



Ein neues grünes Flaggschiff

Die Energieeffizienz rückt immer mehr in den Mittelpunkt der Informationstechnologie. Nicht nur die Akkulaufzeit von mobilen Geräten wie Handys, Smartphones und Tablet-PCs hängt direkt davon ab. Eine wichtige Rolle spielt der Stromverbrauch ebenfalls in Rechenzentren und Serverfarmen, die das rasant wachsende Datenaufkommen des Internets bewältigen. Sie verbrauchen längst mehr Energie als der weltweite Flugverkehr.

Auch für unsere Forschung wird Green IT zunehmend wichtiger. Schon heute sind die Stromkosten eines Superrechners neben der Anschaffung der wichtigste Kostenfaktor. Ob die Rechenleistung wie bislang weiter exponentiell wachsen kann, hängt stark davon ab, ob der Energiebedarf innerhalb der finanziellen Möglichkeiten liegt. Ein künftiger Exascale-Rechner erfordert daher nicht nur die hundert- bis tausendfache Steigerung der Rechenleistung. Gleichzeitig muss der Energieverbrauch in ähnlichem Maße sinken.

Ganz im Zeichen der Energieeffizienz steht der neueste Spitzenrechner des Forschungszentrums Jülich, der derzeit aufgebaut wird. In JUQUEEN, so der Name des neuen Computers, steckt ein BlueGene/Q-System von IBM. Superrechner dieses Typs

belegen mit rund zwei Gigaflops pro Watt derzeit den ersten Platz der Green500-Liste der energieeffizientesten Supercomputer der Welt. Die effiziente Nutzung der neuen Maschine steht beispielhaft für die enge Zusammenarbeit des Jülich Supercomputing Centre mit IBM im Rahmen des Exascale Innovation Centres. Diese und andere Kooperationen mit wichtigen Partnern und Unternehmen wie etwa Intel sind ein wichtiger Bestandteil unserer Forschung. Sie ermöglichen es uns, auf die jeweils modernste Technologie zuzugreifen und gemeinsam die Entwicklung auf dem Weg zu Exascale voranzutreiben.

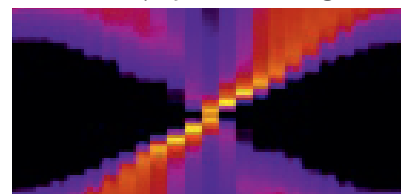
JUQUEEN wird von Wissenschaftlern aus unseren Instituten sowie von Forschern der Jülich-Aachen Research Alliance (JARA), einer Gemeinschaftseinrichtung des Forschungszentrums Jülich und der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, genutzt. Auch das Gauss Centre for Supercomputing (GSC) plant den Umstieg auf Blue Gene/Q. Diese Maschine wird Jülichs bislang schnellsten Rechner JUGENE ablösen.

Prof. Achim Bachem
*Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich*

IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:

Das Gehirn: Studienobjekt und Vorbild
NIC-Exzellenzprojekte 2012 ausgewählt



SEITE 3:

Leistungsgipfeln auf der Spur
Mehr Sicherheit bei Großveranstaltungen



SEITE 4:

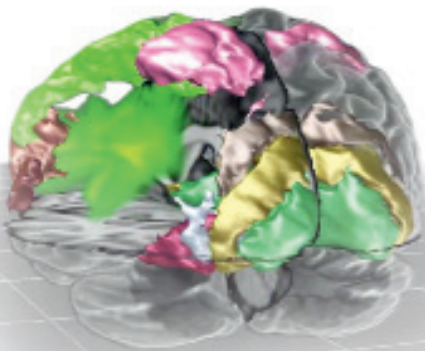
Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

Das Gehirn: Studienobjekt und Vorbild

Das menschliche Gehirn ist leistungsstärker als jeder Hochleistungscomputer, verbraucht aber kaum mehr Energie als eine Glühbirne. Ein Verständnis, wie das Gehirn funktioniert, wollen Forscher im neuen Simulation Laboratory Neuroscience am Forschungszentrum Jülich erarbeiten. „Wir tragen die in den letzten Jahren sprunghaft gestiegenen Datenmengen über das Gehirn

Die Rechenleistung des Gehirns basiert vor allem auf den vielen parallelen Verbindungen der Neuronen.



zusammen und simulieren es an den Jülicher Rechnern. So versuchen wir, das ganze System zu verstehen“, erklärt Prof. Markus Diesmann vom Institut für Neurowissenschaften und Medizin in Jülich. Davon werden Neurowissenschaftler aus ganz Europa profitieren, das Simulation Laboratory unterstützt sie bei der optimalen Nutzung der Jülicher Computer.

Darüber hinaus wird im Rahmen des Laboratory die „Bernstein Facility Simulation and Database Technology“ eingerichtet. Das macht die Institution zu einem festen Be-

standteil des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Nationalen Bernstein Netzwerks Computational Neuroscience. Damit ist sie von Beginn an hervorragend in die neurowissenschaftliche Forschungslandschaft in Deutschland eingebunden. Dank dieser neuen Allianz haben Forscher noch bessere Möglichkeiten, beispielsweise Simulationsprogramme anzupassen und zu optimieren.

Eine wichtige Rolle spielt dabei die Realisierung eines Exaflop-Computers. Denn dessen Rechenleistung wird nötig sein, um irgendwann einmal alle 10^{11} Neuronen des menschlichen Gehirns zu simulieren. Daher beteiligt sich Markus Diesmann an der Bewerbung für das europäische Forschungsvorhaben „Human Brain Project“ (siehe Exascale Newsletter 2/2011). Davon erhoffen sich Wissenschaftler bislang unvorstellbare Impulse für die Medizin sowie für die Entwicklung von neuen und energieeffizienten Supercomputern.

www.fz-juelich.de/bfsd

NIC-Exzellenzprojekte 2012 ausgewählt

Das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) hat die Forschungsprojekte des Kosmologen Dr. Stefan Gottlöber und des Quantenphysikers Prof. Fakhre Assaad als „John von Neumann Exzellenzprojekte 2012“ ausgezeichnet. Damit erhalten die beiden Wissenschaftler mehr Rechenzeit am Jülich Supercomputing Centre. Fakhre Assaad beschäftigt sich an der Universität Würzburg mit Quanten-Vielteilchenphysik, Stefan Gottlöber vom Leibniz-Institut für Astrophysik in Potsdam erforscht die Verteilung naher Galaxien. 85 Anträge auf Rechenzeit waren beim NIC eingegangen.

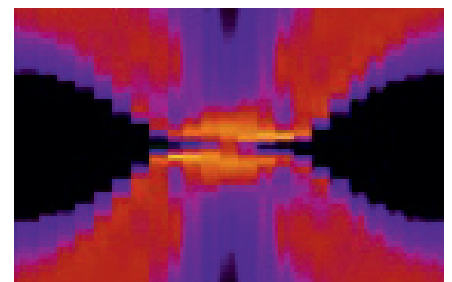
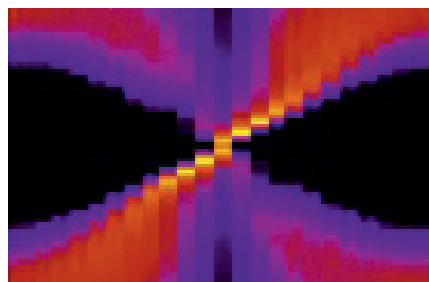
Fakhre Assaad befasst sich mit Materialien, deren Eigenschaften durch hochgradige Koppelung vieler Elektronen untereinander bestimmt sind. „Solche Vielteilchensysteme gehorchen den Gesetzen der Quantenmechanik und verhalten sich völlig anders als die einfache Summe der einzelnen Teilchen. Ihre Komplexität bringt eine große Vielfalt an Phänomenen mit sich. Diese sind mögliche Grundlage für neue technische Anwendungen, etwa neuartige Supraleiter“, so Assaad.

