CSCS
Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing Centre

ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

FACT SHEET

HP2C – Eine Initiative für mehr Recheneffizienz

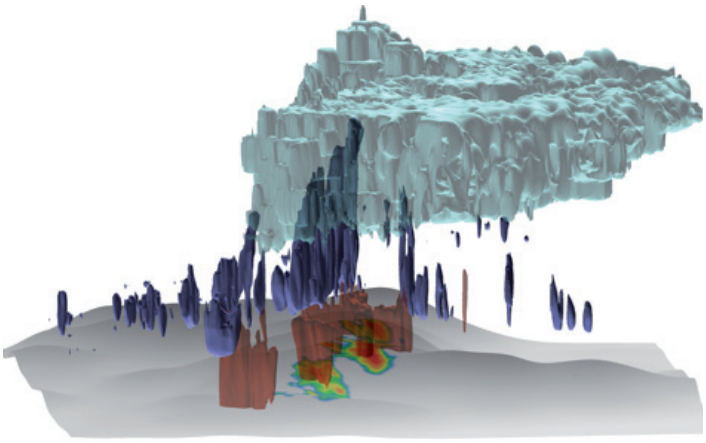
Modellsimulationen sind ein wesentlicher Bestandteil der wissenschaftlichen Methodik. Mit zunehmender Komplexität der Modelle müssen jedoch die Algorithmen verbessert und die Supercomputer leistungsstärker werden. Die Schweiz geht das Software-Problem mit dem Projekt HP2C an.

Spitzenforschung braucht Supercomputer, wie sie das CSCS (Nationales Hochleistungsrechenzentrum der Schweiz) in Lugano für die Schweizer Forschenden bereitstellt. Das Hochleistungsrechnen wurde mit zunehmender Komplexität der «Gedanken-Modelle» ein Schlüsselwerkzeug der modernen Forschung. Modellsimulationen zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen sind deshalb neben Experiment und Theorie ein etablierter Bestandteil der wissenschaftlichen Methode geworden. Die Simulationen, heute mit massiv parallel arbeitenden Supercomputern erstellt, ermöglichen einen völlig neuen Erkenntnisgewinn in der Wissenschaft und fördern die Kreativität von Ingenieuren. Sie machen sichtbar, was dem blossen Auge, auch mit hochauflösenden Mikroskopen oder Teleskopen, verborgen bleibt. Simulationen verhelfen beispielsweise dazu, unbekannte Materialien mit völlig neuen Eigenschaften und Funktionalitäten zu entdecken.

Ungebremste Leistungssteigerung

Vor zwanzig Jahren erreichten Supercomputer eine Leistung, die heute in einem Laptop steckt: In der sogenannten Gigaflops-Leistungsklasse vollzog ein Hochleistungsrechner damals einige wenige Milliarden Rechenoperationen pro Sekunde. Die heutigen Supercomputer der Petaflops-Leistungsklasse führen mehrere Billiarden – mehrere Millionen mal eine Milliarde – Rechenschritte pro Sekunde aus. Da herkömmliche Chip-Technologien an ihre Grenzen stossen, müssen die Rechner der Petaflops-Leistungsklasse aus mehreren tausend bis mehreren zehntausend gut vernetzten Prozessoren gebaut werden. Das wiederum hat eine massive Zunahme des Energieverbrauchs zur Folge. Die weltweit leistungsstärksten Supercomputer verbrauchen etwa 10 Megawatt Strom. Ein Megawatt kostet ein Rechenzentrum rund 1.5 Millionen Franken pro Jahr.

Experten sind sich deshalb einig, dass Supercomputer besser ausgenutzt werden müssen. Konkret bedeutet das, dass Applikationsprogramme für massiv parallele Rechner umgeschrieben werden müssen. Thomas Schulthess, Direktor des CSCS, hat deshalb zusammen mit Piero Martinoli, Präsident der Università della Svizzera italiana, im Rahmen der vom Bund in Auftrag gegebenen nationalen Hochleistungsrechnen- und Vernetzungsstrategie (HPCN-Strategie) 2009 die Initiative High-Performance and High-Productivity Computing (HP2C) lanciert. Entwickler von Applikationssoftware für wissenschaftliche Simulationen verschiedener Disziplinen arbeiten in HP2C interdisziplinär mit Mathematikern, angewandten Mathematikern und Informatikern zusammen.



«Cloud-resolving» Modelle, wie sie an der ETH Zürich in der Klimaforschung verwendet werden, rechnen mit einer horizontalen Maschenweite von etwa einem Kilometer. Sommerliche Gewitterwolken, wie sie hier zu sehen sind, können damit bereits relativ detailliert simuliert werden. In dunkelblauer Farbe sind die Wolken aus Wassertropfen zu sehen, in Rot sind die fallenden Tropfen gezeigt. Wolken aus Eiskristallen sind hellblau gefärbt. Die Regenbogenfarben zeigen die resultierende Niederschlagsmenge (rot=viel, blau=wenig). *(Bildquelle: Wolfgang Langhans, ETH Zürich)*

Algorithmen und Software verbessern

Insgesamt sind 13 Projektgruppen aus Chemie, Materialwissenschaft, Physik, Astrophysik, Medizin, Anthropologie sowie den Klima- und Erdwissenschaften am HP2C-Projekt beteiligt. Sie alle arbeiten mit hochkomplexen und vielschichtigen Modellen und haben wie viele der rechnergestützten Wissenschaften das Problem, dass ihre bisher verwendeten Codes auf der Hardware der massiv parallelen Rechner sowie deren Chips mit ihrer steigenden Anzahl an Prozessorkernen nicht mehr effizient arbeiten oder skalieren, wie es im Fachjargon heisst.

Ziel ist, dass die Anwendungssoftware bei den Computersimulationen die potentielle Rechenleistung moderner Rechnerarchitekturen maximal ausnutzt. Dazu werden in HP2C die Rechenmethoden so angepasst, dass sie die Hardware der Prozessoren optimal nutzen. Zudem werden die Simulationsprogramme so strukturiert, dass die Bewegungen der Daten auf dem Prozessor, zwischen Prozessor und Hauptspeicher, sowie zwischen den Prozessoren des massiv-parallelen Supercomputers minimiert werden.

Test der neuen Hard- und Software

Die Codes für die unterschiedlichen Fragestellungen müssen modifiziert werden. Um sie auf neuester Hardware zu testen, wurde der Supercomputer «Tödi», eine Cray XK6, im Oktober 2011 am CSCS installiert. «Tödi» ist ein massiv paralleler Rechner der auf einer hybriden Technologie basiert. Sie nutzt eine Mischung aus herkömmlichen Prozessoren und Grafikprozessoren – laut Experten ist dies ein vielversprechender Ansatz für die zukünftige Technologie im Hochleistungsrechnen. Im Gegensatz zu herkömmlichen Computerprozessoren laufen auf Grafikprozessoren Hunderte bis Tausende von Rechenoperationen parallel. Das verhilft den Forschenden zu einer schnelleren Lösung ihrer Fragestellungen.

Laurent Villard, Hauptinitiator des HP2C-Projekts «Gyrokinetic», über HP2C:

Laurent Villard ist Professor für Plasmaphysik an der EPF Lausanne.

Warum haben Sie sich um ein HP2C-Projekt beworben?

Laurent Villard: Turbulenzen von magnetisch eingeschlossenem Plasma zu simulieren ist eine grosse Herausforderung, da die Simulation ungleiche Zeit- und Längen-Massstäbe umfasst. Es ist daher essentiell, dass unsere Codes überarbeitet und, wenn nötig, völlig neu geschrieben werden, um die Möglichkeiten der fortschrittlichsten HPC-Systeme ausschöpfen zu können. Die Entwicklung unserer Codes müssen in einer Langzeitperspektive vorgenommen werden: Immer mehr physikalische Effekte werden berücksichtigt, die wiederum ständig steigende Computerressourcen erfordern. Deshalb ist es wichtig, mit den neuesten Entwicklungen mitzuhalten und einen vorausschauenden Blick auf die Belange des HPC zu haben.

Wo profitieren Sie und Ihr Team am meisten von HP2C?

Das Schöne an HP2C ist, dass es finanzielle Mittel in Forschungsinstitutionen investiert, die die speziellen wissenschaftlichen Anwendungen durchführen, und uns zugleich mit einem Team von Spitzenspezialisten des CSCS vernetzt. Dank HP2C konnten wir die Skalierbarkeit unserer Codes auf parallelen Rechnern erhöhen. In den herausfordernden Anwendungsfällen mit mehreren Milliarden Berechnungspunkten konnte die Leistung mehr als verdoppelt werden. Ausserdem hat HP2C uns angeregt, neue Wege bei zukünftigen Code-Entwicklungen zu beschreiten. Ein nicht zu vernachlässigender «Nebeneffekt» von HP2C war, dass wir uns seit Anfang 2012 Zugang zu einem Supercomputer der Petaflops-Klasse in Japan sichern konnten.

Wie würden Sie den folgenden Satz vervollständigen: HP2C ist für die Schweiz ...

... eine einzigartige, gut durchdachte und gut geführte Chance, um uns an die Spitze der Wissenschaft in den vielen Bereichen, die stetig wachsende Rechenleistung benötigen, zu führen und dort zu halten.

Projektbeispiele

Die folgenden Beispiele zeigen, welchen direkten Einfluss der Erfolg der HP2C-Projekte auf unseren Alltag hat.

Die Erdbebenforschung vorantreiben

Durch das Projekt «Petaquake» sollen zentrale Fragen in den Erdwissenschaften geklärt werden, beispielsweise wie das Erdinnere genau aufgebaut ist, welche Prozesse sich im Erdinneren abspielen und wie genau Erdbeben entstehen. Ein Blick in das Erdinnere analog einer Computertomographie beim Menschen könnte die Antworten liefern. Die im Projekt entwickelten Codes und Algorithmen sollen ermöglichen, hochauflösende tomographische Bilder von Prozessen im Erdinneren im Bereich von mehreren zehn Kilometern zu berechnen. Diese Bilder können helfen, bestehende Unsicherheiten in der Gefahreneinschätzung zu reduzieren und Gefahrenkarten zu verbessern. Petaquake hat für die erdbebengefährdete Schweiz und Europa einen direkten praktischen Nutzen.

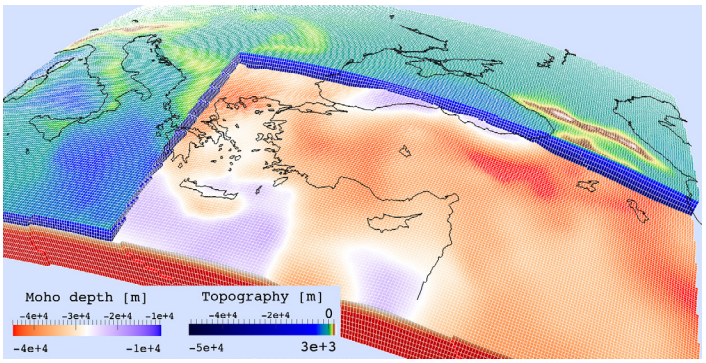
Petaquake – Large-Scale Parallel Nonlinear Optimization for High Resolution 3D-Seismic Imaging; Olaf Schenk, Professor an der Università della Svizzera italiana

Energieprobleme mit dem Supercomputer lösen

Simulationen können Beiträge beim Erforschen von Medikamenten oder alternativer Energiequellen – neuartiger Brennstoffe oder Solarzellen – liefern. Spezielle Rechencodes machen es möglich, neue Materialien und deren hochkomplexe molekularen Eigenschaften zu simulieren. Einer der wichtigsten Codes für derartige Simulationen ist CP2K (Car-Parrinello 2000 Projekt). Mit CP2K können grosse komplexe chemische Systeme wie etwa Grenzflächen mit Materialübergängen von fest zu flüssig oder von flüssig zu gasförmig simuliert werden. Solarzellen wie die Grätzel-Zellen sind ein typisches Beispiel für ein derartiges Interface: einem Festkörper auf der einen Seite, einem Lösungsmittel auf der anderen, mit einem Farbstoff im Zwischenbereich. Diese elektrochemische Farbstoff-Solarzelle funktioniert nach einem ähnlichen Prinzip wie die Photosynthese und erreicht derzeit einen Wirkungsgrad von 12.3 Prozent. Um die Zelle noch effizienter bauen zu können, müssen die Forscher ihre Funktionsweise möglichst genau kennen. Dazu nutzen sie Simulationen. Je besser die Solarzellen durch die Simulationen verstanden sind, umso effizienter kann man mit ihnen im Labor experimentieren und dadurch ihren Wirkungsgrad verbessern.

CP2K verwendet viele verschiedene Algorithmen und besitzt komplexe numerische Strukturen, die es unter anderem im Rahmen von HP2C auf den neuen Rechnerarchitekturen abzubilden gilt.

CP2K – New Frontiers in Ab Initio Molecular Dynamics; Jürg Hutter, Professor an der Universität Zürich



Ein realistisches Modell für seismische Wellenausbreitung in Europa. Das Gitter umfasst 2 Milliarden Gitterpunkte, Oberflächentopographie und dreidimensionale Erdstruktur. Es wurde von Seismologen der ETH Zürich auf Supercomputern des CSCS entwickelt, um damit unter anderem Erdbebenszenarien in der Türkei zu berechnen. Solche realitätsnahen Untergrundstrukturen sind essentiell, um die Erdbebengefahr – zum Beispiel nahe Istanbul – zu quantifizieren. Diese Modelle können helfen, kritische lokale Baustrukturen zu bewerten. *(Bild: Rietmann et al., Supercomputing 2012, accepted)*

Agentenbasierte Simulationen – Handeln verstehen lernen

20 000 bis 200 000 Jahren vor unserer Zeit lebten mit dem Neandertaler und dem modernen Menschen mindestens zwei Arten von Hominiden gleichzeitig auf der Erde. Während der moderne Mensch in Afrika und der Neandertaler in Europa getrennt voneinander vorkamen, lebten im Nahen Osten Homo sapiens und Homo neanderthalensis etwa 100 000 Jahre nebeneinander. Warum aber die Neandertaler vor mehr als 20 000 Jahren plötzlich ausstarben, bleibt bis heute ungeklärt.

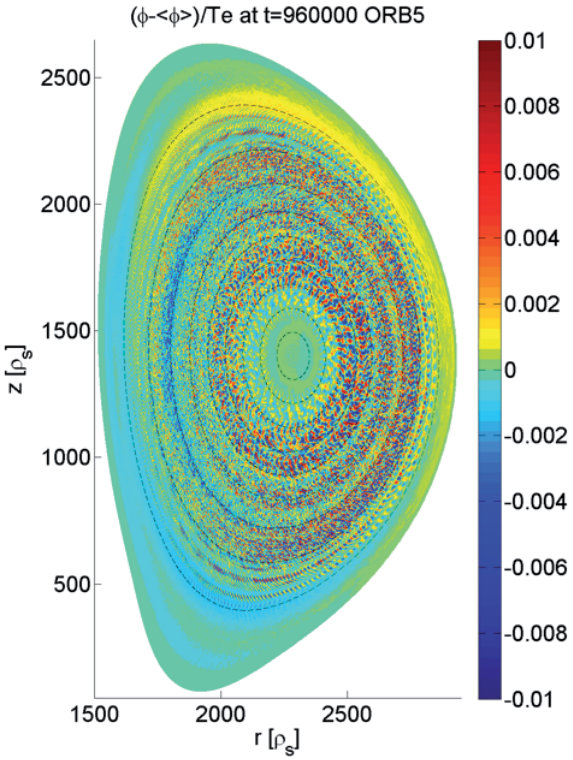
Mit einem sogenannten agentenbasierten Modell möchten die Forschenden verschiedene Verhaltensszenarien zwischen Neandertaler und Mensch unter Berücksichtigung von Fauna, klimatischen Bedingungen, Topographie und Vegetation durchspielen, um die möglichen Ursachen des Aussterbens der Neandertaler genauer zu erforschen. Es handelt sich um eine komplexe Modellierungstechnik, in der jedes Individuum, ausgestattet mit spezifischen Eigenschaften, als diskretes Objekt dargestellt wird. Derartige Modelle gewinnen zunehmend an Bedeutung, um beispielsweise das Verhalten von Menschen, etwa bei einer Massenpanik, zu simulieren.

Neanderthal Extinction – Individual-Based Modeling of Humans Under Climate Stress; Christoph P. E. Zollikofer, Professor an der Universität Zürich

Strom durch Kernfusion

Mit dem Gyrokinetik-Projekt in HP2C verfolgen Plasmaphysiker von der EPF Lausanne das Ziel, neue numerische Codes für die Simulation von turbulentem Transport in Plasmen mit magnetischem Einschluss zu entwickeln. Damit liefern sie einen wichtigen Beitrag zu ITER, dem grössten internationalen Projekt auf dem Gebiet der thermonuklearen Fusionsforschung. ITER (lateinisch für «der Weg») soll den Nachweis erbringen, dass die Energiegewinnung aus der Kernfusion von Deuterium und Tritium in physikalischer und technologischer Hinsicht machbar ist. ITER basiert auf dem Tokamak-Prinzip und wird das heisse Fusionsplasma durch Magnetfelder einschliessen, die von supraleitenden Spulen erzeugt werden. Die Plasmaturbulenz zu beherrschen ist wichtig, da sie für einen erhöhten Wärmetransport verantwortlich ist und dadurch die Energieeinschlusszeit des Reaktors beeinträchtigt. Die Arbeiten von Laurent Villard und seinem Team in HP2C finden international grosse Beachtung. Dies zeigt sich unter anderem darin, dass den Wissenschaftlern ein Viertel der gesamten Rechenzeit eines speziell für die Fusionsforschung bereitgestellten 1.5 Petaflops Supercomputers in Japan bewilligt wurde, um ihre neu entwickelten Codes zu testen.

GYROKINETIC – Advanced Gyrokinetic Numerical Simulations of Turbulence in Fusion Plasmas; Laurent Villard, Professor an der EPF Lausanne



Die Grafik veranschaulicht anhand von Konturlinien Dichtefluktuationen im turbulenten ITER-Plasma. Die Simulationen erfolgten mit dem ORB5 Code auf dem IFERC-CSC HELIOS Rechner (1.5 Petaflops) unter Einsatz von 1 Milliarde Gitterpunkten und 2 Milliarden Partikeln. «Unser HP2C Projekt war sehr erfolgreich», sagt Laurent Villard. «Die Rechengeschwindigkeit und Skalierbarkeit des für die Simulationen genutzten ORB5 Code konnten massiv verbessert werden. Wir können nun grossmasstäbliche Turbulenzsimulationen durchzuführen, die vorher praktisch nicht machbar waren. Die neuen Code-Eigenschaften ermöglichten uns den Zugang zu Rechnern der Petaflops-Klasse». *(Bild: Gyrokinetic group Laurent Villard, EPF Lausanne)*

HP2C High Performance and High Productivity Computing

Thomas Schulthess formulierte 2008 ein Projekt für die Rektorenkonferenz der Schweizer Universitäten (CRUS). Ziel des Projekts sollte sein, die Zusammenarbeit zwischen CSCS und USI zu stärken und Grundprobleme im Supercomputing strukturiert anzugehen. Ursprünglich war das HP2C-Projekt kleiner geplant und auf etwa 4 Millionen Franken angelegt. Die Schweizerische Universitätenkonferenz regte jedoch an, die Plattform schweizweit zu erweitern, und steuert etwa 80 Prozent der Finanzierung, rund 14.5 Millionen Franken, bei. HP2C ist ein zentrales Element der vom Bund seit 2009 geförderten nationalen Strategie für Hochleistungsrechnen.
www.hp2c.ch

Via Trevano 131
6900 Lugano
Switzerland

Tel +41 (0)91 610 82 11
Fax +41 (0)91 610 82 82
www.cscs.ch

© CSCS 2012