



5-Petaflop/s-Booster in der Rechnerhalle des Jülich Supercomputing Centre (JSC)

JURECA zündet den Turbo

Booster-Modul verdreifacht Rechenleistung

Der neue Booster ist so groß wie ein ganzer Superrechner: In 33 Schränken findet das Modul in der Rechnerhalle des Jülich Supercomputing Centre (JSC) Platz. Die Erweiterung zur massiven Steigerung der Rechenleistung ist direkt angebunden an den Supercomputer JURECA. Der von Jülicher Wissenschaftlern mitentwickelte Rechner ist dank des Boosters und seinen zusätzlichen 5 Petaflop/s – das entspricht 5 Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde – nun einer der schnellsten Superrechner Europas. Zum ersten Mal geht damit ein Superrechner mit innovativer Cluster-Booster-Architektur an einem Rechenzentrum in den produktiven Betrieb.

Das Cluster-Booster-Konzept geht zurück auf die Forschungsprojekte DEEP und DEEP-ER. Ziel ist eine modulare Supercomputer-Architektur, die speziell auf die Anforderungen moderner Simulationscodes hin zugeschnitten ist. Verschiedenartige Module lassen sich über eine einheitliche Software-Oberfläche ansteuern und dynamisch zuteilen, sodass deren jeweiligen Vorteile zum Tragen kommen.

Teile des Simulationscodes, die sich nur schwer gleichzeitig auf einer Vielzahl von Prozessoren berechnen lassen, werden auf dem sogenannten Cluster-Part ausgeführt. Dessen General-Purpose Prozessoren sind darauf ausgerichtet, Befehle schnell nacheinander abzuwickeln. Andere, besser parallelisierbare Programmteile werden auf den Booster ausgelagert. Dieser verwendet eine große Anzahl von relativ langsamen, dafür aber extrem energieeffizienten Rechenkernen.

Mit dem JURECA-Booster kommen 1.640 Rechenknoten mit Intel Xeon Phi Prozessoren hinzu, von denen jeder über 68 Rechenkerne verfügt. Den Cluster-Part bildet der 2015 von T-Platforms gelieferte Superrechner JURECA. Zusammen erzielen beide Module eine Spitzenleistung von 7,2 Petaflop/s. Beide Teile nutzen unterschiedliche Netzwerktechnologien: InfiniBand EDR im JURECA-Cluster und Intel Omni-Path Architecture im JURECA-Booster. Verbunden werden sie künftig über eine neuartige Highspeed-Bridge, die sich derzeit noch in der Entwicklung befindet.

STATEMENT



Prof. Paolo Carloni
Institutleiter
IAS-5/INM-9
Forschungszentrum Jülich

Simulationen auf Supercomputern ermöglichen es, neuronale Signalwege molekular aufzulösen und neue Verbindungen für bildgebende Verfahren und therapeutische Zwecke zu entwickeln. Das JURECA-Upgrade erweitert unsere Möglichkeiten, diese faszinierenden und pharmakologisch wichtigen Prozesse zu erforschen.

Werkzeuge für Big Data

In vielen Wissenschaftsbereichen nimmt der Umgang mit riesigen Datenmengen rasant zu. In der medizinischen Forschung sind etwa Hochdurchsatz-Techniken gefordert, mit denen sich medizinische Bilddaten von Tausenden Personen mit genetischen und anderen Informationen abgleichen lassen. Der Ansatz verspricht bedeutende Fortschritte bei der Erforschung genetischer Einflussfaktoren und neuer Biomarker, mit denen sich Erkrankungen frühzeitig erkennen lassen. Das Verfahren ist bislang jedoch extrem rechenintensiv. Schon eine einzelne Analyse erfordert mehrere Monate Rechenzeit.

Diese und weitere Methoden für unterschiedliche Big-Data-Anwendungen zu verbessern und voranzutreiben ist das Ziel des Helmholtz Analytics Framework, das im Oktober 2017 startete. Fünf Institute des Forschungszentrums Jülich und fünf weitere Helmholtz-Zentren sind an dem Pilotprojekt beteiligt, das aus dem Helmholtz Impuls- und Vernetzungsfonds für drei Jahre mit rund 3 Millionen Euro finanziert wird. Die Arbeiten erfolgen in enger Kooperation mit der vom Karlsruhe Institut für Technologie (KIT) koordinierten Helmholtz Data Federation, die auf den Aufbau einer neuartigen Infrastruktur für die Speicherung und Nutzung von Forschungsdaten ausgerichtet ist.

„Skalierbarkeit spielt in der Entwicklung vieler Methoden eine untergeordnete Rolle“, erläutert Björn Hagemeier vom Jülich Supercomputing Centre (JSC), welches das Helmholtz Analytics Framework koordiniert. „Wir wollen Analysemethoden für großskalige Anwendungen bereitstellen.“

Ein besonderer Schwerpunkt des Projekts liegt auf dem Austausch von Methoden aus unterschiedlichen Forschungsbereichen. Wissenschaftler aus den Gebieten der Erdsystemmodellierung, der Strukturbiochemie, der Luft- und Raumfahrt, der medizinischen Bildgebung und den Neurowissenschaften haben sich zu diesem Zweck mit Informatikern zusammengeschlossen, um bestehende Data-Analytics-Techniken zu verbessern und für andere Anwendungen nutzbar zu machen.

SC17: Unter Jülicher Flagge

Schwarz, rot, gold leuchtet das Motto der SC17, die am 12. November 2017 im US-amerikanischen Denver startet – vielleicht auch als Anspielung auf ihren Koordinator. Bernd Mohr ist der erste Nicht-Amerikaner, der die wichtigste Supercomputing-Konferenz organisiert. Drei Jahre dauerten die Vorbereitungen, 600 Freiwillige halfen mit. Der geborene Netzwerker wurde vom Fachmagazin HPCwire gleich zweimal – 2015 und 2017 – in die Liste der „People to Watch“ gewählt. Die Frage „Do you know Bernd Mohr?“, hat sich in der Szene bereits zum geflügelten Wort entwickelt.



Herr Mohr, was ist das Besondere an der SC?

Die gesamte Supercomputing Community aus der ganzen Welt trifft sich dort jedes Jahr. Es kommen über 11.000 Experten aus 60 Nationen, von Universitäten, Forschungslaboren, aber auch Computerhersteller und Anwender. Andererseits ist es eine Kombination aus einer wissenschaftlichen Konferenz kombiniert mit einer Fachmesse, auf der die Hersteller ihre neuesten Produkte zeigen. Aber auch Forschungseinrichtungen haben da einen Stand.

Welche neuen Trends zeichnen sich ab?

Das sind im Wesentlichen zwei Dinge: Lange Zeit war man mit Computing beschäftigt: Wie schnell kann ich was rechnen? Jetzt hat man endlich gemerkt: Andere Aspekte sind auch wichtig. So muss man auch große Datenmengen verarbeiten, die von wissenschaftlichen Instrumenten kommen, zum Beispiel von Satelliten oder vom LIGO-Experiment, das jetzt den Nobelpreis bekommen hat [für den Nachweis von Gravitationswellen, Anm. d. Red.], also die Schlagworte Big Data, Data Analytics.

Was ist das andere Thema?

Das andere ist das Aufkommen von Deep Learning. Man versucht jetzt Verfahren des maschinellen Lernens oder Methoden der Artificial Intelligence einzusetzen, um die großen Datenmengen von wissenschaftlichen Experimenten zu analysieren. Und dann gibt es natürlich das Rennen zum Exascale-Rechner: Es deutet sich an, dass China, Japan und oder die USA 2020 oder 2021 einen Exascale-Rechner haben könnten. Dazu werden jetzt die aktuellen Planungen gemacht – hinter verschlossenen Türen natürlich. Und jeder hofft, auf der SC etwas dazu zu erfahren.

➤ *Blog zur Konferenz-Vorbereitung:*
blogs.fz-juelich.de/berndmohr

➤ *Ausführliches Videointerview:*
exascale-news.de/de/sc17

➤ *Supercomputing-Konferenz SC17*

Biomoleküle im Fokus

Die Strukturbiochemie ist das gemeinsame Thema zweier neuer Forschungsgruppen des John von Neumann-Instituts für Computing (NIC). Die im September 2017 gegründete Gruppe „Computational Structural Biology“ arbeitet an neuen Verfahren, mit denen sich die 3D-Struktur von Biomolekülen und Proteinen aus unterschiedlichen Datenquellen herleiten lässt. Proteine sind kettenartige Riesenmoleküle, die an fast allen Prozessen des Lebens maßgeblich beteiligt sind. Ihre komplexe gefaltete räumliche Struktur ist entscheidend für ihre Funktion in der Zelle.

Die genaue Anordnung der Atome ist oft nur durch aufwendige Puzzlearbeit zu ermitteln. Ein Schwerpunkt der von Dr. Alexander Schug geleiteten Gruppe liegt auf der Erfassung sogenannter Koevolutionsdaten. Dabei wird gezielt nach Mutationen gefahndet – Veränderungen einzelner Aminosäuren-Bausteine im Gerüst komplexer Proteine. Gesucht sind Mutationen, die nicht alleine auftreten, sondern weitere Mutationen in ihrer Umgebung nach sich ziehen. Derartige koevolutionär entstandene Paare lassen gleichzeitig Rückschlüsse auf die räumliche Nähe der beiden Partner zu – und damit auf die räumliche Struktur des gesamten Proteins.

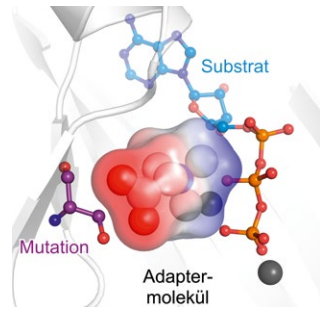
Bereits Ende April 2017 startete die NIC-Forschungsgruppe „Computational Biophysical Chemistry“. Die von Prof. Holger Gohlke geleitete Gruppe führt die Kompetenzen unterschiedlicher Fachgebiete zusammen mit dem Ziel, komplexe Fragen zu Struktur, Dynamik und Funktion von Biomolekülen und Supramolekülen zu beantworten.

Im Fokus stehen Methoden, mit denen sich die physiologischen Wirkungen von Biomolekülen vorhersagen und modulieren lassen – zum Beispiel zur Erforschung neuer medizinischer Wirkstoffe. So hat Gohlke beispielsweise eine Mutation an einem essenziellen Enzym beim Menschen untersucht, die eine schwerwiegende Störung des Stickstoff-Stoffwechsels nach sich zieht. Mithilfe von Molekular-Dynamik-Simulationen auf dem Jülicher Superrechner JURECA ließ sich die funktionelle Störung im Detail erkunden und so ein Wirkstoffkandidat erproben, der der hervorgerufenen Schwächung molekularer Bindungskräfte entgegenwirkt.

➤ **Neue NIC-Forschungsgruppe**
„Computational Structural Biology“

➤ **Neue NIC-Forschungsgruppe**
„Computational Biophysical Chemistry“

PLOS Computational Biology,
DOI: 10.1371/journal.
pcbi.1004693



Protein-Repair: Adaptermoleküle (Betain) verbessern Bindung zwischen Substrat (ATP) und Enzym (Glutamin-Synthetase)

Strömungsvorhersage für die Nase

Vor einem harmlosen Schnupfen ist niemand gefeit. Doch bei etwa 11 Prozent der Bevölkerung ist die Behinderung der Nasenatmung chronisch. Im Projekt Rhinodiagnost arbeiten Supercomputing-Experten gemeinsam mit anderen Fachkräften daran, Ärzte bei der – oft schwierigen – Entscheidung für oder gegen eine Operation zu unterstützen. Ziel ist der Aufbau eines Service-Netzwerks, das individuelle 3D-Modelle und Strömungssimulationen als zusätzliche Entscheidungshilfe zur Verfügung stellen soll.

Über 100.000 Operationen werden in Deutschland jährlich an der Nasenhöhle oder den Nasennebenhöhlen durchgeführt.

Die Fehlerrate bei derartigen Eingriffen ist mit schätzungsweise 30 Prozent recht hoch, die gegenwärtige Diagnostik ist nicht aussagekräftig genug. Für die Diagnose kommen zumeist Methoden der medizinischen Bildgebung oder rein optische Verfahren zum Einsatz, die keinerlei Information über die Strömungsverhältnisse liefern.

„Die richtige Einschätzung der Erfolgchance einer OP hängt momentan noch sehr stark ab von der Erfahrung des praktizierenden Arztes“, erläutert Jens Henrik Göbbert vom Jülich Supercomputing Centre (JSC). „In Rhinodiagnost wollen wir patientenindividuelle Strömungssimulationen auf Basis von computertomographischen Aufnahmen ermöglichen,

mit denen sich der Effekt von anatomischen Veränderungen darstellen lässt.“

Die gesunde, natürlich geformte Nase ist eine Art strömungsmechanisches Wunderwerk und kann durch eine OP leicht Schaden nehmen. Auf einer Strecke von nicht einmal 10 Zentimetern befeuchtet die Nase die eingeatmete Luft und erwärmt sie auf Körpertemperatur, selbst dann, wenn außen Minusgrade herrschen. Die Simulation der Luftströmung auf Superrechnern ist technisch bereits ausgereift und könnte als weitere Maßnahme dazu beitragen, unnötige Eingriffe zu vermeiden und Operationen individuell anzupassen.

Experten des Jülich Supercomputing Centre (JSC) und der RWTH Aachen entwickeln in Rhinodiagnost die dazu notwendigen Softwarekomponenten, die es Ärzten ermöglichen, Simulationsdaten auf modernen Höchstleistungsrechnern interaktiv und zielgerichtet zu nutzen. Darüber hinaus ist die Demonstration virtueller Operationen geplant, bei denen sich relevante Strömungsparameter in Echtzeit anzeigen und analysieren lassen. Als weitere Partner sind die deutschen Unternehmen Sutter Medizintechnik und Med Contact sowie die österreichische Angewandte Informationstechnik Forschungsgesellschaft beteiligt, die das Projekt koordiniert.

➤ rhinodiagnost.eu



Simulation der Nasenatmung mittels numerischer Strömungsmechanik



QPACE3 gestartet

Seit Juli läuft ein neuer Rechner am Jülich Supercomputing Centre (JSC). Der QPACE3-Rechner wurde im Rahmen des DFG-Sonderforschungsbereichs SFB TRR 55 von den Universitäten Regensburg und Wuppertal beschafft. Er wird hauptsächlich für Simulationen der Quantenchromodynamik eingesetzt. Die theoretische Rechenleistung beträgt 1,79 Petaflop/s. Zur Kühlung wird Warmwasserkühlung verwendet. Das Wasser, das die Racks verlässt, darf über 40 Grad warm sein, was den Energieverbrauch reduziert.

➤ [mehr erfahren](#)

Deep Learning im Fokus

Ein neues, bereichsübergreifendes Team am JSC wird Forschung auf dem Gebiet des Deep Learning vorantreiben und die Unterstützung von Nutzern in diesem Bereich optimieren. Zusätzlich wird das Team auch neue Rechnerarchitekturen für Unüberwachtes und Bestärkendes Lernen untersuchen und gemeinsam mit Wissenschaftlern aus anderen Fachgebieten Anwendungen entwickeln, um große Mengen an Rohdaten zu analysieren und so zu kombinieren, dass wertvolle, versteckte Information entdeckt werden können.

500 Mio. Euro für GCS

Bund und Länder fördern das Gauss Centre for Supercomputing (GCS) bis Ende 2025 mit 500 Millionen Euro. Das Budget dient dem Ausbau der Rechner-Infrastruktur sowie Erweiterungen der Nutzerunterstützung und Softwareentwicklung in der Mis-

sion „Smart Exascale“. Die drei großen deutschen Rechenzentren in Stuttgart (HLRS), Jülich (JSC) und München (LRZ) bündeln seit 2007 im GCS ihre Aktivitäten, um ihre Rolle als globaler Player im Bereich des Höchstleistungsrechnens weiter auszubauen.

➤ [mehr erfahren](#)

Europäische Hardwarebeschaffung

Rechenzentren aus vier europäischen Ländern haben sich zusammengeschlossen, um erstmals gemeinsam neue innovative Hardware anzuschaffen. Durch das vom Forschungszentrum Jülich koordinierte Verfahren sollen künftig mehr Ressourcen auf europäischer Ebene zur Verfügung stehen. Darüber hinaus beabsichtigen die beteiligten Zentren (BSC, CINECA, JSC, GENCI), mittels PPI4HPC ihren Einfluss auf die Hardware-Entwicklung zu vergrößern, um Hardware-Lösungen noch besser an die Anforderungen von Wissenschaftlern und Ingenieuren anpassen zu können.

➤ [mehr erfahren](#)



Jetzt online lesen!

- *Exascale-Newsletter:*
exascale-news.de
- *effzett – das Forschungsmagazin:*
effzett.fz-juelich.de
- *Daten und Fakten aus Jülich:*
fakten.fz-juelich.de

IMPRESSUM

EXASCALE-NEWSLETTER des Forschungszentrums Jülich
Herausgeber: Forschungszentrum Jülich GmbH | 52425 Jülich
Konzeption und Redaktion: Dr. Anne Rother (v.i.S.d.P.), Tobias Schläßer
Grafik und Layout: SeitenPlan GmbH
Bildnachweis: S. 1 oben: Forschungszentrum Jülich/Wilhelm Peter Schneider/SeitenPlan; S. 1 unten: Forschungszentrum Jülich/Sascha Kreklau; S. 2 links: sacura/Shutterstock.com; S. 2 rechts: Forschungszentrum Jülich/R.-U. Limbach; S. 3 oben: Forschungszentrum Jülich/Holger Gohlke; S. 3 unten: CLIPAREA | Custom media Shutterstock.com/Forschungszentrum Jülich/Jens Henrik Göbbert/SeitenPlan; S. 4: Forschungszentrum Jülich/R.-U. Limbach
Kontakt: Geschäftsbereich Unternehmenskommunikation | Tel.: 02461 61-4661 | Fax: 02461 61-4666 | E-Mail: info@fz-juelich.de
Druck: Schloemer & Partner GmbH
Auflage: 550

Trainingskurs
 „Introduction to the programming and usage of the supercomputer resources at Jülich“
 23.-24.11.2017
 am Jülich Supercomputing Centre
 Dozenten: Firmenmitarbeiter von Intel und ParTec, Mitarbeiter des JSC
 ➤ [mehr erfahren](#)

Trainingskurs
 „Advanced Parallel Programming with MPI and OpenMP“
 27.-29.11.2017
 am Jülich Supercomputing Centre
 Dozent: Dr. Rolf Rabenseifner, HLRS; Mitarbeiter des JSC
 ➤ [mehr erfahren](#)

Trainingskurs
 „Parallel and Scalable Machine Learning“
 15.-17.1.2018
 am Jülich Supercomputing Centre
 Dozent: Prof. Morris Riedel, JSC
 ➤ [mehr erfahren](#)

Trainingskurs
 „Parallel I/O and Portable Data Formats“
 12.-14.3.2018
 am Jülich Supercomputing Centre
 Dozenten: Sebastian Lührs, Dr. Michael Stephan, Benedikt Steinbusch, Dr. Kay Thust, JSC
 ➤ [mehr erfahren](#)

➤ [Übersicht über Veranstaltungen am Jülich Supercomputing Centre:](#)
fz-juelich.de/ias/jsc/events