

TaLPas: Task-basierte Lastverteilung und Auto-Tuning in der Partikelsimulation

Aufgaben der Projektpartner in der Umsetzungskette:

Technische Universität München, Lehrstuhl für wissenschaftliches Rechnen:

- Koordination und Projektmanagement
- Selbstadaptierende Partikelsimulationen, Performanzevaluierung

Universität Hamburg, Wissenschaftliches Rechnen:

- Koordination
- Selbstadaptierende Partikelsimulationen

Universität Stuttgart, Institut für Höchstleistungsrechnen:

- Wissenschaftspartner
- Softwareentwicklung zur Aufteilung von Simulationsabläufen, Performanzevaluierung auf HPC-Systemen

Universität Stuttgart, Institut für Visualisierung und interaktive Systeme:

- Wissenschaftspartner
- Resilienz, Visualisierung der Simulationsergebnisse zur Aus- und Bewertung des Simulationsablaufs

Technische Universität Darmstadt, Lehrstuhl für parallele Programmierung:

- Wissenschaftspartner
- Laufzeitvorhersage von Simulationsabläufen

Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik:

- Wissenschaftspartner
- Molekulare Simulationsverfahren, Samplingverfahren

Universität Paderborn, Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik:

- Wissenschaftspartner
- Molekulare Partikelinteraktionen, Samplingverfahren

Vorhabenziele:

Durch das wachsende Energiebewusstsein und die zugleich steigende Notwendigkeit größerer und schnellerer Höchstleistungsrechner zur Simulation komplexer Probleme in Forschung und Industrie kommt deren optimaler Auslastung eine große Bedeutung zu. Je effizienter Rechenressourcen von Simulationssoftware genutzt werden können, umso besser werden die benötigte Energie und somit die Investition in den Rechenbetrieb eingesetzt. Hierzu muss zum einen die Rechenleistung jedes einzelnen Prozessors (basierend auf seinen eigenen Charakteristika) optimal genutzt werden. Zum anderen muss das zu lösende Problem so effizient wie möglich auf dem Höchstleistungsrechner verteilt werden, so dass all seine vorhandenen, heterogenen Ressourcen (CPUs, Akzelerator-Hardware, etc.) optimal eingesetzt werden. Für künftige Höchstleistungsrechner-Architekturen mit zunehmender Rechenkernanzahl stellt in diesem Zusammenhang auch die effiziente Handhabung einzelner ausfallender Prozessoren eine große Herausforderung dar. Eine Simulationssoftware auf aktuellen und künftigen Höchstleistungsrechnern muss folglich schnell und effizient auf entsprechende Fehler reagieren und eine optimale Neuverteilung der Rechenlast bei möglichst vernachlässigbarem Informationsverlust in die Wege leiten können.

Im Projekt TaLPas wird Software für Simulationsverfahren und -abläufe entwickelt, die sich an jeden einzelnen Prozessor automatisch anpasst und somit dessen Rechenleistung bestmöglich ausschöpft. Zudem wird untersucht, inwiefern komplexe Simulationsabläufe und ihre internen Abhängigkeiten effizient auf vorgegebene Rechenressourcen übertragen werden können. Hierzu soll der Gesamtablauf so in Teilaufgaben unterteilt werden, dass diese die vorhandenen Ressourcen optimal über den Gesamtverlauf der Simulation nutzen können. Um auf Hardwarefehler wie bspw. ausfallende Prozessoren reagieren zu können, sollen die entstandenen selbstadaptierenden Verfahren um effiziente Fehlertoleranzansätze ergänzt werden. Eine Evaluierung der hier entwickelten Ansätze wird auf verschiedenen Höchstleistungsrechnern erfolgen, insbesondere auf SuperMUC (Leibniz-Rechenzentrum, Garching b. München) und Hazel Hen (Hochleistungsrechenzentrum Stuttgart). Zudem wird eine Analyse der Simulationsabläufe durch unterstützende Visualisierungsmethoden ermöglicht.

Beispielhaft werden in TaLPas partikelbasierte Simulationen betrachtet. Diese kommen in einer Vielzahl von Problemstellungen zur Anwendung, u.a. in der Molekulardynamik, in der Chemie, in der Strömungssimulation, oder in der Astrophysik. Die selbstadaptierenden Partikelverfahren als auch das zu entwickelnde Software-Werkzeug zur Auf- und Verteilung von Teilaufgaben von Simulationsabläufen sollen nach Projektende anderen Nutzern und Entwicklern zur Verfügung gestellt werden. Die erzielten Ergebnisse zu Selbstadaption und aufgabenbasierter Aufteilung von Abläufen sind zudem auf andere Arten der Simulation übertragbar.

Das vom BMBF für drei Jahre geförderte Verbundprojekt wird von der Technischen Universität München und der Universität Hamburg koordiniert und bringt Wissenschaftler aus den Bereichen Höchstleistungsrechnen, Data Science und Thermodynamik zusammen.

Kontakt: Dr. Philipp Neumann

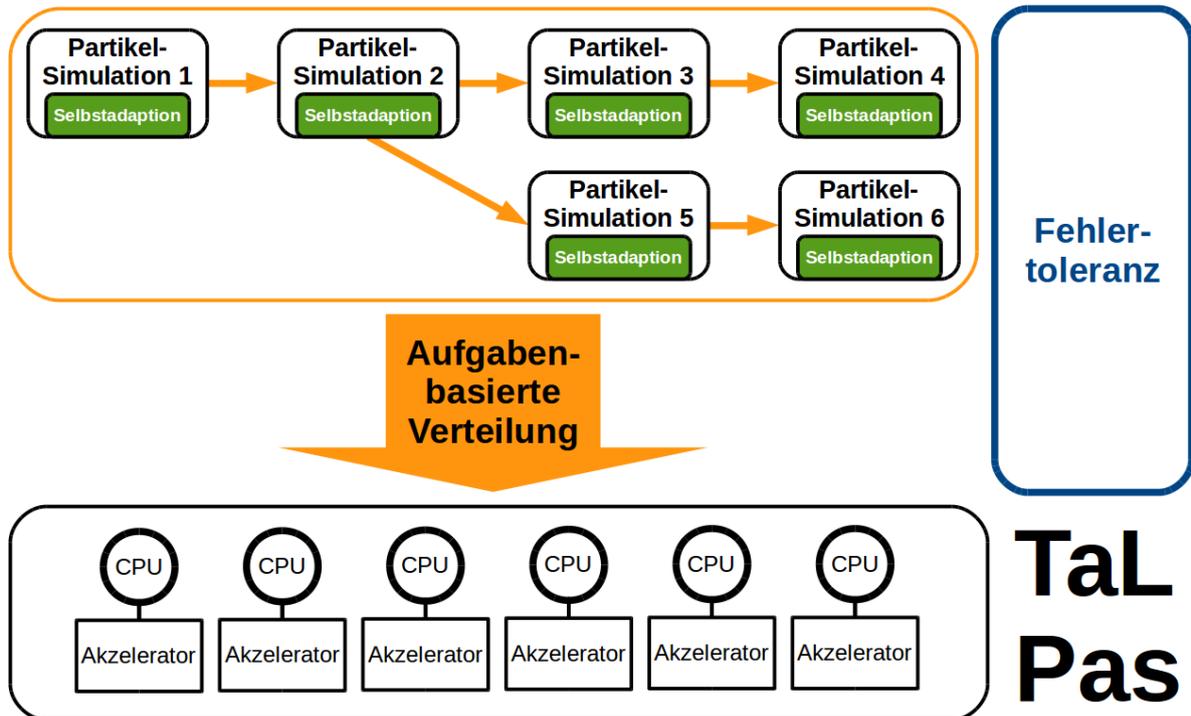


Abbildung 1: Bausteine von TaLPas. Mehrere selbstadaptierende Partikel-Simulationen sind im Rahmen eines gesamten Simulationsablaufs in verschiedenen Abhängigkeiten zusammengeschaltet (Oben). Über aufgabenbasierte Verteilung von Teilstücken des Simulationsablaufs (Mitte) und integrierte Fehlertoleranz (Rechts) soll eine effiziente Nutzung von heterogenen Höchstleistungsrechnern (Unten) erreicht werden.