



## Was bedeutet EXASCALE?

Computer haben unseren Alltag verändert. Das fängt bei der Kommunikation mit dem Smartphone an und endet bei der Steuerung der Motoreinspritzung von Autos. Genauso krempelt das wissenschaftliche Rechnen den Erkenntnisprozess in der Forschung um. Es bietet Natur- und Ingenieurwissenschaftlern ungeheure Möglichkeiten. Der Gesellschaft eröffnet sich damit die Gelegenheit, sich schon heute den drängenden Fragen der Zukunft zu stellen: Wie gewährleistet man die Gesundheit einer alternden Gesellschaft? Wie sichere ich nachhaltige Mobilität? Woher kommt umweltverträglicher Strom? Welche Datenspeicher nutzen wir morgen? Mit Supercomputern können Forscher die Welt von morgen simulieren und schon heute Antworten für künftige Fragen finden.

Der Erfolg hängt auch davon ab, ob die richtigen Werkzeuge bereitstehen. Forscher benötigen Rechner mit mehr Leistung. Aus der heutigen Rechnergeneration mit einem

Petaflop/s Leistung soll bis 2019 die tausendmal stärkere Exaflop/s-Klasse entstehen. Ein einfaches Skalieren, das Aneinanderreihen von tausend Supercomputern, wird uns nicht ans Ziel bringen. Wir brauchen Hardware, die entscheidend weniger Strom verbraucht, damit die Energiekosten nicht die Forschungsbudgets auffressen. Wir brauchen Software, die auf intelligente Art eine Million Prozessoren zusammenschaltet, um den Nutzern überschaubare Algorithmen anbieten zu können. Der Weg dahin, das Überwinden von Hürden, das Skalieren der Möglichkeiten: all dies verstehen wir am Forschungszentrum Jülich unter „Exascale“. Als Standort des größten nationalen Rechenzentrums und als führender Partner in Europa wollen wir Sie mit unserem neuen Exascale-Newsletter regelmäßig über die Fortschritte hin zu Exaflop/s informieren. Zugleich laden wir Sie ein, mit uns zusammen den weiteren Weg zu gestalten. In diesem Sinne wünsche ich Ihnen eine spannende Lektüre der ersten Ausgabe.

Prof. Achim Bachem  
Vorstandsvorsitzender  
des Forschungszentrums Jülich

## IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:  
DVD-Materialien von morgen  
Trillionen für die Wissenschaft



SEITE 3:  
Kompakte Teilchenbeschleuniger  
Evakuierungsforschung



SEITE 4:  
Kurznachrichten  
Termine  
Impressum

## Der Schlüssel für die DVD-Materialien von morgen

Filme und Musik auf einer DVD zu speichern, gehört zu unserem digitalen Alltag. Trotzdem sind die physikalischen Grundlagen der Datenspeicherung noch nicht restlos aufgeklärt. Neue Erkenntnisse von Forschern aus Jülich, Finnland und Japan über die Struktur des DVD-Materials könnten helfen, leistungsfähigere Speichermaterialien zu entwickeln – etwa mit größerer Kapazität, längerer Datenhaltbarkeit und geringerer Zugriffszeit.

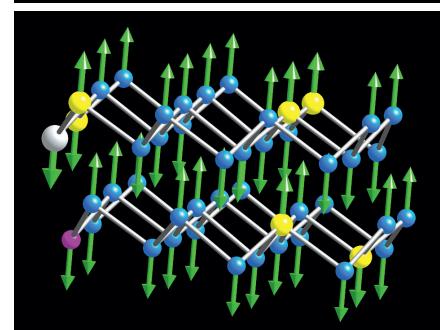
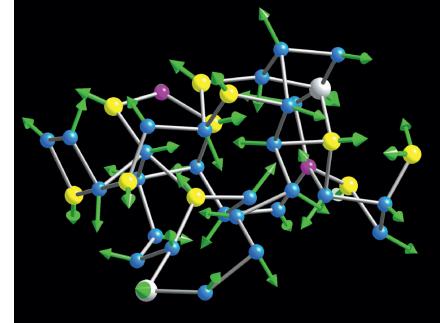
Mittels Simulationen auf dem Jülicher Supercomputer JUGENE sowie Röntgenuntersuchungen am Synchrotron Spring-8 in Japan

haben die Wissenschaftler einen Blick auf den Phasenwechsel während des Schreibprozesses einer DVD geworfen. Bei dem Pha-

senwechsel verändert sich die Struktur der informationstragenden Schicht auf der silbernen Scheibe – von einer ungeordneten, amorphen (rechts oben) hin zu einer geordneten, kristallinen Form (rechts unten). Der Übergang dazwischen dauert nur einige Nanosekunden und lässt sich durch einen Laserstrahl auslösen. Die Forscher, unter ihnen der Jülicher Experte Dr. Robert O. Jones, konnten die Strukturen der beiden Phasen für DVD-RW bestimmen und ein Modell für den schnellen Phasenübergang entwickeln.

