

*Rote Blutkörperchen können sich auch von alleine bewegen – vorausgesetzt, sie haben genug Zeit, selbst aktiv zu werden, bevor schnellere Moleküle sie treffen und anstoßen.*

## Und sie bewegen sich doch

Nicht nur äußere, auch innere Kräfte regen rote Blutkörperchen an

Jahrelang haben Forscher diskutiert: Bewegen sich die Membranen von roten Blutkörperchen von alleine oder werden sie von äußeren Kräften angestoßen? Ein internationales Team von Biophysikern hat nun nachgewiesen, dass beides stimmt. Die Forscher haben physikalische Grundsätze und biologische Realität miteinander verknüpft und konnten so zeigen, wie sich rote Blutkörperchen bewegen. Dazu kombinierten sie innovative Experimente mit theoretischen Modellen und Simulationen am Jülicher Supercomputer JURECA.

### Eigenantrieb braucht Zeit

Rote Blutkörperchen transportieren Sauerstoff im Blut. Stoßen schnelle Moleküle die Blutkörperchen an, bringen sie deren Zellmembran zum Zappeln. Dadurch bewegen sich die sehr weichen und elastischen Zellen. „Wir haben festgestellt, dass die Blutkörperchen aber auch selbst aktiv sind: Wenn sie genug Zeit haben, werfen sie sozusagen den eigenen Motor an, bevor sie von außen angeregt werden“, erläutert Dr. Dmitry Fedosov vom Jülicher Institutsbereich „Theorie der Weichen Materie und Biophysik“ (ICS-2/IAS-2). Jülich und das Pariser Institut Curie

hatten die Forschung initiiert, die nun gemeinsam mit der Universität Münster abgeschlossen wurde.

### Transportproteine im Verdacht

Das Forscherteam hatte Blutkörperchen mit einer sogenannten optischen Pinzette, einem konzentrierten Laserstrahl, in die Länge gezogen. Dabei wirkten die Blutkörperchen der Kraft der optischen Pinzette entgegen, wenn sie genügend Zeit hatten. Es muss also Kräfte in der Zelle geben. Physikalische Theorien und Computersimulationen untermauerten die Resultate der Experimente. Die Forscher haben auch bereits einen Verdacht, wer der innere Auslöser sein könnte: „Transportproteine in der Membran könnten solche Kräfte erzeugen, indem sie Ionen von einer Seite der Membran auf die andere befördern“, mutmaßt der Jülicher Biophysiker Dr. Thorsten Auth, der gemeinsam mit Dmitry Fedosov insbesondere für die Simulationen zuständig war. Um welches Protein es sich handelt, müssen nun Biologen herausfinden.

► [Nature Physics \(2016\)](#), DOI: [10.1038/nphys3621](#) und [10.1038/nphys3703](#)

## STATEMENT



**Prof. Gerhard Gompper**  
Institutsleiter ICS-2/IAS-2

*Wir entwickeln Modelle und Methoden, um komplexe biologische Systeme aufgrund physikalischer Prinzipien zu verstehen. Mit Simulationen auf Supercomputern können wir chemische und biologische Prozesse quantifizieren, die sich einer direkten experimentellen Beobachtung entziehen.*

# Die komplexen Rätsel der Verbrennung

► Institut für Technische Verbrennung, RWTH Aachen

Gas oder Flüssigkeiten verbrennen, um Energie zu gewinnen – das Prinzip ist altbekannt und wird schon lange erfolgreich in Motoren, Gasturbinen oder Kraftwerken angewendet. Und dennoch gibt das Zusammenspiel von chemischen und strömungsmechanischen Vorgängen noch viele Rätsel auf. Prof. Heinz Pitsch, Leiter des Instituts für Technische Verbrennung an der RWTH Aachen, versucht, sie mithilfe von Simulationen an Supercomputern zu lösen. Im April hat ihm der Europäische Forschungsrat (ERC) dafür einen Advanced Grant verliehen. Die 2,5 Millionen Euro Fördermittel sollen helfen, Verbrennungsprozesse noch exakter zu beschreiben und mit den Erkenntnissen bestehende Systeme zu optimieren beziehungsweise neue zu entwickeln. Dafür wird Pitsch auch Jülicher Supercomputer nutzen.

