



Die zwei neuen Pilotsysteme für einen interaktiven Superrechner, die am Jülich Supercomputing Centre getestet werden: JULIA vom Hersteller Cray (links) sowie JURON von IBM und NVIDIA (rechts). In der Mitte: das Storage System, auf das beide Pilotsysteme zugreifen

## Die Zukunft ist interaktiv

Pilotsysteme für künftigen Superrechner des Human Brain Project gestartet

Das Jülich Supercomputing Centre (JSC) hat zwei neue Pilotsysteme für einen interaktiven Superrechner in Betrieb genommen. Die Systeme – JULIA vom Hersteller Cray sowie JURON von IBM und NVIDIA – sind speziell für Anwendungen in den Neurowissenschaften ausgelegt. Die Installation und Testphase sind Teil eines speziellen Ausschreibungsverfahrens im Rahmen des europäischen Human Brain Project (HBP).

Jülicher Wissenschaftler und ihre Kollegen vom HBP testen nun, wie leistungsfähig beide Systeme sind und wie gut sie die gewünschten Funktionen erfüllen. Dazu nutzen sie unter anderem Anwendungen, die Jülicher Forscher entwickelt oder mitentwickelt haben, beispielsweise dreidimensionale Modelle des menschlichen Gehirns wie „BigBrain“ oder Software wie NEST oder Elephant.

### In die Abläufe eingreifen

Bislang arbeiten Superrechner Aufträge weitgehend autonom ab. Künftig soll es Wissenschaftlern möglich sein, in die Abläufe von Anwendungen einzugreifen und sie interaktiv zu steuern. Dadurch

müssen im Rechner noch einmal deutlich mehr Daten verarbeitet werden als die enormen Mengen, die ohnehin bei Simulationen des menschlichen Gehirns anfallen. Die besondere Herausforderung für den künftigen Rechner: Die zusätzlichen Daten müssen parallel zur Hauptanwendung in kurzer Zeit analysiert und auch visualisiert werden.

### Neueste Technologien

Die beiden Konkurrenten setzen mit ihren Konzepten auf schnelle Rechnertechnologien, die teilweise noch gar nicht auf dem Markt sind. So kommunizieren die Rechenknoten über Netzwerke der neuesten Generation. Zum Einsatz kommen auch neue, nichtflüchtige Speichertechnologien, die es in Zukunft erlauben werden, viel mehr Rechenspeicher zu realisieren. Sowohl JURON (abgeleitet aus Jülich und NeuRON) als auch JULIA (abgeleitet aus Jülich und GLIA, einem Zelltypen des Nervensystems) arbeiten außerdem mit modernsten Grafikprozessoren für die Visualisierung. Anfang 2017 sollen die Tests abgeschlossen sein.

► Die Pilotsysteme JULIA und JURON

## STATEMENT



**Prof. Katrin Amunts**  
Institutleiterin ► INM-1

Wir wollen neue 3D-Modelle des menschlichen Gehirns entwickeln, die die räumliche Auflösung noch einmal um den Faktor 20 verbessern. Dazu benötigen wir interaktive Supercomputer, um direkt in die Abläufe eingreifen und Zwischenergebnisse immer wieder neu visualisieren zu können.

# Vorhersage von Wirbelstürmen: Forscher testen Modelle

Im Schnitt fegen pro Jahr fünf tropische Wirbelstürme über den Atlantik. Immer wieder kommt es zu Todesopfern und schweren Sachschäden, wie etwa im Oktober 2016 durch den Hurrikan Matthew. Computermodelle helfen, Wirbelstürme und deren Verlauf vorherzusagen. Heidelberger Wissenschaftler vergleichen unterschiedlich komplexe Modelle.

„Über einen systematischen Vergleich möchten wir herausfinden, welche Eigenschaften die verschiedenen Modelle im Hinblick auf die Genauigkeit und die Rechenzeit haben“, sagt Dr. Martin Baumann, Mitarbeiter in dem Vorhaben des Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL) der Universität Heidelberg. „Natürlich gehen wir davon aus, dass das aufwendigste Modell der Natur am nächsten kommt. Aber solche Modelle benötigen mehr Rechenzeit und leistungsstärkere Supercomputer. Mitunter sind schon Ergebnisse von einfacheren Modellen für viele Fragestellungen ausreichend.“

Für diese Untersuchung nutzen die Forscher an Jülichs Supercomputer JUQUEEN drei Modelle, um ein mehrere Tausend Quadratkilometer großes Gebiet und zwei Wirbelstürme zu simulieren. Das einfachste Modell geht von stark idealisierten meteorologischen Bedingungen aus – etwa von einer horizontal konstanten Dichte der Luft, die in der Realität nicht vorkommt. Das aufwendigste Modell wäre sogar in der Lage, akustische Einflüsse von Windgeräuschen zu berücksichtigen. Das dritte Modell ist eine Zwischenstufe der beiden und berücksichtigt nur ausgewählte physikalische Effekte.

