

Ein unverzichtbares Werkzeug

Vor rund 20 Jahren war die Bedeutung von Computersimulationen für die Wissenschaft noch kaum abzusehen. 1994 schrieb etwa die Wochenzeitung „Die Zeit“: „Das wissenschaftliche Rechnen ist eine junge, interdisziplinäre Forschungsrichtung, die ihren Platz zwischen den einzelnen Naturwissenschaften und ihre Rolle zwischen Experiment und Theorie noch finden muss.“ Heute besteht kein Zweifel mehr. Simulationen auf Superrechnern sind ein unverzichtbares Werkzeug für Forschung und Entwicklung, wie auch aktuelle Beispiele in dieser Ausgabe zeigen.

In den Biowissenschaften berechnen Wissenschaftler mit Supercomputern komplexe Vorgänge wie die Proteinfaltung. Der Prozess ist für praktisch alle lebenswichtigen Zellfunktionen relevant (siehe S. 3). Die Erkenntnisse helfen uns, Krankheiten wie Alzheimer zu enträtseln, bei denen falsch gefaltete Proteine eine wichtige Rolle spielen. Simulationen führen auch zu tieferen Einsichten in biochemische Prozesse, die durch Experimente allein nicht möglich wären. Sie ermöglichen es Wissenschaftlern beispielsweise, Biosensoren weiterzuentwickeln (siehe S. 2). In der Materialfor-

schung sind Simulationen ebenfalls unerlässlich, um etwa neue Komponenten für die Informationstechnologie von morgen zu entwickeln (siehe S. 3).

Gegenüber diesen traditionellen Anwendungsgebieten sind die Neurowissenschaften eine vergleichsweise junge Disziplin für das Hochleistungsrechnen. Gehirnmodelle und Netzwerksimulationen werden zusehends komplexer, die Datenmengen damit immer umfangreicher. Mit der neuen Abteilung „High Performance Computing in Neuroscience“ am Jülich Supercomputing Centre tragen wir dieser Entwicklung Rechnung (siehe S. 4). Sowohl im Supercomputing als auch in den Neurowissenschaften verfügt Jülich über eine hohe Expertise. Die Ergebnisse und Anforderungen, die durch die Arbeiten in den Neurowissenschaften entstehen, werden mit Sicherheit die Entwicklung künftiger Supercomputergenerationen beeinflussen.

Prof. Achim Bachem
Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich

IN DIESER AUSGABE

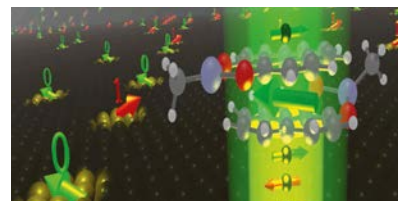
SEITE 2:

Wie Biosensoren Signale produzieren
Fit für Exascale



SEITE 3:

Ein magnetisches Sandwich
Das Leben verstehen



SEITE 4:

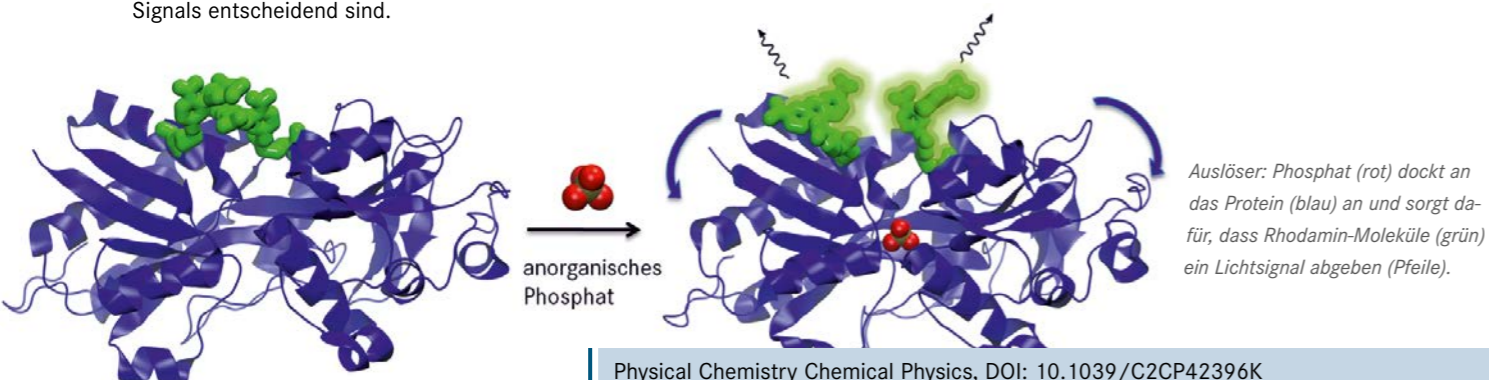
Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

