

Ein neues Kronjuwel

Modularer Superrechner JUWELS folgt auf Rechenkönigin JUQUEEN

Am Jülich Supercomputing Centre (JSC) geht in diesen Tagen ein neuer Höchstleistungsrechner an den Start. JUWELS ersetzt den Jülicher Supercomputer JUQUEEN, einst schnellster Superrechner Europas. Das neue System kann bis zu 12 Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde durchführen, das entspricht 12 Petaflops. Eine für 2020 geplante Erweiterung wird die Rechenleistung noch einmal vervielfältigen.

Der „Jülich Wizard for European Leadership Science“ zählt zu einer neuen Generation von modularen Supercomputern, wie der im Herbst letzten Jahres aufgestockte Jülicher Rechner JURECA. „JUWELS ist kein Rechner von der Stange. Wir haben uns bewusst für eine Maschine entschieden, die wir selbst mit entwickeln. Das Modulare Supercomputing ist für uns der Schlüssel zu einer bezahlbaren Technologie, mit der sich dann auch smarte europäische Exascale-Systeme der nächsten Generation verwirklichen lassen“, erklärt Prof. Thomas Lippert, Direktor des JSC.

Das am JSC erdachte modulare Konzept sieht einen Superrechner aus mehreren spezialisierten Bausteinen vor. Das jetzt von der europäischen Firma

Atos gemeinsam mit den Softwarespezialisten der deutschen Firma ParTec gelieferte Cluster-Modul besticht durch seine Vielseitigkeit und einfache Nutzbarkeit. Innerhalb von zwei Jahren soll ein zweites Booster-Modul für massiv parallele Anwendungen hinzukommen, die sich gut mit einer großen Zahl von relativ langsamen, dafür aber extrem energieeffizienten Rechenkernen bearbeiten lassen.

Eine Besonderheit des Cluster-Moduls ist seine neuartige Warmwasserkühlung, die es erlaubt, den Großteil der Abwärme ohne zusätzliche Kälteerzeuger direkt mit der Außenluft zu kühlen und dadurch Energie zu sparen.

Der neue Rechner ist bei europäischen Forschern schon jetzt hochbegehrt. 87 Projekte wurden bereits vergeben. Die nächsten Monate sind komplett ausgebucht. „Das System wird unter anderem für Simulationen in der Quantenphysik oder den Neuro- und Materialwissenschaften genutzt. Für Wissenschaftler im Bereich der Erdsystemmodellierung (ESM), etwa der Klimaforschung, ist zudem eine Erweiterung enthalten“, erklärt Dr. Dorian Krause vom JSC. Andere Anwendungen stammen aus den Ingenieurwissenschaften, den Lebenswissenschaften, Astronomie oder Chemie.



Prof. Andreas Wahner
Institutleiter am Forschungszentrum Jülich (IEK-8)

JUWELS ermöglicht es, komplexe chemische Reaktionen der Spuren- und Schadstoffe im asiatischen Monsun in bisher unerreichter Auflösung für mehrere Phasenzustände zu simulieren. Im FRONTAIR-Projekt erforschen wir so das Zusammenwirken von Wetter und extrem belasteter Luft für Klimamodelle der nächsten Generation.

Klimafaktor Vulkan

Lange gingen Forscher davon aus, dass praktisch nur die Vulkane in den Tropen das Klima global beeinflussen. Doch das ist so nicht richtig. Auch Eruptionen, die weiter nördlich oder südlich stattfinden, können sich auf die gesamte Erdatmosphäre auswirken. Entscheidend ist, in welcher Jahreszeit sich ein Ausbruch ereignet, wie Wissenschaftler mithilfe von Computersimulationen nachgewiesen haben.

ORIGINALPUBLIKATION

Wu, X., Griessbach, S., Hoffmann, L.: Equatorward dispersion of a high-latitude volcanic plume and its relation to the Asian summer monsoon: a case study of the Sarychev eruption in 2009, Atmos. Chem. Phys. (2017), DOI: 0.5194/acp-17-13439-2017

VIDEO

Vulkane als Klimafaktor
(Länge 1:28 min)

➤ <https://www.youtube.com/watch?v=Sob45iViBQ>

Vulkanausbrüche sind ein wichtiger Klimafaktor. Die nach Ausbrüchen entstehenden Sulfat-Aerosole reflektieren einen Teil der einfallenden Sonnenstrahlung und tragen so dazu bei, die Erderwärmung zu verlangsamen. In den unteren Luftschichten ist ihre Lebensdauer recht kurz. Wenn sie jedoch in die Stratosphäre gelangen, können sie dort Monate bis Jahre unbeschadet überstehen, was die darunter liegende Troposphäre abkühlen lässt.

Bislang nahm man an, dass sich nur große vulkanische Ereignisse und moderate Ausbrüche in den Tropen global auf das Klima auswirken können. Ein Grund dafür sind die stratosphärischen Zirkulationsmuster, wonach die Luft am Äquator aufsteigt, in hohe Breiten strömt und über den Polen wieder absinkt. Aerosolpartikel aus Vulkanausbrüchen in

mittleren und hohen Breiten befinden sich bereits im absteigenden Ast der Zirkulation, ihr Einfluss sollte daher eigentlich begrenzt sein.

„Das ist aber nicht immer so“, erklärt Dr. Xue Wu von der Chinesischen Akademie der Wissenschaften. Seit zwei Jahren arbeitet sie als Gastwissenschaftlerin am Jülich Supercomputing Centre (JSC). Gemeinsam mit den Experten des SimLab Climate Science am JSC hat sie herausgefunden, dass beim Ausbruch des nördlich gelegenen Sarychev-Vulkans im Juni 2009 große Mengen an Aerosolteilchen bis in die tropische Stratosphäre gelangten. Von dort breiteten sie sich weiter über den gesamten Erdball aus.

Verantwortlich für den unerwartet hohen Aufstieg der Aerosole ist der Asiatische Monsun, der nur im Sommer auftritt und die Aerosolteilchen bis in die tropische Stratosphäre transportierte. Im Winter wären sie dagegen in den unteren Atmosphärenschichten verblieben und schon nach kurzer Zeit aus der Atmosphäre gewaschen worden. Bezieht man die Aerosole aus dem Sarychev-Ausbruch in Berechnungen mit ein, so lässt sich damit der Anstieg von 15.000 bis 20.000 Tonnen Sulfat-Aerosol pro Jahr in der tropischen Stratosphäre erklären, der in den letzten Jahren beobachtet worden war.

48 Qubits simuliert



Prof. Kristel Michielsens

Wenn in der Zukunft die ersten Quantencomputer an den Start gehen, müssen Software-Entwickler und Ingenieure nicht bei Null anfangen. Mit Hilfe der numerischen Simulation ist es bereits heute möglich, das Verhalten von Quantenrechnern detailgetreu auf herkömmlichen Computern nachzustellen. Der Rechenaufwand ist allerdings enorm. Mit jedem simulierten Quantenbit – kurz: Qubit – verdoppelt sich der Bedarf an Speicherplatz. Mehrere Jahre dauerte es bis jetzt gewöhnlich, um auf Superrechnern die Zahl der maximal simulierten Qubits um eins zu erhöhen.

Prof. Kristel Michielsens vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) gelang es nun innerhalb weniger Monate gleich zweimal, die bestehende Bestmarke zu übertreffen. Gemeinsam mit Forschern der Universitäten im chinesischen Wuhan, im japanischen Tokio und im niederländischen Groningen hatte sie zunächst einen Quantencomputer mit 46 Qubits und danach einen ebensolchen Rechner mit 48 Qubits simuliert. Gerecht hatten sie unter anderem auf zwei der leistungsfähigsten Rechner der Welt, dem Sunway TaihuLight in China und dem K Supercomputer in Japan.

Für Kristel Michielsens sind es nicht die ersten Rekorde dieser Art. 2010 simulierte sie als Erste einen Quantencomputer mit 42 Qubits auf dem damaligen Jülicher Superrechner JUGENE. Ein Weltrekord, den sie 2012 mit der Simulation eines 43-Qubit-Systems auf dem Nachfolger von JUGENE, dem Superrechner JUQUEEN, noch übertraf. Ende 2017 hatte sie gemeinsam mit Partnern der Universitäten in Groningen, Tokio und Wuhan ein Quantensystem mit 45 Qubits simuliert und damit den erst im Frühjahr verbesserten Rekord eingestellt.

Die aktuellen Durchbrüche sind nicht allein auf die immense Rechenkraft zurückzuführen. Den Rekorde ging vielmehr eine Anpassung des Codes voraus. Die Forscher hatten ihre Software so optimiert, dass jeder Quantenzustand nur noch jeweils 2 statt 16 Bytes benötigt, ohne dass sich die Genauigkeit der Ergebnisse signifikant verringert. Von der Verbesserung werden auch andere Anwender profitieren. Durch die Vereinfachung reduziert sich der Speicherbedarf um den Faktor acht. Das ermöglicht es Nutzern nun, einen Quantencomputer mit 32 Qubits auf einem Notebook mit 16 Gigabyte Arbeitsspeicher zu simulieren.

Deep Learning für bessere Luft

Dr. Martin Schultz erforscht die Konzentration von Schadstoffen in der Atmosphäre. Der Datenspezialist vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) ist nach der Liste der „Highly Cited Researchers 2017“ einer der meistzitierten Geowissenschaftler auf der Welt. Für sein jüngstes Projekt IntelliAQ hat er einen ERC Advanced Grant über 2,5 Millionen Euro erhalten – die höchste wissenschaftliche Auszeichnung auf europäischer Ebene.

Herr Schultz, worum geht es in IntelliAQ?

In dem Projekt wollen wir mit Methoden des maschinellen Lernens Muster identifizieren, die verschiedene Wetterdaten und geografische Informationen mit Luftschadstoffwerten verknüpfen. Diese Verknüpfungen wollen wir nutzen, um räumliche und zeitliche Lücken in den Datensätzen zu schließen und Konzentrationen von Schadstoffen wie Ozon, Feinstaub und Stickoxiden vorherzusagen.

Was kann künstliche Intelligenz in diesem Fall Besonderes leisten?

Herkömmliche numerische Modelle weisen bei solchen Vorhersagen auch nach Jahrzehnten der Entwicklung immer noch gravierende Fehler auf. Diese sind auf ein

unvollständiges Verständnis der physikalischen und chemischen Prozesse und auf die geringe räumliche Auflösung zurückzuführen. Mit den tiefen neuronalen Netzen können wir stattdessen möglichst viele Informationen direkt aus den Messdaten ableiten. Wir ersetzen also ein Modell mit bekannten, aber unvollständigen Gleichungen durch ein System, welches prinzipiell über vollständige Informationen verfügt, dafür aber keine Aussagen über die Prozesse erlaubt.

Wie muss man sich so eine Luftqualitätsvorhersage vorstellen?

Unser Ziel ist es, zunächst einmal für alle Messstationen – und des Weiteren auch für Orte dazwischen – eine Vorhersage zu liefern, die dann von Städten für Maßnahmen zur Luftreinhaltung herangezogen werden kann. Weitere mögliche Anwendungen sind retrospektive Untersuchungen zu Änderungen der Luftqualität, um etwa gesundheitliche Risiken einzuschätzen. Und es gibt viele Initiativen, die mit preiswerten Kleinsensoren eine flächendeckende Überwachung der Luftqualität zumindest in Städten anstreben. Mit unserem System könnte man solche Daten später quasi eichen und dadurch nutzbar machen.

➔ [mehr erfahren](#)



Dr. Martin Schultz

Trend zu künstlicher Intelligenz

Computer unterhalten sich mit uns oder bringen sich selbst bei, den Weltmeister im Brettspiel Go zu schlagen. Ähnlich lernfähige Algorithmen geben Fotos den letzten Schliff oder erzeugen täuschend echt aussehende Ansichten, die es so in der Realität eigentlich gar nicht gibt. Keine Frage, künstliche Intelligenz (KI) ist im Alltag angekommen, ein Trend, der auch in der Wissenschaft zu beobachten ist.

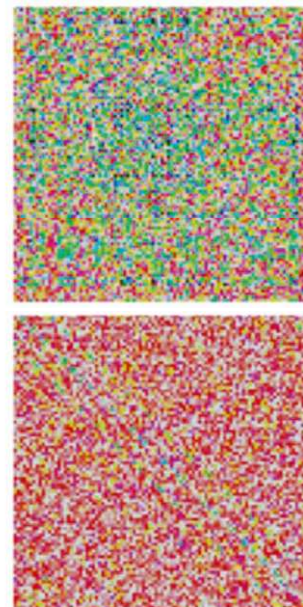
„KI ist ein Thema, das auch im Rahmen des Höchstleistungsrechnens immer mehr an Bedeutung gewinnt. Von der letzten Rechenzeitvergabe wissen wir, dass gut ein halbes Dutzend der Projekte KI-bezogene Verfahren anwenden möchte, die aus dem Bereich der kondensierten Materie, Strömungsmechanik, Meteorologie, Biologie und natürlich Informatik kommen“, erklärt Dr. Alexander Trautmann, der die Bereitstellung von Rechenzeit auf den Jülicher Superrechnern über das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) koordiniert.

Eines dieser Projekte ist das frisch gekürte NIC-Exzellenzprojekt „Simulation of quantum-mechanical many-fermion systems“. Die Forscher trainieren lernfähige neuronale Netze darauf, Muster von neuartigen Materialeigenschaften zu erkennen, für die es in der klassischen Physik keine Entspre-

chung gibt. Grundlage bilden Simulationen auf dem JURECA-Booster. Das Modul des Jülicher Superrechners wurde im letzten Herbst installiert und ist auf extreme Rechenleistung getrimmt.

„Eine Sache, die uns interessiert, ist der Mechanismus der Hochtemperatur-Supraleitung, der Physikern seit 30 Jahren Rätsel aufgibt“, erklärt Projektleiter Prof. Simon Trebst von der Universität zu Köln. Ein weiteres Phänomen sind Spinflüssigkeiten: Materialien, deren Elektronenspins bei ultrakalten Temperaturen ähnlich chaotisch wechselwirken wie die Moleküle in einer Flüssigkeit.

Beide Eigenschaften treten in Fermionen-Systemen auf. Fermionen besitzen im Gegensatz zu Bosonen keinen ganzzahligen, sondern nur einen halbzahligen Spin. „Bosonen lassen sich sehr gut simulieren, Hunderttausende Teilchen sind möglich. Fermionen sind wegen der anders gearteten Wellenfunktion dagegen deutlich aufwendiger zu berechnen“, erläutert der Physiker. Lange Zeit konnte man nur etwas mehr als zwanzig Elektronen simulieren, bis man vor ein paar Jahren eine neue Formulierung entdeckte, die es ermöglicht, den Rechenaufwand für eine bestimmte Klasse von Elektronen-Problemen erheblich zu reduzieren und nun einige Hundert Elektronen zu simulieren.



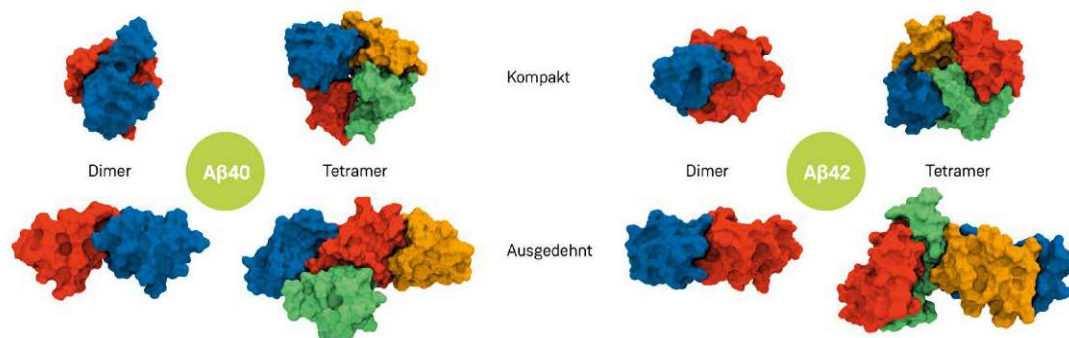
Isolator (oben) und Metall (unten): Künstliche Intelligenz kann unterschiedliche Phasen unterscheiden. Die Abbildungen wurden während der Simulation eines Viel-Fermionen-Systems „aufgenommen“.

Erforschung von Alzheimer

Ablagerungen von Amyloid-beta-Plaques im Gehirn sind typisch für die Alzheimerkrankheit. Ursächlich sind vermutlich weniger die mikroskopisch gut sichtbaren Ablagerungen selbst, als vielmehr schon deren Vorläuferaggregate, die Oligomere, die Nervenzellen auf verschiedene Arten schädigen können. Mittels Simulationen auf dem Jülicher Superrechner JURECA haben Forscherinnen und Forscher des Jülicher Institute of Complex Systems (ICS-6) nun die Rolle unter-

schiedlicher Formen von Oligomeren untersucht. Die treibenden Kräfte für die Ausbildung der alzheimerartigen Ablagerungen sind demnach längliche oder ausgedehnte Oligomere. Oftmals bestehen sie aus einer langkettigen Variante des Amyloid-beta-Peptids, das als besonders schädlich gilt.

Journal of the American Chemical Society (2018), DOI: 10.1021/jacs.7b10343



Kompakte Formen von Oligomeren (oben) sind relativ stabil, ausgedehnte Formen (unten) dagegen eher kurzlebig. Varianten aus langkettigen Peptid-Bausteinen (Aβ42, rechts unten) gelten als besonders schädlich.

Deutschlands beste MATSE

Svenja Schmidt ist spitze. Die ehemalige Auszubildende im JSC wurde für ihre Abschlussprüfung zur Mathematisch-technischen Softwareentwicklerin (MATSE) als beste deutsche Prüfungsteilnehmerin bei der Bestenehrung der IHK-Berufe in Berlin ausgezeichnet. Svenja Schmidt ist nach wie vor am Forschungszentrum Jülich beschäftigt und arbeitet im Institute for Advanced Simulation – Zivile Sicherheitsforschung (IAS-7), parallel zu ihrem Masterstudium an der FH Aachen.

➔ [mehr erfahren](#)

Europas nächstes Flaggschiff

Die Auswahl des nächsten Flaggschiff-Projekts der EU mit bis zu einer Milliarde Euro an Fördergeldern geht in die nächste Phase. Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich sind an vier Anträgen beteiligt, die sich erfolgreich für die zweite von insgesamt

drei Runden beworben haben: ExtremeEarth-PP, eine Vorhersage extremer Naturphänomene, BATTERY 2030+, ein Energieforschungsprojekt, SUNRISE, ein Vorhaben zu synthetischen Kraftstoffen und Rohstoffen, und DigiTwins, ein Projekt in der personalisierten Medizin.

ORPHEUS-Projekt abgeschlossen

Das vom JSC koordinierte ORPHEUS-Projekt beschäftigte sich drei Jahre lang mit Bränden in U-Bahn-Stationen. Anfang des Jahres endete es mit einem öffentlichen Treffen in Berlin, bei dem die Beteiligten ihre Ergebnisse präsentierten. Drei Beiträge hatten kurz zuvor auf Konferenzen Best Paper Awards erhalten und belegten die wissenschaftliche Relevanz des Projekts, das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert wurde.

➔ [mehr erfahren](#)



Jetzt online lesen!

- ➔ Exascale-Newsletter: exascale-news.de
- ➔ effzett – das Forschungsmagazin: effzett.fz-juelich.de
- ➔ Daten und Fakten aus Jülich: fakten.fz-juelich.de

IMPRESSUM

EXASCALE-Newsletter des Forschungszentrums Jülich

Herausgeber: Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich

Konzeption und Redaktion: Dr. Anne Rother (vi.S.d.P.), Tobias Schlößer

Grafik und Layout: SeitenPlan GmbH

Bildnachweis: S. 1 oben: Forschungszentrum Jülich/Ralf-Uwe Limbach/SeitenPlan; S. 1 unten: Forschungszentrum Jülich/Sascha Kreklau; S. 2-3 oben: Gennady Tepplitskiy/Shutterstock; S. 2 unten: Forschungszentrum Jülich/Ralf-Uwe Limbach; S. 3 oben: Forschungszentrum Jülich/Ralf-Uwe Limbach; S. 3 unten: Universität zu Köln/Simon Trebst; S. 4: Forschungszentrum Jülich/Birgit Strodel

Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de

Druck: Schloemer & Partner GmbH

Auflage: 550

TERMINE

Trainingskurs „Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP“

13.-17.8.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Referenten: Benedikt Steinbusch, Thomas Breuer, JSC

➔ [mehr erfahren](#)

Extreme Data Workshop

18.-19.9.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Organisatoren: Dr. Martin Schultz, Prof. Dirk Pleiter, Daniel Mallmann, JSC

➔ [mehr erfahren](#)

CECAM tutorial: Atomistic Monte Carlo Simulations of Biomolecular Systems

24.-28.9.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Referenten: Dr. Sandipan Mohanty, Dr. Olav Zimmermann, Dr. Jan Meinke, JSC

➔ [mehr erfahren](#)

Trainingskurs „Porting code from Matlab to Python“

8.-9.10.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Referenten: Sandra Diaz, Lekshmi Deepu, Dr. Alexander Peyser, Wouter Klijn, JSC

➔ [mehr erfahren](#)

Trainingskurs „Introduction to GPU programming using OpenACC“

29.-30.10.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Referenten: Dr. Andreas Herten, JSC Jiri Kraus, NVIDIA

➔ [mehr erfahren](#)

- ➔ Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre: fz-juelich.de/ias/jsc/events