

## 5 Petaflops für die Wissenschaft

Zuletzt herrschte viel Bewegung in der TOP500, der Liste der schnellsten Supercomputer der Welt. Europa, vorher eher schwach vertreten, präsentierte sich im Juni gleich mit vier Rechnern unter den zehn ersten Plätzen. Der neue Jülicher Spitzenrechner JUQUEEN brachte es mit seiner ersten Ausbaustufe auf Anhieb auf den achten Platz. Im Oktober wurde das System von 8 auf zunächst 24 Racks erweitert. Wir sind gespannt, wie es abschneidet, wenn im November die nächste TOP500 erscheint.

Viel schwerer wiegt aber: Als voraussichtlich erster Supercomputer Europas mit einer Rechenleistung von 5 Petaflops – das sind 5 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde – eröffnet die Maschine neue Möglichkeiten in Jülich für ein noch breiteres Spektrum an Arbeitsgruppen und für besonders rechenintensive Großprojekte. Der Bedarf an Rechenleistung steigt unaufhaltsam, das zeigt nicht zuletzt die bisherige Auslastung des Vorgängersystems. JUGENE lieferte bahnbrechende Erkenntnisse über grundlegende Eigenschaften der Elementarteilchen, über den Ursprung des Lebens, die Struktur von Datenspeicher-Materialien oder über elementare Zellprozesse, einen wichtigen Ansatzpunkt für die Entwicklung neuer medizinischer Wirkstoffe (siehe S. 2).

Der Nachfolger steht ebenfalls im Dienst der Wissenschaft und ist zudem ein weiterer Schritt Richtung Exascale – zu den tausendmal schnelleren Rechnern der nächsten Generation. Im Vergleich zu JUGENE hat sich die Energieeffizienz – die momentan größte Herausforderung – um das Fünffache verbessert. Nutzer aus ganz Deutschland und Europa können über zwei Supercomputing-Verbünde Rechenzeit beantragen: über das Gauss Centre for Supercomputing und über die europäische Forschungsinfrastruktur PRACE. JUQUEEN eignet sich insbesondere für hochskalierende Projekte, etwa für Klima- und Atmosphärensimulationen, Gehirn- oder Galaxienmodelle, neue Materialien oder die Erforschung elementarer Teilchen. In diesem Zusammenhang freuen wir uns auch auf den Jülicher Festvortrag zum Jahresabschluss am 12. November 2012 in Bonn, in dem der Direktor des Jülich Supercomputing Centre, Prof. Thomas Lippert, weitere Einblicke in die Welt des wissenschaftlichen Rechnens geben wird.

Prof. Achim Bachem  
Vorstandsvorsitzender  
des Forschungszentrums Jülich

### IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:

Protonen als Grenzgänger  
Neue Plattform stärkt Europa



SEITE 3:

Mehr Leistung durch Grafikprozessoren  
Daten mittels Spinspiralen lesen



SEITE 4:

Kurznachrichten  
Termine  
Impressum

[www.fz-juelich.de/ias/jsc](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc)



## Protonen als Grenzgänger

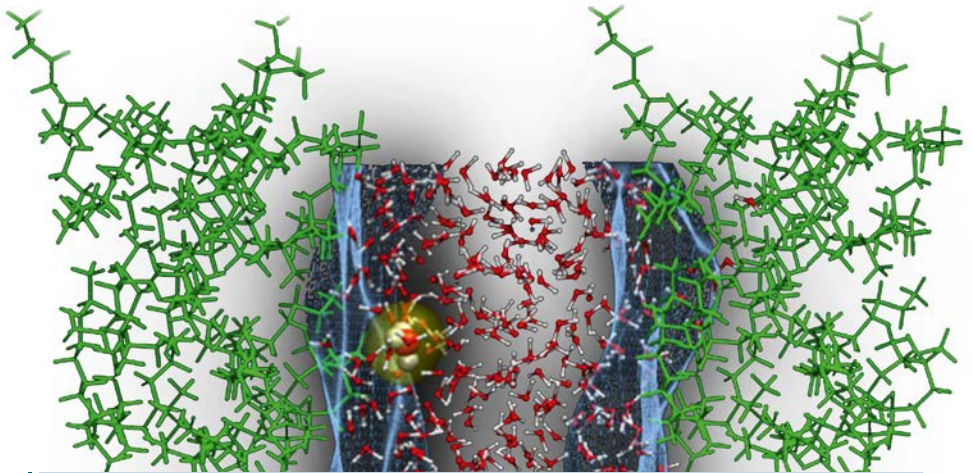
Energieumwandlung spielt eine wichtige Rolle in der Natur, etwa beim menschlichen Stoffwechsel oder der Photosynthese. Zum besseren Verständnis untersuchen Wissenschaftler die komplexen Prozesse in der kleinsten lebenden Einheit, der Zelle. Eine Schlüsselfunktion kommt hier dem Protonen-Transport zu. Dabei bewegen sich die Protonen ungewöhnlich schnell an Membranwänden der Zelle entlang. Ermöglicht wird dies durch eine Grenzschicht, die Jülicher und Linzer Wissenschaftler dank Simulationen am Jülicher Supercomputer JUGENE entdeckt haben. In ihr können die Protonen praktisch ungebremst vorankommen, ohne den Kontakt zur Membranoberfläche zu verlieren.

