

Dank einer bestimmten Kombination aus verschiedenen Polymeren lässt sich auch Wasser zur Schmierung von Gelenken und Scharnieren nutzen. Das zeigen Simulationen auf Jülicher Superrechnern. Wasser ist deutlich geschmeidiger als Öl und reduziert den Verschleiß.

Dressing lässt Maschinen länger leben

Ingenieure schauen etwas neidisch auf die Natur – denn die nutzt geschmeidiges Wasser als Schmiermittel und kein zähflüssiges Öl. Wissenschaftler aus Jülich und Twente haben mithilfe von Simulationen an Supercomputern nun eine Möglichkeit entwickelt, es der Natur gleichzutun. Dies könnte den Verschleiß von Maschinen stark reduzieren.

Kniegelenke, Pumpen, Kugellager – sowohl in der Natur als auch in der Technik treffen bewegliche Bauteile aufeinander. Ein Schmiermittel verhindert, dass die Teile aneinander scheuern und dadurch verschleiben. Die Natur verwendet hierfür eine wässrige Lösung, die Technik dagegen Öl. Prof. Martin Müser, Leiter der NIC-Arbeitsgruppe „Computational Materials Physics“ am Jülich Supercomputing Centre, erklärt, warum die Natur besser abschneidet: „Öl verursacht eine stärkere Reibung als Wasser. Und Reibung führt meist auch zu höherem Verschleiß.“

Forscher wollen der Natur schon lange nacheifern. Das Problem: Wasser wird verdrängt, wenn der Druck steigt. Öl dagegen versteift sich und bleibt an Ort und Stelle. Die Natur greift zu einem Trick. Auf den Knorpeln der Knie wachsen sogenannte Polymerbürsten. Das sind zu Ketten angeordnete Moleküle, die so geladen sind, dass sie Wasser anziehen. Ingenieure könnten ebenfalls Polymerbürsten nutzen – doch es gibt einen Haken: Die Bürsten verhaken sich

und nutzen sich ab. Im Knie wachsen sie nach, in Maschinen nicht.

Müser entwickelte eine Idee, die über den Ansatz der Natur hinausgeht. „Man kombiniert wasseranziehende sowie wasserabweisende Polymerbürsten und schmiert das Gerät mit einer Art Salatdressing – einer Wasser-Öl-Mischung. So bildet sich eine Schicht, die verhindert, dass sich die Polymerbürsten verhaken“, so der Physiker. Er und seine inzwischen an die Universität in Twente gewechselte Mitarbeiterin Sissi de Beer entwickelten daraus ein Modell, mit dem sie den Vorgang auf 100 Nanometer großen Flächen am Supercomputer simulieren konnten. Ihr Ansatz senkte den Abrieb durch das Schmiermittel um den Faktor 100. Dies konnte de Beer auch experimentell bestätigen. Für viele Maschinen bedeutet das die Aussicht auf ein längeres Leben.

Nature Communications,
DOI 10.1038/ncomms4781

IN DIESER AUSGABE

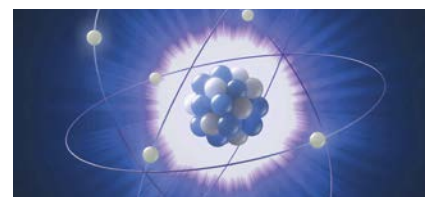
SEITE 2:

Ordnung im Chaos entdeckt



SEITE 3:

Einblicke in exotische Kerne



SEITE 4:

Kurznachrichten

Termine

Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

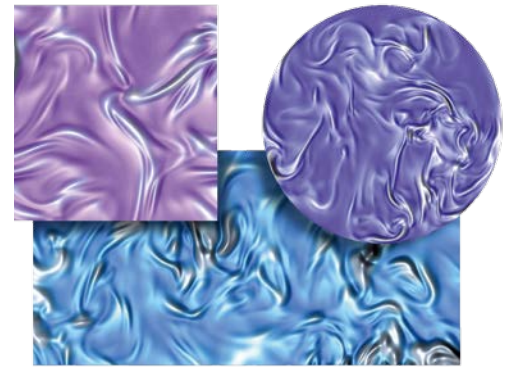
Ordnung im Chaos entdeckt

Turbulenzen geben Physikern nach wie vor Rätsel auf. Simulationen auf dem Jülicher Superrechner JUQUEEN haben die Forschung nun einen Schritt weitergebracht: Ein internationales Wissenschaftlerteam hat eine Gesetzmäßigkeit gefunden, mit der sich möglicherweise eine allgemeine Ordnung in den verschiedensten, scheinbar chaotischen turbulenten Strömungen in Natur und Technik nachweisen lässt.

