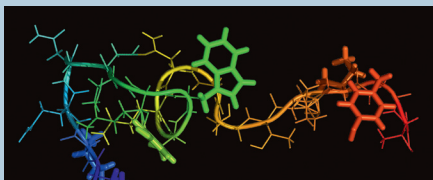




Den Fortschritt beschleunigen

Erfolg in Wissenschaft und Industrie hängt zunehmend von komplexen Computersimulationen ab – und damit von ausreichend verfügbarer Rechenleistung. Das gilt für die Material- oder Klimaforschung ebenso wie für die Genetik. Die Schlüsseltechnologie hierzu lautet High Performance Computing (HPC). In dieser Pionierwissenschaft werden in einem rasanten Tempo neue Bereiche erschlossen.



Diese Innovationen müssen auch Unternehmen möglichst rasch nutzen können. HPC-Cloud heißt eine Lösung, an der Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich, besonders am Jülich Supercomputing Centre, arbeiten. Cloud Computing für Anwendungen mit durchschnittlichen Anforderungen ist in aller Munde. Statt sich Hard- oder Software selbst anzuschaffen, greifen Nutzer auf Ressourcen, Rechenkapazitäten oder Programme über ein Netzwerk zu.

Experten sprechen von einem Paradigmenwechsel in der Informationstechnologie.

Diese Lösung ist beim High Performance Computing ebenfalls denkbar. Unternehmen könnten über solche Clouds frühzeitig neueste Technologie anwenden und so eigene Entwicklung und Produktion optimieren. Das würde den Fortschritt deutlich beschleunigen. Natürlich gilt es, entsprechende Voraussetzungen zu schaffen, etwa bei Fragen der Sicherheit, der Standardisierung und der Zertifizierung. Die anteilige Nutzung von Clouds durch die Industrie wäre zudem eine Möglichkeit, diese Technologie entsprechend zu finanzieren.

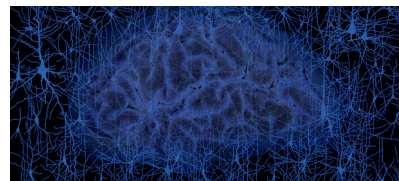
An HPC-Cloud-Komponenten für die europäische Industrie wird bereits gearbeitet, beispielsweise im Rahmen des europäischen Supercomputerverbunds PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Der Verbund wird europaweit Dienstleistungen für das Höchstleistungsrechnen bereitstellen und so die europäische Wettbewerbsfähigkeit entscheidend stärken.

Prof. Achim Bachem
*Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich*

IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:

Simulation des menschlichen Gehirns
Digitales Radioteleskop



SEITE 3:

Neue Ära hat bereits begonnen
Turbolader für Supercomputer



SEITE 4:

Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/supercomputing

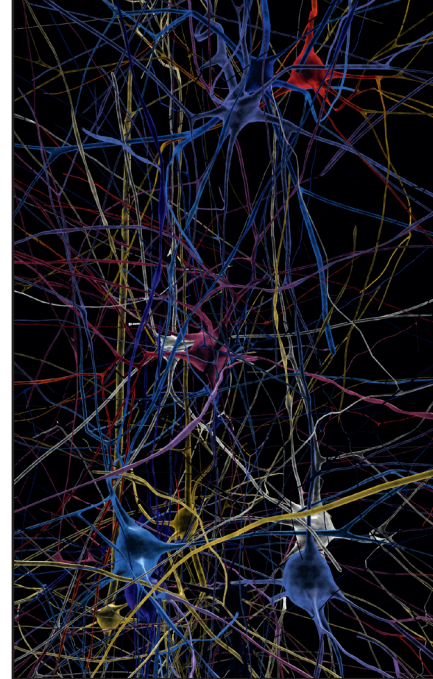
Simulation des menschlichen Gehirns eröffnet neue Dimensionen

Ein Team von Wissenschaftlern aus neun europäischen Staaten hat einen kühnen Plan: Innerhalb von zehn Jahren wollen sie das menschliche Gehirn mit einem Supercomputer simulieren. Das „Human Brain Project“ ist eines von sechs Vorhaben, die sich um die Förderung als sogenanntes FET-Flagship der Europäischen Union bewerben. Die EU unterstützt solche visionären technologischen Projekte zehn Jahre lang mit bis zu einer Milliarde Euro.

Die 13 Partnereinrichtungen decken die unterschiedlichsten Bereiche ab: von den Neurowissenschaften über Genetik, Robotik und Sozialwissenschaften bis hin zum Höchstleistungsrechnen. Hier kommt das Forschungszentrum Jülich ins Spiel. Professor Thomas Lippert, Direktor des Jülich Supercomputing Centre (JSC), leitet den Arbeitsbereich High Performance Computing

in dem Human Brain Project. „Für dieses Projekt benötigen wir eine neue Generation von Superrechnern“, sagt JSC-Mitarbeiter Dr. Boris Orth. Er schätzt, dass rund tausendmal mehr Rechenleistung nötig sein wird, als heute möglich ist. Der Vorteil des Forschungszentrums: Hier arbeiten Supercomputing-Experten des JSC und Wissenschaftler des Instituts für Neurowissenschaften und Medizin bereits eng zusammen.

Weitere Herausforderungen sind die Visualisierung etwa von dreidimensionalen Hologrammen und das Datenmanagement. Gigantische Mengen an Informationen müssen verarbeitet werden – analog zum menschlichen Gehirn. Hier könnte es zum Vorbild für künftige Rechnerarchitekturen werden, etwa beim geringen Energieverbrauch. Bedeutende Fortschritte erhoffen



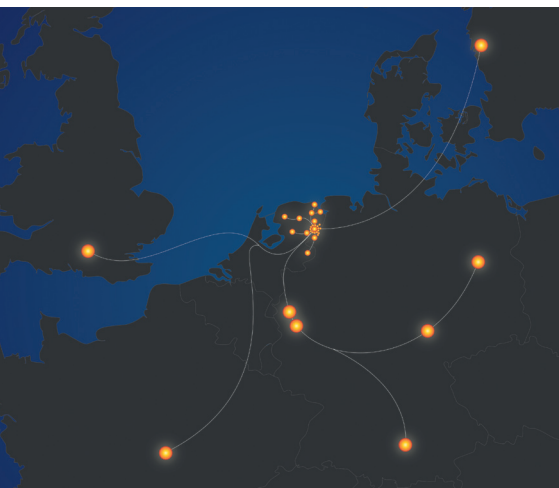
sich die Wissenschaftler zudem in der Medizin bei der Erforschung und Therapie von Hirnerkrankungen. Und in der Robotik wollen sie irgendwann in der Lage sein, Roboter an ein simuliertes Gehirn anzuschließen.

Das Human Brain Project bietet daher die Chance, bisheriges Wissen zusammenzutragen und auf mehreren Gebieten in neue Dimensionen vorzustoßen. Bis Ende April 2012 muss das Team, das der Neurowissenschaftler Professor Henry Markram aus Lausanne koordiniert, einen detaillierten Antrag vorlegen. 2013 soll es losgehen.

www.humanbrainproject.eu

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2011/11-05-11HBP.html

Superrechner ermöglicht digitales Radioteleskop



Radioteleskope sind eines der wichtigsten Instrumente, um das Universum zu erforschen. Sie erfassen elektromagnetische Strahlungen im Bereich der Radiowellenlängen, die Objekte im Weltall ausstrahlen. Solche Teleskope sind vor allem als tonnenschwere Großanlagen mit ihren riesigen,

rund 100 Meter breiten Schüsseln und der darin befindlichen Antenne bekannt. Einen anderen Ansatz verfolgt das niederländisch-europäische Pilot-Projekt LOFAR (Low Frequency Array) mit seinem digitalen Radioteleskop. Es unterhält 36 Stationen mit einer Vielzahl von kleinen Antennen – vor allem in den Niederlanden, aber auch in Deutschland und weiteren europäischen Ländern.

LOFAR hat verschiedene Vorteile: Die verteilten Antennenfelder decken den gesamten Himmel ab und können gleichzeitig in verschiedene Himmelsrichtungen blicken. Dagegen dauert die Ausrichtung der schwerfälligen Großanlagen meist mehrere Minuten. Das digitale System ist außerdem kostengünstiger und ermöglicht Bilder des Sternenhimmels in bislang unerreichter Präzision.

Bislang scheiterte die Umsetzung an technischen Hürden. „Inzwischen verfügen wir aber beispielsweise über ausreichend Rechnerleistung, um die gigantischen Da-

tenmengen zu übertragen, zu speichern und zu verarbeiten“, sagt Thomas Fieseler vom Jülich Supercomputing Centre (JSC), Ansprechpartner in Jülich für die Station, die in Kürze ihren Betrieb aufnehmen wird. Darüber hinaus betreut das JSC ein Datenzentrum für die fünf deutschen Stationen. Dort werden die Daten gesammelt, von einem Supercomputer ausgewertet und auf einem Bandroboter gespeichert – als Langzeitdatenarchiv.

Unlängst ist es einem internationalen Astronomenteam dank LOFAR gelungen, die bisher empfindlichsten Radiobeobachtungen von Pulsaren bei niedriger Frequenz aufzunehmen. Das digitale Radioteleskop nutzen sowohl Radioastronomen, um etwa mehr über den Urknall zu erfahren, als auch Geophysiker sowie Klima- und Umweltforscher.

www.lofar.org

Neue Ära hat bereits begonnen

Die Maschine hat den Menschen besiegt – zumindest beim Ratespiel „Jeopardy“. Bei dem Quiz muss in einer bestimmten Zeit auf eine vorgegebene Antwort die passende Frage gefunden werden. Im Februar 2011 war der Supercomputer „Watson“ von IBM dabei eindeutig schneller als seine menschlichen Mitspieler. Was folgt daraus? – Fragen an Professor Thomas Lippert, Direktor des Jülich Supercomputing Centre.

Welche Bedeutung hat der Sieg von „Watson“?

Es ist – mal wieder – ein Meilenstein, ähnlich wie vor 15 Jahren, als der IBM-Computer „Deep Blue“ Schachweltmeister Garri Kasparow Matt setzte. Allerdings ging es dieses Mal um mehr: nämlich um Sprache.

Worin liegt die besondere Leistung des Superrechners?

Das Entscheidende ist weniger der Rechner als die Software. „Watson“ hat zwar einen großen Speicher, aber nicht die größte



Rechenleistung. Die Software kann komplizierte Sprache, Zweideutigkeiten und semantische Verbindungen mit einer beachtlichen Genauigkeit bewerten – und das oftmals schneller als der Mensch.

Stehen wir vor dem Beginn einer neuen Ära?

Wir sind bereits mitten drin, wie der Sieg von „Watson“ zeigt. Die Software ist im Grunde universell einsetzbar – vorausgesetzt, es sollen Sprache und sprachliche

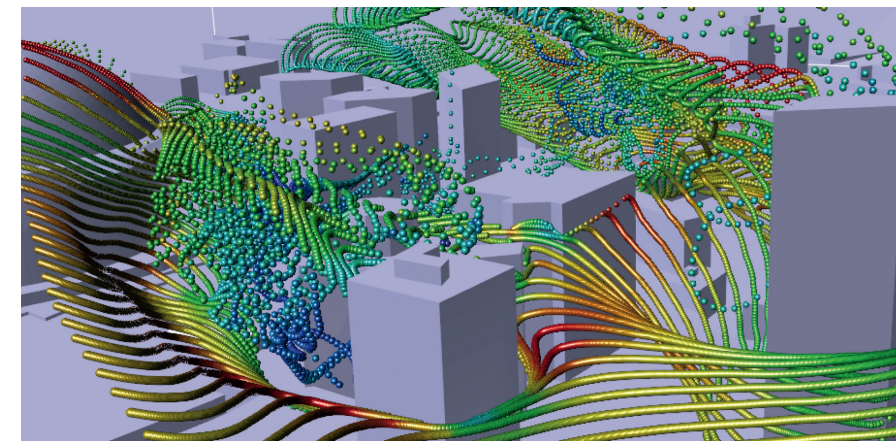
Aussagen bewertet werden und es existiert eine ausreichende Datenbank. In Jülich versuchen wir solche Bewertungsfunktionen auf den experimentellen Bereich zu übertragen, etwa in den Materialwissenschaften, der Astrophysik und der Hirnforschung.

www.ibm.com/watson

Turbolader für Supercomputer

Das Jülich Supercomputing Centre (JSC) hat einen neuen, besonders energieeffizienten Supercomputer in Betrieb genommen: das GPU-Computing-Cluster JUDGE (Juelich Dedicated GPU Environment). JUDGE

ist ein Hybridrechner. Er besteht aus herkömmlichen Prozessoren, die durch Grafikprozessoren verstärkt werden. Genauer gesagt sind es 54 IBM iDataPlex-Knoten, denen 108 Grafikprozessoren vom Typ NVIDIA



www.fz-juelich.de/jsc

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2011/11-05-05-Judge.html

Tesla M2050 unter die Arme greifen. Neben rechenintensiven Datenanalysen und Simulationen in der Biologie und Gehirnforschung soll das Cluster Simulationen in der Klima- und Atmosphärenforschung vorantreiben.

Der Einsatz von Grafikprozessoren hat einen wichtigen Vorteil: Dadurch lässt sich die Leistung von Computern enorm steigern, ohne den Energieverbrauch zu erhöhen. Für Professor Thomas Lippert, Direktor des Jülich Supercomputing Centre, ein wichtiger Schritt auf dem Weg zum Supercomputer der Zukunft: „Nur mit entsprechenden Technologiesprüngen kann die derzeitige Spitzenleistung von Supercomputern von etwa einem Petaflop pro Sekunde bis Ende des Jahrzehnts um den Faktor 1000 auf ein Exaflop pro Sekunde gesteigert werden“. Pilotprojekte wie JUDGE sollen den Weg hin zu Hybridrechnern ebnen. Dabei haben die drei Partner JSC, IBM und NVIDIA nicht nur die Leistungssteigerung im Blick, sondern auch den geringeren Stromverbrauch.

KURZNACHRICHTEN

Europäer sprechen mit einer Stimme

14 Organisationen haben sich 2010 in München zur European Open File System Society zusammengeschlossen. Sie wollen ein paralleles Dateisystem auf Open-Source-Basis mitentwickeln und etablieren. Mit der Gründung möchten die Partner sicherstellen, dass bei solchen Systemen die speziellen Anforderungen von europäischen Einrichtungen und Firmen berücksichtigt werden.

Zu den Initiatoren und Gründungsmitgliedern zählt das Jülich Supercomputing Centre. Weitere Mitglieder sind die Universitäten Paderborn und Zürich, die Bull GmbH, CEA/DAM, Data Direct Networks, das GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung, die Credativ GmbH, T-Platforms, die High Performance Cluster File System Software Foundation, Mellanox, Whamcloud, das Leibniz-Rechenzentrum und die ParTec GmbH. Im März kamen hinzu: das Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft, Eurotech Italien und Xyratex Technology Limited, UK.

www.eofs.eu

HOPSA optimiert Leistung

Das europäisch-russische Projekt HOPSA (HOListic Performance System Analysis) hat seine Arbeit aufgenommen: Experten entwickeln Software-Werkzeuge und Arbeitsabläufe für das High Performance Computing weiter. Ziel ist eine integrierte Infrastruktur für die Leistungsoptimierung von HPC-Anwendungsprogrammen – basierend auf einer Kombination von Anwendungs- und Systemmessdaten.

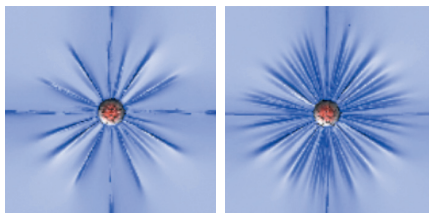
Dafür bringen die europäischen Einrichtungen ihre etablierten Analysewerkzeuge ein: „ThreadSpotter“ der Firma Rogue Wave Software, „Paraver“ vom Barcelona Supercomputing Center, „Vampir“ der Technischen Universität Dresden sowie „Scalasca“ des Jülich Supercomputing Centre (JSC) und der German Research School for Simulation Sciences. Von russischer Seite beteiligt sind die Lomonossow-Universität Moskau, die Firma T-Platforms, die Russische Akademie

der Wissenschaften und die Südliche Föderale Universität in Taganrog. Die EU fördert das Projekt bis 2012 mit Mitteln aus dem 7. Forschungsrahmenprogramm und zwar aus einem speziellen Russland-Programm. Die Koordination der EU-Partner liegt beim JCS. www.vi-hps.org/projects/hopsa

Preiswürdige Promotion

Dr. Stefan Krieg, wissenschaftlicher Mitarbeiter am Jülich Supercomputing Centre und an der Bergischen Universität Wuppertal, hat den Dissertationspreis der Gesellschaft der Freunde der Bergischen Universität erhalten. Sie verlieh ihm die mit 3.000 Euro dotierte Auszeichnung für seine Doktorarbeit „Towards the Confirmation of QCD on the Lattice. Improved Actions and Algorithms“. Darin beschäftigt sich Krieg unter anderem mit verbesserten Simulationsalgorithmen für die Quantenchromodynamik.

Materialien besser simulieren



Das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) hat die neue Forschungsgruppe „Computational Materials Physics“ im Forschungszentrum Jülich eingerichtet. Sie wird in den kommenden fünf Jahren an besseren Algorithmen und Applikationen für die Statistische Physik und die Materialphysik arbeiten. Die Gruppe leitet Prof. Dr. Martin Müser von der Universität des Saarlandes. Der Experte für Computersimulation von Materialien hat an verschiedenen Universitäten und Forschungseinrichtungen gearbeitet, darunter am Watson Research Center von IBM in New York. Das NIC ist eine Gemeinschaftseinrichtung der drei Helmholtzzentren Forschungszentrum Jülich, Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY und GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung. www2.fz-juelich.de/nic

TERMINE

From Computational Biophysics to Systems Biology 2011 (CBSB11)

20. – 22. Juli 2011

im Forschungszentrum Jülich

Seit 2006 bringt die Veranstaltungsreihe „From Computational Biophysics to Systems Biology“ Wissenschaftler verschiedener Fachrichtungen zusammen, um die Lücke zwischen biologischen Simulationen im Molekularbereich und Beschreibungen biologischer Systeme im zellulären Bereich zu schließen. Der diesjährige, fünfte Workshop ist Harold Scheraga gewidmet. Der amerikanische Chemiker, der in diesem Jahr seinen 90. Geburtstag feiert, setzte als einer der Ersten Computer in der Chemie und Biologie ein. Dieser Workshop wird die aktuellen Trends in computergestützter Biophysik und Systembiologie beleuchten. Auch Studierende und Nachwuchswissenschaftler sind herzlich eingeladen.

www.fz-juelich.de/cbsb11

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

2. – 5. August 2011

am Jülich Supercomputing Centre

Der Trainingskurs führt in die parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern im technisch-wissenschaftlichen Umfeld ein. Im Mittelpunkt steht die Verwendung des Message Passing Interface (MPI), des gängigsten Programmiermodells für Systeme mit verteiltem Speicher (distributed memory). Ein weiteres Thema ist OpenMP, das auf Systemen mit gemeinsamem Speicher (shared memory) zum Einsatz kommt. Der Kurs richtet sich in erster Linie an die Teilnehmer des JSC-Gaststudentenprogramms „Wissenschaftliches Rechnen“. Die Teilnahme weiterer Interessierter ist nach Absprache möglich.

Anmeldung:

Dr. Florian Janetzko

Tel.: 02461 61-1446

E-Mail: f.janetzko@fz-juelich.de

www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/mpi-gsp

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

www.fz-juelich.de/ias/jsc/events

IMPRESSUM

EXASCALE Newsletter des Forschungszentrums Jülich **Herausgeber:** Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich **Konzeption und Redaktion:** Dr. Anne Rother (v.i.S.d.P.), Christian Hohlfeld (Trio MedienService) **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich, Defelipe Spain/HBP (S. 1 re. o.), Blue Brain/HBP (S. 2 o.), Astron (S. 2 u.), IBM (S. 3 o.), JARA-SIM, RWTH Aachen (S. 3 u.), Martin Müser (S. 4) **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer und Partner GmbH **Auflage:** 800