Verbrennungsprozesse sind sehr komplex, sie laufen auf unterschiedlichsten Zeit- und Längenskalen ab. „Es kommt zu chaotischen Strömungsbewegungen, sogenannten Turbulenzen.

Phänomene wie Zündung, Verlöschen und Schadstoffbildung lassen sich selbst unter Zuhilfenahme aufwendiger Experimente nur schwer verstehen und erklären“, erläutert der Aachener Forscher. Er hat mit von ihm mitentwickelten Modellen bereits mehrfach solche Prozesse auf Supercomputern simuliert, auch in Jülich – etwa über die Jülich Aachen Research Alliance (JARA), eine gemeinsame Forschungsallianz der RWTH und des Forschungszentrums Jülich. Dabei hat er sich auch mit der Entstehung von Schadstoffen beschäftigt. „Der Anteil der erneuerbaren Energien steigt immer weiter, dennoch werden wir noch Jahrzehnte auf die Verbrennung fossiler Rohstoffe angewiesen sein“, so Pitsch. „Die große Herausforderung ist es, Anlagen effizienter und umweltfreundlicher zu gestalten.“

## Mehr Sicherheit für Menschen mit Beeinträchtigungen

Anfang Februar 2016 ist das Forschungsprojekt „Sicherheit für Menschen mit körperlicher, geistiger oder altersbedingter Beeinträchtigung“ (SiME) gestartet. Daran beteiligt ist auch das Jülich Supercomputing Centre. Stefan Holl von der Abteilung Sicherheit und Verkehr erklärt die Ziele des Vorhabens.



Stefan Holl

### Herr Holl, worum geht es bei SiME?

Wenn Gebäude bei Störfällen oder Bränden rasch evakuiert werden müssen, sind Menschen mit Beeinträchtigungen oft auf fremde Hilfe angewiesen. Gemeinsam mit unseren Projektpartnern wollen wir herausfinden, wie gut sich Betroffene überhaupt selbst retten können. Auf Basis dieser Erkenntnisse wollen wir Maßnahmen entwickeln, um ihre Fähigkeit zur Selbstrettung zu verbessern. Dazu zählt, die Menschen effizient auf kritische Situationen vorzubereiten oder Flucht- und Rettungswege optimal zu gestalten.

### Was ist dabei Aufgabe des JSC?

Wir entwickeln Modelle, um die Bewegung von Personen unter anderem während einer Evakuierung zu simulieren. Hier bauen wir auf Erfahrungen aus früheren Projekten zur Eigendynamik großer Menschenmengen wie etwa „BaSiGo“ auf. Allerdings liegen uns noch keine Bewegungsparameter für Menschen mit Beeinträchtigung vor, zum Beispiel über Geschwindigkeiten oder Abstände der Personen untereinander.

### Wie wollen Sie solche Parameter bekommen?

Wie in den anderen Projekten werden wir Studien durchführen, und zwar mit gemischten Gruppen aus mobilen und mobilitätseingeschränkten Personen. Dabei wollen wir beispielsweise herausfinden, wie sich Rollstühle oder Rollatoren auf das Bewegungsverhalten der Gruppen auswirken. Auf Basis solcher Parameter können wir dann Simulationen erstellen, etwa für die Evakuierung von Wohnheimen oder Werkstätten.

### Lassen sich die Ergebnisse auch für öffentliche Gebäude nutzen?

Zunächst geht es um Sicherheitskonzepte für Einrichtungen des sozialen Sektors. Betreiber, Fachplaner und Genehmigungsbehörden erhalten dadurch eine Bewertungsgrundlage. Wir hoffen aber, dass auch andere unsere Ergebnisse in ihren Evakuierungskonzepten berücksichtigen.

Herr Holl, vielen Dank für das Gespräch!

► SiME-Projekt

## Neues Konzept für digitale Datenspeicher

### Antiferromagneten lassen sich kontrolliert schalten

Einem internationalen Forscherteam ist es gelungen, die magnetischen Momente eines antiferromagnetischen Materials elektronisch kontrolliert zu schalten und auszulesen – ein wichtiger Schritt, um Informationen speichern zu können. Die Erkenntnisse ermöglichen neue Ansätze für digitale Datenspeicher.

Bislang kommen antiferromagnetische Materialien in der Informationstechnologie nur in Kombination mit anderen Materialklassen zum Einsatz. Das liegt an den atomaren magnetischen Momenten, den sogenannten Spins. Bei Antiferromagneten zeigt die eine Hälfte der Spins in eine Richtung, die andere in die Gegenrichtung, sie heben sich also im Mittel gegenseitig auf. Deshalb lassen sich Antiferromagneten im Gegensatz zu Ferromagneten wie Eisen nicht von einem externen Magnetfeld beeinflussen. Doch genau diese Eigenschaft von Ferromagneten wird bei den derzeit gängigen Methoden zur magnetischen Datenspeicherung genutzt.

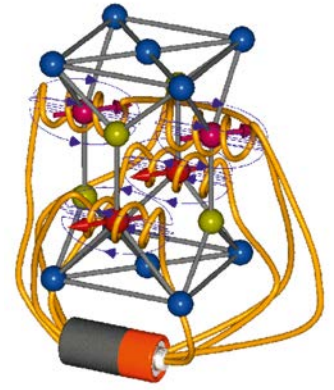
„Da Antiferromagneten jedoch magnetisch stabiler und grundsätzlich schneller schaltbar als Ferromag-

neten sind, haben wir nach einem neuen Ansatz gesucht“, sagt Prof. Yuriy Mokrousov vom Jülicher Peter Grünberg Institut. Mithilfe von Kupfermanganarsenid-Proben gelang es den Forschern aus Großbritannien, Tschechien, Deutschland und Polen, die Ausrichtung der Spins mit Strompulsen zu kontrollieren.

### Strom kippt Spin

„Der Strom bewirkt ein quantenmechanisches Drehmoment auf einzelne Spins, die sich jeweils um 90 Grad verdrehen“, erläutert der Jülicher Experte Dr. Frank Freimuth. Simulationen auf Jülicher Supercomputern sowie eine in Jülich entwickelte Software halfen den Forschern zu verstehen, wie das Umklappen im Detail abläuft.

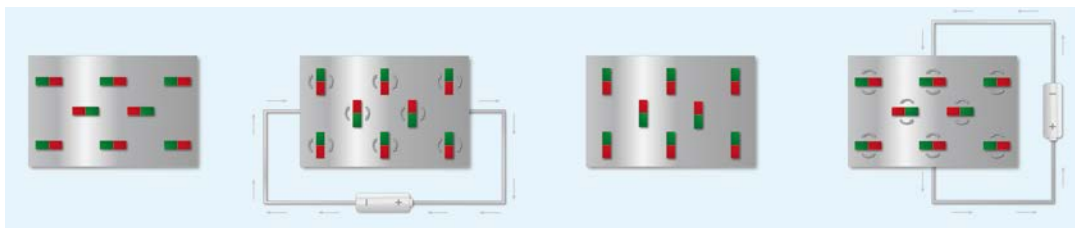
Die Wissenschaftler wollen nun Ideen entwickeln, mit denen sich ihr neuer Ansatz in bestehende Datenspeicher-Konzepte integrieren lässt. Die Auswahl an geeigneten Materialien, die bei Raumtemperatur antiferromagnetisch sind, ist groß. Antiferromagnetismus findet sich unter anderem in Metallen, Halbleitern und Isolatoren.



*Um Antiferromagneten mit Magnetspulen zu schalten, wäre ein kompliziertes Gewirr aus Windungen notwendig (gelbe Linien im Bild oben). Solche atomar kleinen Spulen gibt es jedoch nicht. Stattdessen haben Forscher einen Weg gefunden, die Ausrichtung der Spins (rote Kugeln) mittels Strompulsen um 90 Grad zu drehen.*

*Bild links: Spins einer Kupfermanganarsenid-Probe. Erst ein Strompuls, der senkrecht zum ersten verläuft, lässt sie wieder in die Ausgangsposition zurückkippen.*

► Science (2016), DOI: 10.1126/science.aab1031



## Human Brain Project startet europäische Infrastruktur

Ende März 2016 hat das Human Brain Project (HBP) eine erste Version seiner gemeinsamen europäischen Infrastruktur zur Erforschung des menschlichen Gehirns vorgestellt. Forscher aus 24 Ländern haben sie in den letzten zweieinhalb Jahren aufgebaut. Das neue Angebot, das allen interessierten Nutzern offensteht, soll detaillierte Analysen und Simulationen des Gehirns ermöglichen. Dafür vernetzt es die Wissenschaftler über vier große europäische Supercomputer- und Datenzentren. Eines der Zentren ist das Jülicher Supercomputing Centre (JSC). Der Zugang zur Infrastruktur erfolgt über ein Webportal.

Das JSC koordiniert gemeinsam mit der ETH Zürich eine der sechs Plattformen dieser Infrastruktur. Die Plattform für „High Performance Analytics and Computing“ soll helfen, die gewaltigen Datenmengen über das menschliche Gehirn zu speichern, in Modelle zu integrieren und in Simulationen auszuwerten. Darüber hinaus unterstützt das JSC gemeinsam mit 14 Kooperationspartnern die europäischen Neurowissenschaftler dabei, die Supercomputer-Ressourcen, Speichersysteme und Anwender-Software zu nutzen.

### Neue IT-Technologien

Das HBP erforscht die Organisation des Gehirns und will zu einem besseren Verständnis neurologischer Erkrankungen beitragen. Dafür entwickeln die beteiligten Forscher unter anderem neue IT-Technologien wie neurosynaptische Prozessoren, die sich an den Arbeitsprinzipien des Gehirns orientieren. Davon sollen nicht nur die Neurowissenschaft, sondern auch Supercomputing und Robotik profitieren.



► Die sechs Plattformen der europäischen Infrastruktur

► Das Human Brain Project erforscht die Organisation des menschlichen Gehirns. Die jetzt gestartete europäische Infrastruktur soll detaillierte Analysen und Simulationen ermöglichen.

## KURZNACHRICHTEN

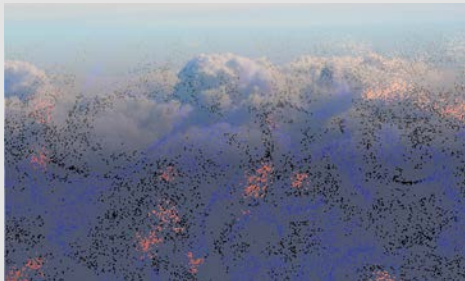
### Neuer SPXXL-Vorsitzender

Dr. Michael Stephan vom Jülich Supercomputing Centre ist neuer Vorsitzender der Vereinigung SPXXL. Darin haben sich Einrichtungen zusammengeschlossen, die Supercomputer mit IBM- oder Lenovo-Systemen betreiben. Ziel von SPXXL ist es, gemeinsam mit Herstellern das wissenschaftlich-technische Rechnen auf skalierbaren Parallelrechnern weiterzuentwickeln.

► [mehr](#)

### Einblick in Regenwolken

Big-Data-Experten des Jülich Supercomputing Centre (JSC) haben einen häufig genutzten Algorithmus zur Datenanalyse optimiert. Durch die Parallelisierung von DBSCAN (Density Based Spatial Clustering for Applications with Noise) lassen sich große Datenmengen schneller auf Supercomputern bearbeiten. Auch der Speicherverbrauch konnte deutlich reduziert werden. Die neue Variante HPDBSCAN wird derzeit in Jülich benutzt und als Open Source Software angeboten. Gemeinsam mit Partnern aus der RWTH Aachen wollen die JSC-Forscher damit die Tröpfchenbildung in Regenwolken besser verstehen.



