



BaSiGo im
Zeitraffer –
zum Video



Daten sammeln bei
Experimenten mit Fußgängern

Durchbruch dank virtuellem Mikroskop

„Forschungsfragen werden immer komplexer, in vielen Bereichen sind Simulationen am Supercomputer der Schlüssel zum Erfolg.“

Die Wissenschaft dringt immer tiefer vor: in die Bausteine des Lebens, die Entwicklung des Universums oder den Ablauf von chemischen und physikalischen Prozessen. Forschungsfragen werden immer komplexer, in vielen Bereichen sind Simulationen am Supercomputer der Schlüssel zum Erfolg. Das zeigt sich auch an der Vergabe der diesjährigen Nobelpreise. Der Chemie-Nobelpreis ging an drei Wissenschaftler, die es ermöglicht haben, komplexe molekulare Prozesse am Computer wie mit einem virtuellen Mikroskop zu erforschen. Ein weiteres Beispiel ist die mit dem Physik-Nobelpreis ausgezeichnete Entdeckung des Higgs-Teilchens. Auch sie wäre ohne Berechnungen auf Supercomputern undenkbar.

Ähnliche Fortschritte erhofft sich die Wissenschaft bei der Erforschung des menschlichen Gehirns. Die erfolgreiche Simulation eines neuronalen Netzwerkes mit 10,4 Billionen Kontaktstellen auf dem K Supercomputer in Japan (siehe Seite 2) ist eine wichtige Vorarbeit für das Human Brain Project. Dieses Projekt, das Anfang Oktober

offiziell startete, will das komplette menschliche Gehirn am Computer simulieren. An beiden Aktivitäten sind Jülicher Forscher maßgeblich beteiligt. Computersimulationen werden aber auch benötigt, um eher alltägliche Herausforderungen zu meistern: etwa im Bereich Verkehr und Sicherheit. Im Projekt „BaSiGo – Bausteine für die Sicherheit von Großveranstaltungen“ entwickeln Wissenschaftler vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) gemeinsam mit ihren Partnern ein Modell, mit dem Personenströme bei Großveranstaltungen simuliert werden können. Bei einem spektakulären Großexperiment mit 2.000 Fußgängern in der Messe Düsseldorf haben sie im Sommer 2013 Daten gesammelt, wie überhaupt ein Fußgängerstau entsteht und wann dieser in ein lebensgefährliches Gedränge umschlägt. Den nächsten Themenschwerpunkt haben die Experten am JSC bereits im Visier: die Brandsimulation.

Prof. Achim Bachem
Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich

IN DIESER AUSGABE

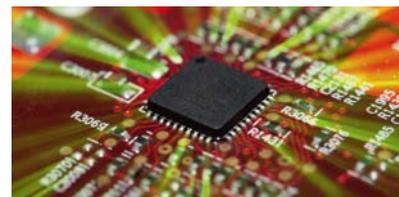
SEITE 2:

10,4 Billionen Synapsen simuliert
Hirnforschung: Modelle müssen neue Erkenntnisse berücksichtigen



SEITE 3:

Schneller und sicherer dank DEEP-ER
Weniger ist manchmal mehr



SEITE 4:

Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc



10,4 Billionen Synapsen simuliert

Wissenschaftler aus Japan und Jülich haben ein neuronales Netzwerk bisher unerreichter Komplexität auf dem japanischen K Supercomputer simuliert. Es umfasst 1,7 Milliarden Nervenzellen, die über insgesamt 10,4 Billionen Kontaktstellen – die sogenannten Synapsen – miteinander verbunden sind. Die Simulation stellt eine Sekunde biologischer Aktivität der Nervenzellen nach. Wie beim menschlichen Gehirn ist jede Zelle in dieser Zeit nur wenige Mal aktiv.

