

# Wie Supercomputer die Forschung prägen

Wissenschaftler nutzen heute Höchstleistungsrechner als eigenständiges Forschungsmittel – als virtuelles Mikroskop, Teleskop oder Labor, als Ersatz für einen Beschleuniger, den ganzen Kosmos oder eine Zeitmaschine. Computer-gesteuerte Simulationen sind aus kaum einem Gebiet mehr wegzudenken.

Von Achim Bachem und Thomas Lippert

In fast allen Forschungsgebieten werden heute Supercomputer eingesetzt, von der Astrophysik über die Ingenieurwissenschaften bis zur Hirnforschung. Als weitgehend eigenständiges Hilfsmittel sind sie längst unersetzbar geworden. Darüber hinaus bestimmen sie in zunehmendem Maß ganze Forschungsrichtungen.

Ein Beispiel aus der theoretischen Physik. Wie ist die Masse der Protonen und Neutronen, welche die Atomkerne bilden, und verwandter Teilchen zu erklären? Die Lösung dieses Rätsels ist – neben anderen – der Menschheit immerhin so wichtig, dass sie für ein geeignetes Experimentiergerät, den Teilchenbeschleuniger Large Hadron Collider (LHC) am euro-

päischen Forschungszentrum CERN bei Genf, ungefähr drei Milliarden Euro aufzuwenden bereit war (Spektrum der Wissenschaft 5/2011, S. 86).

Seit 2008 gibt es eine korrekte Antwort auf diese Frage. Geliefert wurde sie nicht von einem Experiment, sondern mit Hilfe einer Simulation auf dem Supercomputer Jugene des Forschungszentrums Jülich, einem Petaflops-Rechner des Herstellers IBM (Bild rechts). Das Gerät ist auch nicht wirklich billig, aber mit etwas über 50 Millionen Euro deutlich günstiger als der LHC und vor allem auch für eine Vielzahl anderer Zwecke verwendbar. Das griechische Präfix »Peta« bedeutet  $10^{15}$  (eine Billion), »flops« steht für *floating point operations per second* (Gleitkommaoperationen pro Sekunde), die elementaren Rechenakte wie zum Beispiel Additionen oder Multiplikationen von zwei 16-stelligen Zahlen, aus denen sich jede Simulation zusammensetzt.

## AUF EINEN BLICK

### RECHNER DER SPITZENKLASSE

**1** Die Leistung der schnellsten Computer ist in jedem der letzten drei Jahrzehnte ungefähr um den Faktor 1000 angestiegen. Stand der Technik sind **einige Billionen ( $10^{15}$ ) Rechenschritte pro Sekunde**.

**2** Viele wissenschaftliche Probleme können durch diese enormen Rechenfähigkeiten überhaupt erst angegangen werden: **Masse der Nukleonen, Entstehung von Galaxien, Weltklima im Detail, Optimierung von Turbinen, Simulation des menschlichen Gehirns**.

**3** Unweigerlich wirken die technischen Möglichkeiten auf die Forschung zurück: Wissenschaftler stellen bevorzugt Fragen, auf die sie von einem **Supercomputer** eine Antwort erwarten dürfen.

### Rätselhafte Protonenmasse

Worum geht es genau? Materie ist aus Atomen aufgebaut, bestehend aus einem Kern und Elektronen, die um ihn kreisen. Der Kern enthält Protonen und Neutronen, die man zusammen als Nukleonen bezeichnet. Jedes von ihnen besteht wiederum aus drei Quarks. Doch deren Massen machen zusammen nur etwa fünf Prozent der Masse eines Nukleons aus. Das Ganze ist also weit schwerer als die Summe seiner Teile. Wie ist das möglich? Des Rätsels Lösung findet sich in



FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH

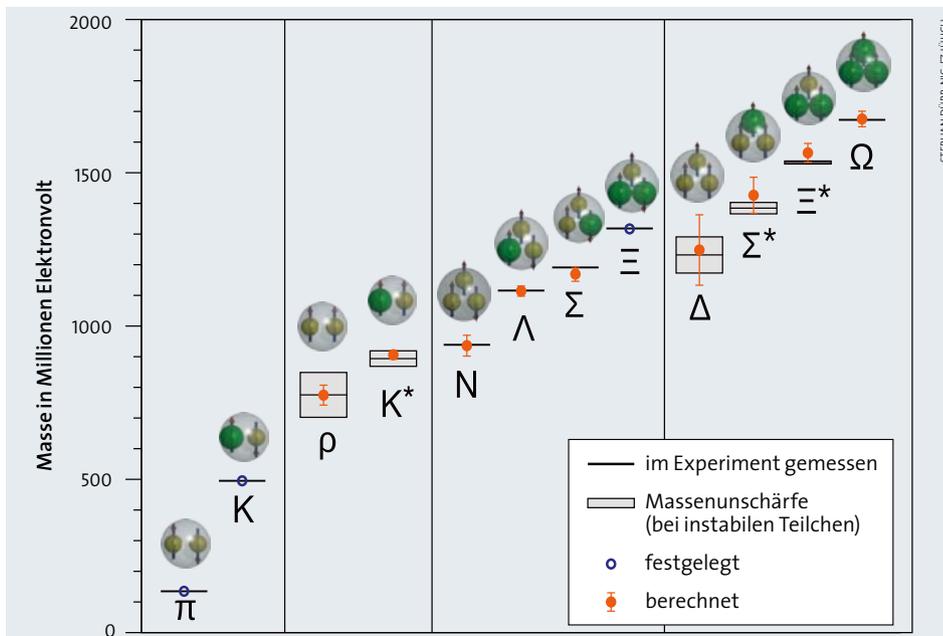
der berühmten Formel  $E = mc^2$  von Albert Einstein: Energie und Masse sind zueinander proportional, und etwa 95 Prozent der Nukleonenmasse haben letztendlich ihren Ursprung in der Gesamtenergie des Systems aus Quarks und den zwischen ihnen ausgetauschten Gluonen, den Vermittlern der starken Wechselwirkung. Diese Kraft bewirkt, dass Quarks immer in Paaren oder zu dritt als Einheiten wie Pionen und Protonen auftreten, aber niemals allein. Theoretisch wird die starke Wechselwirkung mit Hilfe einer Quantenfeldtheorie beschrieben, der Quantenchromodynamik, die Anfang der 1970er Jahre entwickelt wurde.

Auf die korrekte Berechnung der Protonenmasse musste die Welt jedoch noch mehr als 35 Jahre warten, denn diese Aufgabe überstieg die Fähigkeiten der besten Mathematiker und der stärksten Computer. Der Hauptgrund: Gluonen können sich im Gegensatz zu Photonen, den Vermittlern der elektromagnetischen Kraft, auch gegenseitig anziehen. Diese »Selbst-Wechselwirkung« macht die Berechnungen sehr kompliziert. Obendrein muss man im Formalismus einer Quantenfeldtheorie nicht nur die real vorhandenen Teilchen berücksichtigen, sondern auch so genannte virtuelle Teilchen, die gleichsam spontan aus dem Nichts entstehen, wechselwirken und wieder vergehen – ein Effekt, der letztendlich mit Heisenbergs Unschärferelation gedeutet werden kann.

Im Jahr 2008 gelang einem internationalen Team unter Leitung des Physikers Zoltán Fodor von der Universität Wup-

**Jugene, der schnellste Rechner des Jülich Supercomputing Centre, enthält rund 72 000 Prozessoren (Einzelrechner), die in 72 wassergekühlten Schränken untergebracht sind. Die Festplatten können 7 Petabyte ( $10^{15}$  Byte) aufnehmen – den Speicherplatz von mehr als einer Million DVDs – und sind wiederum an einen Magnetbandspeicher mit 30 Petabyte Kapazität angeschlossen.**

pertal der endgültige Durchbruch: Mit Hilfe von Jugene berechneten die Forscher die Massen von Nukleonen und anderen Teilchen, die aus Quarks aufgebaut sind. Jugene hatte damals bereits eine Rechenleistung von 180 Teraflops (Billionen Rechenoperationen pro Sekunde) und erreichte durch einen weiteren Ausbau Mitte 2009 als erster Rechner in Europa ein Petaflops ( $10^{15}$  Rechenoperationen pro Sekunde). Nur dank dieser enormen Geschwindigkeit konnten Fodor und seine Mitarbeiter die komplizierten Gleichungen für die Felder der Quarks und Gluonen auf genügend feinen Raumzeitgittern berechnen. Indem sie den Abstand der Gitterpunkte sukzessive verkleinerten, kamen die Forscher der kontinuierlichen Raumzeit immer näher. Als Ergebnis der bis dahin wohl aufwändigsten Rechnung in der Geschichte der Forschung erhielten sie schließlich Werte für die Massen der Nukleonen, die nahezu perfekt mit den im Experiment gemessenen übereinstimmen (Spektrum der Wissenschaft 5/2009, S. 16). Das ist eine überzeugende Bestätigung der



STEPHAN DÜRR, NIC FZ/JÜLICH

Am Ende der aufwändigsten Berechnung aller Zeiten stehen einige wenige Zahlenwerte: die Massen der Hadronen (Teilchen, die der starken Wechselwirkung unterliegen). Die Parameter der Quantenchromodynamik wurden so eingestellt, dass die Rechnung die experimentell bestimmten Massen der drei Hadronen  $\pi$ ,  $K$  und  $\Xi$  reproduzierte. Daraufhin ergaben sich für die Massen der anderen leichten Hadronen Werte, die den gemessenen bemerkenswert nahe kommen – eine glänzende Bestätigung der Theorie mittels Supercomputern.

Quantenchromodynamik – so sah es auch Frank Wilczek, einer ihrer drei Gründerväter, und die Redakteure der renommierten Fachzeitschrift »Science« wählten die entsprechende Publikation in die Top-Ten-Liste der wissenschaftlichen Durchbrüche des Jahres 2008.

Nicht nur, wenn drei Quarks ein Nukleon bilden, sondern auch, wenn sich mehrere Nukleonen zu einem Atomkern oder mehrere Atomkerne zu einem größeren zusammenschließen, spielt die starke Kernkraft die entscheidende Rolle – und treibt den Rechenaufwand in die Höhe. Der elementarste unter diesen Prozessen ist die Fusion von vier Nukleonen zu einem Helium-4-Atomkern ( ${}^4\text{He}$ , bestehend aus zwei Protonen und zwei Neutronen), auch Alphateilchen genannt. Der Energieüberschuss dieser Kernreaktion ist es, der die Sonne strahlen lässt und damit die Energie für alles Leben auf der Erde bereitstellt. Die Atomkerne der meisten anderen chemischen Elemente sind ebenfalls durch Fusionsprozesse im Inneren von – längst erloschenen – Sternen entstanden; die Einzelheiten hat der britische Astrophysiker und Sciencefiction-Autor Fred Hoyle (1915–2001) bereits 1954 analysiert.

### Warum es genügend Kohlenstoff gibt

Der nächste und kritischste Schritt nach der Fusion von Wasserstoff zu Helium ist die Synthese des häufigsten Kohlenstoffisotops ( ${}^{12}\text{C}$ ) aus drei Alphateilchen (Bild rechts). Zwei von ihnen können sich zu einem Beryllium ( ${}^8\text{Be}$ )-Kern vereinigen. Dieser hat allerdings nur eine Lebensdauer von  $2,6 \cdot 10^{-16}$  Sekunden. Während dieser kurzen Zeit muss ihn ein drittes Alphateilchen treffen und mit ihm zu einem stabilen  ${}^{12}\text{C}$  verschmelzen. Darüber hinaus haben die beiden Reaktionspartner zusammen wesentlich mehr Energie als ein  ${}^{12}\text{C}$ -Kern im Grundzustand und würden deshalb in den allermeisten Fällen wieder auseinanderfliegen, wenn es nicht einen angeregten Zustand des Kohlenstoffkerns mit fast perfekt passender Energie gäbe. (Üblicherweise beziehen sich

die Bezeichnungen »Grundzustand« und »angeregter Zustand« auf die Elektronenhülle eines Atoms; hier sind entsprechende Zustände des Atomkerns selbst gemeint.) Hoyle hat ihn 1954 postuliert, wenige Jahre später wurde er am California Institute of Technology (Caltech) in Pasadena experimentell nachgewiesen – aber für die theoretische Kernphysik blieb er mehr als 50 Jahre ein wahres Mysterium.

Frühe Berechnungen legten gewisse, experimentell gestützte Annahmen für die Kräfte zwischen zwei oder drei Nukleonen zu Grunde. Mit ihnen gelang es, fast alle Energieniveaus (angeregten Zustände) der Kerne bis zur Atomzahl 13 präzise zu bestimmen – nicht aber den Hoyle-Zustand. Man musste »von Anfang an« (*ab initio*) rechnen, das heißt nur die Gleichungen der Quantenchromodynamik zu Grunde legen und sonst gar nichts. Steven Weinberg (Physik-Nobelpreis 1979, siehe auch Spektrum der Wissenschaft 12/2010, S. 34) stellte 1991 eine Methode dafür bereit; diese hat sich seitdem für Kerne mit bis zu vier Nukleonen zu einem Präzisionsinstrument entwickelt.

Für größere Nukleonenzahlen musste die Welt allerdings auf größere Rechenkapazität warten. Evgeny Epelbaum und Hermann Krebs aus Bochum, Dean Lee aus Raleigh (North Carolina) sowie Ulf Meißner aus Bonn entwickelten die Theorie von Weinberg weiter. Nach vier Millionen Prozessorstunden auf Jugene fanden die Forscher neben dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand des Kohlenstoffkerns einen weiteren angeregten Zustand mit genau den richtigen Quantenzahlen und der richtigen Energie – den lange gesuchten Hoyle-Zustand. Diese Arbeiten zeigen nun einen Weg auf, die Erzeugung auch schwererer Elemente in den Sternen ohne weitere Annahmen zu berechnen und darüber hinaus die Grenzen der Stabilität für neutronen- oder protonenreiche Kerne zu finden.

Unversehens wird nun der Supercomputer zu einem Instrument zur Beantwortung philosophischer Fragen. Die fun-

damentalen physikalischen Theorien enthalten bestimmte Parameter. Wären deren Zahlenwerte geringfügig anders, als sie in unserem Universum realisiert sind, dann könnten wir nicht existieren. Weinberg selbst hat das für die kosmologische Konstante ausgeführt, welche die Ausdehnung oder Kontraktion unseres Universums bestimmt (Spektrum der Wissenschaft 11/2008, S. 38). Die schiere Tatsache, dass es uns gibt, erlaubt Aussagen über fundamentale Parameter der Physik: Das ist das »anthropische Prinzip« (Spektrum der Wissenschaft 5/2009, S. 34; unter demselben Namen gibt es auch die unwissenschaftliche Aussage, ein »intelligenter Designer« habe die Werte der Parameter so gewählt, dass wir existieren können).

### Dem anthropischen Prinzip auf der Spur

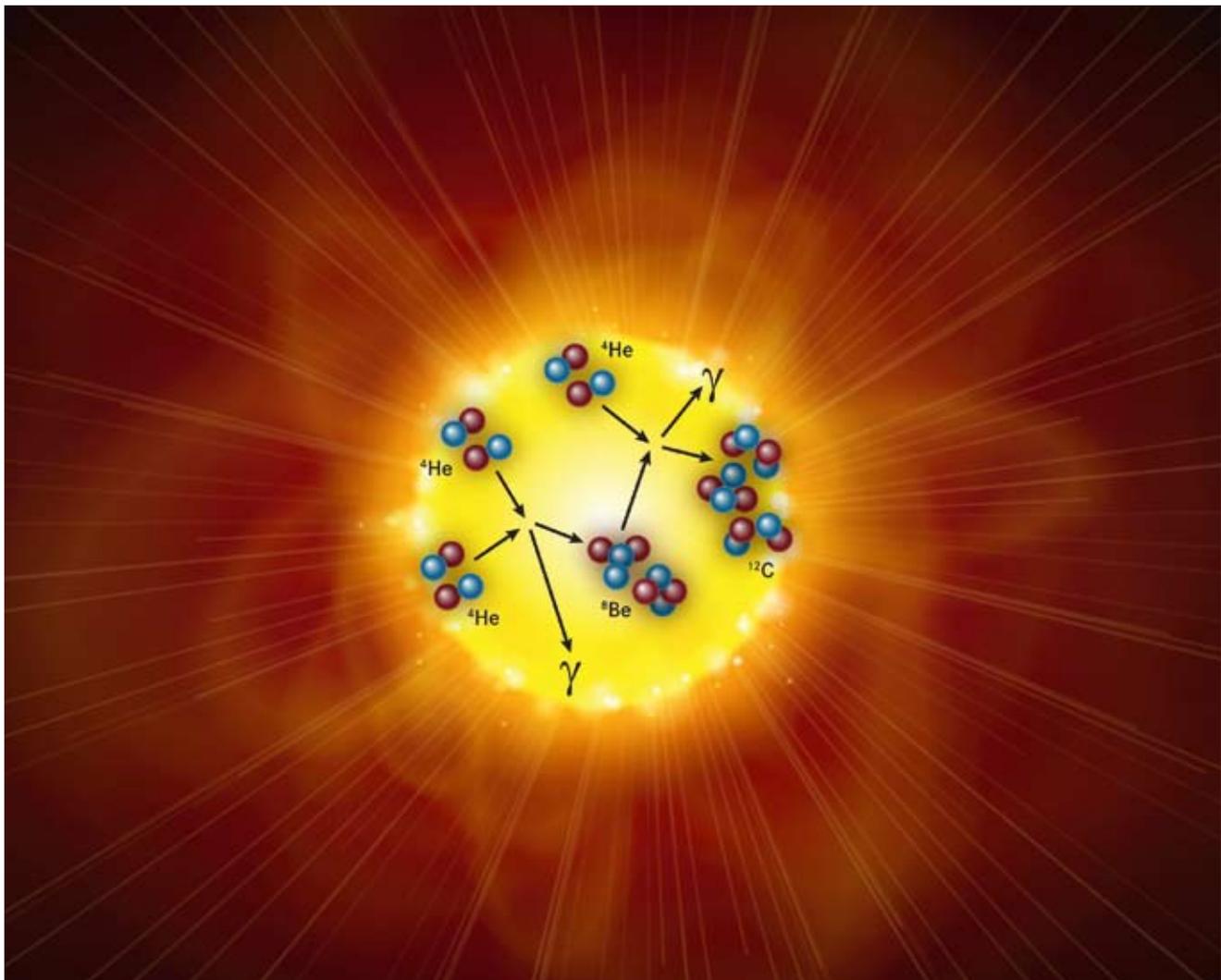
Ein Paradebeispiel für die Gültigkeit des anthropischen Prinzips ist der Hoyle-Zustand: Gäbe es ihn nicht, gäbe es nicht genug Kohlenstoff und daher auch kein Leben, wie wir es kennen. Aber ist dem wirklich so? Um dies zu überprüfen, kann man fundamentale Parameter, in diesem Fall die Massen der leichten Quarks, ein wenig verändern und nachsehen, ob dabei die sehr speziellen Bedingungen für die Syn-

these des Kohlenstoffs erhalten bleiben oder nicht. Letzteres wäre eine spektakuläre Bestätigung des anthropischen Prinzips. Erst seit neuester Zeit, mit Hilfe von Supercomputern, ist diese faszinierende Frage überhaupt behandelbar. Die Gruppe von Ulf Meißner ist nahe an einer Antwort.

Eine weitere Säule der modernen Naturwissenschaft, die mit Hilfe von Supercomputern auf den Prüfstand gestellt werden kann, ist das kosmologische Standardmodell. Sein Ziel ist, in konsistenter Weise zu beschreiben, wie sich das Universum seit seinen Anfängen entwickelt hat, und vor allem, wie sich nach der Trennung von Strahlung und Materie, etwa 300 000 Jahre nach dem Urknall, die heutigen Galaxien und Sterne bildeten.

Das kosmologische Standardmodell, auch Konkordanzmodell genannt, postuliert neben der bekannten »baryonischen« Materie eine bislang unbekannte und im Experiment

**Ein Kohlenstoffatom  $^{12}\text{C}$  entsteht, wenn zwei Alphateilchen ( $^4\text{He}$ ) sich zu einem instabilen Beryllium ( $^8\text{Be}$ )-Kern vereinigen und dieser dann rechtzeitig von einem weiteren Alphateilchen getroffen wird. Dabei wird Energie in Form von Gammaquanten ( $\gamma$ ) frei.**



GRAFIK: FORSCHUNGSZENTRUM LÜDICH; HINTERGRUND: FOTOLIA / ULADIMIR BAKIJNOVIC

noch nicht nachgewiesene »Dunkle Materie«, die mit elektromagnetischer Strahlung, insbesondere Licht, nicht wechselwirkt, sich aber gleichwohl über die Wirkung ihrer Schwerkraft bemerkbar macht.

Nach der Entkopplung von Licht und Materie waren die Partikel der Dunklen Materie nahezu gleichförmig im Kosmos verteilt, so die Aussage des kosmologischen Standardmodells. Unter der Wirkung ihrer gegenseitigen Gravitationsanziehung ballten sie sich zu so genannten Halos zusammen. Deren Schwerkraft wirkte auch auf die gewöhnliche Materie, mit dem Effekt, dass sich in den Zentren der Halos die Galaxien bildeten. Damit macht das kosmologische Standardmodell eine Vorhersage, die sich im Prinzip durch Beobachtungen überprüfen lässt.

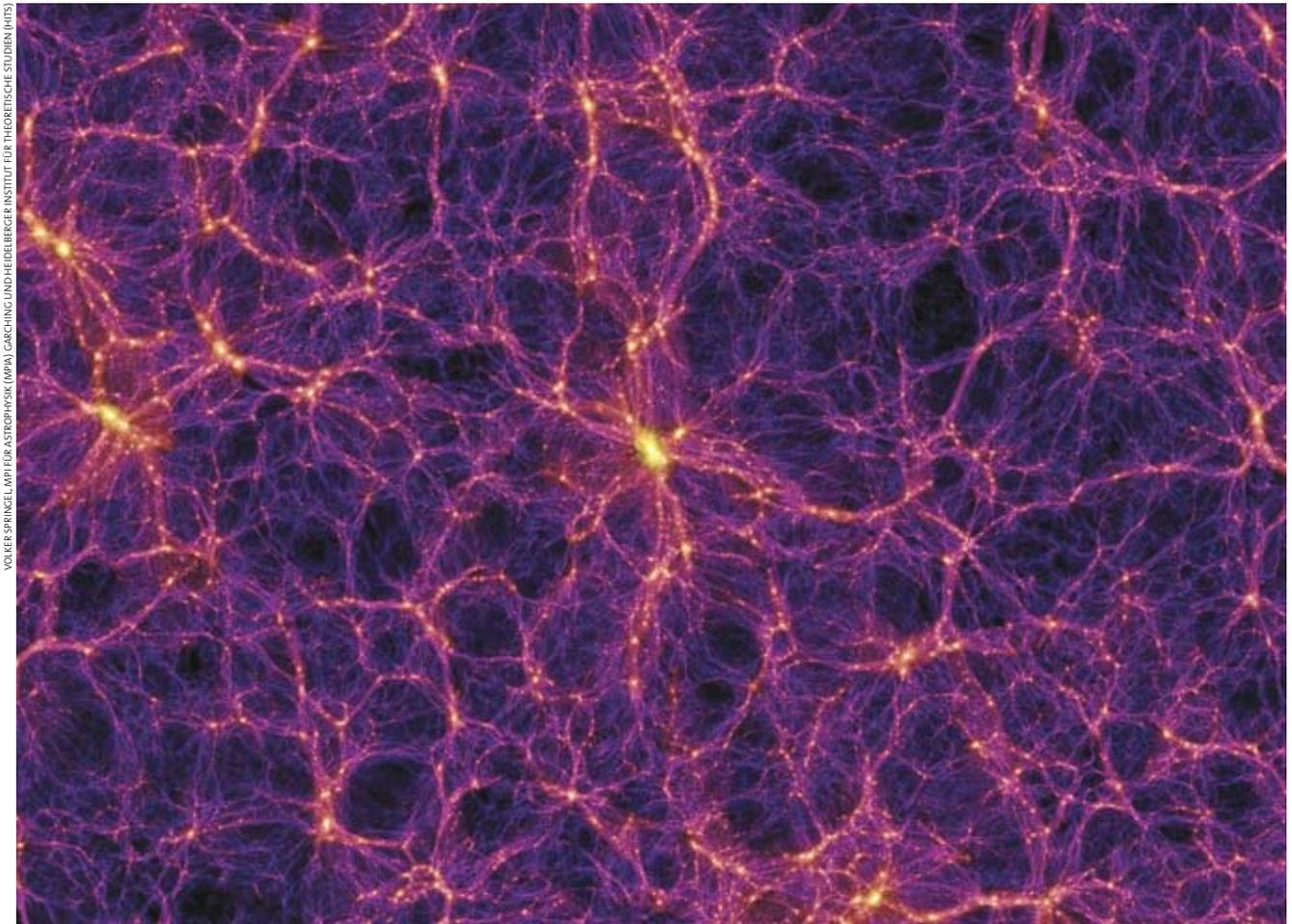
Eine solche Beobachtung findet zurzeit statt (Spektrum der Wissenschaft 1/2011, S. 38). Weltweit vermessen Astronomen die räumlich-zeitliche Verteilung der Galaxien. Mit der hohen Infrarotempfindlichkeit der Spektrografen des »Sloan Digital Sky Survey III« können sie beispielsweise in extrem weit entfernte Milchstraßensysteme blicken, deren Licht auf

**Eine Momentaufnahme in der simulierten Entwicklung des Universums. Für die Berechnung wurde die Bewegung jedes einzelnen von 300 Milliarden Teilchen der Dunklen Materie bestimmt.**

Grund der kosmischen Expansion hin zum langwelligen, roten Bereich des Spektrums verschoben ist. Allein im Teilprojekt »Baryon Oscillation Spectroscopic Survey« (BOSS) sollen bis 2014 die Spektren von 1,4 Millionen Galaxien und 160 000 Quasaren erfasst werden.

Nun ist die Vorhersage des kosmologischen Standardmodells so präzise auszurechnen, dass man sie mit den Beobachtungen abgleichen kann. Das bedeutet nichts weniger, als die Entwicklung des gesamten Universums über die Zeit von kurz nach dem Urknall bis heute im Computer zu simulieren. Dabei muss die Dunkle Materie durch eine immense Anzahl von zunächst gleichverteilten Teilchen wiedergegeben werden. Nur dann ist die Verteilung von Galaxien, die sich am Ende des Simulationslaufs einstellt, so aussagekräftig, dass sie schließlich mit der beobachteten vergleichbar ist.

Eine internationale Vereinigung von Astrophysikern, das Virgo Consortium für kosmologische Simulationen auf Supercomputern, hat sich dieser Herausforderung angenommen (Spektrum der Wissenschaft 11/2010, S. 34). In dem Projekt »Millennium XXL« simulierte 2010 ein Team unter Leitung des Heidelberger Astrophysikers Volker Springel auf dem Jülicher Supercomputer JuRoPA insgesamt 300 Milliarden Dunkle-Materie-Teilchen – 30-mal so viel wie in der damals bahnbrechenden »Millennium-Simulation« von 2004. Springels Programm GADGET-3, das auch von den



VOLKER SPRINGEL, MPI FÜR ASTROPHYSIK (MPIA), GARCHING UND HEIDELBERGER INSTITUT FÜR THEORETISCHE STUDIEN (HITS)



meisten anderen Kosmologen genutzt wird, konnte mehr als 12 000 der über 16 000 Prozessorkerne von JuRoPA für die Rechnung nutzen. Bei einer Spitzenleistung von 150 Teraflops benötigte die Simulation nur eine Gesamtlaufzeit von etwa zehn Tagen – auf einem schnellen Einzelprozessor wären es über 350 Jahre gewesen. Allerdings wurde die benötigte Rechenzeit in einzelne Blöcke über mehrere Wochen verteilt; die Pausen nutzte man, um die jeweils erreichten Zwischenergebnisse aufzubereiten und grafisch darzustellen.

JuRoPA basiert auf der Clustertechnologie, das heißt, das System ist aus vielen (in diesem Fall 2208) standardisierten Hardwarekomponenten modular aufgebaut. Der große Arbeitsspeicher von drei Gigabyte pro Rechenknoten reichte gerade aus, um die enormen 30 Terabyte des Simulationsmodells im Speicher zu halten und zu verarbeiten. Auch hinsichtlich der Datenkommunikation ist der Rechner sehr gut auf datenintensive Anwendungen eingestellt.

Millennium XXL ist die bei Weitem größte kosmologische Simulation aller Zeiten. Dem Team um Volker Springel gelang es, in einem Würfel von über zwölf Milliarden Lichtjahren Kantenlänge mehr als 500 Millionen Galaxien zu identifizieren und deren Entstehung und zeitliche Entwicklung in mehr als 25 Milliarden Halos zu verfolgen. Ein ganz wesentliches Resultat ist die genaue Vermessung der so genannten baryonischen akustischen Oszillationen in der räumlichen Verteilung von Galaxien. Durch Vergleich mit Beobachtungen kann man damit kosmologische Theorien testen. Ein anderes wichtiges Ergebnis liegt in der Bestimmung der maximalen Größe, die Galaxienhaufen im Standardmodell der

**Die äußere Erscheinung des Supercomputers JuRoPA ist eher unspektakulär: säuberlich in Schränken angeordnete Prozessoren, Verbindungskabel – und Lüftungslöcher im Boden zum Abführen der Wärme.**

Kosmologie erreichen können. Sollte einmal ein noch größerer Haufen entdeckt werden (wie schon gelegentlich behauptet), wäre das bereits eine Widerlegung des derzeit favorisierten Modells. Noch ist die Analyse der Simulationsergebnisse nicht abgeschlossen. Doch schon jetzt ist klar, dass diese Arbeit unter die bedeutendsten Beiträge zur Kosmologie einzuordnen ist.

### **Die Jülicher Superrechner**

JuRoPA (*Jülich Research on Petaflop Architectures*) ist eine gemeinsame Entwicklung der Ingenieure des Jülich Supercomputing Centre, des französischen Rechnerherstellers Bull und der Münchner Softwarefirma ParTec. Neben Nehalem-Prozessoren von Intel sorgen die schnellen Infiniband-Kommunikationsnetze von Mellanox aus Israel für eine skalierbare Gesamtrechenleistung von 310 Teraflops, ebenfalls seit Mitte 2009. Das Betriebssystem »ParaStation« ist eine langjährige gemeinsame Entwicklung des Forschungszentrums und der ParTec.

Von seiner Ausbaufähigkeit her noch eindrucksvoller ist Jugene, ein Supercomputer des Typs Blue Gene/P von IBM und einer der Rechner des deutschen Gauss Centre für Supercomputing (Bild S. 85). Als er im Mai 2009 auf seine der-

zeitige Ausbaustufe erweitert wurde, war er mit einer Leistung von einer Billiarde ( $10^{15}$ ) Rechenoperationen pro Sekunde (einem Petaflops) der schnellste Rechner Europas. Nur ein solches System, das eine Rechenleistung von mehr als 25 000 handelsüblichen PCs aufbringen kann – dabei allerdings nur ein Drittel der Energie verbraucht –, war Ende 2008 in der Lage, das eingangs erwähnte Rätsel der Hadronenmassen in quantitativer Weise zu lösen.

In Supercomputern kommt es auf effizientes Teamwork an: Jeder einzelne Prozessor arbeitet für sich an einem kleinen Teil des Gesamtproblems. Die Ergebnisse der Berechnung werden zwischen den Prozessoren ausgetauscht und gehen in den nächsten Schritt der Berechnung ein. Wie bei einem Mosaik werden die Einzelteile dann zusammengefügt und ergeben schließlich ein Gesamtbild. Dazu müssen die auszutauschenden Daten rechtzeitig und zuverlässig an ihrem Bestimmungsort ankommen. Erforderlich ist daher zum einen ein leistungsstarkes Datennetz zwischen den Prozessoren, zum anderen eine Programmierung, die aus der Vielzahl der Prozessoren eine funktionale Einheit macht.

Die Rechenkraft von Jugene steht ausgewählten rechenintensiven Projekten aus ganz Europa zur Verfügung, die sich gut »skalieren« lassen. Das heißt: Die Rechenleistung wächst annähernd proportional zur Zahl der eingesetzten Prozessoren – der notwendige zusätzliche Datenverkehr und das Warten auf benötigte Daten nehmen nicht überhand.

### Das Weltklima vorhersagen

Inzwischen zählt bei Supercomputern – ähnlich wie in der Formel 1 – nicht mehr ausschließlich die Rechengeschwindigkeit. Das zeigt sich schon daran, dass sich neben der Top500-Liste der schnellsten Rechner inzwischen eine Green500-Liste der Supercomputer mit dem geringsten Energieverbrauch etabliert hat. Auf ihr konnte der Hochleistungsrechner QPACE (*QCD Parallel Computing on the Cell*), seit Mitte 2009 mit jeweils vier Regalen (»Racks«) in Jülich und an der Universität Wuppertal in Betrieb, seither zweimal in Folge den ersten Platz einnehmen. Entwickelt wurde er von einem akademischen Konsortium aus Universitäten und Forschungszentren sowie IBM Deutschland. Innerhalb des Konsortiums übernahmen unter Führung der Universität Regensburg die Forschungszentren Desy und Jülich zentrale Aufgaben.

Doch beschränken sich die Einsatzgebiete von Supercomputern nicht auf die Berechnung fundamentaler Naturkräfte oder die großen Rätsel des Universums. Simulationen erlauben es beispielsweise auch, die Folgen menschlichen Handelns auf unsere Umwelt abzuschätzen und entsprechende Empfehlungen auszusprechen. Paradebeispiel dafür ist die Klimaforschung: Die Vorhersagen für das Weltklima, die insbesondere in die Sachstandsberichte des Weltklimarats IPCC eingehen, konnten bisher unter anderem aus Mangel an Rechenleistung gewisse Prozesse nicht in das mathematische Modell einbeziehen, sondern nur »parametrisieren«, das heißt summarisch durch gewisse Zahlenwerte (»Parameter«)

berücksichtigen, die ihrerseits durch Abgleich mit dem Klima der Vergangenheit gewonnen wurden. Das betrifft Vorgänge in der Stratosphäre ebenso wie solche, die sich auf kleinem Raum abspielen, insbesondere die Dynamik der Wolken und Aerosole.

Für spezielle Szenarien kann diesem Mangel bereits abgeholfen werden. Die Gruppe um Martin Schultz aus Jülich hat die Auswirkungen anthropogener Emissionen aus großen Städten auf das Klima berechnet. Externe Gruppen erforschen mit dem Supercomputer natürliche Aerosolereignisse wie den Staubflug aus der Sahara oder die Ausbreitung der Vulkanasche des Eyjafjallajökull.

Das Universalwerkzeug Supercomputer kann auch von unmittelbarem, praktischem Nutzen sein und in der Industrie den Weg zum Produkt verkürzen. So führt nach Auffassung der meisten Experten der Weg zu optimalen Gasturbinen nur über Computersimulationen. Das ist ein bedeutender Wirtschaftszweig mit hohem Wachstumspotenzial: Jedes (Düsen-)Flugzeugtriebwerk ist eine Gasturbine, und der Flugverkehr nimmt weiter zu. Vor allem aber bieten diese Geräte zurzeit die effizienteste Möglichkeit, durch Verbrennung Strom zu erzeugen: Pro Kilowattstunde verbrauchen sie in Gas-und-Dampf-Kombikraftwerken weniger Brennstoff und stoßen entsprechend weniger Kohlendioxid aus als konventionelle Kraftwerke.

Lange Zeit setzten Ingenieure auf teure und zeitaufwändige Experimente und Tests sowie auf ihre Intuition, um den Wirkungsgrad der Turbinen zu erhöhen. In den letzten Jahren hat die Computersimulation Einzug in den Entwicklungsprozess gehalten, allerdings zunächst vor allem, um einzelne Komponenten der Turbine zu verbessern: Verdichter, Brennkammer und Expander (die Turbine im engeren Sinn). Mit weiter steigender Rechenfähigkeit können die Ingenieure sich in den kommenden Jahren der nächsten Herausforderung stellen und die einzelnen Computermodelle miteinander koppeln. Der Nutzen getrennter Modelle für die einzelnen Komponenten ist sehr begrenzt, weil zum Beispiel ein Modell für den Expander die Einströmung des Gases aus der Brennkammer als gegeben hinnehmen muss. Erst wenn Brennkammer und Turbine gleichzeitig simuliert werden, lassen sich die Einlassbedingungen optimal festlegen.

Für ein perfektes Ergebnis müssen die Berechnungen unterschiedlichste physikalische Vorgänge und Theorien – Strömungsmechanik, Verbrennung, Strahlung, Wärmeübertragung, Akustik – sowie die Chemie der Emissionen einbeziehen. Auch das ist nur möglich, indem einerseits Programme für den Einsatz auf massiv parallelen Supercomputern fit gemacht werden und andererseits die Rechnerleistung weiter gesteigert wird.

### Aufbruch ins Exaflops-Zeitalter

Derzeit läuten die Computerbauer die Exaflops-Ära ein: eine Trillion ( $10^{18}$ ) Rechenoperationen pro Sekunde – ein Ziel, das bis zum Jahr 2020 durchaus erreichbar erscheint, was die Hardware angeht. Allerdings ist eine solche Leistungssteige-

rung aus heutiger Sicht nur mit Millionen von Prozessoren zu erreichen. Das würde – mit heutiger Technik – das Problem der Skalierbarkeit weiter verschärfen und den Energieverbrauch der Systeme ins Unbezahlbare treiben.

Das Forschungszentrum Jülich geht beide Herausforderungen offensiv und mit verschiedenen Partnern an. Zusammen mit Intel und ParTec betreibt es das »Exa-Cluster Laboratory«. In einem mit EU-Geldern geförderten Projekt namens DEEP (*Dynamical Exascale Entry Platform*) entwickeln wir zusammen mit dem Leibniz-Rechenzentrum in Garching ein System, das auf der Many-core-Technologie von Intel aufbaut; das Kommunikationssystem »Extoll« stammt von dem Heidelberg-Mannheimer Informatiker Ulrich Brüning. Mit dem Böblinger Labor der Firma IBM betreiben wir das Exascale Innovation Center, in dem die Programmierung der superschnellen Rechner vorangetrieben werden soll. Bis 2016 sollen erste brauchbare Prototypen fertig sein.

### Europäischer Schulterschluss

Seit etwa zehn Jahren ist zu beobachten, dass europäische Wissenschaftler im Vergleich zu ihren amerikanischen, japanischen und neuerdings auch chinesischen Fachkollegen immer weniger Anteil an der weltweit verfügbaren Rechenzeit haben – aus einleuchtenden Gründen: Supercomputer im höchsten Leistungsbereich sind enorm teuer und veralten wegen des rapiden technischen Fortschritts bereits nach wenigen Jahren; der Staat, der sie anschafft, bedient schon aus Wettbewerbsgründen vorrangig die eigenen Leute mit Rechenzeit, und überhaupt sind Chip- und Computerentwicklung in Europa nur schwach vertreten.

Um dem Rückstand abzuhelpfen und die Kosten auf mehrere Schultern zu verteilen, gründeten Vertreter von mittlerweile über 20 europäischen Staaten Mitte 2010 den Supercomputerverbund PRACE (*Partnership for Advanced Computing in Europe*), formal ein internationaler gemeinnütziger Verein mit Sitz in Brüssel. Frankreich, Deutschland, Italien und Spanien haben sich verpflichtet, während der nächsten fünf Jahre Rechenzeit im Wert von 400 Millionen Euro für Europas Wissenschaft und Industrie zur Verfügung zu stellen; Deutschland hat bisher insbesondere die Leistung von Jugene eingebracht. Für den Aufbau von PRACE geben die Europäische Kommission und das Konsortium der 20 beteiligten Länder noch je 70 Millionen Euro dazu. Unter der Koordination des Jülich Supercomputing Centre werden hier auch vielfältige Entwicklungsprojekte für Supercomputerkomponenten gemeinsam mit den europäischen Herstellern geför-

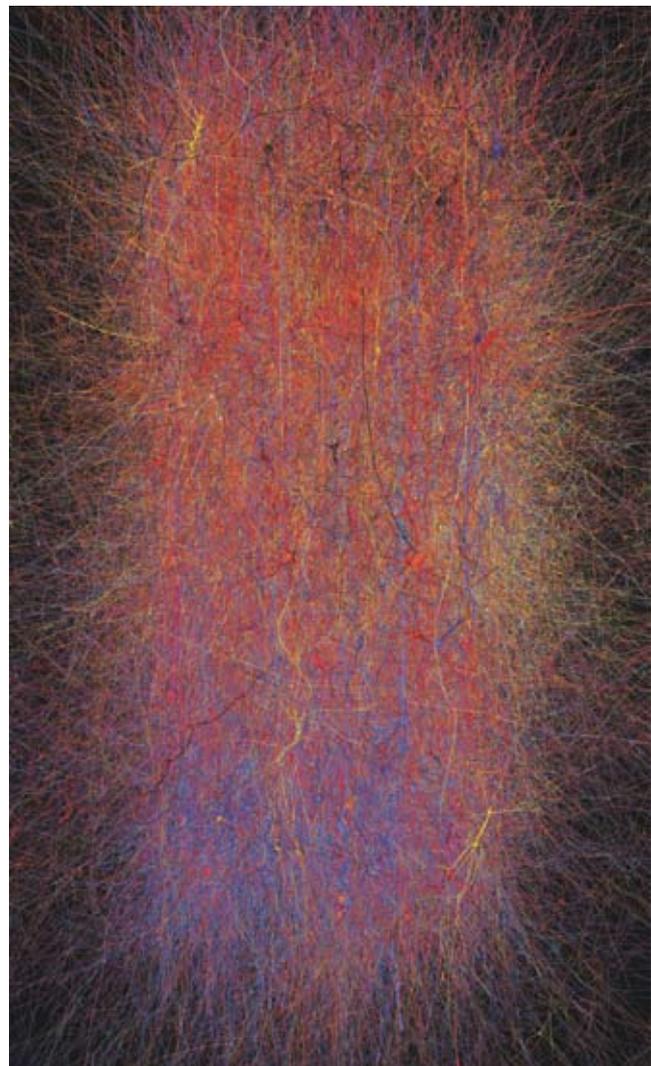
**In dieser Computersimulation aus dem Blue Brain Project entspricht jeder der abgebildeten Fäden einem Neuron; die Farben geben dessen – zeitlich variable – elektrische Spannung wieder. Das Bild ist sehr komplex, zeigt aber nur 1000 der 10 000 Neurone, mit denen die Simulation arbeitet; und das ganze System (eine »kortikale Säule«) entspricht nur einem winzigen Teil eines echten Gehirns.**

dert – ein wichtiger Beitrag, um die europäische Industrie auf diesem Sektor wieder sichtbar werden zu lassen.

Der deutsche Partner in PRACE ist das »Gauss Centre for Supercomputing« (GCS). In ihm sind auf Initiative des Bundesministeriums für Bildung und Forschung die drei deutschen Höchstleistungsrechenzentren in Stuttgart, Garching und Jülich zusammengeschlossen. Wissenschaftliche Beiräte von unabhängigen Experten beraten GCS und PRACE und verteilen die Rechenzeit im *peer-review*-Verfahren streng nach wissenschaftlicher Exzellenz der beantragten Projekte.

In Jülich führen Simulationslaboratorien für Klimaforschung, Biologie, Plasmaphysik oder Elementarteilchenphysik Wissenschaftler und Studenten an die beispiellosen Möglichkeiten der neuen Systeme heran. Jedes dieser Labore wird von einem Vertreter des jeweiligen Fachs geleitet; Informatiker und Mathematiker kümmern sich um die technischen Feinheiten der Programme.

Mit Exaflops-Supercomputern werden sich Vorhaben umsetzen lassen, die heute noch überaus utopisch anmuten. Ein Beispiel dafür ist das »Human Brain Project« des Biologen Henry Markram von der École polytechnique fédérale (EPFL) in Lausanne. Neurowissenschaftler, Ärzte, Informatiker, Ma-



BLUE BRAIN PROJECT / ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE (EPFL)

thematiker und Computertechniker aus ganz Europa wollen alles Wissen über die Vorgänge im menschlichen Gehirn – bis hinunter auf die Ebene der Zellen oder gar einzelner Moleküle – in gewaltigen Datenbanken sammeln. Zugleich wollen sie Methoden entwickeln, um die Funktionsweise des Gehirns in allen biologischen Details zu simulieren. Das Forschungszentrum Jülich beteiligt sich daran mit mehreren seiner Institute. Insbesondere zeichnet das Jülich Supercomputing Centre für den Aufbau der »Human Brain Facility« verantwortlich: Bis 2020 soll Markrams Simulationssoftware Schritt für Schritt die Funktionen des Gehirns nachbilden können und auf dem Jülicher Supercomputer als virtuelles Gehirn Forschern aus der ganzen Welt als Arbeitsplattform dienen. Dazu allerdings ist eine Rechenleistung im Exaflops-Bereich zwingend erforderlich. Ein Antrag auf Förderung über das »Flagship«-Programm FET (*Future and Emerging Technologies*) der EU hat bereits die erste Hürde überwunden: Die EU-Kommission hat den Auftrag für eine Machbarkeitsstudie erteilt.

Die Forscher sind davon überzeugt, dass von diesem Projekt Medizin und Computertechnik gleichermaßen profitieren werden. Auf der medizinischen Seite erwarten sie eine frühere Diagnose und bessere Behandlung neurologischer Krankheiten, die Steuerung von Prothesen mittels Gedankenkraft und ein besseres Verständnis von Alterungsprozessen. Auf der anderen Seite kann das menschliche Gehirn auch als perfektes Vorbild für einen extrem leistungsfähigen und zugleich energieeffizienten, selbst lernenden und sich selbst reparierenden Computer dienen. Der Heidelberger Physiker Karlheinz Meier, stellvertretender Direktor des Human Brain Project, entwickelt derzeit einen »neuromorphen Chip«, der auf elektronischem Weg Funktionen des Gehirns emulieren soll.

Die Wissenschaftler hoffen, dass sie mit ihrem Vorhaben eine Spirale der Erkenntnis in Gang setzen: Je mehr sie mit Hilfe von Computersimulationen verstehen, nach welchen Prinzipien das Gehirn arbeitet, umso mehr werden sie diese anwenden können, um leistungsfähigere Computer und intelligenterer Roboter zu entwerfen.

### Inflation der Rechenkerne

Die rasante Entwicklung der Supercomputer und ihr Eindringen in nahezu alle wissenschaftlichen Disziplinen werfen unweigerlich auch prinzipielle Fragen auf: Werden Wissenschaftler sich verstärkt auf Theorien und Modelle konzentrieren, die sich auf den Supercomputern der nahen Zukunft berechnen lassen? Wie kommen wir mit Problemen weiter, für die das (noch) nicht gilt? In der Tat ist zu erkennen, dass die Grundlagenforscher mit der Skalierbarkeit ihrer Programme deutlich weiter sind als die Vertreter der Ingenieur- und der Lebenswissenschaften, aus einem einfachen Grund: Letztere sind weniger frei in der Wahl ihrer Probleme.

Heute gehen wir davon aus, dass größere Rechengeschwindigkeiten fast ausschließlich durch mehr Einzelrechner (»Rechenkerne«) in Supercomputern zu erreichen sind. Dies erscheint plausibel, da die Taktfrequenz des einzelnen

Rechenkerns allem Anschein nach ihre technische Obergrenze erreicht hat.

Mittlerweile werden jedoch zahlreiche andere Lösungen verfolgt (Spektrum der Wissenschaft 2/2011, S. 90). Darunter ist auch eine Abkehr vom Prinzip des Universalrechners. Der Supercomputer »Anton« von der Firma D.E. Shaw Research in New York, benannt nach Antoni van Leeuwenhoek (1632–1723), dem Erfinder des Mikroskops, kann nur noch sehr spezielle Rechnungen durchführen, nämlich die Bewegungsgleichungen für die Faltung eines Proteins lösen, das aber fast 100-mal so schnell wie ein Standardsystem. Anton berechnet die speziellen Kraftfelder in Festkomma- statt in Gleitkommaarithmetik und hat auch einige andere Tricks eingebaut. So können zum ersten Mal deterministische Faltungen größerer Proteine beobachtet werden.

Erfolge wie der von Anton sind richtungsweisend und werden Wissenschaftler anderer Gebiete und Informatiker motivieren, nach ähnlich innovativen Lösungen zu suchen. ~

### DIE AUTOREN



**Achim Bachem** (links) habilitierte sich 1980 in Mathematik an der Universität Bonn. Nach Professuren in Erlangen-Nürnberg, Bonn und Köln wurde er 1996 Vorstandsmitglied des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) und

von 1998 bis 2002 deutscher Delegierter der Europäischen Weltraumorganisation ESA. Seit 2006 ist er Vorstandsvorsitzender des Forschungszentrums Jülich. **Thomas Lippert** promovierte gleich zweimal: 1993 in Wuppertal über Simulationen zur Quantenchromodynamik und 1998 in Groningen (Niederlande) über ein Verfahren zur Ansteuerung von Parallelrechnern. Seit 2004 ist er Direktor des Jülich Supercomputing Centre im Forschungszentrum Jülich und zugleich Professor für Theoretische Physik in Wuppertal. Die Autoren danken dem freien Wissenschaftsjournalisten **Dr. Frank Frick** ([www.frankfrick.de](http://www.frankfrick.de)) für seine Unterstützung.

### QUELLEN

- Epelbaum, E. et al.:** *Ab Initio* Calculation of the Hoyle State. In: Physical Review Letters 106, Nr. 192501, 2011. Online unter <http://physics.aps.org/pdf/10.1103/PhysRevLett.106.192501.pdf>
- Weinberg, S.:** Anthropic Bound on the Cosmological Constant. In: Physical Review Letters 59, S. 2607–2610, 1987
- Weinberg, S.:** Nuclear Forces from Chiral Lagrangians. In: Physics Letters B 251, S. 288–292, 1990

### WEBLINKS

- <http://physics.aps.org/articles/v4/38>  
Morten Hjorth-Jensen: *The Carbon Challenge. Über die Synthese von Kohlenstoff-12 aus drei Alphateilchen und den Hoyle-Zustand*
- [http://inside.hlr.de/hlm/Edition\\_02\\_10/article\\_06.html](http://inside.hlr.de/hlm/Edition_02_10/article_06.html)  
Volker Springel et al.: *The Millennium-XXL Project: Simulating the Galaxy Population of dark Energy Universes*
- [www.spiegel.de/wissenschaft/mensch/0,1518,761995,00.html](http://www.spiegel.de/wissenschaft/mensch/0,1518,761995,00.html)  
Christoph Seidler und Cinthia Briseño: *Forscher basteln an der Hirnmaschine.*
- Diesen Artikel sowie weiterführende Informationen finden Sie im Internet: [www.spektrum.de/artikel/1120985](http://www.spektrum.de/artikel/1120985)