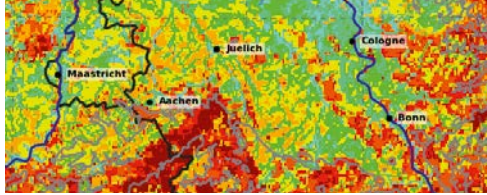
*Im Wolkenmeer: Regentropfen bilden sich durch die Verdichtung von Partikeln. DBSCAN identifiziert Strömungslinien (dunkelblaue Punkte im unteren Teil des Bildes) und andere Verdichtungen (orange), um Niederschlagsbildung aufzudecken.*

### 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.), Dr. Regine Panknin, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1: @psdesign/fotolia.com; S. 2: @Valeev/fotolia.com, S. 3 unten: @vege/fotolia.com; S. 4. oben: HPSC TerrSys; Forschungszentrum Jülich **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: [info@fz-juelich.de](mailto:info@fz-juelich.de) **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700



### Täglich neu auf YouTube

Jeden Tag veröffentlicht das Kompetenzzentrum „High-Performance Scientific Computing in Terrestrial Systems“ auf YouTube aktuelle Simulationen zu wichtigen Zustandsgrößen des terrestrischen Wasserkreislaufs. Diese zeigen, wie sich im Tagesverlauf etwa der Grundwasserstand ändert oder wie viel Wasser im Boden für Pflanzen verfügbar ist – sowohl für Nordrhein-Westfalen als auch für Europa. Die Simulationen werden auf den Jülicher Supercomputern JUQUEEN und JURECA mithilfe der Terrestrial Systems Modeling Platform (TerrSysMP) durchgeführt, siehe Exascale-Newsletter 2015/2.

► [mehr](#)

### Ansprechpartner für die Industrie

Unternehmen, die Supercomputing nutzen wollen, können sich seit Januar 2016 an eine spezielle Anlaufstelle am Jülich Supercomputing Centre (JSC) wenden. Das Industry-Relations-Team hilft beim Zugang zu den Jülicher Supercomputern und beim Einkauf von Rechenzeit. Darüber hinaus koordiniert das Team Forschungsprojekte mit Industriebezug und bringt externe Auftraggeber mit JSC-Experten zusammen.

Tel.: 02461 61-8808

E-Mail: [ha.fischer@fz-juelich.de](mailto:ha.fischer@fz-juelich.de)

► [mehr](#)

### JUQUEEN macht Leistungstest

Vom 14. bis 20. Juni 2016 führt das Jülich Supercomputing Centre eine Big Blue Gene Week durch. In dieser Zeit laufen auf dem Supercomputer JUQUEEN ausschließlich Anwendungen, die mindestens vier Blue Gene/Q-Racks oder 65.536 Rechenkerne nutzen. Die Testtage sollen Nutzern helfen, ihre Programme leichter und effizienter zu skalieren.

► [mehr](#)



## TERMINE

### ► International Supercomputing Conference

19. – 23.06.2016

[Auf der Messe Frankfurt](#)

Jülicher Forschung: Stand 1310 (Jülich Supercomputing Centre), Stand 1320 (JARA|HPC), Stand 1340 (europäische Exascale-Projekte), Stand 1201 (PRACE), Stand 553 (UNICORE)

### ► High-performance scientific computing in C++

27. – 28.06.2016

[am Jülich Supercomputing Centre](#)

Dozent: Dr. Sandipan Mohanty, JSC

### ► International Workshop on Quantum Annealing and its Applications in Science and Industry (QuAASI'16)

26. – 28.07.2016

[am Jülich Supercomputing Centre](#)

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

09. – 12.08.2016

[am Jülich Supercomputing Centre](#)

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

### ► CECAM Tutorial: Atomistic Monte Carlo Simulations of Bio-molecular Systems

19. – 23.09.2016

[am Jülich Supercomputing Centre](#)

### ► HPSC TerrSys Fall School 2016

10. – 14.10.2016

[an der Universität Bonn](#)

### ► Introduction to GPU Programming using OpenACC

24. – 25.10.2016

[am Jülich Supercomputing Centre](#)

Dozenten: Anke Zitz, Dr. Andreas Herten, Dr. Paul Baumeister, alle JSC, Jiri Kraus, NVIDIA

### ► Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre