



*Experimente des Projekts ORPHEUS in der Berliner U-Bahn liefern Daten für Computersimulationen, mit denen sich die Rauchausbreitung vorhersagen lässt.*

## Sicher durch die Unterwelt

Wie Superrechner den Brandschutz in U-Bahnhöfen optimieren

Ein Brand in der U-Bahn-Station kann verheerende Folgen haben: Giftiger Rauch breitet sich in den Schächten aus und versperrt die Fluchtwege für Rettungskräfte und Fahrgäste. Im Projekt ORPHEUS haben sich Experten des Jülich Supercomputing Centre (JSC) mit Partnern aus Forschung und Industrie zusammengeschlossen, um mithilfe von Supercomputern die Sicherheit zu verbessern.

Ziel ist es, mittels Simulationen vorherzusagen, wie Rauchgase sich in den unterirdischen Komplexen ausbreiten, um so sichere Fluchtwege zu erschließen. Die Ergebnisse des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekts fließen zudem in neue Brandschutzkonzepte ein.

### Rechenaufwand vereinfachen

Rauchsimulationen für Areale dieser Größe sind nur mit Superrechnern zu bewältigen. Jülicher Wissenschaftler entwickeln ein adaptives Gittermodell, das den immensen Rechenaufwand reduziert. Interessante Stellen nahe der Brandentstehung oder Ausgänge werden sehr fein aufgelöst, abgelegene Bereiche nur grob erfasst. Über die Kopplung von

Simulationsprogrammen zur Brandausbreitung (FDS) und Fußgängerdynamik (JuPedSim) können die Forscher zudem ermitteln, wie Rauchgase sich auf Mobilität und Sichtweite auswirken und wie sie die Zeit für die Evakuierung beeinflussen.

Darüber hinaus sind Echtzeit-Simulationen der Rauchausbreitung geplant. Sie könnten die Rettungskräfte in Zukunft während des Einsatzes unterstützen. Experten des JSC optimieren die Codes, um die Anwendung durch Grafikprozessoren zu beschleunigen.

### Neue Daten gewinnen

Experimente im Berliner U-Bahnhof Osloer Straße liefern die Datenbasis zur Anpassung der Algorithmen. Unter Einsatz von Spurengasen und Propanbrennern erforschen die Projektpartner zusammen mit den Berliner Verkehrsbetrieben (BVG), wie sich Rauchgase in dem mehrstöckigen Bahnhof verteilen. Weitere Übungen rücken den Faktor Mensch in den Mittelpunkt. Dabei werden insbesondere Anforderungen von Menschen mit Beeinträchtigungen berücksichtigt. Die gewonnenen Erkenntnisse lassen sich auch auf oberirdische Einrichtungen übertragen.

► [Das ORPHEUS-Projekt](#)

## STATEMENT



Prof. Kristel Michiels (JSC) leitet die Gruppe ► [„Quantum Information Processing“](#)

Wir arbeiten an Modellen und Methoden, mit denen sich komplexe Quantensysteme auf Supercomputern simulieren lassen. Damit sind wir maßgeblich beteiligt an der Entwicklung von verschiedenen Typen von Quantencomputern und ihren vielversprechenden Spezialanwendungen.

► [siehe auch Seite 2](#)

# Masse von Dunkle-Materie-Teilchen berechnet

*Axionen gelten als Kandidaten für die Dunkle Materie im Universum (Hintergrund: Millennium Simulation, V. Springel & The Virgo Consortium)*

► Originalveröffentlichung: Nature (2016), DOI: 10.1038/nature20115

► Kommentar: Nature News and Views (2016), DOI:10.1038/539040a

Wissenschaftler sind bei der Suche nach der mysteriösen Dunklen Materie möglicherweise einen Schritt vorangekommen. Mithilfe groß angelegter Computersimulationen gelang es einer deutsch-ungarischen Forschergruppe unter Federführung der Bergischen Universität Wuppertal und des Forschungszentrums Jülich, eine Art Steckbrief des Axions zu erstellen. Das bislang noch unentdeckte Elementarteilchen gilt als vielversprechender Kandidat für die Dunkle Materie des Universums. Insbesondere die Eingrenzung der Masse liefert wichtige Anhaltspunkte, um in künftigen Experimenten mit Detektoren gezielt nach dem hypothetischen Teilchen zu fahnden.

