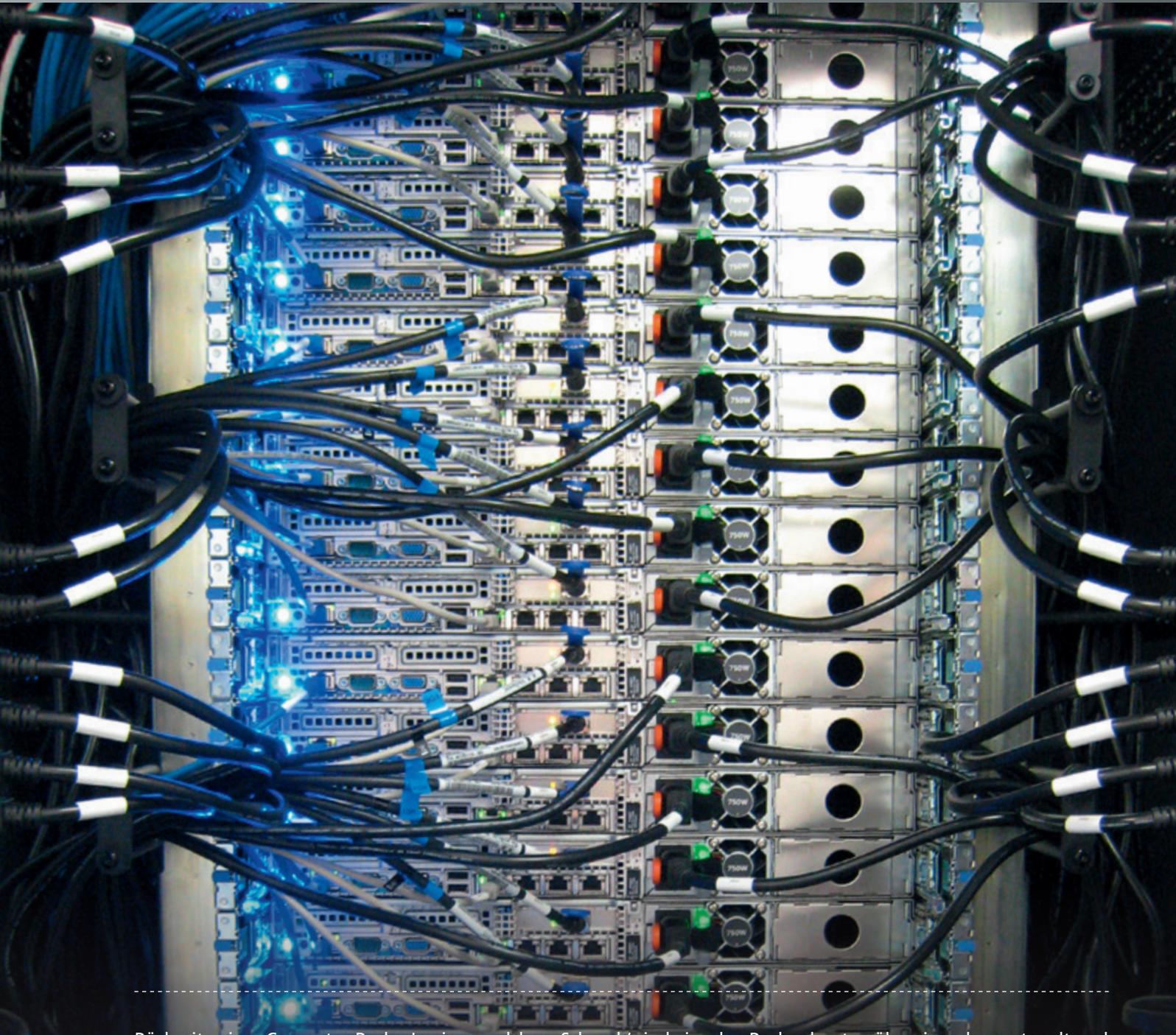




COMPETENCE CENTER HIGH PERFORMANCE COMPUTING



Rückseite eines Computer-Racks: In einem solchen ‚Schrank‘ sind einzelne Rechenknoten übereinander gestapelt und durch schnelle Netzwerke wie z.B. Infiniband miteinander verbunden. Durch die enge Packung sowie die Verbindung mehrerer solcher Racks zu einem Großrechner, können Rechenzentren heute die Rechenleistung zur Verfügung stellen, die für zukunftsweisende HPC Anwendungen wie Deep Learning oder jegliche Art von Simulation erforderlich sind.



Hoch- und Höchstleistungsrechnen – High Performance Computing (HPC) – ist für die Wettbewerbsfähigkeit von Wissenschaft und Wirtschaft unerlässlich. Ohne detaillierte Simulationen sind moderne Grundlagenforschung in der Energieforschung, den Material- und Lebenswissenschaften oder auch der Klimaforschung undenkbar. Das gilt auch für Schlüsselbereiche der deutschen Wirtschaft. Deep Learning und Methoden des maschinellen Lernens werden unsere Gesellschaft deutlich verändern.

Die Europäische Union hat HPC zu einem für Europa strategisch wichtigen Thema erklärt und erhebliche Investitionen in Gang gesetzt. Dabei ist die Konvergenz von HPC und Big Data ein wesentliches Element. Die Abteilung konnte sich in diesem Umfeld durch Beteiligung an zentralen EU-Projekten einbringen und das Programmiermodell GPI wurde für den EU Innovation Radar Prize nominiert. Das Ecosystem um die myPowergrid-Technologie zum Management verteilter Energiespeichersysteme konnte 2016 deutlich ausgeweitet werden und der Schwerpunkt Deep Learning konnte sich international mit algorithmischen Ideen und tiefgehender Analyse etablieren.

SCHWERPUNKTE

- HPC-Systemsoftware und -Anwendungen
- Deep Learning und Big Data
- IKT und Erneuerbare Energien
- Parallele Dateisysteme – BeeGFS und BeeOND
- Simulation und Datenanalyse in der Seismik

Kontakt

franz-josef.pfreundt@itwm.fraunhofer.de
www.itwm.fraunhofer.de/hpc





1

© www.spaceandmatter.nl



2

GREENPOWERGRID UND GRID-FRIENDS

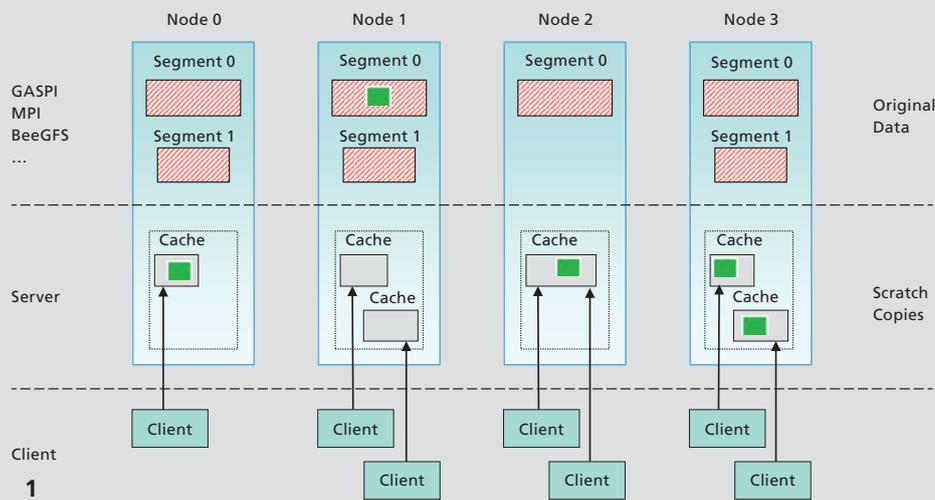
1 *Schoonschip Community in Amsterdam Noord*

2 *Realisierter »Peak-Shaver« zur Lastreduktion von Industrieverbrauchern mit registrierender Lastgangmessung; der Speicher hat eine Leistung von 60 kW und eine Kapazität von 60 kWh.*

Die Gruppe »Green by IT« widmet sich mit der Entwicklung intelligenter IT-Systeme und innovativer Algorithmen dem Übergang von schwankender Produktion aus EE-Anlagen in eine verlässliche, kostengünstige und zukunftsgerichtete Energieversorgung. 2016 fiel der Startschuss für zwei neue Forschungsprojekte: GreenPowerGrid und Grid-Friends, mit einer Laufzeit von jeweils drei Jahren. GreenPowerGrid, gefördert durch das Land Rheinland-Pfalz und den Europäischen Fonds für regionale Entwicklung EFRE, verfolgt in Kooperation mit den Stadtwerken Speyer das Ziel einer regionalen Grünstromversorgung. Die myPowerGrid-Technologie wird hier als Grundlage für die Entwicklung eines dezentralen PV-Speicher-Kraftwerks verwendet. Ziel ist es, mehr als 100 PV-Speichersysteme im Stadtgebiet von Speyer zu realisieren und damit die Stromkunden direkt vor Ort mit verlässlicher regenerativer Energie zu beliefern. Im Projekt konnten bereits ein Messkonzept und ein neuartiges Abrechnungs-/Bilanzierungssystem entwickelt werden. Eine in sekundlicher Auflösung gerechnete Simulation der Energieversorgung von 250 Haushalten über ein ganzes Jahr führte zu einer positiven lokalen Eigenversorgungsquote durch das PV-Speicherkraftwerk und nach einer ersten Betrachtung auch zu einem positiven neuen Geschäftsmodell für die Stadtwerke.

Im vom ERA-Net Smart Grids Plus und dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie geförderten Projekt Grid-Friends entwickelt und bewertet ein Konsortium aus deutsch-niederländischen Partnern Koordinierungsmechanismen zwischen einzelnen Energieverbrauchern und -erzeugern. Das ITWM entwickelt in Grid-Friends eine ganzheitliche Energiemanagementplattform für Microgrids und Energiecommunitys. Neben der Steuerung der Stromspeicher implementiert es hier auch eine Sektorenkopplung, d. h. auch Wärmespeicher in Kombination mit Wärmepumpen und Ladestationen für Elektrofahrzeuge werden flexibel entsprechend der Verfügbarkeit erneuerbarer Energien gesteuert werden können. Die entwickelte Energiemanagementplattform wird in einem Demonstrator mit 35 auf einem Kanal in Amsterdam schwimmenden Wohngebäuden sowie in einem Wohnquartier in Köln-Widdersdorf zum Einsatz kommen. Die beiden Demonstratoren verfolgen unterschiedliche Zielsetzungen: maximale Autarkie in Amsterdam bzw. maximale Kosteneffizienz in Köln-Widdersdorf.

Neben den beiden Forschungsprojekten konnte ein namhafter Netzbetreiber für ein Beratungs- und Demonstrationsprojekt gewonnen werden: Das ITWM realisierte die Projektierung, Installation und die anschließende Betriebsführung von zwei leistungsstarken Batteriespeichersystemen zur Lastreduktion in Industriebetrieben mit registrierender Leistungsmessung. Die optimierte Steuerung der Speicher basiert auf dem lokalen Energiemanagementsystem der myPowerGrid-Technologie.



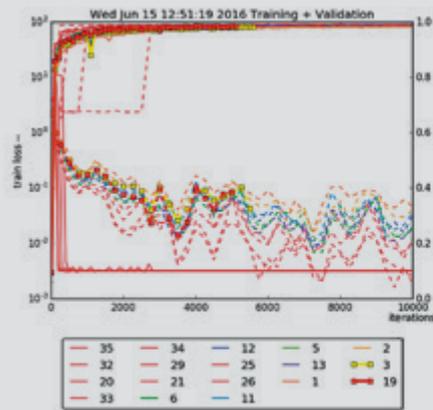
HIGH PERFORMANCE COMPUTING FÜR EUROPA

Das CC HPC engagiert sich seit einigen Jahren in Projekten innerhalb der europäischen Förderprogramme. Zurzeit sind wir an Projekten in den Bereichen HPC und Transport beteiligt; zwei davon werden im Folgenden vorgestellt.

Das am Fraunhofer ITWM entwickelte Kommunikationsmodell GPI (Global Address Space Programming Interface), eine Schlüsseltechnologie in der HPC, ist Teil des EU-Projekts INTERWinE, welches sich mit der Kompatibilität von auf dem HPC-Markt verfügbaren Kommunikationsmodellen beschäftigt. Mithilfe von Kommunikationsmodellen werden Daten zwischen Rechenknoten und Rechenkernen kommuniziert. Dies ist wichtig für parallele Programme, die die Rechenleistung großer Computercluster effizient nutzen. GPI erlaubt eine asynchrone, multi-threaded Kommunikation unter Vermeidung von Zwischenkopien der Daten. Dadurch kann die Rechenzeit optimal überlappt werden mit der Zeit, die für die Kommunikation der benötigten Daten notwendig ist. Interoperabilität zwischen GPI und anderen Kommunikationsmodellen erlaubt Anwendern, bereits entwickelten Code mit GPI-basiertem Code zu mischen und die Vorteile von GPI zu nutzen. Das Fraunhofer ITWM entwickelt ein Werkzeug, mit dem man Anwendungen, die task-basierende Programmiermodelle benutzen – welche oftmals nur auf einem Knoten laufen – nun auf vielen Knoten skalieren kann.

Die verteilte Laufzeitumgebung GPI-Space bildet die Basis der IT-Infrastruktur im EU-Projekt SafeClouds. Ziel von SafeClouds ist die deutliche Verbesserung des Luftverkehrsmanagements. In den kommenden Jahren wird der Luftverkehr weiter wachsen; um die Sicherheitsstandards kostenneutral zu verbessern, müssen Daten ausgetauscht und intelligente Algorithmen angewendet werden. Nur so können zeitnah Risikofaktoren aus den massiven Datenmengen identifiziert und Maßnahmen eingeleitet werden. Die am Fraunhofer ITWM entwickelte Langzeitumgebung GPI-Space bildet die Grundlage für den Datenaustausch. Die Komponenten von GPI-Space ermöglichen eine Aufteilung zwischen der algorithmischen Expertise und der Parallelisierung der Programme für einen effizienten Ablauf auf Computerclustern. Die GPI-Space-Laufzeitumgebung ist dafür verantwortlich, das Programm über die zur Verfügung stehenden Ressourcen (auch über geographisch verteilte Systeme) zu verteilen und auszuführen. Der Arbeitsfluss wird mithilfe der Laufzeitumgebung definiert und dynamisch und nebenläufig mithilfe von GPI ausgeführt. Für das CC HPC ist das SafeClouds-Projekt spannend, da die Software GPI-Space in einem völlig neuen Anwendungsgebiet eingesetzt werden kann als dem traditionellen Anwendungsfall, der Seismik.

1 Directory Cache Client-Server-Architektur



Experiment base lr	momentum	History ...
35	0.009	1.0
32	0.006	1.0
20	0.003	0.9
33	0.007	1.0
34	0.008	1.0
29	0.003	1.0
21	0.004	0.9
6	0.007	0.7
12	0.004	0.8
25	0.008	0.9
26	0.009	0.9
11	0.003	0.8
5	0.006	0.7
13	0.005	0.8
1	0.002	0.7
7	0.003	0.7
3	0.004	0.7

Job started: 596 seconds ago (2016-06-15 12:41:24)
 Job status: running
 Progress: 16 of 36 packages done (44.44%)
 Number of workers: 2
 Average time per package: 66411 msec
 Estimated finish (average): In 664 seconds (2016-06-15 13:02:25)
 Maximum time per package: 96453 msec

1

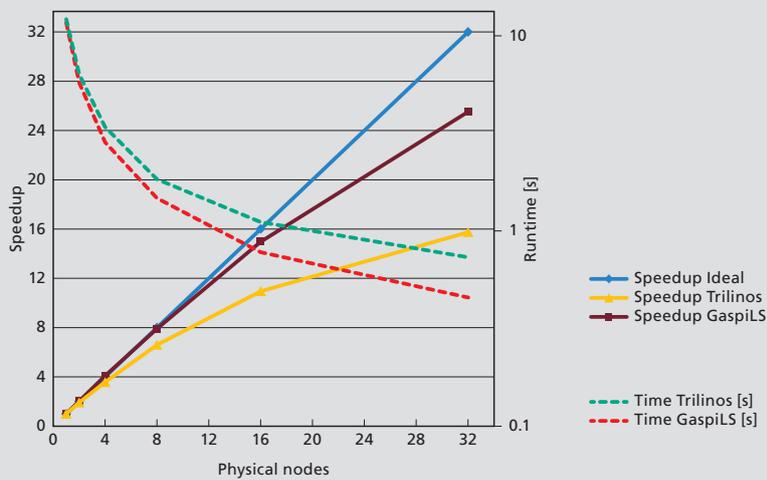
SKALIERBARES DEEP LEARNING AUF BASIS VON HPC-TECHNOLOGIE

1 DLPS-System zur automatischen Meta-Parameter-Optimierung von tiefen neuronalen Netzen in der Cloud

Im Bereich des Maschinellen Lernens wurden in den letzten Jahren auf vielen Anwendungsgebieten große Fortschritte gemacht. Von der Spracherkennung über die automatische Bildanalyse bis hin zum autonom fahrenden Autos oder Go-spielenden Rechnern auf Weltmeisterniveau: fast immer stehen hinter den Erfolgsmeldungen sogenannte Deep-Learning-Algorithmen. Diese Familie von Lernverfahren verwendet teils sehr große und komplexe künstliche neuronale Netze zur Modellierung der Lernprobleme. Das Training solcher Netze bedarf nicht nur sehr großer Datenmengen, sondern auch enormer Rechenleistungen. Mathematisch betrachtet entspricht der Trainingsvorgang einem nicht konvexen und nicht-linearen Optimierungsproblem im hoch-dimensionalen Raum. Diese schwierige Problemstellung führt dazu, dass die Berechnung praxisrelevanter Modelle mit den gängigen Optimierungsmethoden Tage bis Wochen an Rechenzeit in Anspruch nehmen kann.

Die bisher in der Literatur erreichten Beschleunigungen des Trainingsvorgangs durch Parallelisierung sind aufgrund der sequenziellen Natur der etablierten Optimierungsverfahren eher bescheiden. Das CC HPC konnte durch die vorhandenen Erfahrungen im High Performance Computing und durch Verwendung eigener HPC-Tools wie GPI, GPI-Space und BeeGFS die Entwicklung neuer Algorithmen auf diesem Gebiet vorantreiben und so erste skalierbare Lösungen vorstellen: CaffeGPI wurde auf Basis der weitverbreiteten Open Source Software Caffe entwickelt und erlaubt ein über mehrere Rechenknoten verteiltes Training von Deep Learning-Modellen auf HPC-Clustern. CaffeGPI erreicht mit einem neuen Optimierungsalgorithmus und durch die Verwendung unserer GPI-Bibliothek eine deutlich bessere Skalierbarkeit als andere verteilte Ansätze.

Das auf GPI-Space basierende »Deep Learning in the Cloud-System (DLPS)« erlaubt eine automatische und redundante Optimierung der Meta-Parameter eines Deep-Learning-Modells. Die Anpassung dieser Parameter an eine konkrete Problemstellung ist in der Regel ein zeitraubender und rechenintensiver Prozess. Mit DLPS kann dieser automatisiert und kostengünstig in die Cloud ausgelagert werden.



1

GaspILS – SKALIERBARE LINEARE LÖSER

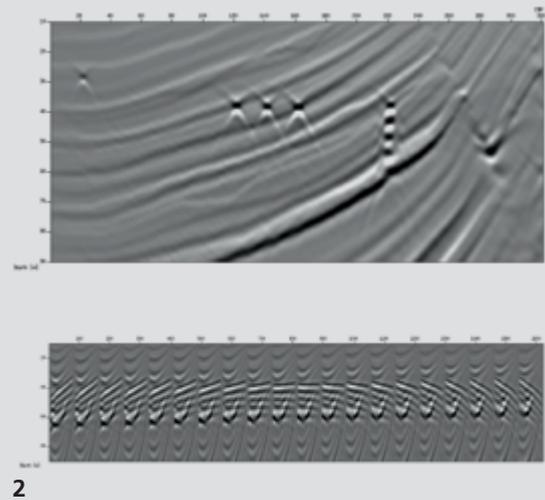
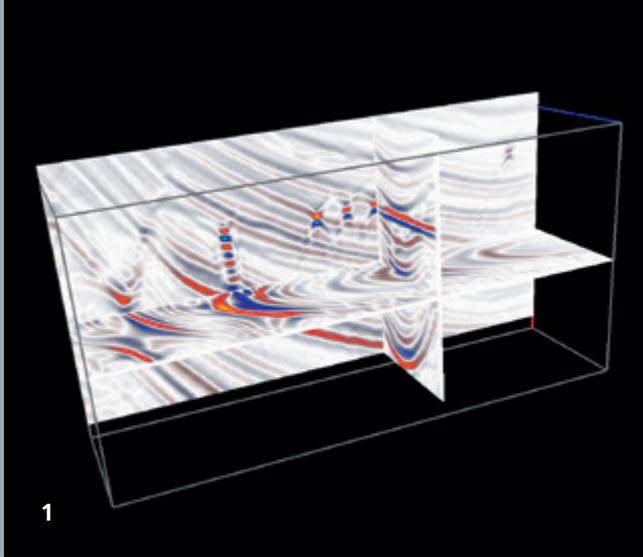
Simulationen sind neben Theorie und Experiment die dritte Säule des Erkenntnisgewinns innerhalb vieler Forschungszweige. Computermodelle schaffen ein virtuelles Abbild der Natur. Meistens basieren die Simulationen hierbei auf der Diskretisierung von Differentialgleichungen. Letztendlich entsteht ein großes Gleichungssystem, das gelöst werden muss; dafür benutzt man iterative Löser. Die Lösung dieser Gleichungssysteme ist extrem rechenintensiv und der Aufwand wird mit steigendem Detaillierungsgrad immer größer; damit auch der Hunger nach immer mehr Rechenleistung.

Hardwareseitig wird die Steigerung der Rechenleistung nicht mehr durch eine Erhöhung der Taktfrequenz erreicht, sondern durch die Erhöhung der Parallelität auf den Recheneinheiten. Dies geschieht zum einen durch eine Erhöhung der Anzahl der Fließkommazahlen, die gleichzeitig in einer Rechenoperation abgearbeitet werden, und zum anderen durch die Erhöhung der Anzahl der Rechenkerne. Darüber hinaus werden noch mehrere Rechner mit einem Netzwerk zu einer großen Einheit verbunden. Auf modernen Systemen haben wir bis zu 20 Kerne pro Recheneinheit. Das heißt, dass die im HPC-Umfeld üblicherweise verbauten Systeme mit zwei Sockeln schon bis zu 40 Kerne pro Rechenknoten zur Verfügung stellen. Noch extremer wird es bei den sogenannten Beschleuniger-Architekturen, die auf einer einzelnen Karte schon bis zu 72 Kerne beherbergen.

Will man nun die erhöhte Parallelität auf modernen Rechnern für die Simulationen ausnutzen, bedarf es Software mit guten Skalierungseigenschaften. Skalierbarkeit ist ein Maß für den zusätzlichen Nutzen, der durch den Einsatz zusätzlicher Ressourcen generiert wird. Gut skalierbare Software nutzt die zur Verfügung gestellten Ressourcen also zu 100 Prozent aus. Dies muss das Ziel für eine effiziente Nutzung sein.

GaspILS ist eine numerische Löserbibliothek für iterative Verfahren, die von vornherein auf gute Skalierbarkeit getrimmt wurde. Sie basiert auf dem Programmiermodell GPI-2 und implementiert ein asynchrones, von den Abhängigkeiten zwischen den Daten getriebenes Ausführungsmodell mit optimalem Overlap von Kommunikation und Berechnung und vermeidet globale Synchronisierungspunkte so gut wie möglich. Dies sind die Grundprinzipien für eine gute Skalierbarkeit. Das objektorientierte Design von GaspILS definiert abstrakte Interfaces für Matrizen, Vektoren, iterative Löser und Vorkonditionierer und erlaubt damit eine einfache Erweiterbarkeit. Von Haus aus stellt GaspILS verschiedene Löser wie (P)CG, BiPCGStab und GMRES zur Verfügung. Als Vorkonditionierer sind Jacobi, ILU(0) und ILUM(0) implementiert. GaspILS wird unter der Open-Source-Lizenz GPLv3 vertrieben werden. Zurzeit ist es Basis zweier Industrieprojekte.

1 *Vergleich der Skalierbarkeit und Laufzeit von Trilinos und GaspILS, gemessen anhand der Lösung eines Gleichungssystems zur Reservoir Simulation mittels des CG Verfahrens. (Intel Haswell, 256 GB RAM, zwei Sockel pro Knoten, sechs Threads pro Sockel)*



STÖRKÖRPERDETEKTION AUS SEISMISCHEN DATEN

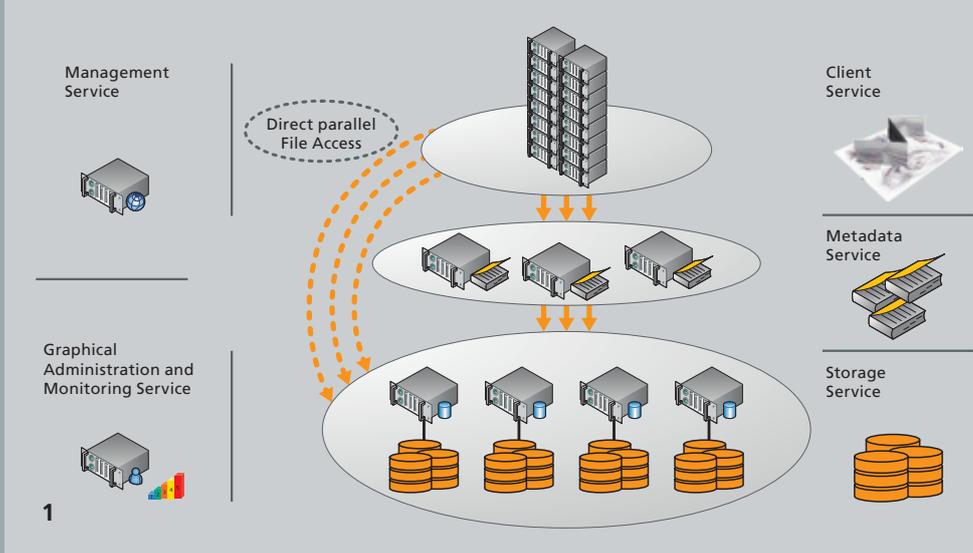
1 Positionen von Diffraktoren im Untergrund als Resultat der GRT-Migration; ausgeklappt dargestellt sind GRT-Zwischenergebnisse, in denen sich Diffraktionen von Reflektionen durch ihr linienhaftes Aussehen abheben.

2 Positionen von Diffraktoren im Untergrund als Resultat der GRT-Migration (oben); in den GRT-Zwischenergebnissen heben sich Diffraktionen von Reflektionen durch ihr linienhaftes Aussehen ab (unten).

Reflektionsseismische Exploration skaliert über einen großen Bereich abgestrahlter akustischer Wellenlängen und erlaubt nicht nur im für die Öl- und Gasexploration relevanten Frequenzbereich um 50 Hz und für Tiefenlagen der Reservoirs von einigen Tausend Metern Aussagen über Struktur, Stratigraphie und Gesteinsparameter, sondern auch das detaillierte, hochauflösende Erkunden des flacheren Untergrundes.

In einem vom BMWi geförderten Projekt bringt das CC HPC seine langjährige Kompetenz in der Entwicklung von Verfahren zur Analyse seismischer Daten ein und erarbeitet zusammen mit dem Fraunhofer IWES eine Verfahrenskette zum Auffinden von Gesteinskörpern der Größenordnung ab einem Meter Durchmesser im Untergrund bis maximal 100 m Tiefe. Energieunternehmen haben ein großes Interesse daran, in der Planungsphase von Offshore-Windparks derartige Störkörper zu erkennen und die exakte Positionierung der Windmasten gegebenenfalls anzupassen. Flachgründig in den Meeresgrund eingebettete Gesteinskörper können durch bathymetrische Untersuchungen und sehr hochauflösende Sonarsysteme leicht erkannt werden. Für die Untersuchung im Tiefenbereich 10–80 m unterhalb des Meeresgrundes müssen tiefer eindringende seismische Verfahren verwendet werden. Die Idee dabei ist, auf die bei Planungen von Offshore-Windparks in Hinblick auf Fragestellungen zur Standsicherheit ohnehin erhobenen seismischen Akquisitionsmessungen zurückzugreifen. Bei Frequenzen von ca. 300 Hz und daraus resultierenden Wellenlängen von 5 m müssen Gesteinskörper oben genannter Dimension anhand ihrer Diffraktionsantwort im seismischen Datensatz erkannt werden.

Zur Separation der Diffraktionen von den im Vergleich dazu sehr viel Amplituden-stärkeren Reflektionen entwickelt das CC HPC einen aus Multi-Fokussing-Techniken und unserer GRT-Prestack-Tiefenmigration bestehenden Zwei-Schritt-Prozess. In beiden Schritten werden die Reflektionen zugunsten der Diffraktionen abgeschwächt, sodass sich ein auf die diffraktierenden Objekte beschränktes Untergrundabbild ergibt, das zum Erkennen der räumlichen Zusammenhänge verstärkt in das konventionelle strukturelle Migrationsergebnis eingefügt wird. Die Interpretation der Ergebnisse erlaubt Aussagen zur Vorkommenshäufigkeit der Gesteinsbrocken sowie auch zur Lage einzelner Objekte.



BeeGFS – HOCHVERFÜGBARES PARALLELES DATEI-SYSTEM MIT MAXIMALER PERFORMANCE

Mit der stetig zunehmenden Leistungsfähigkeit moderner Prozessoren und Netzwerktechnologien ergeben sich neue Möglichkeiten, um immer größere Problemstellungen zu bearbeiten und zunehmend realistischere und detailliertere Simulationsergebnisse zu erhalten. Dies erfordert allerdings auch die Arbeit mit sehr großen Datensätzen, oftmals bereits im Terabyte-Bereich. Um diese riesigen Datenmengen zu bewältigen und optimale Performance bei der Berechnung zu gewährleisten, arbeitet das CC HPC seit einigen Jahren am parallelen Dateisystem BeeGFS. Hierbei werden die einzelnen Dateien scheibchenweise, in sogenannten Chunks, auf mehrere Server verteilt und können dadurch parallel eingelesen bzw. geschrieben werden. Dieses Verfahren ermöglicht es, Datensätze mit einem Vielfachen der herkömmlichen Geschwindigkeit zu verarbeiten. Von Anfang an waren Skalierbarkeit, maximale Performance, Flexibilität sowie einfache Bedienbarkeit die Eckpfeiler bei der Entwicklung und sind heute die Eigenschaften, die es für eine immer breiter und globaler werdende Nutzerbasis so attraktiv machen.

Im vergangenen Jahr wurde BeeGFS noch um Hochverfügbarkeitsmechanismen erweitert. Kunden haben nun die Möglichkeit, mit der Software ein ausfallsicheres globales Dateisystem zu erstellen. Dazu ist weder weitere Software von Drittherstellern noch spezielle, auf Hochverfügbarkeit ausgelegte Hardware nötig. Weiterhin bietet BeeGFS mit dem Tool BeeOND die Möglichkeit, ein paralleles Dateisystem auf einem definierten Satz Hardware mit einem Knopfdruck zu erstellen. Somit kann BeeOND im Bedarfsfall auch als dynamisches paralleles Dateisystem direkt auf den Rechenknoten eingesetzt werden. Temporäre Berechnungsdaten können somit direkt verarbeitet werden, ohne das globale Speichersystem über ein Netzwerk kontaktieren zu müssen.

BeeGFS kann kostenlos von www.beegfs.com bezogen werden. Da die Software mittlerweile unter einer Open-Source-Lizenz vertrieben wird, können von der Webseite auch die Quelldateien bezogen werden. Ein Spin-Off des Fraunhofer ITWM, ThinkparQ, bietet seit 2014 weltweit kommerziellen Support für BeeGFS an, während das CC HPC sich auf die Weiterentwicklung der Software fokussiert. Das Entwicklerteam bringt sein umfangreiches Wissen auch erfolgreich in mehreren von der EU geförderten Projekte ein, an denen das CC HPC beteiligt ist. In Kooperation mit den Projektpartnern werden neue Verfahren und Computerarchitekturen entwickelt, mit speziellem Augenmerk auf Exascale Computing. Bei einer so hohen Leistungsfähigkeit der Recheneinheiten muss weiterhin sichergestellt sein, dass zu verarbeitende Daten schnell genug bereitgestellt werden können. Dieser Umstand macht BeeGFS zu einem wichtigen Bestandteil dieser Projekte.

1 *Übersicht über die Architektur von BeeGFS: Getrennte Dienste für Metadaten und Nutzdaten erlauben eine getrennte Skalierbarkeit beider Funktionen.*