Auch wenn die Nervenzellen zufällig miteinander verknüpft wurden und sich daher noch keine neuen neurowissenschaftlichen

Erkenntnisse daraus ableiten lassen: Das Modell setzt neue Maßstäbe bei der Präzision der mathematischen Beschreibung der biologischen Vorgänge. Für diese Forschung entwickelt Jülich mit seinen Partnern die für jeden Wissenschaftler weltweit frei verfügbare Software NEST (NEural Simulation Tool). Erst neue Datenstrukturen, die Jülicher Wissenschaftler gemeinsam mit japanischen Kollegen vom Forschungsinstitut RIKEN und vom Okinawa-Institut für Technologie entwickelt hatten, machten es überhaupt möglich, den gesamten, ein Petabyte großen Arbeitsspeicher von K für die Lösung

Derzeit viertschnellster Superrechner der Welt: der K Computer am RIKEN-Institut im japanischen Kōbe

einer einzigen Aufgabe gleichzeitig zu nutzen. Unter den vier schnellsten Rechnern der Welt stellt K den einzelnen Rechenknoten den größten Speicher zur Verfügung.

„Die Simulation ist eine richtungweisende Vorarbeit, etwa für das Human Brain Project“, betont Prof. Markus Diesmann vom Jülicher Institut für Neurowissenschaften und Medizin. Das Anfang Oktober gestartete Human Brain Project, an dem Jülicher Forscher maßgeblich beteiligt sind, will mit dem Supercomputer JUQUEEN und seinen Nachfolgern vollständige Gehirne simulieren. Auf die Forscher kommt noch viel Arbeit zu. Denn das menschliche Gehirn verfügt schätzungsweise über 100 Milliarden Nervenzellen.

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2013/13-08-02RekordK.html

Hirnforschung: Modelle müssen neue Erkenntnisse berücksichtigen

Bis vor kurzem dachte man, im erwachsenen Gehirn ändere sich lediglich die Übertragungsstärke von Synapsen. Heute weiß die Forschung, dass sich erfahrungsbahängig neue Verbindungen aufbauen und reorganisieren. Bislang war unklar, welchen Regeln diese sogenannte Strukturplastizität folgt. Eine neue Theorie haben Dr. Markus Butz-Ostendorf, seit Mai 2013 am Jülich Supercomputing Centre (JSC) tätig, und Dr. Arjen van Ooyen von der Vrije Universiteit Amsterdam entwickelt. Ihr Ansatz: Neuronen steuern den Auf- und Abbau der Synapsen durch Selbstregulation ihres elektrischen Aktivitätslevels. Ist das Level zu niedrig, baut ein Neuron neue Verbindungen auf; ist es zu hoch, werden Verbindungen reduziert – so ähnlich reguliert sich auch der Blutzuckerspiegel. Mit Hilfe eines von Butz-Ostendorf entwickelten Simulationsmodells konnte gezeigt

werden, dass der Umbau von neuronalen Netzwerken im Cortex der Maus tatsächlich wie angenommen funktioniert.

Das Aktivitätslevel von Neuronen ändert sich nicht nur beim Lernen, sondern beispielsweise auch nach einer Amputation von Körperteilen, Schlaganfällen oder Hirnerkrankungen. Das Gehirn passt sich in zum Teil monatelangen Prozessen an diese dauerhafte Veränderung eingehender Reize an. Die Zukunft der Medizin wird darin bestehen, Reorganisationsprozesse im Gehirn gezielt zu stimulieren und zu steuern. Mit verbesserten Modellen könnten Therapien mit Hilfe von Simulationen optimiert werden. Heutige Modelle betrachten jedoch nur fixe Verbindungen zwischen Neuronen und verändern lediglich deren Stärke. Aber auch Strukturänderungen und langfristige Wachstumsprozesse müssen berücksichtigt werden. Insbesondere für Netzwerksimulationen mit Millionen von Neuronen sind

die neu entwickelten Algorithmen interessant, denn sie ermöglichen es, das selbstorganisierte Wachstum der Netzwerke auf Supercomputern wie JUQUEEN nachzubilden.