### Atom für Atom richtet sich neu aus

Für DVD-RW wird in der Regel die Legierung AIST verwendet, die in kleinen Mengen Silber und Indium sowie Antimon und Tellur enthält. Bei GST-Legierungen, etwa für DVD-RAM oder Blu-ray Disc, ersetzt Germanium das Silber und Indium. Das Forscherteam



hat festgestellt, dass sich der Übergang zwischen den Phasen bei den beiden Materialklassen deutlich unterscheidet: In der AIST-Klasse startet der Prozess vom Rand her und in vielen kleinen Schritten richtet sich Atom für Atom neu aus.

Um dies herauszufinden, waren etwa 4000 Prozessoren des Supercomputers JUGENE vier Monate ausgelastet. In der GST-Klasse, die das Forscherteam bereits zuvor untersucht hatte, bilden sich dagegen Kristallisationskeime im Innern. Die atomaren Strukturen nutzen, anders als bei AIST, vorhandene Hohlräume für größere Umordnungen.



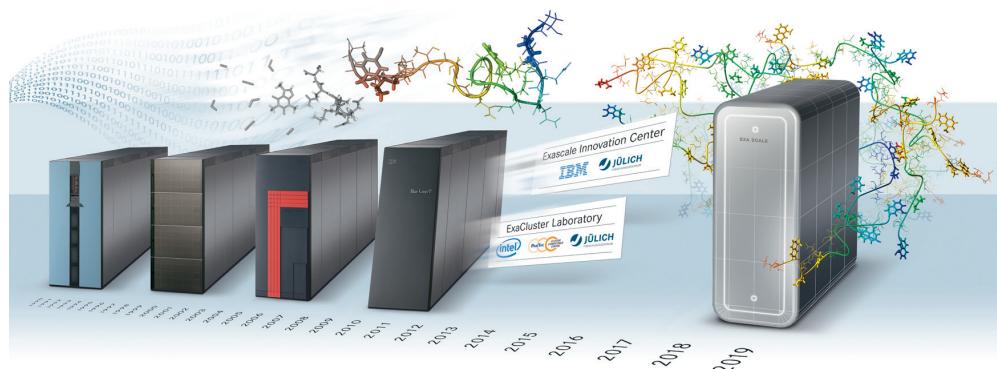
Nature Materials DOI: 10.1038/NMAT2931

[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2011/11-01-10naturematerials-dvd.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2011/11-01-10naturematerials-dvd.html)

## Eine Trillion für die Wissenschaft

In den nächsten zehn Jahren soll die Rechenleistung von Supercomputern um den Faktor 1000 steigen – auf ein Exaflop/s, also eine Trillion Rechenoperationen pro Sekunde. Damit ließe sich der Erkenntnisgewinn in den gesellschaftlich wichtigen Forschungsfeldern beschleunigen, etwa Klimawandel, Energieversorgung, Informationstechnologie und Gesundheit. Um die Entwicklung hin zum Exaflop/s-Rechner gemeinsam voranzutreiben, kooperiert das Forschungszentrum Jülich eng mit den Firmen IBM und Intel.

Zusammen mit dem IBM Forschungs- und Entwicklungszentrum hat es das „Exascale Innovation Center“ mit den Standorten Jülich und Böblingen gegründet. Rund zehn Mitarbeiter sind damit beschäftigt, bis zum Jahr 2019 auf Basis der Blue Gene-Hardwaretechnologie von IBM Supercomputer der Exaflop/s-Klasse zu ermöglichen und für die wissenschaftliche Anwendung zu



optimieren. Über die Pläne, bereits bis 2015 in Jülich den ersten Prototypen aufzustellen, informierten sich Anfang des Jahres auch Parlamentarier des Bundestags in Berlin.

In Jülich entsteht außerdem in Kooperation mit Intel und der Firma Partec das „ExaCluster Laboratory“. Es wird Betriebssysteme, Softwarewerkzeuge und Simulationssoftware für Cluster-Rechner entwickeln, die aus einer großen Zahl von günstigen, stan-

dardisierten Hardware-Komponenten modular aufgebaut sind. Etwa ein Dutzend Forscher werden daran arbeiten, energieeffizient, zuverlässig und nachhaltig allerhöchste Rechenleistung bereitzustellen.

