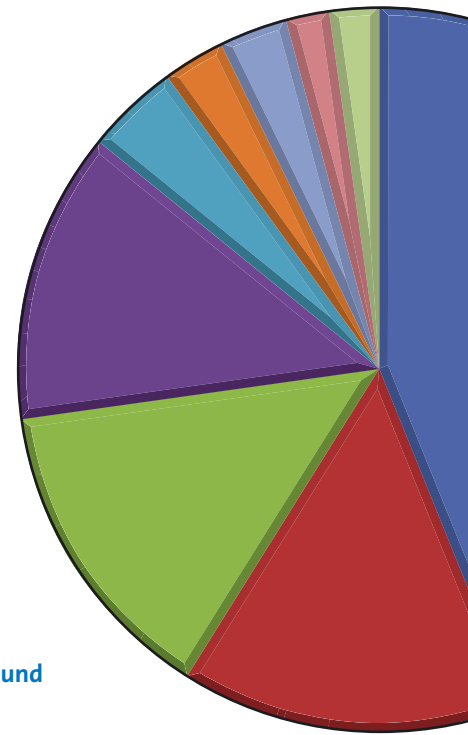


Überblick

Höchstleistungsrechnen am LRZ

Warum sind numerische Simulationen aus der heutigen Forschung nicht mehr wegzudenken und was muss alles berücksichtigt werden, bis ein Höchstleistungsrechner wie der neue SuperMUC tatsächlich in Betrieb geht?

VON ARNDT BODE



Höchstleistungsrechnen für die Wissenschaft

Höchstleistungsrechnen beschreibt die schwierige interdisziplinäre Aufgabe, reale Gegenstände oder Ereignisse auf einem Höchstleistungsrechner durch ein geeignetes Programm numerisch zu simulieren.

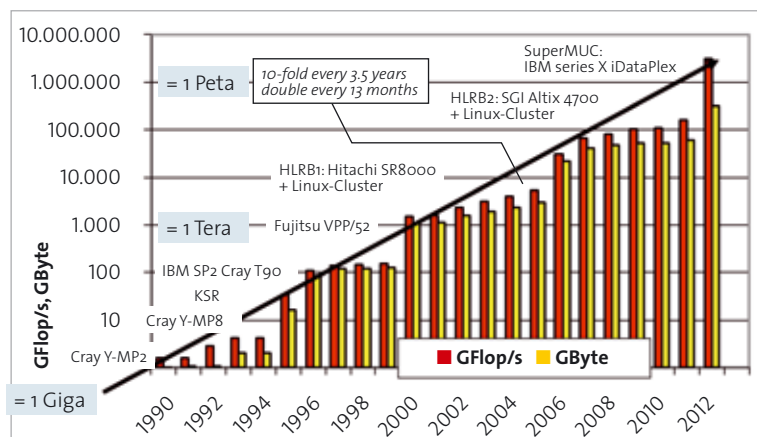
Ziel ist es dabei, Erkenntnisse über Gegenstände und ihr Verhalten zu gewinnen, die durch Experiment und Theorie nicht oder nicht vergleichbar günstig zu gewinnen sind. Diese Erkenntnisse können sich dabei auf Grundlagenwissenschaften beziehen wie die Entstehung des Universums oder die Vorhersage von Erdbeben, sie können aber auch unmittelbar zur Herstellung von neuen Produkten und Dienstleistungen dienen, z. B. die Simulation von Flugzeugtragflächen mit minimalem Kerosinverbrauch und Fluglärm oder der Ausbreitung von Schadstoffen im Grundwasser. Höchstleistungsrechnen ist also in gleichem Maße bedeutend für neue Erkenntnisse in der Wissenschaft wie auch für konkurrenzfähige Produkte in der Wirtschaft. Die Bayerische Staatsregierung hat diese Tatsache erkannt und – teilweise in Ko-finanzierung mit dem Bund – die Beschaffung von Höchstleistungsrechnern im Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) ebenso großzügig gefördert wie die Wissenschaftsdisziplin des Höchstleistungsrechnens. Denn die Programme zur numerischen Simulation haben nicht nur einen fast unbegrenzten Bedarf an Rechenleistung, sondern sie erfordern auch die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Fachwissenschaften, Mathematikern und Informatikern, um den Gegenstand der Betrachtung algorithmisch effizient zu beschreiben und diese Beschreibung dann effizient auf dem meist hochparallelen Rechner zu implementieren.

Anwendungen und Ausbildung

Seit über 20 Jahren betreibt das LRZ deshalb Höchstleistungsrechner für die Wissenschaft und beschäftigt eine wachsende Anzahl von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die die Anwender der Rechner fachspezifisch unterstützen und betreuen. Weit über 100 unterschiedliche Anwendungen von Wissenschaftlern aus Bayern und Deutschland, künftig auch aus Europa, nutzen die Rechner im LRZ. Dabei sind fast alle Wissenschaftsgebiete vertreten, wie die Übersicht zur relativen Nutzung des Rechners SuperMIG zeigt.

Die Anwendungen der Höchstleistungsrechner und der geförderten Projekte im Bayerischen Kompetenznetzwerk für wissenschaftlich-technisches Höchstleistungsrechnen (KONWIHR) werden regelmäßig auf Tagungen präsentiert und in Buchform dokumentiert. Diese Aktivitäten sind Teil der umfangreichen Weiterbildungsmaßnahmen für Anwender des Höchstleistungsrechnens wie die themenspezifischen Kurse des Leibniz-Rechenzentrums und des Regionalen Rechenzentrums der Universität Erlangen-Nürnberg (RRZE) sowie entsprechen-

Übersicht über die Höchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum seit 1990.



Die auf dem SuperMIG vertretene-
nen Wissenschaftsdisziplinen:

- Engineering & Computational Fluid Dynamics: 44 %
- Astrophysics: 15 %
- High Energy Physics: 14 %
- Chemistry: 13 %
- Life Sciences: 4 %
- Physics: 3 %
- Earth Sciences: 3 %
- Grid Computing: 2 %
- Support: 2 %

de nationale und internationale Ausbildungen durch GCS e. V. und PRACE.

Zu diesen Maßnahmen zählt auch das Angebot an einschlägigen Master-Studiengängen der Bavarian Graduate School of Computational Engineering (www.bgsce.de) für Computational Engineering, Computational Mechanics sowie Computational Science and Engineering, die im Rahmen des Elitenetzwerks Bayern durchgeführt werden.

Höchstleistungsrechner am LRZ

Über die Zeit gemittelt, verdoppeln sich die Rechenleistung und die Speicherkapazität der Systeme alle 13 Monate. 1990 rechnete die CRAY Y-MP2 etwa eine Milliarde Operationen pro Sekunde, 2012 ist SuperMUC 3-millionenfach leistungsfähiger (3×10^{15} Operationen pro Sekunde, PFlop/s). Die Leistungssteigerung vollzieht sich bei Höchstleistungsrechnern rascher als bei klassischen Mikroprozessoren, bei denen die Leistungsverdopplung „erst“ etwa alle 18 Monate stattfindet.

Die „Treppenkurve“ der betrachteten Systeme beschreibt die Beschaffungszyklen von fünf bis sechs Jahren, mit jeweils leicht ansteigender Leistung in jeder Stufe durch den zwischenzeitlichen Ausbau der Systeme.

Die im LRZ beschafften Systeme und ihre Hersteller zeigen die große Volatilität der weltweit leistungsfähigsten Rechnerarchitekturen. Bei der Beschaffung der Systeme CRAY Y-MP2 bzw. Y-MP8, KSR, IBM SP2, Fujitsu, Hitachi SR8000, SGI Altix 4700 und SuperMUC stellte sich jeweils das Produkt eines neuen Herstellers als dasjenige mit dem besten Preis-Leistungs-Verhältnis heraus. Aber auch die Rechnerarchitekturen und Programmiermodelle wechselten vom klassischen

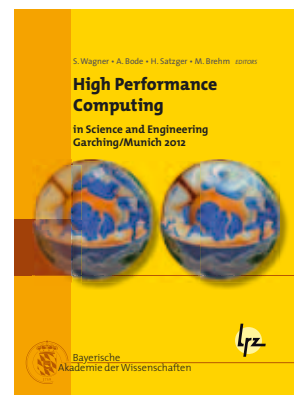
Vektorrechner mit wenigen Prozessoren über eine Cache-only-Architektur zum ersten Cluster-Rechner, dann zu einer parallelen Vektorarchitektur, über einen Cluster-Rechner mit verteilten Speichern zu einem Cluster mit gemeinsamem Speicher bis schließlich zum neuen SuperMUC mit höchster Parallelität von über 150.000 Prozessoren.

Wie wird ein solcher Rechner ausgewählt?

Die Auswahl dieser Systeme ist inzwischen europaweit über PRACE abgestimmt, ebenso in Deutschland über das Gauss Centre for Supercomputing GCS e.V., so dass sichergestellt ist, dass für die Wissenschaft jeweils neueste Hardware und unterschiedliche Architekturen zur Verfügung stehen. Der Auswahlprozess speziell für das LRZ zieht sich mindestens über zwei Jahre hin: Auf technische Evaluationen und Vorgespräche zu Prozessor- und Systemplanungen mit den einschlägigen Herstellern erfolgt eine offizielle Ausschreibung, die in einen neun Monate dauernden wettbewerblichen Dialog mit den Anbietern mündet, bei dem schrittweise die Anzahl der Bieter durch intensive ganztägige Verhandlungsrunden reduziert wird. Hauptkriterium der Entscheidung sind ca. 25 Benchmarks, die die wichtigsten Anwendungsgebiete der LRZ-Kunden repräsentieren, aber auch solche aus Europa (die so genannten PRACE-Benchmarks) sowie synthetische Programme, die ganz spezielle Architektureigenschaften bewerten. Die Leistungseigenschaften, die die Hersteller zusagen, müssen auf Basis von Simulationen ermittelt werden, denn die Systeme – bis hin zu den Prozessoren – existieren ja zum Zeitpunkt der Auswahl noch nicht. Bis zum Gewinn einer Supercomputer-Beschaffung fallen auf diese Weise nicht nur erhebliche Kosten im LRZ für die Bewertung, sondern auch bei den Herstellern für ihr Angebot an.

Der Beitrag von Hans Werner Meuer in diesem Heft (S. 5) zeigt, dass die Investitionen der Hersteller in neue Rechnerarchitekturen und Programmiermodelle sowie der Anwender in neue Programme für Supercomputer schon nach drei bis sieben Jahren Eingang in Standardrechner finden. Supercomputing ist für hochentwickelte Nationen also auch deshalb wichtig, weil hier Computertechnologien für Massen Anwendungen erprobt und bewertet werden und Know-how für den Massenmarkt entsteht.

Die folgenden Beiträge dieser Ausgabe von „Akademie Aktuell“ erläutern die Architektur des SuperMUC und schildern sechs exemplarische Anwendungen.



Publikationen über das wissenschaftliche Höchstleistungsrechnen informieren über die rasante Entwicklung auf diesem Gebiet.

DER AUTOR

Prof. Dr. Arndt Bode ist seit 2008 Vorsitzender des Direktoriums des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften und hat den Lehrstuhl für Rechnerarchitektur und Rechnerorganisation an der TU München inne. Sein zentrales Forschungsgebiet ist die Rechnerarchitektur, insbesondere der Entwurf und die Programmierung Paralleler und Verteilter Systeme. Er ist Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.