Wie Biosensoren Signale produzieren

Fluoreszierende Messfühler aus biologischen Komponenten werden häufig eingesetzt, um biochemische Prozesse zu untersuchen, beispielsweise um bestimmte Stoffe zu erkennen. Verbindet sich die gesuchte Substanz mit dem Sensor, sendet ein Marker ein Lichtsignal aus. Wie das Signal genau entsteht, war jedoch lange unklar. Eine internationale Forschergruppe hat die molekulare Struktur eines typischen Protein-basierten Biosensors am Jülicher Supercomputer JUROPA simuliert und nachgewiesen, welche Vorgänge für die Entstehung des Signals entscheidend sind.

Der Biosensor wurde vor einigen Jahren zur Erkennung von anorganischem Phosphat entwickelt, das bei vielen Zellaktivitäten eine Rolle spielt. Es ist beispielsweise am Energiestoffwechsel der Zelle und am Aufbau von Zellmembranen beteiligt. Der Biosensor basiert auf einem Protein des Darmbakteriums *Escherichia coli*, das Phosphat bindet, und dem fluoreszierenden Rhodamin-Farbstoff als Marker. „Ohne Phosphat sehen die beiden Rhodamin-Moleküle aus wie zwei Broteisbelegen, die sich überlappen. Sie geben ihre Energie dann nicht als Licht, sondern größtenteils als Wärme ab. Bindet sich das Phosphat an, entfernen sich die Rhodamin-Moleküle voneinander und können Licht emittieren“, erklärt der Jülicher Wissenschaftler Dr. Jens Dreyer. Er und seine Kollegen vom Institute for Advanced Simulation und der German Research School for Simulation Sciences fanden sogar Hinweise, wie sich die Signalgebung verbessern lässt, etwa durch den Austausch einzelner Aminosäuren des Proteins. Derzeit führt der Entwickler des Sensors Experimente durch, um die Erkenntnisse zu überprüfen.



Physical Chemistry Chemical Physics, DOI: 10.1039/C2CP42396K
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/cp/c2cp42396k>

Fit für Exascale

Exascale ist nicht nur eine Frage der Hardware. Die Software muss mit der zunehmenden Parallelität Schritt halten. Im Schwerpunktprogramm 1648 „Software for Exascale Computing“ (SPPEXA) der Deutschen Forschungsgemeinschaft arbeiten

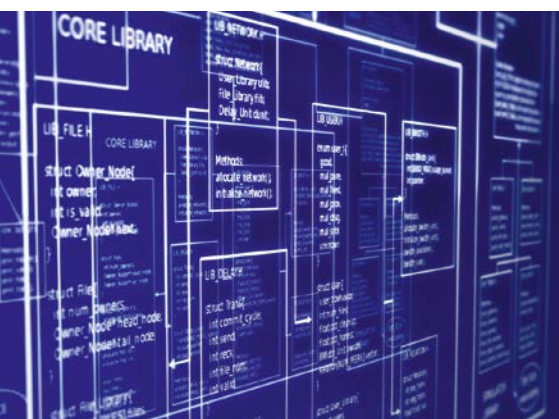
Wissenschaftler seit Anfang des Jahres an neuen Konzepten. Das Jülich Supercomputing Centre (JSC) ist an zwei Teilprojekten beteiligt.

Jede Software, die auf einem Supercomputer läuft, verbraucht Zeit, Energie und damit Geld. Im Projekt CATWALK wollen Forscher eine automatische Methode zur Optimierung entwickeln. So sollen ineffiziente Berechnungen und unnötige Arbeit, die durch die Verwendung ungeeigneter Algorithmen entstehen, vermieden werden. „Bisher stellen Nutzer erst relativ spät fest, ob die Skalierung auf eine hohe Anzahl von Prozessoren Probleme bereitet. Mit CATWALK sollen sie vorab leichter herausfinden können, wo künftig Engpässe ihrer Anwendungen lauern“, sagt Dr. Bernd Mohr vom JSC. Die Forscher wollen die Performance von aktuellen Programmen bei unterschiedlichen Parametern wie Datengröße und Anzahl von Prozessoren messen und daraus ableiten, wie sich eine Anwendung unter künftigen Voraussetzungen verhält.

Im Projekt GROMEX entwickeln Forscher das weitverbreitete Molekulardynamikprogramm GROMACS weiter, damit es auch auf zukünftigen massiv-parallelen Rechnerarchitekturen in seiner gesamten Funktionalität effizient läuft. In diesem Zusammenhang wollen sie einen portablen, flexiblen und extrem skalierbaren Algorithmus für die Berechnung der Potenziale und Kräfte konzipieren und in GROMACS implementieren. Dabei setzen sie auf das sogenannte schnelle Multipolverfahren. „Im Vergleich zu anderen Methoden erfordert dieses Verfahren weniger globale Kommunikation und ist daher besonders gut für Exascale-Computing geeignet“, erläutert JSC-Wissenschaftler Dr. Holger Dachsels.

www.vi-hps.org/projects/catwalk
www.mpiibpc.mpg.de/grubmueller/sppexa

Anpassung: Software muss für massiv-parallele Rechner optimiert werden.



Ein magnetisches Sandwich

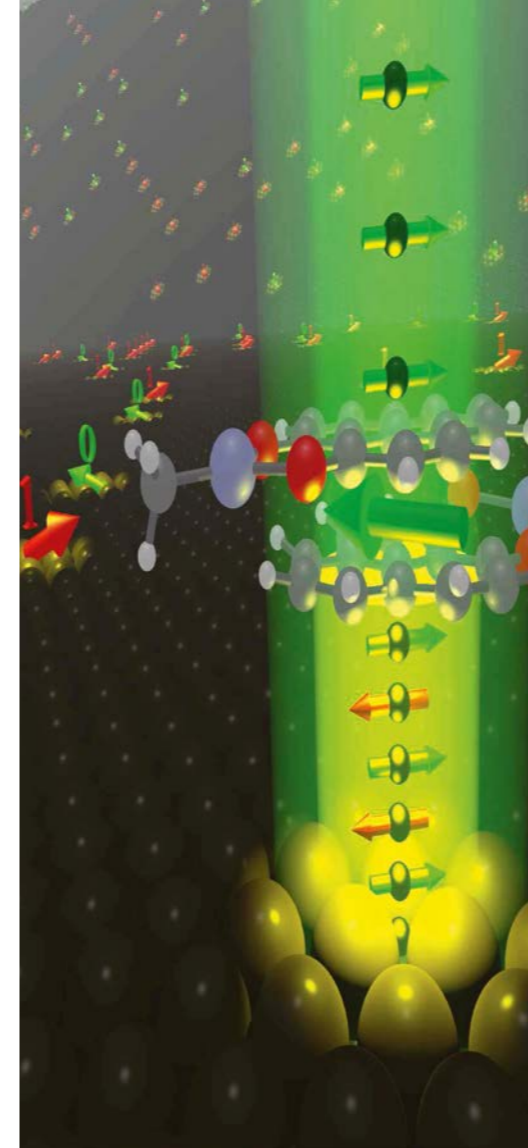
Bauelemente, die mit einzelnen magnetischen Molekülen arbeiten, gelten als aussichtsreiche Kandidaten für leistungsfähigere und energieeffizientere Datenspeicher und Prozessoren von morgen. Ein internationales Forscherteam mit Jülicher Beteiligung hat einen neuen Weg gefunden, solche molekularen Magnete herzustellen. Es setzt auf dünne Schichtsysteme aus dem Metall Kobalt und dem metallorganischen Molekül Zinkmethylphenalenyl (ZMP). Für das physikalische Modell, das die Eigenschaften des verwendeten Materials erklärt, wurden verschiedene Berechnungen an Jülicher Supercomputern durchgeführt.

Ein molekularer Magnet ist eine chemische Verbindung zwischen einem Metall

und einem Molekül, bei der das Molekül bestimmte magnetische Eigenschaften aufweisen muss. Diese sind jedoch empfindlich und gehen häufig verloren, wenn Moleküle an anorganischen Materialien wie Metall befestigt werden. Als Stromleiter kann auf anorganisches Material aber nicht verzichtet werden. Das Forscherteam hat eine neue Strategie entwickelt und nutzt gezielt die unvermeidbaren Wechselwirkungen zwischen Molekül und Untergrund aus. Erst im Zusammenspiel der Schichten von Kobalt und dem für sich genommen nichtmagnetischen ZMP entsteht ein magnetisches „Sandwich“, dessen Ausrichtung sich gezielt hin- und herschalten lässt. Wichtiger Vorteil: Die gewünschten Effekte treten bereits bei minus 20 Grad Celsius auf, bislang gelang das meist nur nahe dem absoluten Nullpunkt von minus 273,15 Grad Celsius. „Dies ist ein deutlicher Fortschritt auf dem Weg zur Entwicklung von Moleküldatenspeichern und -rechenelementen, die bei Raumtemperatur funktionieren“, sagt Dr. Nicolae Atodiresi vom Peter Grünberg Institut in Jülich.

Mini-Magnet: Schichtsystem aus Kobalt (unten) und organischen Molekülen (grau-rot) „filtert“ Elektronen mit bestimmter magnetischer Ausrichtung (grüne Pfeile).

Nature, DOI: 10.1038/nature11719
<http://dx.doi.org/10.1038/nature11719>



Das Leben verstehen

Proteine erfüllen lebenswichtige Aufgaben, etwa für die Funktion und die Struktur von Zellen. Um überhaupt aktiv zu werden, müssen sich die meisten Proteine in spezifische dreidimensionale Formen falten. Wie der Prozess genau funktioniert, ist noch nicht komplett entschlüsselt worden. Neue Erkenntnisse verspricht sich die Forschung von Computersimulationen. Jülicher Forschern ist es gelungen, die Faltung eines Proteins mit 92 Aminosäuren mit Hilfe des Monte-Carlo-Verfahrens zu beschreiben. Die Berechnung gilt als bislang größte Proteinfaltungssimulation, die ohne Zuhilfenahme von Daten aus dem gefalteten Zustand auskommt.

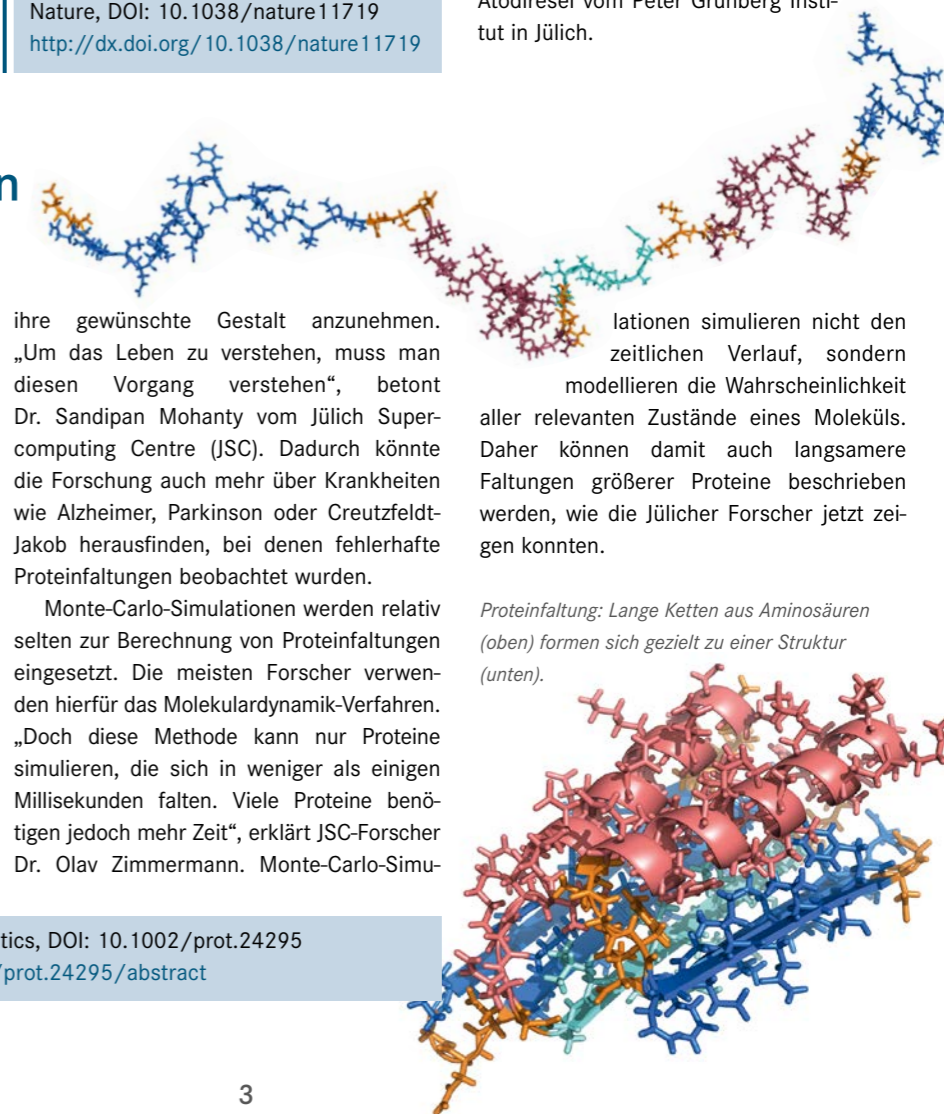
Proteine sind lange Ketten von Aminosäuren, die enorm viele verschiedene Formen annehmen können. Erstaunlicherweise benötigen die meisten Proteine nur zwischen einer Mikrosekunde und einer Sekunde, um

ihre gewünschte Gestalt anzunehmen. „Um das Leben zu verstehen, muss man diesen Vorgang verstehen“, betont Dr. Sandipan Mohanty vom Jülich Supercomputing Centre (JSC). Dadurch könnte die Forschung auch mehr über Krankheiten wie Alzheimer, Parkinson oder Creutzfeldt-Jakob herausfinden, bei denen fehlerhafte Proteinfaltungen beobachtet wurden.

Monte-Carlo-Simulationen werden relativ selten zur Berechnung von Proteinfaltungen eingesetzt. Die meisten Forscher verwenden hierfür das Molekulardynamik-Verfahren. „Doch diese Methode kann nur Proteine simulieren, die sich in weniger als einigen Millisekunden falten. Viele Proteine benötigen jedoch mehr Zeit“, erklärt JSC-Forscher Dr. Olav Zimmermann. Monte-Carlo-Simu-

lationen simulieren nicht den zeitlichen Verlauf, sondern modellieren die Wahrscheinlichkeit aller relevanten Zustände eines Moleküls. Daher können damit auch langsamere Faltungen größerer Proteine beschrieben werden, wie die Jülicher Forscher jetzt zeigen konnten.

Proteinfaltung: Lange Ketten aus Aminosäuren (oben) formen sich gezielt zu einer Struktur (unten).



Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, DOI: 10.1002/prot.24295
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/prot.24295/abstract>

KURZNACHRICHTEN

Besserer Datenzugriff

Das EU-Projekt EUDAT, das an einer europäischen fachübergreifenden Dateninfrastruktur arbeitet, hat seinen ersten Dienst vorgestellt: einen sicheren Datenreplikationsdienst, der unter der Leitung des Jülich Supercomputing Centre (JSC) entwickelt wurde. Der Dienst verbessert die Langzeitarchivierung von Daten und den Zugriff darauf. Jeder Datensatz erhält eine eindeutige Identifizierung, einen sogenannten Persistent Identifier (PID). Dadurch können unnötige Duplizierungen von Datensätzen aufgespürt werden. Gleichzeitig erhalten Wissenschaftler damit eine eindeutige Referenz, auf die sie verweisen können, wenn sie etwa einen Datensatz bei einer Publikation verwenden. Der Dienst ist so flexibel aufgebaut, dass Einrichtungen zusätzlich zu den globalen Richtlinien eigene lokale Speicherregeln verwenden können. „Wir haben von Beginn an wissenschaftliche Communities in die Entwicklung miteinbezogen“, erklärt Dr. Morris Riedel vom JSC, der für den EUDAT-Bereich „Safer Replication“ verantwortlich ist. Drei große Forschungsinfrastrukturen nutzen den Dienst bereits. www.eudat.eu

Neue JSC-Abteilung

Im März hat eine neue Abteilung am Jülich Supercomputing Centre (JSC) ihre Arbeit aufgenommen: „High Performance Computing in Neuroscience“. Unter der Leitung von Dr. Boris Orth wird sie unter anderem neue Möglichkeiten für Datenanalyse, Simulation und Visualisierung im Bereich Computational Neuroscience erforschen und entwickeln. Dabei arbeitet sie eng mit Jülicher Neurowissenschaftlern, den Exascale Labs des JSC und im Rahmen der Jülich Aachen Research Alliance (JARA) mit der Virtual Reality Group der RWTH Aachen zusammen. Die neue Abteilung koordiniert darüber hinaus das Helmholtz-Portfoliothema „Supercomputing and Modeling for the Human Brain“ und leitet das Teilprojekt für die HPC-Plattform des „Human Brain Project“.

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

Klimafreundliche Verbrennung

Das Jülich Supercomputing Centre beteiligt sich am Verbundprojekt „Entwicklung von Verbrennungstechnologien für klimaschonende Energieerzeugung“. Der Schwerpunkt liegt auf modernen effizienteren Gasturbinen. Diese sollen einen wesentlichen Beitrag zur Energiewende leisten. An dem Projekt, das die Siemens AG und das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie fördern, sind neun Industrie- und Forschungseinrichtungen beteiligt. An Jülichs Supercomputer JUQUEEN soll eine komplette Ringbrennkammer einer Gasturbine simuliert werden, um insbesondere Verbrennungsinstabilitäten zu untersuchen. Grundlage für die Simulation ist das frei verfügbare Softwarepaket OpenFOAM.

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



„FORSCHEN in Jülich“ –
jetzt auch 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
Text: Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** Forschungszentrum Jülich, Physical Chemistry Chemical Physics (S. 2 o.) © (freshidea, Kopf/Titelbild; Photobank kiev, S. 1 und S. 2 u.) fotolia.com, Siemens (S. 4)
Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer und Partner GmbH **Auflage:** 700

TERMINE

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP

6. – 9. August 2013

am Jülich Supercomputing Centre

Der Trainingskurs führt in die parallele Programmierung von Höchstleistungsrechnern im technisch-wissenschaftlichen Umfeld 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. Der Kurs richtet sich in erster Linie an die Teilnehmer des JSC-Gaststudentenprogramms „Wissenschaftliches Rechnen“.

Dozenten: Dr. Florian Janetzko,
Dr. Alexander Schnurpfeil, JSC

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

Traffic and Granular Flow 2013

25. – 27. September 2013

am Forschungszentrum Jülich

Zum zweiten Mal nach der Auftaktveranstaltung 1995 ist Jülich Gastgeber der internationalen Konferenzreihe „Traffic and Granular Flow“. Forscher aus aller Welt treffen sich bei der 10. Ausgabe der Reihe, um sich über neueste Entwicklungen rund um Verkehr und Transport auszutauschen. Dabei geht es unter anderem um Straßenverkehr, kollektive Bewegungen in biologischen Systemen, Datenverkehr im Internet und das Fließverhalten sogenannter granularer Materie, wie etwa Sand oder Geröll.

www.tgf13.de

Tag der Neugier

29. September 2013

am Forschungszentrum Jülich

Auch das Jülich Supercomputing Centre öffnet an diesem Tag seine Türen für die Öffentlichkeit. Gezeigt werden zum Beispiel Supercomputer wie JUQUEEN, dreidimensionale Visualisierungen von wissenschaftlichen Anwendungen, mathematische Knocheleien sowie das Programm SuperReSi, mit dem die Arbeitsweise eines Supercomputers simuliert werden kann.



www.fz-juelich.de/ias/jsc/events/tdn2013

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

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