

Mithilfe von Satellitenaufnahmen haben Forscher beobachtet, wie sich Schwerewellen in der Atmosphäre ausbreiten. Auf der Infrarot-Aufnahme (kleines Bild) ist ein typisches konzentrisches Muster so einer Welle zu erkennen, das vom Zentrum eines Gewitters ausgeht. (Die dünnen hellen Linien sind Blitze, die großen hellen Punkte sind Städte).

## Das Wellenmeer am Himmel

Forscher verfolgen erstmals lückenlos den Weg von Schwerewellen

Wer hat als Kind nicht Steinchen ins Wasser geworfen und die sich ausbreitenden Wellen bestaunt? Etwas Ähnliches passiert auch in der Luft. Die Steinchen sind hier starke Gewitter, Tropenstürme oder sogar Vulkanausbrüche. Sie versetzen Luftteilchen der Erdatmosphäre in Schwingungen. Genau wie im Wasser entstehen Wellen, die sogenannten atmosphärischen Schwerewellen. Sie breiten sich in der Atmosphäre zur Seite und nach oben aus. Für Klimaforscher sind sie von besonderer Bedeutung, denn sie beeinflussen Wind, Temperatur und die chemische Zusammensetzung der mittleren und oberen Erdatmosphäre. „Beobachtungen von Schwerewellen helfen, globale Strömungsmuster der Atmosphäre besser zu verstehen und gezielter vorherzusagen“, sagt Dr. Lars Hoffmann, der das Simulation Laboratory (SimLab) Climate Science am Jülich Supercomputing Centre leitet.

### Zufallsfund in Satellitendaten

Ein internationales Forscherteam mit Jülicher Beteiligung konnte nun erstmals lückenlos messen, wie sich solche Wellen von der Anregung am

Boden bis zu ihrer Auflösung in rund 100 Kilometer Höhe ausbreiten. Die Wissenschaftler entdeckten die Wellen eher zufällig auf Infrarot-Aufnahmen von „Suomi-NPP“, einem neuen Umwelt-Satelliten der US-Raumfahrtbehörde NASA. Indem sie die Ergebnisse mit Aufnahmen des NASA-Satelliten „Aqua“ kombinierten, konnten sie den Weg der Wellen durch verschiedene Höhenschichten genau verfolgen. „Die Entdeckung in den Daten war ein unerwarteter Glücksfund, eigentlich standen nächtliche Wolkenformationen im Fokus“, erklärt Hoffmann, der gemeinsam mit Kollegen vom SimLab die „Aqua“-Daten im Hinblick auf klimarelevante Prozesse auf den Jülicher Supercomputern analysiert.

Ziel der Forscher ist es nun, die Entstehung und die Ausbreitung der Wellen kontinuierlich zu beobachten. Mit dem neuen Wissen wollen sie bestehende Klimamodelle überprüfen und verbessern.

► PNAS, DOI: [10.1073/pnas.1508084112](https://doi.org/10.1073/pnas.1508084112)

## STATEMENT



**Prof. Stefan Blügel**  
Institutsleiter PGI-1/IAS-1  
Wir entwickeln quantentheoretische Methoden für Supercomputer, um theoretische Konzepte wie die magnetischen Skyrmionen in Materialien zu realisieren. Mit den passenden Eigenschaften könnten daraus Speicher für die Informationstechnologie der Zukunft werden.  
> siehe auch Seite 3

# Neue Einblicke in die Entstehung schwerer Elemente

Erstmals Streuung von Heliumkernen im Innern von Sternen exakt simuliert

Sterne wie unsere Sonne sind gigantische, extrem heiÙe Schmelzöfen. In ihrem Innern fusionieren Atomkerne zu neuen Elementen. So verschmelzen etwa Heliumkerne zu den schwereren Elementen Kohlenstoff und Sauerstoff. Beide sind wichtige Bausteine für die Entstehung irdischen Lebens. Ein internationales Forscherteam hat nun eine neue Methode entwickelt, um diese Geburtsprozesse detailliert auf Supercomputern zu simulieren. Das Verfahren verringert den Rechenaufwand erheblich. Mithilfe des Jülicher Supercomputers JUQUEEN konnten die Forscher so erstmals die Streuung von zwei Heliumkernen, sogenannten Alphateilchen, von Grund auf berechnen.

Neues Verfahren verkürzt Rechenzeit

Die Simulation solcher Prozesse ist extrem rechenintensiv, selbst für heutige Supercomputer. Das liegt beispielsweise daran, dass alle Protonen und Neutronen eines Atomkerns miteinander wechselwirken. Bisherige Simulationen beschränkten sich daher auf Reaktionen, an denen nicht mehr als fünf Teilchen beteiligt sind. Mit einem Trick haben die deutschen und amerikanischen Wissenschaftler den Rechenaufwand verringert: Sie platzierten die beteiligten Protonen und Neutronen nicht frei im Raum, sondern auf einem virtuellen Gitter. „Der Zustand eines solchen Gitters lässt sich sehr effizient parallel mit einer großen Anzahl von Prozessoren berechnen“, sagt der Jülicher

Kernphysiker Prof. Dr. Ulf-G. Meißner, der an der Entwicklung der Methode mitgearbeitet hat. Wie gut ihr Verfahren funktioniert, zeigten die Forscher am Beispiel zweier Heliumkerne, die über insgesamt acht Teilchen verfügen. „Bislang hätte ein Supercomputer wie JUQUEEN dafür Jahrtausende benötigt, jetzt sind es nur noch Wochen“, so der Jülicher Wissenschaftler. Er und seine Kollegen erhoffen sich nun neue Erkenntnisse über die Bildung von Sauerstoff. Hier sind im Gegensatz zum Kohlenstoff noch viele grundlegende Fragen unbeantwortet.



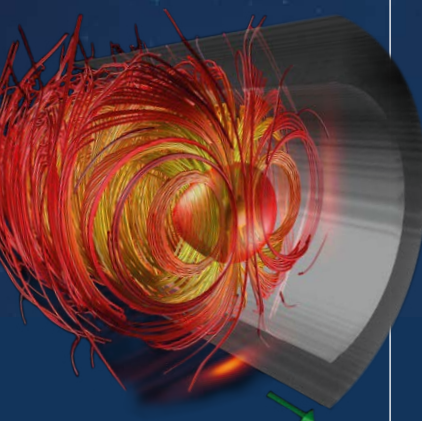
Auf JUQUEEN simuliert: Verschmelzung von zwei Heliumkernen, sogenannten Alphateilchen

## Teilchenbeschleunigung im Weltall

Das Weltall ist voller Phänomene, die wir bislang nur ansatzweise verstanden haben. Dazu gehören Magnetfelder und Schockwellen. Die Bochumer Plasmaphysikerin Dr. Anne Stockem Novo will mithilfe von Simulationen an Supercomputern herausfinden, wie Magnetfelder im Weltall erzeugt werden und wie sich Schockwellen und Magnetfelder gegenseitig beeinflussen. Die Arbeiten sind ein Gemeinschaftsprojekt von Physikern der Ruhr-Universität Bochum und des Instituto Superior Técnico in Lissabon, Portugal. Schockwellen sind eine Art wandernde Front aus elektrisch geladenen Teilchen. Sie entstehen, wenn die Teilchen durch Wechselwirkungen mit

elektromagnetischen Feldern abgelenkt werden. Einige Teilchen werden dann in der Schockwelle beschleunigt. Wie das genau funktioniert, versuchen Astrophysiker auf der ganzen Welt zu erforschen. Die deutsch-portugiesischen Partner haben auf dem Jülicher Superrechner JUQUEEN Teilchenströme simuliert, die selbst Magnetfelder erzeugen, und beobachteten anschließend die Wechselwirkungen. Hierfür musste JUQUEEN jedes Teilchen und dessen Veränderung mithilfe physikalischer Grundgleichungen einzeln berechnen. Die Magnetfelder erzeugten Turbulenzen und streuten die Teilchen in alle möglichen Richtungen. Dabei stieg die Dichte der Teilchen. „Das sind genau die Voraussetzungen dafür, dass Schockwellen entstehen“, sagt Anne Stockem Novo. Ihre Ergebnisse verglichen die Forscher mit Laborexperimenten. Beides stimmte gut überein. „Wir sind auf dem richtigen Weg“, so die Bochumer Physikerin. Weitere Simulationen sollen nun die Erkenntnisse vertiefen.

*Simulation eines Teilchenstrahls (rote Kugel in der Mitte) durch einen Plasma-Hohlraum: Die zahlreichen kreisförmigen Linien stellen das selbst generierte Magnetfeld dar, das den Flug des Teilchens beeinflusst.*



► Nature,  
DOI: 10.1038/nature16067

► Astrophysical Journal Letters,  
DOI: 10.1088/2041-8205/803/2/L29

# Die Geheimnisse der magnetischen Nanostrukturen

Die magnetischen Eigenschaften von winzigen Nanostrukturen sind für Physiker eine spannende, aber auch komplexe Herausforderung. Einerseits geht es darum, die grundlegenden physikalischen Effekte zu verstehen. Andererseits ergeben sich neue Ansätze für winzige energieeffiziente und schnelle Datenspeicher. Simulationen auf Jülicher Supercomputern helfen, Eigenschaften und Prozesse zu enträtseln.

## Millionenschwere Förderung

### Physiker Samir Lounis erhält Consolidator Grant

Um seine innovative Forschung über winzige Magnetstrukturen weiter auszubauen, hat Juniorprofessor Samir Lounis eine besondere Förderung erhalten. Der Europäische Forschungsrat (ERC) hat ihn mit einem Consolidator Grant ausgezeichnet. Damit verbunden sind Fördermittel in Höhe von rund 2 Millionen Euro. Die Mittel fließen in sein auf fünf Jahre angesetztes Vorhaben „Dynamical magnetic excitations with spin-orbit interaction in realistic nanostructures“ (DYNASORE). Darin beschäftigt sich der Physiker vom Forschungszentrum Jülich und der RWTH Aachen mit Magnetstrukturen wie den wirbelförmigen Skyrmionen. Diese Gebilde wurden erst vor wenigen Jahren entdeckt. Mit ihnen könnten sich künftig Daten mit sehr geringem Energieaufwand auf engstem Raum verarbeiten und speichern lassen. Jedoch sind die dynamischen Prozesse, die beim Entstehen und Löschen von Skyrmionen ablaufen, noch völlig unverstanden.

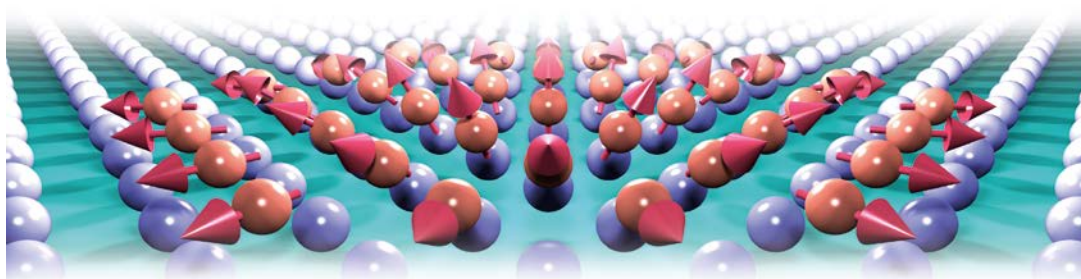
„Wir wollen die physikalischen Einflüsse entschlüsseln, die hierbei eine Rolle spielen“, erläutert Lounis. Dazu werden er und sein Team am Peter Grünberg Institut eine Jülicher Rechenmethode weiterentwickeln, die sogenannte KKR-Methode (Korringa-Kohn-Rostoker Green Function Method). Mit ihr soll es dann möglich sein, die Entstehung und Auslöschung von Skyrmionen in Strukturen aus bis zu mehreren Tausend Atomen zu beschreiben. Die Simulationenmethode fußt alleine auf den zugrunde liegenden Gesetzen der Physik und kommt ohne zusätzliche experimentell zu bestimmende Parameter aus. Solche Ab-initio-Rechenmethoden benötigen enorme Rechenkapazitäten und sind deshalb nur an Supercomputern möglich. Dabei profitiert Samir Lounis von der engen Kooperation mit dem Exascale Innovation Centre, einer Gemeinschaftseinrichtung von IBM und dem Forschungszentrum Jülich. Es optimiert das entsprechende Programm KKRnano für den Einsatz auf den Jülicher Supercomputern.



ERC-Grant-Gewinner  
Samir Lounis

► Neuer Magneteffekt  
erspürt Nanomagnetwirbel

Komplexe magnetische  
Struktur (rote Pfeile) eines  
Nanoclusters aus mehreren  
Tausend Atomen



## Schneller rechnen dank Filter

Der Physiker Prof. Alexander I. Lichtenstein von der Universität Hamburg untersucht mithilfe des Jülicher Supercomputers JUQUEEN die magnetischen Eigenschaften von kristallinen Festkörpern. Solche Festkörper setzen sich zumeist aus einer Vielzahl mikroskopisch kleiner Kristalle zusammen, deren Atome in einem regelmäßigen Gitter angeordnet sind. Das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) hat das Forschungsvorhaben „Continuous Time Quantum Monte Carlo for Materials“ des Hamburger Forschers als NIC-Exzellenzprojekt 2015 ausgezeichnet.

### Komplexe Festkörpersysteme

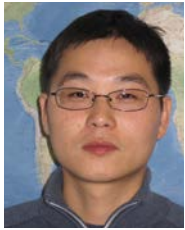
Lichtenstein interessiert sich besonders für Verbindungen mit Kobalt und Sauerstoff, mit Calcium-Titan-Oxid (Perovskite) sowie mit Eisen, beispielsweise

eisenbasierte Hochtemperatursupraleiter. Er will unter anderem herausfinden, unter welchen äußeren Bedingungen ein Material magnetisch ist und wie es sich unter dem Einfluss eines veränderlichen elektromagnetischen Feldes verhält. Allerdings sind die Festkörpersysteme, die er untersucht, sehr komplex. Das erschwert die theoretische Beschreibung erheblich. Eine exakte Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften würde selbst mit heutigen Supercomputern Millionen Jahre dauern. Quanten-Monte-Carlo-Simulationen verkürzen die Rechenzeit enorm, indem sie die wichtigsten Bereiche in einem statistischen Verfahren herausfiltern. Der Hamburger Festkörperphysiker und sein Team haben hierfür neue Quanten-Monte-Carlo-Methoden mitentwickelt, die nun auf JUQUEEN eingesetzt werden.

► NIC-Exzellenzprojekt  
2015: Continuous Time  
Quantum Monte Carlo for  
Materials

## KURZNACHRICHTEN

### Jung und ausgezeichnet



Die Internationale Union für reine und angewandte Physik (IUPAP) hat Dr. Wei-Min Wang den Preis für junge Wissenschaftler im Bereich Computerphysik 2015 verliehen. Der 35-jährige Wang, in den letzten beiden Jahren Alexander von Humboldt-Stipendiat am Jülich Supercomputing Centre (JSC), erhielt die Auszeichnung Anfang Dezember 2015 auf der IUPAP-Konferenz für Computerphysik in Guwahati, Indien. Wangs Spezialgebiet sind Simulationen und Modellierung in der Plasmaphysik. Gemeinsam mit JSC-Forscher Prof. Paul Gibbon sowie Wissenschaftlern aus China und Schottland entwickelte er 2015 ein neues Konzept für eine Terahertz-Quelle (siehe Exascale-Newsletter 2/2015). Für die Publikation der Ergebnisse erhielt er nun die Auszeichnung. Die Forscher hatten mithilfe aufwendiger Simulationen am Jülicher Supercomputer JUQUEEN gezeigt, wie sich Wellenlänge und Polarisation der Terahertz-Strahlung durch ein starkes äußeres Magnetfeld gezielt beeinflussen lassen. Terahertz-Strahlung zu erzeugen, gilt als

sehr schwierig. Nach Ablauf seines Stipendiums ist Wang an das Physik-Institut der Chinesischen Akademie der Wissenschaften in Peking zurückgekehrt.

► [mehr](#)

### NIC-Symposium 2016

Rund 200 Wissenschaftler haben Mitte Februar 2016 am 8. Symposium des John von Neumann-Instituts für Computing teilgenommen. Die Veranstaltung informierte mit Vorträgen und einer Posterausstellung über Fortschritte und Ergebnisse von Projekten, bei denen in den letzten zwei Jahren Jülicher Supercomputer genutzt wurden.

► [mehr](#)

### Blog zur SC17

Dr.-Ing. Bernd Mohr vom Jülich Supercomputing Centre wird 2017 als erster Nicht-Amerikaner die bedeutendste Konferenz für High-Performance Computing leiten, die Supercomputing Conference (SC) in den USA. In seinem Blog gewährt er Einblicke in Organisation und Vorbereitung der Konferenz.

► [mehr](#)

### DEEP auf der CeBIT

Das EU-Forschungsprojekt DEEP (Dynamical Exascale Entry Platform) präsentiert sich auf der diesjährigen CeBIT vom 14. bis 18. März 2016 in Hannover (Halle 6, Stand C30). Ausgestellt wird der GreenICE-Booster (Foto) des DEEP-Rechners. Das DEEP-System setzt auf das sogenannte Cluster-Booster-Konzept. Ein Booster aus hochparallelen, untereinander vernetzten Mehrkern-Prozessoren beschleunigt dabei wie eine Art Turbolader einen Cluster mit herkömmlichen Prozessoren. Der Prototyp wird am Jülich Supercomputing Centre betrieben (siehe Exascale-Newsletter 3/2015). Der GreenICE-Booster, eine Spezialentwicklung innerhalb des DEEP-Projekts, hat ein sehr effizientes Kühlsystem. Dabei befinden sich die elektronischen Baugruppen in einer speziellen Flüssigkeit, die bereits bei moderaten Temperaturen verdampft.

► [mehr](#)



### 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 oben: National Aeronautics and Space Administration (NASA), St. D. Miller, W.C. Straka III, J. Yue, St. M. Smith, M. J. Aleaxander, L. Hoffmann, M. Setvák, P. T. Partain (DOI: 10.1073/pnas.1508084112); S. 2 Hintergrund: © Fotolia.com und Forschungszentrum Jülich; S. 2 unten links: Instituto Superior Técnico/Paulo Alves; 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



## TERMINE

► **Introduction to Parallel In-Situ Visualization with VisIt**  
18.04.2016

am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Jens Henrik Göbbert, Dr. Herwig Zilken, JSC

► **Einführung in ParaView zur Visualisierung von wissenschaftlichen Daten**  
20.04.2016

am Jülich Supercomputing Centre  
Dozentin: Sonja Habbinga, JSC

► **GPU Programming with CUDA (Kurs der PRACE Advanced Training Centres PATC)**  
25.-27.04.2016

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

► **Node-Level Performance Engineering**  
28.-29.04.2016

am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Dr. Georg Hager, Prof. Gerhard Wellein, RRZE/HPC, Universität Erlangen

► **PRACEdays16**

10.-12.05.2016  
in Prag, Tschechische Republik

► **Einführung in die Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich**  
23.-24.05.2016

am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Firmenmitarbeiter von IBM, Intel und ParTec, Mitarbeiter des JSC

► **High-performance computing with Python**

(Kurs der PRACE Advanced Training Centres PATC)

13.-14.06.2016

am Jülich Supercomputing Centre  
Dozenten: Dr. Jan Meinke, Dr. Olav Zimmermann, JSC

► **Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre**