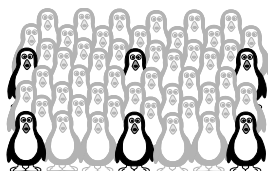


Inhalt



Editorial	2
Iterationsschleife	6
Petascale Time Series Similarity Mining	9
ISC 2020 = ISC Digital	17
Über den neuen Impact der Informatik	19
8. BGCE Student Paper Price	20
Ausgezeichnete Daten-Forschung	22
LRZ installiert HPE-System Cray CS500 mit Fujitsu A64FX-Prozessoren	25
KONWIHR: New projects - Spring 2020	27
preCICE v2.1 (from home)	29
Notiz*Notiz*Notiz	31

Das Quartl erhalten Sie online unter <http://www5.in.tum.de/quartl/>



Das Quartl ist das offizielle Mitteilungsblatt des *Kompetenznetzwerks für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR)* und der *Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE)*

Editorial

Ausnahmsweise muss das Editorial diesmal ohne Sottisen auskommen. Dafür gibt's mal etwas Kultur – genauer einen Erlebnisbericht zur Laienmusik in Corona-Zeiten.

So ab und zu schaffte es der Kulturbetrieb ja auch mal in die Nachrichten, konnte sich kurz gegen Lufthansa, Wirte und unsere allgegenwärtige Automobilbranche durchsetzen. Denn von Corona-bedingten Schwierigkeiten weiß die Kultur ja schon auch zu berichten. Da ist zum einen die Nachfrageseite – bekanntlich lebt der Mensch nicht vom Brot allein. Aber da konnte und kann man sich immerhin aus dem Archiv bedienen. Härter traf es all die auf der Angebotsseite, die nicht in einem der großen Orchester, Opernhäuser, Theater oder Museen mit einer Planstelle gesegnet waren: die Aushilfen, die freischaffenden Künstler und Lehrer. Da stellten sich schnell ökonomische Probleme bis hin zum Existenziellen ein, die auch nicht so einfach durch ein „dann halt zum Mitnehmen“ abgeschwächt werden konnten.

Darüber hinaus gab es auch noch ein emotionales Problem. Bekanntermaßen sehnt sich nicht jeder Sachbearbeiter nach Sachbearbeitungen, und nicht jede Buchhaltungsfachkraft lechzt ununterbrochen nach Buchhaltung. Musiker und Musikerinnen zählen jedoch gemeinhin zu den Menschen, wo – wie sagt man so schön – Beruf Berufung ist. Sprich: Sie müssen nicht nur vor Publikum musizieren, sie wollen es auch. OK, auch dort gibt es Routine und Langeweile, aber im Wesentlichen vermutet man da doch eine deutlich überdurchschnittliche Lust am Job. Da kann einen das „nichts geht mehr“ schon in eine mittlere Krise stürzen. Und da hilft ja auch kein Home Office.

Dieses emotionale Krisenszenario betraf natürlich auch die Laienmusik. Auch Laienmusiker wollen musizieren, und die meisten eben auch nicht nur im stillen Kämmerlein, sondern vor Publikum. (Ob das Publikum das immer auch hören will, ist freilich eine ganz andere Sache, reden doch böse Zungen immer wieder von quasi Gedungenen aus dem Familien- und Freundeskreis ...). Bekanntlich ist Deutschland ja das Land der Laienmusik. Nirgendwo

sonst gibt es derartig viele Orchester, Blaskapellen oder sonstige Ensembles, die regelmäßig spielen und eben auch öffentlich auftreten. Ich erinnere mich noch genau an ein Gespräch mit dem Konzertmeister des Shanghai Symphony Orchestra vor einigen Jahren, der ziemlich verblüfft war, dass man in Deutschland auch als Nicht-Profi Konzerte mit Brahms-Sinfonien bestreiten kann. In China gebe es das nicht – so zumindest seine Aussage. Aber das kommt ja vielleicht noch.

