

Climate modelers meet HPC experts

Op 18 september jl. kwamen experts op het gebied van klimaatmodellering en op het gebied van HPC bij elkaar in Amsterdam tijdens het door NCF, IMAU (UU), SARA en IBM georganiseerde symposium: "Climate modelers meet HPC experts". Er waren ongeveer 40 mensen met een goede balans tussen de HPC experts van onder meer SARA en IBM en klimaatwetenschappers van verschillende universiteiten (in Nederland en België) en het KNMI. De dag werd voorgezeten door Axel Berg (ochtend) en Henk Dijkstra (middag). Na een overzicht van Henk Dijkstra (IMAU, UU) over de urgente problemen binnen het klimaatonderzoek, de ontwikkeling van het gebruik van supercomputers binnen dit onderzoek en de 'challenges' in de nabije toekomst werd door de volgende sprekers elk een specifiek onderwerp belicht. David Blaskovich (IBM Research Deep Computing) schetste de historie van supercomputers in connectie met de ontwikkeling van klimaatmodellen en de belangrijke rol van IBM in dit geheel. Daarop volgend vertelde Harm Jonker (TUD) over zijn ervaringen met het gebruik van diverse supercomputers binnen het DEISA - DECI project PINNACLE. In dit project wordt de structuur van de atmosferische turbulente grenslaag met een Directe Numerieke Simulatie techniek onderzocht. Zijn verhaal illustreerde prachtig dat alleen bij gebruik van een zeer hoge spatiale resoluties de resultaten van laboratorium experimenten en veld observaties goed kunnen worden geïnterpreteerd en dat deze berekeningen alleen gedaan kunnen worden op supercomputers van Europees formaat. Na de lunch presenteerde John Donners (SARA) zijn ervaringen met de implementatie en schaling van een oceaanmodel (NEMO) op diverse supercomputers. Hugues Goosse (LIN, Louvain-la-Neuve) hamerde op het belang van ensemble simulaties (simulaties met iets verschillende begincondities) binnen het klimaatonderzoek en hij gaf een aantal voorbeelden van simulaties met het door hem gebruikte klimaatmodel. Met ensemble simulaties kunnen de veranderingen in de statistiek van extreme weersituaties worden bekeken en bovendien kan de natuurlijke variabiliteit in het klimaatsysteem worden 'gefilterd'. Dit laatste is nuttig om bijvoorbeeld de specifieke klimaatveranderingen ten gevolge van de toename van broeikasgassen te bepalen. Voor de theepauze gaf Anna von der Heydt (IMAU) een overzicht van de simulaties die op dit moment worden gedaan om het effect van een andere ligging van continenten op het klimaat in het verleden (bijv. in het Krijt, zo'n 100 miljoen jaar geleden) te onderzoeken. Ze liet zien dat het in dit soort situaties computationeel erg duur is om een klimaatmodel naar een statistisch evenwicht te integreren. Axel Berg (SARA) gaf een overzicht van de huidige nationale rekenfaciliteiten, de ondersteuning vanuit SARA bij het gebruik ervan en van de activiteiten binnen het PRACE project. Als laatste gaf Luigi

Brochard (IBM) zijn visie op de toekomstige ontwikkelingen in hardware (met name bij IBM) en benadrukte het belang van 'load-balancing' en 'multi-threading' bij het gebruik van de nieuwe type Petaflop systemen.

De dag werd afgesloten met een discussie over hoe codes van klimaatmodellen kunnen worden geoptimaliseerd voor gebruik op toekomstige systemen en wat voor ondersteuning daar voor nodig is. Uit ervaringen met grote simulatieprojecten zoals die binnen Dutch Computing Challenge en DEISA-DECI werd het idee van een 'simulation lab' geopperd. Rond een specifiek project is binnen een dergelijk 'simulation lab' een team van experts (HPC, klimaatonderzoekers inclusief aio's en/of postdocs, en bijv. ondersteuning voor visualisatie) aan het werk. Zo'n structuur kan garanderen dat een efficiënte code wordt gebruikt en dat de data uit een grote simulatie ook werkelijk in detail worden geanalyseerd hetgeen resulteert in een grotere wetenschappelijke output. Hopelijk kunnen in de toekomst dit soort 'simulation labs' worden gerealiseerd en komt er een structuur van financiering die dit mogelijk maakt. Tijdens de borrel na het symposium werden de eerste ideeën voor projecten al gelanceerd.

Henk Dijkstra

Agenda

- 09-13 januari 2010, Bangalore, IN
16th International Symposium on High-Performance Computer Architecture (HPCA 2010)
<http://www.hpcacnf.org/hpca16>
- 23 January, 2010, Pisa, IT
4th HiPEAC Workshop on Reconfigurable Computing
http://ce.et.tudelft.nl/HiPEACRC_WS/HiPEACRC_WS_2010/
- 19-29 april, 2010, Atlanta, US
The 17th Reconfigurable Architectures Workshop (RAW 2010)
<http://www.ece.lsu.edu/vaidy/raw/>
- 17-19 mei, Bertinoro, IT
2010 ACM International Conference on Computing Frontiers
<http://www.computingfrontiers.org/2010>
- 31 mei-3 juni 2010, Hamburg, DE
The International Supercomputing Conference (ISC)
<http://www.isc10.org>
- 22-25 juni 2010, Berkeley, US
9th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2010)
<http://vecpar.fe.up.pt/2010>
- 30 juni-2 juli 2010, Basel, CH
6th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA'10)
<http://www.pmaa10.unibas.ch/>

De parallele wereld en het filosofisch brein

Onlangs bij een nieuwe TELEAC talkshow, De bovenkamer, gepresenteerd door Jan Jaap van der Wal, was als eerste te gast ons aller Bas Haring. Hoogleraar 'Publiek begrip van de Wetenschap' te Leiden. Het ging over het brein (Wat is denken? was de titel van de aflevering). Bas kan sneller filosoferen dan de meeste mensen tot zich kunnen laten doordringen, maar het waren dan ook maar betrekkelijk luchtige filosofietjes, bedoeld 'voor een miljoenenpubliek' (enthousiasme van Van der Wal). Als je iemand van zijn brein kunt ontdoen, maar alle bedradingen in tact kunt laten, zodat je brein tegenover je staat, denk je dan hé van wie is dat lichaam, of hé van wie is dat brein. Of denk je hé wat doe ik daar? En wie is "je" dan? Afijn, dat soort van dingen. Aardig gedaan.

Maar als je dan net terug bent uit Tsukuba, bij Tokyo, voor de derde International Exascale Software Project workshop (www.exascale.org), dan geeft die workshop je wel extra te denken. Binnenkort zullen computerchips met vele processoren op een chip een componentdichtheid hebben waarbij de afstand tussen de componenten zo'n honderd atoomafstanden bedraagt. Een klein stukje DNA is al vele malen langer. En dan rust je een exascale computer uit met een miljoen van dergelijke processoren. Ontwikkel dan nog een zelfadaptief netwerk dat al die componenten naar behoefte verbindt en vraag je dan af hoe groot het verschil met een brein eigenlijk nog is. Er is nog één belangrijk verschil, namelijk het energieverbruik. Maar dat is geen filosofisch probleem. We mogen beginnen ons af te vragen wat bewustzijn eigenlijk is. Die talkshow ging eigenlijk daarover, maar dat kwam iets minder uit de verf. Wanneer begint dat ding nou eindelijk eens zelf te denken? Want wat ooit science fiction was komt langzamerhand op het niveau van de science facts en dan kunnen we er beter op voorbereid zijn.

Het Blue Brain project (<http://bluebrain.epfl.ch/>) probeert alle connectieve structuren van de hersenen in beeld te brengen. Een gigantisch project, waaraan onze Nederlandse Computational Neurologists graag meedoen. Als die dan zo rond 2020 klaar zijn en we trekken in de tussentijd gelijk op, dan werkt IESP dus eigenlijk aan de software voor het eerste siliciumbrein. Maar gelukkig hebben anderen meer verstand van filosofie.

Ik houd me maar bij de gedachte dat zulke systemen nog beter kunnen helpen de grote mondiale problemen aan te pakken en ons te leren welke dingen we vandaag echt moeten doen om het morgen beter te hebben.

Patrick Aerts



Stichting Nationale
Computerfaciliteiten (NCF)

Anna van Saksenlaan 51
Postbus 93575
2509 AN Den Haag
T: +31(0)70 344 0700
F: +31(0)70 344 0946
e-cijfferinghe@nwo.nl
www.nwo.nl/ncf



PRACE project

Prototype systemen op weg naar Petascale performance

PRACE (PaRtnership for Advanced Computing in Europe) is enerzijds een samenwerkingsverband en anderzijds een project. PRACE is georganiseerd in acht verschillende werkpakketten. In dit artikel wordt het werkpakket WP6 nader belicht.

Het zesde werkpakket in PRACE is het grootste technische werkpakket binnen het PRACE project. Alle zestien partners zijn betrokken in WP6, met een totale menskracht besteding van 280 persoonmaanden. WP6 wordt geleid door EPCC (Edinburgh Parallel Computing Center), met serieuze ondersteuning van NCF en SARA. Doelstelling van WP6 is het identificeren van software bibliotheken, tools, benchmarks en vaardigheden die gebruikers nodig hebben om Petaflop/s systemen productief en efficiënt te kunnen gebruiken.

In de praktijk betekent dit dat WP6 zich voor een groot gedeelte bezig houdt met gebruikersapplicaties. Dus codes die echt gebruikt worden door wetenschappers op de diverse Europese systemen, waaronder de Huygens machine bij SARA. Voor het resterende gedeelte kijkt WP6 naar synthetic benchmarking, tools en alternatieve programmeermodellen, en raakt daarbij ook aan nieuwe programmeertalen voor bijvoorbeeld goed gebruik van accelerators en GPU processoren. Een van de eerste taken van WP6 is geweest het identificeren van de meest gebruikte wetenschappelijke applicaties op de huidige Europese systemen. Eerst gebaseerd op de applicaties die in DEISA gebruikt worden, later uitgebreid op basis van een onderzoek bij de rekencentra van de PRACE partners, heeft dat geleid tot een initiële set van applicaties (in totaal 20), variërend van theoretische chemie applicaties tot stromingsleer, astrofysica, engineering, theoretische natuurkunde, klimatologie en oceaanmodellering. Deze applicaties zijn in de technische taken van WP6 beschikbaar gemaakt op de verschillende PRACE prototype systemen (denk aan Huygens, aan BlueGene in Jülich, aan Cray XT5 in Helsinki, etc.). Vervolgens is er gekeken naar enerzijds single-CPU optimalisatie van deze applicaties, en anderzijds naar schaalbaarheid en de potentie daartoe: immers, we willen op Petaflop/s systemen draaien, en die bevatten duizenden tot tienduizenden cores.

Als resultaat van vooral de schalingsexperimenten is er binnen WP6 gekeken naar de geschiktheid van de initiële set applicaties met betrekking tot schaalbaarheid, en is de set aangepast in die richting. De definitieve set (benchmark set) bestaat nu uit 22 applicaties. Bij de aanschaf van nieuwe systemen in het kader van PRACE ligt het in de bedoeling dat een subset van deze benchmark set gebruikt gaat worden bij het technisch testen van de aan te schaffen systemen.

Afgezien van vooral deze applicatiegerichte activiteiten houdt WP6 zich ook bezig met zogenaamde synthetic benchmarks: kleine kernels en/of testprogramma's om typisch een onderdeel van de supercomputer te testen, en dus om de mogelijkheid te hebben om specificaties van de architectuur te testen. Een ander onderdeel is het testen van software tools: denk bijvoorbeeld aan het debuggen van applicaties, of aan het onderzoeken van de performance van een applicatie, op Petaflop/s systemen met duizenden tot tienduizenden cores: dat gaat niet zomaar eventjes.

NCF, SARA en CIT-RUG werken mee aan WP6. Aad van der Steen van NCF werkt aan de synthetic benchmarking en Peter Michielse van NCF aan de mede-coördinatie van het werkpakket en aan de samenstelling van de benchmark set. Walter Lioen van SARA is verantwoordelijk voor het testen van de tools op de prototype systemen, terwijl John Donners van SARA zich vooral bezig houdt met de schaalbaarheid van de klimaat- en oceaanmodelleringsapplicaties. Robert de Bruin van CIT-RUG werkt mee aan de chemische applicaties.

Vier van de zes PRACE prototype projecten op Huygens Op dit moment zijn er zes nieuwe projecten goedgekeurd om de PRACE (PaRtnership for Advanced Computing in Europe) prototype systemen te testen. Drie projecten uit Ierland, twee uit Frankrijk en een uit Spanje zijn toegekend met gezamenlijk 4.5 miljoen core-uren op de PRACE prototype systemen. De Nationale Supercomputer Huygens, geïnstalleerd bij SARA in Amsterdam en gefinancierd door NCF, is een van de PRACE prototype systemen.

Vier van deze nieuwe PRACE-projecten zullen gebruik maken van de Nationale supercomputer Huygens, onder leiding van Damien Thompson (Ierland), Edouard Audit (Frankrijk), Jim Greer (Ierland) en Gary McGuire (Ierland). Zie ook: www.prace-project.eu/news/six-projects-granted-access-to-the-prace-prototype-systems-4-5-million-core-hours en www.prace-project.eu/prototype-access

Computer voorspelt met 'chemische precisie' reacties tussen moleculen en oppervlakken

Science heeft op 6 november j.l. een artikel gepubliceerd van een international team onder leiding van de Leidse hoogleraar Geert-Jan Kroes, dat het resultaat was van een groot Dutch Computing Challenge Project, uitgevoerd op Huygens. Het artikel kondigt goed nieuws aan voor de heterogene katalyse: reacties van (waterstof)moleculen met oppervlakken kunnen nu met de modernste chemische modelleringstechnieken (Computational Chemistry) en de nieuwste generatie supercomputer in Nederland met "chemische precisie" worden voorspeld. Daarmee wordt dit soort berekeningen van direct toepasbaar nut voor de waterstofeconomie. De bijzonder complexe reacties van moleculen aan oppervlak-

ken waarvan de simulatie nu praktisch precieze resultaten oplevert vinden ondermeer plaats in de autokatalysator en andere heterogene katalyseprocessen. Die zijn weer van nut voor de productie van de meeste synthetische verbindingen. De bevindingen zijn ook van betekenis voor waterstofopslag en nog veel meer.

Over dit succesvolle resultaat, waarmee we het hele team feliciteren, zullen we later meer publiceren.

Chemically accurate simulation of a prototypical surface reaction: H₂ dissociation on Cu(111). C. Díaz, E. Pijper, R.A. Olsen, H.F. Busnengo, D.J. Auerbach, G.J. Kroes. *Science* 6 november 2009.

Rekenen helpt!

Als altijd is NCF bezig met het uitgeven van diverse boeken en boekjes over de wetenschappelijke kant van superrekenen. In de laatste NCF-publicatie, getiteld *Rekenen helpt!* wordt ook de maatschappelijke kant belicht. In het boekje worden enkele voorbeelden gegeven van concrete vragen – op het gebied van bijvoorbeeld weer en klimaat, watermanagement en gezondheidszorg – waarvoor we zonder supercomputers geen antwoorden zullen vinden. Met deze voorbeelden worden supercomputers en hun belang voor de Nederlandse maatschappij iets dichterbij gebracht.



Het boekje (bij NCF verkrijgbaar; de tekst is ook te vinden op www.nwo.nl/nwohome.nsf/pages/NWOA_7X7ER4) laat zien dat supercomputers onmisbare instrumenten zijn bij het oplossen van complexe wetenschappelijke, maatschappelijke en industriële uitdagingen en zijn daarmee van strategisch

belang. Onze maatschappij staat voor grote uitdagingen als het gaat om natuur en milieu, energievoorziening, infrastructuur, gezondheidszorg, veiligheid. En we verwachten dat de wetenschap in staat is hiervoor antwoorden en oplossingen aan te dragen, want de toekomst wacht niet. Simulaties maken voorspellingen en scenario's mogelijk die langs geen andere weg toegankelijk zijn.

Overview of recent supercomputers 2009

Dezer dagen is de gedrukte versie van "Overview of recent supercomputers 2009" uitgekomen. Het rapport beslaat zo'n 80 bladzijden en geeft een beschrijving van de HPC computers die op dit moment op de markt zijn. Ook worden nog verschillende aspecten van HPC systemen die ze "HPC" maken, zoals communicatienetwerken, processoren en computational accelerators besproken. Daarbij moet men denken aan o.a. GPUs en FPGAs. Er is geprobeerd om de eigenschappen van de machines en componenten zo compact mogelijk weer te geven, maar we zijn toch nog op 80+ pagina's uitgekomen vanwege de vele nieuwe ontwikkelingen die er gaande zijn. De gedrukte versie is bij NCF verkrijgbaar. Daarnaast kan de PDF of PostScript versie gedownload worden van www.euroben.nl vanuit de directory 'reports' of men kan de webversie raadplegen. De URL daarvoor is <http://www.euroben.nl/reports>.

