

Neutronen (blau) sind eine Winzigkeit schwerer als Protonen (gelb). Lange Zeit verfügte die Wissenschaft weder über die Methoden noch über ausreichend leistungsfähige Computer, um die Differenz präzise zu berechnen. Einer internationalen Forschergruppe ist das nun mithilfe von Supercomputern wie JUQUEEN gelungen.

Ein Meilenstein der Computersimulation

Zwei Jahre lang rechneten die Jülicher Supercomputer JUQUEEN und JUROPA sowie ihre Kollegen in Deutschland und Frankreich. Dann war es geschafft: Erstmals war es einer internationalen Forschergruppe gelungen, den winzigen Masseunterschied zwischen Neutron und Proton von Grund auf zu berechnen. Gerade einmal 0,14 Prozent ist das Neutron schwerer – oder anders ausgedrückt: $2,3 \cdot 10^{-30}$ Kilogramm. Dieser Unterschied ist winzig, aber entscheidend. Würde die Differenz nur ein wenig abweichen, so ergäbe sich ein völlig anderes Universum mit mehr Neutronen, weniger Wasserstoff und weniger schweren Elementen.

Physiker feiern es als Durchbruch, dass der Unterschied 80 Jahre nach der Entdeckung des Neutrons endlich aus theoretischen Modellen berechnet werden kann. „Unsere Simulation ist eine weitere Bestätigung des Standardmodells der Teilchenphysik“, sagt Prof. Kálmán Szabó vom Jülich Supercomputing Centre. Er und sein Kollege Dr. Stefan Krieg gehören zu dem internationalen Team aus Deutschland, Frankreich und Ungarn, das die Simulation, unter

Führung des Wuppertaler Forschers Zoltán Fodor, entwickelt und durchgeführt hat.

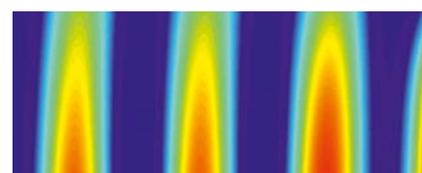
Prof. Kurt Binder, Vorsitzender des Wissenschaftlichen Rats des John von Neumann-Instituts für Computing, sprach von einem „Meilenstein der Computersimulation“. Bislang gab es weder die Methoden noch die entsprechend leistungsfähigen Computer, um die winzige Differenz präzise zu bestimmen. Erst mit JUQUEEN, einem der aktuell leistungsstärksten Supercomputer Europas, und neuen Simulationsverfahren ist es möglich geworden, alle theoretisch vorhergesagten Effekte zu berücksichtigen. Auch der Physiknobelpreisträger Frank Wilczek setzt große Hoffnung auf die neuen Simulationswerkzeuge: „Denkbar sind wesentlich genauere Modellierungen von Supernovae-Explosionen und so seltsamen Objekten wie Neutronensternen. Die Verwirklichung des Traums von einer verfeinerten Nuklearchemie könnte näher rücken, etwa von verbesserten Energiespeichern und Ultrahochenergie-Lasern.“

Science, DOI: [10.1126/science.1257050](https://doi.org/10.1126/science.1257050)

IN DIESER AUSGABE

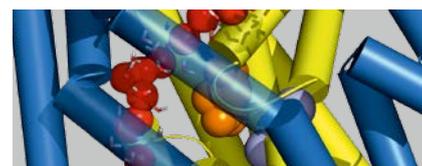
SEITE 2:

Neuer Ansatz für Terahertz-Quelle



SEITE 3:

Doppelfunktion von Glutamat-Transportern aufgelöst



SEITE 4:

Kurznachrichten
Termine
Impressum

www.fz-juelich.de/ias/jsc

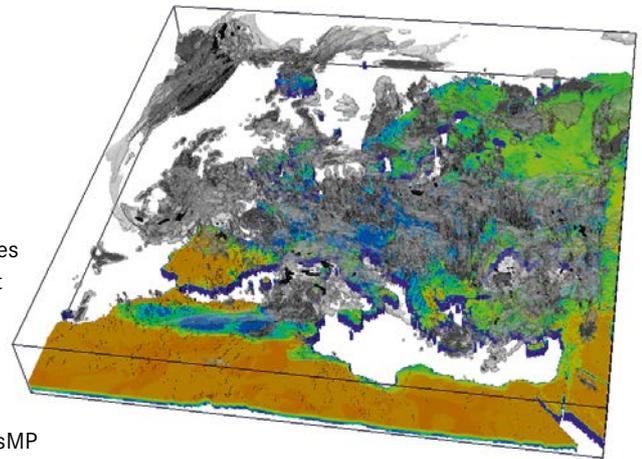
Die Kreisläufe geschlossen

Auf den ersten Blick wirkt der Wasserkreislauf gar nicht so kompliziert. Meerwasser verdunstet und gelangt als Niederschlag auf die Erdoberfläche. Dort verdunstet es erneut, versickert im Boden oder wird von Flüssen zurück ins Meer transportiert. Dieser Kreislauf wird jedoch durch komplexe Interaktionen beeinflusst, etwa zwischen Atmosphäre, Landoberfläche und Böden. Jülicher und Bonner Wissenschaftler haben eine Modellplattform entwickelt, die Terrestrial Systems Modeling Platform (TerrSysMP). Damit wollen sie die terrestrischen Wasser-, Energie- und Stoffflüsse für ganz Europa nachbilden.

TerrSysMP liefert dafür vollgekoppelte Simulationen. Das bedeutet, dass beispielsweise Grundwasser-, Boden- und Atmosphärenmodelle tatsächlich miteinander interagieren. Andere Simulationen verwenden häufig isolierte Modelle, die nur Prozesse im jeweiligen Bereich abdecken. „Dadurch werden Wechselwirkungen nur unzureichend berücksichtigt. Bei unserem Modell haben wir die Kreisläufe komplett geschlos-

sen, ob Masse oder Energie, es geht nichts verloren“, erklärt Prof. Stefan Kollet, Leiter des Centre for High-Performance Scientific Computing in Terrestrial Systems (HPSC TerrSys). Derzeit berechnet TerrSysMP Europa und seine Flusseinzugsgebiete mit einer Auflösung von zwölf mal zwölf Kilometern, Testläufe mit drei mal drei Kilometern wurden aber bereits durchgeführt.

Dabei fallen nicht nur enorm viele Daten an. Es müssen auch räumlich und zeitlich sehr unterschiedliche Prozesse abgedeckt werden. So dauern einige nur Sekunden, andere Tage oder Jahre. „Damit der Supercomputer JUQUEEN möglichst effizient rechnet, haben wir TerrSysMP so angepasst, dass die unterschiedlichen Komponenten gleich schnell laufen“, sagt Dr. Klaus Görgen, Leiter des Simulation Laboratory Terrestrial Systems, das zum HPSC TerrSys gehört. Als nächstes müssen die Wissenschaftler prüfen, wie gut die Simulationen mit der Realität überein-



Vollgekoppelte Simulation des terrestrischen Wasser- und Energiekreislaufs von Grundwasserleitern über die Landoberfläche in die Atmosphäre: Momentaufnahme des Wolkenwassergehalts (grau) und der Bodenfeuchte (bunt) in Europa im Juni 2013.

stimmen. Bei guter Übereinstimmung können mit TerrSysMP künftig Prozesse analysiert werden, etwa der Einfluss des Grundwassers auf Wasser- und Energieumsätze. Aber auch Prognosen für Hochwasser und das Wasserressourcen-Management sind möglich.

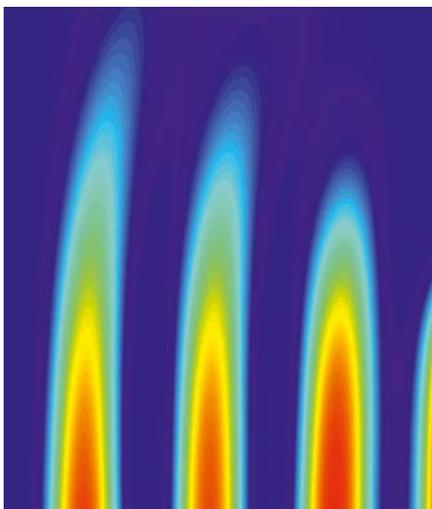
Neuer Ansatz für Terahertz-Quelle

Strahlung im Terahertz-Bereich besitzt interessante Eigenschaften: Einerseits durchdringt sie Textilien und Kunststoffe, andererseits absorbieren viele Materialien sie auf charakteristische Art und Weise. Die Strahlung wird beispielsweise bei der Früherkennung von Krebs, der Nahrungsmittel-

kontrolle, bei Körperscannern und ultraschnellem WLAN eingesetzt. Doch ihre Erzeugung ist schwierig und bislang nur eingeschränkt möglich. Eine internationale Forschergruppe hat ein neues Konzept für Terahertz-Quellen am Jülicher Supercomputer JUQUEEN simuliert. Mit der Methode lässt sich unter anderem die Wellenlänge flexibel einstellen.

Terahertz-Wellen sind im elektromagnetischen Spektrum zwischen den Mikrowellen und der Infrarotstrahlung angesiedelt. Um solche Wellen im Bereich zwischen 0,1 und 30 Terahertz zu erzeugen, werden seit der Jahrtausendwende vermehrt sogenannte Femtosekundenlaser genutzt. Dabei wird ein Gas mit zwei ultrakurzen Lichtpulsen beschossen. Aus den schnelleren Laserfrequenzen entsteht eine langsamer schwingende Terahertz-Welle.

Gemeinsam mit Forschern der Universität Strathclyde in Schottland und des Institute of Physics in Peking haben Wissenschaftler vom Jülicher Supercomputing Centre (JSC) diesen Ansatz weiterentwickelt. „Mithilfe aufwendiger Simulationen konnten wir zeigen, wie man Wellenlänge und Polarisierung der Terahertz-Strahlung durch ein starkes äußeres Magnetfeld gezielt beeinflussen kann“, sagt JSC-Forscher Prof. Paul Gibbon. „Insbesondere abbildende Verfahren könnten von der besseren Zeit- und Raumauflösung profitieren, etwa zur Untersuchung der Dynamik großer Biomoleküle wie der DNA“, ergänzt Humboldt-Stipendiat Dr. Wei-Min Wang, der ebenfalls am JSC tätig ist. Nach der erfolgreichen Simulation geht es nun an die praktische Umsetzung.



Ausbreitung einer Terahertz-Welle: Mit einem starken Magnetfeld lassen sich Wellenlänge und Ausbreitungsrichtung gezielt beeinflussen.

Physical Review Letters, DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.253901

Doppelfunktion von Glutamat-Transportern aufgelöst

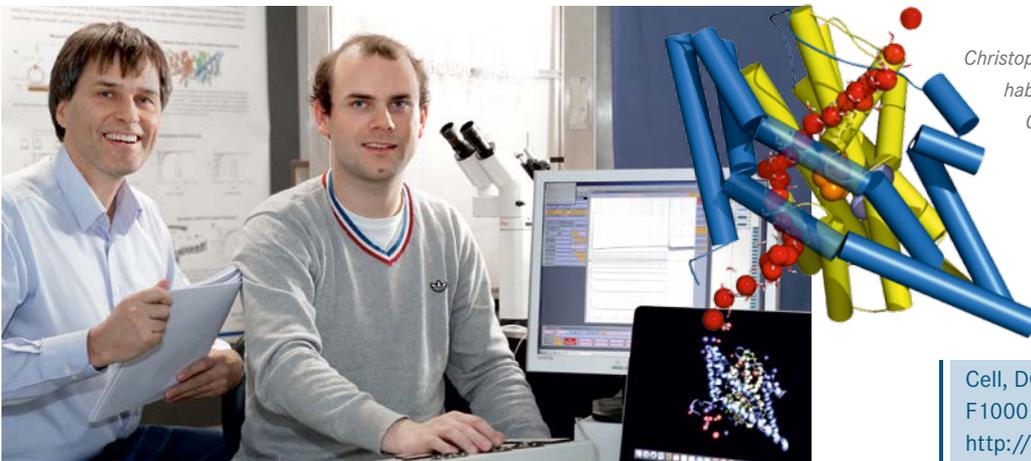
Einer Forschergruppe unter Jülicher Leitung ist ein Durchbruch im Verständnis von Glutamat-Transportern gelungen. Diese Proteine entfernen den Neurotransmitter Glutamat aus den Synapsen, sie spielen daher eine bedeutende Rolle bei der Informationsübertragung im zentralen Nervensystem des Menschen. Mit Simulationen am Jülicher Supercomputer JUROPA entwickelten die Wissenschaftler ein Modell der Proteinstruktur und konnten den Transporter bei der Arbeit beobachten.

Im Fokus des Teams um Prof. Christoph Fahlke vom Jülicher Institute of Complex Systems stand eine der wichtigsten Familien von Transportern: die Excitatory Amino

Acid Transporters (EAATs). Sie pumpen nicht nur Glutamat in die Zelle, sondern erlauben auch die selektive Passage von Chloridionen durch einen Ionenkanal – zwei physikalisch völlig unterschiedliche Transportprozesse. „Eine solche Doppelfunktion ist für verschiedene Proteine postuliert worden, wir konnten erstmals aufklären, wie es tatsächlich funktioniert“, erläutert Fahlke.

Versuche, den Ionenkanalmechanismus mit experimentellen Techniken zu enträtseln, waren stets fehlgeschlagen. Für den Durchbruch sorgten rechenintensive Molekuldynamik-Simulationen auf JUROPA. Zusammen mit Kollegen vom Max-Planck-Institut

für biophysikalische Chemie in Göttingen entwickelten die Forscher dazu ein atomares Modell eines EAAT-Proteins in einer Zellmembran. „Damit können wir die Strukturänderungen im Protein, die zur Ionenkanalöffnung führen, sehr genau vorhersagen“, erklärt der Jülicher Wissenschaftler Dr. Jan-Philipp Machtens. Die Ergebnisse stimmen nahezu perfekt mit elektrophysiologischen und fluoreszenzspektroskopischen Laborexperimenten überein, die die Forscher im Anschluss an die Simulationen durchführten. Als Nächstes wollen sie ihre neuen Erkenntnisse nutzen, um Glutamat-Transporter gezielt pharmakologisch zu verändern.



Christoph Fahlke (l.) und Jan-Philipp Machtens haben eine besondere Funktion von Glutamat-Transportern im Gehirn entschlüsselt.

Cell, DOI: 10.1016/j.cell.2014.12.035
F1000 Prime Recommendation:
<http://f1000.com/prime/725332607>

Active Memory Cubes: Hans-Meuer-Preis geht an JSC und IBM

Ein deutsch-amerikanisches Forscherteam erhält den Hans-Meuer-Preis, den die internationale Supercomputing-Konferenz ISC in diesem Jahr erstmals vergibt. Die Wissenschaftler des Jülich Supercomputing Centre (JSC), des IBM-Labors in Böblingen und des IBM Watson Research Center in den USA erhalten die Auszeichnung für ihre Arbeit über den Einsatz von Active Memory Cubes (AMC) im Hochleistungsrechnen. Die Arbeit ist im Rahmen des Exascale Innovation Centre entstanden, einer langfristigen Kooperation zwischen dem JSC und IBM zur Entwicklung von Exascale-Technologien. Der mit 3.000 Euro dotierte Preis wird auf der ISC-Konferenz im Juli 2015 in Frankfurt verliehen.

Die Forscher hatten mithilfe von Strömungssimulationen nach dem Lattice-Boltzmann-Verfahren und Simulationen zur Quantenchromodynamik (Lattice Quantum Chromodynamics) untersucht, wie sich der Einsatz von Active Memory Cubes auf Leistung und Energieeffizienz auswirkt. Bei dem von IBM entwickelten aktiven Speicher werden die Daten zum großen Teil direkt im Speicher verarbeitet. Das bedeutet, sie müssen nicht zum Hauptprozessor hin- und wieder zurückgeschoben werden. Das verbessert die Leistung und spart Energie. Gebaut wurde diese neuartige Hardware noch nicht. Die auf präzise Simulationen basierenden Ergebnisse demonstrieren jedoch das große Potenzial dieser Zukunftstechnologie.

Hans-Meuer-Preis

Die Auszeichnung ist nach dem 2014 verstorbenen Gründer der ISC-Konferenz, Hans Meuer, benannt. Sie wird künftig jährlich auf der ISC vergeben. Meuer, der auch an der Einführung der Top500-Liste der leistungsstärksten Supercomputer beteiligt war, arbeitete von 1962 bis 1973 in Jülich, ehe er eine Professur an der Universität Mannheim übernahm.



KURZNACHRICHTEN

Wechsel an der GCS-Spitze

Prof. Thomas Lippert, Leiter des Jülich Supercomputing Centre (JSC), ist neuer Vorstandsvorsitzender des Gauss Centre for Supercomputing (GCS). Die GCS-Mitgliederversammlung wählte ihn Mitte April 2015 zum Nachfolger von Prof. Michael M. Resch, dessen zweijährige Amtszeit in diesem Jahr auslief. Das GCS vereint die drei deutschen Höchstleistungsrechenzentren – das JSC, das Leibniz-Rechenzentrum in Garching und das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart – zu einer nationalen Einrichtung.



Erfolgreich eingeworben

Das Jülich Supercomputing Centre ist an vier Vorhaben beteiligt, die künftig Fördermittel aus dem Bereich „Centres of Excellence for Computing Applications“ des EU-Programms Horizont 2020 erhalten: Energy-oriented Centre of Excellence (EoCoE) will den Übergang zu einer kohlenstoffarmen Energieversorgung beschleunigen. Materials Design at the Exascale (MaX) setzt auf eine schnellere Entwicklung neuer Materialien. Bei E-Infrastructure for Software, Training and Consultancy in Simulation and Modelling (E-CAM) geht es nicht nur um neue Materialien, sondern auch um biologische Prozesse. Performance Optimisation and Productivity (POP) will Nutzern aus Wissenschaft und Wirtschaft helfen, Supercomputer noch effektiver einzusetzen. Alle vier Projekte sollen im Herbst starten.

Brandschutz in U-Bahnhöfen

Ein Brand in einem U-Bahnhof kann rasch zur Gefahr werden. Ein neues Projekt am Jülich Supercomputing Centre will die Sicherheit für die Fahrgäste erhöhen und die Ableitung von Rauchgas verbessern. Das Vorhaben ORPHEUS ist im Februar 2015 gestartet und wird drei Jahre lang vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. Mithilfe von realen Brandversuchen, Modellen im kleinen Maßstab und numerischen Strömungssimulationen erarbeiten die Partner technische Brandschutzkonzepte für geplante und bereits bestehende Stationen. Untersucht wird auch die Zusammenarbeit von Rettungskräften, Anlagenbetreibern und angelegenen Verkaufsstätten.

www.orpheus-projekt.de



JURECA ersetzt JUROPA

Im September geht ein neuer Supercomputer in Jülich ans Netz. JURECA (Jülich Research on Exascale Cluster Architectures) ersetzt das JUROPA-System, das seit 2009 in Betrieb ist. JURECA wird in seiner Endausbaustufe aus rund 1.850 Rechnerknoten bestehen. Dieses System, das das russische Unternehmen T-Platforms liefert, wird auf eine Spitzenleistung von etwa 1,8 Petaflop/s kommen. Damit ist es knapp achtmal schneller als der Vorgänger JUROPA.

Jetzt auch für Smartphone und Tablet!

Exascale Newsletter
www.exascale-news.de

„effzett“ (als Tablet-Magazin)
www.fz-juelich.de/app



iOS (iPad)



Android

TERMINE

am Jülich Supercomputing Centre

11.–14. August 2015

Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP im Rahmen des JSC-Gaststudentenprogramms

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

14.–18. September 2015

Workshop „Computational Solar and Astrophysical Modeling“

14.–16. Oktober 2015

Workshop „Lattice Practices 2015“

19.–20. Oktober 2015

Introduction to GPU programming using OpenACC

Dozenten: Anke Zitz, Thorsten Hater, Dr. Paul Baumeister, alle JSC, Jiri Kraus, NVIDIA

9.–11. November 2015

Data analysis and data mining with Python

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

Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre:

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

IMPRESSUM

EXASCALE NEWSLETTER des Forschungszentrums Jülich **Herausgeber:** Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich **Konzeption und Redaktion:** Dr. Anne Rother (v.l. S. d. P.), Tobias Schlöber, Christian Hohlfeld **Grafik und Layout:** Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich **Bildnachweis:** S. 1 o.: Bergische Universität Wuppertal/Thavis, Forschungszentrum Jülich; S. 2 o.: Forschungszentrum Jülich/Universität Bonn, Meteorologisches Institut; S. 1 r., S. 2 u., S. 3 o., S. 4: Forschungszentrum Jülich; S. 3 u.: © vege/fotolia.com; **Kontakt:** Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de **Druck:** Schloemer & Partner GmbH **Auflage:** 700