Dies quasi als Hinführung zum Thema. Jetzt konnte ich mir als Wissenschaftler im Frühjahr ja mit Zoom und BigBlueButton die Zeit vertreiben, aber ... es fehlte schon etwas. Keine Messen an Ostern, keine Frühjahrskonzerte, in der Phase der Ausgangsbeschränkungen nicht mal ein still vergnügtes Streichquartett. Und die Sorge wuchs, dass es auch die Neuburger Kammeroper treffen könnte (siehe <https://neuburger-kammeroper.de/>). Seit 1969 werden im historischen Stadttheater Neuburg an der Donau, in den Achtzigern aufwändig renoviert, kleinere, selten gespielte, oft (manchmal nicht ganz zu Unrecht) völlig in Vergessenheit geratene Opern aufgeführt. 250 Plätze nur, aber ansonsten alles wie „bei den Großen“: Orchestergraben, Bühnentechnik, immerhin zwei Ränge. Seit den Siebzigern stellt der Akademische Orchesterverband München, eines der vielen Münchener Laienensembles, das Opernorchester, seit 1983 bin ich dabei. Diesen April war kaum vorstellbar, dass es auch im Corona-Jahr Ende Juli Operaufführungen in Neuburg geben würde. Aber das Organisatorenteam glaubte unbeirrbar daran, ließ nicht locker, sprach ohne Unterlass mit Gesundheitsämtern, Stadt- und Kreisverwaltungen, und so begann – und gelang – ein bis dato wohl ziemlich einmaliges Experiment.

Fast im Wochentakt wurde das Hygienekonzept überarbeitet, wurde darum gerungen, was gehen würde – und was nicht. Schnell waren einige Anforderungen an das Werk klar: Es muss ohne Chor gehen, es darf nur eine begrenzte Zahl von Solisten und Solistinnen auf der Bühne stehen, auch auf der Bühne muss mit Abstand gearbeitet werden (was bei den üblichen Liebes-Irrungen der seichteren Stücke schon eine Herausforderung an Regie und Akteure ist), es muss ohne Pause gehen (undenkbar das übliche Lustwandeln

mit Häppchen und Schlückchen), und aufgrund der Abstandsregeln war an ein komplettes Orchester nicht zu denken. Also rein kammermusikalisch – ein Streichquintett, ein Bläserquintett, und ein Dirigent; das war mit konstruktiver Auslegung der Abstandsregeln gerade noch darstellbar.

Da die Oper schon ausgesucht war („Theatralische Abenteuer“ – die Musik immerhin von Cimarosa und Mozart, das Libretto nach Vulpius und Goethe), waren nun die Arrangeure gefragt: weg mit der Pause, weg mit den Chornummern, weg mit Hörnern und Trompeten. Am Ende stand eine echte „Kammeroper“. Auch im Publikum war alles anders: Man musste bis zu einer Stunde vorher da sein, wurde einzeln maskiert an den Platz geführt, nur etwa 60 Zuhörer und Zuhörerinnen waren pro Aufführung zugelassen, und am Ende mussten alle warten, bis sie wieder einzeln hinausgeleitet wurden.

Klingt alles schräg – aber es war super. Hier entstand etwas von einer Intensität und Intimität, die man ohne Corona nie entdeckt hätte: zehn Instrumentalisten, alle Stimmen solistisch, kein Verstecken möglich, aber eben endlich auch mal ohne dieses notorische „das Orchester ist zu laut“ und ohne das dicht gedrängte Sitzen und beengte Spielen im stickigen Graben. Das war Kammermusik pur, wie man sie sich wünscht. Und das Publikum berichtete von „wie daheim im Wohnzimmer, eine richtige Hausmusik-Atmosphäre“, da eben links und rechts nicht die nächsten Ellenbogen störten. Und so mehrten sich am Ende der Produktion die Stimmen, warum man das nicht immer so gemacht habe. Gut, da war auch viel Freude über das mögliche Gemachte dabei, aber es war schon auch ein „back to the roots“. Denn schließlich war bei den Aufführungen beim Fürst Soundso anno dazumal auch nicht immer das Orchester in passender Besetzung verfügbar, musste auch improvisiert werden, war auch vieles eine Nummer kleiner, als wir es heute aus dem Opernbetrieb kennen. Warum eigentlich nicht?

Auch wenn es letztendlich eine tolle Erfahrung war, hoffen doch alle inständig, dass es eine einmalige bleiben möge. Bzw. dass, falls man sich nochmals für eine solche Aufführungspraxis entscheiden wird, dies aus freien Stücken und ohne widrige Umstände zustande kommt.

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, einen schönen Herbst – mit vielen kulturellen Highlights und ohne weitere Wellen. Zunächst aber natürlich wie immer viel Spaß mit der neusten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Iterationsschleife

N=36

10. September 2020

Der Germanist David Precht hat ein Buch geschrieben. Das alleine ist ein Ereignis, denn Bücher von Precht verkaufen sich grundsätzlich sehr gut. Über das Buch muss also berichtet werden. Zeitungskritiken werden verfasst. Radiosender produzieren Features und recherchieren die Hintergründe zu den Themen, die im Buch angesprochen werden. Der Spiegel bringt ein Streitgespräch zwischen Precht und dem Investor Frank Thelen.

