

# High Performance Computing und Datenmanagement für Ingenieursanwendungen in Forschung, Mittelstand und Industrie

Dr. Bastian Koller, Ralf Luithardt



**Bild 1:** Kompetenzfelder, die die Basis von EXCELLERAT bilden

## Einleitung

Im Laufe der letzten Jahre hat sich die Nutzung von hoch skalierbaren Rechen-systemen (Supercomputern) durch die Industrie von einem exklusiven Kundenkreis, der sich den Aufbau der internen Fachexpertise leisten konnte, hin zu einem erweiterten Kundenkreis entwickelt, der bislang eher wenig oder keine Erfahrung mit dem Umgang dieser Ressourcen hatte.

Höchstleistungsrechenzentren, die den Zugriff auf die Rechensysteme anbieten, haben sich in Folge dessen von der „Bare-Metal“-Bereitstellung hin zum Angebot von Komplettlösungen weiterentwickelt, inklusive der Optimierung von Applikationen, Tests und Zugriff auf Wissen.

Eine wichtige Community im Industriebereich, welche High Performance Computing (HPC) bereits für ihre Produktzyklen, sowie Forschung und Entwicklung nutzt, ist im Bereich Ingenieurwissenschaften angesiedelt. Um diesen wirtschaftlichen Zweig auch weiterhin bestmöglich unterstützen zu können, bedarf es eines einfachen Zugangs zu relevanten Dienstleistungen und Wissensquellen, welche die jeweiligen Fragestellungen und Probleme zielgerichtet angehen können.

Um diesen Zugang zu realisieren wurde vor drei Jahren eine Arbeitsgemeinschaft europäischer Höchstleistungsrechenzentren ins Leben gerufen, welche die Vorarbeiten für ein im Dezember startendes Forschungs- und Entwicklungsprojekt legte, um ein Exzellenzzentrum (Centre of Excellence – CoE) für Ingenieurwissen-

schaften aufzubauen – das EXCELLERAT Projekt.

## Das Projekt EXCELLERAT

EXCELLERAT begründet sich auf Erfahrungen und Aktivitäten der beteiligten Projektpartner, die allesamt die Möglichkeit haben Services im Bereich Paralleles Rechnen anzubieten oder zu nutzen.

Daher sind die besten Voraussetzungen gegeben, um schnellstmöglich erste Services für Ingenieurwissenschaften zur Verfügung zu stellen und gleichzeitig eine Evaluierung möglicher Services durchzuführen, um das Portfolio angebotener Dienste konsequent zu erweitern.

Während in der Vergangenheit im Lebenszyklus einer Ingenieursanwen-

derung hauptsächlich das Prozessieren einer Anwendung betrachtet wurde, wird EXCELLERAT das Gesamtbild adressieren und betrachten, und sich somit auch mit Lösungen im Bereich Pre- und Postprocessing, Datenmanagement und Datentransfer, sowie Visualisierung von Rechenergebnissen befassen.

Dabei wird ein Augenmerk auf dem intelligenten Analysieren von Datenmenüen (Data Analytics), sowie auf Machine Learning und Deep Learning liegen, um die angebotenen Lösungen zukunftsorientiert zu gestalten.

Generell kann man die Vision für das Exzellenzzentrum wie folgt umschreiben:

- der Engineering-Community einen einfachen Zugang zu relevanten Dienstleistungen und Wissen rund um High Performance Computing zu verschaffen,
- der Engineering-Community Zugang zu Nischen-Know-How in der Anwendungsentwicklung für HPC und Diversität von angebotener Höchstleistungshardware zu verschaffen,
- Unterstützung der Community mit gezielten Trainings- und Netzwerkaktivitäten,
- die EXCELLERAT-Nutzer in die Entwicklung des Zentrums einzubinden,
- Stärkung der europäischen Wettbewerbsfähigkeit im Bereich des HPC-

gesteuerten Engineerings durch exzellente Forschung in den Bereichen Entwicklung, Skalierung und Optimierung von Anwendungen bis hin zu Exascale-Performance,

- die Anwendung und Evaluierung von innovativen technischen Lösungen im HPC und High Performance Data Analytics Bereich mit einem klaren Bezug zu Problemstellungen der Ingenieurwissenschaften.

**Gemeinschaft**

Ein Kompetenzzentrum wie EXCELLERAT kann nur dann nachhaltig sein, wenn es anwendergetrieben aufgebaut wird, d.h. es muss eine ganz klare Kundenorientierung vorherrschen. Für EXCELLERAT besteht die Anwenderbasis aus einer Community, die gleichzeitig als Wissens-träger und Lösungsanbieter fungiert. Mitglieder dieser Gemeinschaft sind Forscher, Ingenieure, IT/HPC Spezialisten und generell Technologen aus Industrie und Wissenschaft. Primär richtet sich EXCELLERAT insbesondere an folgende Zielgruppen:

- akademische, aber auch kommerziellen HPC-Zentren in Europa mit Expertise in der Zusammenarbeit mit kommerziellen Partnern und als Lieferanten von HPC-Ressourcen für Industrie und Wissenschaft,
- akademische und industrielle Entwick-

ler von paralleler Anwendungssoftware für den Ingenieursbereich,

- in Europa tätige Unternehmen, die in ihrer Produktentwicklung parallele Anwendungen nutzen – von KMU bis hin zu Großunternehmen,
- in Europa tätige Maschinenbauunternehmen, die HPC noch nicht in ihrem Produktentwicklungszyklus nutzen, aber die Vorteile davon evaluieren wollen,
- akademische HPC-Zentren in Europa mit Expertise in der Zusammenarbeit mit kommerziellen Partnern und als Lieferanten von HPC-Ressourcen für Industrie und Wissenschaft.

Damit das Zentrum erfolgreich etabliert werden kann, wurden aus den verschiedensten Bereichen internationale Partner gesucht, welche den jeweiligen Aspekt des Zentrums einbringen und/oder vertreten können und das Zentrum gleichzeitig auf europäischer Ebene verankern.

Die Sicht und das Wissen der Rechenzentren werden durch das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (Deutschland), CINECA (Italien), Barcelona Supercomputing Center (BSC, Spanien), EPCC (Großbritannien), KTH (Schweden) und ARCTUR (Slowenien) repräsentiert. ARCTUR repräsentiert kommerzielle Zentren, sodass auch ökonomische Aspekte eingebracht werden.



**Bild 2:** Das Europäische Exzellenzzentrum



**Bild 3:** Datenversand durch das Datenaustauschsystem SWANportal

CERFACS (Frankreich), das Deutsche Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR, Deutschland) und die RWTH Aachen (Deutschland) bringen die Sicht der Anwendungsentwickler in das Vorhaben mit ein. Gleichzeitig hat hier das Barcelona Supercomputing Center eine Doppelfunktion, da dieses auch eine eigene Anwendung innerhalb der Projektaktivität weiterentwickeln wollen. Die Anwendungen selbst kommen aus den Bereichen Aerospace/Aeronautics, Automotive und Verbrennung/Verbrennungsmotoren. Sie adressieren somit wichtige Bereiche der Ingenieurwissenschaften.

Die Firma SSC-Services GmbH (Deutschland) und das Fraunhofer SCAI (Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI) decken die Thematiken Datenmanagement, Datentransfer, Machine und Deep Learning ab.

**Die Motivation**

Generell folgt dieses Exzellenzzentrum für Ingenieurwissenschaften der europäischen Strategie für Höchstleistungsrechnen (EuroHPC <http://eurohpc.eu>) und wird ein wichtiger Teil der europäischen HPC Landschaft werden.

EuroHPC sieht vor, in den Bereichen Hardware, Software und Nutzbarkeit immense Fortschritte zu machen, um Europa im HPC wettbewerbsfähig mit den USA, China oder Japan zu halten.

Während im Hardwarebereich die Entwicklung europäischer Rechnerbauteile, wie z.B. eines europäischen Prozessors für HPC, angestrebt werden, wurde das Konzept der Exzellenzzentren kreiert, um sowohl eine Weiterentwicklung von Anwendungen, als auch eine breite Unterstützung von Anwendern und Entwicklern zu garantieren. Dabei wird ein Hauptaugenmerk auf die nächsten Generationen von Höchstleistungsrechnern gerichtet, von denen man Exascale Leistung (1 ExaFLOP =  $1 \times 10^{18}$  mathematische Operationen pro Sekunde) erwartet. Da momentane Rechner gemeinhin eine maximale Leistung im zweistelligen PetaFLOP Bereich haben (1 PetaFLOP =  $1 \times 10^{15}$  mathematische Operationen pro Sekunde als ausführbare Aktionen) und die Leistungssteigerung von Prozessoreinheiten durch technologische Limitationen immer kleiner wird, kann Exascale Leistung nur durch technologische Fortschritte im Hardware- und Softwarebereich erfolgen.

Im Jahr 2015 wurde eine erste Welle dieser Exzellenzzentren auf europäischer Ebene gestartet, welche durchaus Kernbereiche wie Klimaforschung oder Energieforschung adressieren, allerdings fehlte bislang der Bereich Ingenieurwissenschaften komplett.

Deshalb ist die Mission und zugleich Motivation für EXCELLERAT nun geeignete (d.h. schon jetzt hoch performante)

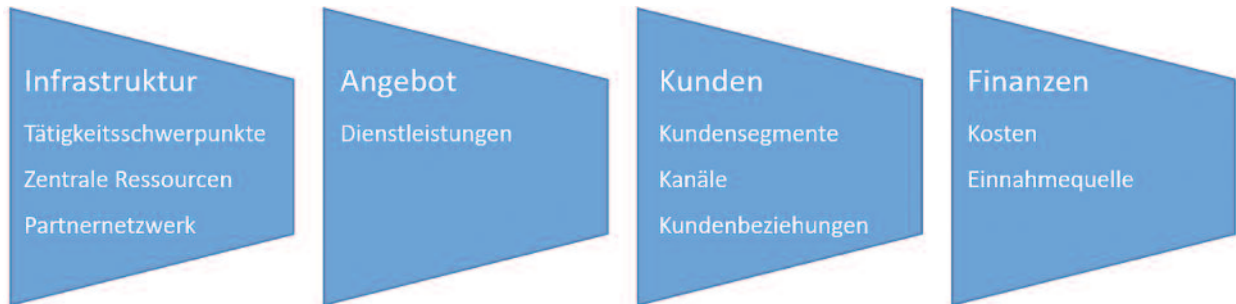
Anwendungen in Richtung Exascale zu bringen und dabei sämtliche Optimierungsmöglichkeiten auf Softwareebene zu nutzen. Da dies alleine aber nicht ausreichend sein wird, ist eine große Anzahl von zusätzlichen Services nötig, die den Einstieg und die Nutzung der Technologien vereinfachen sollen und zugleich auch wichtige Aspekte, wie z.B. die Ausbildung von Fachkräften, sicherstellen müssen.

Was bei vielen dieser Aktivitäten bisher fehlte, war die Betrachtung des Lebenszyklus von HPC Anwendungen, welche eben nicht nur die Berechnung an sich berücksichtigen darf, sondern auch notwendige Bausteine wie Pre-Post Processing und Datenmanagement/-transfer erfassen muss. Vor allem letzterer wird für eine Nutzbarkeit der Services innerhalb eines Produktentwicklungszyklus immens wichtig sein.

**Der Datentransfer**

Die Idee, dass Daten in den HPC nun als Service-Angebot berechnet werden können und für einen breiteren Einsatz in der Industrie genutzt werden sollen, legt natürlich zu Grunde, dass eben diese Daten auch zu den Rechenzentren transportiert werden – sicher, nachvollziehbar und reproduzierbar.

Der Datentransfer ist eine der Kerndisziplinen für die Zusammenarbeit zwischen



**Bild 4:** Kernelemente des EXCELLERAT Businessplans

den Beteiligten. Da man mit einem enormen Anstieg des ausgetauschten Datenvolumens insbesondere in Richtung Exascale konfrontiert sein wird, ist es empfehlenswert, neue Wege zu finden, um die Datenverfügbarkeit dort zu sichern, wo sie benötigt wird. EXCELLERAT bietet die Möglichkeit, das gesamte Spektrum des Datenmanagements zu erschließen – vom Austausch über die Workflow-Überwachung bis hin zur Verantwortung für die Datenspeicherung.

Durch den Aufbau eines zwischengeschalteten Datalayers, der alle zu verarbeitenden Daten beinhaltet, und den damit verbundenen Datenanalyseprozessen, wird es möglich Deltas zu erstellen, um das Datenvolumen zu reduzieren und die Datenübertragungs- und Berechnungsgeschwindigkeit zu erhöhen.

Der Datenaustausch zwischen Datenproduzent (Sender) und Datenverarbeiter (Empfänger) muss auf einem hohen Automatisierungsgrad erfolgen, um Doppelungen von Übertragungsinhalten zu vermeiden. Nicht nur die Datendateien selbst müssen berücksichtigt werden, sondern auch ihr Inneres. Dieser Ansatz wird zu einer Datenreduktion durch den Aufbau einer zuverlässigen zentralen Datenbank führen.

Das HLRS verfügt seit einem bereits abgeschlossenen Projekt, dem Media

Solution Center (MSC), über ein eigenes, von SSC-Services betriebenes Datenaustauschsystem. Die bereits etablierte Technologie kann als Teil der Gesamtlösung angepasst, weiterentwickelt, getestet und schlussendlich zum Einsatz gebracht werden.

**Ausblick / Vision**

Das Zentrum wird als die einzige Anlaufstelle für Technologie und Fachwissen fungieren. Durch die Nutzung des Wissenspools von EXCELLERAT können Entwickler in Hochschulen und Industrie überschneidende Investitionen vermeiden und sich auf den Kern der Problemstellungen und somit auf die Innovationen konzentrieren. Es ist geplant, dass dieser Single Point of Access im Laufe des Projektes und darüber hinaus stetig wachsen und Success Stories produzieren wird, die seine Attraktivität auch für momentan wenig HPC-affine Firmen steigert.

Das bestmögliche Ausnutzen neuer Technologien steht somit im Vordergrund, was durch die kritische Masse an Experten innerhalb des Konsortiums gewährleistet wird. Zum ersten Mal in diesem Umfang wird nicht nur die Fähigkeit verbessert viele Produktdaten und Zwischenergebnisse zu generieren, sondern auch diese intelligent zu managen und auszuwerten. ■

Dr.-Ing. Bastian Koller  
 Höchstleistungsrechenzentrum  
 Stuttgart – HLRS  
 E-Mail: koller@hlrs.de

Ralf Luithardt  
 SSC-Services GmbH  
 E-Mail: r.luithardt@ssc-services.de

**Kontakt**