„Ich freue mich, mit diesen starken Partnern die Hürden auf dem Weg zum Exaflop/s-Rechner zu meistern“, sagt Prof. Thomas Lippert, Direktor des Jülich Supercomputing Centre.

[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2010/index6ad2\\_htm.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2010/index6ad2_htm.html)  
[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2010/index92bb\\_htm.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2010/index92bb_htm.html)

## Teilchenbeschleuniger im Labor-Format

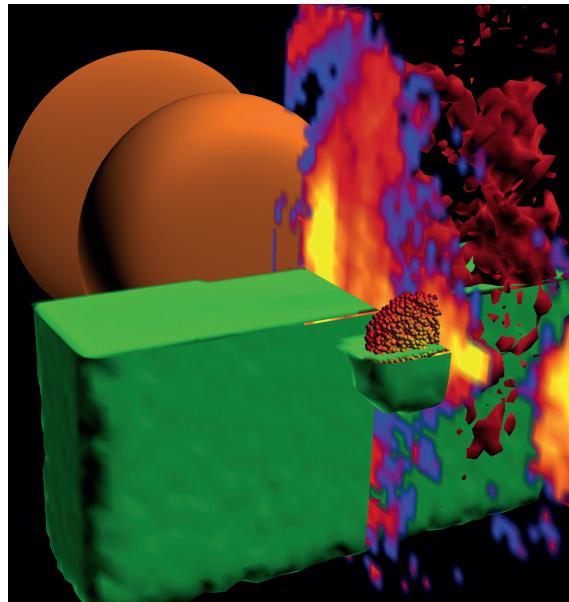
Um Teilchen auf hohe Geschwindigkeiten zu bringen, müssen Forscher auf riesige Teilchenbeschleuniger wie etwa am Forschungsinstitut CERN zurückgreifen. In kilometerlangen Röhren werden dort Protonen durch elektrische Felder aufwendig auf fast Lichtgeschwindigkeit gebracht. Eine kompakte Alternative, die in jedes Universitätslabor passen könnte, haben Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich und der Universität Belfast entwickelt.

Die Jülicher Forscher Dr. Bin Qiao und Dr. Paul Gibbon haben sie an einem besonderen Beispiel erprobt: dem Lichtsegel, dem Antrieb durch Strahlungsdruck (Radiation Pressure Acceleration – RPA). Dabei gibt das Sonnenlicht seinen Impuls an großformatige, leichte Kunststoffsegel ab und treibt damit beispielsweise einen Satelliten an. Genau das hat kürzlich die japanische Weltraummission IKARUS getestet. Den Effekt des Strahlungsdrucks haben die Jülicher Wissenschaftler im Kleinen auf dem Super-

computer JUROPA des Forschungszentrums untersucht und auf die extreme Beschleunigung kleiner Massen übertragen.

### Möglichkeiten für die Tumor-Behandlung

„In unserer Simulation haben wir eine hauchdünne, wenige Nanometer dicke Kunststofffolie mit einem gepulsten Hochleistungslaser beschossen“, sagt Paul Gibbon. Die Folge: Der Laserstrahl (im Bild orange) brachte die Folie auf nahezu Lichtgeschwindigkeit. Dabei erhitzte sie sich so weit, dass aus einer präparierten Kunststoffmischung aus Kohlen- und Wasserstoff ein stabiler Protonenstrahl (rot-gelbe Kugeln) entstand. Diese Teilchenkonfiguration wurde bei Laserleistungen von rund 100 Exawatt pro Quadratzentimeter erreicht, was heutigen Laborlasern entspricht. „Interessant war, dass unser Lichtsegel sich für Teile der Strahlung als transparent erwies, was einen stabilisierenden Effekt auf die Beschleunigung der Protonen hatte“, erklärt Gibbon.



„Wir haben es also mit einem löchrigen Sonnensegel zu tun.“ Kompakte Teilchenbeschleuniger könnten in Zukunft in der Forschung für Fusionsexperimente oder in Krankenhäusern zur Tumortherapie oder als Röntgenquelle eingesetzt werden.

