

Bestens für die Zukunft gerüstet

„Supercomputing ist mehr als die Jagd nach Rekorden, es hat den Rang einer Schlüsseltechnologie.“

Vor rund sieben Jahren fragte mich das Nachrichtenmagazin „Der Spiegel“, ob Deutschland den Wettlauf um die schnellsten Rechner der Welt aufgegeben habe. In meiner Antwort bat ich um Geduld. Auch wenn Deutschland anscheinend an Boden verloren hatte, wurden damals die notwendigen Weichen gestellt: national mit dem Gauss Centre for Supercomputing und europaweit mit dem Superrechnerverbund PRACE. Der Erfolg stellte sich bald ein: Bereits im Mai 2009 präsentierten wir mit JUGENE den ersten europäischen Petafloprechner. Sein Nachfolger JUQUEEN, der aktuell schnellste deutsche Rechner, kommt auf beinahe sechs Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde.

Supercomputing ist jedoch mehr als die Jagd nach Rekorden, es hat den Rang einer Schlüsseltechnologie. Simulationen am Supercomputer haben sich als eigenständige Methode etabliert und sind neben Theoriebildung und Experimenten zur dritten Säule für den Erkenntnisgewinn geworden. Mit ihnen lassen sich komplexe Zusammenhänge nachvollziehen und große Datenmengen bewältigen.

Gerade die Grundlagenforschung benötigt angemessene Ressourcen, um in wissenschaftliches Neuland vorzustoßen. In Jülich beschäftigen wir uns insbesondere mit Klima-, Material- und Hirnforschung sowie Biophysik. Aber auch Wissenschaftler anderer Einrichtungen erhalten wertvolle Rechenzeit, etwa um neue Erkenntnisse über die Geburt von Sternen und Galaxien zu erlangen.

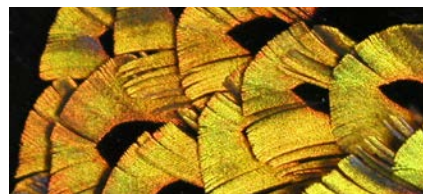
Im Juni endet nach acht Jahren meine Amtszeit als Vorstandsvorsitzender des Forschungszentrums Jülich. Ich wünsche dem Jülicher Supercomputing und seinen Partnern bei ihren Aktivitäten weiterhin viel Erfolg, etwa bei Gauss, PRACE sowie den Kooperationen mit NVIDIA, Intel und IBM. Wie es weitergeht mit der kommenden Exascale-Generation und dem Human Brain Project, darauf dürfen wir alle gespannt sein. Ihnen, liebe Leserinnen und Leser, danke ich für Ihr Interesse. Bleiben Sie Jülich in Neugier verbunden!

Prof. Achim Bachem
Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich

IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:

Der Tanz der Farben



SEITE 3:

Auch Kunst lässt sich rechnen



SEITE 4:

Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

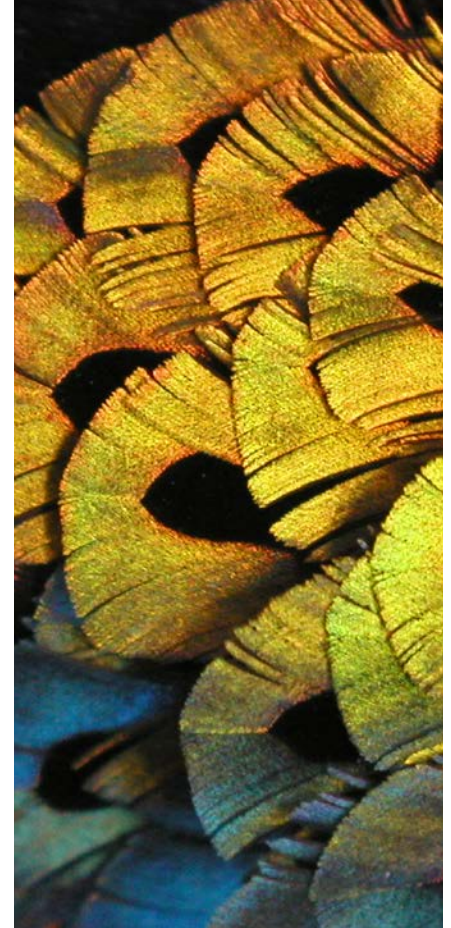
Der Tanz der Farben

Wenn Paradiesvögel ihr Balzspiel aufzuführen, ist Showtime angesagt. Die Männchen tanzen, singen und präsentieren dabei geschickt die Farbenpracht ihrer Federn, um die Weibchen zu betören. Biologen interessieren sich schon lange für das farbenfrohe Spektakel der Singvögel, die vor allem auf Papua-Neuguinea zu Hause sind. Forschern aus Jülich und Groningen ist es nun gelungen, die komplexen optischen Eigenschaften des Federkleids am Supercomputer der Universität Groningen zu simulieren.

Dafür haben sich die Physiker des Jülicher Supercomputing Centre (JSC) und ihre niederländischen Kollegen einen Vertreter besonders genau angesehen: den männlichen Blaanacken-Strahlenparadiesvogel (*Parotia lawesii*). Er führt auf dem sonnigen Waldboden, den er zuvor als Balzarena hergerichtet hat, ein besonders beeindruckendes Ritual auf. Während des Tanzes

PNAS, DOI: [10.1073/pnas.1323611111](https://doi.org/10.1073/pnas.1323611111)

stellt er seine bunten Brustfedern zur Schau, die mal orange, mal grün oder blau leuchten. Ursache für dieses Farbenspiel sind Reflexionen des Sonnenlichtes an winzigen Strukturen der Federn. Die Wissenschaftler wollten herausfinden, wie das genau funktioniert. Dazu bestimmten sie zunächst die optischen Eigenschaften einzelner Brust- und Nackenfedern mit einem besonderen Streulichtmessgerät. Anschließend entwickelten sie ein Computermodell, mit dem sie die Reflexionsmuster simulieren konnten. Die Ergebnisse waren nahezu identisch. „Die Reflexionen hängen stark vom Winkel des einfallenden Lichtes ab. Das beeindruckende Farbenspiel entsteht also erst durch den Tanz, bei dem die Federn unter ständig wechselndem Winkel beleuchtet werden“, erklärt Prof. Kristel Michielsen vom JSC. Ihr Modell könnte auch helfen, nanostrukturierte Materialien mit interessanten optischen Eigenschaften zu entwerfen, etwa für Sensoren und optische Kommunikationsgeräte.



Mit dem Farbenspiel ihrer Federn beeindruckten Paradiesvögel die Weibchen. Einem Forscherteam gelang es jetzt, die komplexen optischen Eigenschaften des Federkleids am Computer zu simulieren.

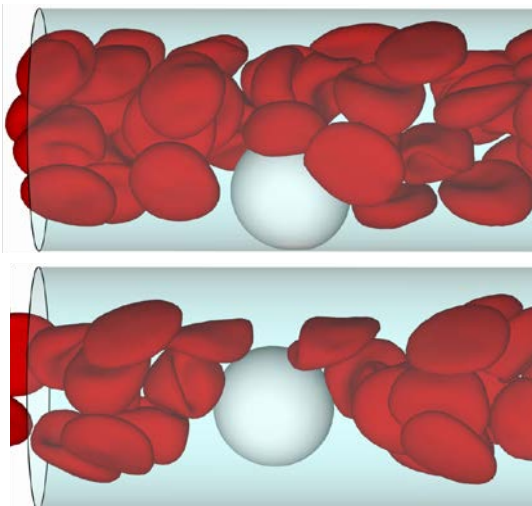
Was die Immunpolizei an den Rand drängt

Weißer Blutkörperchen sind die Polizisten unseres Immunsystems. Sie nutzen Arterien und Venen, um in sämtliche Winkel unseres Körpers zu gelangen. Das Problem: Diese weißen Blutzellen, auch Leukozyten genannt, verfügen über keinen eigenen Antrieb. Wenn sie ein Blutgefäß verlassen wollen, müssen sie passiv an die Gefäßwand gespült werden, um diese dann durchdringen zu

können. Welche Voraussetzungen dafür nötig sind, haben Jülicher Forscher dank Simulationen am Jülicher Supercomputer JUROPA herausgefunden.

Ist ein Gewebe von Krankheitserregern befallen, sendet es einen Botenstoff aus. Dieser veranlasst die kugelförmigen Leukozyten, ihre Form zu ändern, um durch enge Öffnungen in den Blutgefäßen an den Einsatz-

ort zu gelangen. Damit weiße Blutkörperchen überhaupt eine Gefäßwand erreichen, kommt es auf ihre Form und Größe, die Konzentration roter Blutkörperchen sowie die Fließgeschwindigkeit des Blutes an. „Mit Hilfe dreidimensionaler Computersimulationen konnten wir genau berechnen, was bei bestimmten Werten dieser Faktoren passiert“, erklärt der Physiker Dr. Dmitry Fedosov vom Institutsbereich Theorie der Weichen Materie und Biophysik. Eine mittlere Anzahl von roten Blutkörperchen und eine geringe Fließgeschwindigkeit drängen demnach eine weiße Blutzelle an den Rand. Ist dagegen die Zahl der roten Blutkörperchen zu niedrig und die Fließgeschwindigkeit zu hoch, schwimmt eine weiße Blutzelle im Strom mit und kann die Gefäßwand nicht erreichen. „Unsere Methode könnte auch für die Entwicklung neuer Technologien genutzt werden, etwa für die medizinische Diagnostik, zum Beispiel bei Malaria“, betont Institutsleiter Prof. Gerhard Gompper. Bei der Krankheit liegen oft nur wenige Erreger vor, die für einen zuverlässigen Nachweis abgetrennt und konzentriert werden müssen.



Simulationen der Jülicher Forscher und Standbilder daraus. Im Bild oben: Eine mittlere Anzahl von roten Blutkörperchen und eine geringe Fließgeschwindigkeit (von links) drängen die weiße Blutzellen wie gewünscht an den Rand der Blutgefäße.

Bild unten: Ist die Zahl der roten Blutkörperchen zu niedrig und die Fließgeschwindigkeit zu hoch, schwimmt die weiße Blutzelle im Teilchenstrom mit und kann die Gefäßwand nicht erreichen.

Soft Matter, DOI: [10.1039/C3SM52860J](https://doi.org/10.1039/C3SM52860J)



Auch Kunst lässt sich rechnen

Der Jülicher Supercomputer JUROPA eignet sich besonders gut für rechenintensive Datenanalysen, beispielsweise für Medizin, Biologie oder Klimaforschung. Anfang des Jahres hatte die Maschine jedoch eine ungewöhnliche Aufgabe zu erledigen: Kunstwerke rechnen.

Der international renommierte Künstler Thomas Ruff hatte das Jülich Supercomputing Centre (JSC) um Unterstützung gebeten, um Werke aus seiner neuen Serie „Fotogramme“ in größtmöglicher Qualität zu erzeugen. Fotogramme sind eigentlich fotografische Bilder in Schwarz-Weiß, die ohne Kamera in der Dunkelkammer entstehen. Dabei werden Gegenstände auf lichtempfindlichem Papier arrangiert und belichtet. Ruffs bunte Fotogramme entstehen jedoch komplett am Computer. Bei einer Größe von 2,20 Meter mal 1,64 Meter und mehr als neun Gigabyte Daten pro Bild stießen die Rechner des Künstlers allerdings an ihre Grenzen. „Für uns

war das eine gute Gelegenheit, um wichtige Charakteristiken für das Design des JUROPA-Nachfolgers zu bestimmen, etwa hinsichtlich der hohen Anforderungen an Datenhaltung, Datenraten und lokale Rechenleistung“, sagt JSC-Leiter Prof. Thomas Lippert, „und eine Chance, Menschen, die nicht zu unserer üblichen Klientel gehören, für High Performance Computing zu interessieren“.

JSC-Mitarbeiter passten die von Ruff verwendete Software an JUROPA an, optimierten den Rechenprozess und schufen die passende Messumgebung. Außerdem entwickelten sie ein neues Monitoring-Tool, das künftig allen Nutzern zur Verfügung steht. Das Ergebnis waren deutlich detailreichere Bilder, die nun allerdings mindestens 18 Terabyte groß waren. Für JUROPA dennoch kein Problem: 1.000 Knoten benötigten bis zu 15 Stunden für ein Bild, Ruffs Computer hätte dafür mehr als ein Jahr gebraucht.

Einige Fotogramme sind noch bis 24. August 2014 im Museum für zeitgenössische Kunst im belgischen Gent (S.M.A.K.) zu sehen.



Einer der international bekanntesten deutschen Künstler der Gegenwart: Thomas Ruff

Laser-Beschleuniger auf der Überholspur

Kompakte Laser-Plasma-Beschleuniger haben das Potenzial, klassische Teilchenbeschleuniger in immer mehr Bereichen zu ersetzen. Letztere werden in der naturwissenschaftlichen Grundlagenforschung eingesetzt oder in der Medizin, um Tumoren zu entfernen. Laserbasierte Systeme könnten darüber hinaus zukünftig als Quelle für polarisierte Teilchenstrahlen dienen, wie sie für hochpräzise kernphysikalische Experimente benötigt werden. Diese Vermutung legen erste Messungen nahe, die Jülicher und Düsseldorfer Wissenschaftler durchgeführt haben und die durch Simulationen am Jülicher Supercomputer JUROPA bestätigt wurden.

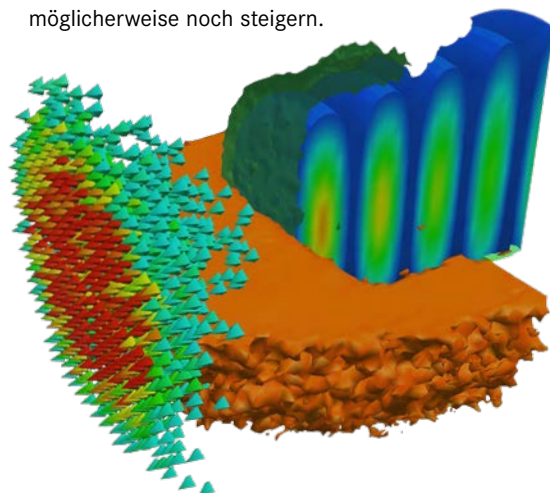
Laser-Beschleuniger können Teilchen bereits im Labormaßstab auf die notwendigen Geschwindigkeiten bringen. Der Aufwand für Anschaffung und Betrieb fällt somit deutlich geringer aus als für die großen und kostspieligen klassischen Geräte. Die Forschergruppe um den Jülicher

Prof. Markus Büscher will den Einsatz solcher Beschleuniger auch bei klassischen Physikexperimenten ermöglichen. Sie hat eine Methode entwickelt, mit der erstmals die Polarisation der Teilchen an Laser-Beschleunigern gemessen werden kann. „Dabei hat sich gezeigt, dass der sogenannte Spin oder Eigendrehimpuls der Protonen nicht entscheidend durch die starken elektromagnetischen Felder verändert wird, die innerhalb des vom Laser erzeugten Plasmas vorherr-

Prallt der Laserpuls (Ellipsen mit blauem Rand) auf eine dünne Folie (orange), lösen sich die Elektronen (bunte Partikel links) von den Atomkernen. Zwischen Atomrümpfen und Elektronenwolke bildet sich ein enorm starkes elektromagnetisches Feld, das Atomkerne auf kürzester Distanz beschleunigen kann.

Physics of Plasmas,
DOI: 10.1063/1.4865096

schen“, erklärt Büscher, der am Jülicher Peter Grünberg Institut sowie an der Düsseldorfer Heinrich-Heine-Universität tätig ist. Damit ist eine wichtige Voraussetzung erfüllt, um Laser zur Beschleunigung polarisierter Teilchen einzusetzen. Ob dies tatsächlich funktioniert, soll sich im Laufe des Jahres zeigen. Davon könnte eines Tages auch die Fusionsforschung profitieren, denn mit polarisierten Teilchen ließe sich die Energieausbeute von Fusionsreaktoren möglicherweise noch steigern.



KURZNACHRICHTEN

Offen für Innovationen

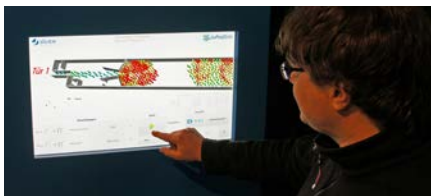
Das Forschungszentrum Jülich ist der OpenPOWER-Foundation beigetreten. Der 2013 gegründeten Allianz gehören Firmen wie IBM, Google und NVIDIA an. Sie setzt sich für die Verwendung offener Technologien rund um die Architektur der IBM-POWER-Prozessoren ein. Die derzeit 25 Mitglieder stellen Hardware und Software zur Verfügung, um Innovationen für Rechenzentren etwa für Hardware-Beschleunigung, Speicher- und Netzwerk-Lösungen zu ermöglichen. Davon soll auch die Entwicklung neuer Supercomputerarchitekturen profitieren, die auf den POWER-Prozessoren sowie Grafikprozessoren basieren. Hierfür bringt das Jülich Supercomputing Centre seine Expertise aus dem NVIDIA Application Lab und dem Exascale Innovation Center ein.

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2014/14-04-23OPF.html

Wissenschaft an Bord

Noch bis zum 28. September reist das Ausstellungsschiff „MS Wissenschaft“ durch Deutschland und Österreich – mit an Bord: die Ausstellung „Digital unterwegs“. Sie präsentiert, was Forscher über Nutzen und Chancen, aber auch über Risiken und Herausforderungen der digitalen Revolution durch Computer und Internet herausgefunden haben. Experten des Jülich Supercomputing Centre zeigen, wie Computersimulationen dazu beitragen können, gefährliche Situationen bei Großveranstaltungen zu vermeiden. Ausstellungsbesucher können am Rechner durchspielen, wie sich mehrere Hundert Menschen aus einem Raum in Sicherheit bringen können.

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2014/14-04-30ms-wissenschaft.html



Ungemütliches Zentrum

Heidelberger Astrophysiker haben mit Hilfe des Jülicher Supercomputers JUDGE neue Einblicke in die Entstehung von Sternen gewonnen. Offensichtlich läuft der Prozess im Zentrum der Milchstraße anders ab als in deren Randbereichen, etwa in der 25.000 Lichtjahre entfernten Umgebung unserer Sonne. Das liegt an den extremen Bedingungen im Zentrum. Ein Schwarzes Loch sowie sehr heiße oder explodierende Sterne sorgen für gewaltige sogenannte Strahlungswinde. Simulationen mit der JUDGE-Erweiterung „Milky Way“ ergaben, dass das Strahlungsfeld im Zentrum 1.000 Mal stärker sein muss als am Rand der Milchstraße. Dieses starke Feld heizt das für die Sternentstehung wichtige interstellare Gas auf. Die Wissenschaftler des Sonderforschungsbereichs 881 „Das Milchstraßensystem“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft vermuten, dass das den stellaren Entstehungsprozess beeinflusst.

DOI: 10.1088/2041-8205/768/2/L34
www.zah.uni-heidelberg.de/sfb881/

Jetzt auch für Smartphone und Tablet!

Exascale Newsletter
www.exascale-news.de

„Forschen in Jülich“ (als Tablet-Magazin)
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 **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1: Forschungszentrum Jülich, ©fotolia.com/Photobank/virtua73; S. 1 m. und S. 2 o.: Justin Marshall; S. 2 u. und S. 3 o. Forschungszentrum Jülich; S. 3 u. Jülich Supercomputing Centre; S. 4 o.: ©fotolia.com/virtua73; S. 4 u.: Ilja Hendel/Wissenschaft im Dialog **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700

TERMINE

Höchstleistungsrechnen mit Python

26. – 27. Juni 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Paralleles Programmieren mit Python, Performance-Optimierung mit verschiedenen Tools.

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

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

5. – 8. August 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern im technisch-wissenschaftlichen Umfeld, Trainingskurs im Rahmen des JSC-Gaststudentenprogramms.

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

Atomistische Monte-Carlo-Simulationen von biomolekularen Systemen

15. – 19. September 2014
am Jülich Supercomputing Centre

CECAM-Tutorium zur Open-Source-Software ProFASI, mit der Biomoleküle auf atomarer Ebene nach dem Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren simuliert werden können.

www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/cecam-mc-2014

Datenanalyse und Data-Mining mit Python

10. – 12. November 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Vorstellung von Analyse- und Auswertungsprogrammen für Python: matplotlib für Visualisierung, pandas für Zeitreihenanalyse und scikit-learn für Data-Mining.

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

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen

27. – 28. November 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Einführung für neue Nutzer, um beispielsweise bewilligte Rechnerressourcen optimal zu nutzen.

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

Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre:

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