

## Neue Impulse für eine Erfolgsgeschichte

Europa holt auf im weltweiten Wettlauf des Höchstleistungsrechnens. Noch vor 2020 will es mit einem Rechner der Exascale-Klasse die Führung übernehmen. Dafür soll auf Empfehlung der EESI (siehe S. 4) über eine Milliarde Euro investiert werden, das ist doppelt so viel, wie bisher geplant. Simulationen auf immer besseren Supercomputern sind unverzichtbar für die Automobilindustrie, Luftfahrt oder das Gesundheitswesen. Sie können den Unterschied ausmachen zwischen Leben und Tod, Bankrott oder neuen Arbeitsplätzen.

Auch für den wissenschaftlichen Erfolg ist die Qualität der Simulationen ein wesentlicher Faktor. Das zeigte sich zuletzt bei zwei Jubiläen am Forschungszentrum Jülich. Computational Science hat dort eine lange Tradition. Die Anfänge gehen zurück ins Jahr 1961. Damals, vor 50 Jahren, wurde das Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM) gegründet. 2007 bekam es seinen heutigen Namen: Jülich Supercomputing Centre (JSC).

Schon Ende der sechziger Jahre standen Forschern in Jülich leistungsfähige Großrechner zur Verfügung. Als deren Rechenleistung an ihre Grenzen stieß, folgte 1983 der Einstieg ins Supercomputing. Der Rech-

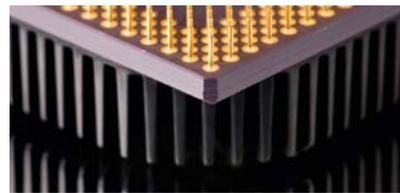
ner CRAY X-MP/22 war das erste Cray-Mehrprozessorsystem außerhalb der USA. Vier Jahre später folgte der nächste Meilenstein: die Gründung des ersten nationalen Supercomputing-Zentrums in Jülich, das heutige John von Neumann-Institut für Computing (NIC), das im Februar 2012 sein 25-jähriges Bestehen feierte.

In diesem Zeitraum entwickelte sich Jülich zum führenden Zentrum für Supercomputing in Europa. Der Jülicher Höchstleistungsrechner JUGENE durchbrach 2009 als erster europäischer Supercomputer die Marke von einem PetaFlop. Mit seiner Hilfe konnte erstmals die Masse des Protons, ein Bestandteil des Atomkerns, von der grundlegenden Theorie ausgehend berechnet werden. Rund 250 wegweisende Projekte laufen derzeit an den Supercomputern JUGENE und JUROPA. Und die Vorbereitungen für Exascale haben bereits begonnen. Zusammen mit strategischen Partnern wie Intel und IBM arbeiten wir heute schon an den Rechnern der nächsten Generation.

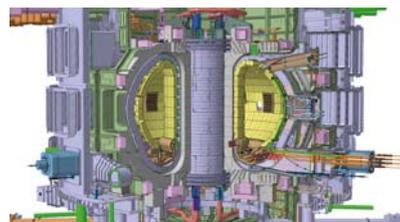
Prof. Achim Bachem  
Vorstandsvorsitzender  
des Forschungszentrums Jülich

## IN DIESER AUSGABE

SEITE 2:  
Gemeinsam die Entwicklung beschleunigen  
Strom sparen wie die Kleinen



SEITE 3:  
Eine extrem heiße Fusion  
Die Masse macht es



SEITE 4:  
Kurznachrichten  
Termine  
Impressum

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

## Gemeinsam die Entwicklung beschleunigen

Intel-Topmanager Stephen Pawlowski sprach Mitte Februar 2012 in Jülich darüber, wie die Forschung den Durchbruch zu Exascale schaffen will. Sein Vortrag war zugleich der Auftakt der neuen Veranstaltungsreihe „Jülich Lectures“.

Supercomputer auf Basis von Intel-Prozessoren belegen 77 Prozent aller Einträge

der jüngsten Liste der 500 schnellsten Höchstleistungsrechner der Welt. Entsprechend ist der Halbleiterhersteller ein wichtiger Partner für das Forschungszentrum Jülich auf dem Weg in die ExaFlop-Ära. Im ExaCluster Laboratory (ECL) schaffen Intel und das Jülich Supercomputing Centre (JSC) gemeinsam mit der Software-Firma ParTec die Voraussetzungen für künftige Clustertechnik. Es gibt vier dieser Intel-Labs in Europa: in Jülich, in Paris, im belgischen Leuven und in Barcelona. Das ECL entwickelt sowohl Betriebssysteme als auch Softwarewerkzeuge und Simulationssoftware. „Co-Design mit Intel hilft uns, die Entwicklung Exascale-fähiger Cluster-Architekturen in unserem Sinne zu beschleunigen“, sagt Prof. Thomas Lippert, Leiter des JSC.

Wie sehen die Computerchips der Zukunft aus? Stephen Pawlowski, Intel, sprach bei der ersten „Jülich Lecture“ am Forschungszentrum.

Aus Sicht von Stephen Pawlowski, Senior Fellow und General Manager, Datacenter and Connected Systems Pathfinding, Intel, gibt es fünf wesentliche Aufgabenfelder für die Forschung: Stromverbrauch beziehungsweise Energieeffizienz, Parallelisierung von Anwendungen, Zuverlässigkeit, Speicher-/Storage-Kapazität und Bandbreite. Daran wird beispielsweise im EU-Projekt DEEP (Dynamical ExaScale Entry Platform) gearbeitet. Jülicher Wissenschaftler haben für DEEP eine neuartige „Cluster Booster Architektur“ konzipiert. Ein wichtiges Element darin sind noch in der Entwicklung befindliche, speziell für das Parallelrechnen ausgelegte Prozessoren, die Intel® Many Integrated Core Architektur (MIC).

[www.fz-juelich.de/1stjuelichlecture](http://www.fz-juelich.de/1stjuelichlecture)

## Strom sparen wie die Kleinen

Beim Bau eines Supercomputers von Handy und iPad lernen? Genau das wollen Jülicher Wissenschaftler in dem mit acht Millionen Euro geförderten EU-Projekt Mont-Blanc, das vom Barcelona Supercomputing Center (BSC) geleitet wird. Gemeinsam mit Partnern aus Forschung und Industrie entwickeln sie einen Vorläufer für einen Supercomputer der nächsten Generation, der nicht nur eine Trillion Rechenoperationen pro Sekunde ausführen kann, sondern auch 15- bis 30-mal weniger Strom verbraucht als heutige Superrechner. Hierbei setzen die Wissenschaftler auf stromsparende Standardkomponenten, wie sie heute in mobilen Geräten eingesetzt werden. „Beim Design eingebetteter Systeme, etwa Handys oder iPads, lag der Fokus schon immer auf der Energieeffizienz“, erläutert Thomas Fieseler, Koordinator der Mont-Blanc-Aktivitäten am Jülich Supercomputing Centre (JSC).

Basierend auf energiesparenden Prozessoren der Firma ARM, des Weltmarktführers bei eingebetteten Hochleistungsprozessoren, entwickeln die Partner zunächst die Architektur für einen voll funktionsfähigen, energieeffizienten Prototypen. Dieser wird nach einer Testphase weiter ausgebaut und für wissenschaftliche Anwendungen optimiert. Das Forschungszentrum Jülich stellt Performance-Analyse-Tools zur Verfügung und steuert verschiedene Anwendungen bei, darunter Simulationen von Teilchenkollisionen und Software zur Faltung von Proteinen.

Jülich ist damit an zwei von drei großen Exascale-Projekten der EU beteiligt. Neben Mont-Blanc gehört dazu auch das von Jülich koordinierte Projekt DEEP (Dynamical Exascale Entry Platform, siehe EXASCALE-Newsletter 3/2011).

Vorbild in Sachen Energieeffizienz: mobile Geräte wie das iPad.