Physical Review Letters DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.155002  
[www2.fz-juelich.de/jsc/slpp/research/laserplasma](http://www2.fz-juelich.de/jsc/slpp/research/laserplasma)

## Der schnellste Weg in die Sicherheit

Immer wieder kommt es bei Großveranstaltungen zu Ereignissen, die eine Massenpanik auslösen oder andere gefährliche Folgen haben können. Die beiden Jülicher Wissenschaftler Mohcine Chraibi und Prof. Armin Seyfried sowie Prof. Andreas Schadschneider von der Universität Köln haben ein Computermodell zur Evakuierung entwickelt, das kritische Situationen frühzeitig erkennt. Mit Hilfe des Modells könnten Menschen im Katastrophenfall zu den besten Fluchtwegen geleitet sowie Rettungskräfte optimal eingesetzt werden. Dafür erfassen beispielsweise bei einem Brand in Fußballstadien, Bahnhöfen oder öffentlichen Gebäuden Sensoren freie Rettungswege und Personenströme. Aus den Daten erstellt dann ein Supercomputer sehr schnell eine Stauprognose, die es den Verantwortlichen erlaubt, frühzeitig einzutreten.

Das Modell wurde im Rahmen eines Projektes der Deutschen Forschungsgemeinschaft entwickelt und kommt nun im Verbundprojekt „Hermes“ zum Einsatz.



Das Vorhaben „Hermes“, das das Bundesforschungsministerium mit rund 5,4 Millionen Euro fördert, soll die Sicherheit der Personen bei Großveranstaltungen mit Hilfe

eines Evakuierungsassistenten verbessern. Das System soll 2011 in der ESPRIT Arena in Düsseldorf getestet werden.

Das Modell wurde in der Physical Review E (DOI: 10.1103/PhysRevE.82.046111) vorgestellt. Der Artikel „Generalized Centrifugal Force Model for Pedestrian Dynamics“ der drei Wissenschaftler wurde jüngst in den „Research Highlights“ der Zeitschrift Nature Physics kommentiert (DOI:10.1038/nphys1850).  
[www2.fz-juelich.de/jsc/appliedmath/ped/projects/hermes-de](http://www2.fz-juelich.de/jsc/appliedmath/ped/projects/hermes-de)

## KURZNACHRICHTEN

## Computer entdecken Radiopulsar



Ein Stern und eine Viertelmillion Finder: Mit Hilfe der verteilten Rechenkapazitäten von rund 250 000 Teilnehmern hat das Projekt Einstein@Home den Radiopulsar PSR J2007+2722 in unserer Milchstraße entdeckt. Über ein Jahr lang wurden dazu die Daten aus dem Arecibo Observatorium in Puerto Rico ausgewertet. Das Projekt nutzte neben vielen privaten Heim-PCs auch die Ressourcen von Computer-Netzwerken aus der Wissenschaft. Dazu zählt etwa D-Grid, das rund 36 000 Prozessoren an 40 Standorten zusammenfasst – unter anderem die des Jülicher Computerclusters JUGGLE.

[www.d-grid.de](http://www.d-grid.de)

## PRACE nimmt Arbeit auf

Der Verein der europäischen Supercomputerzentren PRACE hat mit der Vergabe von Rechenzeit begonnen. Der unabhängige Gutachterbeirat wählte für die beiden laufenden Bewilligungsperioden Early Access und First Regular Call 19 Projekte aus. Diese erhielten insgesamt rund 700 Millionen Prozessorstunden Rechenzeit auf dem ersten europäischen Petaflop-Rechner, dem Jülicher Supercomputer JUGENE, zugeteilt. Beworben hatten sich fast 120 Projekte mit einem Bedarf von 4,2 Milliarden Prozessorstunden. Die 19 ausgewählten Projekte kommen aus Deutschland, Großbritannien, Italien, Portugal, Frankreich, Polen, Spanien, Ungarn und den Niederlanden und decken die Bereiche Astrophysik, Chemie und Materialforschung, Teilchenphysik, Mathematik, Umwelt-, Ingenieur- und Lebenswissen-

schaften ab. Die nächste große Antragsrunde, der Second Regular Call, beginnt am 1. November 2011. Kleinere Rechenzeitkontingente zur Softwareerprobung, der sogenannte Preparatory Access, können laufend beantragt werden ([peer-review@prace-ri.eu](mailto:peer-review@prace-ri.eu)).

„Ich begrüße den Start des Supercomputerverbunds PRACE wirklich sehr, denn wissenschaftliche Hochleistungsrechner sind ein Schlüsselfaktor“, erklärte die Vizepräsidentin der Europäischen Kommission, die Kommissarin für die Digitale Agenda Neelie Kroes, anlässlich eines Themenabends zu Beginn der Bewilligungsperiode. Dabei trafen sich in Brüssel Vertreter der europäischen Institutionen – des Parlaments, der Kommission und des Ministerrates – sowie Vertreter der Industrie mit Experten von PRACE.

