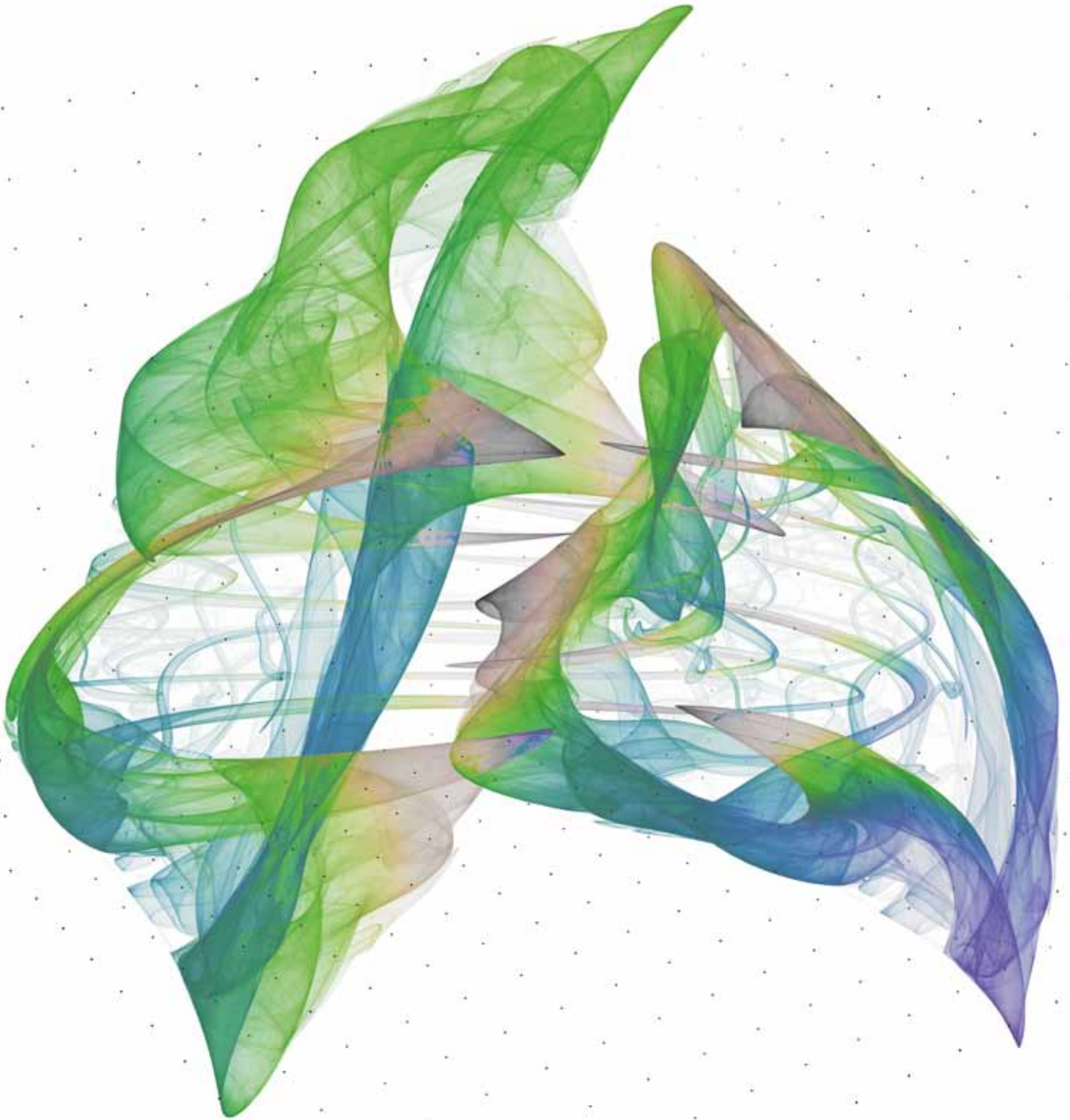


Link

www.mac.tum.de



Die Rechenbeschleuniger

Der Weg zur wissenschaftlichen Erkenntnis führt heute häufig über den Computer. Simulationsrechnungen eröffnen neben Theorie und Experiment einen dritten Lösungsweg. Am Munich Centre of Advanced Computing entwickeln Wissenschaftler fachübergreifend Methoden, um komplexe Fragestellungen effizient am Computer zu lösen

Mitte 2012 wird am Leibniz-Rechenzentrum in Garching ein Kraftprotz einziehen: SuperMUC, einer der leistungsfähigsten Computer der Welt. Informatiker rattern seine Kennzahlen herunter wie Motorsportfans die PS von Rennautos: Weit über 100.000 Prozessorkerne werden bis zu drei Milliarden elementare Rechenoperationen in der Sekunde bewältigen. Simulationsrechnungen auf schnellen Computern ergänzen oder ersetzen immer öfter den Laborversuch. Das kann ein virtueller Windkanal sein, an dem Autobauer den c_w -Wert der Karosserien optimieren, ein Materialmodell, an dem Ideen für neue Werkstoffe durchgespielt werden, oder ein Klimamodell, das Prognosen für die Erderwärmung liefert. Doch die Nutzung von Supercomputern ist nicht einfach: Viele wissenschaftliche Programme wurden für einige wenige leistungsstarke Prozessoren geschrieben.

Nun müssen sich die Rechenaufgaben auf Hunderte oder Tausende gleichzeitig arbeitende Rechenkerne aufteilen. „Es ist, als hätte man bisher einen Handwerksbetrieb mit wenigen Mitarbeitern geführt und müsste nun einen Konzern steuern“, erklärt Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz. Er leitet am Institut für Informatik der Technischen Universität München den Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen. Die relativ junge Disziplin entwickelt Methoden, um wissenschaftliche Probleme effizient am Computer zu lösen. Ihre Anfänge liegen in den 90er-Jahren, als die Rechenleistung endlich ausreichte, um komplexe Systeme mit mehreren physikalischen Effekten zu modellieren. Beispielsweise, um in der Atmosphäre neben den Luftströmungen auch chemische Reaktionen mit zu berechnen. Es entstand Software mit damals Hunderttausenden Anweisungen oder Codezeilen, an denen über die Jahre zehn oder ▶



mehr Autoren beteiligt waren. Bungartz nennt sie die Diamanten der Forschungsinstitute. Nun sollen sie fit werden für moderne Technologien. Aber Wissenschaftler müssen neue Erkenntnisse in ihrer Disziplin produzieren und können nicht jahrelang und immer wieder ein Computerprogramm aktualisieren. Auch die klassische Forschungsförderung ist nicht auf die Finanzierung solcher Aufgaben ausgerichtet. Viele sprechen deshalb von einer Softwarekrise: Man habe Geld für Superrechner, aber keine Ressourcen, um passende Programme zu entwickeln.

Schnelle Software für schnelle Rechner

Hier setzt das Munich Centre of Advanced Computing (MAC) an. Seit 2008 vereint das Zentrum Forscher der TUM, der Münchner Ludwig-Maximilians-Universität und mehrerer Max-Planck-Institute. Eng verzahnt ist das MAC mit dem Leibniz-Rechenzentrum, das von einem Professor der TUM, dem Informatiker Arndt Bode, geleitet wird. Die arabische King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) ist ebenfalls beteiligt. Advanced Computing steht für Metho-

den, um komplexe Aufgaben effizient am Computer zu lösen. Hardware, wie schnelle oder viele Prozessoren und Leitungen für den schnellen Datenverkehr, reiche dafür nicht, sagt Bungartz: „Optimierte Algorithmen, die weniger Rechenschritte brauchen, machen Programme ebenfalls deutlich schneller.“ Ein weiterer Punkt sind Analysetechniken, denn viele Programme liefern derart komplexe und riesige Datenmengen, dass man die gesuchte Information nur schwer findet. An den zehn Forschungsprojekten am MAC beteiligen sich Informatiker, Mathematiker, Physiker, Ingenieure und Chemiker. Dieser Austausch ist wichtig, denn viele Fragestellungen sind ähnlich. Strömungsmodelle zum Beispiel benutzen Bauingenieure ebenso wie Geophysiker. Die breite Ausrichtung und das Ausbildungsangebot – es gibt eigene Studiengänge und ein Promotionsprogramm – machen das MAC zu einem in Europa einzigartigen Zentrum für Advanced Computing.

Das virtuelle Chemielabor

Die theoretischen Chemiker Prof. Dr. Notker Rösch und Dr. Sven Krüger modernisieren am MAC ihr Programm



Foto: Wenzel Schürmann, TUM

Höchstleistungsrechner: Noch verrichtet am Leibniz-Rechenzentrum der SGI Altix 4700 seine Dienste für die Forschung. Mitte 2012 wird mit SuperMUC ein Kraftprotz einziehen, der völlig neue Perspektiven für das Supercomputing eröffnet

ParaGauss. Die Software simuliert die quantenmechanischen Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Atomkernen und kann so Moleküle und die Reaktionen zwischen ihnen berechnen. Rösch ist Experte für Katalysatoren, das sind Substanzen, typischerweise feinverteilte Metall-Nanoteilchen, die chemische Reaktionen beschleunigen. Unter anderem sucht er nach besseren Katalysatoren zu Optimierung von Diesel, zur Gewinnung von Kraftstoffen aus Biomasse und für die Herstellung von Kunststoffen aus Kohlendioxid. Simulationsrechnungen sollen ein genaues Verständnis des Ablaufs der Reaktionen liefern und so helfen, Katalysatoren für möglichst effiziente Reaktionen zu finden. Rösch entwickelt ParaGauss seit 1994. Er arbeitet bereits mit parallelen Rechenkernen und soll nun noch schneller werden: „Damals waren zehn Prozessoren schon viel. Heute rechnet das Programm mit viel mehr Prozessoren effizient, kann aber die Aufgaben noch nicht optimal auf wirklich große Prozessorzahlen verteilen.“ Außerdem steigt der Rechenaufwand enorm mit der Zahl der betrachteten Atome – im Schnitt verachtfacht sich die Rechenzeit, wenn man die Zahl der Atome verdoppelt.

Rechenarbeit auf viele Prozessoren verteilen

Das Programm ist eine Herausforderung für die Informatiker am MAC: Während zum Beispiel Windkanalmodelle immer die gleichen Strömungsgleichungen lösen, verwendet ParaGauss je nach Fragestellung und Rechenvariante bis zu einem Dutzend verschiedene Algorithmen, die sehr oft wiederholt durchlaufen werden. Dazu kommen spezielle Effekte für schwere Atome und Umgebungseffekte, wenn die Moleküle in Flüssigkeiten gelöst oder in Kontakt mit Oberflächen sind. Derzeit durchleuchten MAC-Informatiker die etwa 500.000 Codezeilen von ParaGauss mit ausgefeilten Analysewerkzeugen. Sie fahnden nach Leerläufen, denn das Programm wickelt so viele verschiedene Aufgaben ab, dass manchmal ein Rechenschritt auf ein Zwischenergebnis warten muss. Nun sollen die Algorithmen so verbessert oder neu geschrieben werden, dass sich die Arbeit effizient auf möglichst viele Prozessoren verteilt. Manche Programmvarianten laufen mittlerweile schon auf doppelt oder viermal so vielen Kernen. Außerdem soll der Rechenaufwand bei mehr Atomen in Zukunft weniger stark ansteigen. ▶



Bild: TUM

Anhand der **Terraindaten**, die von einem Satelliten gemessen wurden, haben die Wissenschaftler die Infrastrukturdaten (wie zum Beispiel Straßen und Flüsse) extrahiert und über das Satellitenbild gelegt

Noch schneller wird ParaGauss, wenn nicht nur einzelne Rechnungen, sondern ganze Pakete parallel laufen. Das können zum Beispiel Serien von Simulationen mit verschiedenen Reaktionsparametern sein. Verteilen sich solche Aufgaben auf 500 oder 1000 Prozessoren, schrumpft die Rechenzeit auf etwa ein Zehntel, schätzt Krüger. Dazu muss das Programm die Rechenpakete eigenständig effizient auf die Prozessoren verteilen. In einigen Fällen gelingt das bereits. Rösch ist gespannt: „Der Ansatz ist völlig neu. Das MAC gibt uns die Gelegenheit, ihn umzusetzen. Auf lange Sicht wären 1000 effizient genutzte Prozessoren eine tolle Sache. Das wird uns auf jeden Fall helfen, Antworten auf bisher sehr schwierige Fragen zu finden.“

Schneller und besser analysieren

Das schnellste Programm hilft nichts, wenn sich vor der Erkenntnis riesige Datenmengen auftürmen. Die Informatikerin Prof. Dr. Gudrun Klinker will die oft mühsame Analyse vereinfachen. Sie entwickelt Techniken, mit denen Anwender ähnlich wie in einem Computerspiel schnell die wichtigen Aspekte ihrer Daten erfassen

und verschiedene Lösungsansätze durchspielen können. Klinker ist am MAC-Projekt Virtual Arabia beteiligt, an dem sie gemeinsam mit Kollegen von KAUST arbeitet. Ziel ist ein dreidimensionales ComputermodeLL von Saudi-Arabien – eine Art interaktives Google Earth für Oberfläche, Himmel und Untergrund. Am fertigen Modell will man zum Beispiel den Verlauf des Sonnenstands an geplanten Gebäuden simulieren, um sie möglichst energieeffizient zu bauen, oder vor einem Bauvorhaben die Auswirkungen eines Erdölfördergebiets auf die Stabilität des Untergrunds studieren.

Ein zweites KAUST-Projekt simuliert die Einlagerung von Kohlendioxid in Erdölquellen. Dort ist das Gas klimafreundlich weggesperrt und gleichzeitig drückt es das restliche Öl aus der Quelle. Mit dem Modell wollen die Wissenschaftler diese Verbindung aus Klimaschutz und Ölförderung optimieren.

Genaueres Bild vom Inneren der Ölquelle

Um zu berechnen, wie sich das Gas in der Quelle ausbreitet, müssen sie die Gesteinsstruktur mit tausendstel Millimeter kleinen Poren für ein kilometerweit ausge-



Mit Datenhandschuhen durch die virtuelle Welt: die wissenschaftliche Mitarbeiterin Amal Benzina bewegt sich durch das dreidimensionale Computermodell von Saudi-Arabien, das Wissenschaftler am Munich Center of Advanced Computing entwickelt haben

dehntes Ölfeld abbilden. „Selbst Supercomputer können nicht das ganze Gebiet in so hoher Auflösung bearbeiten“, sagt Dr. Tobias Weinzierl, der wissenschaftliche Leiter der beiden KAUST-Projekte. Stattdessen rechnet man einzelne Stellen genau und überträgt die Ergebnisse auf das ganze Modell. Integriert in Virtual Arabia, veranschaulichen diese Simulationsdaten die Vorgänge in der Ölquelle direkt in der realen Umgebung und die Forscher erkennen zum Beispiel sofort, ob eine berechnete Stelle für die Einleitung des Gases wirklich zugänglich ist.

Solche Betrachtungen kann man sehr gut in einer CAVE (Computer Aided Virtual Environment) anstellen. Das ist ein kleiner Raum, der an Wänden, Boden und Decke die dreidimensionalen Daten eines Computermodells zeigt. Mit 3-D-Brillen ausgerüstet, können mehrere Personen sich zum Beispiel virtuell in eine Erdölquelle stellen und ausprobieren, unter welchen Bedingungen sich Kohlendioxid am besten verteilt. Die Nutzer bedienen die CAVE mit Gesten. Dazu tragen sie spezielle Handschuhe oder halten Werkzeuge, deren Bewegungen von Sensoren erfasst werden. CAVEs brauchen extrem leistungsfähige

Programme und Computer, die die Daten fast in Echtzeit neu rechnen und darstellen, damit das Modell mit dem Nutzer unmittelbar interagieren kann. Klinker testet in einer CAVE unterschiedliche Darstellungs- und Bedientechniken und beobachtet, wie schnell die Nutzer jeweils zu Ergebnissen kommen: „Je intuitiver das System reagiert und beispielsweise eine intensiv betrachtete Stelle automatisch vergrößert, desto schneller werden Computer und Mensch zusammen das Problem lösen können“. Das Modell soll auch mögliche Ansätze, beispielsweise ungewöhnliche Daten, aufzeigen, denn oft ist der Datenwust so groß oder sind die Einflussparameter so vielfältig, dass der Nutzer kaum sieht, an welcher Schraube er zuerst drehen soll. Bungartz erwartet ohnehin, dass Simulationsrechnungen den Wissenschaftlern eher die passenden Fragen statt fertiger Antworten geben: „Wenn Modelle immer komplexere Systeme beschreiben, sind die Ergebnisse oft so unerwartet, dass sie die eigentlich richtigen Fragen erst aufwerfen, indem sie uns falsche Annahmen aufzeigen.“

Christine Rüth