Was genau ein Investor ist, wird im Gespräch nicht so klar, aber offenbar ist Thelen ein technisch interessierter Mensch, und so soll wohl das Streitgespräch verdeutlichen, welchen Diskurs die Philosophen mit den Technikern pflegen und umgekehrt. Wobei dieses Wort „umgekehrt“ uns schon signalisiert: möglicherweise ist es gar kein hin- und hergehendes, sondern ein hin- und vorbeigehendes und ein her- und vorbeigehendes Gespräch und die kommunikativen Dissonanzen werden dann als Reibungsgewinne verbucht, während sie doch in Wirklichkeit nur der Tatsache geschuldet sind, dass das Gespräch keine gemeinsame Sprache findet und damit nur zufällige gedankliche Blasen produziert, die nur die richtige Beleuchtung (Spiegelgespräch, berühmter Philosoph, Investment-Tycoon) zum Schillern bringen kann.

Müssten Informatiker nicht froh sein, wenn sich ein Philosoph die Mühe macht, technische Dinge von der erhöhten Warte des Wissenden aus zu betrachten, einzuordnen und in einfachen Häppchen dem breiten Publikum nahezubringen? Verdient das nicht höchstes Lob – alleine schon dafür, dass wenigstens einer sich der Mühe der Wissenschaftskommunikation unterzieht? Muss die Informatik nicht beschämt zu Boden blicken und sich fragen lassen, warum erst ein Philosoph kommen musste, um dem Volk zu erklären, worum es bei der „Künstlichen Intelligenz“ denn „eigentlich“ geht?

Das Wort sollte uns irritieren. „Eigentlich“ heisst ja immer, dass man bisher das „Eigentliche“ versteckt, verschwiegen, unterschlagen, im Dunklen gelassen hat, um eine versteckte Agenda zu betreiben. Verschwörungstheorien beginnen gerne mit dem Wort „Eigentlich“. Während Philosophen sich noch mit der Aussage begnügen, dass die Wirklichkeit in Wirklichkeit nicht wirklich wirklich sei, signalisiert das Wort „Eigentlich“ dem Laien, dass auch er Adressat der Aufklärung ist und nun enthüllt wird, was eigentlich hinter den Dingen steckt.

Zunächst aber im Buch nichts davon, sondern sehr nüchtern eine Einführung zur Geschichte der künstlichen Intelligenz. Das ist spannend und wer sich mit Intelligenz beschäftigt wünscht sich eine kritische Betrachtung. Denn was ist Intelligenz anderes als ? Das Problem sind nun die Pünktchen, denn fassbar ist der Begriff kaum geworden in der langen Geschichte der Intelligenz. War es lange Zeit das Wort das den „Göttlichen Funken“ in einem Menschen (grundsätzlich männlich – der Mensch nicht der Funke!) beschrieb, so wurde es um 1900 zum Fachbegriff erklärt für die Beschreibung der Fähigkeit eines Menschen, durch Imitation und Kombination die typischen unabdingbaren intellektuellen Fähigkeiten des modernen Menschen (lesen, schreiben, rechnen, logisch denken, erinnern, erkennen) zu nutzen, um schematische Probleme schematisch zu lösen. Nur so war der Quotient der Intelligenz nämlich zu messen. Alles andere als eine Standardisierung hätte eben aus dem technischen Begriff wieder nur eine persönliche Einschätzung gemacht, die so wenig nutzbar gewesen wäre für die Sozialtechnokraten und Erziehungstheokraten wie das Wort „kreativ“. Kreativ kann jeder, aber intelligent muss man erst mit einem Test beweisen – zum Beispiel mit dem Hamburg Wechsler Intelligenztest.

Auch Precht lässt es lieber sein, sich zu fragen, was denn um Gottes (oder der Göttin) Willen intelligent sei und stürzt sich nach der Einleitung mutig auf die Feinde der Menschheit – als da wären „Der Kapitalismus“, Ray Kurzweil und Elon Musk (ein paar andere tauchen auch noch auf, scheinen aber unter den Göttern der Unterwelt eher eine bedeutungslose Nebenrolle zu spielen). Die Darstellung des Bösen folgt nun in etwa dem Muster der mittelalterlichen Darstellung des Bösen in der religiösen Malerei. Keine Bosheit, die den Menschenfeinden nicht zugeschrieben werden kann, kein Dunkel, das dunkel genug ist, um die Verkommenheit der Menschenfeinde deutlich zu machen. Während man zunächst nur entnervt die Trivialität der Darstellung zur Kenntnis nimmt, wird immer deutlicher, dass es hier in Wirklichkeit (eigentlich!) um das Helle und Leuchtende geht.