[www.prace-project.eu](http://www.prace-project.eu)

## Softwaretools ausgezeichnet

Die europäische Förderorganisation ITEA hat das Forschungsprojekt „Parallel Programming for Multicore Architectures – ParMA“ mit dem Achievement Award 2010 in Gold ausgezeichnet. Sie würdigte damit die signifikanten Ergebnisse auf hohem technischem Niveau, die die Projektpartner aus vier Ländern erzielten. ParMA stellt Softwarewerkzeuge zur Verfügung, um Multicore-Architekturen im Supercomputing effizienter zu nutzen. Ein wichtiger Teil des Software-Pakets sind die Jülicher Beiträge UNITE und Scalasca, mit denen parallele Programme analysiert und optimiert werden können. Die Forscher von Scalasca erhielten bereits auf der International Conference on Parallel Processing (ICPP) 2010 den Best Paper Award. In der ausgezeichneten Veröffentlichung stellten sie ein skalierbares Verfahren vor, das Ursachen für unnötige Wartezyklen in parallelen Programmen identifizierte.

[www.scalasca.org](http://www.scalasca.org)

## IMPRESSUM

**EXASCALE** Newsletter des Forschungszentrums Jülich  
**Herausgeber:** Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich  
**Konzeption und Redaktion:** Kosta Schinarakis, Dr. Anne Rother (v.i.S.d.P.), Christian Hohlfeld

**Design und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich

**Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich, © fotolia.com (Furret (S. 2), Tjefferson (S. 4))  
**Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Telefon: 02461 61-4661 | Telefax: 02461 61-4666 | E-Mail: [info@fz-juelich.de](mailto:info@fz-juelich.de)

**Druck:** Schloemer und Partner GmbH  
**Auflage:** 800

## TERMINE

Parallel I/O und portable Datenformate

28. – 30. März 2011

am Jülich Supercomputing Centre

**Inhalte:** Die Eingabe, die Ausgabe und das Speichern von Daten auf Parallelrechnern mit mehreren zehntausend Prozessoren können einen Engpass bedeuten. Auch die Portabilität von Datenformaten wird zusehends eine Herausforderung, wenn Simulationen auf unterschiedlichen Systemen betrieben werden. Dieser Kurs widmet sich daher intensiv plattformunabhängigen, selbstbeschreibenden Datenformaten wie HDF5 und netCDF.

**Dozenten:**

Wolfgang Frings, Dr. Michael Stephan,  
Dr. Florian Janetzko

**Anmeldung:**

Dr. Florian Janetzko, 02461 61-1446,  
[f.janetzko@fz-juelich.de](mailto:f.janetzko@fz-juelich.de)

**Internet:**

[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Termine/IAS/JSC/EN/courses/parallelio.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Termine/IAS/JSC/EN/courses/parallelio.html)

Einführung in die PGAS-Programmiersprachen UPC und CAF

12. April 2011

am Jülich Supercomputing Centre

**Inhalte:** Dieser Kurs führt anhand von Übungen in Programmiersprachen ein, die auf Parallelrechnern globale Speicheradressen nutzen. Sie bieten Vorteile beim Programmieren und sind genauso leistungsfähig wie bestehende Programmierkonzepte.

**Dozent:**

Dr. Reinhold Bader, LRZ

**Anmeldung:**

Dr. Florian Janetzko, 02461 61-1446,  
[f.janetzko@fz-juelich.de](mailto:f.janetzko@fz-juelich.de)

**Internet:**

[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Termine/IAS/JSC/EN/courses/pgas.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Termine/IAS/JSC/EN/courses/pgas.html)

Gaststudentenprogramm

„Wissenschaftliches Rechnen“

1. August – 7. Oktober 2011

am Jülich Supercomputing Centre

**Inhalte:** Masterstudierende der Natur- und Ingenieurwissenschaften sowie der Mathematik und Informatik können in diesem 10-wöchigen Ferienkurs ihre Erfahrungen im wissenschaftlichen Rechnen auf Höchstleistungsrechnern ausbauen. In enger Zusammenarbeit mit einem Mentor und innerhalb einer Forschergruppe bearbeiten sie ein Thema aus dem Forschungsspektrum des Jülich Supercomputing Centre.

**Anmeldung:**

Mathias Winkel, 02461 61-2509, [jsc-gsp@fz-juelich.de](mailto:jsc-gsp@fz-juelich.de)

**Internet:**

[www2.fz-juelich.de/jsc/gsp\\_de](http://www2.fz-juelich.de/jsc/gsp_de)

Eine Übersicht der Kurse am Jülich Supercomputing Centre finden Sie unter:

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/DE/Aktuelles/Termine/termine\\_node.html](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/DE/Aktuelles/Termine/termine_node.html)