Nach derzeitigem Verständnis sind nur rund 15 Prozent der Materie des Universums sichtbar. Die restlichen 85 Prozent zählen dagegen zur Dunklen Materie und machen sich nur durch die Schwerkraft bemerkbar. Physiker konnten trotz zahlreicher Anstrengungen bis heute nicht klären, woraus diese Materieform besteht. Gleichzeitig könnte die Existenz des Axions die Lösung sein für ein weiteres großes Rätsel der Physik. Im Kern geht es dabei um eine Eigenheit der starken Wechselwirkung, also der

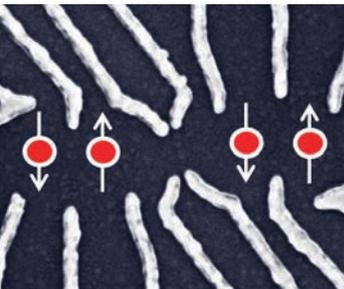
Kraft, welche die Elementarteilchen im Innern von Atomkernen zusammenhält, und die Frage, warum diese anders als die anderen drei Grundkräfte in der Physik so überraschend symmetrisch ausgeprägt ist.

## Blick in die Frühzeit des Universums

Den Berechnungen zufolge liegt die Masse des Axions zwischen 50 und 1.500 Mikroelektronenvolt. Das Axion wäre damit ein sehr leichtes Teilchen, bis zu zehn Milliarden Mal leichter als das Elektron, seinerseits ebenfalls ein Leichtgewicht. „Es ist davon auszugehen, dass die vorgelegten Ergebnisse zu einem Wettlauf um die Entdeckung dieser Teilchen führen werden“, schätzt Arbeitsgruppenleiter Prof. Zoltán Fodor. Für die groß angelegte Simulation der Zustände kurz nach dem Urknall, als die hypothetischen Partikel möglicherweise entstanden, mussten die Forscher neue Rechenmethoden entwickeln. Für die Berechnung nutzten sie insbesondere den Supercomputer JUQUEEN am Forschungszentrum Jülich. Die Rechenzeit hatte das John von Neumann Institut für Computing bereitgestellt.

► Peter Grünberg Institut, Theoretische Nanoelektronik (PGI-2 / IAS-3)

*Forscher wollen zu Demonstrationszwecken 50 Halbleiter-Quantenbits (Qubits) auf einem Chip integrieren. Je ein Elektronenspin-Paar kodiert ein Qubit.*



## Millionen-Förderung für Quantencomputer

Quantencomputer haben das Potenzial, spezielle Anwendungen exponentiell zu beschleunigen. Doch die Entwicklung steckt noch in den Kinderschuhen: 5 bis 10 Quantenbits lassen sich mittlerweile experimentell erzeugen. Für praktische Aufgaben ist das noch zu wenig. Im Projekt „Scalable Solid State Quantum Computing“ wollen Forscher nun Voraussetzungen für Systeme mit mehreren Hundert Quantenbits, kurz: Qubits, schaffen, wie sie für Quantencomputer der nächsten Generation notwendig sind.

Das Vorhaben wird von Wissenschaftlern des Forschungszentrums Jülich und der RWTH Aachen koordiniert. Daneben sind auch Forscher des Karlsruher Instituts für Technologie beteiligt. Die Helmholtz-Gemeinschaft hat „Scalable Solid State Quantum Computing“ als eines der ersten innovativen Zukunftsthemen ausgewählt und fördert das Projekt im Rahmen ihres Impuls- und Vernetzungsfonds mit 6 Mio. Euro.

Die Wissenschaftler verfolgen in dem Projekt unter anderem Lösungen für Multi-Qubit-Systeme auf Basis

von Supraleitern und Halbleitern – die zwei Typen, die am häufigsten zur Erzeugung von Qubits in Festkörpern verwendet werden. Im Fokus steht außerdem die Entwicklung neuer Bauteile, mit denen sich mehrere Hundert Qubits präzise steuern lassen.

## Quanten-Speed für spezielle Aufgaben

Qubits sind, analog zu klassischen Bits, die Grundeinheit der Quanteninformationsverarbeitung. Anders als diese können Qubits aber nicht nur zwei klar unterscheidbare Werte wie „0“ und „1“, sondern darüber hinaus gleichzeitig mehrere sich überlagernde Zustände annehmen. Bestimmte Aufgaben lassen sich so sehr schnell lösen. Davon profitieren könnte etwa die Simulation neuer Materialien, deren Atome und Elektronen ebenfalls den Gesetzen der Quantenphysik gehorchen. Zudem gelten Quantencomputer als inhärent abhörsicher und kommen daher als Basis für eine neue Klasse physikalisch abgesicherter Quanten-Kommunikationsnetzwerke in Betracht.

► mehr

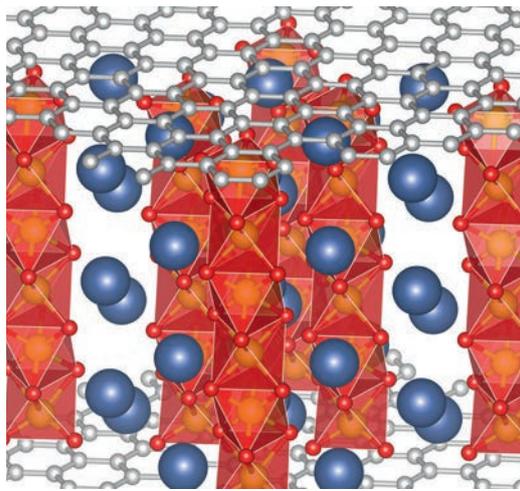
# Neues Material für Spin-Transistoren

Schon lange suchen Wissenschaftler nach Wegen, den Elektronenspin für das Speichern und Verarbeiten von Informationen zu nutzen. Entsprechende Spin-Transistoren benötigen – theoretisch – eine Größenordnung weniger Energie im Vergleich zu konventionellen Transistoren, die nur die elektrische Ladung des Elektrons nutzen, und könnten so die Computertechnik revolutionieren. Für den industriellen Durchbruch fehlte bislang allerdings ein geeignetes Material. Doch die Nachwuchsforscherin Zeila Zanolli hat mithilfe von Computersimulationen eine neue Stoffkombination aufgespürt, die den Anforderungen gerecht wird.

Die Verbindung aus Graphen und Bariummanganoxid ermöglicht es, den Elektronenspin präzise durch ein äußeres Feld auszurichten. Außerdem können sich die Spins darin gut über längere Strecken fortbewegen. Beide Eigenschaften sind für den Bau von Spin-Transistoren essenziell. Traditionelle Halbleiter erfüllen dagegen nur die erste Voraussetzung: Die Spins lassen sich zwar gut von außen kontrollieren, aber die Spin-Ausrichtung bleibt nicht lange bestehen. Kohlenstoff-basierte Halbleiter wie Graphen verhalten sich normalerweise entgegengesetzt: Spins können sich darin 100- bis 200-mal so weit ungestört fortbewegen. Im Gegenzug lassen sich die Spins aufgrund der schwachen Spin-Bahnkopplung aber nur schwer von außen kontrollieren,

wie es für die Erzeugung eines Signals zwingend notwendig ist.

„Die Vorteile beider Materialklassen ergänzen sich, wenn man Graphen mit einem magnetischen Halbleiter kombiniert“, erklärt Zanolli. Die mittlerweile an die RWTH Aachen gewechselte Physikerin konnte die bemerkenswerten Eigenschaften im Rahmen einer Marie-Curie-Fellowship am Forschungszentrum Jülich nachweisen. Für die rechenintensive Analyse kamen unter anderem die Jülicher Superrechner JUQUEEN und JURECA zum Einsatz.



► [Scientific Reports \(2016\)](#), DOI: 10.1038/srep31346

► [Nanospintronics Group](#)

*Hybridmaterial für Spin-Transistoren, bestehend aus Graphen (grau, oben, unten) und Bariummanganoxid (Mitte)*

# Virtuelles Stahl-Labor

Sagen und Legenden ranken sich um die Eigenheiten historischer Stähle. Auch heute noch ist der anpassungsfähige Werkstoff einer der mit Abstand wichtigsten Grundstoffe der Industrie: etwa im Fahrzeugbau, wo moderne Hochleistungsstähle bei geringem Gewicht extremen Belastungen standhalten müssen. Die verbesserten Eigenschaften werden über ein sorgsam abgestimmtes Gefüge auf der Mikroskala erzielt. Zudem führt die heterogene Struktur dazu, dass sich Materialverhalten und -versagen kaum noch korrekt durch einfache Materialgesetze vorhersagen lassen.

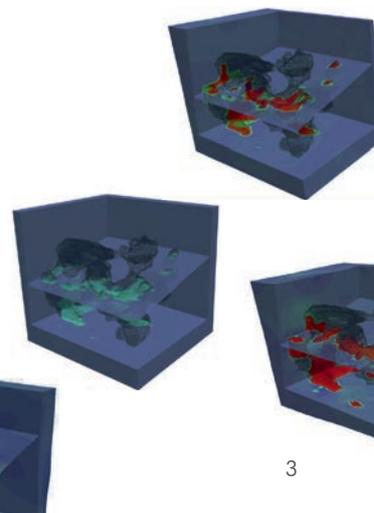
Im Projekt EXASTEEL arbeiten Experten an neuen Simulationswerkzeugen, die es ermöglichen sollen, solche hochfesten Leichtbaustähle – sogenannte Dualphasenstähle – in einer virtuellen Umgebung zu erforschen. Die realistische Simulation ganzer Bauteile unter Berücksichtigung der Mikrostruktur ist extrem rechenaufwendig und nur mithilfe geeigneter Algorithmen durch einen Superrechner der nächsten Exascale-Generation zu bewältigen.

„Eines unserer Ziele ist es, den FE2TI-Code für massiv parallele Systeme anzupassen und weiterzuentwickeln“, erklärt Projektsprecher Prof. Axel Klawonn von der Universität zu Köln. „Der Algorithmus unterteilt Bauteile nach der Finite-Elemente-Methode in kleine Teilkörper, um makroskopische Verformungen zu berechnen. Die Simulationen auf Mikrostrukturebene beschränken sich auf repräsentative Volumenelemente, da der Rechenaufwand sonst die Rechnerkapazitäten der näheren Zukunft weit übersteigt.“

Forscher der Universitäten in Köln, Freiberg, Erlangen, Duisburg-Essen, Dresden und Lugano beteiligen sich an dem Projekt, das durch das Schwerpunktprogramm SPPEXA der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt wird und Rechenzeit über das Gauss Centre for Supercomputing erhält. Bei der Anpassung des Codes konnten sie bereits erste Erfolge verzeichnen: Seit 2015 gehört FE2TI dem High-Q Club an. Mitglied werden kann nur, wem es gelingt, alle 458.752 Prozessorkerne des Jülicher Spitzenrechners JUQUEEN effizient auszulasten.

► [Projekt Exasteel - Bridging Scales for Multiphase Steels](#)

*EXASTEEL verbindet Makro- und Mikro-Simulationen für Materialtests auf kommenden Exascale-Rechnern.*



## KURZNACHRICHTEN

### NIC-Exzellenzprojekt

Die Rechenzeitkommission des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC) hat ein Vorhaben zur Berechnung des magnetischen Moments des Myons als zweites Exzellenzprojekt 2016 ausgezeichnet. Das Projekt des DESY fahndet nach Abweichungen vom klassischen Wert für den schweren Verwandten des Elektrons. Die Abweichungen gehen zurück auf reine Quanteneffekte und können Aufschluss geben über Theorien jenseits des Standardmodells der Hochenergiephysik. [► mehr](#)

### HBP konkretisiert Ziele

Das Human Brain Project (HBP) hat seine Forschungsziele neu ausgerichtet und in der Fachzeitschrift „Neuron“ veröffentlicht. Die Forscher wollen entschlüsseln, wie das Gehirn funktioniert. Dafür schafft das HBP eine europäische Forschungsinfrastruktur, die es ermöglicht, die äußerst komplexen Abläufe und Strukturen des Gehirns in genauen Analysen und Simulationen zu erforschen. [► mehr](#)



### Bundesweit Spitze

Julia Valder aus dem Jülich Supercomputing Centre ist für ihren hervorragenden Abschluss in der Ausbildung zur Mathematisch-technischen Softwareentwicklerin, kurz: MATSE, ausgezeichnet worden. Bei der Ehrung der Industrie- und Handelskammer Ende 2016 erhielt sie den Preis für die beste MATSE-Auszubildende in Nordrhein-Westfalen und Deutschland. Bundesfamilienministerin Manuela Schwesig hielt die Festrede auf der Veranstaltung. [► mehr](#)

### Europäischer Datendienst

Das Jülich Supercomputing Centre hat zusammen mit 14 weiteren europäischen Rechen- und Datenzentren die EUDAT Collaborative Data Infrastructure (EUDAT CDI) gegründet. Die Partner wollen damit eine zuverlässige und langfristige Infrastruktur für Forschungsdaten schaffen, die von Projektlaufzeiten unabhängig ist. EUDAT CDI geht zurück auf das Projekt EUDAT 2020, das in Horizon 2020 gefördert wird. [► mehr](#)

### Helmholtz Daten-Föderation

Die Helmholtz-Gemeinschaft fördert den Aufbau einer international vernetzten Infrastruktur für Forschungsdaten bis 2021 mit 49,5 Mio. Euro. Ziel der Helmholtz Data Federation ist es, Daten langfristig aufzubewahren und offen zugänglich zu machen. Bislang sind insgesamt sechs Einrichtungen beteiligt, unter anderem das Karlsruher Institut für Technologie als Projektkoordinator und das Forschungszentrum Jülich. [► mehr](#)

## TERMINE

► PATC-Trainingskurs  
„GPU Programming with CUDA“  
24.-26.04.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Dr. Jan Meinke, Jochen Kreuzt, JSC; Jiri Kraus, NVIDIA

► Trainingskurs  
„Introduction to the usage and programming of supercomputer resources in Jülich“  
22.-23.05.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Firmenmitarbeiter von Intel und ParTec, Mitarbeiter des JSC

► PATC-Trainingskurs  
„High-performance computing with Python“  
12.-13.06.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Dr. Jan Meinke, Dr. Olav Zimmermann, JSC

► Trainingskurs  
„High-performance scientific computing in C++“  
20.-21.06.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozent: Dr. Sandipan Mohanty, JSC

► Trainingskurs  
„Einführung in ParaView zur Visualisierung von wissenschaftlichen Daten“  
28.06.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozentin: Sonja Habbinga, JSC

► Trainingskurs  
„Introduction to Parallel In-Situ Visualization with VisIt“  
29.06.2017  
am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Jens Henrik Göbbert, Dr. Herwig Zilken, JSC

► Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre

### 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.), Tobias Schlöber, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1: Forschungszentrum Jülich/Ralf Eisenach, Weissblick/fotolia.com; S. 2 oben: V. Springel & The Virgo Consortium; S. 2 unten: RWTH Aachen/2. Physikalisches Institut; S. 3 oben: RWTH Aachen/Zanolli; S. 3 unten: Dominik Brands, Axel Klawonn, Martin Lanser, Oliver Rheinbach, Lisa Scheunemann, Jörg Schröder; Seite 4: DIHK / Schicke/Ebner, Jezper/fotolia.com **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 550

