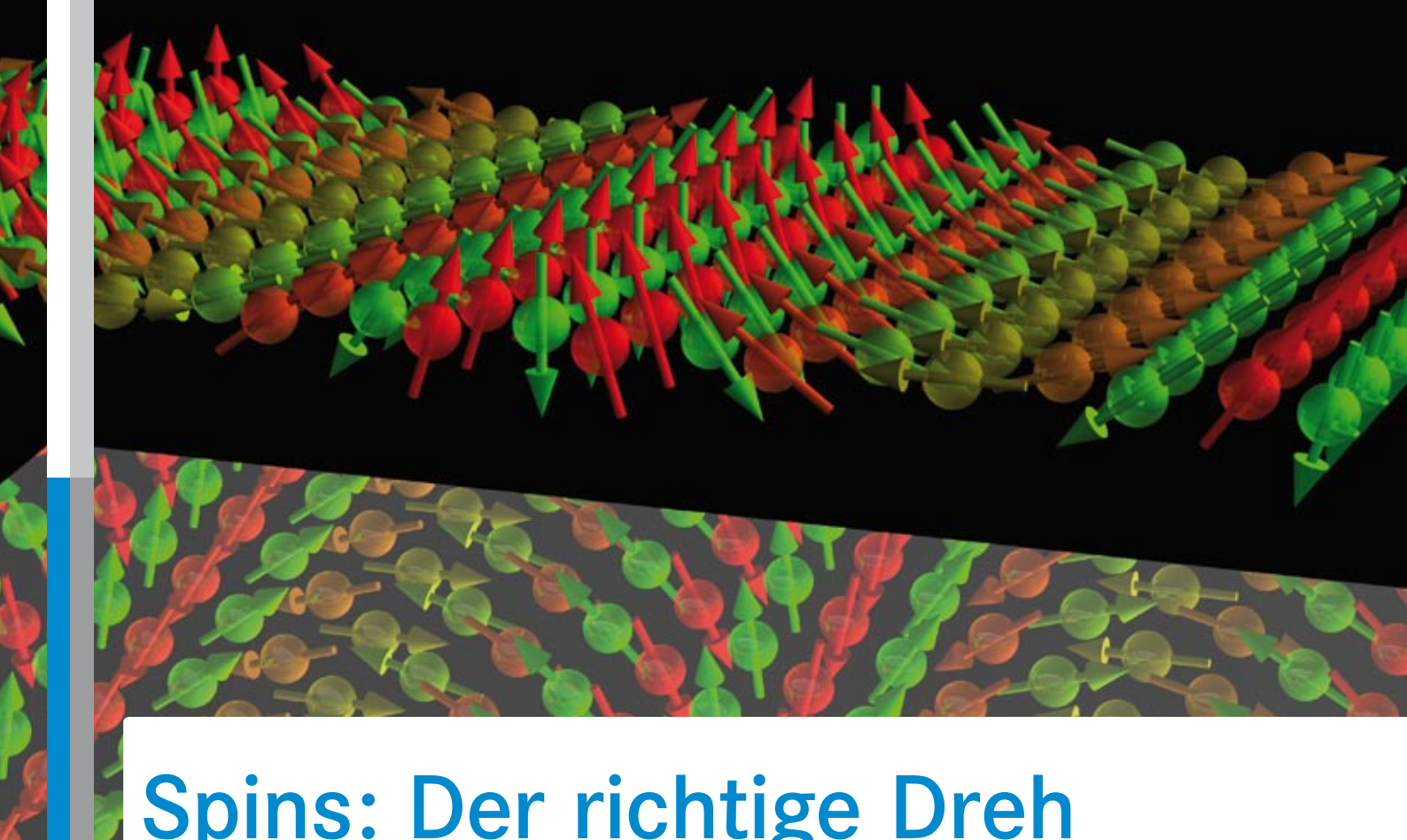
1 Sterne bewegen sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit durchs Universum: Die rot eingefärbten Exemplare in diesem Sternenhaufen sind langsam, die gelben schnell.

2 Laserpulse (links) treffen auf die Oberfläche eines Festkörpers (blaue Scheibe) und produzieren eine Elektronenwolke (rechts).



- 3 Ein simuliertes Quark-Antiquark-Paar unter dem Einfluss von Bindungskraften. Nach heutigem Wissen sind Quarks die elementarsten Bausteine der Natur.
- 4 Drei Brunnen (blau) entwässern ein Stück Land. Gespeist werden sie durch Grundwasser, das in Richtung der grünen Pfeile durch den Boden fließt. Es nimmt einen Schadstoff (gelb-braune Wolke) mit sich.
- 5 Die räumliche Struktur eines Proteins, die durch Faltung langer Eiweißketten entsteht. Fehlerhafte Faltungen treten zum Beispiel bei der Alzheimer-Erkrankung auf.
- 6 Tanz der Wirbel: die strukturellen Details im Innern der turbulenten Strömung eines Gases.

- 7 Solche Simulationen helfen Forschern, die mechanischen Eigenschaften von Zellmembranen zu verstehen: Ein elastisches Netzwerk bildet unter Krafteinfluss eine komplex gefaltete Struktur.
- 8 Bunte Welt: Die Farben illustrieren unterschiedliche Konzentrationen des Spurengases Ozon in der Atmosphäre 38 Kilometer über dem Boden.
- 9 Das Strömungsprofil entlang der Mischkammer eines Reformers, der aus Treibstoffen wie Diesel oder Kerosin ein wasserstoffreiches Gas gewinnt. Dieses Gas kann von Brennstoffzellen genutzt werden, die daraus Strom erzeugen.



Spins: Der richtige Dreh

Die Natur ist wählerisch: In einer dünnen Manganschicht auf dem Metall Wolfram ordnen sich die Elementarmagnete immer in einer linksdrehenden Spirale an, nie in einer rechtsdrehenden. Die Erklärung dafür fand ein Wissenschaftlerteam vom Institute for Advanced Simulation (IAS), indem es den Jülicher Supercomputer JUMP bis an seine Grenzen ausreizte. Erste Anwendungen des kuriosen Phänomens sind bereits in Sicht.

Prof. Stefan Blügel vom IAS erinnert sich, wie alles begann: „Mein Hamburger Kollege Matthias Bode erzählte mir von einem merkwürdigen Ergebnis eines seiner Doktoranden. Dabei ging es um ein magnetisierbares Material, das in Domänen unterteilt ist.“ Das bedeutet: Innerhalb des Materials gibt es sozusagen Grenzen, an denen sich die Richtung der Magnetisierung unvermittelt ändert. Domänen sind die Gebiete gleicher Magnetisierung zwischen diesen Grenzen.

Die Richtung des Magnetfeldes wird auf der Ebene der Atome durch die Richtung des Elektronenspins vorgegeben. Vereinfacht kann man sich den Spin als einen winzigen Stabmagneten vorstellen, der sich dem äußeren Magnetfeld entsprechend ausrichtet, dabei aber auch selbst ein Magnetfeld erzeugt. Zwischen den Domänen müssen also die Spinrichtungen zwischen benachbarten Elektronen gegeneinander verdreht sein, weil sich hier die Richtung des Magnetfeldes ändert.

Die Richtungsänderung geschieht allerdings nicht ganz so abrupt, wie es von außen gesehen scheint. Tatsächlich sind direkt benachbarte Spins jeweils nur um einen kleinen Winkel gegeneinander verdreht. Erst durch die Aneinanderreihung vieler Nachbarn summiert sich der

Gesamtdrehwinkel so, dass er mit der magnetischen Ausrichtung der angrenzenden Domäne übereinstimmt.

VERGESSENE KRAFT TAUCHT AUF

„Den Hamburger Kollegen war nun aufgefallen, dass sich die Spins immer nur in die gleiche Richtung verdrehen“, so Blügel. Erwartet hatten die Wissenschaftler dagegen, dass die Drehrichtung der Spins zufällig verteilt ist – in der einen Übergangswand linksherum, in einer anderen rechtsherum. Nach dem Gespräch mit Bode erinnerte sich Blügel vage daran, dass ein russischer und ein japanischer Wissenschaftler bereits vor rund 50 Jahren einen Effekt vorhergesagt hatten, der von einer Wechselwirkung zwischen der Bahnbewegung eines Elektrons und seinem Spin verursacht wird. Bislang

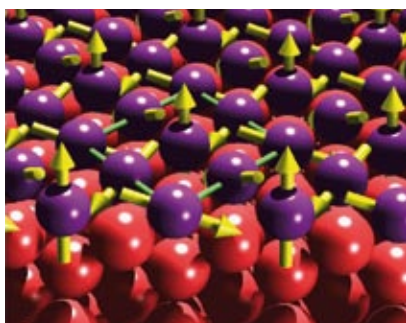
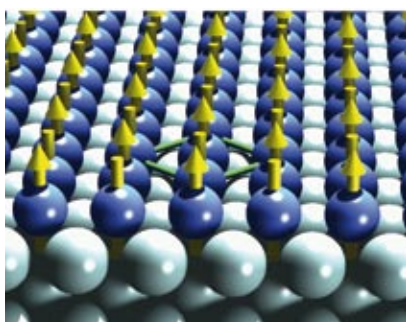
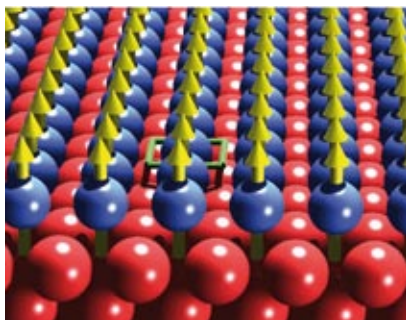
Institute for Advanced Simulation (IAS)

Seit dem 1. Januar 2008 sind unter dem Dach des IAS Supercomputing und Simulationwissenschaften vereint. Das IAS besteht bislang aus dem Jülich Supercomputing Centre und drei wissenschaftlichen Institutsbereichen, die Supercomputer einsetzen, um Fragen zur Struktur und den Eigenschaften der verschiedensten Materialien bis hin zu biologischen Systemen zu klären. Einer davon wird von Prof. Stefan Blügel geleitet. Er ist überzeugt: „Die Geschwindigkeit, mit der wir neue Erkenntnisse gewinnen, wird in Zukunft immer mehr von der intelligenten Nutzung der Computer abhängen. Die räumliche Bündelung von Fachwissenschaftlern aus verschiedenen Disziplinen schafft dafür im IAS die optimale Arbeitsatmosphäre.“ Die Integration weiterer Wissenschaftlergruppen etwa aus der Umwelt- und Gesundheitsforschung ist geplant.



Bild links: Die roten und grünen Pfeile repräsentieren Spins, die man sich als kleine Elementarmagnete vorstellen kann. Im oberen Teil sieht man, wie sich die Spins in einer dünnen Manganschicht anordnen, darunter das Spiegelbild, das in der Natur nicht existiert.

Bildserie unten: Spins (gelbe Pfeile) in verschiedenen Materialien.



hatte die Fachwelt jedoch vermutet, dass die Kraft dieses Effektes zu klein ist, um sich so auszuwirken, wie es nun in Hamburg beobachtet worden war. Blügel jedoch bezweifelte diese Annahme.

„Somit kamen zwei Dinge zusammen: Die Gruppe um Bode hat ein hochauflösendes Rastertunnelmikroskop, das die merkwürdige Bevorzugung einer Drehrichtung beim Spin entdecken konnte, und wir in Jülich haben den Supercomputer, mit dem wir mögliche Ursachen dafür überprüfen konnten“, sagt Blügel.

