



Klimaforschung und Hochleistungsrechnen

1. Der Erkenntnisgewinnungsprozess
2. Klimamodellierung und Computer
3. Rechner- und Speicherinfrastruktur am DKRZ
4. Themengebiete der Informatik
5. Herausforderungen

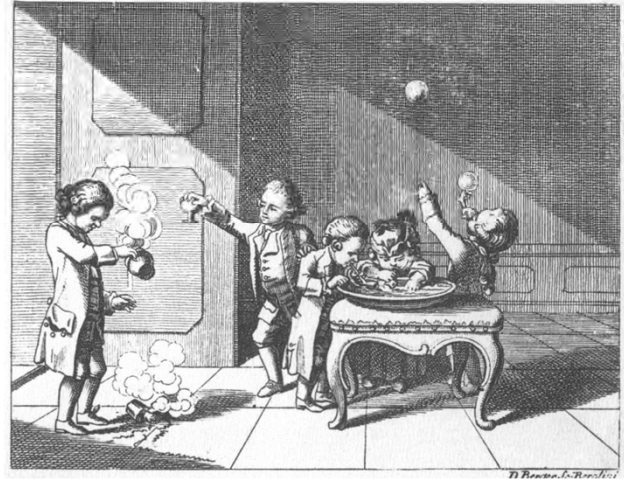


1. Der Erkenntnisgewinnungsprozess

- Das Experiment
- Die Theorie
- Die Dritte Säule: Numerische Simulation
- The Fourth Paradigm: Datenintensive Wissenschaft

Das Experiment

„Ein **Experiment** (von lateinisch *experimentum* „Versuch, Beweis, Prüfung, Probe“) im Sinne der Wissenschaft ist eine methodisch angelegte Untersuchung zur **empirischen** Gewinnung von Information (*Daten*).“ (Wikipedia)



Die (wissenschaftliche) Theorie

„Eine **Theorie** ist ein System von Aussagen, das dazu dient, **Ausschnitte der Realität** zu beschreiben beziehungsweise zu erklären und **Prognosen über die Zukunft** zu erstellen.“
(Wikipedia)

$$\begin{aligned} T_{gb} &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 T_i \, d\mu \, d\varphi \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \sqrt{\frac{S_o (1 - \alpha_o) \mu}{\epsilon \sigma}} \, d\mu \, d\varphi \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[\frac{S_o (1 - \alpha_o)}{\epsilon \sigma} \right]^{0.25} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \mu^{0.25} \, d\mu \, d\varphi \\ &= \frac{2}{5} \left[\frac{S_o (1 - \alpha_o)}{\epsilon \sigma} \right]^{0.25} \quad (5) \end{aligned}$$

Numerische Simulation (Die Dritte Säule)

„Als **numerische Simulation** bezeichnet man allgemein Computersimulationen, welche mittels numerische Methoden wie zum Beispiel mit Turbulenzmodellen durchgeführt werden. Bekannte Beispiele sind Wetter- und Klimaprognosen, numerische Strömungssimulation oder Festigkeits- und Steifigkeitsberechnungen.“ (Wikipedia)

- Computersimulation dient in sehr vielen modernen Wissenschaften als Methode der Erkenntnisgewinnung
- Die wissenschaftstheoretischen Probleme sollen hier nicht erörtert werden

Ganz grob zur Vorgehensweise

- Wir haben eine Vorstellung der Zusammenhänge in einem System, die sich mathematisch darstellen lässt
- Mathematische Darstellung wird in ein Programm überführt
- Das Programm berechnet Ergebnisdaten
- Ergebnisdaten werden mit der Realität verglichen



Datenintensive Wissenschaft (Fourth Paradigm)

“Increasingly, scientific breakthroughs will be powered by advanced computing capabilities that help researchers **manipulate** and **explore** massive **datasets**.”

The speed at which any given scientific discipline advances will depend on how well its researchers collaborate with one another, and with technologists, in areas of **eScience** such as databases, workflow management, visualization, and cloud computing technologies.”

Microsoft Research



The FOURTH PARADIGM

DATA-INTENSIVE SCIENTIFIC DISCOVERY

EDITED BY TONY HEY, STEWART TANSLEY, AND KRISTIN TOLLE



Datenintensive Wissenschaft

- Datenintensive Wissenschaft ist ein Teil von dem, was jetzt diffus als „Big Data“ bezeichnet wird
- Big Data meint meistens große unstrukturierte Datensätze aus potentiell verschiedenen Quellen
 - Z.B. Erkennen von Krankheitsausbreitungen durch entsprechende Eingaben in Google („Grippemittel“)
- Wichtigste Gemeinsamkeit: aus den Daten alleine werden neue Einsichten gewonnen

2. Klimamodellierung und Computer

Für ein erstes intuitives Verständnis

- Ein Klimamodell ist repräsentiert durch einen Satz von Programmen, mit deren Hilfe ein Klimageschehen simuliert wird
- Typischerweise werden lange Zeiträume auf globaler Ebene simuliert
- Hierfür benötigen wir sehr hohe Rechenleistung und große Speichersysteme



Unterschied Wetter vs. Klima

Wetter

„Als Wetter bezeichnet man den spürbaren, kurzfristigen Zustand der Atmosphäre an einem bestimmten Ort der Erdoberfläche, der unter anderem als Sonnenschein, Bewölkung, Regen, Wind, Hitze oder Kälte in Erscheinung tritt.“ (Wikipedia)

Klima

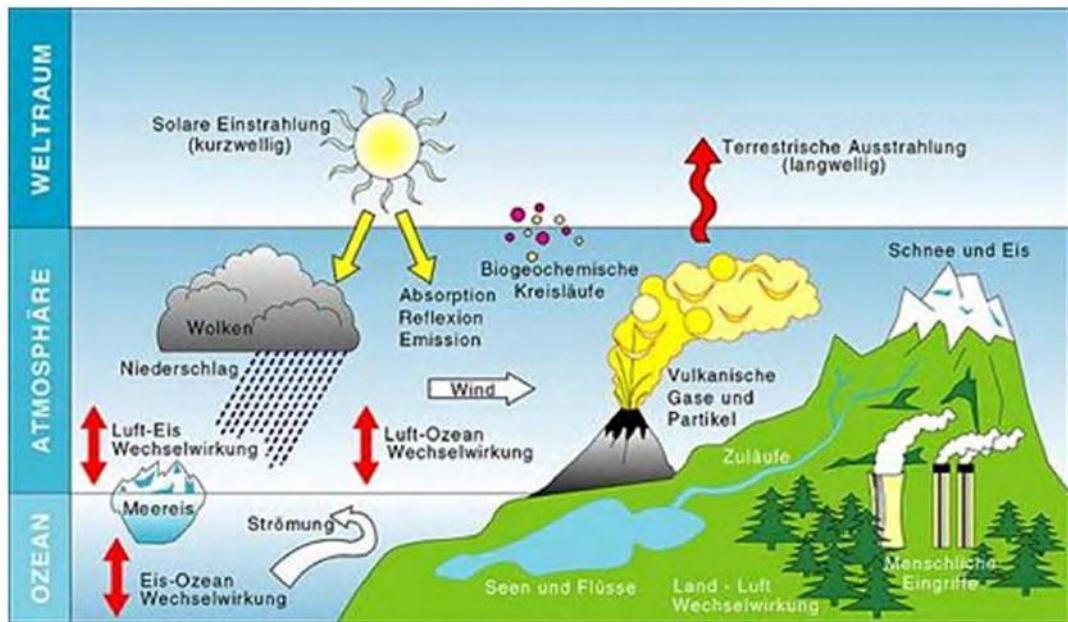
„Klima ist die Gesamtheit aller an einem Ort möglichen Wetterzustände, einschließlich ihrer typischen Aufeinanderfolge sowie ihrer tages- und jahreszeitlichen Schwankungen.“
(Wikipedia)

„Klima ist das 30-Jahres-Mittel des Wetters“ – mithin ein mathematisches Konstrukt

Wetter- und Klimasimulationen im Computer

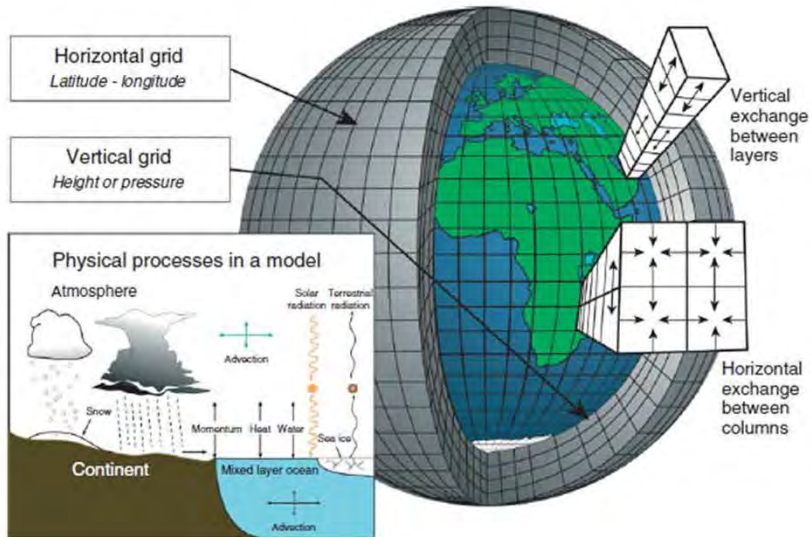
- Erste Wettersimulationen 1950
 - Charney, Fjørtoft, von Neumann
 - Erste rechnergestützte 24-Stunden-Wetterprognose
 - Auf einem der ersten Rechner, der ENIAC
 - NWP – numerical weather prediction
- Erste Klimasimulation 1956
 - Princeton Institute for Advanced Studies
 - Realistische monatliche und saisonale Strukturen
 - 2 Schichten, 17x16 Gitterpunkte
 - Computer: 1KB Hauptspeicher, 2 KB Magnetspeicher
 - GCM – global circulation model

Komponenten im Klimasystem

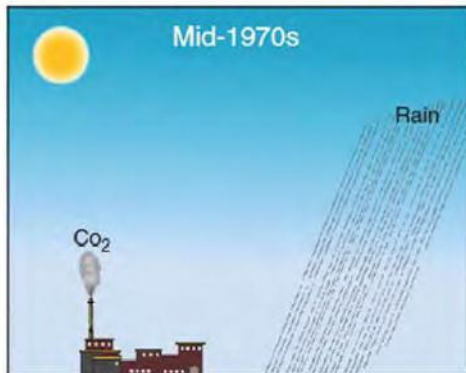


Numerischer Ansatz

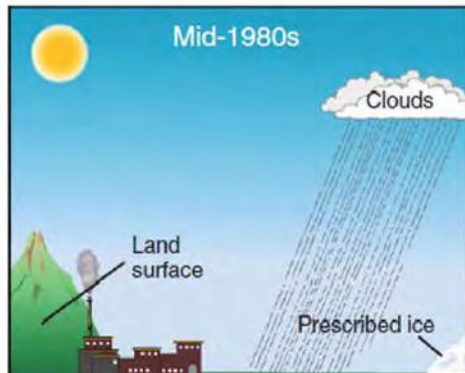
- Diskretisierung des Raumes: Einteilung in Gitterzellen
- Diskretisierung der Zeit: feste Schritte der simulierten Zeit
- Halbierung des Gitterabstandes erfordert auch Halbierung des Zeitschrittes
- Erfordert 16-fache Rechnerleistung !!



Evolution der Klimamodelle

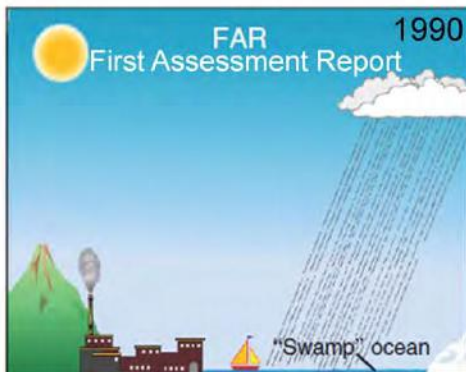


- Auflösungen:
Horizontal 5°
Vertikal 12 Schichten

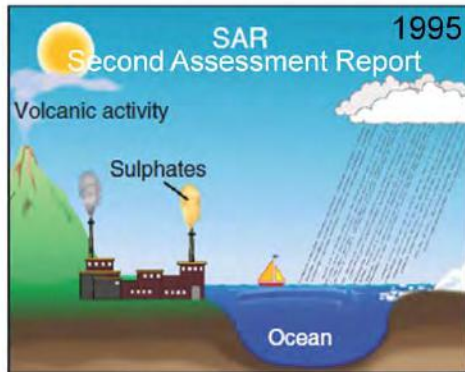


- Auflösungen:
Horizontal ~5°
Vertikal 16 Schichten

Evolution der Klimamodelle (2) (IPCC)

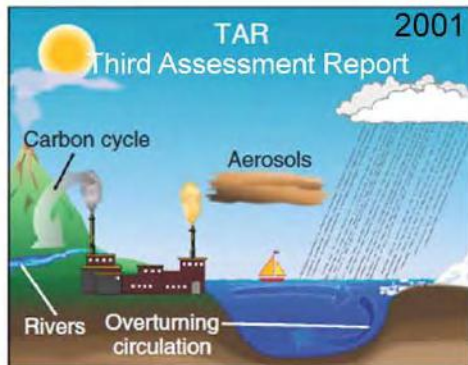


- Auflösungen:
Horizontal 200-1000 km
Vertikal 2-20 Schichten
- Berechnung bis zu 10 000 Jahre

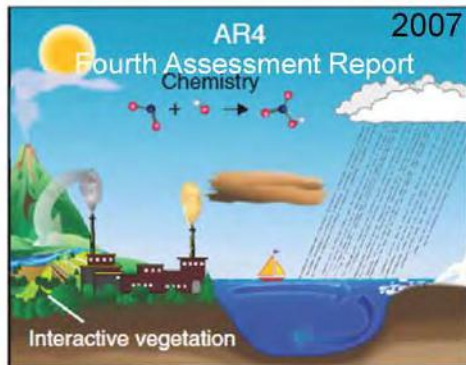


- Auflösungen:
Horizontal: 250 km
Vertikal 1 km

Evolution der Klimamodelle (3) (IPCC)

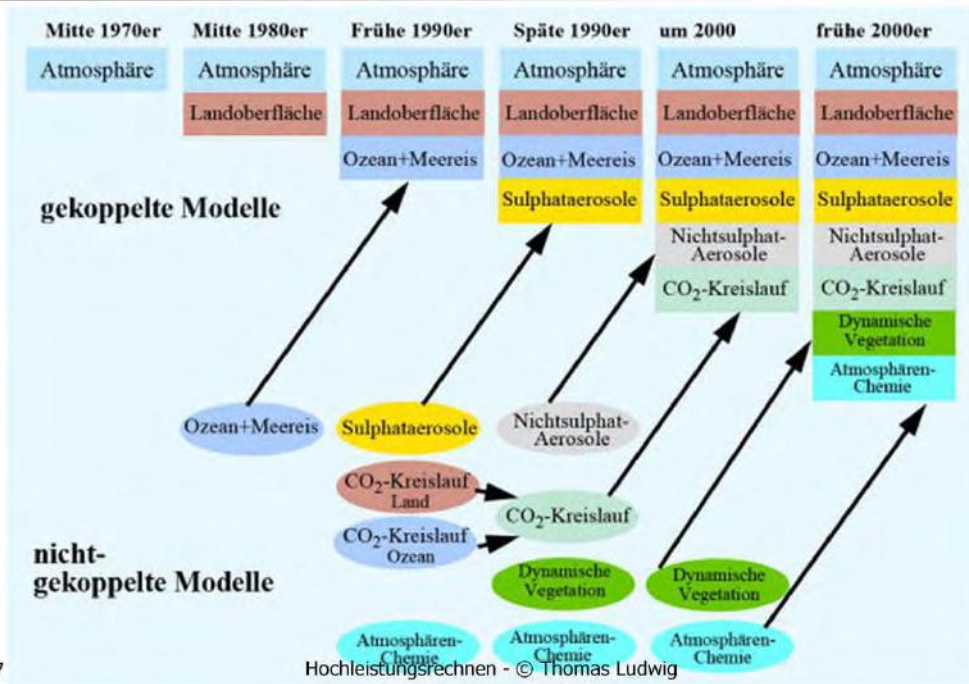


- Auflösungen:
Horizontal 140 km



- Auflösungen
Horizontal: 110 km
Vertikal 60 Schichten
je 30 Ozean und Atmosphäre

Prozesse im Klimamodell



Datenaufkommen bei IPCC-AR

CMIP – Coupled Model Intercomparison Project

- CMIP3 / IPCC-AR4 (Report (2007))
 - 17 beteiligte Zentren mit 25 Klimamodellen
 - Insgesamt 36 TB Modelldaten, ½ TB bei IPCC/DDC
- CMIP5 / IPCC-AR5 (Report 2013/14)
 - 29 beteiligte Gruppen mit 61 Modellen
 - Produzierte Datenmenge: ca. 10 PB, davon 640 TB aus HH
 - Datenvolumen IPCC/DDC: 1,6 PB
- Status CMIP5-Daten in gemeinsamen Archiven
 - 2,3 PB für 69.000 Datensätze in 4,3 Mio. Dateien in 23 Datenknoten
 - CMIP5 ist mehr als 50mal umfangreicher als CMIP3

Extrapolation CMIP6: 150 PB in 280 Mio. Dateien



Neueste Entwicklungen: HP(CP)²-Projekt

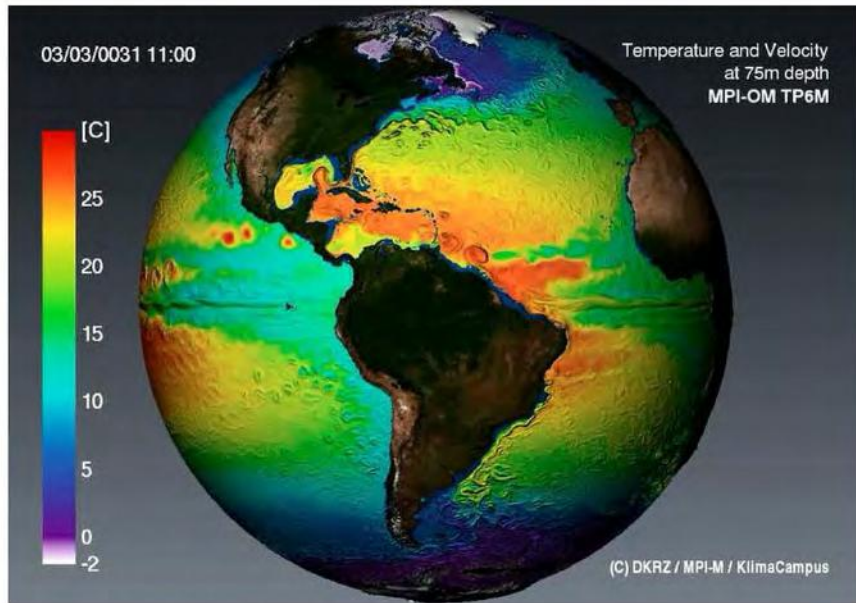
- High Definition Clouds and Precipitation for advancing climate Prediction
 - Gefördert vom BMBF
- Endlich Cloud-Computing ☺
 - Wolken werden berechnet, nicht mehr parametrisiert
- Auflösung auf bis zu 100m Gitterweite in einer Berechnungsbereich von 1000 x 1000 km
- 10⁸ Gitterpunkte horizontal [globale Gitterweite von etwa 2,2 km]
- Bedarf sehr hoher Rechen- und Speicherleistung

Neueste Entwicklungen: HP(CP)²-Projekt...



Ergebnisvisualisierung

- Visualisierungen in 2D und 3D von sehr großen Datenmengen
- Am liebsten auch während des Programmlaufs



3. Rechner- und Speicherinfrastruktur

Deutsches Klimarechenzentrum GmbH (DKRZ)

- Gegründet 1987 als nationale Einrichtung
- Betrieben von 4 Gesellschaftern:
 - MPG (55%), FHH/UHH (27%), HZG, AWI
- Ca. 70 Mitarbeiter

Rechner- und Speicherinfrastruktur

- Alle ca. 5 Jahre mit externer Finanzierung (BMBF, HGF)

Leitbild

DKZR – Partner der Klimaforschung

**Höchste Rechenleistung.
Ausgereiftes Datenmanagement.
Kompetenter Service.**

Vision

**Das DKRZ erschließt der Klimaforschung verlässlich
das Potenzial des sich beschleunigenden technischen
Fortschritts.**



29 Jahre DKRZ (1987-2016)

Erster Computer: Control Data Cyber-205

- 1 Prozessor, 200 MFLOPS, 32 MB Hauptspeicher
- 2.5 GB Festplatten, 100 GB Bandarchiv

200 MFLOPS hat ein modernes Smartphone

Aktuelle Maschine: Bull/Atos (HLRE-3)

- 100.000+ Prozessorkerne, 3,6 PFLOPS, 240 TB Hauptspeicher
- 54 PB Festplatten, 300-500 PB Kapazität im Bandarchiv

TOP500-Liste: Faktor 1.000 alle 12,5 Jahre

Abgeschaltetes Rechnersystem Blizzard

- IBM Power6, installiert 2009
- Spitzenleistung: 158 TFLOPS, Linpack 115 TFLOPS
- 264 IBM Power6-Rechnerknoten (dualcore, 16-socket)
- 8.448 Prozessorkerne
- Über 26 TB Hauptspeicher – 6+ PB auf Platten

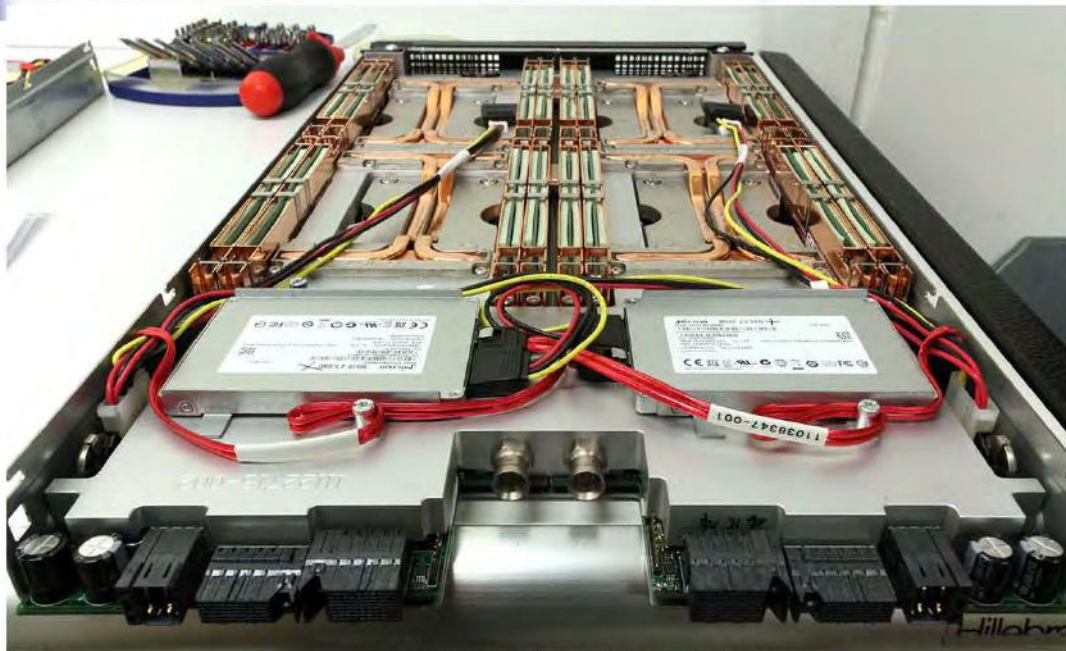


Neues Rechnersystem Mistral

- bullx B700 DLC, installiert 2015
- Spitzenleistung: ca. 3,6 PFLOPS
- Ca. 3.000 Dualsocket-Rechnerknoten
- Intel Haswell (12-core) und Broadwell (18-core)
- Ca. 100.000 Prozessorkerne
- Über 240 TB Hauptspeicher – 54 PB auf Platten



Doppel-Rechnerknoten



Aktuelles Bandarchiv

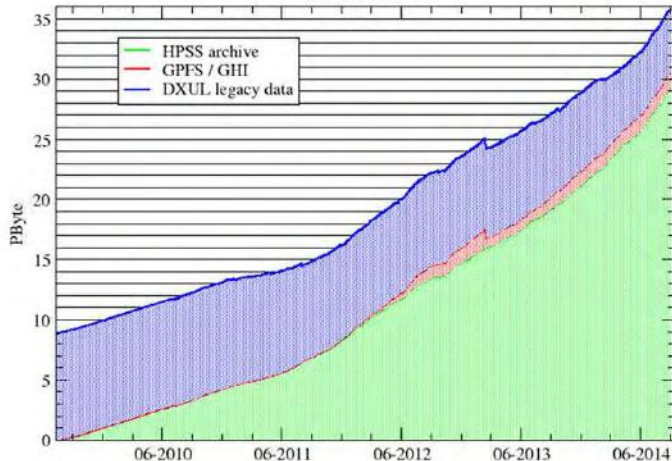
- 7 Sun StorageTek SL8500 Bandbibliotheken
- 67.000+ Stellplätze für Bänder (+10.000 in Garching)
- Ca. 80 Bandlaufwerke
- 130 PB Kapazität mit LTO6-Bändern (ca. 40 PB belegt)



Aktuell ca. 8 PB/Jahr

DKRZ tape archive

total data in HPSS



Ausbau von HLRE-2 zu HLRE-3

Charakteristikum	2009	2015	Faktor
Leistung	150 TFLOPS	3,6 PFLOPS	24x
Rechnerknoten	264	3.000	12x
Hauptspeicher	20 TB	240 TB	12x
Festplattenkapazität	6 PB	54 PB	9x
Durchsatz Hauptspeicher-Festplatten	30 GB/s	400 GB/s	13x
Kapazität Bandbibliothek (2015, 2020)	120 PB	360 PB	3x
Durchsatz Festplatten-Bandbibliothek	10 GB/s	20 GB/s	2x
Leistungsaufnahme (mit Kühlung)	1.6 MW	1.4 MW	0.9x
Investitionskosten	30M€	35M€	1,2x



Dienste am DKRZ

- Abteilung Anwendungen
 - Fehlersuche in parallelen Programmen
 - Leistungsanalyse und -optimierung
 - Verbesserung der Datenein-/ausgabe
 - Verbesserung der Skalierung der Programme
 - Evaluierung neuer HW-Konzepte (z.B. Grafikkarten)
 - Visualisierung
- Abteilung Datenmanagement
 - Qualitätssicherung der Daten
 - Zuteilung von dauerhaften IDs zu Datensätzen
 - Langzeitarchivierung
 - World Data Center Climate (Datenbereitstellung für Dritte)
- Abteilung Systeme
 - Unterstützung Betrieb Hochleistungsrechner und Archiv
 - Evaluierung und Betrieb neuer Speicherkonzepte (z.B. Cloud-Storage)
 - Unterstützung reguläre IT im DKRZ



4. Themengebiete der Informatik

Denkbar sind speziell Ausrichtungen auf Klimaforschung bei

- Hardware
- Software
- Brainware (auch Peopleware, Wetware)

- HW (Prozessoren, Rechner) und Klimaforschung
 - Spezielle Anpassungen für die Numerik der Klimaforschung sind denkbar
 - Allerdings: es gibt keinen Markt, also wird auch kein Hersteller so etwas gezielt bauen
- Programmierbare Spezialprozessoren (FPGAs)
 - Möglich, aber insgesamt zu kompliziert und zu kostspielig

Software – von höchster Bedeutung!

Problemfelder bei Klimaforschung

- Code ist nie abgeschlossen
- Vorhandene Codebasis ist riesig: 20+ Jahre Entwicklung
- Fortran ☺
- Effiziente Datenein-/ausgabe ist nur bedingt erzielt
- Effizienzausbeute des Prozessors begrenzt
- Skalierbarkeit der Modelle kompliziert
- Modellkopplung komplex, endet in Mehrprogrammcode
- Visualisierung zunehmend schwierig
- Datenmanagement noch nicht gelöst

Software – wo sind Lösungen ?

- Softwaretechnik, Softwareengineering
 - Wenige Ansätze für diesen Typ Software: Scientific SW
- Betriebssystemtechnik
 - Kaum Lehre zu Eingabe/Ausgabe, parallel E/A kaum beachtet
- Programmierung komplex
 - Wo sind gute Compiler, Bibliotheken, Programmiermodelle
- Datenmanagement als Thema in der Lehre existiert nicht
 - Trotz dem Aufkommen von Big Data!

Brainware

- Hohe Investitionen in Hardware (schön! 😊)
- Aber
 - Nicht effizient nutzbare Hardware ist verschwendetes Geld
- Stattdessen
 - Angemessene Anteile in Personal investieren
 - Ausbildung in Bereichen wie z.B. Programmierung, Fehlersuche, Leistungsoptimierung
 - Könnte wissenschaftliche Produktivität mit dem Rechnersystem erhöhen



5. Herausforderungen

- Der technische Fortschritt in der Hardware der Informationssysteme hat ein exponentielles Wachstum
- Sowohl Informatiker als auch Nutzer müssen sich ständig mit neuen Konzepten befassen
- Auseinanderlaufen der Kompetenzen durch fehlende institutionalisierte Zusammenarbeit
- Erfolg und Wettbewerbsfähigkeit der HPC-nutzenden Wissenschaften hängt an der optimalen Ressourcennutzung der Systeme

Besondere Teilprobleme für Klimaforschung

- Rechenleistung und Hauptspeicherausbau wächst viel schneller an als Speicherkapazität der Platten und die Zugriffsgeschwindigkeit
 - Es wird schwieriger, balancierte Systeme zu betreiben
 - Klimaforschung benötigt aber viele Speicherressourcen
- Die Anzahl der Prozessorkerne wächst sehr schnell an
 - Es wird schwieriger, die Systeme in vollem Umfang effizient zu nutzen
 - Klimaforschung hat aber sehr langlaufende Modelle

Klimaforschung und Hochleistungsrechnen

Zusammenfassung

- Durchführbare Forschung steht in engem Zusammenhang zu vorhandenen Ressourcen an Hardware – Software – Brainware
- In den vergangenen Jahrzehnten konnten Fortschritte in Hardware ohne komplexe Anpassungen direkt genutzt werden – dies ist aktuell nicht möglich
 - Folge: nur hoher Aufwand für die Software sichert weitere Fortschritte
- Das Softwareproblem ist nur durch intensives interdisziplinäres Arbeiten zu bewältigen

Klimaforschung und Hochleistungsrechnen

Die wichtigsten Fragen

- Welche Wege der Erkenntnisgewinnung kennen wir in der modernen Wissenschaft?
- Welche allgemeinen Probleme sehen Sie bei der numerischen Simulation von Systemen?
- Welchem Ansatz folgt die numerische Simulation in der Klimaforschung?
- Welche Evolution sieht man in der rechnergestützten Klimamodellierung?
- Welche typischen Probleme beim Umgang mit Software bei der Klimamodellierung kennen Sie?
- Welche künftigen Herausforderungen sehen Sie bei der Klimasimulation?