Der Biologe und Informatiker Markus Butz-Ostendorf arbeitet in der Abteilung High Performance Computing in Neuroscience und im Simulation Laboratory Neuroscience am JSC.



www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2013/13-10-11synapsenbildung-gehirn.html

Schneller und sicherer dank DEEP-ER

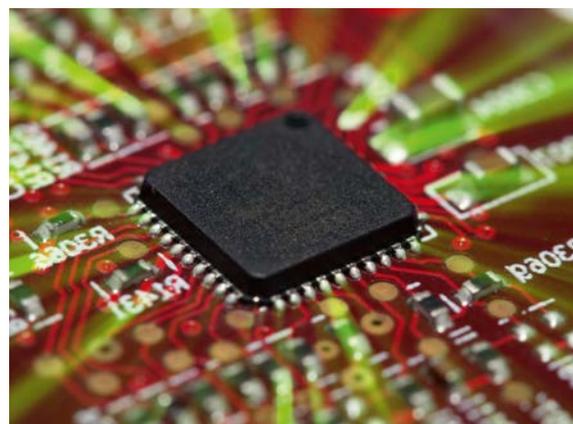
Prozessoren werden immer schneller. Das müssen sie auch, damit Exascale-Rechner wie geplant bis 2020 realisiert werden können. „Jedoch werden Anwendungen erst dann von der höheren Rechengeschwindigkeit profitieren, wenn Programme zügiger auf Daten zugreifen und sie speichern können“, erklärt Dr. Estela Suarez vom Jülich Supercomputing Centre (JSC). Sie ist die Projektleiterin des neuen EU-Projekts „DEEP – Extended Reach“ (DEEP-ER), das dieses Problem lösen will. Ein weiteres Ziel ist der Schutz vor Hardwareausfällen.



Auftakttreffen in Jülich: Beim Kickoff-Meeting legten die Projektpartner die nächsten Schritte fest.

Aufgrund der vielen Komponenten, aus denen die künftigen Supercomputer bestehen werden, steigt die Gefahr von Hardwarefehlern. Diese können zum Verlust von Zwischenergebnissen und Daten führen.

DEEP-ER, das mit dem Kickoff-Workshop Anfang Oktober in Jülich seine Arbeit aufgenommen hat, ergänzt und erweitert das EU-Projekt „Dynamical Exascale Entry Platform“ (DEEP). In DEEP entwickeln europäische Forscher eine neue Rechnerarchitektur für die kommende Exascale-Klasse. DEEP-ER wird das Konzept durch neue Speichertechnologien, Hardware- und Netzwerkkomponenten verbessern, beispielsweise mit einem effizienten Ein-/Ausgabesystem. Um den Nutzen der Erweiterungen zu überprüfen, entwickeln und bauen die Partner einen Rechnerprototypen. Darauf werden sieben beispielhafte Anwendungen aus der Medizin, der Geophysik, der Radioastronomie, der Quantenphysik sowie aus den Bereichen Supraleitung, Erdölexploration und Welt- raumwetter laufen.



DEEP-ER: neue Speichertechnologien, Hardware- und Netzwerkkomponenten im Visier

An DEEP-ER, das vom Forschungszentrum Jülich koordiniert wird, sind 14 Partner aus sieben EU-Ländern beteiligt. Die EU fördert das Projekt bis 2016 mit 6,4 Millionen Euro aus dem 7. Forschungsrahmenprogramm.

www.deep-er.eu

Weniger ist manchmal mehr

Je größer der Kräfteinsatz, desto schneller geht es. So lautete bislang eine Faustregel in der Mechanochemie, nach der Forscher chemische Reaktionen durch mechanische Kräfte in Gang setzen und beschleunigen. Diese simple Regel gilt aber nicht immer, wie Theoretische Chemiker der Ruhr-Universität Bochum mit Hilfe des Jülicher Supercomputers JUQUEEN herausgefunden haben. Aufwendige Simulationen für ein charakteristisches Molekül zeigten, dass die Regel nur bis zu einem Schwellenwert gilt.

Dazu hatten die Forscher den Prozess sehr genau nachgestellt, und zwar am Beispiel eines kleinen, in Wasser gelösten Moleküls mit einer zentralen Disulfidbrücke – das sind zwei aneinander gebundene Schwefel- atome. Je mehr mechanische Energie in das Molekül durch Zugspannung an seinen

