

Weltraumwetter-Simulation im Projekt DEEP-EST: eine von insgesamt sechs Anwendungen aus relevanten europäischen Forschungsfeldern, die zur Entwicklung des DEEP-EST-Prototyps herangezogen werden.

Big-Data-Analysen vereinfachen

Prototyp für modularen Superrechner der nächsten Generation geplant

Bei Smartphones und Notebooks sind Kameras, Netzwerkschnittstellen und GPS längst so wichtig wie die Rechenleistung. Ein ähnlicher Trend ist im Bereich des High-Performance Computing (HPC) zu beobachten. Neben rechenintensive Simulationen treten Big-Data-Analysen und Visualisierungen, die sich mit aktuellen Superrechner-Architekturen nur ineffizient bewältigen lassen. Im Projekt DEEP-EST treiben Experten daher die Entwicklung einer modularen Architektur voran, die auf ein breites Anforderungsspektrum zugeschnitten ist.

Die Idee: Einen Superrechner schaffen, der über unterschiedliche Module für unterschiedliche Aufgaben verfügt. „Das ist ähnlich wie beim Hausbau“, erklärt Projektleiterin Dr. Estela Suarez vom Jülich Supercomputing Centre (JSC). „Anstatt ausschließlich teure, hochausgebildete Facharbeiter zu beschäftigen, übergibt man den Experten nur die komplizierten, kritischen Arbeiten wie die Elektroinstallation. Einfachere Handgriffe werden dann von weniger teuren, jüngeren Arbeitern erledigt.“

Nach den EU-Projekten DEEP und DEEP-ER gehen die Projektpartner mit DEEP-EST nun in die dritte

Runde. Neu hinzukommen wird ein Data Analytics Module, das die Cluster-Booster-Architektur der Vorgänger erweitert. Bis 2020 wird im Co-Design ein Prototyp entwickelt, der die Vorzüge des Konzepts unter Beweis stellen soll. Gemeinsam mit der KU Leuven wollen die Forscher etwa die Auswirkung von Sonnenstürmen simulieren. Bei den seltenen Ereignissen drohen gewaltige Schäden: etwa ein Ausfall der Satellitenkommunikation und gestörte GPS-, Internet- und Telefonverbindungen.

Tests werden zeigen, inwiefern die hochkomplexe Weltraumwetter-Simulation von der modularen Rechner-Architektur profitiert. Die Analyse von Satellitenbildern der Sonnenaktivität wird auf das Datenanalysemodul ausgelagert, das über eine hohe Speicherkapazität und flexibel programmierbare FPGAs verfügt. Die Ausbreitung des Teilchenstroms wird dagegen auf dem Cluster mit leistungsfähigen General-Purpose-Prozessoren berechnet. Die Simulation der Wechselwirkung mit dem Erdmagnetfeld wird auf den Cluster und den extrem energieeffizienten Booster aufgeteilt, der auf vernetzten, hochparallelen Mehrkernprozessoren basiert.

► DEEP-Projekt ► DEEPER-Projekt

STATEMENT



Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert
Leiter des Jülich ► Supercomputing Centre (JSC)

Die Optimierung homogener Systeme ist mehr oder weniger ausgereizt. Wir entwickeln Schritt für Schritt die Voraussetzungen für eine hocheffiziente modulare Superrechner-Architektur, die sich flexibel an unterschiedliche Anforderungen wissenschaftlicher Anwendungen anpassen lässt.

Ungeahnte Formenvielfalt roter Blutkörperchen

In unseren Adern geht es oftmals zu wie in einer überfüllten Wasserrutsche. Mitten drin: die roten Blutkörperchen. Zusammen machen sie fast die Hälfte unseres Blutes aus. Sie ähneln Schwimmreifen mit einer weichen Sitzfläche in der Mitte statt eines Lochs. Dank ihrer Elastizität schlängeln sie sich durch schmalste Blutgefäße und rauschen unbeschadet durch unser Herz. Denn je schneller sie fließen und je enger es wird, desto mehr verformen sich die roten Blutkörperchen: von leicht gekrümmt bis hin zu gerollten Ellipsen oder Pyramiden.

Einige dieser Formen haben Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich sowie der französischen Universität Montpellier erstmals entdeckt. Unter dem Mikroskop waren sie lange Zeit verborgen geblieben, da in Experimenten der flüssige Anteil des Bluts zuvor viel zu zäh gewählt wurde. „Erst als die Biologen auch im Experiment die natürlichen Verhältnisse herstellten, sahen sie die von uns berechnete Formenvielfalt“, erläutert Dr. Dmitry A. Fedosov, Mitarbeiter am Jülicher Institute of Complex Systems (ICS-2).

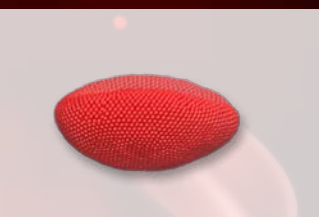
Zudem fanden die Wissenschaftler Hinweise, dass die flexible Formbarkeit die Fließfähigkeit des Blutes entscheidend beeinflusst. Möglicherweise spielt sie eine Schlüsselrolle bei der Ausbildung von Durchblutungsstörungen. „Unsere Untersuchungen legen nahe, dass physiologische Phänomene, bei denen man bisher von einer tropfenähnlichen Bewegung der roten Blutkörperchen ausgegangen ist, neu untersucht werden sollten“, berichtet Institutsdirektor Prof. Gerhard Gompper. Bei Diabetes etwa versteifen sich die roten Blutkörperchen. Sie sind weniger elastisch, passen nicht mehr durch die engsten Gefäße, die Kapillaren. Das betrifft insbesondere Hände und Füße.

In einem weiteren Schritt hatten die Jülicher Forscher berechnet, wie sich Tausende Zellen kollektiv verhalten. Die Blutkörperchen ändern dann etwa ihre Bewegung. Sie rollen nicht mehr frei, sondern gehen in ein geordnetes Gleiten und Sicheinreihen über. Dieses Wissen ist zum Beispiel enorm wichtig beim Design von Stents, Drahtgeflechten, die nach einem Herzinfarkt die Adern offen halten, oder der Entwicklung von Blutpumpen, die in den Körper eingepflanzt werden.

► PNAS (2016), DOI: 10.1073/nas.1608074113



Niedrige Scherrate bzw. Geschwindigkeit



Mäßige Scherrate bzw. Geschwindigkeit



Hohe Scherrate bzw. Geschwindigkeit

Neue Erkenntnisse zu Kupfer und Alzheimer

Juniorprofessorin Birgit Strodel hat mit Simulationen auf Höchstleistungsrechnern des Jülich Supercomputing Centre (JSC) untersucht, wie sich Kupferionen auf das Verklumpen des körpereigenen Proteins Amyloid-beta (A β) auswirken. Das Verknäueln sogenannter A β -Peptide steht in unmittelbarem Zusammenhang mit dem Ausbrechen der Alzheimer-Erkrankung.



Jun.-Prof. Birgit Strodel, Leiterin der Computational Biochemistry Group am Forschungszentrum Jülich (ICS-6)

Frau Strodel, worum ging es in dieser Arbeit?

Hintergrund unserer Arbeit ist, dass Ionen die Aggregation der A β -Peptide beeinflussen. Die Rolle von Kupferionen ist dabei umstritten. Man sieht im Experiment, dass Kupferionen die Bildung von kleinen Aggregaten, sogenannten Oligomeren, teilweise beschleunigen und vor allem toxischer, also schädlicher, werden lassen.

Inwiefern sind diese Prozesse für die Entstehung von Alzheimer von Bedeutung?

Was früher mit Alzheimer in Zusammenhang gebracht wurde, das sind die Fibrillen, die Endprodukte der Aggregation, die man im Gehirn von Patienten findet. Sie sind relativ lang, schon im Nanometerbereich. Oligomere bilden sich dagegen auf dem Aggregationsweg vom einzelnen Peptid zu den Fibrillen. Die sind viel kleiner und nicht sonderlich stabil. Dadurch ist es bisher nicht gelungen, sie strukturell aufzuklären, sodass das Wissen über die Amyloid-Oligomere noch recht lückenhaft ist. Es gilt aber als sicher, dass diese kleinen Oligomere toxisch sind.

Welche neuen Erkenntnisse können Simulationen in diesem Zusammenhang liefern?

Simulationen haben den Vorteil, dass wir das Peptid mit atomarer Auflösung beobachten können, während man es im Experiment häufig nur indirekt sieht. Auf den ersten Blick wirken unsere Ergebnisse ziemlich ungeordnet. Aber durch die statistische Auswertung der Daten erkennt man, dass Ausbildungen einer speziellen Faltstruktur von Proteinen, sogenannte β -Faltblätter, eine große Rolle spielen. Im Vergleich zu den Bedingungen ohne Kupfer sehen wir mehr von diesen β -Faltblätter. Das könnte ein Hinweis darauf sein, dass Kupfer die Aggregation, also das Verklumpen der A β -Peptide, begünstigt. Denn sowohl die Aggregation als auch die Schädlichkeit der Oligomere sind an diese β -Faltblätter gebunden.

Frau Strodel, vielen Dank für das Gespräch!

► Isr. J. Chem. (2017), DOI: 10.1002/ijch.201600108

Quasikristall aus Fullerenen

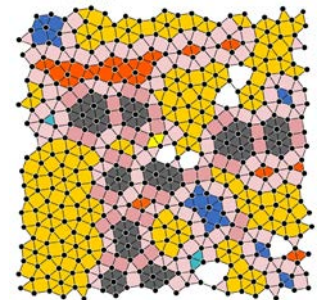
Seit rund 35 Jahren sind Forscher fasziniert von einer neuartigen Materialklasse, den Quasikristallen. Ihre Entdeckung wurde 2011 mit dem Nobelpreis ausgezeichnet. Lange wurden Quasikristalle nur in ternären Legierungen gefunden, also Metallen, die aus drei unterschiedlichen Atomsorten bestehen. Später kamen andere Systeme, etwa Flüssigkristalle oder Perowskitfilme, hinzu. Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich haben nun eine weitere Klasse von Quasikristallen entdeckt und mittels Computersimulationen geklärt, wie die besondere Anordnung der Moleküle zustande kommt.

Aufgrund ihrer speziellen Struktur zeigen Quasikristalle eine Reihe von besonderen physikalischen Eigenschaften. Sie werden heute bereits für Pfannenbeschichtungen oder Katalysatoren eingesetzt. Die neu entdeckte Klasse ist insbesondere für optische Anwendungen, etwa zur Herstellung photonischer Kristalle, interessant. Darüber hinaus schafft sie neue Möglichkeiten des Studiums magnetischer Systeme.

Klassische Kristalle besitzen eine periodische Struktur, deren Elementarzellen sich ähnlich wie bei einem Schachbrettmuster in regelmäßigen Abständen wiederholen. Die Möglichkeiten für derartige Strukturen sind beschränkt: In zwei Dimensionen lassen sich beispielsweise nur zwei-, drei-, vier und sechszählige Symmetrien lückenlos zusammenfügen. Quasikristalle erlauben dagegen auch andere Symmetrien – fünfzählige etwa, oder die nun entdeckte zweidimensionale Struktur mit zwölfzähliger Symmetrie, deren drei- und viereckige Grundelemente aus Fullerenen sich unregelmäßig über das Substrat verteilen.

Forscher des Jülicher Peter Grünberg Instituts (PGI-1, PGI-5, PGI-7) hatten die auch als „Fußballmoleküle“ bekannten Fullerene auf einer Platin-Titan-Legierung abgeschieden. Mittels rechenintensiver Ab-initio-Simulationen auf dem Jülicher Superrechner JUQUEEN gelang es ihnen, die Anordnung der Fullerene auf die spezielle Wechselwirkung mit der zugrunde liegenden Legierung zurückzuführen. Die detaillierten Erkenntnisse könnten es künftig ermöglichen, maßgeschneiderte Quasikristalle mit bestimmten Qualitäten herzustellen.

► [Nature Communications \(2017\), DOI: 10.1038/NCOMMS15367](#)



Zweidimensionale Quasikristall-Struktur aus Fullerenen mit zwölfzähliger Symmetrie

Wärmetransport auf der Nanoskala

Metalle, die den elektrischen Strom gut leiten, transportieren in der Regel auch Wärme gut. In beiden Fällen wird die Energie maßgeblich durch die gleichen Teilchen, nämlich frei bewegliche Elektronen, übertragen. Wissenschaftler konnten nun mithilfe von Simulationen auf Supercomputern nachweisen: Die Verwandtschaft der beiden Eigenschaften besteht auch dann noch, wenn man die Betrachtung auf das Zusammenspiel einzelner Atome reduziert. Die Erkenntnisse sind unter anderem entscheidend für die Entwicklung mikro- und nanoelektronischer Schaltungen, speziell für die Kühlung von immer kleineren Computerchips.

Bereits Ende der 1980er Jahre hatten Wissenschaftler den – quantisierten – Transport elektrischer Ladungen zwischen einzelnen Atomen gemessen. Mithilfe neuartiger Methoden der Rastertunnelmikroskopie ist es Forschern der US-amerikanischen Universität Michigan jetzt gelungen, auch den deutlich schwieriger zu erfassenden Wärmetransport im atomaren Maßstab zu beobachten. Für den Nachweis verwendeten sie einen denkbar dünnen Draht: eine Kette aus einzelnen Goldatomen.

Ein Team um Prof. Peter Nielaba von der Universität Konstanz hat mittels Simulationen auf dem Jülicher Superrechner JURECA gezeigt, dass das Wiedemann-Franz-Gesetz auch noch auf atomarer Skala seine Gültigkeit behält. Das Gesetz beschreibt das Verhältnis von elektrischer und thermischer Leitfähigkeit in der klassischen Physik. In atomaren Dimensionen ist jedoch eine quantenmechanische Beschreibung erforderlich. Die Forscher hatten neben den atomaren Positionen auch den Ladungs- und Wärmetransport der Elektronen in statistischen Ensemblesimulationen berechnet und eine Proportionalität zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Wärmeleitfähigkeit in atomaren Gold- und Platindrähten festgestellt.

Das Ergebnis ermöglicht die Erforschung weiterer Nanosysteme und fundamentaler Quantenphänomene, beispielsweise im Rahmen der Thermoelektrizität. Die Arbeiten werden zudem im frisch gekürnten NIC-Exzellenzprojekt 2017 des John von Neumann-Instituts für Computing fortgeführt.

► [Science \(2017\), DOI: 10.1126/science.aam6622](#)

► [Science Perspective \(2017\), DOI: 10.1126/science.aam9362](#)

Computersimulationen zeigen: Gesetze der klassischen Physik gelten auch für Wärmetransport in atomaren Dimensionen

KURZNACHRICHTEN

People to Watch

Die Fachzeitschrift „HPCwire“ hat Dr. Bernd Mohr vom Jülich Supercomputing Centre (JSC) in seine Liste „People to Watch 2017“ aufgenommen. Jedes Jahr stellt die Zeitschrift etwa ein Dutzend Experten aus dem High-Performance Computing (HPC) vor, von denen sie neue Impulse erwartet. Bernd Mohr ist eine der wenigen Personen, die diese Ehrung zweimal erhalten haben – 2015 und 2017. Er wird dieses Jahr als erster Nicht-Amerikaner die bedeutendste Konferenz im HPC leiten, die SC17 in den USA.

► mehr

10 Jahre GCS

Das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) feiert in diesem Jahr sein zehnjähriges Bestehen. Die drei großen deutschen Rechenzentren in Stuttgart (HLRS), Jülich (JSC) und München (LRZ) bündeln seit 2007 in diesem Verbund ihre Aktivitäten, um gemeinsam eine Supercomputing-Infrastruktur zu schaffen, die international Maßstäbe setzt. Für die Zukunft ist neben dem Ausbau der Rechenkapazität von aktuell 20 Petaflops eine erweiterte Nutzerunterstützung mit Schulungen und intensiverer Betreuung bei der Softwareentwicklung geplant.

► mehr



Booster für JURECA

Intel und das Forschungszentrum Jülich haben zusammen mit ParTec und Dell eine Kooperation für die gemeinsame Entwicklung und Implementierung eines modularen Supercomputer-Systems geschlossen. Drei der Partner hatten bereits in den EU-Projekten DEEP und DEEP-ER eng zusammengearbeitet. Darauf aufbauend wurde nun die Erweiterung des Jülicher Superrechners JURECA mit einem hoch skalierbaren Booster vereinbart, der für eine Spitzenleistung von fünf Petaflop/s ausgelegt ist.

► mehr

Nachfolger gesucht

Anfang 2018 geht der Jülicher Supercomputer JUQUEEN fast sechs Jahre nach seiner Installation in den wohlverdienten Ruhestand. JUQUEEN wird dann durch einen modularen Supercomputer abgelöst, der im Endausbau aus mehreren eng gekoppelten Modulen bestehen wird. Im Mai startete das Beschaffungsverfahren für das erste Modul, das auf einer integrierten Architektur mit Multi-Core-Prozessoren basieren wird und zeitlich möglichst nahtlos an den Betrieb von JUQUEEN anschließen soll.

► 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.), Tobias Schlößer, Brigitte Stahl-Busse **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1: cglightNing/fotolia.com, Kerbusch/fotolia.com; S. 2 links: eranicle/fotolia.com; S. 2 rechts: Forschungszentrum Jülich/Ralf-Uwe Limbach, S. 3 oben: DOI: 10.1038/NCOMMS15367 (CC BY 4.0)/Forschungszentrum Jülich; S. 3 unten: Enrique Sahagun; S. 4 oben: SC16 Conference, Jo Ramsey; S. 4 unten: Forschungszentrum Jülich/Ralf-Uwe Limbach **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 Fax: 02461 61-4666 E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 550



TERMINE

► **Trainingskurs**
„Einführung in ParaView zur Visualisierung von wissenschaftlichen Daten“
28.06.2017
am Jülich Supercomputing Centre
Dozentin: Sonja Habbinga, JSC

► **Trainingskurs**
„Introduction to parallel programming with MPI and OpenMP“
15.-18.08.2017
am Jülich Supercomputing Centre
Dozent: Benedikt Steinbusch, JSC

► **International HPSC TerrSys Fall School 2017**
25.-29.09.2017
an der Universität Bonn
Organisation: Stefan Kollet, Wendy Sharples, Centre for High-Performance Scientific Computing in Terrestrial Systems (HPSC TerrSys)

► **Trainingskurs**
„Porting code from Matlab to Python“
09.-10.10.2017
am Jülich Supercomputing Centre
Dozenten: Sandra Diaz, Lekshmi Deepu, Dr. Alexander Peyser, Wouter Klijn, JSC

► **Trainingskurs**
„Introduction to GPU programming using OpenACC“
16.-17.10.2017
am Jülich Supercomputing Centre
Dozenten: Anke Kreuzer, Dr. Andreas Herten, Dr. Paul Baumeister, JSC, Jiri Kraus, NVIDIA

► **Trainingskurs**
„Software Development in Science“
20.11.2017
am Jülich Supercomputing Centre
Dozenten: JSC-Mitarbeiter aus dem Simulation Lab Neuroscience

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