Nach experimentellen Untersuchungen der Protonendynamik auf einer Grenzfläche aus Wasser und einer wasserabweisenden Oberfläche haben die Forscher den Vorgang auf JUGENE nachgestellt. Auch wenn die Wissenschaftler auf ein minimalistisches Modellsystem zurückgriffen, waren aufwendige molekulardynamische Simulationen notwendig. Nicht weniger als 40 Millionen Prozessorstunden kamen zusammen. „Auf einem einzelnen Standard-PC hätten die

Berechnungen fast 5.000 Jahre gedauert, JUGENE benötigte immerhin 100 Tage“, sagt Chao Zhang von der German Research School for Simulation Sciences (GRS) am Forschungszentrum Jülich, der die Simulationen in der von Prof. Paolo Carloni geleiteten Arbeitsgruppe für computergestützte Biophysik durchgeführt hat. Neben der GRS waren das Jülicher Institute for Advanced Simulation sowie das Institut für Biophysik

der Universität Linz in Österreich beteiligt. Die Berechnungen wurden durch den europäischen Verbund für das Hochleistungsrechnen PRACE gefördert.

*Ungebremster Wanderer: Ein Proton (gelbe Kugel) bewegt sich auf einer Grenzfläche aus Wasser (rot-weiße Elemente) und einer wasserabweisenden Oberfläche (blaues Gitter).*



Originalveröffentlichung:

Proceedings of the National Academy of Sciences DOI: 10.1073/pnas.1121227109

## Neue Plattform stärkt Europas Wettbewerbsfähigkeit



Europa wird nur dann international wettbewerbsfähig bleiben, wenn es seine Innovationsfähigkeit durch den Einsatz von High-Performance Computing (HPC) erhöht. Das ist eine der Kernaussagen, die die neue European Technology Platform for HPC (ETP4HPC) in ihrem Vision Paper veröffentlicht hat. In dem Forum haben sich im Juni 2012 führende Unternehmen und Forschungseinrichtungen zusammengeschlossen. „Damit wollen wir Kräfte bündeln, das Engagement Europas bei der Entwicklung von HPC-Technologie stärken und so insgesamt die technologische Entwicklung vorantreiben“, erläutert Prof. Thomas Lippert, Leiter des Jülicher Supercomputing Centre am

*Führende Rolle: Europa kann die Entwicklung der nächsten Supercomputer-Generation mitprägen.*

Forschungszentrum Jülich, das die Plattform gemeinsam mit 13 Partnern gegründet hat.

Die Mitglieder der ETP4HPC sind besorgt, dass Europa gegenüber anderen Regionen sowohl bei der Entwicklung als auch bei Investitionen in Technologien und Software hinterher hinke. „Das Vision Paper zeigt, wie sich Europa künftig in die Entwicklung von Rechnern der nächsten Generation einbringen kann“, erklärt Lippert. Als erster Schritt wird eine strategische Forschungsagenda erstellt, die im Dialog mit der Europäischen Kommission und anderen Einrichtungen, wie zum Beispiel dem Supercomputerverbund PRACE, umgesetzt werden soll. Konkrete Vorschläge für die Agenda, etwa künftige Schwerpunkte in der Hardwareentwicklung, hat die Plattform in ihrem Vision Paper bereits vorgelegt.

[www.etp4hpc.eu/documents/Joint%20ETP%20Vision%20FV.pdf](http://www.etp4hpc.eu/documents/Joint%20ETP%20Vision%20FV.pdf)



## Mehr Leistung durch Grafikprozessoren

Es gibt verschiedene Wege, die Leistung von Supercomputern zu steigern. Eine enorme Beschleunigung erhofft sich die Forschung durch den Einsatz von Grafikprozessoren (GPUs). An diesem Vorhaben arbeiten Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich und des amerikanischen Grafikkartenherstellers NVIDIA im „NVIDIA Application Lab“, das die beiden Einrichtungen im Sommer gemeinsam gegründet haben. Damit wollen die Partner wissenschaftliche Simulationen unter anderem in Bereichen wie den Neurowissenschaften, der Astrophysik, der Teilchenphysik, den Materialwissenschaften und der Biologie optimieren.

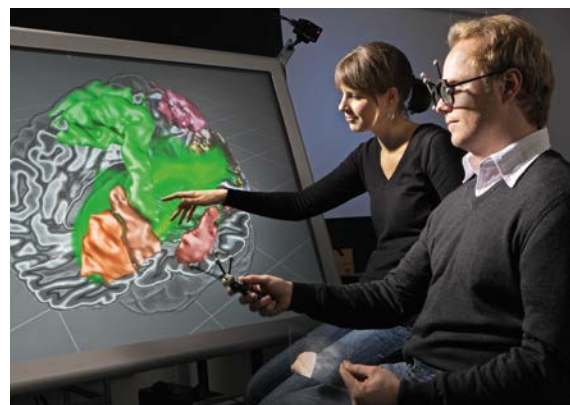
„Während Hauptprozessoren, die CPUs, mit wenigen starken Kernen arbeiten, rechnen GPUs mit vielen schwachen Kernen. Führt man viele einfache Operationen massiv parallel aus, sind GPUs bei geringerem Energieverbrauch oft deutlich schneller“,

erklärt Prof. Dirk Pleiter vom Jülich Supercomputing Centre. Von der Beschleunigung durch GPUs profitiert bereits das Clustersystem JUDGE, das zu den 50 energieeffizientesten Supercomputern der Welt zählt.

Aus Sicht von Pleiter gehört die Zukunft Hybrid-Systemen, die CPUs und GPUs effektiv kombinieren. Momentan sind allerdings nur wenige Anwendungen in der Lage, viele parallel rechnende GPUs effizient zu nutzen. „Um den Einsatz der GPUs auszuweiten, müssen wir genauer wissen, für welche Rechenoperationen GPUs geeignet sind und welche Konsequenzen dies für die Rechnerarchitektur hat.“ Um dies herauszufinden, untersuchen der Physiker und seine Kollegen gemeinsam mit dem Industriepartner Forschungsprojekte, die auf parallelen GPU-Systemen wie JUDGE durchgeführt werden oder durchgeführt werden könnten. Das Pilotprojekt JUBRAIN etwa ist am Jülicher

Institut für Neurowissenschaften und Medizin angesiedelt. Hirnforscher arbeiten darin am Aufbau eines extrem hochaufgelösten und mehrdimensionalen Modells des menschlichen Gehirns.

*Mit Grafikprozessoren optimieren: 3D-Modelle des menschlichen Gehirns.*



[www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2012/12-06-19NVIDIA\\_Application\\_Lab.html](http://www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2012/12-06-19NVIDIA_Application_Lab.html)

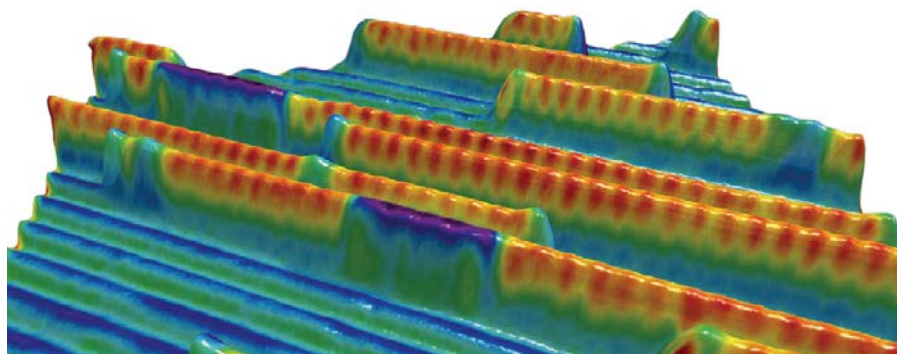
## Daten mittels Spinspiralen lesen

Das große Problem bei Datenträgern ist nicht das Schreiben, sondern das Lesen – zumindest wenn man sich am physikalischen Limit bewegt. Methoden, je Atom ein Bit zu speichern, zeichnen sich bereits ab. Noch gesucht wird dagegen eine Möglichkeit, diese Daten auszulesen, ohne sie zu zerstören. Prof. Yuriy Mokrousov vom Institut für Quanten-Theorie der Materialien am Forschungszentrum Jülich hat dafür mit Spinspiralen einen vielversprechenden Ansatz präsentiert.

Spinspiralen sind Atomketten, in denen die magnetischen Drehimpulse der Atome – die Spins – eine sehr stabile Spiralformation bilden. Der Clou: Dreht man den vordersten Spin, bewegt sich die ganze Kette mit. „Sie dreht sich wie eine Schraube, und die Ausrichtung des hintersten Spins verrät die des vordersten“, erklärt der Physiker. Gewöhnlich stellen sich Spins parallel zu ihren Nachbarn. Berührt das vorderste Atom der Spinspirale ein Atom, dessen magnetischer Drehimpuls eine Information speichert,

könnte man diese also am hintersten Atom der Spirale ablesen – schnell und energiesparend.

Entdeckt hat Mokrousov diese exotische Formation gemeinsam mit Hamburger Experimentalphysikern in einer Doppelreihe von 100 Eisenatomen auf einer Iridium-Oberfläche. Die speziellen magnetischen Eigenschaften zeigte das System bei Temperaturen knapp über dem absoluten Nullpunkt. Die Naturgesetze schließen allerdings nicht aus, dass sich der Effekt auch bei Raumtemperatur einstellt. Mit Hilfe von Simulationen auf dem Supercomputer JUGENE sucht der Forscher daher nach Bedingungen, die eine höhere Temperatur zulassen. Bisher hat er 100 Kelvin erreicht – also für uns eisig minus 173 Grad Celsius. „Für Teilchen, die verrückte Dinge tun, ist das heiß. Meistens tun sie das nämlich nur wenige Grad über der absoluten Null“, sagt Mokrousov.



*Lesehilfe: Durch die gezielte Modulation der magnetischen Ordnung von Atomketten – hier: Eisen (gelb-rot) – lassen sich gespeicherte Informationen schneller abrufen.*

Originalveröffentlichung: Physical Review Letters DOI:10.1103/PhysRevLett.108.197204

## KURZNACHRICHTEN

## DEEP-Cluster in Betrieb

Das EU-Projekt DEEP (Dynamical ExaScale Entry Platform) hat einen neuen Supercomputer-Cluster bekommen. Seit September läuft am Forschungszentrum Jülich ein Aurora HPC 10-10 der Firma Eurotech mit energiesparender Heißwasserkühlung. Dieses System arbeitet mit bis zu 45 Grad Celsius heißem Wasser, das die Wärme ohne zusätzliche Kühlung an die Umgebungsluft abgibt. Im Rahmen von DEEP wird eine neue Rechnerarchitektur für die Ende des Jahrzehnts kommende Exascale-Klasse entwickelt. Das Konzept sieht vor, dass der jetzt installierte Cluster die komplexen Bestandteile von parallelen Programmen berechnet. Er wird ergänzt werden durch einen weiteren Rechner, einen sogenannten Booster. Dessen Prozessoren mit 50 Kernen sollen künftig die – dann deutlich energieeffizientere – Berechnung der einfachen, hochparallelen Programmanteile übernehmen. An dem Projekt, das die Europäische Kommission mit 8 Millionen Euro fördert, sind 16 Partner aus Wissenschaft und Industrie beteiligt. Koordinator ist das Forschungszentrum Jülich.

[www.deep-project.eu](http://www.deep-project.eu)

## Den Faktor Zeit beachten

Immer mehr Prozessorkerne, immer komplexere Rechnerarchitekturen und Anwendungen – nur mit entsprechenden Werkzeugen lässt sich die gestiegene Rechenkapazität effizient nutzen. Unterstützung erhalten die Entwickler paralleler Simulationscodes vom Projekt LMAC (Leistungsdynamik massiv-paralleler Codes). In dem Vorhaben werden die Analysewerkzeuge Vampir, Scalasca und Periscope mit einer zusätzlichen Funktion ausgestattet: der automatischen Untersuchung des zeitabhängigen Leistungsverhaltens, der sogenannten Leistungsdynamik. Bestehende Werkzeuge schlüsseln zwar das Leistungsverhalten eines parallelen Codes oftmals sehr detailliert auf, vernachlässigen aber die Unterschiede im zeitlichen Ablauf eines Programms. Um Leistungsgenpässe

zu minimieren, werden jedoch genaue Informationen über diese Dynamik benötigt. An dem Projekt beteiligt sind die German Research School for Simulation Sciences als Koordinator sowie das Forschungszentrum Jülich, die GNS mbH, die RWTH Aachen, die TU Dresden und die TU München. Die University of Oregon (USA) ist assoziierter Projektpartner.

[www.vi-hps.org/projects/lmac\\_de](http://www.vi-hps.org/projects/lmac_de)

## Stromsparen ohne Zeitverlust

Im Projekt eeClust haben Wissenschaftler eine neue Methode entwickelt, um den Stromverbrauch in Rechnerclustern zu verringern. Dabei untersucht eine Analysesoftware Ausführungsverhalten und Energieverbrauch von parallelen Programmen. Dank dieser Informationen können vorübergehend nicht genutzte Komponenten der Cluster abgeschaltet werden. Der entscheidende Vorteil: Die Rechenzeit wird davon nicht beeinträchtigt. Genau diese Gefahr bestand bei bisherigen Verfahren. Das Jülich Supercomputing Centre setzt die in eeClust entwickelten Werkzeuge und Methoden bereits in laufenden Projekten ein, beispielsweise im gemeinsam mit IBM betriebenen Exascale Innovation Center (EIC).

[www.eeclust.de](http://www.eeclust.de)

„FORSCHEN in Jülich“ –  
jetzt auch als Tablet-Magazin!

[www.fz-juelich.de/app](http://www.fz-juelich.de/app)



iOS (iPad)



Android

### 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, Christian Hohlfeld  
**Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich, fotolia.com (Anterovium, Tanja Bagusat, S. 1/2 u.) **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: [info@fz-juelich.de](mailto:info@fz-juelich.de) **Druck:** Schloemer und Partner GmbH **Auflage:** 900

### TERMINE

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich  
 22. – 23. November 2012  
 am Jülich Supercomputing Centre

Neue Nutzer der Supercomputerressourcen am Forschungszentrum Jülich erhalten in dem Kurs einen Überblick über die Systeme und deren Verwendung. Unter anderem wird gezeigt, wie zugewiesene Rechnerressourcen optimal genutzt werden können.

**Dozenten:** Mitarbeiter des JSC sowie der Firmen IBM, Intel und ParTec

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/sc-nov](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/sc-nov)

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP  
 26. – 28. November 2012  
 am Jülich Supercomputing Centre

Der Kurs führt in die parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern auf dem Gebiet des technisch-wissenschaftlichen Rechnens ein. Vorgestellt werden die beiden gängigsten Programmiermodelle: OpenMP und Message Passing Interface (MPI).

**Dozent:** Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS Stuttgart

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/mpi](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/mpi)

Einführung in das Parallele Computing  
 12. Dezember 2012  
 am Jülich Supercomputing Centre

Die Teilnehmer lernen in dem Kurs die grundlegenden Konzepte, Methoden und Technologien von Hochleistungsrechnersystemen sowie die dafür zwingend notwendige parallele Programmierung kennen. Behandelt werden auch kommende Technologien und künftige Forschungsfragen.

**Dozent:** Dr. Bernd Mohr, JSC

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/parcomp](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/parcomp)

Workshop HYBRID2013  
 4. – 7. März 2013  
 am Jülich Supercomputing Centre

Der „Workshop on Hybrid Particle-Continuum Methods in Computational Materials Physics“ bringt Wissenschaftler der computerunterstützten Materialwissenschaften zusammen, die über komplexe Flüssigkeiten und Feststoffe forschen.

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/parcomp](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/parcomp)

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

[www.fz-juelich.de/ias/jsc/events](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events)