Blügel konnte mit seinen Computersimulationen tatsächlich die Beobachtungen des Hamburger Teams nachvollziehen und erklären. Die Simulationen zeigten, wie die Drehrichtung der Spins von den Eigenschaften der jeweiligen Materialien abhängt. „Dass es überhaupt eine bevorzugte Drehrichtung gibt, ist eine Folge einer quantentheoretischen Eigenschaft“, erläutert Blügel. „Während in der gewöhnlichen Mathematik drei mal vier das Gleiche wie vier mal drei ergibt, gilt diese Vertauschbarkeit für bestimmte quantentheoretische Größen nicht.“

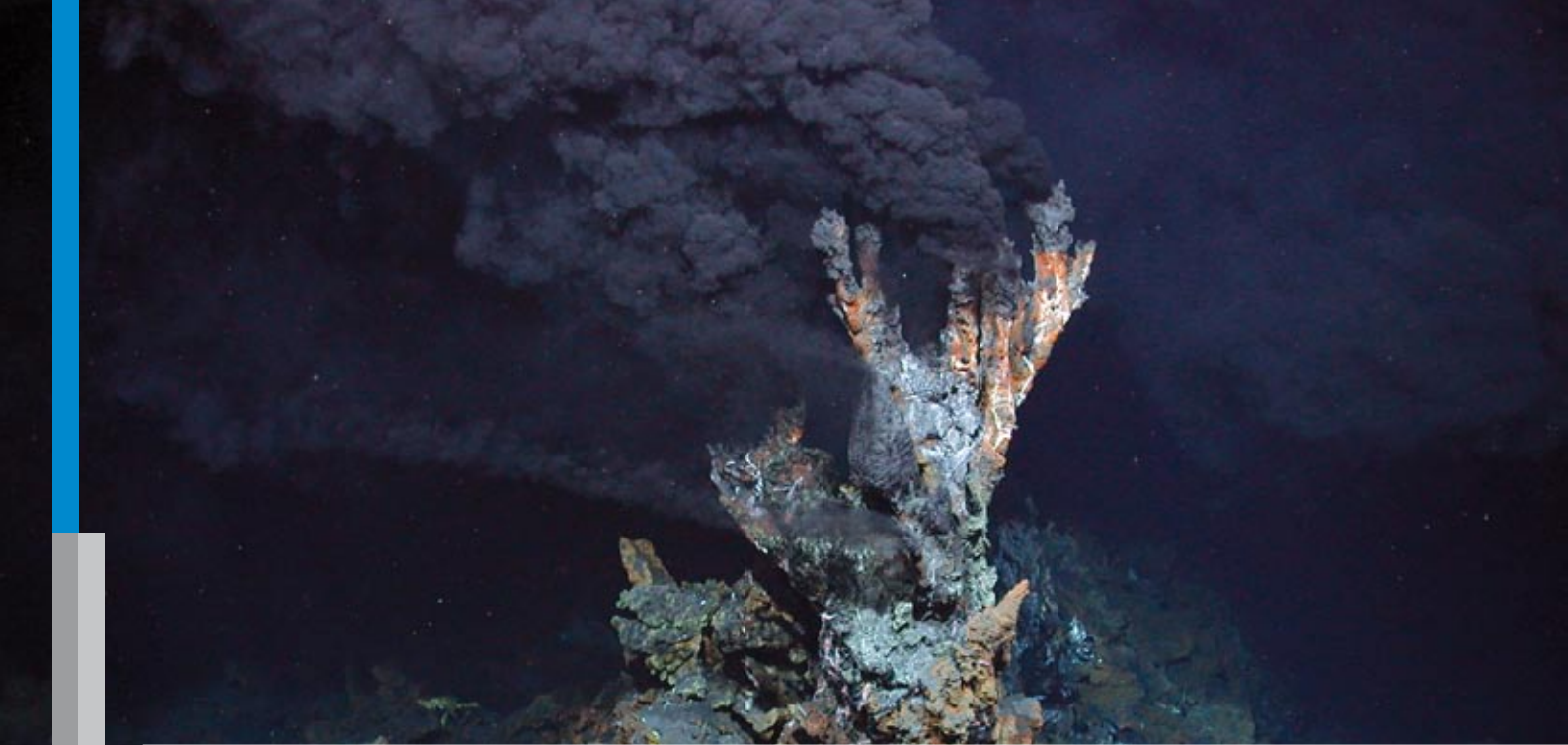
Das Jülicher Team berechnete nun, bei welchen Materialien der Effekt besonders stark ist. Die Hamburger Gruppe prüfte, welche der in Frage kommenden Mate-

rialien in der Realität besonders einfach zu handhaben sind. Schließlich landeten die Wissenschaftler gemeinsam bei Wolfram, das mit einer dünnen Mangan-Oberfläche beschichtet wurde. „Dabei stimmte alles“, sagt Blügel. Der Effekt war so stark, dass er nicht in den Domänenwänden auftrat, sondern in Form von Spiralen in der Mangan-Schicht deutlich messbar war. „Dies führte schließlich zu einer Veröffentlichung in der renommierten Fachzeitschrift Nature“, freut sich Blügel.

SPINS UND POLARISATION

Der Jülicher Wissenschaftler hat die Anwendungen des durchschauten Phänomens fest im Blick: „Die Spiralen lassen sich mit Strom zur Seite verschieben. Man könnte deshalb ihre Lage zur Informationsspeicherung nutzen.“ Vielversprechend ist aber auch das Verhalten der Spiralen bei Lichteinstrahlung: Die Elektronenspins beeinflussen die Polarisation von Licht, das an der Mangan-Oberfläche reflektiert wird. Polarisiertes Licht wird unter anderem bei 3-D-Projektionen – Hologrammen – genutzt, die es ermöglichen, in computererzeugte, künstliche Welten einzutauchen.

Axel Tillemans



Virtuelle Ursuppe

Wie vor über vier Milliarden Jahren, lange bevor es Lebewesen auf der Erde gab, erstmalig einfachste Eiweißmoleküle entstanden sein könnten, erforscht der Bochumer Professor Dominik Marx mit Hilfe Jülicher Supercomputer. Hoher Druck, hohe Temperaturen und schwefelhaltige Mineralien haben möglicherweise an der Entstehung des Lebens mitgewirkt.

Charles Darwin, der Pionier der Evolutionstheorie, vermutete einst, die ersten Eiweißmoleküle könnten „in einem warmen kleinen Teich“ entstanden sein, mit allen möglichen Ammonium- und Phosphor-Salzen, mit Licht, Hitze und Elektrizität. Er wusste allerdings nicht zu sagen, wie der Schritt von der unbelebten zur belebten Materie sich vollzogen haben könnte.

Die ersten Hinweise lieferte 1953 der US-Amerikaner Stanley Lloyd Miller: Als er die Bedingungen einer möglichen Uratmosphäre im Glaskolben nachstellte, bildeten sich darin einfache organische Moleküle, die Aminosäuren. Aber wie sich diese Bausteine zu Eiweißen zusammenfügen konnten, und welche Rolle eisen- und schwefelhaltige Mineralien dabei möglicherweise spielten, blieb weiter Spekulation.

Doch ein Forscherteam um Dominik Marx, den Leiter des Lehrstuhls für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, konnte jetzt erstmals am Jülicher Supercomputer zeigen: Unter Bedingungen, wie sie auch heute noch in der Tiefsee an vulkanischen „heißen Schloten“ herrschen, wäre es tatsächlich möglich, dass sich Aminosäuren zu Eiweißketten zusammenschließen – ganz ohne die biologischen Werkzeuge, die normalerweise nötig sind, wenn Zellen Eiweiße produzieren.

SIMULIEREN STATT SPEKULIEREN

Das Szenario der urzeitlichen Eisen- und Schwefelwelt wurde dafür nicht etwa im Chemielabor nachgebaut. Der „warme kleine Teich“ entstand virtuell im Jülicher Supercomputer JUBL. Nur im Rechner trafen darin zwei simulierte Aminosäuren

– einfache Glyzinmoleküle – aufeinander. „Wir gehen bei unseren Berechnungen von den grundlegenden chemischen Bausteinen aus, also von den Elektronen und Atomkernen der beteiligten Moleküle“, erläutert Marx. Für diese Simulationen wurden keinerlei Messwerte aus Experimenten zu Hilfe genommen, sondern die Forscher fütterten den Rechner nur mit Informationen über die Eigenschaften der beteiligten Molekül-Bausteine. Er berechnete dann das Verhalten der in Wasser gelösten Moleküle unter verschiedenen Bedingungen.

Es zeigte sich: Je höher der simulierte Druck und je heißer das virtuelle Wasser, desto leichter bildet sich zwischen zwei Aminosäuren eine Peptidbindung – der fundamentale Vorgang bei der Eiweißsynthese. Bis zu 20 Megapascal waren die Moleküle dabei ausgesetzt – das ist

Ein vulkanischer „heißer Schlot“ in der Tiefsee. Dort herrschen heute noch Bedingungen, wie sie in der Frühzeit der Erde den Zusammenschluss von Aminosäuren zu Eiweißketten ermöglicht haben könnten.

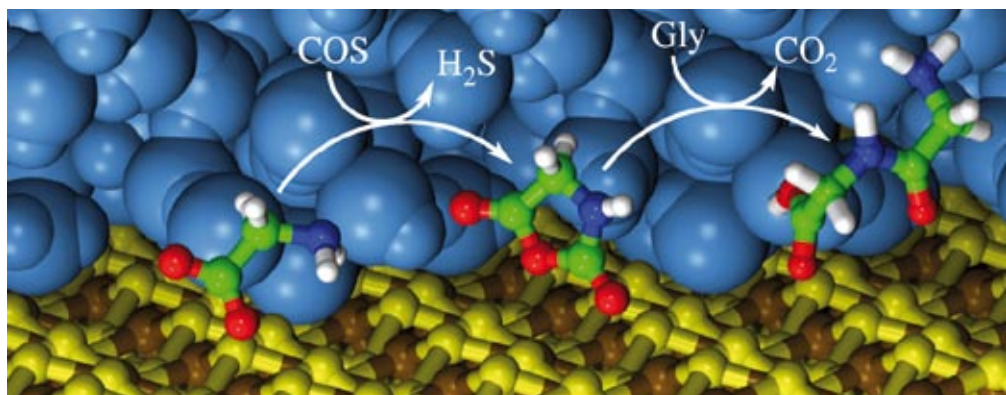
etwa das 200-fache des Luftdruckes auf Meereshöhe. Die Temperatur wurde auf mehr als 200 Grad Celsius gesteigert. „Solche Versuche kontrolliert im Labor durchzuführen, wäre außerordentlich schwierig“, betont Marx. Unter derart extremen Bedingungen hat Wasser ganz andere Eigenschaften als im normalen Zustand, und die darin gelösten Aminosäuren reagieren leichter miteinander. Wenn in der virtuellen Ursuppe außerdem das eisen- und schwefelhaltige Pyrit hinzu kam, taten sich die Eiweißbausteine noch schneller zusammen – das Mineral wirkt als Katalysator, der die Reaktion beschleunigt. „Wie das genau funktioniert, wissen wir noch nicht. Pyrit ist ein Modell für viele Eisen-Schwefel-Verbindungen, die hier eine Rolle spielen könnten“, schränkt Marx ein. „Wir wissen auch nicht, ob die ersten Eiweißmoleküle tatsächlich so entstanden sind, wie in unseren Simulationen. Aber mit dem Supercomputer konnten wir zeigen, dass dieser Weg möglich ist.“

RÜCKBLICK BRAUCHT VIEL RECHENZEIT

Der Rechenaufwand für die Simulation der Frühgeschichte des Lebens war enorm. „Wenn man alles zusammenzählt, arbeiteten mehr als 2 000 Prozessoren des JUBL vier Monate lang daran“, rechnet Dr. Norbert Attig vom Jülich Supercomputing Centre vor. Insgesamt erhalten nur rund 200 Forscherteams pro Jahr



Eisen- und schwefelhaltige Mineralien wie dieser Pyrit erleichtern die Bildung von Eiweißketten.



Die Aminosäure Glyzin (links) wird im heißen Wasser an der Grenzfläche von Pyrit aktiviert (Mitte) und schließt sich dann mit einem weiteren Glycinmolekül zu einem Dipeptid zusammen (rechts).

Zugang zu einem der Jülicher Supercomputer, zu JUGENE sogar nur ein Bruchteil davon. „Prinzipiell könnte jeder Forscher in Europa bei uns rechnen“, so Attig. „Aber die eingereichten Anträge übersteigen die verfügbare Rechenzeit bereits um das Fünf- bis Siebenfache.“ Ein international besetzter wissenschaftlicher Gutachterrät bewertet sie und spricht Empfehlungen für die Bewilligung von Supercomputer-Ressourcen aus. Dabei werden zwei Kriterien angelegt: Verspricht das Projekt neue und relevante Erkenntnisse? Und lässt es sich effizient auf einem großen Supercomputer bearbeiten?

Beide Kriterien trafen auf Marx' Projekt zu. „Das ist einfach eine ungeheuer interessante Fragestellung“, sagt Attig. Erst der Jülicher Blue Gene-Rechner machte es möglich, ihr nachzugehen. Der Gutachterrät des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) – der Einrichtung, die die Rechenzeit auf den Supercomputern der Helmholtz-Gemeinschaft vergibt – zeichnete das Vorhaben sogar als „Exzellenz-Projekt 2008“ aus, und erste Ergebnisse wurden im renommierten „Journal of the American Chemical Society“ veröffentlicht. Auch die Medien berichteten vielfach über die eindrucksvollen Resultate.

Dominik Marx hofft darauf, dass für seine Simulationen bald noch leistungsfähigere Rechner zur Verfügung stehen. „Mit JUGENE haben wir schon phantastische neue Möglichkeiten, aber unsere Modellannahmen sind leider immer noch stark idealisiert. Leistungsstärkere Rechner würden realistischere Modelle möglich machen.“ Für ihn gibt es Gründe, optimistisch in die Zukunft zu schauen: „Das Gauss Centre for Supercomputing, der Verbund der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren, koordiniert seit kurzem die Supercomputing-Aktivitäten in Deutschland und trägt dazu bei, dass Deutschland im Höchstleistungsrechnen nach außen mit einer Stimme spricht“, sagt er. Darüber hinaus kann auf europäischer Ebene die Partnerschaft PRACE („Partnership for Advanced Computing in Europe“) die europäische Infrastruktur im Höchstleistungsrechnen weiter verbessern. „Aber nur die Vernetzung der vorhandenen Zentren allein reicht nicht“, ist Marx überzeugt. „Man braucht auch nachhaltige Investitionen in neue Rechner der höchsten Leistungsklasse, um als Forscher gegenüber Kollegen in den USA und Japan auf Dauer konkurrenzfähig bleiben zu können.“

Wiebke Rögner



Der Wettlauf zur Weltspitze

Einen Computer kaufen ist das eine – ihn in Betrieb nehmen, etwas anderes. Was schon viele leidgeprüfte PC-Besitzer erfahren haben, gilt in ungleich stärkerem Maße, wenn der Computer die Vorsilbe „Super“ trägt und im Rennen der schnellsten Rechner der Welt in die Medaillenränge vorstoßen soll.

September 2008: Ein Ingenieur des Herstellers überreicht Hartmut Peters vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) das offizielle Installationshandbuch des Supercomputers „Blue Gene/P“. Auf 73 Seiten finden sich darin die Details darüber, wie die telefonzellengroßen Schränke des Computers, den sogenannten Racks, mitsamt ihren 65 536 Prozessoren verkabelt sowie mit Luft und Strom versorgt werden müssen. Eine kaum erwähnenswerte Begebenheit? Doch – wegen des Zeitpunktes: Der

Jülicher Blue Gene/P, kurz JUGENE genannt, war bereits seit über einem halben Jahr in Betrieb. „Wir waren die weltweit Ersten, die einen Rechner dieser Bauart und Größe installierten – da waren Teile der Anleitungen noch nicht geschrieben, andere waren fehlerhaft“, sagt Peters. Gemeinsam haben dann die Experten des Forschungszentrums Jülich und des Computerherstellers IBM dem Supercomputer JUGENE den letzten Schliff gegeben. Ihre Erfahrungen flossen in die offizielle Version des Installationshandbuchs ein.

„Kein Hersteller kann es sich heute leisten, einen Computer dieser Größenordnung zunächst bei sich selbst aufzubauen, als Referenz zu betreiben und erst dann baugleiche Exemplare an die

Kunden auszuliefern“, erläutert Administratorin Jutta Docter vom JSC. Somit spielen die Experten an den ersten Standorten einer neuen Supercomputer-Generation eine besonders wichtige Rolle. Hinzu kommt, dass ein Supercomputer mit Datenspeichern und einer Vielzahl von anderen Rechnern zusammenarbeiten muss – und in Jülich sogar mit anderen Supercomputern und europäischen Rechenzentren. Manche Probleme aber treten erst in einer solchen Umgebung auf und sind von den Herstellerfirmen in ihren Entwicklungslabors nicht vorhersehbar. „Wir finden dann gemeinsam mit den Unternehmen heraus, wie man diese Probleme löst“, sagt Olaf Mextorf, Netzwerk-Experte des JSC.



Blick in die große Rechnerhalle des Forschungszentrums Jülich. Die Bildserie auf dieser und der nächsten Doppelseite dokumentiert den Aufbau des Supercomputers JUGENE im Oktober 2007.

TRUMPF IM WETTBEWERB

Da die Computertechnik sich rasant fortentwickelt, ist die Installation eines Supercomputers ein Wettlauf mit der Zeit. Das Ziel: Die Nutzer – in Jülich also die Wissenschaftler – sollen ihre Computersimulationen mit der aktuell maximalen Rechenleistung durchführen können. Somit erzielen sie früher als konkurrierende Forscherteams Ergebnisse, die sie beispielsweise in angesehenen Fachzeitschriften als Erste veröffentlichen. Schnelle Supercomputer bedeuten hier einen klaren Wettbewerbsvorteil. Noch auf andere Weise ist der wissenschaftliche Fortschritt eng mit der Supercomputerkapazität verknüpft: „Mehr Rechenleistung bedeutet immer auch einen Qualitätssprung: Die Ergebnisse der Simulationen werden genauer und sicherer“, sagt Prof. Thomas Lippert. Der Leiter des JSC weiter: „Manchmal werden sogar ganz neue Effekte erkennbar.“ Der Supercomputer erschließt dann neue For-

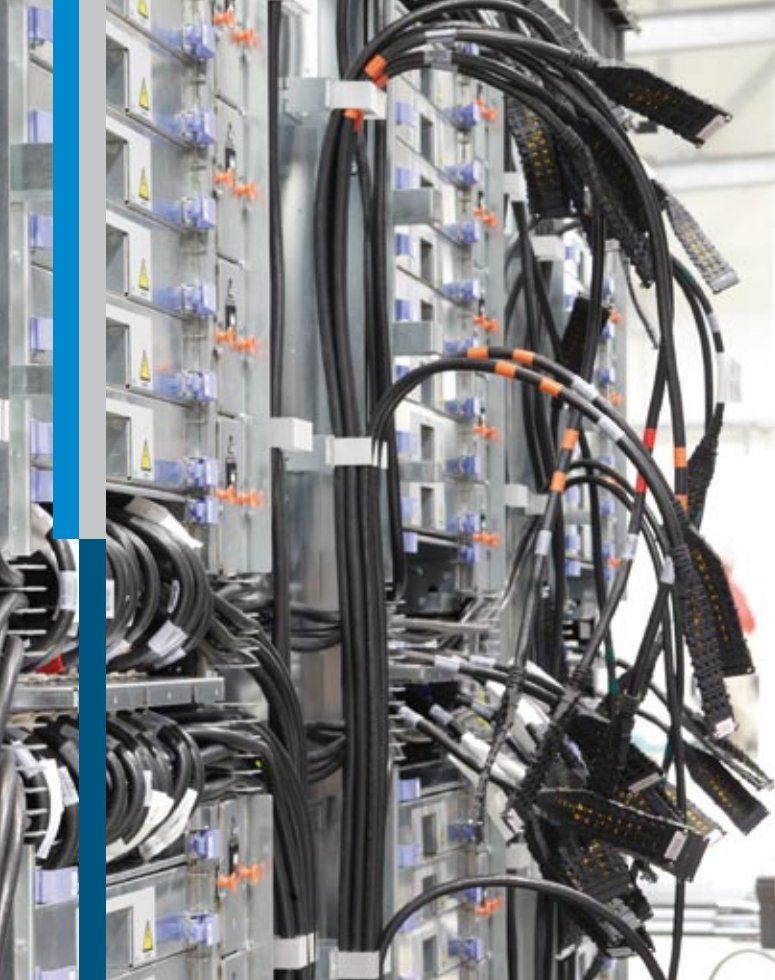
schungsfelder. Weil die weltweit führenden Wissenschaftler ihre Simulationen an den weltweit schnellsten Rechnern durchführen wollen, ziehen Supercomputer der höchsten Leistungsklasse die besten Forscher nach Jülich.

Bei der Rechenleistung haben Fachwelt, Geldgeber und Journalisten stets die TOP500-Liste der weltweit schnellsten Computer im Blick. Sie wird halbjährlich neu zusammengestellt und jeweils im Juni und November veröffentlicht. Die Liste beeinflusst die Planung der Supercomputer-Hersteller und ihre Entwicklungspartner und erzeugt einen zusätzlichen Zeitdruck. Denn es ist ähnlich wie bei einem Weltklasse-Athleten: Dem nützt es wenig, wenn er bei den Olympischen Spielen nicht auf den Punkt fit ist, er daher schon früh ausscheidet und nicht um die Medaillen kämpft. Und trotzdem ist der Sportler verglichen mit dem Computerhersteller in einer entspannten Situation: Er hat immerhin die Chance, bei den

nächsten Olympischen Spielen zu siegen. Ein Supercomputer dagegen wird aufgrund des technologischen Fortschritts in der nächsten TOP500-Liste immer einige Plätze schlechter abschneiden als in der vorherigen.

RUND UM DIE UHR

Im September 2007 meldeten JSC und IBM den Herausgebern der TOP500-Liste ihre Pläne zum Aufbau des Jülicher Supercomputers JUGENE. Am 1. Oktober trafen dann die ersten Computerracks in Jülich ein. Um noch in die TOP500-Liste aufgenommen zu werden, musste JUGENE innerhalb von vier Wochen fertig installiert sein und seine Rechenkraft nachgewiesen haben. Bis zu sechs Techniker arbeiteten daher Tag und Nacht. Schon elf Tage später hatten sie die Racks aufgebaut und verkabelt. Die ersten Tests liefen an. Währenddessen verfeinerten Experten in Jülich und den USA im Dreischichtbetrieb noch die Betriebssoftware



Verstaut in 16 Racks, machten über 65 000 Prozessoren JUGENE bei Inbetriebnahme zum schnellsten zivilen Supercomputer der Welt.

und schrieben zusätzliche Diagnoseprogramme. Schließlich versuchten sie, die für die TOP500-Liste entscheidende Linpack-Prüfung zu starten, aus der die Rechnerleistung hervorgeht.

„Natürlich waren wir hier im JSC genau so heiß darauf, in die Liste zu kommen, wie die IBM-Mitarbeiter“, erinnert sich Jutta Docter. Ihr Büro liegt gegenüber dem Arbeitszimmer, das die IBM-Techniker damals nutzten. „Somit spürte ich nicht nur meine eigene Aufregung, sondern hörte auch sozusagen deren Pulsschlag.“ Nach mehreren Versuchen erzielten die Experten noch gerade rechtzeitig das erste vorzeigbare Ergebnis: JUGENE schnitt beim Linpack-Test mit einer Leistung von über 167 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde oder 167 Teraflop/s ab. Ein schwer vorstellbares Ergebnis: Wenn jeder Mensch pro Sekunde eine Addition oder Multiplikation ausführen könnte, würde die gesamte Menschheit mit vereinten Geisteskräften immer noch fast 30 000-mal langsamer rechnen.

Im Laufe des Jahres 2008 wurde die Leistung sogar noch auf 180 Teraflop/s gesteigert.

SCHNELLSTER RECHNER EUROPAS

Aufgrund des ermittelten Wertes konnte JUGENE ein halbes Jahr lang als „schnellster ziviler Supercomputer der Welt“ bezeichnet werden. Erwartungsgemäß veraltet Rechenpower in der schnelllebigen Computerbranche rasch, dennoch konnte JUGENE auch in der nächsten TOP500-Liste im Juli 2008 einen guten Rang 6 halten und blieb weiterhin der schnellste Rechner Europas.