In Jülich wird er sich insbesondere mit dem Quantenmagnetismus beschäftigen, bei dem die hervorgerufenen magnetischen Eigenschaften eine zentrale Rolle spielen.

Im Projekt CLUES (Constrained Local UniversE Simulations) von Stefan Gottlöber geht es darum, die Entstehung der „Lokalen Gruppe“ besser zu verstehen. Das ist eine Ansammlung von mehreren Dutzend Galaxien in unserer kosmischen Nachbarschaft, zu der auch die Milchstraße und Andromeda zählen. Bei der Entwicklung von Galaxien

spielen gasdynamische Prozesse und die Verteilung Dunkler Materie eine wichtige Rolle. „Diese Verteilung simulieren wir am Computer. Die Ergebnisse können direkt mit präzisen Beobachtungsdaten verglichen werden“, so der Astrophysiker, der die Auszeichnung nach 2009 zum zweiten Mal erhielt.

Innen isolierend, außen metallisch: Quanten-Spin-Hall-Isolatoren – Simulationen zeigen die Spektralfunktion bei schwacher (l.) und stärkerer (r.) elektronischer Wechselwirkung.



www2.fz-juelich.de/nic/Projekte/exzellenz-2012.html



Massenweise paralleles Ausschwärmen ohne Stau? Für Ameisen kein Problem. Bei parallelen Rechenoperationen auf Supercomputern hilft Scalasca.

www.scalasca.org

Leistungsempässen auf der Spur

Die Leistung der Supercomputer hochzutreiben, ist eine Herausforderung. Die andere ist es, diese Leistung auch zu nutzen – wozu die Helmholtz-Nachwuchsforschungsgruppe „Performance Analysis of Parallel Programs“ unter Leitung von Prof. Felix Wolf einen großen Beitrag geleistet hat. Wichtigste Errungenschaft der vor kurzem abgeschlossenen sechsjährigen Forschung am Jülich Supercomputing Centre (JSC) ist das Analyserwerkzeug Scalasca. Mit der Software, die gemeinsam mit der JSC-Arbeitsgruppe von Dr. Bernd Mohr entwickelt wurde, werden inzwischen weltweit Simulationsprogramme für Supercomputer optimiert.

Mit Scalasca begegnen die Wissenschaftler der zunehmenden Parallelisierung der Supercomputer. So nutzt der Petaflop-Rechner JUGENE knapp 300.000 Prozessorkerne, bei Exascale-Systemen könnten es künftig hunderte Millionen sein. „Mit der Anzahl der Prozessorkerne steigen die Anforderungen an die Software drastisch:

Wie verteilt man die zusammenhängenden Rechenoperationen auf die Kerne, ohne dass einer auf die Ergebnisse von anderen warten muss?“, so Felix Wolf.

Um solche potenziellen Leistungsempässe aufzuspüren, hat die zehnköpfige Forschungsgruppe die Leistungsanalyse parallelisiert. „Das hat eine fundamental neue Softwarearchitektur erfordert, die enorme Datenmengen bewältigen muss“, erklärt der Informatiker. „Unser Ansatz war es, auch für unser Programm die Rechenkraft der Supercomputer zu nutzen.“ Das Ergebnis ist Scalasca, ein Open-Source-Diagnosewerkzeug, das Anwendungen auf Supercomputern während des Betriebs beobachtet und feststellt, wo und weshalb es zu Wartezeiten kommt. Derzeit entwickelt Felix Wolf Scalasca an der German Research School für Simulation Science in Aachen in Zusammenarbeit mit den Jülicher Kollegen weiter – mit dem Ziel, es für Exascale-Systeme vorzubereiten.



Mehr Sicherheit bei Großveranstaltungen

Auf Fußballturnieren oder Konzerten feiern viele Menschen auf engstem Raum zusammen. Doch wenn die Massen außer Kontrolle geraten, können die Folgen katastrophal sein, wie bei der Loveparade 2010 in Duisburg. Das im März 2012 gestartete Forschungsprojekt „Bausteine für die Sicherheit von Großveranstaltungen“ (BaSiGo) soll dazu beitragen, gegen solche Fälle besser gewappnet zu sein. Die Projektpartner entwickeln ein computergestütztes Werkzeug, damit Veranstalter, Kommunen und Ordnungskräfte Großveranstaltungen künftig besser planen und Sicherheitsrisiken genauer einschätzen können.

BaSiGo ist Teil des Programms „Forschung für die zivile Sicherheit“ der Bundesregierung, das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert es mit 5,5 Mio. Euro. Zu den 17 Partnern aus Forschung, Industrie, Feuerwehr und Polizei zählt auch

das Forschungszentrum Jülich. Es hat unter anderem das 2011 abgeschlossene Vorgängerprojekt „Hermes“ koordiniert.

„Wir wollen – gestützt auf Erfahrungen von ‚Hermes‘ – das Verhalten von Besucherströmen mit Laborexperimenten und Computersimulationen noch besser verstehen, um darauf aufbauend modulare Sicherheitsbausteine zu entwickeln“, erklärt Dipl.-Ing. Stefan Holl vom Jülich Supercomputing Centre. Geplant sind Experimente mit bis zu 1.000 Testpersonen, um die Methoden zur automatischen Videoaufzeichnung und die Modelle zur Simulation von Fußgängerströmen weiter zu verbessern. Zum vielseitigen Gesamtpaket von BaSiGo gehören außerdem Trainings- und Consultinglösungen, Simulationskomponenten und ein elektronisches Supportsystem zur Erstellung von Sicherheitskonzepten.



Risikofaktor Großveranstaltung: Wenn Menschenmassen außer Kontrolle geraten, wird es gefährlich.

www.bmbf.de/de/6293.php

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2012/12-03-05Start_BaSiGo.html

KURZNACHRICHTEN

JUDGE-Erweiterung für Astronomen

Seit Juni dieses Jahres läuft auf dem GPU-Computing Cluster JUDGE am Jülich Supercomputing Centre (JSC) eine neue Erweiterung für Astronomen: „Milky Way“, zu Deutsch „Milchstraße“. Das JSC hat die Partition gemeinsam mit zwei von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Einrichtungen konzipiert, dem DFG-Sonderforschungsbereich 881 „Das Milchstraßensystem“ an der Universität Heidelberg und dem DFG-Schwerpunktprogramm 1573 „Physics of the Interstellar Medium“ an der Ludwig-Maximilians-Universität München. Die an den beiden Programmen beteiligten Wissenschaftler können mit „Milky Way“ den Ursprung und die Entwicklung der Milchstraße untersuchen und so neue Erkenntnisse über die Entstehung von Galaxien gewinnen.

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



BMBF fördert GASPI-Projekt

Das Projekt GASPI (Global Address Space Programming Interface) wird für drei Jahre vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. Im Rahmen des Förderschwerpunkts „HPC-Software für skalierbare Parallelrechner“ erhält es rund 2 Mio. Euro. Ziel ist es, einen Programmierstandard zu entwickeln, um die Möglichkeiten paralleler Höchstleistungsrechner besser zu nutzen. Der Hintergrund: Parallele Höchstleistungsrechner werden immer komplexer. Das erfordert passendere Programmiermodelle sowie die Anpassung und Optimierung von paralleler Software. Der Standard MPI (Message Passing Interface), der als Kommuni-

kations-Bibliothek weite Verbreitung in paralleler Software findet, lässt momentan einige Möglichkeiten offen. Das GASPI-Projekt setzt auf einen Ansatz mit PGAS (Partitioned Global Address Space), ein modernes Programmiermodell des Hochleistungsrechnens. Basis sind Vorarbeiten des Fraunhofer-Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik. GASPI wird die Software, die im Rahmen des Projekts entwickelt wird, als Open-Source-Bibliothek zur Verfügung stellen. An dem Projekt beteiligt sind neben dem Forschungszentrum Jülich verschiedene Fraunhofer-Institute, Helmholtz-Zentren, Hochschulen, Unternehmen und der Deutsche Wetterdienst. Die Projektkoordination liegt bei T-Systems Stuttgart. www.gaspi.de

Kooperation mit Argonne National Laboratory

Das Forschungszentrum Jülich und das Argonne National Laboratory (ANL) in Illinois, USA, suchen künftig gemeinsam nach Wegen zum Exascale-Computing. Einen entsprechenden Kooperationsvertrag haben beide Einrichtungen im März 2012 unterschrieben. Geplant sind außerdem ein Austausch- und ein gemeinsames Nachwuchsprogramm. Das ANL zählt zu den ältesten und größten Forschungsinstituten des US-amerikanischen Energieministeriums. Zum ANL gehört eines der beiden führenden Rechenzentren, die vom Energieministerium unterstützt werden, die Argonne Leadership Computing Facility (ALCF). Es betreibt unter anderem einen IBM BlueGene/P-Supercomputer. Ende 2011 kündigte das ANL die Einführung der nächsten Rechnergeneration an, eines Blue Gene/Q-Systems.

www.anl.gov

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 (Trio MedienService)
Text: Christoph Mann, Eva-Maria Levermann
Grafik und Layout: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich
Bildnachweis: Forschungszentrum Jülich, IBM (S. 1), JARA (S. 2 o.), ©fotolia.com (erstboese, Klaus Eppel, photocreo/S. 3; Tjefferon/S. 4)
Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de
Druck: Schloemer und Partner GmbH
Auflage: 700

TERMINE

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

7. – 10. August 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Der Kurs gibt eine Einführung in die parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern im technisch-wissenschaftlichen Umfeld. Im Mittelpunkt steht die Verwendung des Message Passing Interface (MPI), des gängigsten Programmiermodells für Systeme mit verteiltem Speicher. Die Veranstaltung richtet sich in erster Linie an Teilnehmer des JSC-Gaststudentenprogramms „Wissenschaftliches Rechnen“. Die Teilnahme weiterer Interessierter ist nach Absprache möglich.

Dozenten: Dr. Florian Janetzko, Dr. Alexander Schnurpfeil, JSC

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

Trainingskurs „Programmierung in C“

22. – 31. Oktober 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Die Teilnehmer des Kurses erhalten eine Einführung in die Programmiersprache C. Diese Sprache wird häufig in der nichtnumerischen Datenverarbeitung eingesetzt und eignet sich auch für systemnahe Programmieraufgaben.

Dozent: Günter Egerer, JSC

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

Cooperative Quantum Dynamics and its Control (CQDC'12)

29. – 31. Oktober 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Im Mittelpunkt des Workshops stehen Quantendynamik und neuartige Quantenzustände in Vielteilchen- oder Vielspinsystemen. Vieles in diesem Themengebiet war bislang nicht experimentell durchführbar. Das könnte sich ändern dank der jüngsten Fortschritte in der Experimentiertechnik. Dazu gehören die Synthese von Molekularmagneten, Nanoengineering von Quantenpunkten, zeitaufgelöste Messen mit ultrakurzen Pulsen und kalte Atome in optischen Gittern. Die Teilnehmer werden über mögliche neue Quantenphänomene diskutieren und erörtern, welche Maßnahmen und Beobachtungen notwendig sind, um diese Phänomene zu erkennen, zu verstehen und umzusetzen.

www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/cqdc12

Eine Übersicht über die Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre finden Sie unter:

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