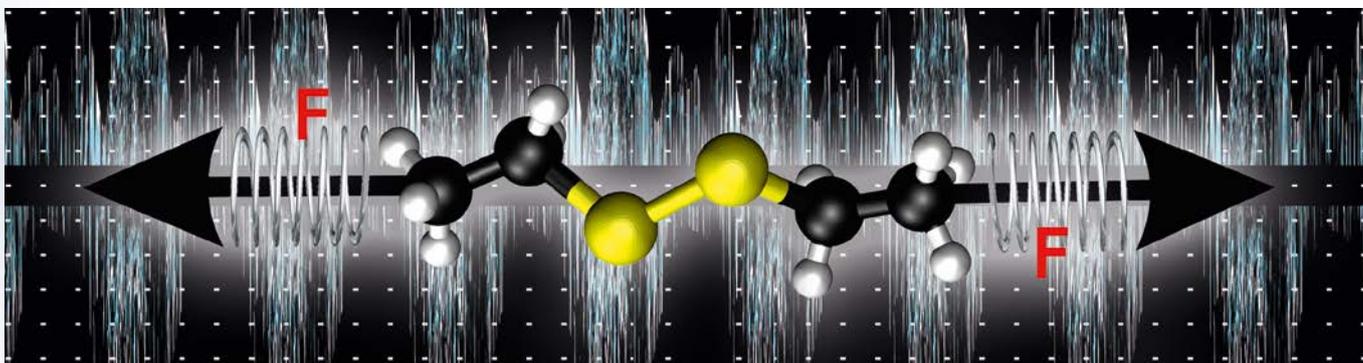
Enden gesteckt wurde, desto schneller wurde die chemische Reaktion aktiviert – aber nur bis zu einer mechanischen Kraft von circa 0,5 Nanonewton. Bei stärkeren Kräften wurde das Molekül so stark „verbogen“, dass das die Disulfidbrücke angreifende Molekül – ein Hydroxidion aus dem umgebenden Wasser – den Ort der Reaktion nicht mehr problemlos erreichen konnte. Dadurch wird die chemische Reaktion verlangsamt.

Diesen Mechanismus untersuchten die Forscher auch an komplexeren Modellen, unter anderem an einem großen Proteinfragment. „Er erklärt bislang unverstandene und kontrovers diskutierte Ergebnisse aus kraftspektroskopischen Messungen am Protein

Titin, das in Muskeln vorkommt“, sagt Prof. Dominik Marx, Projektleiter und Leiter des Bochumer Lehrstuhls für Theoretische Chemie. Diese Erkenntnis war nur möglich, weil die Forscher die komplexen Effekte des umgebenden Wassers miteinbezogen. Oftmals wird die Rolle solcher Lösungsmittel nur sehr vereinfacht berücksichtigt, um die benötigte Rechenleistung zu reduzieren.

Je mehr, desto schneller: Mechanische Kräfte beschleunigen chemische Reaktionen – aber nur bis zu einem bestimmten Schwellenwert.

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2013/13-06-17-nature.html





KURZNACHRICHTEN

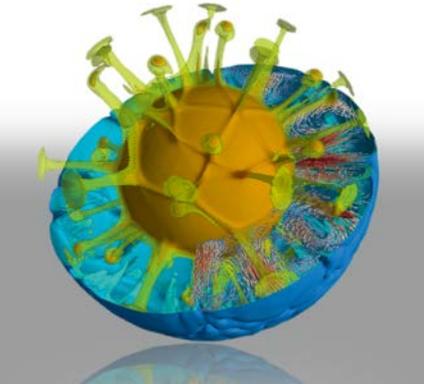
Plasmasimulation voranbringen

Die Helmholtz-Gemeinschaft hat das Forschungsprojekt „Scalable kinetic plasma simulation methods“ als „Helmholtz International Research Group“ ausgewählt. Das Vorhaben ist ein Gemeinschaftsprojekt von Prof. Paul Gibbon vom Jülich Supercomputing Centre und Prof. Giovanni Lapenta vom Centre for Mathematical Plasma Astrophysics der KU Leuven in Belgien. Darin erforschen die Wissenschaftler teilchenbasierte Plasmasimulationsmethoden, die mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern für Anwendungen in der Fusions- und Solarforschung eingesetzt werden. Die Helmholtz-Gemeinschaft stellt dafür drei Jahre lang bis zu 50.000 Euro jährlich zur Verfügung. Dieselbe Förder-summe steuert die KU Leuven bei.