„Dank der Rechenzeit auf JUQUEEN können wir selbst das komplexeste Modell sehr fein auflösen. Die resultierende Lösung verwenden wir als Referenzergebnis“, so der Heidelberger Forscher. Daran werden die anderen Modelle gemessen: Ist der Verlauf der Wirbelstürme identisch, haben sie sich unterschiedlich verformt, wurde an denselben Punkten die gleiche Windgeschwindigkeit simuliert? Ein erstes Ergebnis: Das mittlere Modell erzeugte seine Vorhersage auf dem gleichen Rechencluster etwa zehn Mal schneller als das komplexe Modell. Der Unterschied in den vorhergesagten Positionen der Stürme betrug wenige Kilometer, wobei die Stürme rund 300 Kilometer in 10 Stunden zurücklegten. „Letztlich muss sich ein Anwender für das Modell entscheiden, das für seine Fragestellung am besten geeignet ist. Unsere Untersuchungen liefern konkrete Kriterien, die ihm dabei helfen“, sagt Baumann.



Interaktion zweier idealisierter tropischer Wirbelstürme

► Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL)

## Mobile Technologie als Blaupause

Eine Publikation von 34 Wissenschaftlern aus dem EU-Projekt Mont-Blanc zählt zu den Finalisten des „Best Paper Award“ bei der weltgrößten Supercomputer-Konferenz SC 16 in Salt Lake City, USA. Dr. Dirk Brömmel vom Jülich Supercomputing Centre (JSC), einer der Autoren, erklärt im Interview, worum es in dem Konferenzbeitrag geht.



Dirk Brömmel

### Herr Brömmel, was haben Sie untersucht?

In dem Beitrag beschreiben wir den aktuellen Prototypen des Mont-Blanc-Projekts. Wir vergleichen dabei unsere Rechnerarchitektur mit anderen Ansätzen – und zwar im Hinblick auf den Energieverbrauch und die Rechenleistung.

### Was unterscheidet Ihren Prototypen von anderen Rechnerarchitekturen?

Der Prototyp, den Partner aus Wissenschaft und Wirtschaft gemeinsam entwickelt haben, setzt auf mobile Technologien in Form von vielen hochintegrierten Prozessoren, um damit etwa den Energieverbrauch von künftigen Supercomputern und deren Kosten zu reduzieren. Solche sparsamen Prozessoren werden heute in Smartphones, aber auch in Waschmaschinen und Autos eingesetzt.

### Und wie schneidet der Prototyp ab?

Prinzipiell funktioniert unser Ansatz gut. Das Verhältnis von Leistung pro Energie war bei unserem Prototypen wie erhofft besser als bei dem Vergleichssystem – um wie viel besser, das hing vom jeweiligen Programmcode ab. Aber wir haben auch gesehen, dass wir noch an der Skalierbarkeit arbeiten müssen.

### Welchen Anteil hat das JSC?

In dem EU-Projekt unterstützen wir die Performanceanalyse, etwa indem wir die dafür nötigen Werkzeuge entwickeln. Außerdem entwickeln, optimieren und evaluieren wir wissenschaftliche Anwendungen. Für den Vergleich im Konferenzbeitrag haben wir beispielsweise Anwendungen auf den Prototypen portiert und optimiert, etwa zur Physik der weichen Materie oder zur Proteinfaltung.

### Was bedeutet die Nominierung für Sie?

Diese Anerkennung freut uns natürlich. Es gilt schon als Auszeichnung, dass ein Beitrag überhaupt für diesen Preis berücksichtigt wird. Dank der Nominierung haben wir die Gelegenheit, unsere Ergebnisse in einer besonderen Session der SC 16 zu präsentieren.

Herr Brömmel, vielen  
Dank für das Gespräch!

