Wissenschaftliches Rechen

Paralleles Höchstleistungsrechnen

Christian Engwer

Uni Münster

April 5, 2011

Vorlesung

Dozent

- Christian Engwer
- zu finden in: Einsteinstrasse 62, Zimmer 120.220
- email: `christian.engwer@uni-muenster.de`

Vorlesung

- Di 14-16: Vorlesung
- Do 10-12: im Wechsel VL und Übungen (im Computer Pool)

Homepage

`http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/WissenschaftlichesRechnen_SS11/`

Organisatorischer

- Wer studiert auf Diplom, wer auf Master?
- Wer hat bereits Programmiert?
- Wer hat bereits C/C++ Programmiert?

Was ist Wissenschaftliches Rechnen?

Typischer Wissenschaftlicher Prozess

$\boxed{\text{Experiment}}$ $\boxed{\text{Theorie}}$

- Charakterisierung: beobachten, quantifizieren, messen
- Hypothese
  - Theorie
  - Modell
- Vorhersage
  - logische Herleitung aus der Hypothese?
- Experiment
  - Verifikation/Falsifikation
  - Abweichungen führen ggf. zu neuem/besseren Modell

Was ist Wissenschaftliches Rechnen?

Numerische Simulation als dritte Säule

Experiment	*Simulation*	Theorie

Numerische Simulation ist die dritte Säule der Wissenschaft und Technik neben Theorie und Experiment, um Erkenntnisse zu gewinnen, z.B. wenn

- Eigenschaften/Strukturen nicht experimentell zugänglich sind
- Experimente teuer sind (und deshalb nur wenige durchgeführt werden können)
- Theorien durch ihre Vorhersagen gestestet werden sollen

Was ist Wissenschaftliches Rechnen?

Wissenschaftliches Rechnen

$\boxed{\text{Experiment}}$ $\boxed{\textit{Simulation}}$ $\boxed{\text{Theorie}}$

Wissenschaftliches Rechnen ist ein interdisziplinäres Forschungsgebiet, das zwischen der numerischen Mathematik, der Informatik und den wissenschaftlichen Anwendungsfächern angesiedelt ist.

Modellierung & Simulation

Wirklichkeit

↓

konzeptionelles Modell

Welche Größen und Prozesse sind zur Beschreibung des Originals relevant?

- Schwerkraft des Jupiters irrelevant für Bewegung eines Pendels auf der Erde
- Temperatur eines Körpers ist homogen verteilt
- Ankunftszeiten sind exponentiell verteilt

→ Hypothesen

→

mathematisches Modell

Beschreibung der Zustandsgrößen durch Gleichungen.
Analyse des Modells hinsichtlich Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen sowie eventuell qualitativem Verhalten.
→ Vereinfachungen wie Dimensionsreduktion, Linearisierung, Gebietsgröße, . . .

→

Computermodell

Numerisches Modell; oft Näherung an das mathematische Modell, da sich reelle Zahlen und Funktionen nur näherungsweise darstellen lassen.
→ Implementierung, Effizienz, Korrektheit

↑

Simulationsergebnis

Anwendungen

Elektromegnetismus

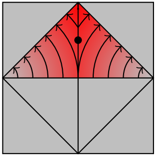
- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$

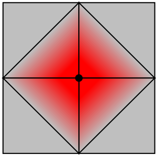
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



2D Edge Element



2D Node Element

Anwendungen

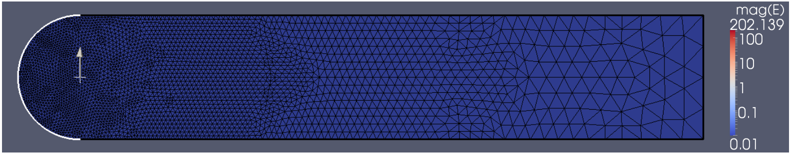
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Rechengitter

Anwendungen

Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$

Zeit: 0

Anwendungen

Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$

Zeit: 1.0021

Anwendungen

Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$

Zeit: 1.99705

Anwendungen

Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$

Zeit: 2.99915

Anwendungen

Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$

Zeit: 4.00125

Anwendungen

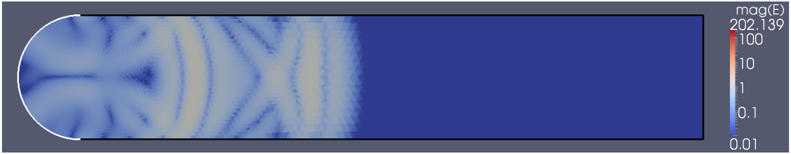
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 5.00335

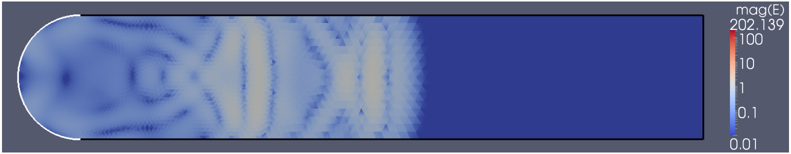
Anwendungen
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 5.99829

Anwendungen

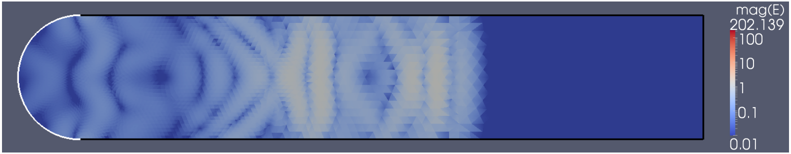
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 7.00040

Anwendungen

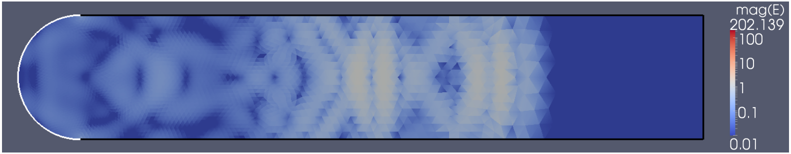
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$
\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho & \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} &= \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J} \\
\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0
\end{aligned}
$$

- Zustandsgleichungen

$$
\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}
$$



Zeit: 8.0025

Anwendungen

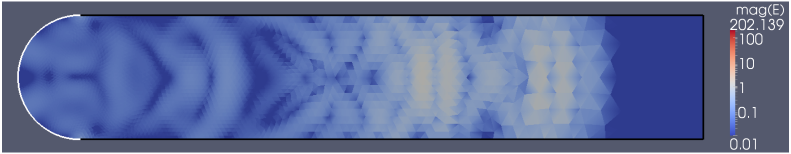
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 8.99744

Anwendungen

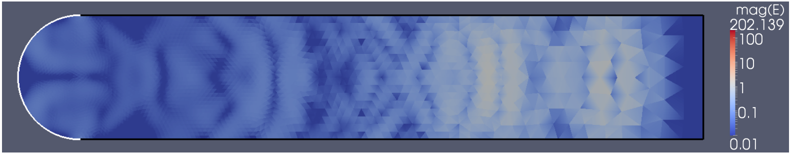
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 9.99954

Anwendungen

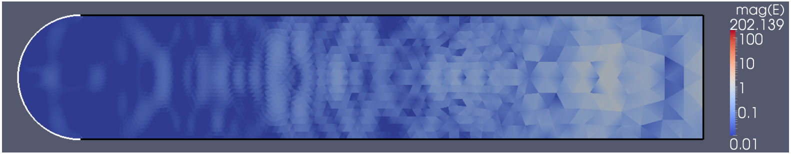
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 11.9966

Anwendungen

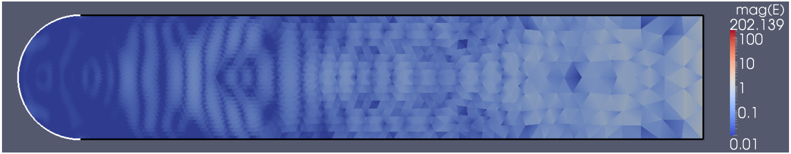
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 14.0008

Anwendungen

Elektromegnetismus

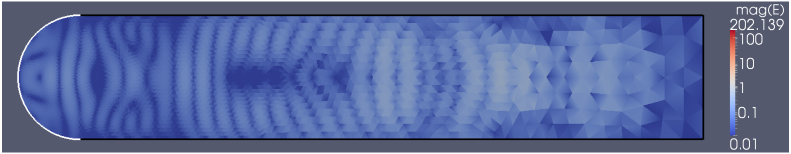
- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 15.9978

Anwendungen

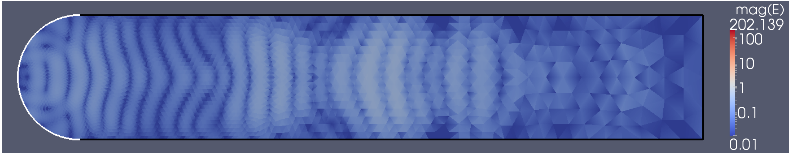
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 18.002

Anwendungen

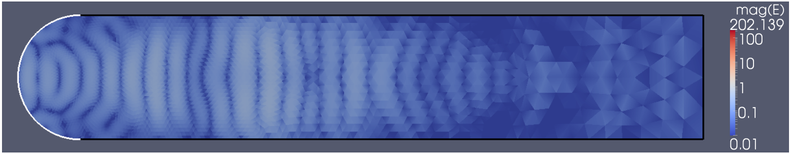
Elektromegnetismus

- Maxwell Gleichungen in der Zeitdomäne

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} = \mathbf{J}_{\text{int}} + \mathbf{J}$$
$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

- Zustandsgleichungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon * \mathbf{E} \qquad \mathbf{B} = \mu * \mathbf{H} \qquad \mathbf{J}_{\text{int}} = \sigma * \mathbf{E}$$



Zeit: 19.9991

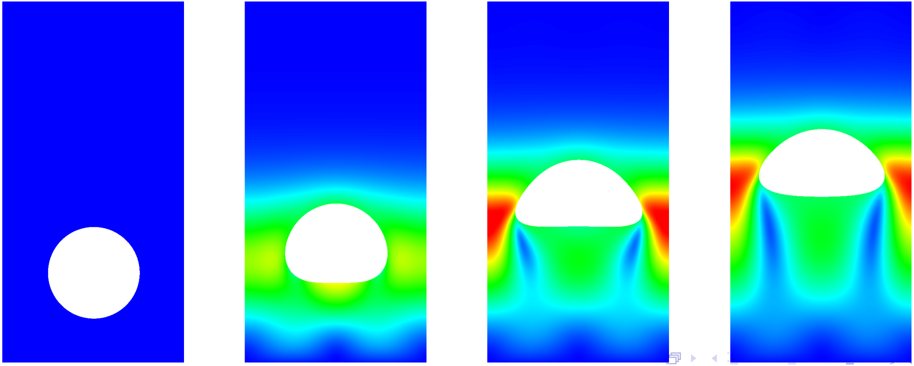
back

Anwendungen

Navier-Stokes Zwei-Phasen Strömung (aufsteigende Gasblase)

$$\rho_i \partial_t \mathbf{u} + \rho_i \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla \underline{\boldsymbol{\sigma}} + \rho_i \mathbf{g}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

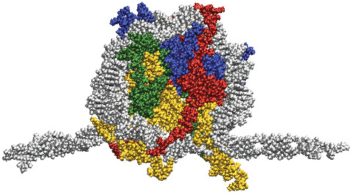
Spannungtensor: $\underline{\boldsymbol{\sigma}} := -p\underline{\mathbf{I}} + \mu_i \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T$



Anwendungen

Molekularbiologie

- Simulation eines Nukleosom
- Nukleosom um Histonen (Proteine, hier bunt) gewickelt
- externe Kraft wird angelegt
- *Wie entrollt sich die DNA?*
- Diskretes Modell, Molekulardynamik Simulation
- Simulationszeit 30ns
- Cluster mit 512 Kernen, 20 Tage Rechenzeit



Dr. Kepper, Bioquant, Universität Heidelberg

Warum parallel Rechnen ?

- Nebenläufigkeit
  - Abarbeitung mehrerer Prozesse auf einem Prozessor
  - Multi-Tasking Betriebssysteme seit den 60er Jahren
  - Bedienung mehrerer Geräte und Benutzer
  - Ziel: Steigerung der Auslastung
  - “Hyperthreading”: Nutze Wartezeiten des Prozessors
  - “Multi-Core” / “Multi-Processor”
  - Mehrere Dinge gleichzeitig : Web-Browser, Desktop
  - Koordinationsproblematik tritt bereits hier auf
- Verteilte Anwendungen
  - Datenbasis ist inhärent verteilt: betriebswirtschaftliche Software, Warenfluß in großen Unternehmen
  - Hier wichtig: plattformübergreifende Kommunikation, Client-Server Architekturen
  - Auch wichtig: Sicherheit, VPN, etc. (behandeln wir nicht)

Es gibt sehr verschiedene Parallelrechner

$\leftrightarrow$

Es gibt sehr verschiedene Parallelrechner

$\leftrightarrow$

4×12 Core AMD-Opteron

Es gibt sehr verschiedene Parallelrechner

$\leftrightarrow$

4×12 Core AMD-Opteron

IBM BlueGene P

Es gibt sehr verschiedene Parallelrechner

$\leftrightarrow$

4×12 Core AMD-Opteron IBM BlueGene P

Beide Varianten für uns relevant!

High Performance Computing

- Treibt Rechnerentwicklung seit Anfang 1940er
- Anwendungen: mathematische Modellierung und numerische Simulation
- ungestillter “Hunger” nach Rechenzeit:
  - Modellfehler $\rightarrow$ detailliertere Physik
  - Approximationsfehler $\rightarrow$ mehr Freiheitsgrade
- Grand Challenges:
  - Kosmologie, z. B. Galaxiendynamik
  - Proteinfaltung
  - Erdbebenvorhersage
  - Klimaentwicklung
- ASCI Program (Advanced Simulation and Computing)
  Programm amerikanischer Parallelrechner seit 1992, Funding 2004: 200 Mio US-$ DoE, 87 Mio US-$ NSF

Grand Challenges

- U.S. Departement of Energy
- Advanced Scientific Computing Research
- Grand Challanges & Exa-Scale Computing

Grand Challenges

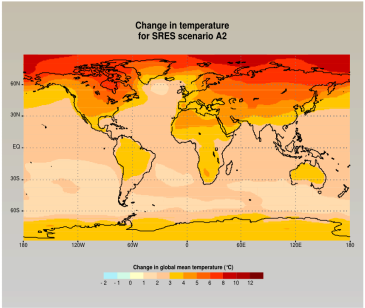
- U.S. Departement of Energy
- Advanced Scientific Computing Research
- Grand Challanges & Exa-Scale Computing
  - Climate Science
  - High Energy Physics
  - Fusion Science
  - Nuclear Energy
  - Biology
  - National Security

Grand Challenges

- U.S. Departement of Energy
- Advanced Scientific Computing Research
- Grand Challanges & Exa-Scale Computing
  - Climate Science
  - High Energy Physics
  - Fusion Science
  - Nuclear Energy
  - Biology
  - National Security

Klimavorhersage

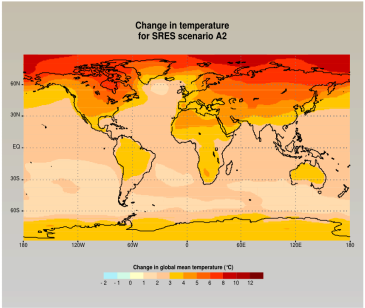
- Langfristige Klimaprognosen
- Simulation von Temperatur, Winden & Gasen in der Atmosphäre
- Interaktion mit Ozeanen und Festland



Quelle: IPCC

Klimavorhersage

- Langfristige Klimaprognosen
- Simulation von Temperatur, Winden & Gasen in der Atmosphäre
- Interaktion mit Ozeanen und Festland
- Grundlegende Gleichungen bekannt
- Instabiles System

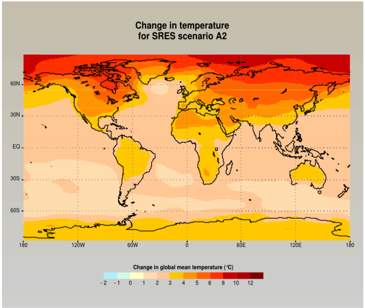


Quelle: IPCC

Klimavorhersage

- Langfristige Klimaprognosen
- Simulation von Temperatur, Winden & Gasen in der Atmosphäre
- Interaktion mit Ozeanen und Festland
- Grundlegende Gleichungen bekannt
- Instabiles System

→ Sehr genaue Messungen und Simulationen nötig



Quelle: IPCC

Paralleles Rechnen zur Wettersimulation

- Erste Idee eines Parallelrechners zur Wettervorhersage stammt von Lewis Fry Richardson
  - Buch: Weather Prediction by Arithmetical Finite Differences (1916)
  - An einzelnen Messpunkten werden Wetterdaten in versch. Höhen erhoben
  - 64000 Messpunkte über die Erde verteilt
  - Auflösung ca. 100 km
  - Jeder Messpunkt sollte von einem *Computer* ausgewertet werden.
  - Vorhersage für den Folgetag

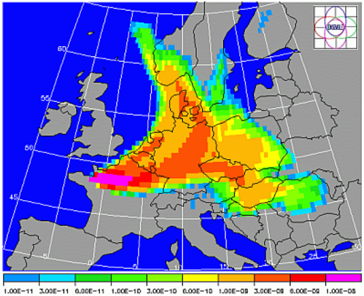
Paralleles Rechnen zur Wettersimulation

- Erste Idee eines Parallelrechners zur Wettervorhersage stammt von Lewis Fry Richardson
  - Buch: Weather Prediction by Arithmetical Finite Differences (1916)
  - An einzelnen Messpunkten werden Wetterdaten in versch. Höhen erhoben
  - 64000 Messpunkte über die Erde verteilt
  - Auflösung ca. 100 km
  - Jeder Messpunkt sollte von einem *Computer* ausgewertet werden.
  - Vorhersage für den Folgetag
  - Wurde nie umgesetzt, und hätte so auch nicht funktioniert

Paralleles Rechnen zur Wettersimulation

Heute:

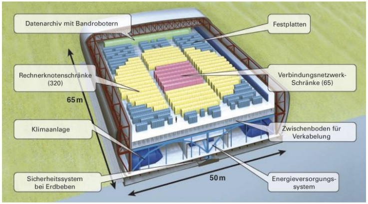
- Deutscher Wetterdienst
  - NEC SX-9 Vectorrechner (seit 2009)
  - ca. 11 TFlops
  - Auflösung von 2,8 km



Paralleles Rechnen zur Wettersimulation

Heute:

- Deutscher Wetterdienst
  - NEC SX-9 Vectorrechner (seit 2009)
  - ca. 11 TFlops
  - Auflösung von 2,8 km
- Earthsimulator
  - Japanischer Supercomputer
  - Klimasimulationen der gesamten Erde
  - Führte von 2002 bis 2004 die TOP 500 an
  - Upgrade 2009



TOP 500

November 2010

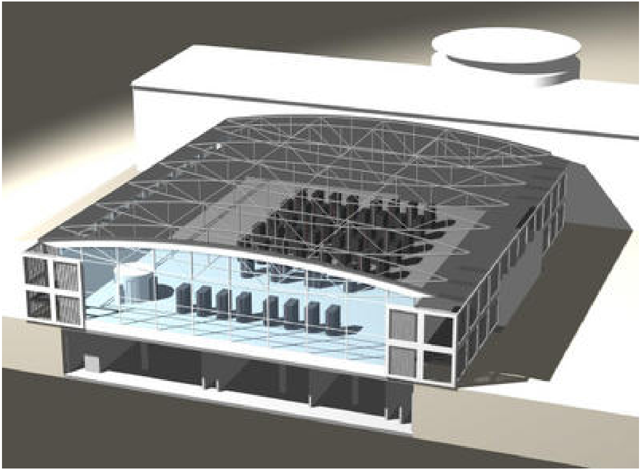
1. Tianhe-1A (China) – *NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C, NUDT*
2. Jaguar (USA) – *Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz, Cray Inc.*
3. Nebulae (China) – *Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU, Dawning*
4. TSUBAME 2.0 (Japan) – *HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows, NEC/HP*
5. Hopper (USA) – *Cray XE6 12-core 2.1 GHz Cray Inc.*
6. Tera-100 (Fankreich) – *Bull bullx super-node S6010/S6030, Bull SA*
7. Roadrunner (USA) – *BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, IBM*
8. Kraken XT5 (USA) – *Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz, Cray Inc.*
9. JUGENE (Deutschland) – *Blue Gene/P Solution, IBM*
10. Cielo (USA) – *Cray XE6 8-core 2.4 GHz, Cray Inc.*

TOP 500

November 2010

1. Tianhe-1A (China) – *NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C, NUDT*
2. Jaguar (USA) – *Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz, Cray Inc.*
3. Nebulae (China) – *Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU, Dawning*
4. TSUBAME 2.0 (Japan) – *HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows, NEC/HP*
5. Hopper (USA) – *Cray XE6 12-core 2.1 GHz Cray Inc.*
6. Tera-100 (Fankreich) – *Bull bullx super-node S6010/S6030, Bull SA*
7. Roadrunner (USA) – *BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, IBM*
8. Kraken XT5 (USA) – *Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz, Cray Inc.*
9. JUGENE (Deutschland) – *Blue Gene/P Solution, IBM*
10. Cielo (USA) – *Cray XE6 8-core 2.4 GHz, Cray Inc.*

Jugene



Das Jülich Supercomputing Center

Jugene

Kühlwasserleitungen im Boden

Jugene

Installation der Jugene

Jugene

Jugene (8 Racks je Reihe)

Jugene

Jugene, einzelnes Rack mit
2 midplanes, à 16 nodeboards, à 32 CPUs

Jugene

Hardware

- 72 Racks, à 1024 CPUs
  - je 2 midplanes, à 16 nodeboards, à 32 CPUs
- 4-Kern Power-PC-450 CPUs, 850 MHz

  $\rightarrow$ 294.912 Kerne
- zwei Gigabyte RAM pro CPU

  $\rightarrow$ 144 Terabyte Hauptspeicher
- 825,5 TFLOPs Peakperformance (Linpack)

  $\rightarrow$ neunt schnellste Computer weltweit
  - erster europäische PetaFLOP-Rechner

Jugene

Infrastruktur

- Ausmaße: 130 m^2
- Energieverbrauch:
  - 2.2 - 2.5 MW (ca. 6000 3-Familienhaushalte)
  - 20% for cooling
- Kühlung:
  - Luftkühlung: 60.000 m^3/h
  - Wasserkühlung: ca. 360 m^3/h,

Inhalt der Vorlesung

I Hardware
- Prozessorentwicklung, Pipelining, SIMD, MIMD
- Caches, Cachekonsistenz, Multicore
- Verbindungsnetzwerke

II Programmierung
- C++
- gemeinsamer Speicher: Locks, Semaphore
- PThreads, OpenMP
- verteilter Speicher: MPI-I, MPI-II

III Algorithmen
- Bewertung von Algorithmen, prinzipielles Vorgehen, Lastverteilung
- dichtbesetzte Matrizen
- dünnbesetzte Gleichungssysteme
- Partikel-Simulationen

Material

- Hennessy und Patterson, *Computer architecture: a quantitative approach*
- Schwandt, *Parallele Numerik: Eine Einführung*
- Bengel, *Masterkurs Parallele und Verteilte Systeme*
- Herlihy und Shavit *The art of multiprocessor programming*
- Bastian, *Vorlesungsskript Paralleles Rechnen*, `http://conan.iwr.uni-heidelberg.de/teaching/scripts/pr1.pdf`