Exklusiver Rechenzirkel

Das Jülich Supercomputing Centre hat den High-Q-Club für Programmentwickler gegründet. Mitglied kann derjenige werden, dem es mit seiner Anwendung gelingt, alle 458.752 Rechenkerne auf dem Jülicher Supercomputer JUQUEEN zu nutzen. Sechs Anwender haben es seit dem ersten „JUQUEEN Porting and Tuning Workshop“ im Februar 2013 geschafft, ihren Code über das gesamte 28-Rack-System skalieren zu lassen. Der Club soll noch mehr Programmentwickler anspornen, ihren Code für JUQUEEN zu optimieren und damit auch die Idee des Exascale-Computings zu unterstützen.

www.fz-juelich.de/ias/jsc/high-q-club



Einblicke ins Innere der Erde

Das John von Neumann-Institut für Computing hat das Forschungsvorhaben „First-principles modeling of minerals, melts and fluids at high pressures and high temperatures“ von Dr. Sandro Jahn als „John von Neumann Exzellenzprojekt 2013“ ausgezeichnet. Damit erhält der Forscher vom Deutschen GeoForschungsZentrum in Potsdam mehr Rechenzeit am Jülich Supercomputing Centre. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen Minerale, Silikat- und Metallschmelzen sowie wässrige Fluide, die als Grundbausteine unserer Erde gelten. Sie beeinflussen maßgeblich die komplexen geologischen Prozesse, die unter der Erdoberfläche ablaufen. Die rechenaufwendigen quantenmechanischen Simulationen auf den Jülicher Supercomputern ermöglichen eine realistische Modellierung der atomaren Wechselwirkungen. Die daraus abgeleiteten Erkenntnisse sind nicht nur für die Interpretation experimenteller Daten unerlässlich, sondern liefern auch theoretische Vorhersagen für die Verteilung chemischer Elemente oder für den Wärme- und Stofftransport im Inneren der Erde. Außerdem erhofft sich Sandro Jahn neue Einblicke in die Bildung des Erdkerns.

webarchiv.fz-juelich.de/nic/Projekte/jahn.html

Jetzt auch für Smartphone und Tablet!

Exascale Newsletter
www.exascale-news.de

„FORSCHEN in Jülich“ (als Tablet-Magazin)
www.fz-juelich.de/app



iOS (iPad)



Android

IMPRESSUM

EXASCALE NEWSLETTER des Forschungszentrums Jülich
Herausgeber: Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich
Konzeption und Redaktion: Dr. Anne Rother (v.i.S.d.P.), Tobias Schlöber, Christian Hohlfeld
Text: Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich; © (Sagittaria, S. 2/Hintergrund; PanOptica, S. 1 u./S. 3 o.; sudok1, S. 3 u.; C2photo, S. 4 o.) fotolia.com; Riken, S. 1 o./S. 2 o.
Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer und Partner GmbH **Auflage:** 700

TERMINE

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP
 25. – 27. November 2013
 am Jülich Supercomputing Centre

Der Trainingskurs führt in die parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern im technisch-wissenschaftlichen Umfeld ein. Message Passing Interface (MPI) ist das wichtigste Werkzeug zur Programmierung von Systemen mit verteiltem Speicher. OpenMP kommt auf Systemen mit gemeinsamem Speicher zum Einsatz.

Dozent: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS Stuttgart

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

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen
 28. – 29. November 2013
 am Jülich Supercomputing Centre

Der Kurs bietet neuen Nutzern eine Einführung in die Supercomputer am Forschungszentrum Jülich. Unter anderem lernen sie, bewilligte Rechnerressourcen optimal zu nutzen.

Dozenten: Firmenmitarbeiter von IBM, Intel und ParTec; Mitarbeiter des JSC

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

2. JUQUEEN Porting and Tuning Workshop
 3. – 5. Februar 2014
 am Jülich Supercomputing Centre

In dem Workshop lernen Nutzer des Supercomputers JUQUEEN, wie sie ihre Anwendung portieren, die Leistung analysieren und die Effizienz verbessern können.

www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/juqueentp14

NIC-Symposium 2014
 12. – 13. Februar 2014
 am Forschungszentrum Jülich

Das 7. NIC-Symposium stellt die Aktivitäten des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) und die Forschungsergebnisse der NIC-Projekte in den vergangenen zwei Jahren vor. Verschiedene Referenten berichten über die Arbeiten in den unterschiedlichen Wissenschaftsgebieten.

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

Eine Übersicht über die Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre finden Sie unter:

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