

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

TIME-X – Partner TUM

Teil I: Kurzbericht

Aufgabenstellung

Rechnergestützte Simulationen erlauben es, Rückschlüsse auf reale Anwendungen zu ziehen. Oft stellt allerdings trotz diverser Optimierungen die limitierte Parallelisierbarkeit eine der größten Herausforderungen für hohe Skalierbarkeit dar. Um diese zu überwinden, bedarf es neuer & disruptiver Algorithmen.

Das Ziel von dem Time-X Projekt ist die Entwicklung solcher Algorithmen für zeitabhängige Simulationen, die bisher aufgrund ihres immensen Rechenaufwandes nicht in einem angemessenen Zeitrahmen durchführbar waren. Diese Form der Parallelisierung der Lösung zeitabhängiger Probleme ist ein notwendiger Schritt, um die Rechenkraft zukünftiger Höchstleistungsrechner im und jenseits des Exascale Bereichs effizient für modellbasierte Vorhersagen nutzen zu können.

Die deutschen Partner im Projekt TIME-X sollten sowohl zur Entwicklung der mathematischen und technischen Grundlagen neuer zeitparalleler Algorithmen für Höchstleistungsrechner als auch zu deren Umsetzung für Anwendungen in den Bereichen der Wettervorhersage, E-Mobilität und Teilchenbeschleunigung beitragen.

Ablauf des Vorhabens

Die Realisierung der Projektziele erfolgte in Form von drei wissenschaftlichen (WP2 HPC & Implementation, WP3 Algorithms, WP4 Applications) und zwei administrativen Arbeitspaketen (WP1 Management, WP5 Impact).

Time-X war ein relativ großes Projekt mit ehrgeizigen interdisziplinären Zielen gewesen, was eine geeignete Managementstruktur erforderte.

Um ein synergetisches Umfeld zu schaffen, hat das Konsortium seine Managementstruktur auf die DESCAs-Vorlage gestützt, die Leitlinien für ein effizientes Forschungsmanagement enthält.

In Time-X wurden die folgenden Konsortialgremien einrichten:

- das Steering Committee, bestehend aus einem Mitglied pro Partnereinrichtung;
- das Scientific Executive Board, bestehend aus dem wissenschaftlichen Leiter und den Leitern der Arbeitspaket;
- das Projektmanagement-Team, bestehend aus dem Koordinator und einem Management-Support-Team.

Das Konsortium wurde zudem von zwei Beiräten unterstützt: einem industriellen und einem wissenschaftlichen Beirat.

Wesentliche Ergebnisse

Der Fokus der Arbeiten an der TUM lagen auf der Einführung, Optimierung, Evaluierung und Nutzung von Verfahren zur dynamischen Adaption in PinT Methoden. Dabei wurden Programmiermodelle erweitert und in Parallel-in-time Methoden integriert.

Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die Projektpartner haben umfangreich mit großen Teilen der internationalen PinT-Community und darüber hinaus kooperiert.

Dies ist in gemeinsamen Publikationen und Software-Releases, aber auch in thematisch verwandten Projekten umgesetzt worden.

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

TIME-X – Partner TUM

Teil II: Eingehende Darstellung

Kontext

Jüngste Erfolge haben das Potenzial der **parallel-in-time-Integration** (PinT) als leistungsstarkes algorithmisches Paradigma zur Freisetzung der Leistung von Exascale-Systemen unter Beweis gestellt. Diese Erfolge wurden jedoch hauptsächlich in einem eher akademischen Umfeld ohne übergreifendes Verständnis erzielt. TIME-X ist der nächste Schritt in der Entwicklung und Umsetzung dieses vielversprechenden neuen Ansatzes für die massiv parallele HPC-Simulation und ermöglicht durch seine Arbeiten eine effiziente parallel-in-time-Integration für reale Anwendungen. Wir haben dabei folgendes erreicht:

1. **Bereitstellung von Software** für die Parallel-in-Time-Integration auf aktuellen und zukünftigen Exascale-HPC-Architekturen, wodurch erhebliche Verbesserungen bei der parallelen Skalierung erzielt;
2. **Entwicklung neuartiger algorithmischer Konzepte** für die Parallel-in-Time-Integration, Vertiefung unseres mathematischen Verständnisses ihres Konvergenzverhaltens und Einbeziehung von Fortschritten in der Multiskalenmethodik;
3. **Nachweis der Auswirkungen** der Parallel-in-Time-Integration, indem das Potenzial für Probleme aufgezeigt wird, die bisher nicht mit voller paralleler Effizienz in **drei verschiedenen und anspruchsvollen Anwendungsbereichen** mit hoher gesellschaftlicher Wirkung bewältigt werden können: Wetter und Klima, Medizin und Fusion.

Erfolge, allgemein

Der Projektantrag definierte sieben (nicht-wissenschaftliche) Meilensteine, die alle erreicht wurden:

- M1: Kick-off Meeting (Nachweis: Treffen hat stattgefunden)
- M2: Zusammensetzung der Konsortialgremien und der Beiräte (Nachweis: Genehmigt)
- M3: Sitzungen des Scientific Executive Board (Nachweis: Protokolle)
- M4: Rekrutierung (Nachweis: eingestellte wissenschaftliche Mitarbeitende)
- M5: Jährliche Treffen mit Konsortialgremien, wissenschaftlichen und industriellen Beiräten (Nachweis: Sitzungsprotokolle)
- M6: Ausbildungsveranstaltungen für Forschende im Konsortium (Nachweis: protokollierte Teilnahmen)
- M7: Multiplikatoren-Workshops für Stakeholder (Nachweis: Stattgefundene Workshops)

Darüber hinaus wurden, ebenfalls wie im Antrag versprochen, Berichte zu den folgenden 15 Deliverables verfasst. Diese wurden durch die EU geprüft und über die Projektwebsite zur Verfügung gestellt:

- D1.1: Consortium Agreement
- D5.1: Training plan, continuously updated
- D1.2: Progress journal, continuously updated
- D5.2: Dissemination plan, continuously updated
- D5.3: Exploitation plan, continuously updated
- D1.3: Data Management plan, continuously updated
- D1.4: TIME-X Project website
- D5.4: Scientific papers
- D3.1: Proof of concept software for algorithms
- D2.1: Open-source HPC software libraries
- D2.2: MPI adaptive PinT extensions
- D4.1: Application software
- D5.5: Valorisation website
- D5.6: Tutorials, demos, showcases
- D1.5: Strategic Research Agenda

Erfolge, spezifisch für TUM

Wissenschaftliche Ziele wurden im ursprünglichen Antrag nicht als Milestones oder Deliverables formalisiert. Nichtsdestotrotz konnten alle zu untersuchenden Forschungsfragen beim Partner TUM abgeschlossen und Ergebnisse durch Publikationen belegt werden. Das betrifft insbesondere folgende Aufgaben ('tasks' im Antrag):

T2.2: Realisierung von adaptivem PinT:

Diese Aufgabe untersuchte die Realisierung der in T2.1 hauptsächlich untersuchten adaptiven Strategien, die lauffzeitvariable Rechenressourcen erfordern.

Hierzu wurde eine Lösung gemeinsam mit der MPI Session working group erarbeitet welche dynamische Ressourcennutzung auch jenseits von diesem Projekt ermöglicht

- Dominik Huber, Maximilian Streubel, Isaías Comprés, Martin Schulz, Martin Schreiber, and Howard Pritchard. Towards Dynamic Resource Management with MPI Sessions and PMIx. In EuroMPI/USA'22: 29th European MPI Users' Group Meeting, 57–67 (ACM, Chattanooga TN USA, 2022)
- Dominik Huber, Martin Schreiber, and Martin Schulz. A Case Study on PMIx-usage for Dynamic Resource Management. In International Conference on High Performance Computing, Lecture Notes in Computer Science (Springer, Hamburg, 2023)
- Dominik Huber, Hans-Joachim Bungartz, Jan Fecht, Keerthi Gaddameedi, Martin Schreiber, Martin Schulz, Tobias Neckel, and Valentina Schüller. PFASST with dynamic resource management for large-scale applications (2023), Poster at 12th Workshop on Parallel-in-Time Integration

- Dominik Huber, Martin Schreiber, Martin Schulz, Howard Pritchard, and Daniel Holmes. Design Principles of Dynamic Resource Management for High-Performance Parallel Programming Models (2024), ArXiv:2403.17107

T4.4: Wetter und Klima

Im Rahmen dieses Antrages wurde an der Verbesserung der Effizienz von iterativen PinT-Methoden wie PFASST und Parareal gearbeitet um diese auf Wetter und Klimasimulationen anzuwenden.

Insbesondere wurden die in T2.2 geschaffenen Schnittstellen verwendet um die Anzahl der adaptiv gewählten spekulativen Zeitschritte während der Laufzeit zu variieren um die genutzten Rechenressourcen mit PFASST zu optimieren

- Dominik Huber, Hans-Joachim Bungartz, Jan Fecht, Keerthi Gaddameedi, Martin Schreiber, Martin Schulz, Tobias Neckel, and Valentina Schüller. PFASST with dynamic resource management for large-scale applications (2023), Poster at 12th Workshop on Parallel-in-Time Integration
- Jan Fecht, Martin Schreiber, Martin Schulz, and Howard Pritchard. An Emulation Layer for Dynamic Resources with MPI Sessions. In High Performance Computing. ISC High Performance 2022 International Workshops, 147–161 (Springer International Publishing, 2023).

T5.3: Interaktion mit anderen

Dieser Task diente dazu, dass das Projekt effektiv mit den europäischen und internationalen Exascale-Initiativen zusammenarbeitet. Das Hauptaugenmerk wurde hierbei aufgrund der Erfolgsaussichten auf zwei Schwerpunkte gelegt:

Zum einen gab und gibt es eine gemeinsame Anstrengungen mit Barcelona Supercomputing Center (BSC) um einen gemeinsamen Software Stack für dynamische Ressourcen aufzubauen (paper befindet sich in review).

Zum anderen gab es eine Kollaboration diverser EU Projekte bezüglich eines state-of-the-art Paper über dynamische Ressourcen.

- Ahmad Tarraf, Martin Schreiber, Alberto Cascajo, Jean-Baptiste Besnard, Marc-André Vef, Dominik Huber, Sonja Happ, André Brinkmann, David E. Singh, Hans-Christian Hoppe, Alberto Miranda, Antonio J. Peña, Rui Machado, Marta Garcia-Gasulla, Martin Schulz, Paul Carpenter, Simon Pickartz, Tiberiu Rotaru, Sergio Iserte, Victor Lopez, Jorge Ejarque, Heena Sirwani, Jesus Carretero, and Felix Wolf. Malleability in Modern HPC Systems: Current Experiences, Challenges, and Future Opportunities. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems 35, 1551–1564 (2024)

Details

Die detaillierten Erfolge des Projektes sind in folgenden EuroHPC Deliverables dokumentiert:

- Application Software, Final Update
- Final Progress Report WP2

- Final Progress Report WP3
- Final Progress Report WP4
- Final Training Plan
- Final Dissemination Plan
- Final Data Management Plan

Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Gesamtausgaben TUM im Projekt

- Ausgaben Personal E13: 224K Euro (geplant 203 Euro)
- Ausgaben Personal HiWi: 6K Euro (geplant 17K Euro)
- Ausgaben Reisen: 21K Euro (geplant 18K Euro)
- Ausgaben Hardware: 3K Euro (geplant 3K Euro)

Bundesanteil

- Ohne Pauschale: 122K Euro
- Mit Pauschale: 139K Euro

Verwertungsplan

Parallelisierung in der Zeit ist als eine der notwendigen Schlüsseltechnologien anerkannt, die es ermöglicht, Exascale-Computer für numerische Simulationen umfänglich zu nutzen. TIME-X hat somit große Auswirkungen auf die deutsche und europäische Exascale- Technologie, auch und v.a. über das Projektende hinaus. Mit der Zeitparallelisierung als wichtigem Baustein für Exascale-fähige Simulationen sind die Erfolgsaussichten im Bereich der Simulationswissenschaften immens.

Speziell für die Arbeiten an der TUM, wird ein dynamisches Ressourcenmanagement zur Unterstützung von adaptiven PinT Algorithmen wird zu signifikanten Änderungen im MPI Standard führen welcher der Standard für Kommunikation auf Höchstleistungsrechnern darstellt. Erforderliche Änderungen und Erweiterungen des Standards wurden hierzu im Rahmen von TIME-X umgesetzt. Es ist geplant, dies im MPI Forum vorzuschlagen um dies in den offiziellen MPI Standard zu übernehmen. Dies wird nicht nur zu einer verbesserten Ressourcennutzung auf Höchstleistungsrechnern für PinT Algorithmen führen, sondern wird auch andere Applikationen unterstützen welche Vorteile aus einem dynamischen Ressourcenmanagement ziehen können.

Veröffentlichungen

- J. Fecht, M. Schreiber, M. Schulz, H. Pritchard, D.J. Holmes (2022). "An Emulation Layer for Dynamic Resources with MPI Sessions", HPCMALL workshop at ISC 2022.
- D. Huber, M. Streubel, I. Comprés, M. Schulz, M. Schreiber, H. Pritchard (2022). "Towards Dynamic Resource Management with MPI Sessions and PMIx", ACM.
- D. Huber, M. Schreiber, M. Schulz (2023) "A Case Study on PMIx-usage for Dynamic Resource Management", 38th International Conference, ISC High Performance 2023, HPCMALL workshop at ISC 2023

- A. Tarraf et al. “Malleability in Modern HPC Systems: Experiences, Challenges, and Future Opportunities” (under review)
- D. Huber, M.Schreiber, H. Pritchard, D.J. Holmes (2024) “Design Principles of Dynamic Resource Management for High-Performance Parallel Programming Models” (submitted at EuroPar 2024)
- P. Freese, S. Götschel, T. Lunet, D. Ruprecht, M. Schreiber, Parallel performance of shared memory parallel spectral deferred corrections, arXiv:2403.20135 [cs.CE].
- D. Huber, S. Iserte, M. Schreiber, K. Gaddameedi, J. Fecht, M. Corumlu, J. Grimm, V. Schüller, A. Pena, H. Bungartz, M. Schulz, T. Neckel “Dynamic Resource Management in HPC Systems using Dynamic Processes with PSets” (Paper on Dynamic Resource Management and Shallow Water Equation, currently in progress)

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

TIME-X – Partner TUM

Teil III: Erfolgskontrollbericht

Wissenschaftlich-technische Ergebnis des Vorhabens

TUM war an folgenden Aufgaben ('tasks' im Antrag) beteiligt. Die Ergebnisse werden kurz skizziert:

T2.2: Realisierung von adaptivem PinT:

Diese Aufgabe untersuchte die Realisierung der in T2.1 hauptsächlich untersuchten adaptiven Strategien, die laufzeitvariable Rechenressourcen erfordern.

Hierzu wurde eine Lösung gemeinsam mit der MPI Session working group erarbeitet welche dynamische Ressourcennutzung auch jenseits von diesem Projekt ermöglicht.

- Dominik Huber, Maximilian Streubel, Isaías Comprés, Martin Schulz, Martin Schreiber, and Howard Pritchard. Towards Dynamic Resource Management with MPI Sessions and PMIx. In EuroMPI/USA'22: 29th European MPI Users' Group Meeting, 57–67 (ACM, Chattanooga TN USA, 2022)
- Dominik Huber, Martin Schreiber, and Martin Schulz. A Case Study on PMIx-usage for Dynamic Resource Management. In International Conference on High Performance Computing, Lecture Notes in Computer Science (Springer, Hamburg, 2023)
- Dominik Huber, Hans-Joachim Bungartz, Jan Fecht, Keerthi Gaddameedi, Martin Schreiber, Martin Schulz, Tobias Neckel, and Valentina Schüller. PFASST with dynamic resource management for large-scale applications (2023), Poster at 12th Workshop on Parallel-in-Time Integration
- Dominik Huber, Martin Schreiber, Martin Schulz, Howard Pritchard, and Daniel Holmes. Design Principles of Dynamic Resource Management for High-Performance Parallel Programming Models (2024), ArXiv:2403.17107
- Ahmad Tarraf, Martin Schreiber, Alberto Cascajo, Jean-Baptiste Besnard, Marc-André Vef, Dominik Huber, Sonja Happ, André Brinkmann, David E. Singh, Hans-Christian Hoppe, Alberto Miranda, Antonio J. Peña, Rui Machado, Marta Garcia-Gasulla, Martin Schulz, Paul Carpenter, Simon Pickartz, Tiberiu Rotaru, Sergio Iserte, Victor Lopez, Jorge Ejarque, Heena Sirwani, Jesus Carretero, and Felix Wolf. Malleability in Modern HPC Systems: Current Experiences, Challenges, and Future Opportunities. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems 35, 1551–1564 (2024)
- Jan Fecht, Martin Schreiber, Martin Schulz, and Howard Pritchard. An Emulation Layer for Dynamic Resources with MPI Sessions. In High Performance Computing. ISC High Performance 2022 International Workshops, 147–161 (Springer International Publishing, 2023).

T4.4: Wetter und Klima:

Im Rahmen dieses Antrages wurde an der Verbesserung der Effizienz von iterativen PinT-Methoden wie PFASST und Parareal gearbeitet um diese auf Wetter und Klimasimulationen anzuwenden.

Insbesondere wurden die in T2.2 geschaffenen Schnittstellen verwendet um die Anzahl der adaptiv gewählten spekulativen Zeitschritte während der Laufzeit zu variieren um die genutzten Rechenressourcen mit PFASST zu optimieren.

- Jan Fecht, Martin Schreiber, Martin Schulz, and Howard Pritchard. An Emulation Layer for Dynamic Resources with MPI Sessions. In High Performance Computing. ISC High Performance 2022 International Workshops, 147–161 (Springer International Publishing, 2023).
- Dominik Huber, Hans-Joachim Bungartz, Jan Fecht, Keerthi Gaddameedi, Martin Schreiber, Martin Schulz, Tobias Neckel, and Valentina Schüller. PFASST with dynamic resource management for large-scale applications (2023), Poster at 12th Workshop on Parallel-in-Time Integration

Des weiteren wurden neue Zeitintegrationsmethoden für Wetter und Klima entwickelt:

- João Guilherme Caldas Steinstraesser, Pedro da Silva Peixoto, and Martin Schreiber. Parallel-in-time integration of the shallow water equations on the rotating sphere using Parareal and MGRIT (2023). ArXiv:2306.09497 [cs, math].

T5.3: Interaktion mit anderen

Dieser Task diente dazu, dass das Projekt effektiv mit den europäischen und internationalen Exascale-Initiativen zusammenarbeitet.

Das Hauptaugenmerk wurde hierbei aufgrund der Erfolgsaussichten auf zwei Schwerpunkte gelegt:

Zum einen gab und gibt es eine gemeinsame Anstrengungen mit Barcelona Supercomputing Center (BSC) um einen gemeinsamen Software Stack für dynamische Ressourcen aufzubauen (paper befindet sich in review).

Zum anderen gab es eine Kollaboration diverser EU Projekte bezüglich eines state-of-the-art Paper über dynamische Ressourcen.

- Ahmad Tarraf, Martin Schreiber, Alberto Cascajo, Jean-Baptiste Besnard, Marc-André Vef, Dominik Huber, Sonja Happ, André Brinkmann, David E. Singh, Hans-Christian Hoppe, Alberto Miranda, Antonio J. Peña, Rui Machado, Marta Garcia-Gasulla, Martin Schulz, Paul Carpenter, Simon Pickartz, Tiberiu Rotaru, Sergio Iserte, Victor Lopez, Jorge Ejarque, Heena Sirwani, Jesus Carretero, and Felix Wolf. Malleability in Modern HPC Systems: Current Experiences, Challenges, and Future Opportunities. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems 35, 1551–1564 (2024)

Ein gemeinsames Repository wurde für zukünftige Zusammenarbeit geschaffen <https://gitlab.inria.fr/dynres>

Fortschreibung des Verwertungsplan

Die TUM hat keine direkten wirtschaftliche Verwertung geplant, wird aber im Rahmen von Folgeprojekten mit anderen Unternehmen kooperieren.

Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende

Einer der wichtigsten strategischen Erfolge von Time-X ist die Tatsache, dass es die europäischen Forschungsbemühungen zu PinT-Methoden vereint hat. Es besteht die Gefahr, dass die Kohärenz verloren geht, wenn alle Konsortialpartner letztendlich ohne viel Koordination auf lokale Finanzierung zurückgreifen würden. Aus diesem Grund haben wir eine strategische Forschungsagenda entwickelt, mit der alle Forschungsgruppen ihre langfristigen Forschungsziele festlegen können, um die nachhaltige Kohärenz der europäischen Forschungsbemühungen sicherzustellen (siehe Deliverable 11).

Arbeiten, die zu keiner Lösung geführt haben

n/a

Einhaltung der Zeitplanung

Die Zeitplanung musste teilweise umgestellt werden. Aufgrund von Mangel an Personal mussten Tasks etwas verspätet begonnen werden.

Dies hatte jedoch keine Auswirkungen auf die Endresultate, da statt einer 50% Besetzung eine Besetzung auf mind. 80% erfolgte.

Einhaltung der Ausgabenplanung

TUM konnte etwas mehr PMs ausgeben als vorgesehen, da mehr Nachwuchsforscher eingestellt wurden als vorgesehen.