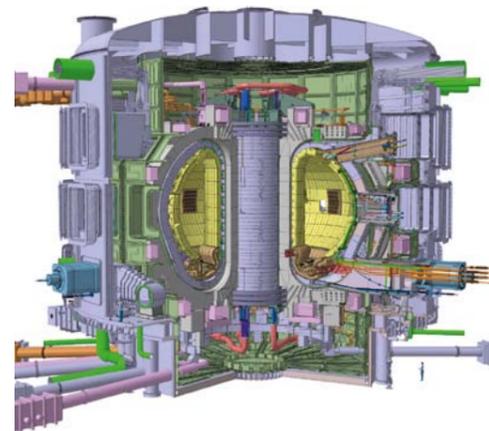
[www.montblanc-project.eu](http://www.montblanc-project.eu)

## Eine extrem heiße Fusion

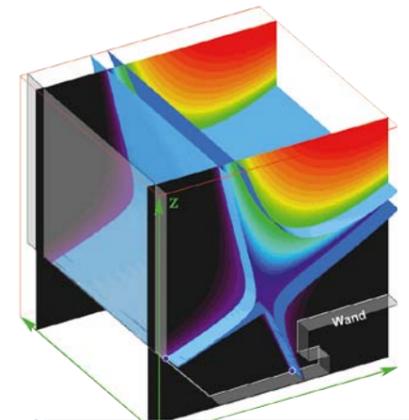
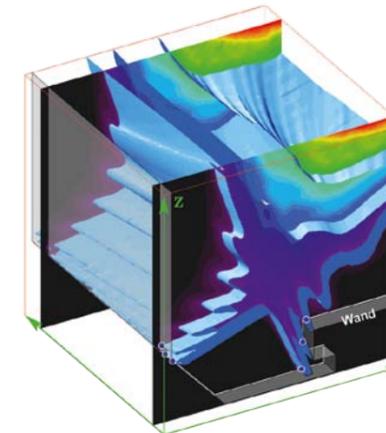
Fusionsreaktoren gelten als eine umweltschonende und nachhaltige Lösung für die Energieversorgung der Zukunft. Die technischen und wissenschaftlichen Hürden sind jedoch hoch. Computersimulationen könnten ein Weg sein, Forschung und Entwicklung voranzutreiben. Doch bislang sind die Berechnungen zu teuer, die aktuellen Supercomputer dem Rechenaufwand nicht

gewachsen. „Um wichtige Aussagen für künftige Fusionskraftwerke machen zu können, sind Simulationen auf Exascale-Level notwendig“, erklärt Dr. Paul Gibbon, Leiter der Abteilung Computational Science am Jülich Supercomputing Centre (JSC). Die dazu benötigten Superrechner werden voraussichtlich um das Jahr 2020 herum fertig entwickelt sein. Das Projekt Nuclear Fusion Simulations at Exascale (Nu-FuSE) bereitet sich schon heute auf solche zukünftigen Simulationen vor, um einen virtuellen Fusionsreaktor aufzubauen. Die internationale Allianz von Supercomputing und Fusionsforschung wird gemeinsam durch die G8-Staaten finanziert, die acht größten Industrienationen der Welt.

Ein Fusionsreaktor wandelt die Energie, die bei einer kontrollierten Fusion von zwei Atomkernen frei wird, in elektrischen Strom um. Dazu muss ein Plasma erzeugt werden, also der vierte Aggregatzustand eines Stoffes nach fest, flüssig und gasförmig. Um die beabsichtigte Kernfusion zu erzeugen, wird Plasma auf hundert Millionen Grad Celsius erhitzt. Entsprechend stabil und langlebig muss das Wandmaterial eines Reaktors sein. Jülicher Wissenschaftler erforschen solches Material an speziellen Testanlagen wie zum Beispiel dem TEXTOR in Jülich.



2-D-(rechts) und 3-D-Simulation (links) der Plasmatemperaturen nahe der Innenwand einer Fusionsanlage (oben). Die Temperaturen nehmen von Rot über Grün nach Hellblau ab.



[www.nu-fuse.com](http://www.nu-fuse.com)

## Die Masse macht es

Leichte Quarks sind die kleinsten Bausteine des Atomkerns. Ein internationales Team unter Federführung des Forschungszentrums Jülich und der Universität Wuppertal hat ein Rätsel dieser fundamentalen Bestandteile aller Materie gelöst: Unter realistischen physikalischen Bedingungen bildeten sie mit Hilfe des Jülicher Supercomputers JUGENE ein Stückchen Kernmaterie nach und berechneten daraus die Masse der leichten Quarks mit bislang unerreichter Präzision.

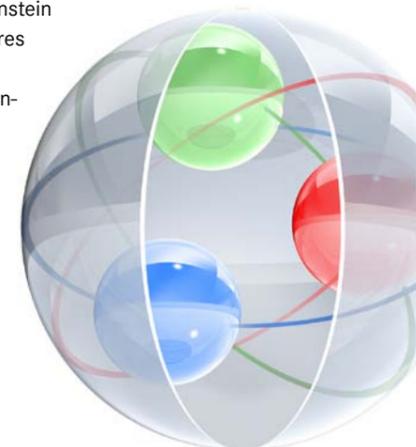
Eine wichtige Erkenntnis, Quarkmassen bestimmen etwa, welche Atomkerne stabil sind und welche nicht, – und sind deshalb ein entscheidender Faktor für die Existenz der uns bekannten Welt. Bereits 2008 hatte

JUGENE der Wissenschaft zu einem Durchbruch verholfen. Ein internationales Team berechnete damals die Massen von Protonen und Neutronen.

Die Masse der leichten Quarks zu berechnen gilt als sehr komplex wegen des Einflusses der sogenannten „starken Kraft“. Diese Wechselwirkung sorgt dafür, dass sich Quarks zu Protonen, Neutronen und schließlich zu Atomkernen verbinden. Ihre theoretische Beschreibung nennen die Physiker Quantenchromodynamik. „Über 30 Jahre nachdem der spätere Nobelpreisträger

Elementare Teilchen: Die Bestandteile eines jeden Atomkerns setzten sich aus genau drei Quarks zusammen.

Kenneth Wilson sie niedergeschrieben hat, ist es nun erstmals gelungen, seine Formulierung der Theorie mit realistischen Parametern zu simulieren“, erklärt Dr. Stefan Krieg vom Jülich Supercomputing Centre. Die Forschergruppe hat damit einen Meilenstein für ein tieferes Verständnis aller Teilchenmassen gesetzt.



Dürr et al., Lattice QCD at the physical point: Light quark masses, Physics Letters B, 701 (2011) 2, 265-268; DOI: 10.1016/j.physletb.2011.05.053

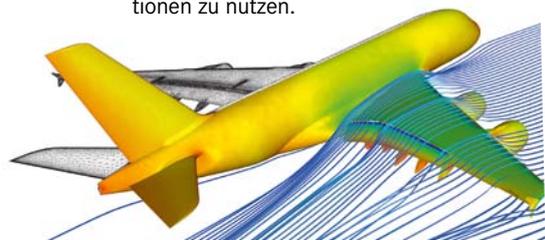
## KURZNACHRICHTEN

## Fernziel „digitales Flugzeug“

Ein komplett am Rechner entwickeltes und erprobtes Fluggerät – das ist die gemeinsame Vision des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) und des Jülich Supercomputing Centre (JSC). Doktoranden beider Einrichtungen wollen gemeinsam Simulationstechniken entwickeln, um ein solches „digitales Flugzeug“ auf Supercomputern strömungsmechanisch zu erforschen. Ein erster Austausch fand bei einem Seminar Ende November 2011 in Jülich statt.

Die numerische Simulation ist eine tragende Säule der modernen Luft- und Raumfahrtforschung. Im DLR entwickelte Verfahren sind Standardwerkzeuge der europäischen Luftfahrtindustrie, das volle Potenzial der Systeme ist jedoch längst nicht ausgeschöpft.

Die interdisziplinäre Kooperation zwischen DLR und JSC ermöglicht es den Forschern, die Ressourcen in Jülich und im „Center for Computer Applications in AeroSpace Science and Engineering“ (C<sup>2</sup>A<sup>2</sup>S<sup>2</sup>E) des DLR und des Flugzeugbauers Airbus zielgerichtet für große Simulationen zu nutzen.



## „Hermes“ blickt voraus

Ob in Fußballstadien, Bahnhöfen oder öffentlichen Gebäuden: Großveranstaltungen bergen immer die Gefahr einer Massenpanik oder anderer lebensbedrohlicher Situationen. Der vom Forschungszentrum Jülich mitentwickelte Evakuierungsassistent „Hermes“ soll helfen, solche Gefahren frühzeitig zu erkennen und optimale Fluchtwege zu finden. Im September 2011 zeigte „Hermes“ nach dreijähriger Projektlaufzeit, was in ihm steckt: In der Düsseldorfer ESPRIT Arena erfasste das System während des Fußballspiels der

heimischen Fortuna gegen Energie Cottbus jeden Schritt der Besucher in einem Teil des Stadions. Die Aufnahmen der 120 Kameras – aus Datenschutzgründen nur Zählwerte und Bewegungsmuster – wurden sofort ausgewertet. Damit simulierten die Wissenschaftler auf einem Parallelrechner mit 208 Prozessoren den weiteren Verlauf der Personenverteilung – und zwar 15 Minuten im Voraus. So bleibt im Ernstfall genug Zeit, Rettungskräfte zu mobilisieren und die Menschen zu Fluchtwegen zu leiten.

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

## Empfehlungen der EESI

Seit Juni 2010 diskutieren Experten der European Exascale Software Initiative (EESI) über technische Voraussetzungen und mögliche Strategien für die künftigen Exascale-Systeme. Im Oktober 2011 wurden auf der EESI Final Conference in Barcelona erste Ergebnisse vorgestellt. Zusammen mit PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), Planet HPC und IESP (International Exascale Software Project) wurden Empfehlungen erarbeitet, wie die Systeme bis 2020 in Europa implementiert werden können. „Für dieses Ziel ist ein nachhaltiges, langfristiges, EU-weit koordiniertes Vorgehen notwendig. Der richtige Weg wäre ein umfassendes, rund 3,5 Milliarden schweres Forschungs- und Entwicklungsprogramm, das alle Bereiche von Hardware über Software bis zu wissenschaftlichen Anwendungen bündelt“, erläutert Dr.-Ing. Bernd Mohr vom JSC die entscheidende Botschaft der 120 Experten.

Die ausführlichen Empfehlungen der Expertengruppen sind auf der Webseite <http://www.eesi-project.eu> im Bereich „Publications“ unter „Working group reports“ zu finden. [www.eesi-project.eu](http://www.eesi-project.eu)

### 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 (Trio MedienService) **Text:** Ursula Resch-Esser, Eva-Maria Levermann **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich, Iter (S. 3 o. li.), DLR (S. 4), fotolia.com (Konstantin Milenin, Cliparea.com, S. 2) **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:** 700

## TERMINE

Winterschule „Hierarchical Methods for Dynamics in Complex Molecular Systems“

5. – 9. März 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Fortschritte im Supercomputing eröffnen auch der molekularen Simulation neue Möglichkeiten. Zu den großen Herausforderungen zählt, die Dynamik von molekularen Systemen zu simulieren und zu analysieren. Die Winterschule stellt geeignete hierarchische Methoden vor, mit denen beispielsweise der Blutfluss auf Zellebene simuliert werden kann.

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

GPU Programming

19. – 21. März 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Die Teilnehmer lernen CUDA, OpenCL und Multi-GPU-Programmierung kennen. Themen sind unter anderem Optimierung und Tuning von wissenschaftlichen Anwendungen.

**Dozenten:** Dr. Jan Meinke, Jochen Kreutz, Willi Homberg, JSC; Suraj Prabhakaran, GRS; Kevin Drzycimski, FH Aachen

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

Paralleles I/O und portable Datenformate

28. – 30. März 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Die Verarbeitung größerer Datenmengen auf Parallelrechnern kann zu einem Engpass werden. Bei Simulationen auf unterschiedlichen Systemen spielt zudem die Portabilität von Datenformaten eine wichtige Rolle. Der Kurs stellt plattformunabhängige Formate wie HDF5 und netCDF vor.

**Dozenten:** Wolfgang Frings, Dr. Michael Stephan, Dr. Florian Janetzko, JSC

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

Programmierung und Nutzung der Supercomputerressourcen in Jülich

21. – 22. Mai 2012

am Jülich Supercomputing Centre

Der Kurs gibt einen Überblick über die Supercomputerressourcen am Forschungszentrum Jülich und zeigt, 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](http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/sc)

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)