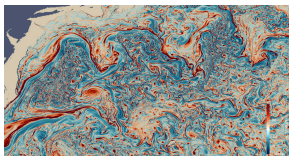


Kurzbericht

ExaOcean
Leistungsverbesserung des ICON-O Ozeanmodells auf heterogenen Exascale-Supercomputern mit Methoden des Maschinellen Lernens

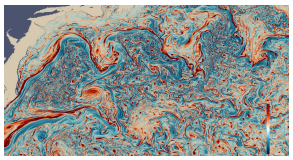
Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich Supercomputing Centre (JSC), Förderkennzeichen: 16ME0682, Laufzeit: 10/2022 – 09/2025,
Beteiligte: Y.-S. Lu, L. Hoffmann

1 Aufgabenstellung

Das Ziel von ExaOcean war es, den Durchsatz von sub-mesoskaligen Wirbeln auflösenden Simulationen mit dem ICON-O Ozeanmodell von 7 simulierten Tagen pro 24h Laufzeit auf mindestens 30 Tage pro 24 Laufzeit zu verbessern. Dies sollte durch zwei wesentliche methodische Neuerungen geschehen: Zum einen durch Entwicklung und Implementierung eines neuartigen parallelisierbaren Zeitschrittverfahrens und zum anderen durch die Adaption von „super-resolution“ Ansätzen aus der Nachbearbeitung von Daten für die dynamische Anwendung während der Simulation.

2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand

Zu Beginn des Projekts wurde in ICON-O standardmäßig ein implizit-explizites Adams-Bashforth-2 Mehrschrittverfahren benutzt. Dieses ist effizient und von zweiter Ordnung, benötigt aber aus Stabilitätsgründen relativ kleine Zeitschritte. Zur Parallelisierung verwendet ICON-O einen hybrid-Ansatz, welcher MPI-basierte Gebietszerlegung im Raum mit einer OpenMP-basierten Parallelisierung der Schleifen innerhalb jedes Teilgebiets kombiniert. Im Bereich der im Projekt anvisierten „parallel-across-the-method“ zeitparallelen Verfahren gab es zu Beginn von ExaOcean zwar verschiedene in der Literatur vorgeschlagene Varianten, allerdings litten diese im Vergleich zu ihren seriellen Gegenstücken unter langsamer Konvergenz und unklarer Anwendbarkeit auf Probleme mit komplexen Dynamiken.
Im Rahmen der Bildverarbeitung ist „super-resolution“ schon seit längerem ein etabliertes Forschungsfeld. Was die Anwendung vergleichbarer Techniken zur Verbesserung der Auflösung dynamischer Simulationen anging, gab es vor ExaOcean nur wenige Ergebnisse. Im Rahmen des Projekts wurde ein ursprünglich von Pathak et al. (https://arxiv.org/abs/2010.00072) vorgeschlagener Ansatz aufgegriffen und unter dem Namen „dynamic super-resolution“ (DSR) weiterentwickelt und in



ICON-O implementiert.

3 Planung und Ablauf

Die Realisierung der Projektziele erfolgte in Form von sieben wissenschaftlichen Arbeitspaketen. AP1 und AP5 entwickelten und verbesserten das zeitparallele Verfahren, AP2 den Ansatz zu DSR während AP3 beide Techniken zusammen in ICON-O implementierte. Für Arbeitspaket AP4 war ursprünglich die Entwicklung eines Ansatzes zum Online-Lernen der „dynamic super-resolution“ Korrektur geplant, diese konnte aber aufgrund von Zeitmangel nicht umgesetzt werden. Das Arbeitpaket AP6 zielte auf die Optimierung von ICON-O für heterogene Beschleunigerarchitekturen wie z.B. den neuen ExaScale Computer JUPITER am Forschungszentrum Jülich. Im Rahmen von AP7 leistete das Jülich Supercomputing Centre durchgehende Unterstützung in den Bereichen Portierung, Code Optimierung, Benchmarking and Continuous Integration.
Der neue Algorithmus und der Ansatz zur DSR konnten wie geplant entwickelt und in ICON-O integriert werden. Für den Testfall einer barotropen Instabilität konnte demonstriert werden, dass das neue Zeitschrittverfahren deutliche Geschwindigkeitsgewinne gegenüber dem vorher in ICON-O benutzten AB-2 Verfahrens liefert. Der Durchsatz konnte um circa einen Faktor zwei verbessert werden. Für eine barokline Instabilität wurde gezeigt, dass DSR es erlaubt, die Auflösung des benutzten Gitters um circa einen Faktor zwei zu vergröbern ohne an Genauigkeit zu verlieren. Aufgrund der noch nicht erfolgten Optimierung der Ausführung des dazu notwendigen neuronalen Netzes liegt der Zugewinn an Durchsatz bisher nur bei einem Faktor 1.5, wird aber durch Code-Optimierung noch deutlich gesteigert werden. Die Zusammenführung beider Ansätze für den Testfall der baroklinen Instabilität war im Rahmen des Projekts nicht mehr möglich, es ist hier aber insgesamt eine Verbesserung des Durchsatzes um einen Faktor von in etwa $2 \times 1.5 = 3$ zu erwarten.
Die Portierung von ICON-O auf JUPITER war erfolgreich und erste Skalierungstests auf JUPITER wurden durchgeführt.

4 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Partner an der Technischen Universität Hamburg (TUHH), dem Max-Planck Institut für Meteorologie (MPI-M), Deutschen Klimarechenzentrum (DKRZ) und Jülich Supercomputing Centre (JSC) haben im Rahmen von ExaOcean eng zusammengearbeitet.