

Bei der Massenspektrometrie werden Moleküle in die Gasphase gebracht, um etwa Struktur und Zusammensetzung von Substanzen zu analysieren. Oligonukleotide, Bausteine der DNA, verändern dabei ihre Struktur. Das zeigen Simulationen auf dem Supercomputer JUQUEEN.

Überraschender Platzwechsel in DNA-Bausteinen

Belgische und spanische Forscher standen vor einem Rätsel. Sie hatten Bausteine der DNA, sogenannte Oligonukleotide, mittels Massenspektrometrie und klassischer Computersimulation untersucht. Überraschenderweise stimmten die Ergebnisse nicht überein. Erst Ab-initio-Molekulardynamik-Simulationen, die ihre Jülicher Partner um Prof. Paolo Carloni vom Bereich „Computational Biomedicine“ auf dem Supercomputer JUQUEEN durchführten, ergaben die Lösung. Solche Simulationen haben den Vorteil, dass nicht nur Struktur und Dynamik eines Systems untersucht werden können, sondern auch chemische Vorgänge auf atomarer Ebene. So stellte sich heraus, dass in der Gasphase Wasserstoffatome innerhalb von Bruchteilen einer Sekunde ihren Platz wechseln.

Diese Erkenntnis war eine Überraschung. Bei der Massenspektrometrie werden Moleküle aus wässriger Lösung in die Gasphase überführt. Bisherige Untersuchungen hatten stets gezeigt, dass sich die Messergebnisse aus der Gasphase sehr gut auf wässrige Bedingungen übertragen lassen – also auf die Bedingungen, wie sie in realen lebenden Systemen herrschen. „Resultate solcher Untersuchungen sollten künftig kritisch betrachtet und ähnliche Veränderungen wie bei

Oligonukleotiden nicht von vornherein ausgeschlossen werden“, so der Jülicher Wissenschaftler Dr. Jens Dreyer.

Die Arbeit von Carlonis Gruppe zeigt, dass Supercomputer wie JUQUEEN auch in der Molekularbiologie eine wachsende Rolle spielen. „Die Molekulardynamik ist dafür ein gutes Beispiel. Dank immer leistungsfähigerer Superrechner haben sich unsere Möglichkeiten mit diesem Verfahren stetig verbessert. Damit können wir auch die großen Herausforderungen in der Biomedizin angehen“, erklärt Paolo Carloni. So setzt die Ab-initio-Molekulardynamik auf quantenmechanische Berechnungen, die es ermöglichen, das komplexe Zusammenspiel zwischen Atomen und Molekülen noch genauer zu simulieren. Dadurch können Forscher noch bessere Strukturinformationen und physikalische Parameter aus den Simulationen ableiten – wie im Fall der Oligonukleotide. Um solche komplexen Vorgänge beschreiben zu können, erfordern diese Simulationen allerdings einen enormen Rechenaufwand: Bei dem Projekt kamen elf Millionen Prozessorstunden zusammen.

Angewandte Chemie, <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201406910>

IN DIESER AUSGABE

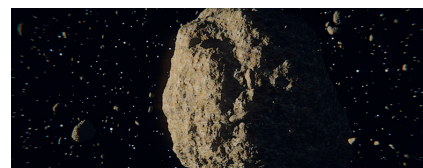
SEITE 2:

Der erste Nicht-Amerikaner an der Spitze der SC



SEITE 3:

Wie aus kleinen Klumpen Planeten werden



SEITE 4:

Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

Neues Zentrum bündelt Kompetenzen

IBM, NVIDIA und das Forschungszentrum Jülich haben ein neues Kompetenzzentrum gegründet: das POWER Acceleration and Design Center. Es unterstützt Wissenschaftler und Ingenieure, Simulationsrechnungen auf OpenPOWER-kompatiblen Systemen mit



Grafikprozessoren-Beschleunigern durchzuführen. „Das Kompetenzzentrum soll es ihnen ermöglichen, modernste Architekturen und Technologien für Superrechner zu nutzen, um die großen gesellschaftlichen Herausforderungen in den Bereichen Energie und Umwelt sowie Information und Gesundheit anzugehen“, erläutert Prof. Thomas Lippert, Direktor des Jülich Supercomputing Centre.

Die drei Partner wollen unter anderem gemeinsam die Programmierung, Portierung und Optimierung wissenschaftlicher Codes verbessern, neue Softwarelösungen entwickeln und den Aufbau einer neuen Super-

Grafikprozessoren wie NVIDIAs Tesla (Bild) beschleunigen Supercomputer-Anwendungen. NVIDIA gehört zu den Gründern des POWER Acceleration and Design Center.

computerarchitektur vorantreiben. Die Arbeiten erfolgen im Rahmen der 2013 gegründeten OpenPOWER Foundation, an der sich über 70 Unternehmen und Forschungseinrichtungen beteiligen. Die Foundation setzt sich für die Verwendung offener Technologien rund um die POWER-Architektur des IT-Konzerns IBM ein, um innovative Hard- und Softwarelösungen für Rechenzentren zu ermöglichen. Der Chiphersteller NVIDIA steuert dafür seine Grafikprozessoren bei.

Das Jülich Supercomputing Centre kooperiert bereits auf verschiedenen Ebenen mit den beiden Partnern: etwa mit IBM im Exascale Innovation Center, das neue Lösungen für die künftige Exascale-Klasse entwickelt, und mit NVIDIA im NVIDIA Application Lab.

Der erste Nicht-Amerikaner an der Spitze der SC

Erstmals wird 2017 ein Nicht-Amerikaner die bedeutendste Konferenz für High-Performance Computing (HPC), Networking, Storage and Analysis leiten, die Supercomputing Conference (SC) in den USA. Der Vorstand der Konferenzreihe wählte den Jülicher Wissenschaftler Bernd Mohr zum General Chair für die Organisation der SC17 in Denver. Für das Fachportal „HPCwire“ war die Wahl Anlass, ihn in die Liste der 2015 am meisten zu beachtenden Fachleute aufzunehmen.

Seit 1988 kommen bei der SC jedes Jahr Wissenschaftler und Anwender aus aller Welt zusammen, um sich über aktuelle Entwicklungen auszutauschen. Mittlerweile hat die Konferenz über 10.000 Teilnehmer. Veranstalter sind die Association for Computing Machinery (ACM) und das Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). Für das Amt des General Chair müssen Interessenten ein mehrstufiges Bewerbungsverfahren durchlaufen. Kollegen hatten Bernd Mohr ermutigt, seinen Hut in den Ring zu werfen. „Ich hatte mir kaum Chancen ausgerechnet. Als am Ende die Bestätigungsmail kam, dachte ich nur eins: Wahnsinn!“, so der Forscher von der Abteilung Anwendungssupport des Jülich Supercomputing Centre.

Warum er sich diese Mammutaufgabe überhaupt antut? „Ich organisiere gerne“, antwortet er. Für die SC hat er schon in der Vergangenheit Organisationsaufgaben übernommen, zuletzt als Mitglied des Steering Committee. Dass es ihm überhaupt nichts ausmacht auch vor Tausenden Leuten zu sprechen, glaubt man dem offenen und kommunikationsfreudigen Forscher sofort. Zudem gilt er als jemand, der gut Kontakte knüpfen kann. Insbesondere in die USA hat er seit einem mehrjährigen Forschungsaufenthalt Mitte der 1990er Jahre enge Verbindungen. „Damals habe ich viele Leute

kennengelernt, die in der Folgezeit unser Fachgebiet geprägt haben“, berichtet er.

Auf diese Netzwerke kann er nun aufbauen. Denn die Arbeiten für die SC17 haben längst begonnen. Eine der wichtigsten Anfangsaufgaben: Er muss sein Kernteam zusammenstellen, um das sich in den kommenden Monaten die rund 500 freiwilligen Helfer scharen werden. Auch über die inhaltliche Gestaltung macht er sich bereits Gedanken: „Eine noch stärkere internationale Ausrichtung und eine engere Verknüpfung von HPC mit Themen wie Big Data Analytics und Visualisierung könnten zwei Schwerpunkte werden.“

JSC-Experte Bernd Mohr leitet 2017 die bedeutendste Konferenz für High-Performance Computing (HPC), Networking, Storage and Analysis.

www.hpcwire.com/people-watch-2015/



Wie aus kleinen Klumpen Planeten werden

Ein Stern bleibt selten allein. In seiner Nähe bilden sich aus Materialüberresten, sozusagen als Nebeneffekt der Sternentstehung, Planeten. Wie das konkret abläuft, konnte die Forschung noch nicht vollständig enträtseln. Wissenschaftler vom Max-Planck-Institut für Astronomie wollen mit Simulationen am Jülicher Supercomputer JUQUEEN mehr über die sogenannten Planetesimale herausfinden, die Vorläufer und Bausteine von Planeten.

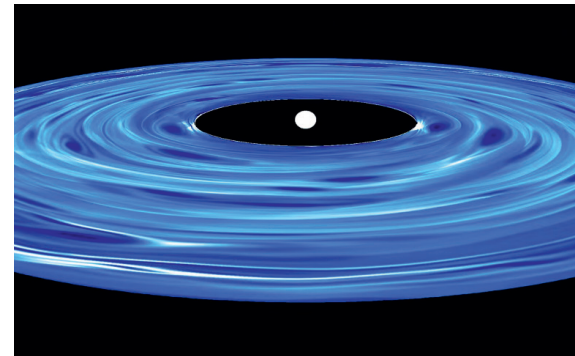
Wenn ein Stern wie etwa unsere Sonne entsteht, formt sich um ihn herum zunächst eine Scheibe aus Gas und Staub. In dieser Scheibe kollidiert und verklebt Materie im Laufe der Jahrmillionen – erst sind es Klumpen von wenigen Zentimetern, später mehrere Kilometer breite Brocken. Allerdings gibt es ein Problem. Die Forschung nennt es „Meterbarriere“. Experimente haben gezeigt, dass die Klumpen eigentlich nicht größer als ungefähr ein Tennisball werden dürften. Die Max-Planck-Forscher scheinen eine Antwort

gefunden zu haben, warum doch riesige Brocken entstehen. „Unsere Computersimulationen zeigen, dass es in der Scheibe Verwirbelungen gibt, in denen sich kleine Klumpen rasch zu Kilometer großen Planetesimalen vereinigen“, sagt Dr. Hubert Klahr, der das Projekt „Gravoturbulent Planetesimal Formation: A Key to Understand Planet Formation“ leitet.

Mit ihrem Computermodell wollen er und seine Kollegen herausfinden, wie eine realistische Massenverteilung von Planetesimalen unter Berücksichtigung wichtiger Faktoren wie Schwerkraft, Magnetfelder und Turbulenzen tatsächlich aussehen müsste. Dazu sollen rund 64 Millionen Partikel von JUQUEEN berechnet werden. 60 Millionen Rechenstunden stehen dafür zur Verfügung. Da sich die Prozesse nur langsam entwickeln und eine hohe Auflösung benötigen, ist diese Zeit allerdings schnell aufgebraucht.

„Gelingen die Simulationen wie erhofft, sind wir in der Lage vorherzusagen, wann

und wo Planetesimale in welcher Größe in den Scheiben entstehen. Das wäre ein wichtiger Schritt, um die Entstehung unseres Sonnensystems zu verstehen“, so Klahr.



In der Scheibe aus Gas und Staub (blau) um einen jungen Stern verklebt im Laufe der Zeit Materie zu Klumpen. Doch nur in den Verwirbelungen in der Scheibe (dunkelblaue Flächen) können aus den tennisballgroßen Stücken mehrere Kilometer große Planetesimale werden – die Vorläufer und Bausteine von Planeten.

From Dust to Planetesimals – High Resolution Simulations of Planet Formation Processes. InSiDE, Autumn 2014, Vol. 12, Nr. 2

Das Rätsel der Kontinentalverschiebung

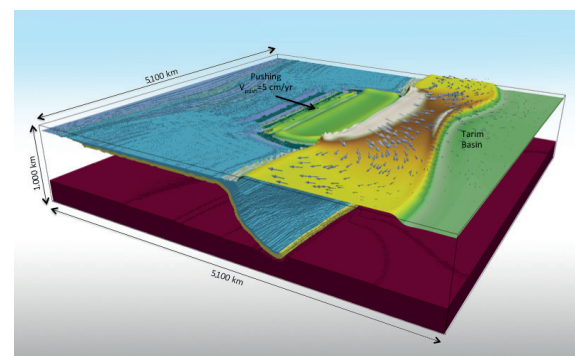
Unser Kontinente wandern. Genauer gesagt, sind es kontinentale und ozeanische Platten, die sich über Jahrmillionen langsam verschieben. Diese Kontinentalverschiebung sorgt dafür, dass etwa Landmassen getrennt werden oder Gebirge entstehen. Die physikalischen Prozesse, die dahinterstecken, geben der Forschung allerdings Rätsel auf. Der Geowissenschaftler Prof. Boris Kaus und sein Team von der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz wollen mithilfe von Simulationen am Jülicher Supercomputer JUQUEEN mehr über diese Prozesse herausfinden. Das für die Vergabe der Rechenzeit zuständige John von Neumann-Institut für Computing (NIC) zeichnete ihr Vorhaben „Numerische Modellierung von Deformationen in der Lithosphäre auf der Längenskala der Erdkruste in geologischen Zeiträumen“ als „NIC-Exzellenzprojekt 2014“ aus.

„Die aktuelle Position der Platten können wir jederzeit mittels geologischer Daten und geophysikalischer Messverfahren erfassen.

Dadurch können wir abschätzen, wie schnell und wohin die Platten wandern“, sagt Boris Kaus. Die Platten sind rund 100 bis 200 Kilometer dick und liegen auf weiteren Gesteinsschichten. Um auch die für Verschiebungen verantwortlichen Prozesse vollständig zu verstehen, verknüpfen die Mainzer die geologischen Informationen mit numerischen 3D-Deformationsmodellen. Dafür haben sie ein spezielles Softwarepaket entwickelt. „Das Lithosphere and Mantle Evolution Model (LaMEM) erlaubt uns, auch das komplexe Materialverhalten von Gesteinen zu berücksichtigen“, erklärt der Geowissenschaftler.

Dank der 15,4 Millionen Stunden Rechenzeit auf JUQUEEN können die Forscher Modelle mit einer Größe von 2.000 mal 2.000 mal 700 Kilometern berechnen – und das bei einer Auflösung von 2,5 Kilometern in jeder Richtung. Mit einem Standard-PC ist lediglich eine Auflösung von 20 Kilometern möglich. Die Forscher untersuchen beispielsweise die Kollision von Indien und Asien, die zur Bildung des Himalaya und der

Hochebene von Tibet geführt hat. Außerdem simulieren sie, wie sich die Platten unter den Alpen verschieben könnten, und beschäftigen sich mit der Entstehung von Salzstöcken.



Simulation der Kollision von Indien und Asien, bei der der Himalaya (weiße Fläche) und das tibetische Plateau (gelbe Fläche) entstanden.

www.john-von-neumann-institut.de/nic/exzellenz-2014

KURZNACHRICHTEN

Ausgezeichnete Optimierung

Beim internationalen CASP-Wettbewerb für computerbasierte Strukturbiochemie hat ein Team aus Jülich einen zweiten Platz belegt. Juniorprofessor Gunnar Schröder, Leiter der Jülicher Nachwuchsgruppe für computergestützte Strukturbiochemie, und sein Mitarbeiter Dennis Della Corte waren in der Kategorie für Strukturoptimierung gegen rund 50 andere Teams angetreten. Ihre Aufgabe war es, mithilfe von selbstentwickelten Computermodele fehlerhafte dreidimensionale Strukturen von Proteinmolekülen zu korrigieren. Die notwendige Rechenzeit stellte ihnen das Jülich Supercomputing Centre zur Verfügung. So konnten Schröder und Della Corte auf dem Supercomputer JUROPA simulieren, wie sich die Aminosäuresequenzen – die Grundbausteine der Proteine – falten. Solche computer-gestützte Verfahren gewinnen immer mehr an Bedeutung. Viele Proteine können mit experimentellen Möglichkeiten nicht oder nur mit großem Aufwand strukturell analysiert werden. Schröder und seine Gruppe haben mehrere Methoden zur Optimierung von Proteinmodellen entwickelt, die bereits bei verschiedenen Studien erfolgreich eingesetzt wurden.

www.predictioncenter.org/casp11

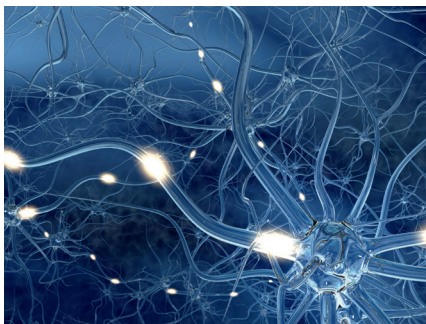
Internationales Forschungslabor

Das Jülich Supercomputing Centre ist neues Mitglied des Joint Laboratory on Extreme Scale Computing (JLESC). In der internationalen Vereinigung arbeiten Supercomputer-Zentren aus den USA, Frankreich, Spanien und Deutschland gemeinsam an Softwarelösungen für komplexe Höchstleistungsrechner. Das JLESC ist aus dem Joint Laboratory for Petascale Computing entstanden, das die amerikanische University of Illinois und das nationale französische Institut für Computerwissenschaften Inria 2009 gegründet hatten.

<http://publish.illinois.edu/jointlab-esc/>

Interaktiver Superrechner

Die Entwicklungsarbeiten für das Herzstück des Human Brain Project haben begonnen. Drei Firmenkonsortien installieren nun am Jülich Supercomputing Centre jeweils ein Pilotsystem für einen interaktiven Supercomputer. Mit dem System, das am Ende den Zuschlag erhält, soll im Laufe des von der EU geförderten Projekts das gesamte menschliche Gehirn auf der Ebene einzelner Nervenzellen simuliert werden. Bei den drei Konsortien handelt es sich um Dell/ParTec/Extoll, IBM/NVIDIA sowie die drei Tochterunternehmen von Cray aus Deutschland, Großbritannien und der Schweiz. Sie hatten sich im Rahmen einer sogenannten vorkommerziellen Auftragsvergabe (Pre-Commercial Procurement – PCP) durchgesetzt.



Jetzt auch für Smartphone und Tablet!

Exascale Newsletter
www.exascale-news.de

„effzett“ (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 Schlößer, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1 o.: ©Digital Genetics/fotolia.com; S. 1 m.: Walter Nadler/JSC; S. 1 u.: Andreas Schreiber/Max-Planck-Institut für Astronomie; S. 2 o.: NVIDIA; S. 2 u.: Forschungszentrum Jülich; S. 3 o.: Hubert Klahr/Max-Planck-Institut für Astronomie; 3 u.: Johannes-Gutenberg-Universität Mainz; S. 4: ©Sagittaria/fotolia.com
Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de
Druck: Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700

TERMINE

Paralleles I/O und Portable Datenformate; Kurs des PRACE Advanced Training Centre (PATC)

16.–18. März 2015
am Jülich Supercomputing Centre

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

Vektorisierung und portierbares Programmieren mit OpenCL

23.–24. März 2015
am Jülich Supercomputing Centre

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

Jülich School on Computational Trends in Solvation and Transport in Liquids

23.–27. März 2015
am Jülich Supercomputing Centre

www.fz-juelich.de/stl-2015

GPU-Programmierung mit CUDA; Kurs des PRACE Advanced Training Centre (PATC)

20.–22. April 2015
am Jülich Supercomputing Centre

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

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich

18.–19. Mai 2015
am Jülich Supercomputing Centre

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

Wissenschaftliche Workflows und Datenmanagement mit UNICORE

16. Juni 2015
am Jülich Supercomputing Centre

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

Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre:

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