Turbulenzen sind allgegenwärtig: ob bei Windböen, Düsentriebwerken oder beim Auflösen von Milch im morgendlichen Kaffee. Turbulent wird es, wenn Gase oder Flüssigkeiten sehr schnell strömen. Es entstehen fortlaufend neue Wirbel, die in kleinere Wirbel zerfallen. Die Forscher um Prof. Jörg Schumacher von der Technischen Universität Ilmenau haben aber gar nicht auf die Strömungswirbel in dieser sogenannten

Wirbelkaskade selbst geschaut. Sie konzentrierten sich auf sehr feine Scherschichten zwischen den Wirbeln. Bei Vergleich von drei sehr unterschiedlichen turbulenten Strömungen stellten die Wissenschaftler stets die gleichen statistischen Gesetze für die Fluktuationen in diesen feinen Schichten fest.

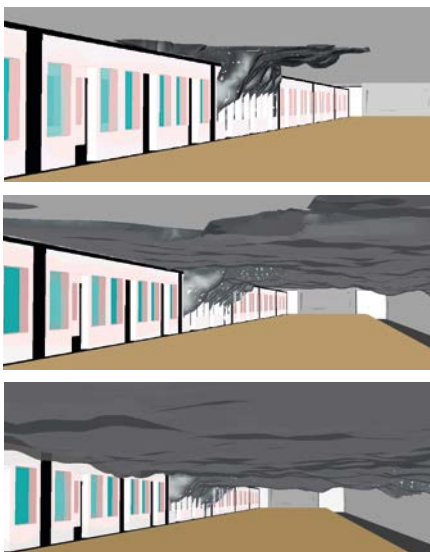
Der Ansatz der Forscher zeigt einen neuen Weg auf, die mehr als 70 Jahre alte Kolmogorov-Hypothese zur Universalität der Turbulenz zu bestätigen. Diese besagt, dass die zufällige Bewegung der mittelgroßen und kleineren Wirbel in einer ausgedehnten Wirbelkaskade immer den gleichen statistischen Gesetzen folgt. Die Simulation einer solchen ausgedehnten Strömungswirbelkaskade sprengt immer noch das Leistungsvermögen heutiger Supercomputer. „Diese fundamentale Hypothese der Turbulenz ist mit heute vorhandener Höchstleistungsrechenntechnik jedoch bereits



Im Wirrwarr der Wirbel gibt es Regeln – und zwar in den Scherschichten, dem Übergangsbereich zwischen zwei parallelen Strömungen.

entschlüsselbar, wenn man auf die richtigen physikalische Größen schaut – nämlich auf die Scherschichten statt die Strömungswirbel“, betont der Strömungsmechaniker Jörg Schumacher.

PNAS, DOI:10.1073/pnas.1410791111



Gefahr im Verzug: Brennt eine U-Bahn im Bahnhof oder Tunnel, kann der Rauch nicht ins Freie abziehen und füllt binnen Minuten die Gänge. Jülicher Forscher simulieren den Verlauf.

Dem Feuer einen Schritt voraus sein

Im Brandschutz werden Computersimulationen immer wichtiger. Experten vom Bereich „Zivile Sicherheit und Verkehr“ des Jülich Supercomputing Centre (JSC) arbeiten gemeinsam mit Kollegen der Universität Wuppertal daran, die Modellierung von Bränden zu verbessern. „Wir analysieren die Ausbreitung von Feuer und Rauch, beispielsweise in einfachen Gebäuden oder komplexen U-Bahnhöfen. Daraus leiten wir allgemeingültige Aussagen ab, die in die Weiterentwicklung von Computermodellen einfließen“, erklärt JSC-Wissenschaftler Dr. Lukas Arnold, der das Forscherteam seit 2012 leitet.

Ein Brand ist ein äußerst komplexer Prozess, bei dem viele Faktoren eine Rolle spielen: etwa Luftströmung und -temperatur, Art der brennbaren Materialien, aber auch Verbrennungsvorgänge und der sogenannte Wärmestrahlungstransport. „Bei einem Flüssigkeitsbrand sorgt die elektromagnetische Strahlung der Flamme dafür, dass die Flüssigkeit verdampft und weiteres brennbares Gas freigesetzt wird. Wird diese Art des Wärmetransports nicht berücksichtigt, würde das Feuer in der Simulation aufhören zu brennen“, betont der Physiker.

Um die Ausbreitung von Feuer und Rauch zu simulieren, setzen die Wissenschaftler auf die numerische Strömungsdynamik. Ihre Simulationen auf dem Jülicher Supercomputer JUROPA sind dabei wesentlich detaillierter als Anwendungen, die heute von Ingenieurbüros eingesetzt werden. Rechnungen dauern daher schon einmal mehrere Wochen auf Hunderten von Rechenkernen. Nur so können die Forscher herausfinden, welche Vorgänge wichtig sind und wie die numerische Auflösung sein muss. Bislang teilen Simulationen das Volumen eines Raumes in gleichgroße Untervolumina ein. Die Jülicher Forscher wollen ein Modell entwickeln, das die Auflösung dieser Volumina dynamisch anpasst: am Brandort sehr fein und in entfernteren Bereichen eher grob. Das würde die Rechenzeit deutlich verringern, ohne die Qualität zu reduzieren. Die Wissenschaftler denken aber schon weiter. Ihr Ziel: die Ausbreitung von Bränden in Echtzeit zu berechnen. „Bis dahin liegt allerdings noch viel Forschungsarbeit vor uns“, so Lukas Arnold.

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

Einblicke in exotische Kerne

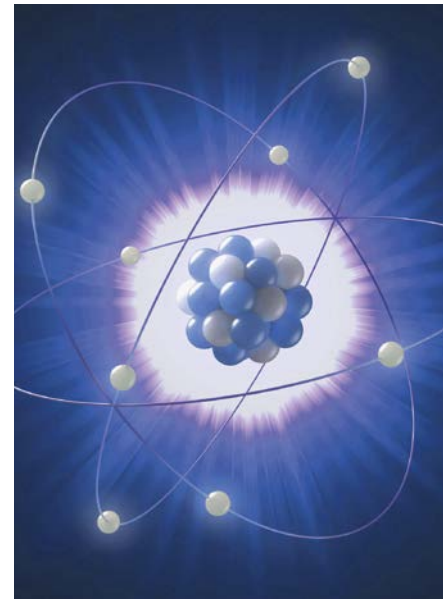
Extrem neutronenreiche Kerne spielen eine entscheidende Rolle bei der Erzeugung von Elementen im Universum. So entstehen beispielsweise Gold oder Blei, wenn Sterne am Ende ihres Lebens als Supernova explodieren. Prof. Achim Schwenk und sein Team von der Technischen Universität Darmstadt entwickeln neue Rechenmethoden zur Vorhersage von extrem neutronenreicher Materie in der Astrophysik und in exotischen Kernen. Sein Projekt „The Strong Interaction at Neutron-Rich Extremes“ hat das John von Neumann-Institut für Computing als „John von Neumann Exzellenzprojekt 2014“ ausgezeichnet. Damit steht den Darmstädter Forschern zusätzliche Rechenzeit am Jülicher Supercomputer JUROPA zur Verfügung.

Die Auszeichnung ermöglicht es den Kernphysikern, neue Vielteilchenmethoden voranzutreiben. „Die Kombination von JUROPA und moderner Kern- und Vielteilchenphysik wird wichtige neue Einblicke in die Starke Wechselwirkung in exotischen Kernen und in

Neutronensternen liefern“, betont Schwenk. Bislang wurde erst die Hälfte der Atomkerne entdeckt, die von der sogenannten Starke Wechselwirkung zusammengehalten werden. Die Mehrzahl der unbekannt exotischen Kerne sind extrem neutronenreiche Isotope, die nur für kurze Zeit oder unter neutronenreichen Bedingungen existieren. Isotope sind Atome, deren Atomkerne gleich viele Protonen, aber unterschiedlich viele Neutronen enthalten.

Die Darmstädter Forscher konnten bereits zeigen, dass Dreiteilchenkräfte zwischen Neutronen und Protonen essenziell sind für das Verständnis von neutronenreichen Isotopenketten. Erste Rechnungen mit Zwei- und Dreiteilchenkräften konnten die neutronenreichen Kalzium-Isotope beeindruckend vorhersagen.

www.john-von-neumann-institut.de/nic/exzellenz-2014



Bei exotischen Atomkernen handelt es sich oft um kurzlebige, extrem neutronenreiche Isotope. Die Darmstädter Forscher haben insbesondere Kalzium-Isotope untersucht.



Hervorragende Zukunftsstrategie

Seit Juli 2014 ist Prof. Wolfgang Marquardt Vorstandsvorsitzender des Forschungszentrums Jülich. Supercomputing ist kein unbekanntes Gebiet für den Verfahrenstechniker. Von 2011 bis 2014 war er Vorsitzender des Wissenschaftsrats, der in dieser Zeit jeweils ein Positionspapier zum Höchstleistungsrechnen und zu den Simulationswissenschaften veröffentlichte.

Prof. Marquardt, was waren die Kernaussagen der beiden Papiere?

Der Wissenschaftsrat hat immer wieder betont: In vielen Wissenschaftsfeldern kann Deutschland nur dann im Wettbewerb bestehen, wenn es über eine entsprechende Infrastruktur von Höchstleistungsrechnern verfügt. Hierfür hat sich eine nach Rechenleistung abgestufte Pyramide mit einer kleinen Zahl von Zentren an der Spitze bewährt. Allerdings ist ein nachhaltiges finanzielles Engagement von Bund und Ländern erforderlich, um den weiter wachsenden Bedarf zu decken. Empfohlen haben wir außerdem eine engere Abstimmung innerhalb Europas.

Jetzt stehen Sie selbst an der Spitze eines solchen Zentrums. Wie gut ist Jülich aufgestellt?

In den vergangenen Jahren wurde hier hervorragende Arbeit geleistet. Das haben uns gerade erst internationale Experten bestätigt, die im Auftrag der Helmholtz-Gemeinschaft den Bereich Supercomputing begutachtet haben. Nach ihrer Ansicht gehört Jülich zu den weltweit führenden Einrichtungen. Insbesondere bescheinigen sie eine hervorragende Zukunftsstrategie.

Wie sieht die aus?

Wir betreiben nicht nur Superrechner, sondern unterstützen unsere nationalen und internationalen Nutzer methodisch

und inhaltlich. Unsere Experten entwickeln Lösungen, durch die sich das Anwendungsspektrum stetig erweitert. Beispielhaft sind Simulationen in der Hirnforschung und in den Materialwissenschaften zu nennen. Daneben arbeiten wir mit unseren Industriepartnern in gemeinsamen Laboren intensiv am großen Ziel Exascale. Eine wichtige Rolle spielt zudem die Kooperation in deutschland- und europaweiten Netzwerken wie GAUSS und PRACE.

Prof. Marquardt, vielen Dank für das Interview.

KURZNACHRICHTEN

Einsatz in der Industrie

Die Siemens AG und das Forschungszentrum Jülich entwickeln gemeinsam das erfolgreiche Performance-Analyse-Werkzeug Scalasca weiter. Ziel ist es, Scalasca so zu erweitern, dass die Leistung paralleler Anwendungen in der Industrie besser gemessen und analysiert werden kann. Das Jülich Supercomputing Centre (JSC) hatte die Software ursprünglich für das Höchstleistungsrechnen (HPC) entwickelt. Industrielle Anwendungen basieren jedoch meistens nicht auf dem im HPC-Bereich üblichen Message Passing Interface (MPI), sondern auf anderen Programmiermodellen. Die Arbeiten sind Teil des Projekts „Runtime Analysis of Parallel applications for Industrial software Development“ (RAPID), an dem das Corporate Technology Multicore Expert Center der Siemens AG und das JSC beteiligt sind.

www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/Research/HPCTechnology/PerformanceAnalyse/RAPID/rapid.html

Exzellenter Nachwuchs

Dr. Armel Ulrich Kemloh Wagoum vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) hat den Exzellenzpreis 2014 des Forschungszentrums Jülich erhalten. Die Auszeichnung ist mit 5.000 Euro dotiert. Mit dem Preis ehrt das Forschungszentrum junge, international erfolgreiche Nachwuchswissenschaftler, die mit ihren Ideen entscheidende Impulse für die Forschung geben. Der 31-jährige Nachwuchswissenschaftler beschäftigt sich mit Fußgängersimulationen, um für mehr Sicherheit bei Großveranstaltungen zu sorgen. Die Auszeichnung erhielt er für seine an der Universität Wuppertal abgeschlossene Doktorarbeit, die größtenteils am JSC entstand. Darin untersuchte Kemloh, wie das Verhalten



von Menschenmassen am Computer simuliert werden kann. Seine Forschungen führt er als Mitarbeiter im JSC-Bereich „Civil Security and Traffic“ fort. Unter anderem arbeitet er an einem Modell, um Berechnungen der Fußgängerströme schneller als in Echtzeit zu erstellen.

www.fz-juelich.de/SharedDocs/Pressemitteilungen/UK/DE/2014/14-06-14exzellenz-preis.html

Enger abstimmen

Vier große europäische Supercomputer-Zentren bündeln ihre Aktivitäten bei der Umsetzung der europäischen High-Performance-Computing-(HPC)-Strategie. Das haben das Barcelona Supercomputing Center (Spanien), das Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (Frankreich), das Consorzio interuniversitario per il calcolo automatico (Italien) und das Jülich Supercomputing Centre bei einem Treffen in Barcelona Ende Mai vereinbart. In der gemeinsamen Erklärung machen sich die vier Einrichtungen für eine engere Abstimmung bei Forschung, Entwicklung und Innovation stark. Ziel ist eine europäische HPC-Flagship-Industrie, die alle wichtigen HPC-Bereiche abdeckt.

http://www.fz-juelich.de/portal/DE/Presse/Kurznachrichten/2014/2014_06.html#doc1481324bodyText1

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 Schlöber, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1: Forschungszentrum Jülich, ©agsandrew/fotolia.com; S. 1 m. und S. 2 o.: TU Ilmenau; S. 1 u. und S. 3 o. ©ktsdesign/fotolia.com; S. 2 unten ©Pixel&Création/fotolia.com; S. 2 m., S. 3 u. und S. 4 u. Forschungszentrum Jülich; **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700

TERMINE

Datenanalyse und Data-Mining mit Python

17.-19. November 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Die Programmiersprache Python bietet die Möglichkeit, Daten einfach und effizient zu analysieren. Der Kurs gibt einen Überblick und stellt hilfreiche Analyse- und Auswertungsprogramme für Python vor: Matplotlib für Visualisierung, Pandas für Zeitreihenanalyse und Scikit-learn für Data-Mining. Kurssprache ist Englisch.

Dozenten: Dr. Jan Meinke, Dr. Olav Zimmermann, JSC

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

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich

27.-28. November 2014
am Jülich Supercomputing Centre

In dem englischsprachigen Kurs erhalten Nutzer einen Überblick über die Supercomputerressourcen am Forschungszentrum Jülich und deren Verwendung. Unter anderem wird gezeigt, wie zugewiesene Rechnerressourcen optimal genutzt werden.

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

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

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

1.-3. Dezember 2014
am Jülich Supercomputing Centre

Der Trainingskurs führt in die Parallelverarbeitung auf dem Gebiet des technisch-wissenschaftlichen Rechnens ein. Im Mittelpunkt steht die Verwendung des Message Passing Interface (MPI), des gängigsten Programmiermodells für Systeme mit verteiltem Speicher. Ein weiteres Thema ist OpenMP, das auf Systemen mit gemeinsamem Speicher zum Einsatz kommt. Ebenfalls behandelt werden neueste Methoden aus MPI-3.0, die für eine effiziente Nutzung heutiger Rechnerarchitekturen im Höchstleistungsrechnen entwickelt wurden.

Dozent: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS Stuttgart

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

Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre:

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