► Der Konferenzbeitrag  
► EU-Projekt Mont-Blanc

# Komplexer als gedacht

Schwefelbrücken sind unverzichtbar. Sie stabilisieren etwa die Struktur von Proteinen oder machen Gummi härter. Die Bindung von zwei Schwefelatomen mithilfe mechanischer Kräfte in basischer Lösung zu spalten ist jedoch komplexer als bislang gedacht. Das haben Forscher um Prof. Dominik Marx von der Ruhr-Universität Bochum durch Simulationen am Jülicher Supercomputer JUQUEEN herausgefunden.

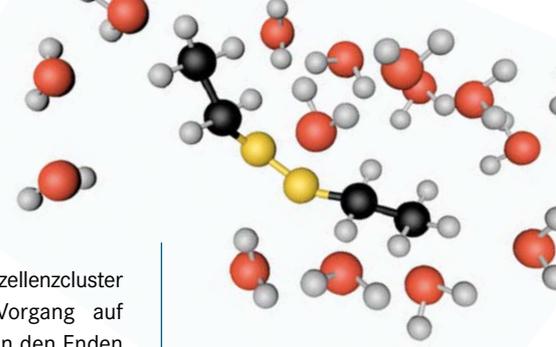
Manchmal ist es wichtig, dass sich Bindungen von zwei Schwefelatomen wieder lösen – etwa wenn Schwefelbrücken biologische Prozesse schalten oder Gummi recycelt werden soll. Die Bochumer Forscher untersuchten, was passiert, wenn man an einer Schwefelbrücke in alkalischer wässriger Lösung an beiden Enden mit konstanter externer Kraft zieht. „Solche mechanochemischen Prozesse treten tatsächlich bei kleineren Kräften in Zellen auf oder werden gezielt beim Gummirecycling eingesetzt“, erklärt Dominik Marx.

## Die Kraft entscheidet

Die Wissenschaftler vom Bochumer Exzellenzcluster „Resolv“ simulierten den gesamten Vorgang auf JUQUEEN. Das Ergebnis: Wurde zu fest an den Enden gezogen, riss nicht die Schwefelbrücke, sondern die Bindung zwischen einem Schwefelatom und einem benachbarten Kohlenstoffatom. Dafür war aber nicht der übliche chemische Prozess der alkalischen Hydrolyse verantwortlich, sondern die physikalische Kraft, die den Reaktionsverlauf drastisch verändert. „Das war bislang nicht bekannt. Diese Erkenntnis macht die korrekte Interpretation von experimentellen Daten viel komplexer als bisher gedacht“, sagt Marx.

Die Entdeckung war nur möglich, weil die Forscher das Wasser ebenso wie alle anderen Moleküle quantenmechanisch berechneten und so die Reaktion in wässriger Lösung korrekt simulieren konnten. Üblicherweise nutzen Theoretiker Methoden, die die Effekte des umgebenden Wassers drastisch vereinfachen, um die benötigte Rechenleistung zu reduzieren.

► Exzellenzcluster Resolv



*Schwefelbrücken, eine Bindung zwischen zwei Schwefelatomen (gelbe Kugeln), verknüpfen beispielsweise Aminosäureketten und stabilisieren so die Struktur von Proteinen. Bei einem Bindungsbruch durch Kraftanwendung reißt nicht die Schwefelbrücke, sondern die Bindung zwischen einem Schwefelatom und einem Kohlenstoffatom (schwarze Kugel).*

► Originalveröffentlichung: Nature Chemistry (2016), DOI: 10.1038/nchem.2632

# Gezielt schichten

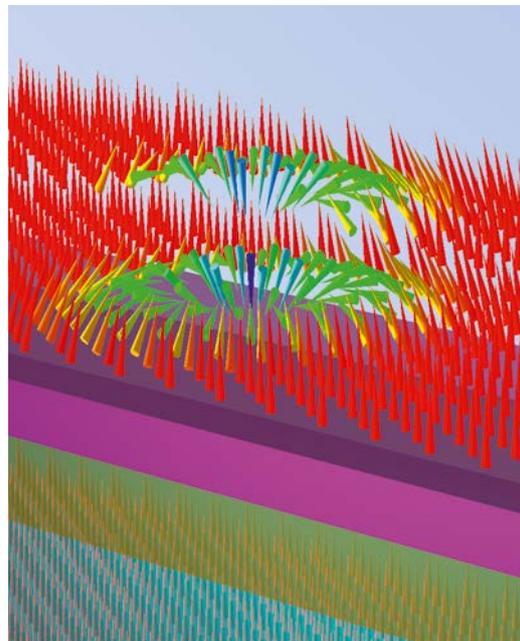
Magnetische Wirbel – sogenannte Skyrmionen – gelten als vielversprechende Kandidaten, um Daten auf engstem Raum energiesparend zu speichern und zu verarbeiten. Bis vor kurzem waren jedoch nur Materialien bekannt, bei denen die Wirbel bei sehr tiefen Temperaturen auftreten. Kieler und Jülicher Wissenschaftler haben mithilfe Jülicher Supercomputer einen Ansatz entwickelt, Skyrmionen auch bei Raumtemperatur zu ermöglichen.

Skyrmionen wurden erstmals 2009 in exotischen Kristallen bei Temperaturen nahe am absoluten Nullpunkt, bei minus 245 Grad Celsius, beobachtet. Die stabilen Wirbel sind nur wenige Nanometer groß und lassen sich durch elektrische Ströme effizient bewegen. Inzwischen wurden die einzigartigen magnetischen Strukturen auch an metallischen Grenzflächen gefunden, die etwa in heutigen magnetischen Sensoren oder Leseköpfen von Festplatten zum Einsatz kommen.

Damit sich Skyrmionen als Speichermedium nutzen lassen, müssen drei Bedingungen erfüllt sein: Die Grenzflächen sollten sich auf großer Skala fertigen lassen, sie müssen genug magnetisches Material besitzen und die magnetischen Wirbel müssen auch bei Raumtemperatur auftreten. Der Ansatz der Wissenschaftler der Universität Kiel und des Forschungszentrums Jülich: Sie schichten unterschiedliche, nur wenige Atomlagen dicke Metalle übereinander. „Wir konnten zeigen, dass auf diese Weise Skyrmionen nahe Raumtemperatur entstehen können und sich die magnetischen Eigenschaften

der Grenzflächen gezielt einstellen lassen“, so der Jülicher Physiker Dr. Gustav Bihlmayer.

Die Ergebnisse der quantenmechanischen Rechnungen auf verschiedenen Supercomputern müssen nun in der Praxis erprobt werden. Im EU-Projekt MAGicSky arbeiten die Kieler und Jülicher Forscher gemeinsam mit Kollegen aus mehreren Ländern an Prototypen magnetischer Datenspeicher. Bis zu ersten Speicheranwendungen ist es aus Sicht der Wissenschaftler jedoch noch ein langer Weg.



► Originalveröffentlichung: Nature Communications (2016), DOI: 10.1038/ncomms11779

► Projekt „Magnetic Skyrmions for Future Nanospintronic Devices“ (MAGicSky)

*Skyrmionen in einer metallischen Schichtstruktur: Im Zentrum dieser winzigen magnetischen Wirbel richten sich die „atomaren Stabmagnete“ der Eisenatome (blaue Pfeile) genau andersherum aus als die in den Bereichen ohne Wirbel (rote Pfeile).*

## KURZNACHRICHTEN

### Stabile Injektion

Das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) hat ein Forschungsvorhaben zu plasmabasierten Beschleunigern von Dr. Alberto Martinez de la Ossa als „NIC-Exzellenzprojekt 2016“ ausgezeichnet. Bei solchen Beschleunigern ist die stabile Injektion von Elektronenpaketen in Plasmawellen eine der größten Herausforderungen. Der Wissenschaftler vom Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY untersucht sie mit sogenannten Particle-in-Cell (PIC)-Simulationen.

► [mehr](#)

### Bessere Analysen

Die Energiewende stellt die Energieversorgung in Deutschland vor neue Herausforderungen. Das gilt nicht nur für die Erzeugung oder Speicherung, auch Methoden und Computermodelle zur Analyse von Energiesystemen werden immer komplexer. Im Projekt BEAM-ME entwickelt das Jülich Supercomputing Centre mit fünf weiteren Partnern neue Algorithmen und Strategien, um die Energiesystemanalyse mithilfe des Höchstleistungsrechnens zu verbessern.

► [mehr](#)



### Bundespräsident zu Gast

Im September besuchte Bundespräsident Joachim Gauck (r.) das Forschungszentrum Jülich. Bei seinem zweistündigen Aufenthalt informierte er sich über Fortschritte in der Hirnforschung sowie im Supercomputing. Prof. Katrin Amunts vom Institut für Neurowissenschaften und Medizin stellte dem Staatsoberhaupt das Jülicher Hirnmodell „BigBrain“ vor, das bisher genaueste Modell eines menschlichen Gehirns.

► [mehr](#)

### Projekt ParaPhase gestartet

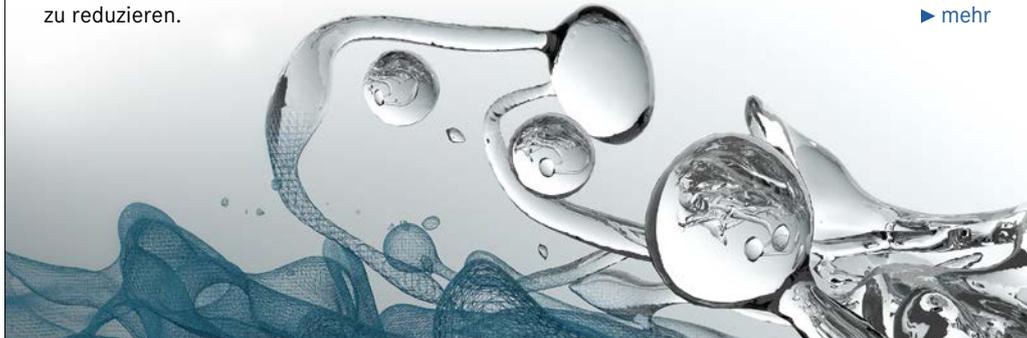
Das Jülich Supercomputing Centre entwickelt im BMBF-Projekt ParaPhase gemeinsam mit fünf Partnern neue Methoden und Software für die effiziente und großskalige Berechnung von Phasenfeldproblemen. Phasenfeldmodelle spielen eine wichtige Rolle bei zahlreichen physikalischen und technischen Prozessen, etwa bei Rissen und Schäden in Festkörpern oder bei der Züchtung von Kristallen.

► [mehr](#)

### Tanz der Tropfen

Hochdruck-Einspritzanlagen sorgen dafür, dass eine optimale Kraftstoffmenge zum richtigen Zeitpunkt in Dieselmotoren gelangt. Dabei entstehen komplexe Strömungsprozesse, bei denen sich bizarr anmutende Tröpfchen bilden. Forscher der RWTH Aachen simulieren die Strömungen an Jülicher Supercomputern, um die Leistung der Motoren zu verbessern sowie Schadstoffemissionen zu reduzieren.

► [mehr](#)



### Auch für Smartphone und Tablet!

- [Exascale-Newsletter](#)
- [effzett – das crossmediale Magazin](#)
- [Daten und Fakten](#)



### IMPRESSUM

**EXASCALE-NEWSLETTER** des Forschungszentrums Jülich **Herausgeber:** Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich **Konzeption und Redaktion:** Dr. Anne Rother (v.i.S.d.P.), Erhard Zeiss, Dr. Regine Panknin, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich; Titel Hintergrund: ©adimas/Fotolia.com; S. 2 Hintergrund: www.nasa.gov; S. 2 unten: Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL), Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg; S. 3 unten: Bertrand Dupé, CAU; S. 4 unten: Mathis Bode, Institut für Technische Verbrennung, RWTH Aachen **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700

## TERMINE

► **Einführung in die Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich**  
24.-25.11.2016

am Jülich Supercomputing Centre

Dozenten: Firmenmitarbeiter von Intel und ParTec, Mitarbeiter des JSC

► **Fortgeschrittene Parallelprogrammierung mit MPI und OpenMP**

28.-30.11.2016

am Jülich Supercomputing Centre

Dozenten: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS Stuttgart; Dr. Markus Geimer, JSC

► **Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP**

31.1. – 3.2.2017

am Jülich Supercomputing Centre

Dozent: Benedikt Steinbusch, JSC

► **Paralleles I/O und portable Datenformate**

(Kurs der PRACE Advanced Training Centres PATC)

13.-15.03.2017

am Jülich Supercomputing Centre

Dozenten: Sebastian Lührs, Dr. Michael Stephan, Benedikt Steinbusch, Dr. Kay Thust, JSC

► **Vectorisation and portable programming using OpenCL**

16.-17.03.2017

am Jülich Supercomputing Centre

Dozenten: Andreas Beckmann, Willi Homberg, Ilya Zhukov, JSC; Prof. Dr. Wolfram Schenck, FH Bielefeld

► **Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre**