



02-2018 I NEWSLETTER ZU SUPERCOMPUTING UND BIG DATA



Forschungsinitiative soll Europa bei Quantentechnologien ganz nach vorne bringen

Abhörsichere Datennetze, extrem präzise Messgeräte und der Computer der Zukunft – an die Quantentechnologie werden große Hoffnungen geknüpft. Die Europäische Kommission hat dazu gerade ein umfangreiches Flaggschiff-Programm im Umfang von einer Milliarde Euro für zehn Jahre aufgelegt. Zusätzlich wird die Bundesregierung in der laufenden Legislaturperiode rund 650 Millionen Euro für Quantentechnologien beisteuern.

Auch viele andere Länder investieren in den Bereich. Die USA fördern die Forschung jährlich mit rund 200 Millionen Dollar. Im chinesischen Hefei entsteht ein Quantenlabor für umgerechnet fast neun Milliarden Euro. Und Firmen wie IBM, Google und Microsoft liefern sich einen Wettstreit um den Bau des ersten Rechners nach den Regeln der Quantenphysik, der herkömmlichen Superrechnern bei speziellen Aufgaben haushoch überlegen ist.

Die europäische Initiative geht zurück auf das sogenannte Quanten-Manifest, das mehr als 3.600 Vertreter aus Wissenschaft und Industrie im Frühjahr 2016 unterzeichneten.

"In der EU laufen wir Gefahr, dass Erkenntnisse, die in Europa initiiert worden sind, außerhalb des Kontinents zu marktreifen Anwendungen weiterentwickelt werden", mahnt Prof. Tommaso Calarco vom Forschungszentrum Jülich (PGI-8), einer der geistigen Väter des Manifests.

Jülich spielt bei der Erforschung von Quantentechnologien eine Schlüsselrolle. Hier werden neue Theorien und Ideen entwickelt. Und die Ansätze können durch die umfangreiche Infrastruktur auch gleich experimentell überprüft werden. Im Flaggschiff-Teilprojekt OpenSuperQ, das die Universität des Saarlandes leitet, planen Forscher einen Quantencomputer mit 50 bis 100 supraleitenden Qubits, der in Jülich entwickelt und eingesetzt werden soll. Ziel ist es, ein zentrales europäisches Labor für Quantencomputer zu schaffen, das öffentlich zugänglich ist und der gesamten Forscher-Community offensteht.

Prof. Kristel Michielsen hofft, dass dieses geplante System der erste Schritt ist zu einem neuen Schwerpunkt am Jülich Supercomputing Centre (JSC): "Ich stelle mir einen Gerätepark vor, der verschiedene Typen von Quantencomputern mit unterschiedlichem technologischem Reifegrad unter einem Dach versammelt." Die Physikerin simuliert auf Höchstleistungsrechnern, wie sich ein idealer Quantencomputer nach den Gesetzen der Physik verhalten würde. Damit hilft sie, die Fehlerrate realer Quantencomputer abzuschätzen. Denn alle heutigen Ansätze sind noch experimentell, die Qubits für ernsthafte Rechnungen noch nicht stabil genug. Das Gute für die Forschung: Es bleibt noch reichlich zu tun.

★ Interview mit Prof. Tommaso Calarco



Prof. Tommaso Calarco Institutsleiter am Forschungszentrum Jülich (PGI-8)

Die Flaggschiff-Initiative umfasst Themen von großer gesellschaftlicher Relevanz. Neben der Konstruktion eines Quantencomputers denke ich da etwa an die Sicherung europäischer Netzwerke durch Quanten-Kryptographie oder die Entwicklung hochempfindlicher Sensoren für Navigation und medizinische Diagnostik.

Bewusstsein für Daten

Wie sich ein Supercomputer in der Praxis schlägt, hängt heute vorrangig davon ab, wie schnell sich Daten vom Speicher zum Prozessor bewegen lassen. Viele Programmiermodelle und Codes stammen jedoch noch aus einer Zeit, in der es fast nur darum ging, zu wie vielen Gleitkomma-Operationen pro Sekunde ein Superrechner imstande war. Ein neues Bewusstsein für Daten zu schaffen ist daher das Ziel des kürzlich gestarteten Maestro-Projekts, das das JSC koordiniert.

"Heute weiß ein System meist nicht, um was für Datenobjekte es sich handelt, die sich im Speicher befinden oder von einer Anwendung innerhalb des Systems kommuniziert werden. Auch Abhängigkeiten zu anderen Objekten sind häufig nicht zu ersehen. Gemeinsam mit europäischen Partnern wollen wir ein neues Konzept für die Definition von Datenobjekten erproben, das es ermöglicht, derartige Angaben über mehrere Software- und Hardware-Ebenen hinweg zu übertragen", erklärt Projektleiter Prof. Dirk Pleiter.

Die Arbeiten zielen auf eine Middleware ab, die zwischen Betriebssystem und Anwendungen vermittelt und Daten intelligent auf unterschiedliche Hardware- und Software-Ebenen verteilt. Die Entwicklung orientiert sich unter anderem an Anwendungen des Europäischen Zentrums für Mittelfristige Wettervorhersage (ECMWF), das mit der Verfeinerung seiner weltweit genutzten Prognosen an technische Grenzen kommt.

Ein transparentes, konsistentes Datenmodell wird zudem für neue Speicherkonzepte benötigt. Diese werden entwickelt, um Zugriffszeiten und Übertragungsraten für datenintensive Anwendungen zu verbessern. Einige Ansätze sind darauf ausgerichtet, getrennte Speicher-Ressourcen auf Rechen- und Speicherknoten zu einem komplexen Gesamtsystem zu verbinden. Weitere Architekturen setzen auf einen Mix verschiedener Speichertypen, der neben klassischen Arbeits- und Festplattenspeichern auch neuartige Solid State Disks und High Bandwidth Memory umfasst.

Diese neuen Architekturen stehen auch im Fokus eines weiteren Projekts mit Beteiligung des JSC, das der Speicherhersteller Seagate koordiniert. Im SAGE-Projekt hatten die Projektpartner einen Prototypen entwickelt, der unterschiedliche Speichertypen kombiniert. In SAGE2 sind nun weitere Lösungen für Arm-Prozessoren geplant, die heute in den allermeisten Smartphones verwendet werden. In der europäischen Prozessor-Initiative EPI, der das JSC ebenfalls angehört, verfolgen Experten die Entwicklung eines europäischen Supercomputer-Prozessors, der auf dieser Technologie basiert.

MAESTRO-PROJEKT

- · JSC (Koordination)
- ·CEA
- · Appentra
- · ETH Zürich
- ECMWF
- · Seagate
- · Cray

SAGE2-PROJEKT

- · Seagate (Koordination)
- · Atos-Bull
- · CEA
- United Kingdom Atomic Energy Authority
- ·KTH
- ·JSC
- · Universität Edinburgh
- Kitware
- · ARM
- **★** sagestorage.eu

EUROPÄISCHE PROZESSOR-INITIATIVE EPI

★ https://bit.ly/2DbSQox

Gerüstet für Big Data

Der Umgang mit großen Datenmengen ist eine der großen aktuellen Herausforderungen. Jedes Jahr steigt die Menge der produzierten Daten in der Wissenschaft weiter an. Um den stetig wachsenden Anforderungen gerecht zu werden, hat das JSC seine Speicher-Infrastruktur 2018 grundlegend erweitert. *★ mehr erfahren*



MAGNETBAND-ARCHIV IM GROSSFORMAT

Name/Typ: IBM TS4500 Tape Library

Speicherplatz: 170 Petabyte oder umgerechnet ca. 36 Millionen DVDs

Bandbreite/Geschwindigkeit: 6 Gigabyte oder ca. eine DVD pro Sekunde

Verwendung: Das Bandlaufwerk ergänzt bestehende Magnetband-Speicher für Backups und die Langzeitarchivierung von Daten.



SPEICHER-CLUSTER DER NEUEN GENERATION

Name/Typ: JUST (Jülich Storage Cluster)
Speicherplatz: ca. 50 Petabyte auf 7.516 Festplatten

Bandbreite/Geschwindigkeit: 500 Gigabyte oder ca. 100 DVDs pro Sekunde

Verwendung: JUST ist das zentrale Speichersystem für die Jülicher Superrechner, auf das unter anderem JUWELS und JURECA zugreifen.



CLOUD-SPEICHER FÜR GROSSE DATENSÄTZE

Name/Typ: Mehrzweck-Cloud-Speicher Speicherplatz: 40 Petabyte (in JUST integriert) Bandbreite/Geschwindigkeit: 20 Gigabyte oder ca. 4 DVDs pro Sekunde

a. 4 DVDs pro Sekunde

Verwendung: Der Mehrzweck-Cloud-Speicher ermöglicht es, große Datensätze über längere Zeit leicht zugänglich zu halten und sehr große Forschungsrohdatensätze für die Verarbeitung durch Supercomputer zu speichern.



Gegen Gedränge auf Bahnhöfen

Auf vielen Bahnhöfen in Deutschland wird es eng. Die Fahrgastzahlen nehmen beständig zu. Gerade zu Stoßzeiten oder nach Großveranstaltungen kommt es vielfach zu überfüllten Bahnsteigen, die dem Ansturm nicht mehr gewachsen sind. Im Projekt CroMa wollen Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich nun gemeinsam mit ihren Partnern neue Konzepte entwickeln, mit denen sich die Lage entspannen und die Effizienz von Bahnhöfen und U-Bahnstationen weiter erhöhen lässt.

Das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert das Projekt, das die Universität Wuppertal koordiniert, für drei Jahre mit insgesamt 2,1 Millionen Euro. Neben Verkehrsbetrieben, darunter die Deutsche Bahn, die Schweizer Bundesbahnen und die Kölner Verkehrs-Betriebe, sind auch Veranstaltungstechniker sowie Polizei und Ordnungsdienstleister an dem Projekt beteiligt. Sie sollen sicherstellen, dass sich die Ergebnisse später tatsächlich in die Praxis überführen lassen.

"Denkbare Maßnahmen sind etwa Markierungen oder Informationen über den Auslastungsgrad einzelner Wagen eines Zuges, wodurch sich die Reisenden am Bahnsteig schon frühzeitig günstiger verteilen können, um das Ein- und Aussteigen zu optimieren. Uns interessiert, welche Effekte Maßnahmen dieser Art haben und wie sie sich auf das Stresslevel der Fahrgäste auswirken", erklärt Dr. Maik Boltes aus dem Bereich Zivile Sicherheitsforschung des Jülicher Institute for Advanced Simulation (IAS-7).

Die Jülicher Forscher befassen sich in CroMa mit der Konzepterstellung und Durchführung von Experimenten, mit denen sich gezielt die Wirkung verschiedenartiger Methoden des Crowd-Managements untersuchen lassen. Die Daten werden unter anderem benötigt für die Anpassung von Computersimulationen, die dann für die Planung und Überprüfung von Bahnhöfen und großen Gebäuden herangezogen werden können.

Neben den Auswirkungen von physischen und baulichen Systemen wie Absperrgittern haben die Experten in CroMa auch psychologische Faktoren im Blick. So wollen sie etwa in Zusammenarbeit mit der Universität Bochum testen, wie unterschiedliche Formen der Informationsweitergabe und Ansprache das Verhalten der Reisenden beeinflussen.

Den Krisenfall simulieren

Jülicher Forscher wollen mithilfe von Computersimulationen dazu beitragen, die Abläufe bei einer großräumigen Evakuierung zu verbessern. Ein mögliches Szenario könnte etwa eine drohende nukleare Katastrophe sein oder auch ein Chemieunfall oder Hochwasser. In Ballungsräumen ist die Lage besonders kritisch. Im Falle einer Katastrophe wären die Straßen und Autobahnen nach kurzer Zeit dicht. Die meisten Menschen wären auf die Bahn angewiesen, um sich aus dem Gefahrengebiet in Sicherheit zu bringen.

Am Beispiel des Dortmunder Hauptbahnhofs wollen die Jülicher Wissenschaftler im Projekt KapaKrit nun tragfähige Daten gewinnen, die Ingenieure und Behörden anschließend für die weitere Planung nutzen können.

An dem Projekt, das im Sommer 2018 startete, sind auch Experten der Hochschule Bochum, das Ingenieurbüro bueffee und assoziierte Partner aus dem Bereich des Bahnbetriebs beteiligt. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert das Vorhaben mit insgesamt etwa 1,1 Mio. Euro über drei Jahre. Die Forscher wollen nun gemeinsam mit Verkehrsbetreibern und Sicherheitskräften untersuchen, wie viele Menschen im Notfall maximal über einen Großstadt-Bahnhof evakuiert werden können. Die Zahlen sind eine wichtige Voraussetzung für die Planung und sollen neue Anstöße geben, wie sich Technik und Organisation verbessern lassen.

"Wir können mit unserer Software JuPedSim mittlerweile ziemlich genau vorhersagen, wie schnell sich Menschen aus einem Raum evakuieren lassen. Aber der Fall, den wir jetzt betrachten, ist sehr komplex", erläutert Projektleiter Dr. Stefan Holl vom Forschungszentrum Jülich. "Die Leute müssen überhaupt erst einmal zum Bahnhof kommen. Dort müssen sie durch den Bahnhof zum richtigen Gleis geschleust werden. Und dann muss ein Zug bereitstehen, in den sie einsteigen können", erklärt der Experte vom Institute for Advanced Simulation (IAS-7).

Der Dortmunder Hauptbahnhof ist mit etwa 130.000 Fahrgästen pro Tag einer der größten Bahnhöfe Deutschlands. Bei einer Evakuierung müssten jedoch noch viel mehr Menschen in Sicherheit gebracht werden. Zu den 600.000 Einwohnern der Stadt kämen dann noch rund 5 Millionen aus der Metropole Ruhr im unmittelbaren Einzugsgebiet hinzu.

Startschuss für JUWELS



Von links nach rechts: Vorstandsvorsitzender Prof. NRW-Ministerpräsident Armin schungsministerin Anja Karliczek und JSC-Direktor Prof.

Bundesforschungsministerin Anja Karliczek und NRW-Ministerpräsident Armin Laschet nahmen im September gemeinsam mit dem Vorstand des Forschungszentrums offiziell den Jülicher Spitzenrechner JUWELS in Betrieb. Der Bund und das Land NRW engagieren sich bis zum Jahr 2025 mit mehr als 145 Millionen Euro für die Weiterentwicklung des Supercomputing in Jülich. Der erste Baustein des neuartigen modularen Supercomputer-Systems kommt auf eine theoretische Spitzenleistung von 12 Petaflops, was in etwa der Rechenpower von 60.000 modernen PCs entspricht. Für 2019 ist eine Erweiterung geplant, die die Rechenleistung von JUWELS noch einmal deutlich erhöhen wird. **★** mehr erfahren

Ozon in China

In China sind die Ozon-Werte in den letzten Jahren stark gestiegen. In den USA und Europa war dagegen ein allgemeiner Rückgang zu verzeichnen. Das zeigt eine neue Studie von chinesischen, amerikanischen und Jülicher Wissenschaftlern. "Nach unserem Wissen gibt es keine andere Region in der Welt, in der die Ozonbelastung so hoch und so häufig ist wie in China", erklärt Dr. Martin Schultz vom Jülich Supercomputing Centre. **★** mehr erfahren

Environ. Sci. Technol. Lett. (2018), DOI: 10.1021/acs.estlett.8b00366

Smarter Rechner

Experten des JSC haben gemeinsam mit dem Übertragungsnetzbetreiber TenneT TSO GmbH ein Computersystem für die Simulationen der Lastflüsse im Stromnetz entwickelt. Mit dem "smarten" System lassen sich die Berechnungen um das über 30-fache beschleunigen. Die Simulationen sollen dazu beitragen, das Netz an die Anforderungen durch die Energiewende anzupassen. In Norddeutschland wird momentan zu Spitzenzeiten oftmals mehr Windstrom produziert, als in den Süden und Westen des Landes transportiert werden kann. ★ mehr erfahren

PRACE-Vorsitz

Prof. Thomas Lippert, Leiter des JSC, wurde zum neuen Vorsitzenden des PRACE-Council gewählt. Als Berater des Gründungsvorsitzenden Prof. Achim Bachem war er schon früh an der Entwicklung des europäischen Supercomputing-Verbunds beteiligt. Lippert sieht eine aktuelle Aufgabe für PRACE darin, Exascale-Computing, wie es durch das EuroHPC Joint Undertaking entsteht, mit Wissenschaft und Industrie in Europa zusammenzubringen. ★ mehr erfahren

Wolfgang Marquardt, Laschet, Bundesfor-Thomas Lippert.

TERMINE

Trainingskurs "Software **Development in Science"**

19.-20.11.2018 am Jülich Supercomputing Centre Referenten: Guido Trensch, Wouter Klijn, JSC

Trainingskurs "Introduction to the usage and programming of supercomputer resources in Jülich"

22.-23.11.2018

am Jülich Supercomputing Centre

Referenten: Firmenmitarbeiter von Intel und ParTec, Mitarbeiter des JSC

Trainingskurs "Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP"

26.-28.11.2018

am Jülich Supercomputing Centre Referenten: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS; Mitarbeiter des JSC

Trainingskurs "Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP"

18.-22.3.2019

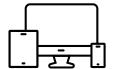
am Jülich Supercomputing Centre Referenten: Benedikt Steinbusch, Thomas Breuer, JSC

Trainingskurs "GPU Programming with CUDA"

1.-3.4.2019

am Jülich Supercomputing Centre Referenten: Dr. Jan Meinke, Jochen Kreutz, Dr. Andreas Herten, JSC; Jiri Kraus, NVIDIA

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



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 (v.i.S.d.P.), Tobias Schlößer

Grafik und Layout: SeitenPlan GmbH

Bildnachweis: S. 1: StarLine/Shutterstock (Montage: SeitenPlan); S. 1 unten: Helmholtz/Stefanie Herbst; S. 2: Forschungszentrum Jülich/ Ralf-Uwe Limbach; S. 3: serpetko/Shutterstock; S. 4: Forschungszentrum Jülich/Wilhelm-Peter Schneider

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

Druck: Schloemer & Partner GmbH

Auflage: 550