

Hauptseminar Hochleistungsrechner: Aktuelle Trends und  
Entwicklungen  
Wintersemester 2015/2016  
**Anton 2: Ein Hochleistungsrechner für Simulationen in  
der Molekulardynamik**

Matthias Höschel  
Ludwig-Maximilians-Universität München

4.2.2016

## Zusammenfassung

Anton 2 ist ein Hochleistungsrechner, der wie sein Vorgänger Anton 1 speziell für den Bereich der Molekulardynamik konzipiert wurde [1]. Dabei wird das Zusammenspiel von Komponenten in biochemischen Systemen auf atomarer Ebene simuliert. So ist es möglich, das Verhalten von wichtigen und kritischen biochemischen Zusammenhängen noch genauer und schneller zu untersuchen und vorherzusagen. Das Problem bei einer solchen Simulation ist, dass innerhalb biologischer Systeme viele Vorgänge parallel stattfinden und dabei bis zu einige Millionen Atome involviert sind, die sich alle gegenseitig beeinflussen. Zu dieser Komplexität kommt noch erschwerend hinzu, dass diese Vorgänge im zeitlichen Rahmen von Millisekunden stattfinden [2,7,8]. Eine Rechnerarchitektur, die einen derartigen Prozess abbilden soll, muss in der Lage sein, im höchsten Grade parallele Berechnungen durchzuführen und das in praktikabler Zeit.

## 1 Einführung

Die Simulation von molekularen Zusammenhängen stellt eine komplexe Aufgabe dar und verlangt der eingesetzten Hardware Höchstleistungen ab. Die

Motivation hierbei ist, das Zusammenspiel von Atomen innerhalb einer biochemischen Struktur nach Newtonschen Gesetzen abzubilden und dementsprechend reproduzierbar verstehen zu können [7,8]. Deshalb geht es in dieser Arbeit darum, den Hochleistungsrechner Anton 2 hinsichtlich seiner Funktionalität zu untersuchen und seiner praktischen Anwendbarkeit zu analysieren. Die Arbeit ist folgendermaßen strukturiert: In der Einführung geht es einerseits darum, einen groben Überblick über die Problemstellungen in der Molekulardynamik zu bekommen und deren Komplexität einordnen zu können. Andererseits soll erklärt werden, wann Hardware für ganz bestimmte Zwecke gebaut wird und wie sie sich von Hardware, die für allgemeinere Anwendungen gebaut wird, unterscheidet. Im zweiten Abschnitt wird darauf eingegangen, wie man diese biochemischen Prozesse modellieren kann und wie sich Anforderungen für das zu entwickelnde System formulieren lassen. Dementsprechend wird im Anschluss daran erläutert, wie die Hardware Architektur von Anton 2 aufgebaut ist. Es wird dabei zuerst ein Performance Vergleich zum Vorgänger herangezogen und dann genauer auf die Teilkomponenten eingegangen. In Kapitel 4 wird diskutiert welche Anforderungen an die Software nötig sind und welche Kriterien für die Performanz eine beson-



Abbildung 1: Stellt die Außenansicht auf den Hochleistungsrechner Anton 2 dar. [3]

dere Rolle spielen. Nachdem dann die Grundlagen und die Architektur im weitesten Sinne erklärt wurden, soll durch die 5. Passage gezeigt werden, welche Leistung das System erbringt beziehungsweise erbringen kann. Dabei wird auch erklärt, wovon die Leistung abhängt und wo eventuell Schwachstellen zu finden sind. Im vorletzten Abschnitt wird anhand einiger Beispiele gezeigt, wie viel Energie das System verbraucht. Zu guter Letzt wird in Kapitel 7 ein allgemeines Fazit bezüglich der Thematik gezogen.

## 1.1 Molekulardynamik

Die Molekulardynamik ist eine Simulationsmethode, um Bewegungen und Interaktionen von Atomen und Molekülen darzustellen [7,8]. Dabei müssen für jedes Atom eines Biosystems verschiedene Berechnungsschritte durchgeführt werden, um die physikalischen Gesetzmäßigkeiten des Kraftfeldes abzubilden [7]. Innerhalb der Molekulardynamik bedarf es für die Modellierung dieses Sachverhaltes drei Komponenten [1,7,8]:

1. Bindungskräfte zwischen Atomen,
2. van der Waals Kräfte,
3. und elektrostatische Kräfte.

Anwendung findet diese Simulationsmethode insbesondere in der physikalischen Chemie, der Materi-

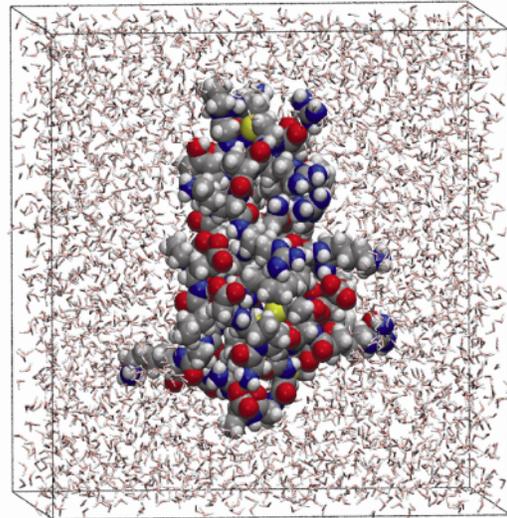


Abbildung 2: Simulation eines Proteins mit allen Atomen, durchgeführt mit Anton 1. [1]

alforschung und generell in der Modellierung von biochemischen Zusammenhängen [1]. Der Vorteil dieser Methode ist, Vorgänge auf mikroskopischer Ebene nachzubilden oder vorab zu simulieren so dass der Aufwand für Experimente reduziert werden kann. Ein Beispiel hierfür sind Untersuchungen von Flüssigkeiten innerhalb der Chemieindustrie. Dort müssen u.a. für Versuchsreihen bestimmte Drücke und Temperaturen eingehalten werden, die den realen wiederholten Versuchsaufwand sehr aufwendig machen [8]. Deshalb kann dieser Prozess mit Hilfe der Molekulardynamik wesentlich erleichtert werden. In Fig.2 ist beispielsweise ein Protein dargestellt, dass durch eine Simulation mit Anton 1 erstellt wurde.

Im Anschluss wird nun erklärt wie aus technischer Sicht der Sachverhalt der Molekulardynamik umgesetzt werden kann und welche Bauteile dazu notwendig werden.

## 1.2 ASIC

Ein ASIC (*application-specific Integrated Circuit*) ist ein elektronischer Schaltkreis, der für einen



Abbildung 3: Eine Draufsicht auf einen einzelnen ASIC Baustein der Anton 2 Architektur. [3]

ganz bestimmten Zweck konzipiert und gebaut wurde. Im Gegensatz zu Schaltkreisen, die für die Bewältigung allgemeiner Aufgaben gedacht sind, werden ASICs für bestimmten Zwecke, wie z.B. Durchsatz, Energieeffizienz oder Geschwindigkeit optimiert [5]. Im Falle von Anton 2 wurde dies dadurch erreicht, dass jeder ASIC Baustein über ein hochperformantes Netzwerk miteinander verbunden ist. Deshalb werden für jeden Schaltkreis 25 Prozent der Chipfläche für Spezialpipelines reserviert, die die Berechnung der Atominteraktionen beschleunigt [1]. Der genauere Aufbau wird im Kapitel Architekturabgehandelt. Mit Hilfe solcher spezifischer Schaltkreise ist es nun also möglich bestimmte Berechnungen schneller durchzuführen. Damit dies auch softwaretechnisch funktioniert, soll der nächste Abschnitt aufzeigen, dass die Modellierung einen nicht unerheblichen Teil zur Performanz beiträgt.

### 1.3 Modellierung

In dieser Sektion geht es darum, wie man Konzepte der Molekulardynamik auf einem Hochleistungssystem abbildet. Beim Anton 2 Computer wurde

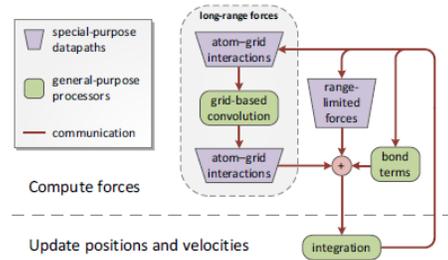


Abbildung 4: Datenfluss bei Anton 2. [1]

prinzipiell zwischen zwei Arten von Abhängigkeiten bei Atomen unterschieden. Einerseits gibt es direkt wirkende gebundene Kräfte (*bond forces*) innerhalb einer kleinen Gruppe von Atomen und nicht gebundenen Kräfte (*non-bonded forces*), die für bei den restlichen Atome wirken [1]. Diese Unterteilung ist für die effiziente parallele Arbeitsteilung der verschiedenen Recheneinheiten immens wichtig [1]. Das dementsprechende Datenmodell ist in Fig.4 zu sehen.

Um einen noch genaueren Einblick und ein Verständnis zu den Berechnungen bei der Simulation zu bekommen, kann man sich folgende vier Phasen vorstellen:

1. Atompositionen von FLEX zu HTIS senden,
2. Interaktionen innerhalb des PPIM berechnen,
3. Resultate der Kräfteberechnungen von HTIS zu FLEX schicken und
4. alle Atompositionen und Bewegungen zusammenfassen und auswerten [1].

Prinzipiell hängt die Performanz des Systems sehr stark von der Modellierung und der dementsprechenden Umsetzung in der Software ab [11]. Als Beispiel kann man die Berechnung und Kommunikation bei Anton 1 und Anton 2 heranziehen. In Anton 1 waren alle vier Phasen sequentiell von einander abhängig. Es war prinzipiell keine Überlappung möglich [1,2]. In Anton 2 hingegen ist dies erlaubt. Im Detail bedeutet das, dass schon während der

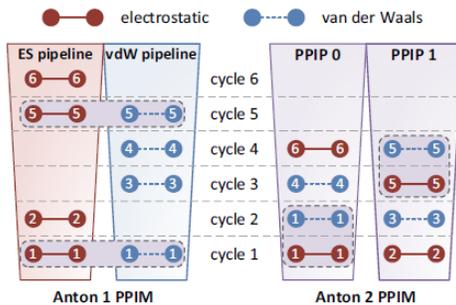


Abbildung 5: Darstellung der unterschiedlichen Zyklen bei Anton 1 und Anton 2 [1].

Kommunikation der Atompositionen, die ersten Interaktionen berechnet werden und somit Phase zwei parallel zu laufen anfängt. Dies bringt einen erheblichen Vorteil gegen über der ersten Variante von Anton, da so Berechnungszyklen gespart werden können [1,2]. Dieser Zusammenhang ist in Fig.5 gut zu erkennen.

Ein weiterer Aspekt ist die Darstellung des zu lösenden Problems als Graph. Mit einher geht dabei der Aspekt der Topologischen IDs, die u.a. auch mit dafür verantwortlich sind, dass die Berechnungsgeschwindigkeit erhöht und unnötigen Zyklen eliminiert werden. Für ein genaueres Verständnis dieser Optimierungsmaßnahmen wird an dieser Stelle das Unterkapitel "Topological IDs" von Shaw et al Arbeit [1] empfohlen.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die oben genannten Modellierungskonzepte sowie deren Umsetzung in Form von fein abgestimmten Algorithmen einen erheblichen Anteil an der parallelen Verarbeitungsgeschwindigkeit von Anton 2 haben [1]. Die genauere Untersuchung der Leistungsfähigkeit sowie der Vergleich zu gleichartigen Systemen wird im späteren Kapitel "Leistungsfähigkeit" detailliert beschrieben.

## 2 Systemanforderungen

Aus der Komplexität von biochemischen Systemen ergeben sich einige Anforderungen an das Simulationssystem. So bestehen interessante zu untersuchende Lebensformen aus 10 Tausenden bis zu mehreren Millionen Atomen. Weiterhin müssen für alle Atome die Kräfte berechnet werden, die sie gleichzeitig innerhalb eines Zeitintervalls aufeinander ausüben. Deshalb wird der gesamte Prozess in wohl definierte kleine Zeitabschnitte zerteilt. Bei den Experimenten mit Anton 2 liegt dieses Berechnungszeitfenster bei 2 fs. Da viele biologische Prozesse in der Regel Millisekunden benötigen, ergeben sich daraus schon einige Milliarden Berechnungsschritte, um die Interaktionen aller Atome eines Systems simulieren zu können. Wenn man beispielsweise annimmt, dass eine zu untersuchende Struktur aus ca. 20000 Atomen besteht, dann ergeben sich für einen einzigen Zeitabschnitt (hier 2 fs) 10000 Gleitkommaoperationen für nur ein Atom. Heutige nicht spezialisierte Hochleistungsrechner mit angepasster Software schaffen es an einem Tag, Bewegungen im Nanosekundenbereich solcher biochemischen Vorgänge zu simulieren (Stand 2014) [1,2]. Im Vergleich dazu kann der spezialisierte Hochleistungsrechner Anton 1 mehrere Mikrosekunden pro Tag berechnen. Obwohl das insgesamt immer noch nicht viel ist, handelt es sich hier um eine Leistungssteigerung um den Faktor 1000 [1]. Anhand dieser Zahlen kann man aber sehen, dass es nach wie vor Verbesserungspotential gibt und die Berechnungszeit weiter optimiert werden muss, um in praktikabler Zeit Ergebnisse zu erzielen. Deshalb baut die Anton 2 Architektur zum Teil auf der des Vorgängers Anton 1 auf und benutzt dabei bewährte Techniken verbessert jedoch auch die Hardwarekomponenten. Im Wesentlichen sind dabei drei Ziele verfolgt worden [1]:

- Erhöhung der Berechnungsgeschwindigkeit
- generelle Verbesserung der Leistungsfähigkeit des Systems und
- Vereinfachung der Software.

	ANTON	ANTON2
CPU cores	13	66
CPU clock	485 MHz	1,650 MHz
Interaction pipelines	66	152
Pipeline clock	970 MHz	1,650 MHz
Peak throughput*	2.73 TFXOPS	12.7 TFXOPS
Main SRAM	128 KB	4,096 KB
Atoms/ASIC	460	8,000
Channel B/W	607 Gb/s	2.7 Tb/s

\*TFXOPS =  $10^{12}$  32-bit fixed-point operations per second.

Abbildung 6: Ein Vergleich der verbauten Hardwarekomponenten in Anton 1 und Anton 2 [3]

Die genaue Umsetzung soll im folgenden Abschnitt erklärt werden.

### 3 Architektur

Die Architektur von Anton 2 ist wie die vom Vorgänger Anton 1 im höchsten Maße auf die Molekulardynamik abgestimmt. Hierfür werden alle Berechnungen mit Hilfe von speziellen Chipsätzen (*ASIC*) durchgeführt, die über ein Hochleistungsnetzwerk miteinander verbunden sind. Zudem konnte aufgrund von neuen Herstellungstechniken die Chipdichte nochmal um ein Vielfaches erhöht werden.

Anhand von Fig.6 lässt sich unschwer nachvollziehen, dass von Anton 1 zu Anton 2 eine erhebliche Aufstockung der Hardware stattgefunden hat. So hat sich nicht nur die Anzahl der CPU Kerne vervielfacht sondern auch der jeweilige Arbeitstakt wurde um den Faktor 4 erhöht. Des Weiteren wurde auch die Anzahl der Interaktionspipelines etwa verdreifacht bei gleichzeitiger Erhöhung des Taktes um über 50 Prozent. Man muss an dieser Stelle je-

doch erwähnen, dass die Aufstockung der Hardware nicht alleine ausreicht, um Leistungssteigerungen zu erzielen. Deshalb ist es zudem notwendig, einige Verbesserungen in der Software vorzunehmen sowie die Instruktionen für die Prozessoren zu vereinfachen. Insbesondere sind hierfür die eventbasierte Programmierung als auch das Shared Memory Modell mitverantwortlich [1].

#### 3.1 System Überblick

Wie bereits erwähnt besteht Anton 2 aus speziellen Schaltkreisen, die miteinander verbunden einen dreidimensionalen Torus ergeben. Dabei werden die einzelnen Knoten durch bidirektionale Kommunikationskanäle verbunden, die je eine Bandbreite von 112 Gb/s aufweisen. Dadurch ergibt sich in der Torusstruktur zu jedem Nachbar (maximal sechs) ein Gesamtbandbreite von 224 Gb/s. Die linke Seite von 7 verbildlicht diesen Sachverhalt nochmals. Hingegen ist auf der rechten Seite von 7 der Aufbau eines einzelnen *ASIC* von Anton 2 erkennbar. Dieser besteht wiederum aus zwei Berechnungseinheiten. Einerseits den sogenannten FLEX (flexible subsystem) und andererseits den HTIS (high-throughput interaction system) Komponenten. Zusätzlich gibt es auf dem Chip eine Schnittstelle zum Nachbarchip und einen Logikanalysator, der für das Überwachen der Chipbauteile verantwortlich ist und zur Feinabstimmung der Performance verwendet werden kann. Insgesamt gibt es 16 FLEX und 2 HTIS Schaltkreise, die mit 1,65 GHz getaktet sind und über eine Bandbreite von 317 Gb/s zum Mesh Netzwerk verfügen. 8 zeigt einen genauen Überblick über die Bestandteile eines einzelnen FLEX Schaltkreises. Dieser enthält vier sogenannte Geometry Cores, 256 KB SRAM, eine Netzwerkschnittstelle und einen Dispatcher, der direkten Hardware support für Event-basierte Programmierung unterstützt [1]. Die zwei HTIS Bausteine bestehen wiederum aus einem Feld von jeweils 38 PPIM Modulen (*Pairwise Point Interaction Module*), einem ICB (*Interaction Control Block*) sowie einem mini-FLEX Chip. Die PPIM sind für paarweise Berechnungen zwischen Atomen verantwortlich. Hierbei übernimmt der ICB die Steuerung

der Berechnungen, indem er die jeweiligen Daten der Atome aus dem Netzwerk erhält und anschließend in 128 Warteschlangen sortiert. Diese werden dann im 640 KB Lokalspeicher zwischengespeichert und anschließend wird der jeweilige Inhalt der Warteschlangen in die PPIM geladen. Der ICB erhält dabei wiederum die Kommandos vom mini-FLEX. 9 verdeutlicht diesen Aspekt.

## 4 Softwareanpassungen

Die Performanz von Anton 2 hängt stark von der parallelen Verarbeitungsgeschwindigkeit ab. Im Gegensatz zu Anton 1 gibt es bei der neueren Variante erhebliche notwendige Änderungen. Die gesamte Software wurde laut [1] in C++ geschrieben und mit einer Version des GCC auf den "Geometry Cores" kompiliert. Diese Prozessorkerne sind 32-Bit Prozessoren die acht Gleitkomma-Multiplikationen und acht Additionen in einer einzelnen Instruktion unterstützen [1]. Ein weiterer Indikator für die Leistungsfähigkeit des Systems sind die *load* und *store* Instruktionen, die einen vierfachen Zugriff auf den SRAM der FLEX Einheiten ermöglichen. Jeder *Geometry Core* kann innerhalb der gesamten Maschine schreibend und lesend auf den verteilten Speicher zugreifen. Des weiteren unterstützen die oben erwähnten *Dispatcher* der FLEX Module eventbasierte Programmierung. Dabei wird die gesamte Software als eine Ansammlung von Tasks ausgedrückt. Bevor also eine Anwendung auf dem Anton 2 System läuft, muss vorher spezifiziert werden, wie die einzelnen Tasks mit einander in Beziehung stehen beziehungsweise welche Abhängigkeiten sie haben. Zur Laufzeit des Systems existiert auf jedem Prozessorkern eine Event Schleife, die den *Dispatcher* mit Aufgaben versorgt. Insgesamt hat die Konsolidierung auf eine Programmiersprache bei Anton 2 die Programmierung im Gegensatz zum Vorgänger wesentlich erleichtert [1]. Hierbei sind zwei wichtige Algorithmen zu nennen - zum einen "Bond Proxies", zum anderen "real-space mesh convolution. Ersterer ist für die Reduzierung der Kommunikationsbandbreite, letzterer für die Verringerung der Kommunika-

tionsverzögerung verantwortlich.

## 5 Leistungsfähigkeit

Dieser Abschnitt soll aufzeigen, welche Leistung das Anton 2 System erbringt. Damit man die Ergebnisse sinnvoll interpretieren kann, wird zunächst geklärt, welche Parameter verwendet wurden. Die Experimente wurden mit folgender Konfiguration durchgeführt:

- Anton 2 System mit 512 Knoten
- $8 * 8 * 8$  Torus,
- jeder Knoten mit 1,65 GHz getaktet,
- jedes biochemische System wurde mit einem 2,5 fs Zeitintervall simuliert,
- für die wirkende Kräfte wurde die "u-series-Methode benutzt und die Parameter  $b = 2$  und  $N = 4$  bzw.  $N = 6$  gesetzt.

Im Vergleich zu anderen Hochleistungsrechnern die in der Molekulardynamik eingesetzt werden, kann sich Anton 2 insbesondere in drei Aspekten behaupten:

- höchste Performanz,
- Datendurchsatz,
- und Berechnungskapazität.

In Fig.12 wird ersichtlich, dass eine Anton 2 Maschine mit 512 Knoten an einem Tag 85 Mikrosekunden der Dihydrofolat-Reduktase zu simulieren. Dieser biochemische Prozess involviert 23558 Atome. Wenn man Fig.10 betrachtet, wird offensichtlich, dass Anton 2 die Leistungsfähigkeit im Vergleich zu Anton 1 mehr als vervierfacht hat und zu anderen nicht spezialisierten Hochleistungssystemen um den Faktor 180 schneller ist. Bezüglich des Datendurchsatzes wird in Fig.12 weiterhin ersichtlich, dass Anton 2 prinzipiell dazu in der Lage ist, in praktikabler Zeit Strukturen mit mehreren Millionen Atomen zu simulieren. Man kann diesen Sachverhalt auch folgendermaßen ausdrücken. Mit Anton 2 ist es nun möglich noch größere biochemische

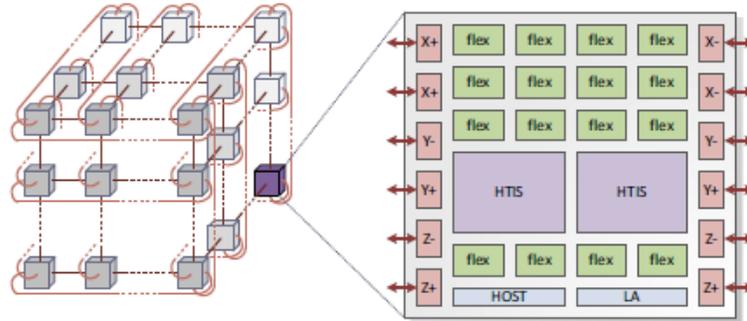


Abbildung 7: Darstellung des 3D Torus und eines einzelnen ASIC mit dessen Bestandteilen [1]

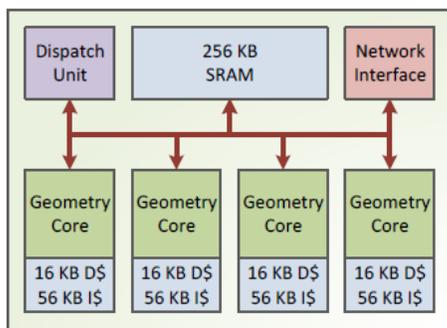


Abbildung 8: Aufbau von FLEX [1]

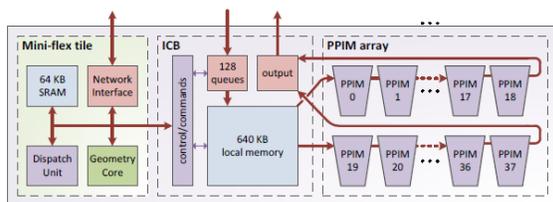


Abbildung 9: Aufbau der HTIS Struktur [1]

Strukturen zu untersuchen oder aber für eine fixe Anzahl von Atomen eine schnellere Berechnungsgeschwindigkeit gewährleisten [1]. Dennoch liegt die Obergrenze für Simulationsberechnungen des Anton 2 Systems mit 512 Knoten bei 3,6 Mikrosekunden pro Tag für ein Ribosom der Größenordnung 2,2 Millionen Atome [1]. Im Vergleich zum SuperMUC Rechnerverbund [10] ist die Anton 2 Architektur damit etwa 21 mal schneller.

Der Zusammenhang zwischen der Größe eines Rechnerverbunds und der Berechnungsleistung lässt sich gut in Fig.11 nachvollziehen. Man kann deutlich erkennen, dass die berechneten Zeitintervalle systematisch mit der Anzahl der Knoten im Verbund ansteigen. Da aktuell nur Anton 2 Maschinen mit 512 Knoten konstruiert wurden, können auch nur darüber Aussagen getroffen werden. Das Anton 2 System ist jedoch laut Shaw et al [1] auf bis zu 4096 Knoten skalierbar. Daraus würde zukünftig eine noch höhere Leistungsfähigkeit resultieren [1]. Allerdings gilt diese Annahme nur dann, wenn das System auch im bisherigen Maße weiter skaliert. Aufgrund der enormen Komplexität bei atomaren Interaktionen, den extrem kleinen Berechnungsschritten im Femtosekundenbereich sowie der Koordination von 4096 Chipsätzen mit jeweils 66 Prozessoren, bleibt dies jedoch noch abzuwarten und dementsprechend zu prüfen.

	Villin	DHFR	ApoA1	ATPase	STMV	Ribosome
# atoms	13,773	23,558	92,224	327,506	1 M	2.2 M
Anton 2 ( $\mu\text{s}/\text{day}$ )	85.8	85.8	59.4	28.2	9.5	3.6
Anton 1 ( $\mu\text{s}/\text{day}$ )	19.7	18.9	7.5	—	—	—
General-purpose hardware ( $\mu\text{s}/\text{day}$ )	1.1 <sup>a</sup>	0.471 <sup>b</sup>	0.289 <sup>b</sup>	0.039 <sup>i</sup>	0.035 <sup>j</sup>	0.171 <sup>l</sup>
		0.235 <sup>c</sup>	0.127 <sup>g</sup>		0.018 <sup>k</sup>	
		0.144 <sup>d</sup>	0.076 <sup>h</sup>			
		0.108 <sup>e</sup>				
		0.100 <sup>f</sup>				

Abbildung 10: Performanzvergleich von verschiedenen Hochleistungssystemen beim Simulieren verschiedener biochemischer Systeme unterschiedlicher Größenordnung [1]

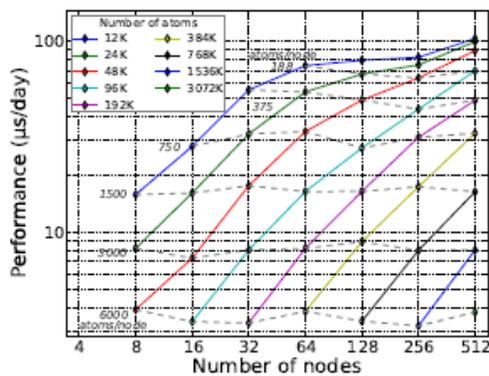


Abbildung 11: Leistung des Systems in abhängig von der Anzahl der Knoten [1]

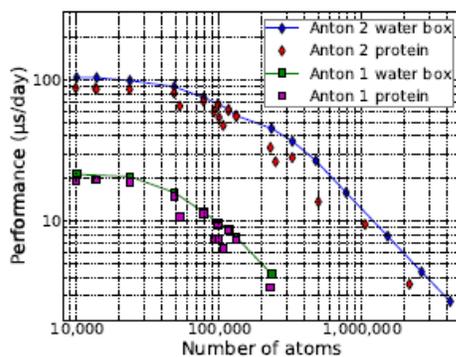


Abbildung 12: Leistung des Systems in abhängig von der Anzahl der Atome [1]

## 5.1 Zeitintervalle

Dieser Abschnitt soll dazu dienen, den Vergleich der verschiedenen Systeme besser einordnen zu können. Innerhalb der Molekulardynamik gibt es verschiedene Simulationsparameter die unterschiedlich ausgeprägt sind. Beispielsweise spielt die Wahl der Zeitintervalle eine große Rolle für die Qualität der Simulation [11]. In der zugrunde liegenden Quelle [1] wurde ein Vermerk gemacht, dass die Resultate der einzelnen Hochleistungsrechner den jeweiligen Quellen entnommen wurden ohne genau die Konfiguration einzusehen zu können. Ohne die Leistungsfähigkeit des Anton 2 Systems zu schmälern, muss man aber dennoch an dieser Stelle erwähnen, dass die Wahl des Zeitintervalls durchaus erhebliche Auswirkungen auf die Ergebnisse einer Simulation haben kann. So ermöglichen z.B. kurze Zeitintervalle wesentlich präzisere Darstellungen als solche mit langen Zeitintervallen. Zudem müssen bei kurzen Zeitintervallen weniger Berechnungen bezüglich elektrostatischen Kraftwirkungen zu entfernten Atomen berechnet werden. Im Gegensatz dazu ermöglichen längere Zeitintervalle eine insgesamt größere Simulationsrate. Dabei verliert die Simulation aber an Präzision hinsichtlich der Feinbewegungen von Atomen einerseits. Und andererseits wird der Berechnungsaufwand bezüglich elektrostatischen Kraftwirkungen zu entfernten Atomen wesentlich aufwendiger [1]. Um die Leistungsfähigkeit von Anton 2 also exakt überprüfen zu können, müsste also auf allen Systemen die gleiche Konfi-

guration eingestellt werden beziehungsweise müsste genau geprüft werden, welche Parameter alle Systeme nun im Detail verwendet haben.

## 6 Energieverbrauch

Da die Reduktion des Energieverbrauchs und generell die nachhaltige Energieversorgung aktuell brisante Themen sind, muss auch das Anton 2 System hinsichtlich seiner Energiebilanz untersucht werden. Dieser Abschnitt soll deshalb verdeutlichen in welcher Größenordnung der Energieverbrauch der Architektur liegt und welche Energieeffizienz sie aufweist. Da ein 512 Node Anton 2 System nahezu 24000 CPU Kerne umfasst und eine extrem hohe Baudichte hat, ist es notwendig ein dementsprechendes leistungsstarkes Kühlsystem zu integrieren. Hierfür wurden in die Tür des Gehäuses drei Lüfter eingebaut, die jeweils eine Leistung von 1,7 kW erbringen. Zudem ist es notwendig dass Gehäuse von unten zu kühlen. Dafür wurde eine Wasserkühlung installiert, die wiederum 56 kW verbraucht. Ohne die Kühlkomponenten verbrauchen die restlichen Bestandteile des Systems ca. 42 W pro Gehäuse [3]. In Fig.14 erkennt man wie dicht gepackt ein derartiges Gehäuse bei Anton 2 ist und wie die Lüfter in das Gehäuse integriert sind.

Insgesamt beläuft sich der Stromverbrauch für ein System mit 512 Knoten auf etwa 150 kW. Obwohl dies natürlich ein extrem hoher Energieverbrauch ist, wird die Energieeffizienz gegenüber anderen Hochleistungsrechnern durch die speziell abgestimmte Hardware um ein vielfaches verbessert [1]. Zum Vergleich verbraucht das IBM SuperMuc Cluster mit 16384 CPU Kernen 316 kW [1,10]. Trotz dieser Verbesserungen und der Tatsache, dass Anton 2 die Referenz im Bereich der Molekulardynamik ist, soll anhand des folgenden Beispiels gezeigt werden, wie viel Energie eigentlich benötigt wird, um bestimmte biochemische Zusammenhänge zu berechnen. Anhand von Fig.13 soll dies beispielhaft gezeigt werden. Als Richtgröße für die Berechnungsgeschwindigkeit wird hierbei Bezug auf den Performanzvergleich von Fig.10 genommen. Weiterhin ist der Gesamtverbrauch des Systems laut Shaw

et al [1] mit 150 kW zu beziffern und der Preis für eine kWh wurde mit 28 Eurocent kalkuliert. Anhand der Parameter lässt sich nun z.B. nachvollziehen, dass die Berechnungen von einem Biosystem mit ca. 24000 Atomen ungefähr 12 Tage dauern und um die 12000 Euro kosten. Man kann diese Kalkulation nun für beliebig viele Konfigurationen und Gebilde der Biochemie fortsetzen, jedoch dient die aktuelle Tabelle nur einer groben Einordnung, um den Aspekt des Energieverbrauchs und dazu anfallende Kosten im Anton 2 System besser verstehen zu können.

### 6.1 Weiterführende Überlegung

Auch wenn das den Rahmen dieser Arbeit sprengt, muss grundsätzlich darüber nachgedacht werden, ob es ein Paradigmenwechsel innerhalb der Computerarchitektur geben muss, um Vorgänge, wie die von biologischen Systemen aber auch innerhalb der Astronomie simulieren zu können. Natürlich ist die Performanz von Anton 2 unbestritten und auch die Energieeffizienz hinsichtlich des Wirkungsgrades von Hochleistungsrechnern ist sehr gut, jedoch ist der Gesamtenergieverbrauch immer noch immens. Im Zusammenhang mit der Analyse und Leistungsfähigkeit von Hochleistungsrechnern im Allgemeinen aber auch bei den Anton Modellen sind noch erhebliche Anstrengungen im Bereich der Software als auch Hardware notwendig, um wirklich praktikabel Forschung zu betreiben. Praktikabel ist hier im Sinne von energiesparsam aber auch weniger zeitintensiv gemeint. Nachdem Anton 2 nun hinsichtlich des Energieverbrauchs untersucht wurde, soll im letzten Abschnitt die Thematik zusammengefasst werden.

# Atome	Leistung ( $\mu\text{s}/\text{Tag}$ )	Berechnungszeit	Simulationszeit	Kosten (28 cent / kWh)
23558	85,8	~ 11,6 Tage	1ms	~ 11692 €
327506	28,2	~ 35,5 Tage	1ms	~ 36000 €
1000000	9,5	~ 105 Tage	1ms	~ 112000 €
2200000	3,6	~ 277,7 Tage	1ms	~ 280000 €

Abbildung 13: Kosten und Berechnungszeit von Anton 2 bei unterschiedlich komplexen Biosystemen

## 7 Zusammenfassung

Nach der oben durchgeführten Untersuchung muss man abschließend feststellen, dass Anton 2 sicherlich die Referenz für Hochleistungs-rechner im Bereich der Molekulardynamik ist. Das betrifft sowohl die Performanz als auch die Programmierbarkeit [1]. Gerade im Bereich von molekularen Strukturen von bis zu 1000000 Atomen erweist sich dieser Hochleistungsrechner als sehr nützlich[1,2]. Die Segmentierung der Architektur in spezielle Berechnungseinheiten spielt dabei sicherlich eine Rolle und ermöglicht für sehr komplexe Sachverhalte eine erhöhte Flexibilität [1]. Beispielsweise berechnet Anton 2 Simulationen von biochemischen Systemen etwa 10 mal schneller als sein Vorgänger Anton 1 [1]. Noch stärker fällt die Leistungssteigerung im Vergleich zu nicht anwendungsspezifischen Systemen aus. Dort liegt sie in etwa beim Faktor 20. Diese Performanz wurde einerseits durch eine Anpassung der Hardware und andererseits durch eine intelligente Event-basierte Programmierung ermöglicht [1]. Die Vervielfachung der CPU Kerne, die 3D Torus- Struktur und die extrem schnelle interne Geschwindigkeit des Netzwerks garantieren dabei einen hohen Datendurchsatz und eine geringe Latenz [1]. Shaw et al [1,2,3] sehen aber nicht nur innerhalb der Molekulardynamik ein Anwendungsfeld von Anton 2. Da die gesamte Architektur auf effiziente Kommunikation, Berechnung und Synchronisation abgestimmt ist, könnten auch andere wissenschaftliche Bereiche davon profitieren [1]. Die Fähigkeit, mehrere Schreibbefehle mit nur einer Instruktion oder aber sehr effiziente Additio-



Abbildung 14: Energieverbrauch

nen innerhalb des Speichers durchzuführen, könnte auch Wissenschaftlern die sich mit neuronalen Netzen, der Strömungslehre oder mit Bewegungen von Flüssigkeiten beschäftigen, von Nutzen sein [1]. Alles in allem lässt sich sagen, dass das Projekt Anton / Anton 2 sehr gelungen ist und für weitere Forschungszwecke mit immensem Berechnungsaufwand gute Aussichten bietet.

## 8 Literatur

- [1] David E. Shaw, J.P. Grossman, Joseph A. Bank, Brannon Batson, J. Adam Butts, Jack C. Chao, Martin M. Deneroff, Ron O. Dror, Amos Even, Christopher H. Fenton, Anthony Forte, Joseph Gagliardo, Gennette Gill, Brian Greskamp, C. Richard Ho, Douglas J. Ierardi, Lev Iserovich, Jeffrey S. Kuskin, Richard H. Larson, Timothy Layman, Li-Siang Lee, Adam K. Lerer, Chester Li, Daniel Killebrew, Kenneth M. Mackenzie, Shark Yeuk-Hai Mok, Mark A. Moraes, Rolf Mueller, Lawrence J. Nociolo, Jon L. Peticolas, Terry Quan, Daniel Ramot, John K. Salmon, Daniele P. Scarpazza, U. Ben Schafer, Naseer Siddique, Christopher W. Snyder, Jochen Spengler, Ping Tak Peter Tang, Michael Theobald, Horia Toma, Brian Towles, Stanley C. Wang, and Cliff Young, *Anton 2: Raising the bar for performance and programmability in a special-purpose molecular dynamics supercomputer*, SC14: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Seite 41-53, 2014.
- [2] David E. Shaw, Ron O. Dror, John K. Salmon, J.P. Grossman, Kenneth M. Mackenzie, Joseph A. Bank, Cliff Young, Martin M. Deneroff, Brannon Batson, Kevin J. Bowers, Edmond Chow, Michael P. Eastwood, Douglas J. Ierardi, John L. Klepeis, Jeffrey S. Kuskin, Richard H. Larson, Kresten Lindorff-Larsen, Paul Maragakis, Mark A. Moraes, Stefano Piana, Yibing Shan, and Brian Towles, *Millisecond-Scale Molecular Dynamics Simulations on Anton*, Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis, Artikelnummer 39, 2009.
- [3] J. Adam Butts, Brannon Batson, Jack C. Chao, Martin M. Deneroff, Ron O. Dror\*, Christopher H. Fenton, Anthony Forte, Joseph Gagliardo, Gennette Gill, Brian Greskamp, J.P. Grossman, C. Richard Ho\*, Jeffrey S. Kuskin, Richard H. Larson\*, Timothy Layman\*, Li-Siang Lee, Chester Li, Shark Yeuk-Hai Mok, Mark A. Moraes, Rolf Mueller, Lawrence J. Nociolo, Jon L. Peticolas, Terry Quan, Daniel Ramot\*, Naseer Siddique, Jochen Spengler, Ping Tak Peter Tang, Michael Theobald, Horia Toma, Brian Towles, Stanley C. Wang, and David E. Shaw, *Anton 2: A Second-Generation ASIC for Molecular Dynamics*, , 2008.
- [4] Martin M. Deneroff, David E. Shaw, Ron O. Dror, Jeffrey S. Kuskin, Richard H. Larson, John K. Salmon, and Cliff Young, *Anton: A Specialized ASIC for Molecular Dynamics*, , 2008.
- [5] Wikipedia, *Application-specific integrated circuit*, [https://en.wikipedia.org/wiki/Application-specific\\_integrated\\_circuit](https://en.wikipedia.org/wiki/Application-specific_integrated_circuit), 20.12.2015.
- [6] Wikipedia, *Newtonsche Gesetze*, [https://de.wikipedia.org/wiki/Newtonsche\\_Gesetze](https://de.wikipedia.org/wiki/Newtonsche_Gesetze), 18.12.2015.
- [7] Wikipedia, *Molekulardynamik-Simulation*, <https://de.wikipedia.org/wiki/Molekulardynamik-Simulation>, 17.12.2015.
- [8] Wikipedia, *Molecular dynamics*, [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_dynamics](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_dynamics), 12.12.2015.
- [9] Wikipedia, *Anton (computer)*, [https://en.wikipedia.org/wiki/Anton\\_\(computer\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Anton_(computer)), 6.12.2015.
- [10] The Green 500, *“The Green500 List – November 2013”*, [http://www.green500.org/lists/2013/11/top/green500\\_top\\_201311.xls](http://www.green500.org/lists/2013/11/top/green500_top_201311.xls), 20.12.2015.

[11] David Fincham, "Choice of timestep in molecular dynamics simulation", Computer Physics Communications, Volume 40, Issues 2-3, Seiten 263 - 269, Juni 1986.