Ein knapper Monat – wenn auch fieberhafter – Aktivität für den Aufbau eines Supercomputers diesen Formats scheint wenig. Doch tatsächlich war diese rekordverdächtige Installation nur möglich, weil die Jülicher Computerfachleute sie schon lange akribisch vorbereitet hatten. Streng genommen beginnt die Geschichte schon fünf Jahre zuvor. Damals weihte IBM den Jülicher Leiter der Abteilung „High-Per-

formance-Systeme“, Klaus Wolkersdorfer, in Pläne für einen Supercomputer neuen Typs ein. „Das war damals so geheim, dass ich darüber zunächst nicht mit meinen Kollegen sprechen durfte“, erinnert sich Wolkersdorfer. Statt weiter auf relativ wenige, extrem leistungsfähige Prozessoren zu setzen, hatte IBM vor, extrem viele, aber relativ langsame Prozessoren einzubauen. Diese sollten dabei – von allen verzichtbaren Funktionen befreit – in der Lage sein, schnell miteinander zu kommunizieren und rasch auf ihren Arbeitsspeicher zuzugreifen. „Während dieses Konzept noch 2004 von vielen deutschen Fachleuten, etwa auch im Supercomputer-Ausschuss des Wissenschaftsrates, skeptisch beurteilt wurde, traf es bei uns auf großes Interesse“, erinnert sich Thomas Lippert. Der JSC-Leiter weiter: „Uns war klar, dass es die Chance bot, die Grenzen der herkömmlichen Herangehensweise in Hinsicht auf Stromverbrauch, Stellfläche und Kosten zu überwinden.“



Sie schalteten JUGENE offiziell für die Nutzer frei (v.l.n.r): Achim Bachem, Vorstandsvorsitzender des Forschungszentrums Jülich, NRW-Ministerpräsident Jürgen Rüttgers, Thomas Rachel, Staatssekretär im Bundesforschungsministerium und Martin Jetter, Vorsitzender der Geschäftsführung der IBM Deutschland GmbH.

Die JSC-Experten testeten daher im Sommer 2005 ein Rack neuer Bauart mit 2 048 Prozessoren. „Das Ding schlug ein“, so Wolkersdorfer knapp. Denn die Jülicher fanden heraus, dass sich ein Teil der Simulationen tatsächlich sehr gut skalieren ließ, wie es im Fachjargon heißt: Die Berechnungen wurden umso schneller fertig, je mehr Prozessoren die Wissenschaftler darauf ansetzten, ohne dass der zusätzliche Datenverkehr die Leistung beeinträchtigte. Das Forschungszentrum bestellte daraufhin sieben zusätzliche Racks, die ab Anfang 2006 gemeinsam mit dem vorhandenen den Supercomputer JUBL (Jülicher Blue Gene/L) bildeten.

SIEBENFACHE ÜBERBUCHUNG

Schon wenige Monate später wurde deutlich, dass auch JUBL nicht ausreichte, um die Nachfrage der Wissenschaftler nach Rechenzeit zu befriedigen. „Wir hatten eine siebenfache Überbuchung“, berichtet Docter. Hinzu kam die Information, dass IBM an einer neuen Blue Gene-

Generation arbeitete. Mitte 2006 begannen Thomas Lippert und sein Team daher mit den Finanzplanungen für JUGENE. Die konkreten Vorbereitungen für dessen Installation im Oktober starteten im Frühjahr 2007: So wurden zur Stromversorgung neue Kabeltrassen benötigt, die vom externen Trafohäuschen zur Rechnerhalle führen. „Außerdem mussten wir die Stellfläche für die Racks festlegen, die entstehende Gewichtsbelastung des 80 Zentimeter hohen Doppelbodens berechnen, diesen an verschiedenen Stellen unter anderem für die Luftzufuhr ausschneiden sowie zwölf Kilometer Netzkabel im Boden verlegen“, so Hartmut Peters.

Als JUGENE dann Ende Oktober den Linpack-Test erfolgreich absolviert hatte, hieß das aber noch nicht, dass er für die Simulationswissenschaftler betriebsbereit war. „Der Supercomputer kommunizierte beispielsweise noch nicht mit den Serverrechnern, die für die Datenspeicherung oder für den Zugriff der verschiedenen Forscherteams benötigt

werden“, sagt Olaf Mextorf. Darüber hinaus hatte sich schon bei den ersten Tests und den Linpack-Probelaufen gezeigt, dass nicht alle der mehr als 65 000 Prozessoren wie gewünscht funktionierten. Nun erst konnten die JSC-Experten die aufgetretenen Fehler gründlich analysieren und beheben. Telefon- und Videokonferenzen mit US-amerikanischen Technikern und Managern gehörten zur täglichen Routine. Manche Ersatzteile wurden nachts vom Flughafen per Taxi nach Jülich gebracht, um keine Zeit zu verlieren. Denn Forscher aus Jülich, Deutschland und Europa drängten bereits darauf, den frisch gekürten Computer-Champion mit ihren wissenschaftlichen Fragestellungen zu füttern. Im Februar 2008 war es dann so weit: Jürgen Rüttgers, Ministerpräsident des Landes Nordrhein-Westfalen, und Thomas Rachel, Staatssekretär im Bundesforschungsministerium, schalteten JUGENE offiziell für die Nutzer frei.

Frank Frick

Prof. Thomas Lippert im Gespräch

Die Zukunft des Supercomputing in Jülich

Der Direktor am Institute for Advanced Simulation (IAS) und Leiter des Jülicher Supercomputing Centre (JSC) erläutert, wie die Höchstleistungsrechner der nächsten Generation beschaffen sind und welche Rolle das Forschungszentrum Jülich im Jahr 2012 spielen wird.



Frage: Herr Prof. Lippert, gestern verließ einer Ihrer Mitarbeiter vorzeitig ein Gespräch über den Jülicher Supercomputer JUGENE, der seit wenigen Monaten in Betrieb ist. Seine entschuldigenden Worte: „Ich muss zum nächsten Termin. Es geht um einen neuen Superrechner.“ Verraten Sie uns mehr?

Lippert: Eigentlich stecken wir sogar in den Planungen zweier Supercomputer. Wir verfolgen in Jülich ein duales Konzept. Dahinter steckt die Erkenntnis, dass die Supercomputer in zwei Klassen einteilbar sind, wenn man das Anwendungsspektrum der Nutzer des JSC betrachtet. Da sind einerseits die Rechner für wenige

besonders große, rechenintensive und hoch skalierbare Simulationen, also Rechner wie JUGENE, mit denen wir die großen gesellschaftlichen Herausforderungen, etwa im Bereich Energie und Umwelt oder Gesundheit, angehen können. Und da sind andererseits die flexiblen Systeme für die etwas kleineren Simulationen, die aber hohe Anforderungen an den Arbeitsspeicher und das Kommunikationsnetzwerk haben – das werden in Zukunft Clustercomputer aus Standardkomponenten sein. Wir brauchen beide Computerarchitekturen, um kostenoptimiert den Bedarf aller Wissenschaftler zu decken, die hier bei uns in Jülich rechnen wollen.

Frage: Aber eigentlich strebt doch jeder Wissenschaftler danach, seine Fragestellung auf dem jeweils leistungstärksten Supercomputer zu bearbeiten. Wozu genau braucht man dann das Clustercomputer-System?

Lippert: Um den High-End-Supercomputer ausdrücklich für vergleichsweise wenige ausgewählte, extrem herausfordernde und interessante Forschungsprojekte – rund 30 pro Jahr – mit höchstem Rechenzeitbedarf einsetzen zu können. Auf dem Clustercomputer-System werden demgegenüber – um eine Zahl zu nennen – jedes Jahr etwa 200 Projekte Rechenzeit



Für ihn ist Jülich Europas erste Adresse, wenn es um „Computational Science and Engineering“ geht: Prof. Thomas Lippert.

erhalten. Man muss dazu auch wissen, dass längst nicht jede Simulation hoch skalierbar ist, also umso schneller läuft, je mehr Prozessoren zur Verfügung stehen. Übrigens hat sich das duale Konzept bereits außerordentlich gut bewährt. Auch bislang hatten wir mit JUMP neben JUGENE einen Rechner sozusagen für die Brot-und-Butter-Arbeit zur Verfügung. Wo bei sich die Ergebnisse dieser Arbeit sehen lassen können, wie viele Veröffentlichungen in angesehenen Fachzeitschriften belegen.

Frage: Was verstehen Sie unter dem Begriff „Clustercomputer-System“, und wie sehen die konkreten Planungen dazu aus?

Lippert: Ein Clustercomputer-System besteht im Prinzip aus Computern, die mit einem vollständigen Betriebssystem ausgestattet sind und aus leistungsstarken Standardkomponenten bestehen – zusammengeschaltet über ein sehr schnelles Kommunikationsnetz, das über Standard-Interfaces mit den Rechenknoten verbunden ist. Nicht jeder Computer wird dabei ein eigenes Gehäuse haben. An solchen Systemen forschen wir seit 2004, weil wir überzeugt sind, dass sie ein überlegenes Preis-Leistungs-Verhältnis bieten. Nun wollen wir ein solches System auf-

bauen, das JuRoPA (Jülich Research of Petaflop Architectures) heißen und auf Quad-Core-Prozessoren von Intel beruhen wird. Mit im Boot haben wir unter anderem die europäischen Unternehmen ParTec und Bull sowie SUN und Intel aus den USA.

Frage: Sie sprachen eingangs davon, dass Sie derzeit noch bei einem zweiten Supercomputer in der Planungsphase stecken. Handelt es sich dabei um einen Nachfolger für JUGENE?

Lippert: Tatsächlich planen wir, JUGENE auszubauen, ihn von derzeit 16 auf mindestens 72 Racks zu erweitern und damit auf die Leistung von einem Petaflop/s zu bringen, also von einer Billiarde Rechenoperationen pro Sekunde. Parallel wollen wir natürlich die Benutzer auf dem Weg zu mehr Rechenleistung stets mitnehmen. Denn man muss schließlich am Ende auch in der Lage sein, das System effizient zu nutzen.

Frage: Im Supercomputing zählt also nicht nur die Rechenleistung und Rechenkapazität, sondern auch das Know-how der Betreiber und der Benutzer?

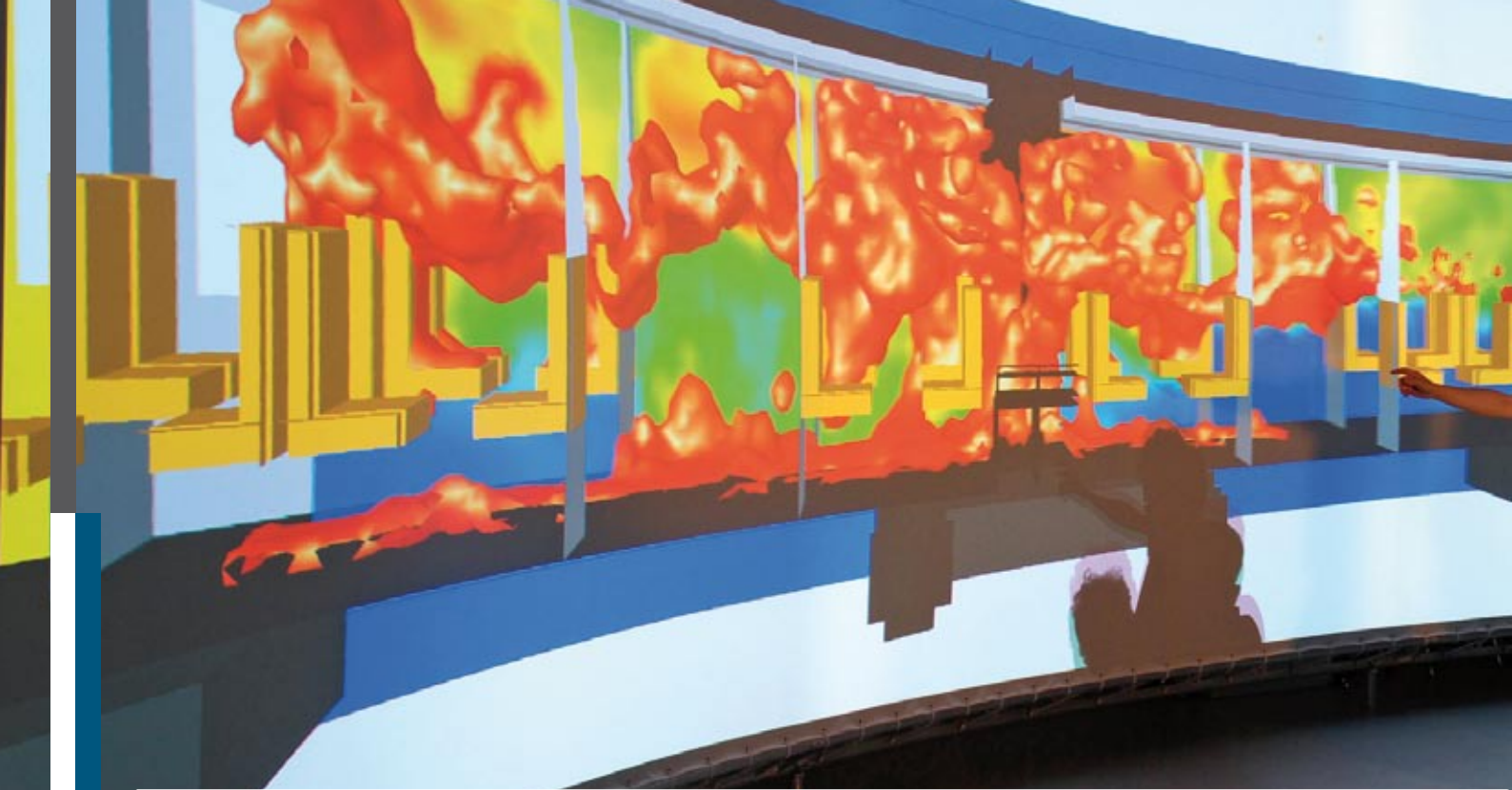
Lippert: Die Kompetenz am Standort ist das, was wirklich zählt. Wenn ich heute junge Menschen am Supercomputer aus-

bilde, so werden sie die nächsten 35 Jahre als Experten den Fortschritt auf diesem Gebiet mitgestalten – die Supercomputer dagegen lösen sich alle vier, fünf Jahre ab. Und künftig braucht man aufgrund der Parallelisierung in der Computerwelt noch mehr Kompetenz – das geht hin bis zu der Frage, wie wissenschaftliche Theorien zu formulieren sind, um sie computertechnisch behandeln zu können.

Frage: Zum Schluss bitte Ihre Vision: Welche Rolle spielt das Forschungszentrum Jülich im Jahr 2012 beim Supercomputing?

Lippert: Jülich ist dann die erste Adresse für 'Computational Science and Engineering' in Europa und betreibt das Supercomputerzentrum als ein Element der neuen europäischen Supercomputer-Infrastruktur. Wir werden den Vergleich mit den Zentren in den USA nicht scheuen müssen. Bei uns wird ein Computer mit einer Leistung von etwa 10 Petaflop/s installiert, auf dem die führenden europäischen Simulationsteams rechnen wollen. Wir arbeiten eng mit der Industrie zusammen und entwickeln gemeinsam mit ihr die Computersysteme der Zukunft.

Interview: Frank Frick



Mittendrin statt nur davor

Vielen Menschen hilft eine anschauliche Grafik, schwierige Sachverhalte besser zu verstehen. Das geht Wissenschaftlern nicht anders. Doch noch mehr Durchblick verschaffen ihnen computererzeugte, dreidimensionale Welten. Experten der Jülich-Aachen Research Alliance (JARA) entwickeln deshalb ein Netzwerk von Visualisierungsstationen, so dass Forscher gemeinsam von verschiedenen Orten aus in die gleiche virtuelle Umgebung eintauchen können.

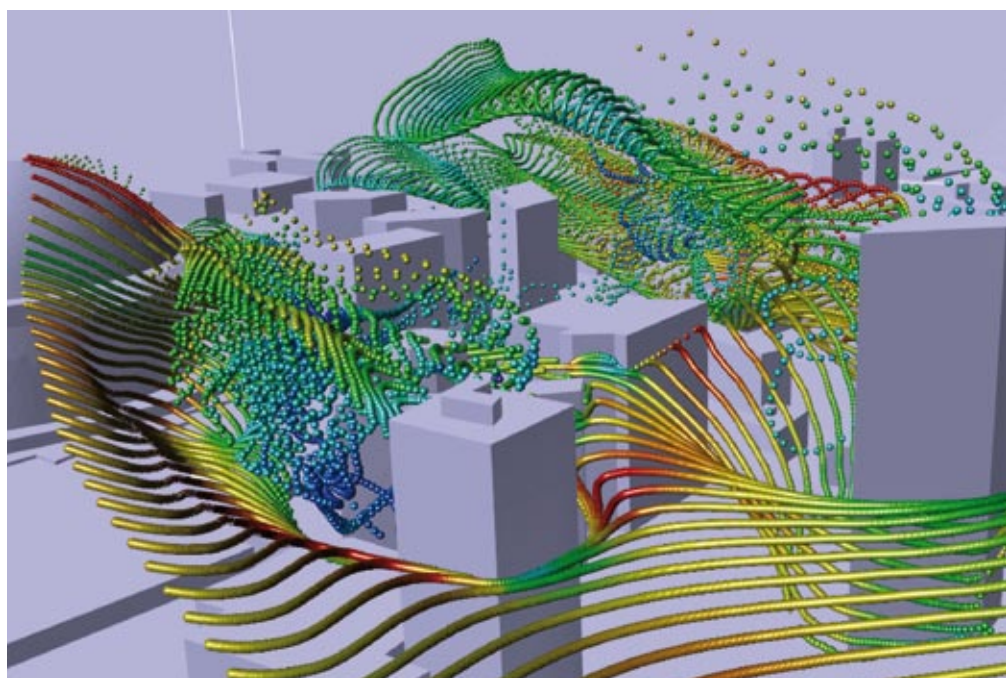
O bwohl er sich gerade mitten in einem brennenden Zug befindet, bleibt Armin Seyfried ganz cool. Besonders abgebrüht oder gar todesverachtend ist er trotzdem nicht: Denn der Zug ist nicht real und der Wissenschaftler vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) befindet sich inmitten einer 3-D-Simulation, die auf eine drei mal elf Meter große Leinwand projiziert wird. Doch durch eine 3-D-Brille betrachtet, bleibt das Bild nicht auf dieser Leinwand. Man glaubt tatsächlich, mitten im Zug zu stehen.

„Bis heute ist umstritten, wie viel Wärme bei einem Zugbrand freigesetzt wird“, erläutert Seyfried. In Schweden habe man einmal versucht, diese Frage experimentell zu klären, indem man einen ICE in einem Tunnel abgebrannt hat. „Das war sehr teuer. Zug und Tunnel waren danach nicht mehr zu gebrauchen. Und darüber hinaus waren die Messergebnisse mit großen Unsicherheiten behaftet“, sagt Seyfried.

Mit Hilfe der Simulationen, die er und seine Kollegen entwickeln, sollen Züge künftig so konstruiert werden, dass sich ein Brand nicht schnell ausbreiten kann. Außerdem sollen die Notausgänge unabhängig von der Lage des Brandherdes immer möglichst schnell erreichbar sein.

Die aufwändigen Simulationsrechnungen, die nur mit Supercomputern durchgeführt werden können, erlauben es, den Zug immer wieder an unterschiedlichen Stellen sozusagen anzuzünden. Durch die 3-D-Visualisierung können die Wissenschaftler hautnah aus beliebigen Perspektiven beobachten, wie das Feuer an Boden gewinnt.

Kälter und windiger geht es derweil bei Prof. Torsten Kühlen vom Virtual Reality Center an der RWTH Aachen zu. Er hat gerade in die Aachener „Cave“ eine Visualisierung der Stadt New Orleans geladen, die sein Team zusammen mit der Universität von Louisiana entwickelt hat. Die Cave ist ein kleiner Raum, an dessen Wände und auf dessen Fußboden Bilder



Links: Drei Wissenschaftler vor einer drei mal elf Meter großen Jülicher Leinwand. Ihre 3-D-Brillen vermitteln ihnen den optischen Eindruck, als stünden sie mitten in einem brennenden Zugabteil. Oben: Simulierte Windströmungen zwischen den Wolkenkratzern von New Orleans.

projiziert werden. „In unserer Cave lassen sich die Objekte noch nicht so anfassen wie in dem Holodeck der Star-Trek-Fernsehserien. Doch der visuelle Eindruck ist bereits sehr gut und wird mit jeder Rechengeneration besser“, sagt Kühlen.

Statt sich die Simulation auf einem Computermonitor anzuschauen, setzt Kühlen so etwas wie eine Sonnenbrille auf, an deren Fassung mehrere weiße Kugeln befestigt sind, und betritt die Cave, zusätzlich bewaffnet mit einer Art Spielzeugpistole, die ebenfalls mit weißen Kugeln besetzt ist. Er stapft nun als Riese durch New Orleans, geht um Wolkenkratzer herum und feuert mit der Pistole.

KEIN SPIEL, SONDERN WISSENSCHAFT

Selbstverständlich ist diese Simulation kein Killerspiel, sondern hat einen ernsten wissenschaftlichen Hintergrund. Die „Pistole“ ersetzt die Computermaus und erlaubt dem Benutzer der Cave, bestimmte Aktionen durchzuführen. In diesem Fall setzt Kühlen mit der Pistole Teilchen frei, die sich mit dem simulierten Windstrom in New Orleans bewegen.

Die weißen Kugeln auf der Pistole ermöglichen es einem sogenannten Tracking-System, das aus zwei Kameras besteht, die exakte Position der Pistole im dreidimensionalen Raum zu bestimmen. Kühlen kann die Schwebeteilchen also zielgenau beispielsweise vor einem Hochhaus oder in einer Straßenschlucht freisetzen, um die Strömungsverhältnisse in New Orleans zu beobachten. Die Kugeln auf seiner 3-D-Brille teilen dem System Kühlens Standpunkt mit. Denn die auf Wände und Boden projizierten Bilder werden dauernd der Perspektive des Benutzers angepasst, die sich mit jeder Bewegung ändert.

„Ein animierter Film könnte die Möglichkeiten solch einer virtuellen Realität nicht annähernd ersetzen“, erläutert Kühlen. „Denn bei der Animation trifft man eine Vorentscheidung über den Standpunkt des Benutzers. Dinge, die sich von seinem Blickwinkel aus beispielsweise hinter einem Hochhaus abspielen, kann er dann nicht sehen. In der Cave geht er dagegen einfach um das Hochhaus herum.“ Außerdem muss man im Film

auch vorher festlegen, wo in der Stadt die Schwebeteilchen ausgesendet werden. Denn wenn man sie überall gleichzeitig freisetzt, erkennt man nichts mehr.

Klar, dass die Möglichkeiten in einer solchen virtuellen Realität von der Rechnerkapazität abhängen, die zur Verfügung steht. „Genau aus diesem Grund sind die Aachener ursprünglich auf uns zugekommen: Unser Supercomputer hat die notwendige Rechenpower“, sagt Dr. Herwig Zilkens vom Jülich Supercomputing Centre.

GEMEINSAM IN DIE 3-D-WELT

Doch inzwischen geht die Zusammenarbeit zwischen der Aachener Hochschule und dem Forschungszentrum Jülich im Rahmen der JARA-SIM-Kooperation (siehe Kasten auf S. 28) weit über die Bereitstellung der Jülicher Rechenkapazität hinaus. Zilkens und Kühlens Gruppen arbeiten gemeinsam an der Entwicklung des sogenannten ivNet (gesprochen: Eivinet). Diese Abkürzung steht für „immersive visualisation network“. Gemeint sind damit über ein Netzwerk verbundene



Mit einer Art Spielzeugpistole setzt ein Wissenschaftler zielgenau Schwebeteilchen frei. Ein Tracking-System mit zwei Kameras bestimmt die exakte Position der Pistole im dreidimensionalen Raum.

Visualisierungsstationen, in die der jeweilige Benutzer „eintauchen“ kann – genauso wie beispielsweise in die Aachener Cave.

„Anders als die Aachener Cave und unsere große 3-D-Vorführleinwand hier in Jülich ist dieses System transportierbar und kann leicht in jedes Forschungsinstitut gebracht und dort installiert werden“, erläutert Zilken. Das System hat die gesamte Funktionalität der Aachener Cave einschließlich 3-D-Brille, Tracking-System und dazugehöriger Computermouse. Lediglich bei der Projektionsfläche, die aus einer 1,20 Meter mal 90 Zentimeter großen Leinwand besteht, hat man zugunsten der Transportierbarkeit Abstriche gemacht.

Einzelstationen dieses Systems sind bereits in Aachen und Jülich betriebsbereit. An der Vernetzung und der dazu erforderlichen Software arbeiten Kühlen und Zilken. Etappenziel ist es zunächst, Forschern aus Aachen und Jülich, die an einem gemeinsamen Projekt arbeiten und

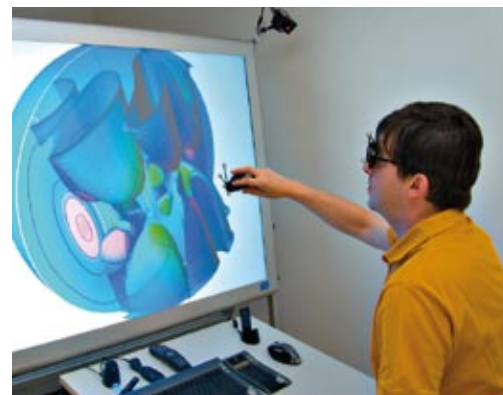
ein bestimmtes Problem besprechen möchten, die Fahrt zwischen Aachen und Jülich zu ersparen. Mit Hilfe des ivNet können beide Forscher sich an ihrem jeweiligen Institut in die virtuelle Realität begeben. Der springende Punkt dabei: Beide befinden sich exakt im gleichen Szenario. Nimmt einer mit der interaktiven Maus eine Veränderung vor, so kann der andere dies hautnah mitverfolgen. Am Ende soll das, was zunächst nur für die relativ kurze Strecke zwischen Jülich und Aachen geplant ist, auch über beliebige Entfernungen hinweg auf der ganzen Welt möglich sein.

Das Projekt ivNet könnte so als Speerspitze der nächsten Revolution im Bereich Kommunikation und globale Vernetzung dienen – in ähnlicher Weise wie ein anderes Forschungsnetzwerk, das vor 15 Jahren im Forschungsbetrieb seinen Anfang genommen hat: Das Internet!

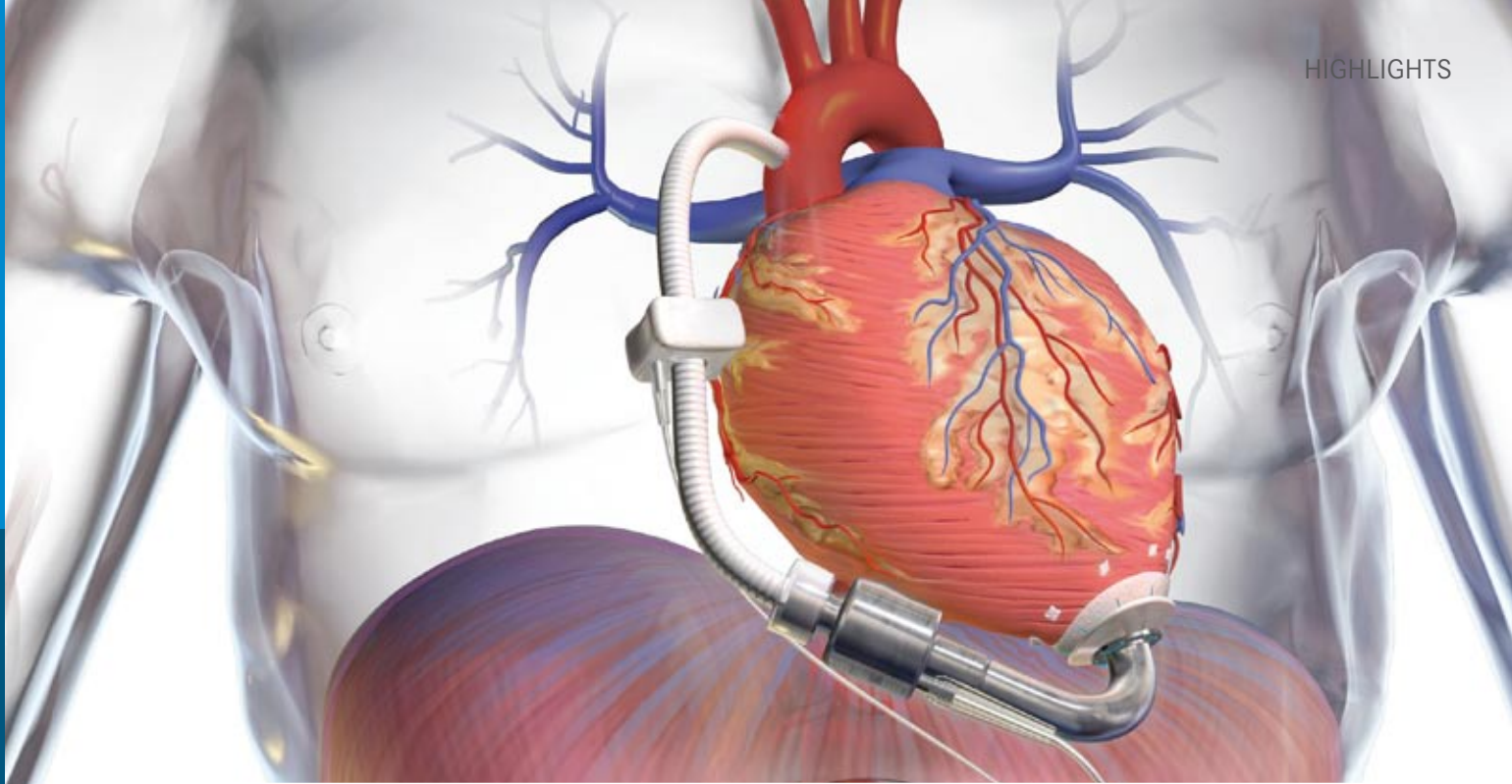
Axel Tillemans

JARA-SIM

Das Forschungszentrum Jülich und die Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule (RWTH) Aachen haben im Jahr 2007 ihre bereits seit Jahrzehnten bestehende Zusammenarbeit unter dem Dach der Jülich-Aachen Research Alliance (JARA) gebündelt. Nicht zuletzt aufgrund dieser Kooperation wurde die RWTH von der Exzellenzinitiative des Bundesforschungsministeriums als Eliteuniversität ausgewählt. Die Sektion JARA-SIM entwickelt Computersimulationen als treibende Kraft für den wissenschaftlichen Fortschritt weiter und führt die Kompetenzen des Jülicher „Institute for Advanced Simulation (IAS)“ und der RWTH zusammen. „Von JARA-SIM profitiert dabei nicht nur die Forschung, sondern auch die Lehre: Ohne diese institutionelle Verzahnung wäre die 'German Research School for Simulation Sciences' (GRS) nicht denkbar, die die künftige Forscherelite der Computersimulation ausbildet“, sagt Thomas Lippert, Direktor am IAS.



JARA | Jülich Aachen
Research
Alliance



Schnelle Rechner für bessere Blutpumpen

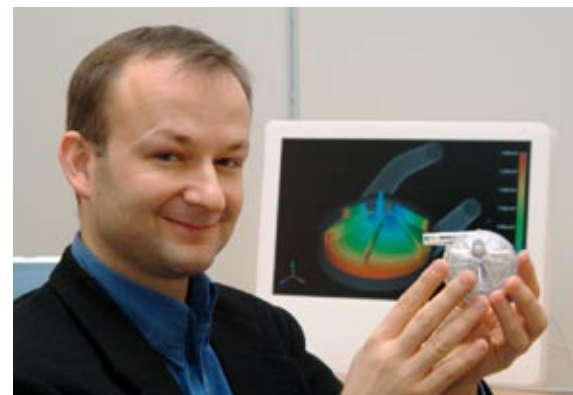
In den Industrieländern sind Herzkrankheiten die Todesursache Nummer Eins. Hilfe für ein zu schwaches Herz bietet eine kleine implantierbare Pumpe. Um die Strömungen in ihrem Innern zu optimieren, nutzen Forscher Jülicher Supercomputer und Simulations-Know-how.

Wer eine Herztransplantation braucht, hat nicht viel Zeit. Doch es kann dauern, bis ein geeigneter Spender gefunden ist. In solchen Fällen setzen Ärzte oft auf eine Blutpumpe, die das Herz unterstützt. Die sogenannte DeBakey-Pumpe eines US-amerikanischen Herstellers, ein finger-großes Gerät aus Titan, wurde bisher rund 440 Patienten eingepflanzt. Bei manchen Herzkranken führt die Entlastung dazu, dass sich der Herzmuskel wieder erholt. Vor allem aber hilft die Pumpe Patienten mit stark geschädigtem Herzen, die Zeit bis zu einer Transplantation zu überbrücken. Prof. Marek Behr von der RWTH Aachen entwickelt die lebensrettenden Pumpen mit dem Supercompu-

ter weiter. Im Rahmen der Jülich-Aachen Research Alliance (JARA) optimieren er und Prof. Felix Wolf vom Jülich Supercomputing Centre die notwendigen Simulationsprogramme, um die Pumpe zu verbessern.

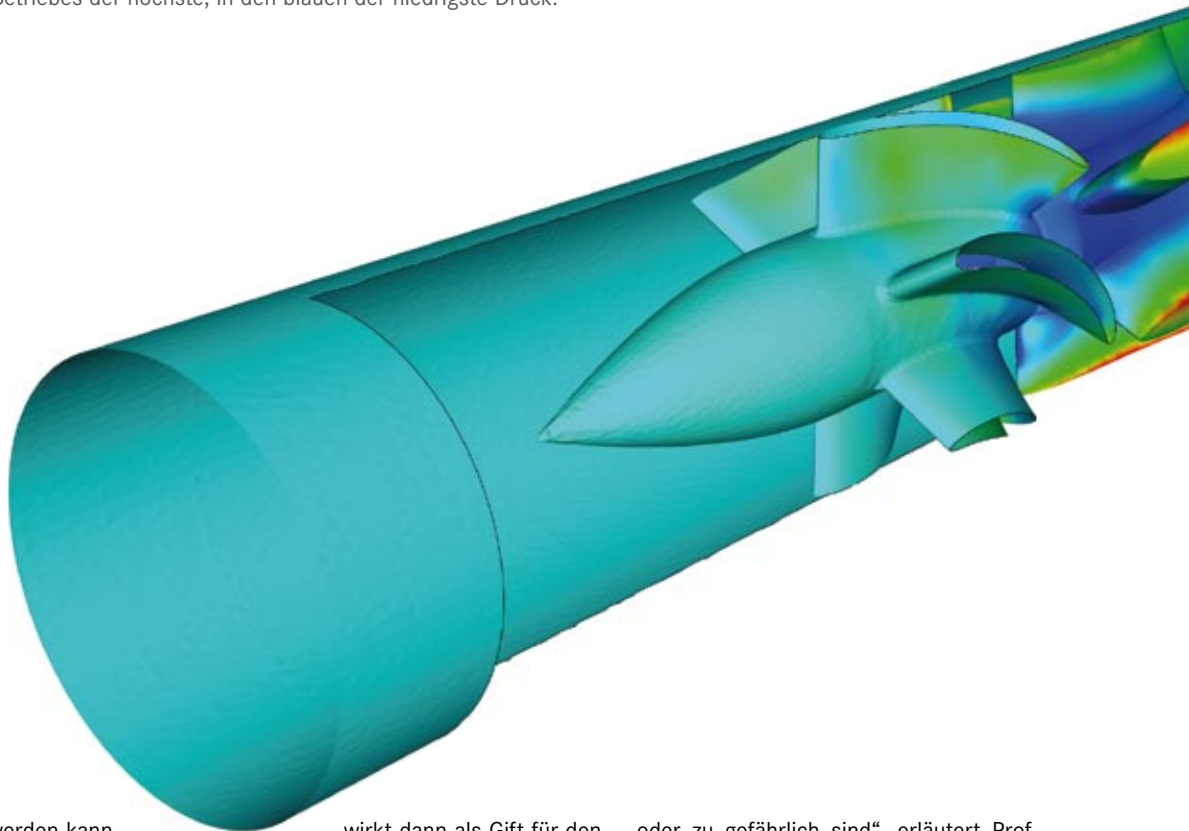
WIDERSPRÜCHLICHE ANFORDERUNGEN

Ein Kunstherz muss anderen Kriterien genügen als etwa eine Wasserpumpe, denn Blut ist – wie Goethe es formulierte – „ein ganz besonderer Saft“. Das wässrige Blutplasma enthält verschiedene Zellen sowie Blutplättchen. Etwa die Hälfte des Blutvolumens besteht aus roten Blutkörperchen, die den Sauerstoff transportieren. Das führt zu sehr gegensätzlichen Ansprüchen an die Pumpe. „Damit sie in



Prof. Marek Behr von der Jülich-Aachen Research Alliance entwickelt mit Hilfe von Computersimulationen lebensrettende Blutpumpen weiter.

Ein Ergebnis der Simulation: In den rot dargestellten Bereichen der Blutpumpe herrscht während ihres Betriebes der höchste, in den blauen der niedrigste Druck.



den Körper implantiert werden kann, muss sie klein sein“, erläutert Behr. „Doch um das Herz ausreichend zu unterstützen, muss sie mehrere Liter Blut pro Minute pumpen. Wenn so viel Flüssigkeit in kurzer Zeit durch eine kleine Pumpe strömt, entstehen starke Scherkräfte.“ Es besteht also die Gefahr, dass der Impeller – ein Bauteil im Inneren der Pumpe – die empfindlichen Zellen und Blutplättchen zerquetscht, wenn er sich 10 000 Mal pro Minute dreht.

Das aber gilt es unbedingt zu vermeiden. Denn wenn zu viele rote Blutkörperchen beschädigt werden, treten große Mengen des darin enthaltenen Blutfarbstoffs Hämoglobin aus. Die Substanz

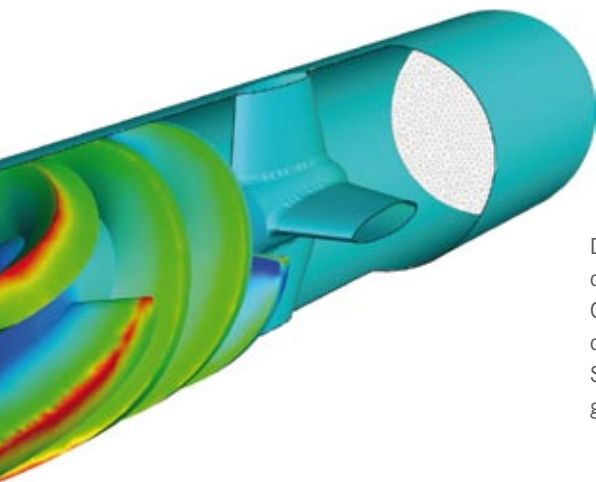
wirkt dann als Gift für den Patienten, und die zerstörten Blutkörperchen können keinen Sauerstoff mehr transportieren. Auch die Blutplättchen dürfen möglichst nicht verletzt oder aktiviert werden. Sonst bilden sich leicht Blutgerinnsel, die die Gefäße verstopfen – die gefürchteten Thrombosen. Wie sich die Pumpe so verbessern lässt, dass sie das Blut noch schonender transportiert, kann man natürlich nicht durch Versuch und Irrtum am Patienten ausprobieren. Hier hilft die Berechnung der Strömungsverhältnisse am Computer weiter. „Das ist ein typischer Fall für den Einsatz von Simulationen. Sie helfen da weiter, wo Experimente nicht möglich, zu aufwändig

oder zu gefährlich sind“, erläutert Prof. Felix Wolf vom Jülich Supercomputing Centre.

„In der ersten Phase, bis 2001, haben wir die Simulation so weit entwickelt, dass wir sicher sein können, dass sie den Ergebnissen realer Experimente entspricht“, schildert Behr die Anfänge des Projekts. In der zweiten Entwicklungsphase gelang es, sichtbar zu machen, wo das Blut beim Strom durch die Pumpe am meisten geschädigt wird. „Das passiert stärker als zuvor angenommen im hinteren Abschnitt der Pumpe, im sogenannten Diffusor“, berichtet Behr. Diese Erkenntnis habe bereits das Design neuer Versionen der DeBakey-Pumpe beeinflusst. Behr weiter: „Seit 2006 entwickeln wir nun in der dritten Projektphase mathematische Methoden und Programme, um die Arbeitsweise der Blutpumpe zu optimieren.“

Auch an die Simulation stellt Blut besondere Anforderungen. Während sich das Strömungsverhalten von Wasser auf einem normalen PC berechnen lässt, braucht man einen leistungsstarken Supercomputer wie den Jülicher JUGENE, um den Flüssigkeitsstrom in einer kompliziert geformten Pumpe und die Dynamik des Gemisches aus Flüssigkeit und Teilchen zu untersuchen. Beispielsweise ist





Der Jülicher Prof. Felix Wolf zwischen den „Schränken“ eines Supercomputers. Gemeinsam mit seinem Team hat er die Berechnungen für die Blutpumpen-Simulationen schneller und effektiver gemacht.

es sehr aufwändig, zu simulieren, wie die Blutpumpe anläuft: „Diese Startphase mit etwa zehn Umdrehungen, bis die Pumpe gleichmäßig dreht, dauert nur einen Sekundenbruchteil. Um sie zu simulieren, benötigen wir aber etwa zehn Stunden Rechenzeit im Supercomputer“, berichtet Behr. Um die Berechnungen auf dem Supercomputer schneller zu machen, holte sich Behr den Rat von Felix Wolf.

Um die Berechnung auf viele Prozessoren des Supercomputers zu verteilen, wird die Pumpe gleichsam in viele kleine Abschnitte zerlegt. Für jedes dieser Segmente ist dann ein Prozessor zuständig. Doch müssen die vielen einzelnen Berechnungen auch wieder zusammengeführt werden. Und hier liegt eine der Schwierigkeiten. „Interessant ist oft, was an den Rändern der Segmente passiert“, sagt Felix Wolf. Um das zu erfassen, sei der Datenaustausch zwischen den Prozessoren entscheidend. „Wenn es dabei zu Problemen kommt, nützt es nichts, eine Aufgabe auf mehr Prozessoren zu verteilen. Die Prozessoren tauschen dann immer mehr Mitteilungen untereinander aus, und manchmal sind viele davon überflüssig, so als ob sie leere Briefumschläge verschicken würden.“

SCHWACHPUNKTE AUFGESPÜRT

Daher wurde anfangs die Simulation der Strömungen in der DeBakey-Blutpumpe nicht mehr schneller oder genauer, wenn mehr als 900 Prozessoren einbezogen waren. Mit einer speziellen Software ging Wolf diesem Problem auf den Grund. Er baute gleichsam kleine Sensoren in das Simulationsprogramm ein – Programmstückchen, die jeden Rechenschritt in allen Einzelheiten protokollieren. Mit dem in Jülich entwickelten Programmpaket

Scalasca (Scalable Performance Analysis of Large Scale Applications) analysierte er diese Daten und spürte so die Schwachpunkte im Simulationsprogramm auf. Aufgrund dieser Analyse ließ sich eine Flut „leerer Briefumschläge“ vermeiden. „Jetzt läuft die Simulation effizient auf mehr als 4 000 Prozessoren und ist etwa fünfmal so schnell wie vorher“, freut sich Wolf. Damit können neue Versionen der Pumpe sehr viel zügiger im virtuellen Testlauf überprüft werden – und früher den Patienten zugutekommen. So wurde inzwischen für herzkranken Kinder zwischen fünf und sechzehn Jahren eine verkleinerte Version der Pumpe entwickelt. „Möglich sind solche Erfolge nur, weil Ingenieure und Informatiker in JARA Hand in Hand zusammenarbeiten“, betont Wolf.

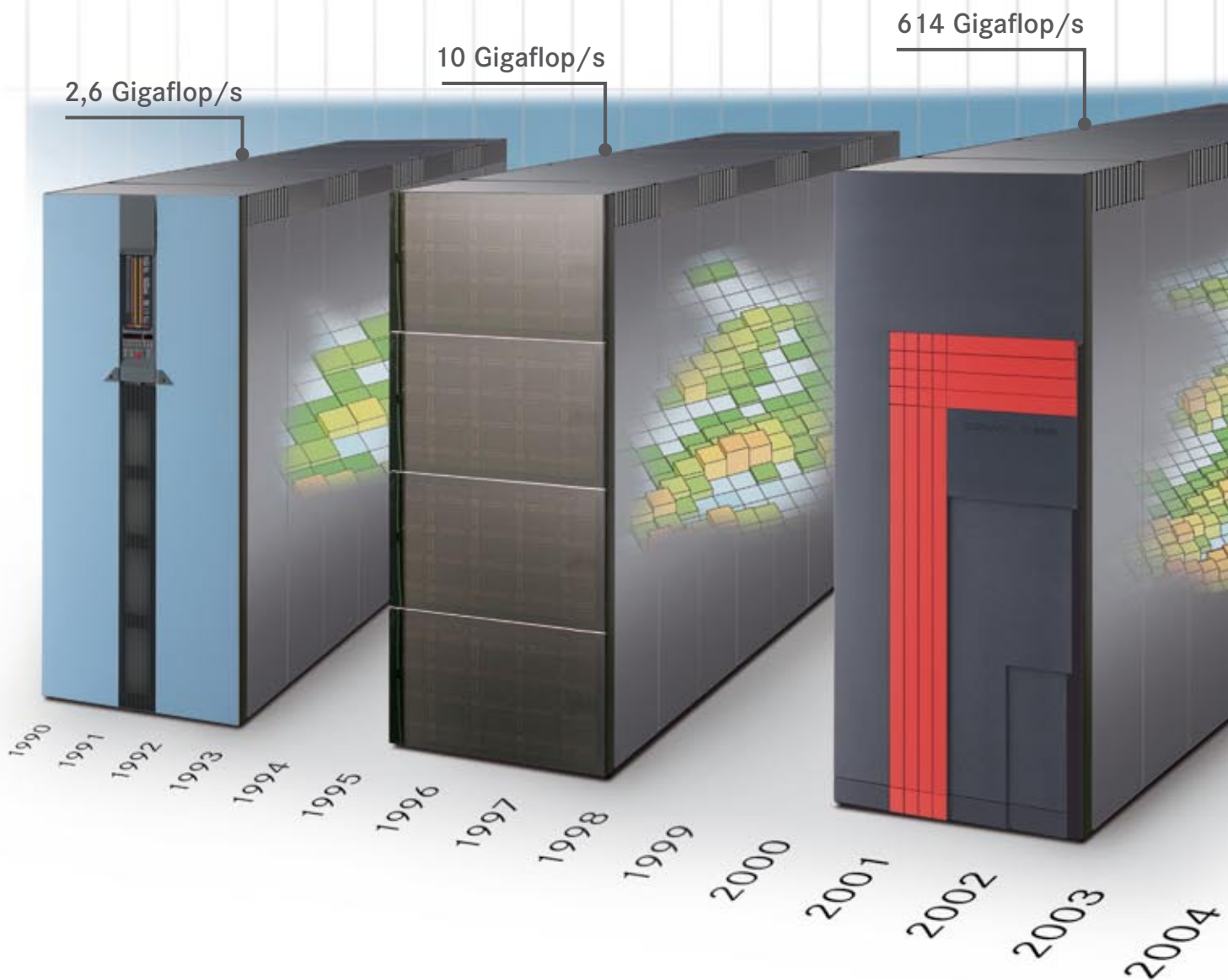
Weitere Fortschritte erhofft er sich vom europäischen Zusammenschluss PRACE („Partnership for Advanced Computing in Europe“). Zwar gebe es in Europa einzelne Höchstleistungsrechner, die auf den internationalen Ranglisten weit vorne liegen. „Aber noch sind wir nicht so gut aufgestellt wie die USA“, sagt Wolf. Indes sind die europäischen Pläne für Rechner der Petaflop-Klasse, die es auf 1 000 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde bringen werden, bereits weit fortgeschritten. „Damit werden die Bedingungen für Forscher in Europa, die komplexe Simulationen durchführen, noch besser“, ist Wolf überzeugt. Möglicherweise rückt dann auch ein seit langem angestrebtes Fernziel näher: Blutpumpen, die nicht nur die Zeit bis zu einer Transplantation überbrücken, sondern das Herz auf Dauer ersetzen können.

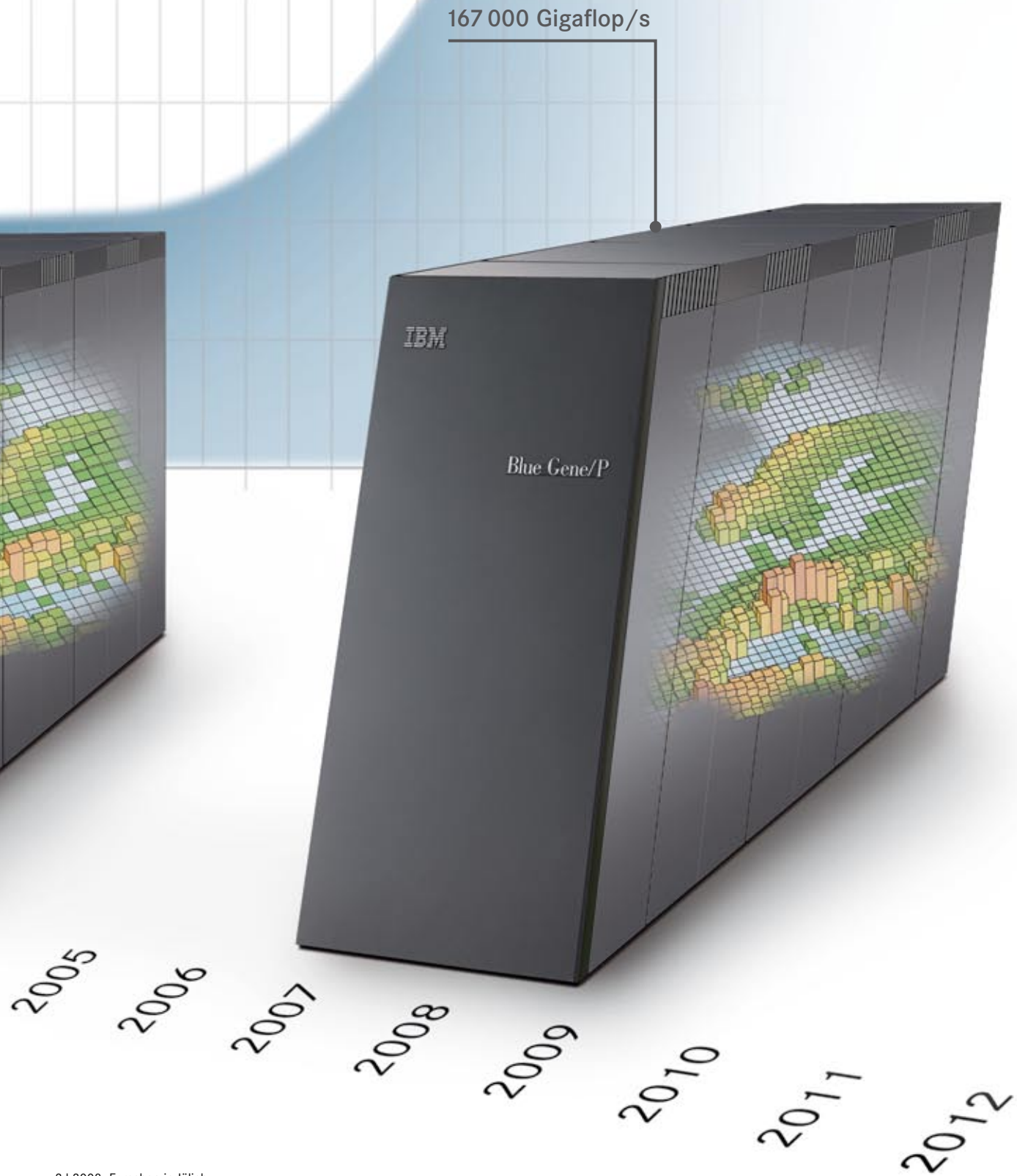
Wiebke Rögener



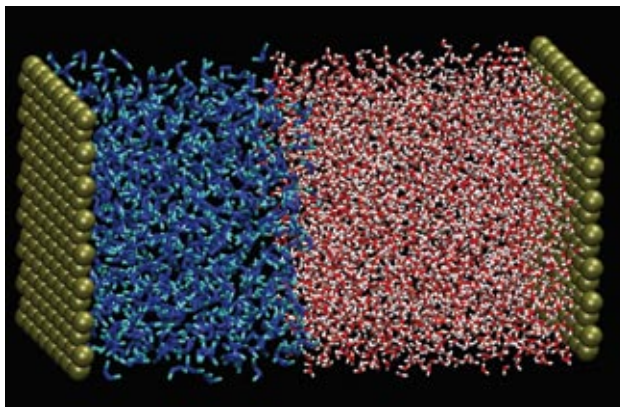
Türen der Erkenntnis

Das Türendesign und damit das „Gesicht“ der Supercomputer am Standort Jülich hat sich im Laufe der Jahre gewandelt. Doch weit mehr veränderten sich die Computerhirne dahinter: Ihre Rechenleistung stieg vor allem mit der aktuellen Gerätegeneration gigantisch an. Zugleich wurden die darauf durchgeführten Simulationen genauer, detailreicher und realistischer: hier demonstriert am immer feineren Rechengitter, das für die Simulation des Klimas über Europa zugrunde gelegt wird.





Spannung im Rechner



Elektrische Ladungen sind in der Natur maßgeblich verantwortlich für Proteinfaltungen, katalytische Prozesse an Oberflächen und viele andere Phänomene. Jülicher Algorithmen, die auf Höchstleistungsrechner zugeschnitten sind, helfen dabei, komplexe Systeme von Ladungsträgern in größeren Dimensionen zu simulieren. Dank einer aktuellen Förderzusage des Bundesforschungsministeriums von rund 1,5 Millionen Euro für das Projekt ScaFaCoS können die Jülicher Wissenschaftler nun gemeinsam mit deutschen Partnern effiziente Programme für physikalische und biologische Fragestellungen weiterentwickeln und der Forschungsgemeinschaft zur Verfügung stellen.

Starke Partnerschaft



Beim ersten Industrieseminar des EU-Projekts PRACE im September 2008 legten hochrangige Manager führender Unternehmen unter anderem aus der Automobil-, der Chemie- und der Elektronikbranche, Wissenschaftler aus 13 europäischen Ländern sowie Vertreter der Europäischen Kommission das Fundament für weitere Zusammenarbeit. „Das Seminar hat gezeigt, dass sehr positive Synergien zwischen Forschung und Industrie beim Höchstleistungsrechnen und bei der Simulation möglich sind“, sagte danach Jean François Hamelin, IT-Leiter des französischen Energieversorgers EDF. Im Projekt PRACE („Partnership for Advanced Computing in Europe“), das vom Forschungszentrum Jülich koordiniert wird, bereiten 16 Partner den Aufbau einer Infrastruktur vor, die europäischen Forschern Zugang zu Supercomputer-Ressourcen auf höchstem Niveau ermöglicht.



Software für verteiltes Rechnen

Experten des Jülich Supercomputing Centre haben die europäische Grid-Software UNICORE grundlegend überarbeitet und als Version 6 veröffentlicht. Grid-Computing ist eine Form verteilten Rechnens, mit der Wissenschaftler und Ingenieure rechenintensive, schwierige Probleme lösen können. UNICORE ermöglicht den Nutzern von jedem Punkt der Welt aus den sicheren und intuitiven Zugang zu Rechenressourcen und Daten unter anderem in Supercomputerzentren. Die Software wird inzwischen auch von Unternehmen und öffentlichen Einrichtungen verwendet. www.unicore.eu

Entscheidendes Engagement



Der Bund und die Länder Baden-Württemberg, Bayern und Nordrhein-Westfalen haben im November 2008 vereinbart, den schrittweisen Ausbau des Gauss Centre for Supercomputing (GCS) an ihren Standorten in Jülich, Garching und Stuttgart mit 400 Millionen Euro zu unterstützen. „Wir sind dafür außerordentlich dankbar, denn nun haben wir die große Chance, die neue europäische Infrastruktur mit Computern der Petaflop-Klasse entscheidend mitzugestalten“, so Prof. Achim Bachem vom Forschungszentrum Jülich im Namen des GCS-Vorstands.
www.gauss-centre.eu

Einschulung der Forscherelite



Die German Research School for Simulation Sciences (GRS), gegründet von Forschungszentrum Jülich und RWTH Aachen, hat ihren Betrieb aufgenommen: Seit dem Wintersemester 2008/2009 werden dort ausgewählte Master-Studenten in Anwendungen und Methoden der Computersimulation für Natur- und Ingenieurwissenschaften ausgebildet. Schon im April 2008 hatte die GRS die ersten Physiker und Ingenieure begrüßt, die an den Standorten Jülich und Aachen den Doktorgrad erwerben werden.
www.grs-sim.de



Simulationen retten Menschen

Künftig sollen Computermodelle schnell vorhersagen, wie Menschen bei einem Brand oder einem Anschlag in Fußballstadien, Bahnhöfen oder öffentlichen Gebäuden der Gefahr zu entkommen versuchen. Entwickelt von Jülicher Wissenschaftlern, werden Simulationen das Rückgrat eines rechnergestützten Evakuierungssystems bilden. Es soll helfen, die Menschen zu den besten Fluchtwegen zu leiten sowie Sicherheitspersonal und Rettungskräfte optimal einzusetzen. Das Bundesforschungsministerium fördert das vom Jülich Supercomputing Centre koordinierte Vorhaben Hermes, an dem auch industrielle Partner beteiligt sind, im Rahmen seines Programms „Forschung für die zivile Sicherheit“ mit rund 4,6 Millionen Euro.

IMPRESSUM

Forschen in Jülich Magazin des Forschungszentrums Jülich, ISSN 1433-7371 **Herausgeber:** Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich **Konzeption und Redaktion:** Dr. Frank Frick, Dr. Angela Lindner (v.i.S.d.P.), Kosta Schinarakis **Autoren:** Dr. Frank Frick, Dr. Wiebke Rögener, Dr. Axel Tillemanns **Design und Layout:** Grafische Betriebe, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich (Titelbild, S. 8 – 9, S. 11, S. 14, S. 15 alle außer Bild 6, S. 17 li., S. 21, S. 26, S. 28 u., S. 32 – 33, S. 34 o. li.), R. U. Limbach (S. 3, S. 4 o., re. u., S. 6, S. 7 o. li., u. m., u. re., S. 12, S. 17 o., S. 19 u., S. 22 – 25, S. 31 re., S. 34 o. re., S. 35 o. re.), K. Peters (S. 10 u.), JARA-SIM, RWTH Aachen (S. 2, S. 27, S. 28 o., S. 29 u., S. 30 o.), creativ collection (S. 10 o., S. 20 o., S. 30 u., S. 35 u.), MARUM, Universität Bremen (S. 18 o.), micromedcv.com (S. 29 o.), Universität Hamburg (S. 4 u. li., S. 16), E. Scheiner; N.N. Nair; D. Marx; Ruhruniversität Bochum (S. 19 o.), C. Czaplewski; A. Liwo; Universität Gdansk (S. 13), Getty Images (S. 7 u. li.), Thomas Klink (S. 7 o. re.), J. Schumacher (S. 15 u. li.), U. Schulzweida & N.P. Noreiks; MPI für Meteorologie (Europa-Grafik S. 32 – 33)
Kontakt: Stabsstelle Unternehmenskommunikation | Tel. 02461 61-4661 | Fax 02461 61-4666 | info@fz-juelich.de
Druck: Druckerei Schloemer GmbH **Auflage:** 15 000



Mitglied der:

