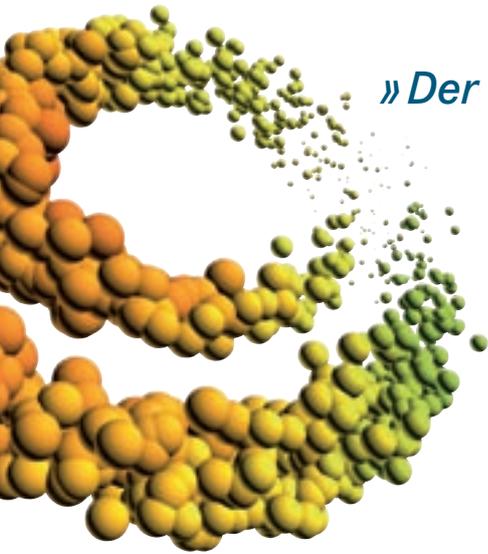


Supercomputing

Höchstleistung für die Forschung



*»Der Mensch ist immer noch der
außergewöhnlichste Computer von allen.«*

John F. Kennedy

Supercomputer: Mehr als die Summe seiner Teile	4
Simulation Sciences: Komplexe Probleme lösen	6
Perspektive: Schlüsseltechnologie für das 21. Jahrhundert	8
Standort Jülich: Kompetenz aus einer Hand	10
Jülichs Partner – Partner Jülich	12
Das Forschungszentrum Jülich	14
Impressum	15

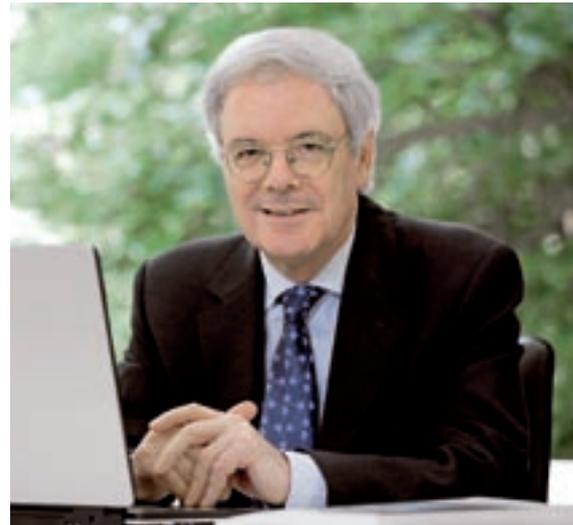
Mit dem neuen Supercomputer JUGENE hat das Forschungszentrum Jülich erneut einen Meilenstein auf seinem Weg zur Forschung von morgen gesetzt. Der schnellste zivil genutzte Rechner der Welt ermöglicht Einblicke und damit Erkenntnisse, die uns bislang verwehrt waren – aus finanziellen, ethischen oder physikalisch-technischen Gründen. Deswegen arbeiten inzwischen immer mehr Forscher mit Computersimulationen, sei es, um zu erklären, wie sich Proteine im Körper falten, wie Halbleiter funktionieren, wie Wasserdampf in die Stratosphäre aufsteigt oder wie sich Autos bei Unfällen verhalten.

Auf einem Meilenstein sollte man sich jedoch nicht lange ausruhen. Das Rennen geht weiter. Immer mehr Forschergruppen haben Bedarf an immer mehr Rechenzeit, denn nur so können sie international an der Spitze bleiben. Gemeinsam mit seinen deutschen und europäischen Partnern arbeitet das Forschungszentrum Jülich an neuen Konzepten und Rechner-Prototypen, um den rasant wachsenden Bedarf zu decken. Rechnen jenseits von Petaflop/s* lautet die Herausforderung für Ende 2009, der wir uns in Jülich gemeinsam mit unseren Partnern und Freunden stellen werden.

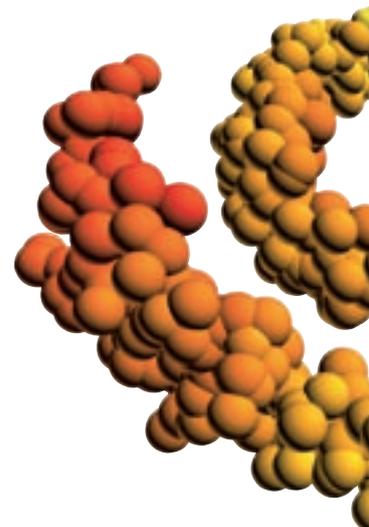
Aber mit großer Rechenkapazität allein ist das Rennen nicht zu gewinnen; man muss sie auch zu nutzen wissen. Deshalb baut das Forschungszentrum Jülich in erster Linie auf Köpfe und nicht auf Prozessoren. Die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des *Jülich Supercomputing Centre (JSC)* gewährleisten nicht nur den Betrieb und entwickeln zukünftige Computergenerationen, sondern sie schaffen letztlich aus Rechenzeit und Zahlenwerten neue Erkenntnisse und Lösungen für die komplexesten Probleme, mit denen die Menschheit konfrontiert ist. Es ist diese Kompetenz in den Simulation Sciences, gebündelt mit dem vielfältigen naturwissenschaftlichen Umfeld, das den hohen Mehrwert des Jülicher Rechners für die Forschung entstehen lässt. Mehr noch: Mit dieser Kompetenz können wir für Deutschland und Europa den unabhängigen Zugang zur Schlüsseltechnologie „Supercomputing“ garantieren. Nur so werden wir den Schlüssel zu diesem bedeutenden Element der wissenschaftlich-industriellen Wertschöpfungskette in unserer eigenen Hand behalten.

In den 60er-Jahren war die Raumfahrt der USA die Leittechnologie, die viele Innovationen in der Wissenschaft anstieß. In unseren Tagen wird das Supercomputing diese Führungsrolle übernehmen und das Tor zu neuen Erkenntnissen aufstoßen. Wir in Jülich folgen dieser Entwicklung nicht nur, wir gestalten sie aktiv.

*(Billiarden Rechenoperationen pro Sekunde)



*Prof. Achim Bachem, Vorstandsvorsitzender
des Forschungszentrums Jülich*



Supercomputer: Mehr als die Summe seiner Teile

Tausende Prozessoren arbeiten in Jülicher Supercomputern effektiv zusammen. Sie bilden ein unentbehrliches Werkzeug für die Forschung.

Supercomputer haben heute ihren festen Platz in der Wissenschaft. Computersimulationen gehören zum Handwerkszeug der Forscher auf den verschiedensten Gebieten: Sie klären, wie sich Galaxien formen, wie sich Proteine falten, wie sich Tragflächen verhalten oder wie Halbleiter funktionieren. Neben der Theorie und dem Experiment bildet die Simulationwissenschaft heute ein drittes Standbein der Forschung. Die Wissenschaftler nutzen die geballte Rechenkraft von Supercomputern, in denen viele Prozessoren parallel an einer Aufgabe rechnen.

Mit ihren Codes schweißen Jülicher Forscher aus Tausenden von Prozessoren eine funktionale Einheit. Dabei kommt es auf Teamwork an. Jeder einzelne Prozessor löst nur einen kleinen Teil des Gesamtproblems. Die Daten werden zwischen den Chips ausgetauscht und gehen dann in den nächsten Schritt der Berechnung ein. Wie bei einem Mosaik werden die Einzelteile zusammengefügt und bilden zum Schluss ein stimmiges Gesamtbild. Dazu müssen die Daten rechtzeitig und zuverlässig an ihrem Bestimmungsort ankommen. Erst mittels des leistungsstarken Datennetzes zwischen den Prozessoren und dank ihres Know-hows in Algorithmen und Programmierung machen die Jülicher Experten aus vielen Chips einen Supercomputer.

Leistungsdaten des Jülicher Supercomputers JUGENE

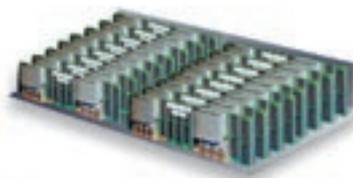
Architektur:	IBM Blue Gene/P
Rechenleistung:	223 Teraflop/s
Prozessoren :	65 536
Prozessortyp:	Power PC 450
Frequenz:	850 Megahertz
Hauptspeicher:	32 Terabyte
Speicherbandbreite:	13,6 GB/s
Lokale Netzwerkbandbreite:	5,1 GB/s
Netzwerklatenz:	160 Nanosekunden
Elektrische Leistung:	560 kW

Rack = 4 096 CPUs



13,9 Teraflop/s

Node Book = 128 CPUs



435,2 Gigaflop/s

Card = 8 CPUs



27,2 Gigaflop/s

Node = 4 CPUs



13,6 Gigaflop/s

Im Jülicher Supercomputer JUGENE (JUelicher Blue GENE) arbeiten über 65 000 Prozessoren. Sie sind in 16 mannshohen Schränken untergebracht und erreichen eine Rechengeschwindigkeit von bis zu 223 Teraflop/s, das sind 223 Billionen Rechenoperationen pro Sekunde. Eine Rechenoperation ist beispielsweise eine Addition oder Multiplikation von zwei 16-stelligen Zahlen. Wie schnell JUGENE rechnet, zeigt der folgende Vergleich: Wenn alle 6 Milliarden Menschen in der Sekunde jeweils mehr als 30 000 Rechenoperationen ausführen und ihre Rechenergebnisse austauschen, dann entspricht das etwa der Rechenleistung von JUGENE.

JUGENE = 16 Racks = 65 536 CPUs



222,8 Teraflop/s

Rund 65 000 Prozessoren rechnen im Jülicher Supercomputer JUGENE. Jeder Prozessor arbeitet an einem kleinen Teilproblem und gibt sein Ergebnis an andere Prozessoren weiter. So findet man in parallelen Einzelschritten die Gesamtlösung des behandelten Problems.

„Ein Engagement, das sich auszahlt“

Interview mit Martin Jetter, IBM

Haben Supercomputer außerhalb der Forschung einen Platz?

Eindeutig ja. Die Forschung dient in vielen Bereichen als Vorreiter und stößt Innovationen an. Ein wichtiges Stichwort in der Industrie ist das „Virtual Prototyping“. Aber auch Finanzdienstleister nutzen inzwischen Supercomputer. Weitere Märkte werden sich auftun. Der Standort Deutschland sollte deshalb Experten für Hardware, Software und Anwendungen bereithalten. Und die werden als Studenten an spannenden Forschungsprojekten am Supercomputer ausgebildet. Das Engagement des Forschungszentrums Jülich im Bereich Supercomputing zahlt sich also für Deutschland in vielfacher Weise aus.

Warum setzt IBM auf die Blue Gene-Architektur?

In der Blue-Gene-Architektur haben wir die besten Eigenschaften eines Supercomputers vereint. Er ist schnell, günstig, energie- und platzsparend. Möglich wird dies durch die optimierte Kommunikation der Prozessoren. Nur so können wir den nächsten Meilenstein ins Visier nehmen: Petaflop/s-Systeme, also Supercomputer, die eine Billiarde Rechenoperationen pro Sekunde ausführen. Sie werden realitätsgetreue und äußerst detaillierte Simulationen und damit neue Erkenntnisse im Bereich Wissenschaft und Technik ermöglichen.

Warum kooperieren Sie mit dem Forschungszentrum?

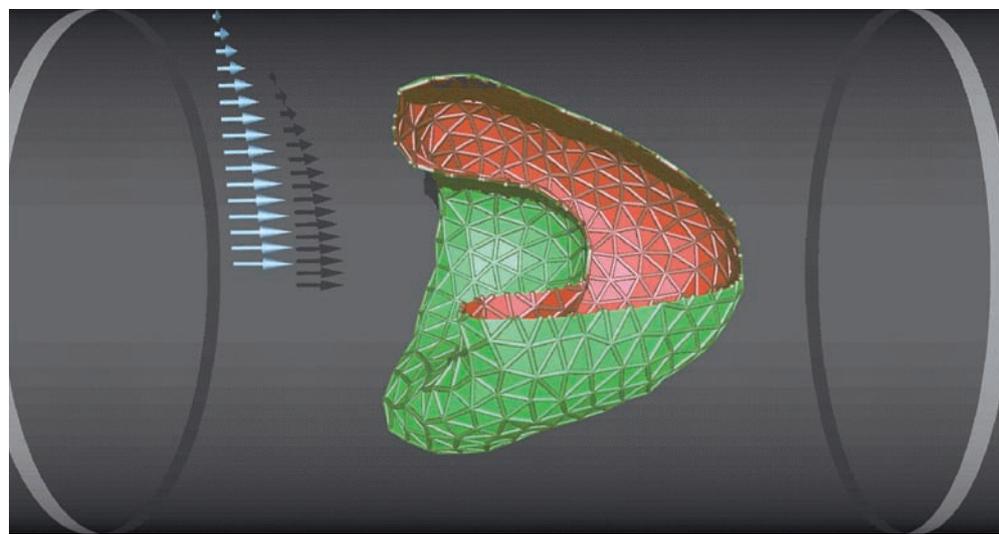
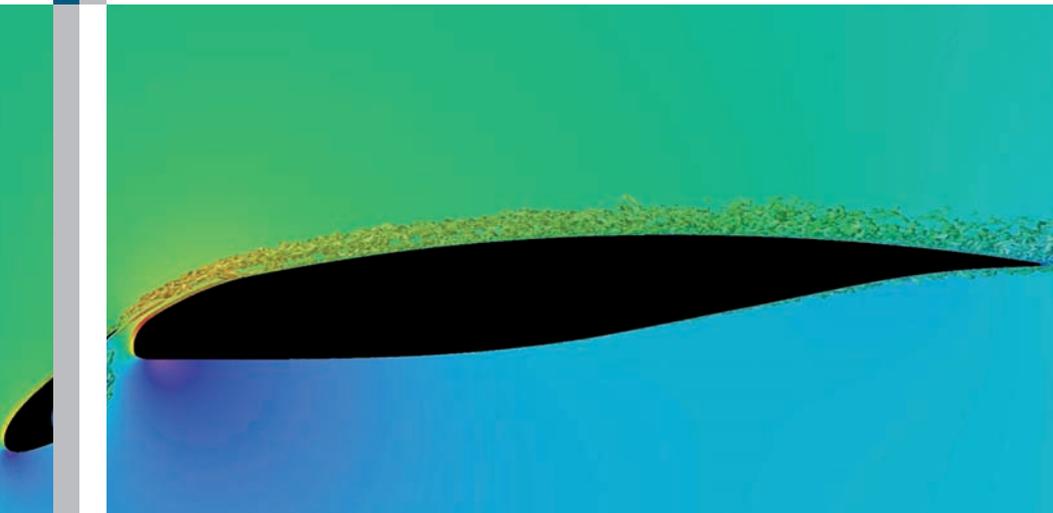
Das Forschungszentrum Jülich ist für uns ein wichtiger Partner und nicht nur Kunde. Vor allem in den Bereichen Kommunikationsinfrastruktur und Algorithmenentwicklung setzen die Jülicher hohe Maßstäbe, die unserer gemeinsamen Entwicklung der nächsten Generation von Supercomputern zugute kommen. Dank unserer komplementären Perspektiven auf dem Gebiet des Supercomputings ergänzen wir uns in dem Ziel, effektive, kompakte Rechner mit höchster Leistung für große Forschungsaufgaben mit hohem Datenaufkommen zu entwickeln.

Martin Jetter ist der Vorsitzende der Geschäftsführung der IBM Deutschland GmbH. In der Rangliste der schnellsten Rechner der Welt erreicht IBM mit seiner Blue-Gene-Architektur regelmäßig den Spitzenplatz. Unter den Top 500 werden rund 230 Systeme von IBM geführt.



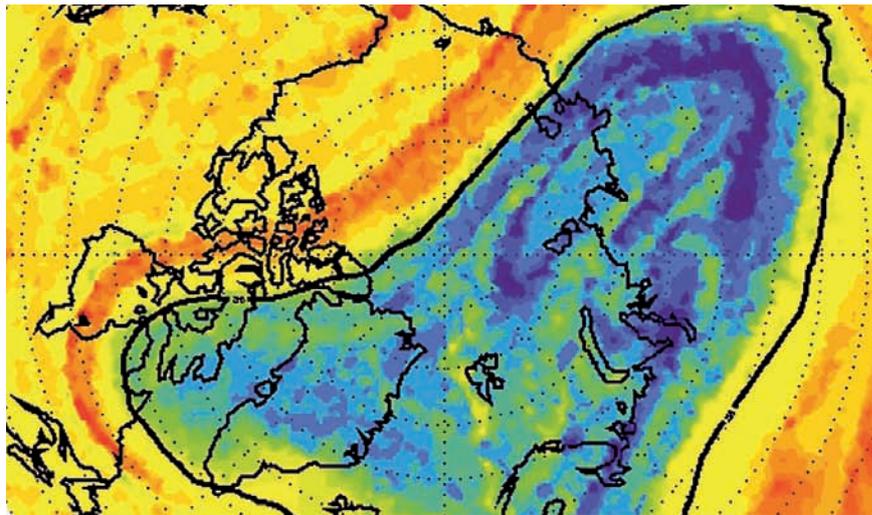
Simulation Sciences: Komplexe Probleme lösen

Virtuelles Labor, Teleskop, Zeitmaschine: Die Simulation mit Supercomputern dient Forschung und Industrie.



Mit Supercomputern erhält man Einblicke in komplexe Systeme. Simulationen werden angewandt, wo Experimente aus finanziellen und ethischen Gründen, wegen Risiken oder prinzipiell aus physikalischen und technischen Gründen nicht möglich sind, wie es etwa in Medizin oder in der Astronomie oft der Fall ist. Der Wissenschaft verhelfen sie dadurch zu neuen Erkenntnissen, in der Industrie verkürzen sie den Weg zum Produkt. In Jülich ermöglichen Simulationen am Supercompu-

ter die Überprüfung theoretischer Modelle ebenso wie virtuelle Experimente mit sonst unerreichbarer Präzision. Simulationen entwickeln sich – neben Theorie und Experiment – zum dritten Standbein der Forschung und werden zur unabdingbaren Voraussetzung für die großen Erkenntnisprünge der Zukunft. Der Supercomputer ist flexibel. Neben der Möglichkeit, ihn als virtuelles Labor, Mikroskop oder Teleskop einzusetzen, dient er auch als virtuelles Fenster in die Zukunft. Detaillierte Simu-



*Wetter, Medizin und Flugzeuge:
Es gibt wohl kein Forschungsgebiet, auf dem Supercomputer wie JUGENE nicht eingesetzt werden und so zu neuen Erkenntnissen beitragen können. Mit Simulationen lassen sich komplexe Systeme und Wechselwirkungen erfassen und ihr Verhalten abschätzen. Aus diesem Wissen entstehen Frühwarnsysteme, passgenaue Medikamente oder bessere Technik.*



Forschung auf dem Jülicher Supercomputer:

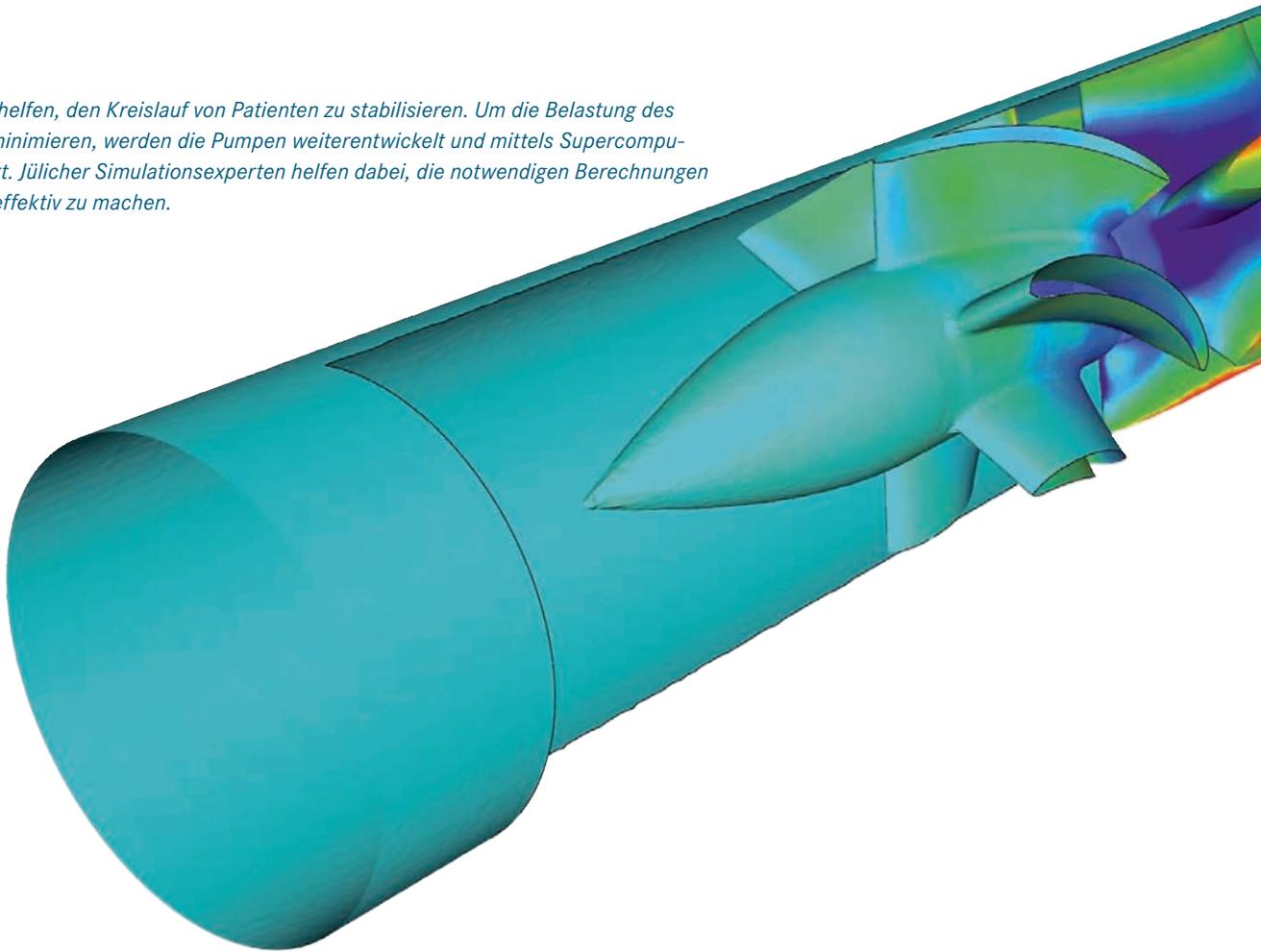
- Schadstoffe im Boden
- Magma im Erdinneren
- Chemische Reaktionen in der Atmosphäre
- Galaxien und Sternbildung
- Polymere in Lösungen
- Laser und Teilchenphysik
- Proteinfaltung in Zellen
- biologische Membranen
- Flugzeug- und Automobilbau
- Brandschutz und Evakuierungsszenarien

Simulationen erlauben es, die Folgen menschlichen Handelns abzuschätzen und Empfehlungen auszusprechen. Klimaprognosen erlauben uns schon heute eine Einschätzung, welche Landstriche sich auf Veränderungen vorbereiten müssen. Wettervorhersagen helfen, bei Stürmen wie „Katrina“ und „Kyrill“ rechtzeitig Häuser zu sichern und Menschenleben zu retten.

Perspektive: Schlüsseltechnologie für das 21. Jahrhundert

Der Bedarf an Rechenleistung wächst unaufhaltsam, denn jeder möchte sich den damit verbundenen Wettbewerbsvorteil sichern. Das Jülicher Know-how hilft dabei.

Blutpumpen helfen, den Kreislauf von Patienten zu stabilisieren. Um die Belastung des Kranken zu minimieren, werden die Pumpen weiterentwickelt und mittels Supercomputern optimiert. Jülicher Simulationsexperten helfen dabei, die notwendigen Berechnungen schnell und effektiv zu machen.



Ob Medizin oder Informationstechnologie, Umwelt- oder Energieforschung – Wissenschaftler aus den unterschiedlichsten Fachgebieten sind davon überzeugt, dass zukünftig wesentlicher Erkenntnisfortschritt zu erwarten ist, wenn Simulationsmethoden mit Supercomputern eingesetzt werden. In Jülich finden sie neben der Hardware auch die kompetenten Ansprechpartner in Sachen Methodik und Algorithmen. Nur mit dieser Kombination lässt sich eine Spitzenposition in der Forschung erreichen.

Die Zahl der Forschergruppen und die Komplexität der Forschungsfragen steigern den Bedarf an Rechenressourcen immer weiter. In den kommenden fünf Jahren soll in Deutschland mehr als 1 000-mal so viel Rechenzeit zur Verfügung stehen wie heute. Der Supercomputer wird zu einer zentralen Schlüsseltechnologie, wenn es um die Priorität bei wissenschaftlichen Veröffentlichungen oder industriellen Patenten geht. Der effiziente und produktive Einsatz von Supercomputern, wie er in Jülich bereits Alltag ist, wird zur Schlüsselkompetenz für die Forscher des 21. Jahrhunderts.

JARA|SIM

„Forschung extrem beschleunigt“

Interview mit Marek Behr, RWTH Aachen

Welches Ziel hat Ihre Forschung?

Herzerkrankungen sind in Europa weit verbreitet und eine häufige Todesursache. Einigen Patienten kann geholfen werden, in dem man ihnen herzunterstützende Blutpumpen einsetzt. Mein Team besteht aus Ingenieuren und Informatikern. Sie simulieren den komplexen Strömungsverlauf in den Pumpen und entwickeln sie weiter, so dass die Pumpen einerseits den Blutkreislauf effektiv unterstützen und andererseits die empfindlichen Zellen im Blut nicht zerstören. Durch die hohe Drehzahl der bisherigen Pumpen üben Turbulenzen auf Blutzellen eine hohe Scherung aus und zerquetschen viele.

Welche Rolle spielt der Supercomputer für Ihre Arbeit?

Der Supercomputer ist unser Handwerkszeug. Um eine Blutpumpe zu simulieren, bedarf es einer Rechenleistung, die mit ein paar vernetzten Computern nicht zu erreichen ist. Wir nutzen Tausende Prozessoren auf den Jülicher Rechnern, um echte Pumpen und Strömungen zu simulieren. Dabei entwickeln wir unsere eigene Software. Sie muss einerseits das physikalische Modell realitätsnah beschreiben und andererseits die Architektur des Supercomputers optimal nutzen.

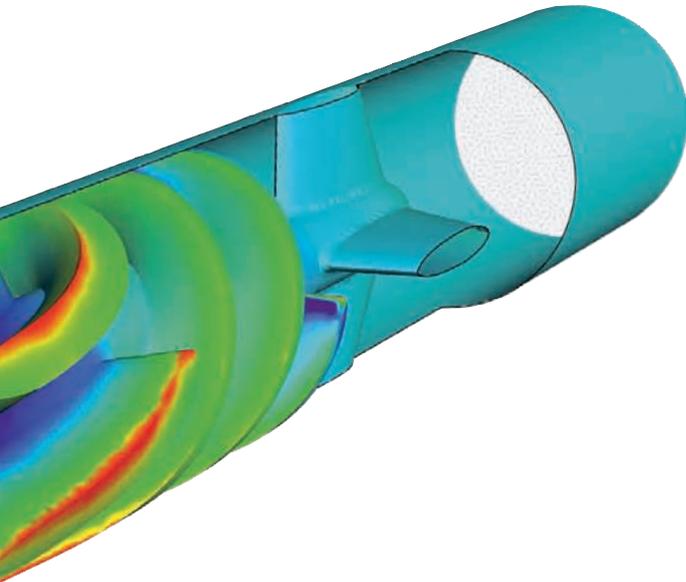
Warum kooperieren Sie mit dem Forschungszentrum Jülich ?

Die Jülicher Kompetenz hat unsere Forschung extrem beschleunigt. Und ich spreche nicht nur von Rechenleistung. Mit dem Jülicher Expertenteam haben wir unsere Software einer gezielten Leistungsanalyse unterzogen und viele Engstellen beseitigt. Wir können nun mehr Prozessoren parallel nutzen und die Rechenzeit verringern. Statt nur einer Konfiguration in mehreren Wochen können wir sie nun in ein paar Tagen durchrechnen. So können wir schnell konkrete Verbesserungen in die Praxis umsetzen und Patienten helfen.

Prof. Dr. Marek Behr leitet den Lehrstuhl für Computergestützte Analyse Technischer Systeme an der RWTH Aachen und ist der wissenschaftliche Direktor der Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced



Study in Computational Engineering Science“ (AICES). Innerhalb JARA-SIM, der Jülich Aachen Research Alliance – Section Simulation Science, arbeitet er mit Jülicher Wissenschaftlern zusammen. Behr entwickelt seit dem Jahr 2000 Blutpumpen; zurzeit arbeitet er daran, ein maßgeschneidertes Modell für Kinder zu entwickeln.



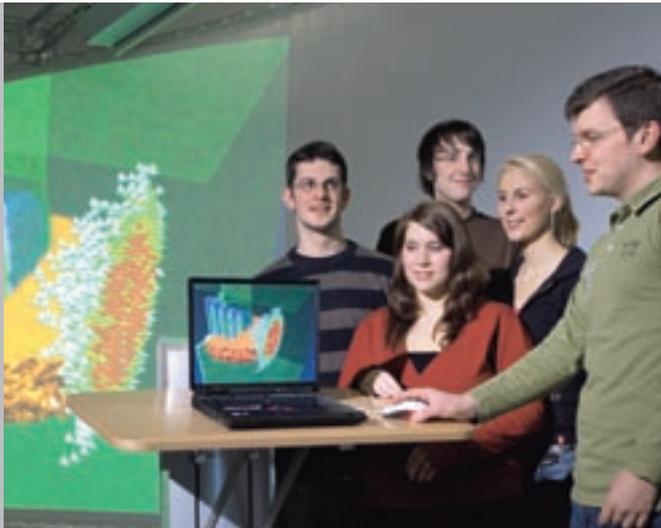
Bedarf an Supercomputing-Kapazitäten in Deutschland

Forschungsfeld	2005-2007	2007-2009	2010
Klima und Umwelt	20	50 -100	>500
Geophysik	1	10 -100	>1 000
Nanoskalige Materialien	1	10-50	>200
Festkörperforschung	1	50 -100	>1 000
Strömungsmechanik	2,5-10	25-100	>1 000
Astrophysik	10	50-100	>500
Teilchenphysik	30	100	>1 000
Materialforschung	10	50-100	>500
Theoretische Chemie	3	25-125	>300
Weiche Materie	3	30	>200
Biophysik und Bioinformatik	3-15	18-80	>100
Plasmaphysik	10	50	>500

alle Angaben in Teraflop/s, Hillebrandt et al., 2005

Standort Jülich: Kompetenz aus einer Hand

Im *Jülich Supercomputer Centre* werden Hardware, Software und Ausbildung auf einzigartige Weise miteinander verknüpft.



Das *Jülich Supercomputing Centre* (JSC) stellt seine Expertise über 200 Forschergruppen in Europa zur Verfügung. Rund 120 Beschäftigte arbeiten an allen Aspekten rund um das Supercomputing und stehen als Ansprechpartner für Simulationswissenschaftler zur Verfügung. Drei Aufgabenfelder zeichnen das JSC aus:

- **Betrieb und Weiterentwicklung von Supercomputern der höchsten Leistungsklassen**

Dank des Jülicher dualen Konzeptes stehen Nutzern die passenden Computerressourcen zur Verfügung: JUGENE, einer der schnellsten Rechner der Welt, wird auf rechenintensive Probleme angesetzt – JUMP, mit über 5 Terabyte Arbeitsspeicher ausgerüstet, steht für datenintensive Anwendungen zur Verfügung. Im Hintergrund arbeitet die unterstützende Infrastruktur mit zum Beispiel bis zu 10 Petabyte an Festplatten- und Bandspeicherkapazitäten. Um auch in Zukunft den steigenden wissenschaftlichen Bedarf an Rechenleistung mit innovativer und effizienter Technik bedienen zu können, werden in Jülich die Entwicklungen der Computerindustrie evaluiert. In Zusammenarbeit mit Industriepartnern werden Konzepte ständig verbessert und Prototypen entwickelt.

- **Professionelle Unterstützung externer Wissenschaftler**

Der effektive Einsatz von Supercomputern bedarf der technischen Unterstützung ebenso wie des wissenschaftlichen

Austauschs. Jülicher Experten entwickeln Software für die Leistungsanalyse von Anwendungen, für die mathematische Modellierung und für den schnellen, nahtlosen Zugriff auf verschiedenste Ressourcen in Netzen. Mit ihrer Arbeit und Erfahrung machen sie Anwendungen effektiver und schneller. Im *Jülich Supercomputing Centre* selbst forschen aber auch Simulationswissenschaftler etwa an den Themen Plasmaphysik, Materialforschung und Biowissenschaften. In „Simulation Laboratories“ werden die Aktivitäten nach Fachgebieten gebündelt und in Kooperationen mit externen Fachkollegen eingebracht.

- **Ausbildung von wissenschaftlichem Nachwuchs**

Die Simulationswissenschaften sind eine neue innovative Disziplin. Mit jeder Computergeneration erweitern sich auch die Möglichkeiten dieser jungen Wissenschaft enorm. Deshalb legt das *Jülich Supercomputing Centre* Wert darauf, dass die neusten Entwicklungen regelmäßig in Workshops und Seminaren vermittelt werden. Studenten, Doktoranden und Wissenschaftler aus ganz Europa nehmen daran teil. Ab 2008 wird auch die *German Research School for Simulation Sciences* auf dem Jülicher Campus ihren Betrieb aufnehmen. Sie wird Master- und PhD-Studiengänge für exzellente Studentinnen und Studenten sowie Doktorandinnen und Doktoranden anbieten.

„Auf dem Weg in die Exaflop/s-Ära“

Von Thomas Lippert

Das Supercomputing gilt als strategische Schlüsseltechnologie sowohl für die theoretische und experimentelle Forschung als auch die industrielle Produktionsoptimierung. Bei stetig zunehmender Komplexität der zu untersuchenden Systeme steigen die Anforderungen an Supercomputer, Netzwerke und Datenzentren exponentiell. Dies geht einher mit zunehmenden Herausforderungen an Algorithmenforschung, Softwaretechnologie und Visualisierungsverfahren. Vor diesem Hintergrund widmet sich das *Jülich Supercomputer Centre (JSC)* der Bereitstellung von Supercomputern der höchsten Leistungsklasse sowie der Entwicklung von Methoden und Werkzeugen zur Unterstützung der Anwender auf verschiedenen Gebieten der Computational Sciences. Das JSC besitzt einen ausgeprägt interdisziplinären Charakter, hat eine lange Tradition als erstes nationales Höchstleistungsrechenzentrum Deutschlands und bildet eine wichtige Brücke zu einer Vielzahl von Forschungsbereichen.

Zusammen mit unseren Partnern stellen wir seit mehr als 25 Jahren der deutschen und europäischen Wissenschaft unentbehrliche Großgeräte und Infrastrukturen zur Verfügung. Ab 2010 will das JSC als europäisches Petaflop/s-Supercomputing-Zentrum in Jülich Supercomputing-Ressourcen und Dienste der weltweit höchsten Skalierbarkeits- und Performanceklasse anbieten. Dieser Anspruch soll durch verstärkte Aktivitäten in Design und Bau zukünftiger Höchstleistungs-Systeme in Kooperation mit europäischen Firmen befördert werden, mit dem Ziel, ab 2016 Exaflop/s-Leistung* anzubieten.

Um die Forschung gezielt und fachspezifisch zu unterstützen, werden Simulations-Laboratorien geschaffen. Eine am Supercomputerzentrum angesiedelte Kerngruppe von Fachwissenschaftlern unterstützt externe, assoziierte Mitglieder mit dem Know-how, um die höchste Effizienz ihrer Simulationen auf dem Supercomputer zu erreichen. Die ersten Laboratorien werden für die Bereiche Plasmaphysik, Erdsystemwissenschaften, Biologie und Nanowissenschaften eingerichtet. Im europäischen Rahmen bereiten wir als Projektbüro von PRACE, der „Partnership for Advanced Computing in Europe“, die organisatorischen, rechtlichen und technischen Voraussetzungen für Petaflop/s-Infrastrukturen vor. Wir entwickeln Grid-Technologien – etwa die Grid-Middleware UNICORE – sowohl für das vernetzte Supercomputing auf der höchsten Leistungsebene als auch für die Interoperabilität mit Grids für datenintensive Anwendungen wie für das vom BMBF geförderte D-Grid sowie die europäischen Grid-Initiativen EGEE und EGI.

*(Trillionen Rechenoperationen pro Sekunde)

Ausbildung und Lehre haben in Jülich ihren festen Platz. Dabei kommen die Studierenden mit den neusten Methoden und Techniken in Kontakt (links). In der modernen Rechnerhalle des Jülich Supercomputing Centre stehen die großen Supercomputer wie JUGENE, auf denen Simulationen und Modelle berechnet werden (rechts). Wichtig ist es, die absolute Kontrolle über Rechnung und Technik zu behalten. In Jülich entwickelte Software-Tools helfen dabei (mitte).

Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert leitet das *Jülich Supercomputing Centre (JSC)* und ist Direktor des Institute for Advanced Simulation sowie des John von Neumann Institute for Computing. Das JSC betreibt mehrere Supercomputer der weltweit höchsten Leistungsklasse und entwickelt in Zusammenarbeit mit den Anwendern und zu deren Unterstützung Simulationsmethoden, mathematische Modelle und Softwarewerkzeuge, die international Beachtung finden.



Jülichs Partner – Partner Jülich

In zahlreichen Kooperationen spielt das *Jülicher Supercomputer Centre* national und international eine prägende Rolle.

Das Forschungszentrum Jülich treibt mit dem JSC die Entwicklung der Simulationswissenschaften und der notwendigen Supercomputer voran. Es baut dabei auf starke Förderer, Partner und Netzwerke:

- Supercomputing wird in Jülich von der **Helmholtz-Gemeinschaft** im Helmholtz-Programm „Wissenschaftliches Rechnen“ durch das BMBF gefördert. In diesem Programm arbeitet Jülich eng mit dem Forschungszentrum Karlsruhe auf dem Gebiet des Grid-Rechnens zusammen. Die Beschaffung der Supercomputer des JSC wird vom BMBF und dem Wissenschaftsministerium des Landes Nordrhein-Westfalen gefördert.
- In **JARA-SIM (Jülich Aachen Research Alliance – Section Simulation Science)** bündeln das Forschungszentrum und die RWTH Aachen ihre Kompetenzen: Lehrstühle, DFG-Sonderforschungsbereiche, ein virtuelles Helmholtz-Institut, Studiengänge, Graduiertenschule und Elite-Ausbildung in der **German Research School for Simulation Sciences**. In der Region Aachen-Jülich vernetzen sich damit universitäre und außeruniversitäre Forschung auf einmalige Weise.
- Im Rahmen seines **John von Neumann-Instituts für Computing (NIC)** betreibt Jülich zusammen mit den Helmholtz-Partnerzentren DESY und GSI das traditionsreichste und größte deutsche Höchstleistungsrechenzentrum.
- Im 2007 auf Initiative von Bundesbildungsministerin Annette Schavan gegründeten **Gauß-Centre for Supercomputing (GCS)** kooperiert das JSC mit den beiden anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Stuttgart und München. Als derzeitiger Sprecher des GCS vertritt Jülich die deutschen Interessen auf internationaler Ebene.



- Als Konsortialführer von **PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)** erarbeitet Jülich konkrete Pläne, um die europäische Supercomputing-Infrastruktur aufzubauen und an die Weltspitze zu führen. Die EU bewilligte für die Vorbereitungsphase bis 2010 rund 10 Millionen Euro. Weitere 10 Millionen tragen die Partner aus 14 europäischen Ländern selbst bei. Ein Ziel ist es, bereits im Jahr 2009 zwei Petaflop/s-Systeme in Deutschland und Frankreich zu installieren. Mit vorbereitenden Untersuchungen und Entwicklungen für die übernächste Generation von Supercomputern will das Projekt langfristige Entwicklungen anstoßen.
- Als Gründungsmitglied von **DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications)** entwickelt das JSC mit 11 Partnern Methoden, um Forschern einen einfachen und nahtlosen Zugang auf das europäische Supercomputernetz zu ermöglichen. Des Weiteren ist es Mitglied von Enabling Grids in E-Science (EEGE) sowie D(eutschland)-Grid und entwickelt die Grid-Software UNICORE.
- Mit den Supercomputing-Forschern vom **Oak Ridge National Laboratory** und vom **Lawrence Berkeley National Laboratory** in den USA werden gemeinsame Projekte und virtuelle Institute betrieben.
- In zahlreichen Kooperationen mit der Industrie wird Hardware und Software getestet und entwickelt, um die Grundlage für neue, leistungsfähigere Supercomputer zu schaffen.

Innerhalb Europas haben sich im Jahr 2007 die führenden Rechenzentren aus 14 Ländern zum Verbund PRACE zusammengeschlossen. Nach einem gemeinsamen Plan wollen sie eine weltweit führende Supercomputing-Infrastruktur in Europa errichten.

„Supercomputing – Eine Aufgabe für Großforschungszentren“

Interview mit Thom Mason, ORNL

Welche Rolle spielt Supercomputing in der Wissenschaft?

Heute versucht die Wissenschaft, komplizierte Fragen zu lösen, die viele Freiheitsgrade beinhalten. Dies ist nur durch den Einsatz von leistungsfähigen Computern möglich. Materialwissenschaftliche Modelle etwa beinhalten Tausende von Atomen, die auf komplexe Art und Weise miteinander wechselwirken, und Klimamodelle verkleinern die Gittergröße von ein paar hundert Kilometern auf nur wenige Kilometer. Auf beiden Gebieten brauchen wir bessere und präzisere Vorhersagen der Systemeigenschaften. Hierfür sind Computer mit einer angemessenen Speicherkapazität und Verarbeitungsgeschwindigkeit erforderlich, die Szenarien auf langen Zeitskalen in kurzer Zeit simulieren können.

Welche Rolle werden große Forschungseinrichtungen wie Jülich und ORNL auf diesem Gebiet spielen?

Computer sind leistungsfähiger geworden. Jedoch ist es gleichzeitig komplizierter geworden, sie zu installieren und zu betreiben. Um eine Spitzenposition einzunehmen, ist das Potenzial eines Großforschungszentrums erforderlich. Der Bedarf der Infrastruktur wird immer anspruchsvoller im Hinblick auf die elektrische Leistung, Kühlung und Investitionskosten. Daher muss sichergestellt werden, dass die Kapazität der verwendeten Ressourcen zu 100 Prozent effektiv genutzt wird. Dies gestaltet sich für kleinere Gruppen schwierig. Wir als Großforschungszentren sind gut ausgerüstet, um diese große Aufgabe in Angriff zu nehmen und um diese Ressourcen einer breiteren Forschungsgemeinschaft zur Verfügung zu stellen.

In welchen Forschungsbereichen, die Supercomputer nutzen, sehen Sie gemeinsame Interessen und Projekte?

Höchstleistungsrechnen ist für die Materialwissenschaften unabdingbar, wenn Versuchsdaten mit theoretischen Modellen verglichen werden. Dies wird sowohl in Jülich als auch in Oak Ridge betrieben. Auf Gebieten, die sowohl Experimente als auch Supercomputer nutzen, können gemeinsame Projekte entstehen. Das Thema Klima im Allgemeinen wird ebenfalls zunehmend wichtiger. Ein drittes Gebiet könnte die Kernfusion darstellen.

Dr. Thom Mason ist Direktor des Oak Ridge National Laboratory (ORNL). Das ORNL ist die größte Wissenschafts- und Energieforschungseinrichtung des US-Energieministeriums. Mit 4 200 Mitarbeitern, 20 Nutzereinrichtungen und einem Budget von ca. 1,2 Milliarden US-Dollar betreibt es Forschung auf den Gebieten Materialwissenschaften, Energieforschung und Supercomputing.



Das Forschungszentrum Jülich

Das Forschungszentrum Jülich betreibt interdisziplinäre Spitzenforschung zur Lösung großer gesellschaftlicher Herausforderungen in den Bereichen Gesundheit, Energie und Umwelt sowie Information. Einmalig ist dabei die Verknüpfung mit den beiden Schlüsselkompetenzen Physik und Supercomputing. In Jülich werden sowohl langfristig angelegte, grundlagenorientierte Arbeiten als auch konkrete technologische Anwendungen erarbeitet. Mit rund 4 400 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern gehört Jülich, Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft, zu den größten Forschungszentren Europas.

Das *Jülich Supercomputing Centre* im Forschungszentrum Jülich betreibt seit 1987 zusammen mit seinen Partnern das erste

deutsche Höchstleistungsrechenzentrum und setzt im *Jülicher Institut for Advanced Simulation*, das Anfang 2008 gegründet wurde, die lange Tradition des wissenschaftlichen Rechnens in Jülich fort. Es stellt den Forschern in Deutschland und Europa über ein unabhängiges Peer-Review-Verfahren Rechenzeit der höchsten Leistungsebene zur Verfügung. Im JSC arbeiten rund 120 Experten und Ansprechpartner für alle Aspekte rund um Supercomputing und Simulationswissenschaften. Das *Jülich Supercomputing Centre* will als Mitglied des deutschen Gauß Centre for Supercomputing zusammen mit der französischen Forschungsorganisation CEA die ersten beiden europäischen Supercomputer mit einer Leistung von über einem Petaflop/s Ende 2009 nach Deutschland und Frankreich holen.



Zahlen und Fakten: Jülicher Supercomputing Centre

Beschäftigte:	Gesamt 120
Darin enthalten:	ca. 70 Wissenschaftler ca. 20 Lehrbeauftragte
Rechenleistung:	ca. 280 Teraflop/s
Speicherplatz:	ca. 1 Petabyte auf Festplatten ca. 10 Petabyte auf Bändern
Gekühlte Stellfläche:	ca. 1 700 Quadratmeter 4 Megawatt Kühlleistung
Externe Projekte pro Jahr:	ca. 200, etwa 20 Großprojekte
Verteilung der Rechenzeit:	40 % Universitäten 40 % Helmholtz-Gemeinschaft 10 % EU-Projekte 5 % Max-Planck-Gesellschaft 5 % Industrieforschung
Rechenzeitvergabe:	Peer-Review-Verfahren
Simulation Labs:	Plasmaphysik, Nanophysik und Materialwissenschaften Erdsystem-Wissenschaften Biophysik und Bioinformatik
Beteiligungen:	über 20 EU-, DFG- und BMBF-geförderte Projekte
Mitglied in:	GCS, PRACE, JARA-SIM NIC, GGF, OASIS, DEISA

Zahlen und Fakten: Forschungszentrum Jülich

Gesellschafter:	Bundesrepublik Deutschland (90 %) Land Nordrhein-Westfalen (10 %)
Stammkapital:	511 291 Euro
Budget:	jährlich 360 Millionen Euro (einschl. Sonderaufgaben)
Beschäftigte:	Gesamt 4 377
darin enthalten:	Wissenschaftler 1 273 davon Doktoranden und Stipendiate 343 Technisches Personal 1 491 Auszubildende 350
Gastwissenschaftler:	jährlich über 800 aus mehr als 50 Ländern



Impressum

Herausgeber

Forschungszentrum Jülich GmbH
52425 Jülich
Telefon: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61 4666
E-Mail: info@fz-juelich.de | Internet: www.fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/supercomputing

Redaktion

Kosta Schinarakis

Grafik und Layout

SeitenPlan GmbH Corporate Publishing, Dortmund

Fotos

IBM Deutschland GmbH (S. 4,5), Wolfgang Schröder/AIA/RWTH Aachen (S. 6, o.li.), Falcon/DLR (S. 6, o.re.), Carlo Dapino (S. 6 u.li.), Dainis Derics (S. 7 u.), Marek Behr/RWTH Aachen (S. 8), Peter Winandy/RWTH Aachen (S. 9), ORNL (S. 13), Forschungszentrum Jülich (alle weiteren Fotos)

Stand 1. Februar 2008

