

# **SPPEXA – Software for Exascale-Computing**

**Ein neues DFG-Schwerpunktprogramm  
(SPP 1648)**

**Hans-Joachim Bungartz**  
TUM, Institut für Informatik

**Wolfgang E. Nagel**  
TU Dresden, ZIH

HPC Status-Konferenz der Gauß-Allianz  
Darmstadt, 6.12.2011

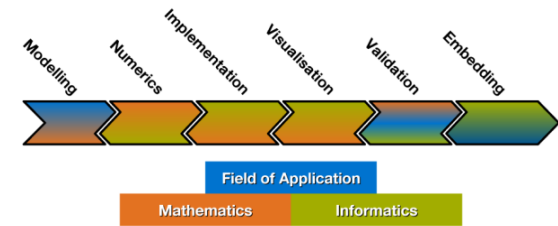
# *Ceterum Censeo*

# Computational Science & Engineering (CSE)

→ Key Technology for Science & Industry

# High-Performance Computing (HPC)

→ Core Enabler for CSE



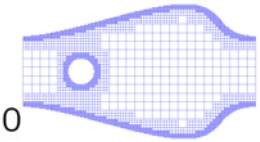
**Mathematical model**

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \nu \Delta \mathbf{u} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

**Discretization & solver**

$$A\mathbf{u}_h + D\mathbf{u}_h + C(\mathbf{u}_h)\mathbf{u}_h - M^T p_h / \rho = 0$$



$$M\mathbf{u}_h = 0$$

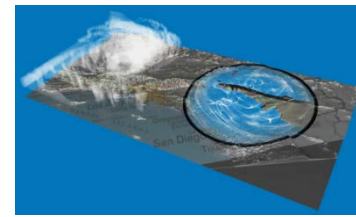
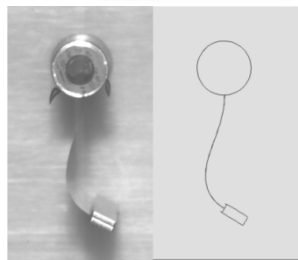
**Impact of each step on all other steps!**

*Hence #1: no pipeline any more, no cycle, but a complete graph*

*Hence #2: Co-design!*

**Parallel implementation, HPC**

**Validation**



**Software**

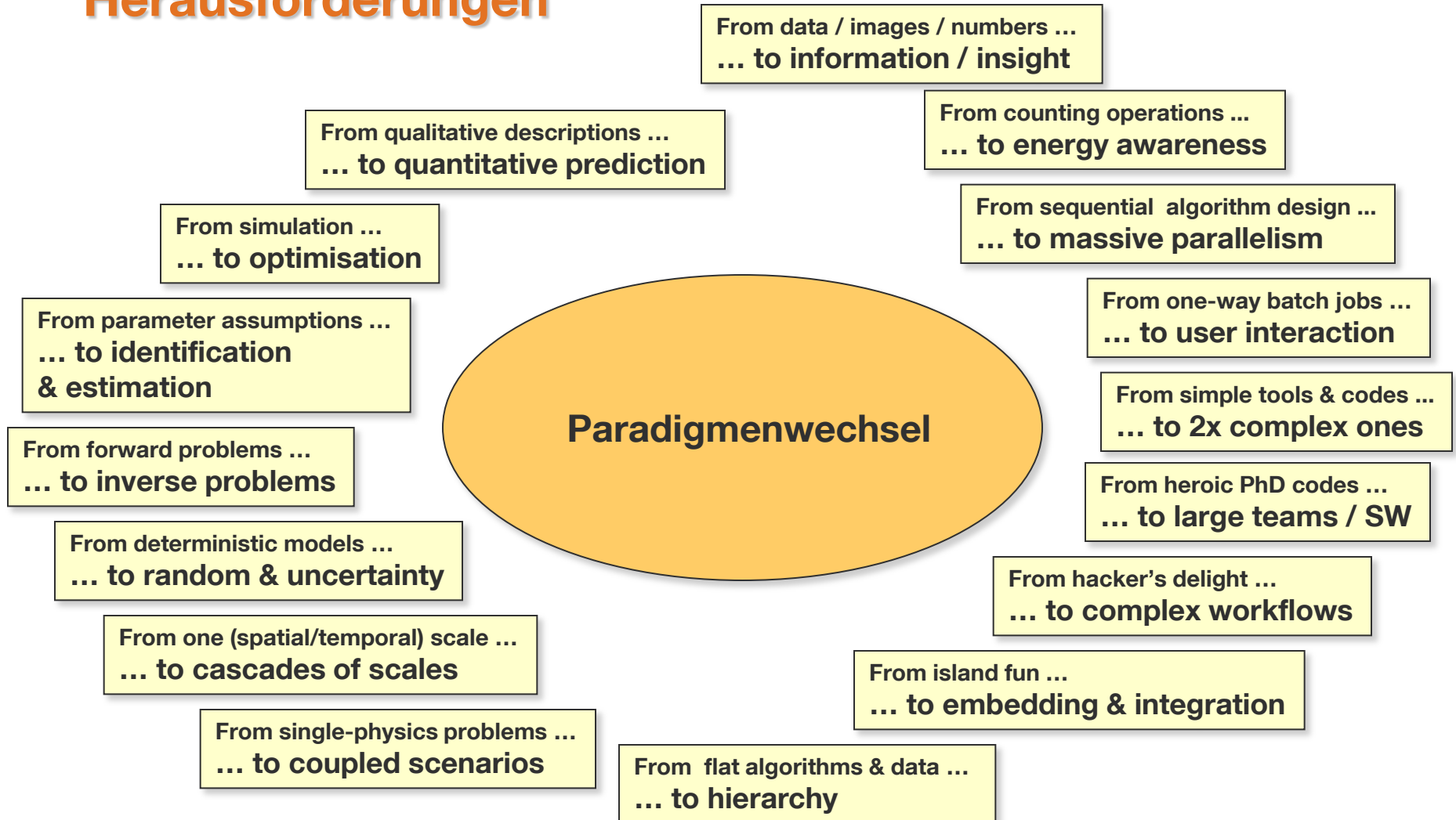


**Insight, Design**

**Exploration**

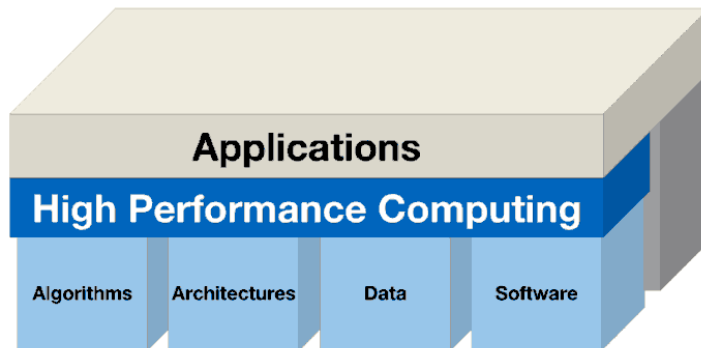


# Herausforderungen

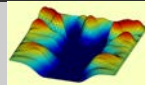




# Beyond Moore: Enablers of Computing



## Computational Algorithms



- Computational statistics
- Differential equations & multi-physics problems

## Parallel Architectures



- {Homo/hetero}geneous multicore architectures
- Parallelisation support & programming models

## Data Engineering / Exploration



- Database technology & data mining
- Visual analytics

## In general: increasing relevance of informatics

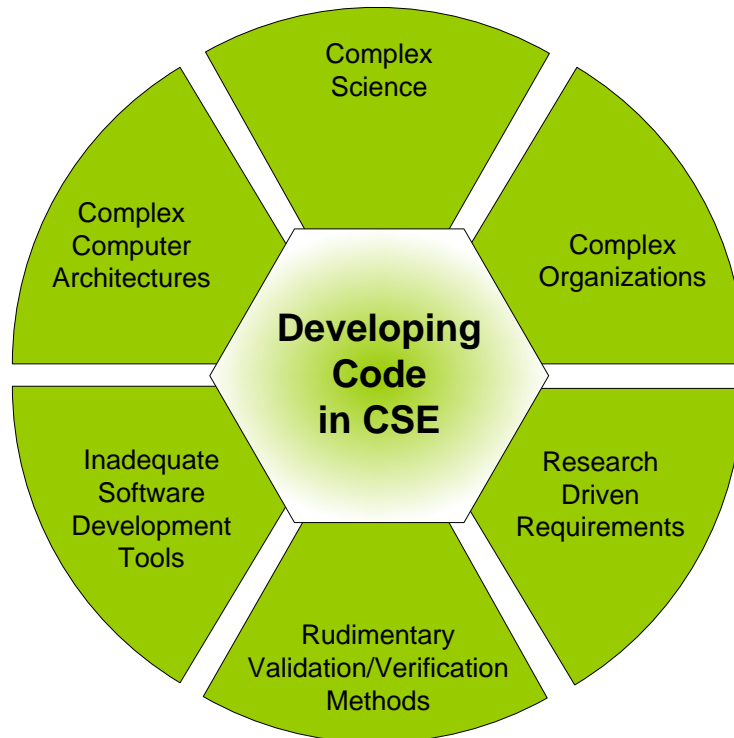
[ languages, compilers, tools, (par)prog paradigms, data exploration, visualization, algorithms and data structures (hierarchy & recursion), hardware-aware algorithmics, HW-SW-co-design, software engineering ... ]

## In particular: increasing relevance of software issues



- Classical **software engineering**
  - specification
  - modular design
  - configuration management
  - documentation and sustainability
  - ...
- Algorithmic **verification and validation**
- Adaptive software **lifecycle management**
- Handling PSE & simulation **workflows**
- Systematic **testing**
- **Languages, compilers, runtime systems**
- **User interfaces**
- **Tool development** & professional **tool support**
- **Performance tuning** (esp. parallel)

## Some Observations on SW Development in CSE

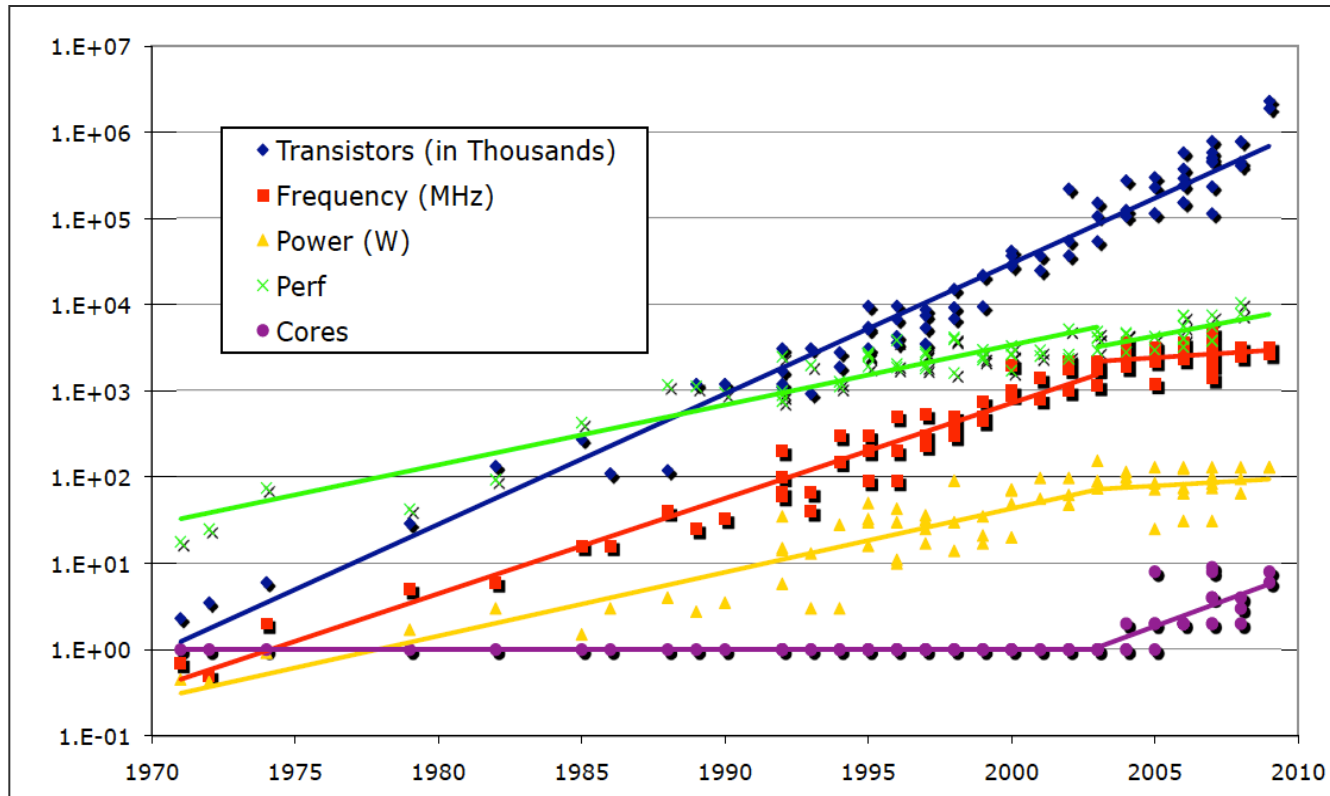


*“Software development is the principal bottleneck in CSE”* (R. Kendall)

### Roadblocks:

- Most developers are domain scientists and engineers, not computer scientists
- **Typical priority: science >> code performance >> software quality**
- **Intellectual level assigned: models >> algorithms >> programs**
- No “software engineering mainstreaming”: design, process models, workflow models, ...
- No “team understanding”: co-operative work, trans-disciplinary, project management, ...
- **Instead, still the lonely heroes with their heroic codes (and sometimes accumulated heroism)**
- **No systematic testing culture**
- **No formal support – verification**
- No best practices
- Many groups working on PSE – in general with limited success

# Wir werden nicht mehr schneller, sondern mehr!



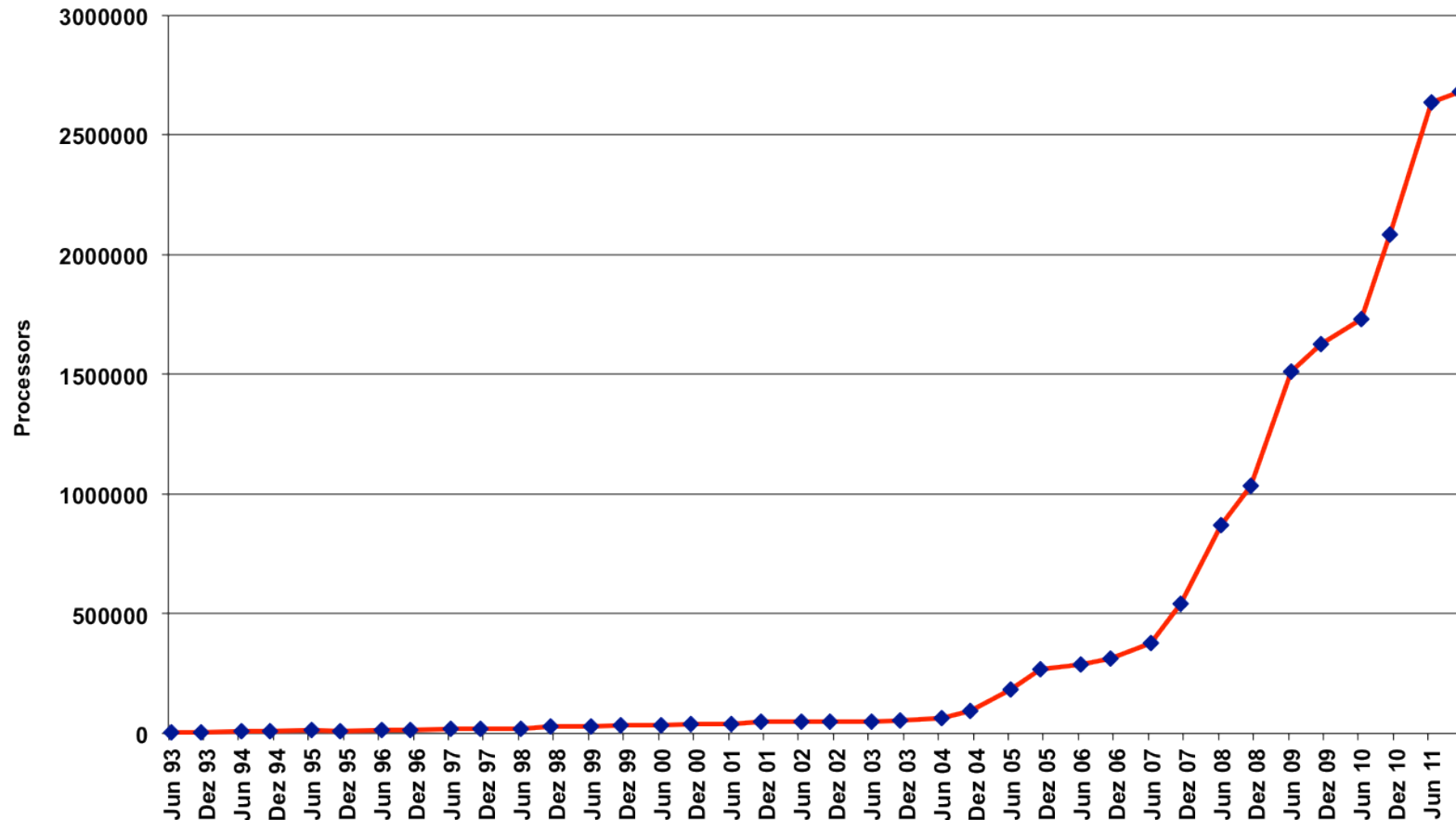
Kathy Yelick: *Ten Ways to Waste a Parallel Computer*

Keynote ISCA 2009. The 36<sup>th</sup> International Symposium on Computer Architecture (mit Daten von Kunle Olukotun, Lance Hammond, Herb Sutter, Burton Smith, Chris Batten und Krste Asanović)

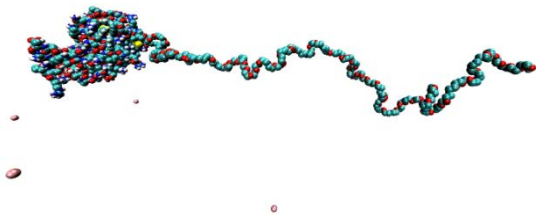


# Zahl der Cores pro System wächst sehr schnell

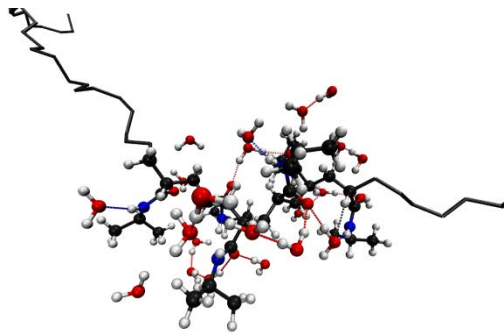
Total # of Cores in Top15



# Atomistic Simulation of Protein Purification: State of the Art



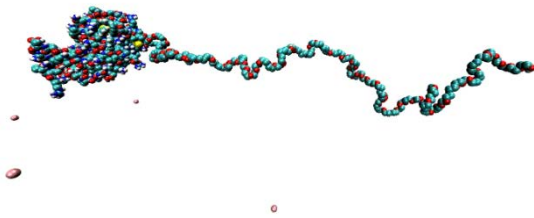
Polymer-modified protein in  
aqueous electrolyte solution



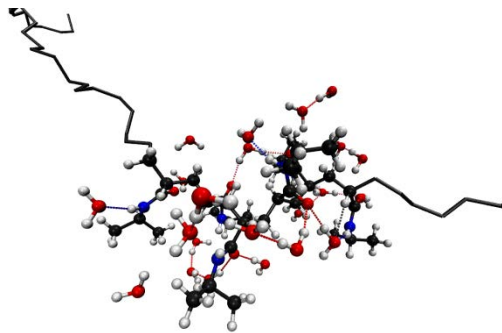
Solvent-hydrogel interactions

- **Small scenarios ( $< 10^6$  interaction sites)**
- **Short times ( $< 10^{-6}$  seconds)**
- **Moderately scaling codes ( $< 10^3$  processes)**
- **Simulation times of weeks**
- **Benefit: qualitative insights**

# Atomistic Simulation of Protein Purification: State of the Art ... and Vision Exascale



Polymer-modified protein in  
aqueous electrolyte solution



Solvent-hydrogel interactions

- Small scenarios ( $< 10^6$  interaction sites)
- **Large scenarios ( $> 10^{10}$  interaction sites)**
- Short times ( $< 10^{-6}$  seconds)
- **Long times ( $> 10^{-3}$  seconds)**
- Moderately scaling codes ( $< 10^3$  processes)
- **Massively parallel codes ( $> 10^6$  processes)**
- Simulation times of weeks
- **Response times of minutes**
- Benefit: qualitative insights
- **Quantitative insights and predictions**

# Bedarf an Informatik-Grundlagenforschung

## Herausforderungen:

- Heterogenität – Skalierbarkeit – Dynamik

## Themen:

- Programmanalyse, Codegenerierung und Codeoptimierung
- Programmierparadigmen
- Sprachen
- Zusammenspiel Compiler  $\leftrightarrow$  Laufzeitsystem
- Software-Engineering
- HW-nahe Algorithmik
- HW-SW- und SW-SW-Co-Design

## Zwei Wege:

- Umstellung traditioneller Technologie (punktuelle schnelle Erfolge)
- Entwicklung radikal neuer Technologie (nachhaltiger, breiter nutzbarer Technologieshift)

# *Der Weg*

# SPPEXA: Vorgeschichte – ein langer Weg

## 2006 – Diskussionen in der Kommission für IT-Infrastruktur (KfR) der DFG

- HPC-Software läuft in Probleme – fehlende Fördermechanismen aus vielfältigen Gründen

## 2007 – Initiativpapier aus den Geowissenschaften

- Titel *Wissenschaftliche Software im PetaFlop-Zeitalter*
- Rundgespräch am 31.3./1.4.2008 in Tutzing

## 2010 – Vorstoß aus dem (deutschen) Kreis der Exascale-Initiativen

- vor dem Erfahrungshintergrund massiver Investitionen in High-End-Systeme weltweit sowie massiver Investitionen in HPC-Software in den USA (DoE-SciDAC-1/2, NSF-OCI)

## 2010 – Aufnahme des Balles durch die KfR

- Erstellung eines Positionspapiers und Gespräch mit DFG-Präsidium (November 2010)
- Vorschlag in der Folge: flexibles, strategisch initiiertes SPP (top-down!) via Strategie-Fond

## 2011 – dann ging alles schnell

- Rundgespräch Mai; Perspektivausschuss Mai, OK Präsidium Juli
- Antragsabgabe August; internationale Begutachtung September; Einrichtung Oktober
- Call am 11.11.11 (!)

## Notwendigkeit

**Missverhältnis „Racks“ zu „Brains“ behindert effiziente Nutzung**

**Software in den Anwendungsfeldern ist groß, komplex – und unvorbereitet**

**Die (Nicht-)Verfügbarkeit hoch performanter Simulationssoftware wird immer mehr zum Enabler (bzw. Disabler) für führende Wissenschaft**

**Kein einfacher Transfer von Bekanntem – neue Methodik erforderlich**

**Wir stehen vor einer Zeitenwende – in den Anforderungen, in der Komplexität der Software, und vor allem in den Systemarchitekturen (many-core)**

**Bisherige Ansätze adressieren ...**

- ... monodisziplinäre Teilbereiche (IN, MA, PH, ING ...) – wichtig, aber hierfür unzureichend
- ... einzelne Teilschritte der Simulationspipeline (Modellierung, Algorithmen, Implementierung, Software, Exploration), berücksichtigen aber nicht deren Verschränkung
- ... mehr angewandte als grundlegende Fragestellungen (BMBF-Förderprogramm)

**Da HPC allgemein die Systeme nutzen wird, werden sehr viele Anwendungen profitieren – Capability und Capacity, in Wissenschaft und Wirtschaft**

# Gebotene Merkmale einer möglichen DFG-Förderung

## **Integrativer Ansatz wichtig – Co-Design!**

- Themen: Modellierung, Algorithmen, Betriebssoftware, Anwendersoftware, Programmierung, Datenmanagement, Software-Werkzeuge (gesamtes SW-Ökosystem)

## **Nur in kleineren Verbundprojekten zu schaffen**

- Adressieren jeweils 2-3 der genannten Themen – Ziel stets signifikanter Sprung im Hinblick auf Parallelisierung (Blockaden brechen)
- Bringen Arbeitsgruppen verschiedener Fachrichtungen zusammen (sine qua non!) – jeweils methodischer Kern plus Leitanwendung
- Zwecks Netzwerkbildung möglichst ortsübergreifend

## **Aber: mehr als eine Menge interessanter Einzelprojekte**

- Lenkung erforderlich aufgrund des breiten Spektrums an Themen und Beteiligten
- Steering Committee koordiniert und synchronisiert die einzelnen Projekte

## **Förderung**

- Als Richtgröße werden 6 Jahre à ca. 4.5 M € als erforderlich angesehen (s. KfR-Papier)
- Sicherstellung der Kohärenz durch zweistufiges Antragsverfahren mit Skizzen (erhöht u.a. Gestaltungsmöglichkeiten durch die Initiative)

## **Internationale Anbindung: Gespräche mit der NSF**

## **Instrument SPP – was ist hier anders?**

**Breite fachübergreifende Zusammensetzung**

**Breite fachübergreifende Strahlkraft**

**Laufender Technologiesprung – diverse Paradigmenwechsel**

**Struktur und Volumen des angedachten SPP sind ungewöhnlich – aber angemessen, ja erforderlich**

**Dringlichkeit – Exascale-Systeme werden 2018 erwartet, international laufen die Vorarbeiten**

**Co-Design-Gedanke fasst verschiedene Einzelthemen integral zusammen**

# *Das Programm*

## Das Ziel

*“SPPEXA addresses fundamental research on the various aspects of HPC software, which is particularly urgent against the background that we are currently entering the era of **ubiquitous massive parallelism**. This massive parallelism only, subsumed to the notion of many-core processors and their assembly to systems beyond  $10^7$  processing units, will smooth the way for **extreme computing** up to exascale, i.e. computations with  $10^{18}$  floating point operations per second and beyond, and the insight resulting from those simulations. **Mastering the various challenges related to this paradigm shift** from sequential or just moderately parallel to massively parallel processing will be the key to any future capability computing application at exascale, but it will also be crucial for learning how to effectively and efficiently deal with commodity systems of the day after tomorrow for smaller-scale or capacity computing tasks – and it is the overall scientific objective of SPPEXA.”*

**→ SPPEXA soll den Erkenntnisgewinn in verschiedenen Simulationsanwendungen nachhaltig ermöglichen, zielt aber selbst nicht darauf ab!**

# Die Themen

1. **Computational algorithms**
2. **System software**
3. **Application software**
4. **Data management and exploration**
5. **Programming**
6. **Software tools**

## Die Projekte

### **Haupt-Abgrenzung zum BMBF-HPC-Programm:**

- Grundlagenforschung – mehr „Revolution“ möglich – kein Industriefokus

### **Keine Einzelprojekte, sondern vielmehr Kleinverbände:**

- typisch 3–5 Partner, möglicherweise mehr

### **„bridge the gap“:**

- HPC-Technologie – HPC-Methodik – HPC-Anwendungen
- Ingenieurwissenschaften – Naturwissenschaften – Mathematik – Informatik
- Evolution vs. Revolution

### **Wenigstens 2 der 6 Themen sind zu adressieren – Fokussierung!**

### **Ziel: viele Skizzen, aber keine inflationären Beteiligungen**

### **Umfang: je nach Größe der Verbände insgesamt 10–13; 4 M€ p.a.**

# Personen

## Redaktionsteam des Antrags:

- **Hans-Joachim Bungartz (München)**
- Hans Hasse (Kaiserslautern)
- Heiner Igel (München)
- Christian Lengauer (Passau)
- **Wolfgang E. Nagel (Dresden)**
- Ulrich Rüde (Erlangen)
- Gabriel Wittum (Frankfurt)

## Steering Committee:

- **Hans-Joachim Bungartz (München)**
- Hans Hasse (Kaiserslautern)
- Heiner Igel (München)
- Christian Lengauer (Passau)
- **Wolfgang E. Nagel (Dresden)**
- Sabine Roller (Aachen)

## Der Zeitplan

**Deadline für Skizzen: 31. Januar 2012**

**Begutachtung der Skizzen: März 2012 (ohne Antragsteller)**

**Deadline für Vollanträge: 15. Mai 2012**

**Begutachtung der Vollanträge: Juli 2012 (mit Antragstellern)**

**Entscheidung über Förderung: Oktober 2012**

**Beginn der Arbeiten: Januar 2013**

## Informationen

[bungartz@in.tum.de](mailto:bungartz@in.tum.de) oder [wolfgang.nagel@tu-dresden.de](mailto:wolfgang.nagel@tu-dresden.de)

[marcus.wilms@dfg.de](mailto:marcus.wilms@dfg.de) oder [sppexa@dfg.de](mailto:sppexa@dfg.de)

Webseite: <http://www.sppexa.de>

Template für Skizzen: auf Webseite (jetzt verfügbar)

Template für Vollanträge: auf Webseite (im Frühjahr verfügbar)