

Produktivität versus Performanz in der Simulation

Werden auf der Welt neue Höchstleistungsrechner eingeweiht, so gibt man deren Leistung meistens in FLOPS, also Floating-Points, beziehungsweise Gleitkomma-Operationen pro Sekunde, an. Aufgrund des bereits seit Jahrzehnten anhaltenden exponentiellen Wachstums der Prozessorleistung – beschrieben und auch bekannt als Mooresches Gesetz – verfolgt die Fachwelt heute gespannt die Ankündigungen erster Petaflop-Architekturen, die schon bald mit mehr als einer Billion Rechenoperationen pro Sekunde bei der Suche nach Lösungen für die dringendsten Probleme unserer Gesellschaft wie zum Beispiel dem Klimaschutz und der nachhaltigen Energieversorgung neue Impulse liefern werden. Am Forschungszentrum Jülich, dem Partner der RWTH in der Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA, ist die Installation einer derart leistungsfähigen Maschine für das Jahr 2009 geplant. Trotz beeindruckender Zahlen bleibt die effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern eine Herausforderung. In einer jüngeren Studie, die 2007 Leonid Oliker und seine Kollegen vom Lawrence Berkeley National Laboratory in den USA vorlegten, wurde ein Spektrum von Codes auf verschiedenen Systemen der Spitzenklasse untersucht. Dabei lag der Anteil der tatsächlich durch eine Anwendung erreichten Leistung im Vergleich zur theoretischen Spitzenleistung in der Mehrzahl der Fälle unter 20 Prozent. Insbesondere bei der gleichzeitigen Nutzung einer hohen Zahl von Prozessoren, beispielsweise mehr als tausend, ist auch ein Anteil von weniger als zehn Prozent keine Seltenheit. Die Produktivität eines Simulationsvorhabens, gemessen an der Zeit, die man zur Lösung des zugrunde liegenden wissenschaftlichen Problems benötigt, hängt allerdings nicht allein von der verwendeten Hardware und deren optimalem Gebrauch ab. Vielmehr ist der Lösungsweg ein hochkomplexer Prozess, der eine Vielzahl hauptsächlich von Menschen durchgeführter Schritte beinhaltet:

die Modellierung des zu simulierenden Sachverhalts, die Auswahl geeigneter paralleler Algorithmen, deren Implementierung in einer Programmiersprache, das Finden und Beheben von Fehlern, die Optimierung des Leistungsverhaltens und schließlich nach der Ausführung des Programms auf dem Rechner die Analyse der Ergebnisse. Freilich ist dieses wasserfallartige Modell des Lösungsprozesses eine sehr grobe Vereinfachung. Oft kommt es zu Rückgriffen auf vorangehende Stufen, zum Beispiel wenn sich Zwischenergebnisse als unzureichend erweisen. Am Ende erfolgt nicht selten eine Verfeinerung des ursprünglichen Modells, wodurch sich der Kreis schließt und der Vorgang von neuem beginnt.

Es bleibt festzuhalten, dass die Produktivität und damit die Kosten von der Dauer all dieser Schritte abhängen. Versuche, den Prozess zu optimieren, müssen daher auch alle Teilaktivitäten berücksichtigen. So gestaltet sich die Programmierung der komplizierten hochparallelen Systeme als ausgesprochen schwierig. Während im Bereich der betriebswirtschaftlichen Software die Komplexität der Anwendungen hinter hoch entwickelten Programmierungsumgebungen verborgen bleibt, stagniert der Fortschritt in der Programmiermethodik von Höchstleistungsrechnern seit Jahrzehnten. Grund dafür ist das engmaschige Zusammenspiel zwischen Hard- und Software. So muss der Entwickler eines parallelen Simulations-Codes in der Regel beides sein: Ein Experte in seiner Fachdisziplin, der die besten Lösungsansätze für das jeweilige wissenschaftliche Problem findet, als auch ein Computerspezialist, der das System, für welches der Code entworfen wird, genau versteht und dessen Stärken optimal einsetzt. Und das ist gar nicht so einfach, da der Zugriff auf die Ressourcen eines hochparallelen Rechners mit Hilfe zum Teil wenig intuitiver und umständlich zu erlernender Programmierschnittstellen erfolgt, deren Leistungsverhalten häufig Überraschungen bereithält und

bei deren Verwendung sich gerne Fehler einschleichen. Insbesondere auf sehr großen Systemen mit zehntausenden von Prozessoren ist die Erstellung korrekter und effizienter Programme extrem schwierig und zeitraubend. Auf Grund der technologischen Randbedingungen und zur Stillung des stetig wachsenden Bedarfs nach noch mehr Rechenleistung zur Durchführung noch feinerer und längerer Simulationen, wachsen die Prozessoranzahlen dennoch in rasantem Tempo weiter. Die Multicore-Revolution, wodurch mehr statt noch schnellere Prozessoren zum Einsatz kommen, um insbesondere den Energieverbrauch nicht noch weiter zu steigern, wirkt hierbei als Katalysator. Das Problem trägt den Namen Skalierbarkeit, womit die Fähigkeit eines Programms gemeint ist, auf einer großen Menge von Prozessoren effizient arbeiten zu können. Skalierbarkeit wird allerdings nicht nur von den Simulations-Codes selbst, sondern auch von den Softwarewerkzeugen erwartet, die Wissenschaftler einsetzen, um ihre Programme zu analysieren und zu verbessern. Oftmals sind die Werkzeuge aber nicht in der Lage, die dabei anfallenden enormen Datenmengen zu verarbeiten. Mal sind die Verarbeitungszeiten zu lang, so dass beispielsweise interaktives Arbeiten unmöglich wird, die Größe der Anzeigen reicht nicht aus, um dem Programmierer sinnvolle Auskunft über das Programmverhalten zu geben, oder unzureichender Speicherplatz verhindert die Verarbeitung völlig.

Dieser Problematik widmet sich seit etwa einem halben Jahr eine neue Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich, der Technischen Universität Dresden, der University of Tennessee in Knoxville und der RWTH Aachen: Das Virtuelle Institut High-Productivity Supercomputing, kurz VI-HPS. Es wurde vom Forschungszentrum Jülich initiiert und erhält Fördermittel aus dem „Impuls und Vernetzungsfonds“ der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren. VI-HPS hat

sich zum Ziel gesetzt, die Qualität von komplexen Simulations-Codes aus Wissenschaft und Technik zu verbessern und ihren Entwicklungsprozess zu beschleunigen. Die vier Institutionen entwickeln modernste integrierte Programmierwerkzeuge für Höchstleistungsrechner, die die Programmierer dabei unterstützen sollen, Programmfehler zu identifizieren und das Leistungsverhalten zu optimieren. Den Schwerpunkt bilden dabei Skalierbarkeit und einfache Handhabung der Werkzeuge auf extrem großen Rechnersystemen.

Dabei setzten die Partner auf Technologien, die sie selbst im Rahmen langjähriger Projekte entwickelt haben. Im Vordergrund steht die Analyse von Kommunikationsmustern anhand von Ereignisspuren, die die Programmausführung in kleinsten Schritten protokollieren und die Aufdeckung von ineffizientem Verhalten erlauben. Ebenso sollen Central Processing Unit-interne Leistungsindikatoren, so genannte Hardware-Zähler, bei der Diagnose von Leistungsengpässen behilflich sein. Die Fehlererkennung zielt vorwiegend auf die inkorrekte Benutzung von Kommunikationsmechanismen. Insgesamt erhoffen sich die Partner, durch eine beschleunigte und qualitativ verbesserte Programmoptimierung und Fehlerbehebung sowohl den Entwicklungsprozess zu verkürzen als auch die später benötigte Rechenzeit zu minimieren. Das spart Kosten und steigert gleichzeitig das Potenzial der Simulations-Programme, die durch verbesserte Performanz und Skalierbarkeit auch anspruchsvollere Ergebnisse hervorbringen können. Um diese Vision möglichst effektiv umzusetzen, sollen die im Rahmen des virtuellen Instituts entwickelten Werkzeuge den Endbenutzern durch geeignete Trainings- und Unterstützungsangebote näher gebracht werden.

Virtuelle Institute sind ein bewährtes Förderinstrument der Helmholtz-Gemeinschaft. Helmholtz-Zentren und Universitäten nutzen dieses Instrument zur Bündelung von Forschungskompetenzen, um da-

durch Kooperationen von internationaler Bedeutung in den zentralen Forschungsbereichen zu fördern. Insgesamt fügt sich das VI-HPS nahtlos ein in die langfristige Kooperation und die gemeinsamen Initiativen zwischen der RWTH Aachen und dem Forschungszentrum Jülich im Bereich Simulation Science und Supercomputing. Die Helmholtz-Nachwuchsgruppe in Jülich ist gleichzeitig Mitglied der Graduiertenschule Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science, kurz AICES, die der RWTH Aachen im Rahmen der deutschen Exzellenzinitiative bewilligt wurde, um qualifizierten Studierenden im Bereich Computational Engineering Science die Promotion zu ermöglichen. Die von der

RWTH Aachen und dem Forschungszentrum Jülich gemeinsam geplante German Research School for Simulation Sciences, kurz GRS, wird begabten Studierenden durch das Graduiertenprogramm Computational Science and Engineering und durch den Bezug zum Hochleistungsrechnen spannende Ausbildungsmöglichkeiten bieten. Schließlich wird die bisher schon intensive Zusammenarbeit zwischen beiden Organisationen durch die Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA, weiter vertieft und strategisch ausgerichtet.

Am Virtuellen Institut High-Productivity Supercomputing, VI-HPS, sind beteiligt:

- Forschungszentrum Jülich gemeinsam mit der RWTH Aachen: Helmholtz-Nachwuchsgruppe Leistungsanalyse paralleler Programme
www.fz-juelich.de/zam/helmholtz-group/
- RWTH Aachen: Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) und das Rechen- und Kommunikationszentrum
www.sc.rwth-aachen.de
- Technische Universität Dresden: Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH)
www.tu-dresden.de/zih
- University of Tennessee, Knoxville, USA: Innovative Computing Laboratory (ICL)
www.icl.cs.utk.edu

Autoren:
Univ.-Prof. Christian Bischof, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls Informatik 12 (Hochleistungsrechnen), Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums und Stellvertretender Sprecher des Virtuellen Instituts High-Productivity Supercomputing.
Prof. Dr.rer.nat. Felix Wolf ist Juniorprofessor für Leistungsanalyse paralleler Programme, Nachwuchsgruppenleiter am Forschungszentrum Jülich und Sprecher des Virtuellen Instituts High-Productivity Supercomputing.

www.vi-hps.org

Anzeige

Ihr Weiterbildungspartner (auch nach dem Erststudium) ZwW e.V. (FH Köln) mit aktuellen Weiterbildungsangeboten, z.B.:

Berufsbegleitendes Weiterbildungsstudium: **Fachplaner/in und Bauleiter/in Brandschutz; Brandschutzkoordinator/in**
Ein berufsbegleitendes zweisemestriges Weiterbildungsstudium für die Bereiche Architektur, Ingenieurwissenschaften, Handwerk und Bauhandwerk. Ort: Fachhochschule Köln

Kursbeginn: März 2008 Kurskosten: Eur 2600,-

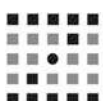
„Toleranzexperte/-in im Fahrzeug und Maschinenbau“

Angesprochen sind Ingenieur/innen und Techniker/innen, die Toleranzen festlegen, beurteilen und fertigungs- oder messtechnisch umsetzen oder überwachen müssen. Die Kurse sind auch einzeln buchbar.

Kurstermine:	14. + 15.2.08	Grundlagen der Toleranzfestlegung
	10. + 11.3.08	Berechnungsmethoden zur Abstimmung von Toleranzketten
	10. + 11.4.08	Systematische Toleranzfestlegung
		Ort: Fachhochschule Köln

Bitte informieren Sie sich unter www.bildungsscheck.nrw.de über die Möglichkeit einer Teilkostenerstattung der Kursgebühren (50% der Kosten/maximal 500 Euro)

Informationen und Beratung: ZwW der Fachhochschule Köln e. V.
Annette Grundmann · Tel.: 0221/82 75-31 45
weiterbildung@fh-koeln.de · www.fh-koeln.de (Weiterbildung)



Zentrum für wissenschaftliche Weiterbildung der Fachhochschule Köln (ZwW) e.V.

Anzeige




Eurogress Aachen
Begegnung ohne Grenzen

Top-Technik, variables Raumangebot, Spitzengastronomie, Kongress-Service etc. sind hier selbstverständlich!

Der Veranstaltungsort der Region.

Ob Kongress, Tagung, Konzert, Ballettaufführung, Ball oder Ausstellung: hier finden Sie stets den richtigen Rahmen.

Das gewisse "Mehr" bei uns: Individueller Service.

Wir informieren Sie!

Eurogress Aachen
Monheimsallee 48
52062 Aachen
Telefon 0241/9131-230
Telefax 0241/9131-200
info@Eurogress-Aachen.de