Das Wesen des Dunkels nämlich ist nicht seine Existenz als Dunkel, sondern seine Existenz als Gegenteil des Guten, das sein helles Strahlen nur bekommen kann, wenn es das Dunkel auch möglichst dunkel darstellt. Wie Don Quijote niemals mit Windmühlen kämpfen würde und diese zu Riesen fantasieren muss, so kann das strahlend Gute mangels eigener Werte mitunter sein Strahlen nur aufrechterhalten, indem es sein Gegenteil dunkler macht, um den Kontrast zu verstärken.

Precht hat das gelernt und sein Kampf gegen die künstliche Intelligenz wäre nur ein Kampf gegen Windmühlen, wenn es ihm nicht gelänge, Kurzweil und Musk zu veritablen Menschenfeinden zu erklären, denen nur er als Philosoph entgegentreten kann. Nur er und nicht die ganze Philosophie? Das würde den Ruhm des Don Quijote wohl schmälern und so müssen alle jene, die sich in Ethikkommissionen engagieren, umgehend und sehr deutlich zu einer Art Sancho Panzas der Philosophie im Dienste des Kapitalismus erklärt werden, die sich mit ihrem Versuch, Technik ethisch zu diskutieren unsterblich lächerlich machen.

Natürlich streift Precht auch am Kern der Debatte an. So wenn er andeutet, dass er verstünde, wie die logische Automatisierung des Menschen sich mit dem Utilitarismus trifft. Oder wenn er zurecht nach den ethischen Grundlagen des Transhumanismus und Posthumanismus fragt. Aber schnell tritt ihm wieder ein philosophischer Abweichler oder informatischer Bösewicht in den Weg, und die Suche nach dem Kern der Sache muss ruhen, bis der Kampf gegen das Böse endgültig bestanden ist.

M. Resch

Petascale Time Series Similarity Mining

*The mining of time series data plays an essential role in modern information retrieval and analysis systems. In particular, the identification of similarities within and across time series has attracted significant attention over the last few years. For this task, **matrix profile**, which is a generic data structure that encodes correlations among records and dimensions—the matrix profile—is a promising, but expensive approach: It requires significant computational power to evaluate dense distance matrices, especially for very long and multi-dimensional time series with a large dimensionality. In this article, we describe our novel MPI-based approach for the calculation of a matrix profile for multi-dimensional time series, which is able to compute matrix profiles at a sustained **1.3 Petaflop/s** performance on the SuperMUC-NG system.*

Matrix Profile

Mining time-tagged series of real-valued data points, known as time series, is an essential task for data processing in various fields of science and engineering. Specifically, the explorative investigation of repeating patterns has implications for analysis and modeling. This investigation typically involves the study of similarities among local chunks—i.e., subsets of continuous values, also known as subsequences—of the time series, by computing a dense distance matrix—or correlation matrix—of all subsequences. Matrix profile is a promising approach in such studies and is introduced first in 2016 by Yeh et al. [1]. It has been successfully applied to datasets in various fields, such as seismology [2] and medical science [3], for various data mining tasks, such as semantic segmentation, clustering and anomaly detection [4].

Despite the matrix in the name (matrix profile), it is not a matrix but a profile: One could think of the matrix profile as a complementing list of local similarity annotations for a time series derived from a complete correlation matrix of local features in a time series. Matrix profile summarizes a complete correlation matrix into two data structures: a *matrix profile* P ,

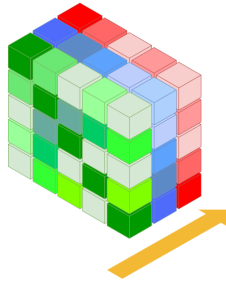


Figure 1: Illustration of distance matrices for a multi-dimensional time series. Here, we show a three-dimensional time series resulting in three distance matrices, which are represented in different colors.

which is a meta series encoding the distance of a subsequence to its nearest neighbor, and a *matrix profile index I*, which is an indexing structure storing pointers to the nearest neighbor of a subsequence in the time series. This information is enough to address lots of questions about the patterns in the data. However, things get even more complex in case of the multi-dimensional time series, i.e., a multiple time series covering multiple sensor inputs. Subsequently, state-of-the-art methods for the computation of a matrix profile mostly target one-dimensional time series. Only recently, the first algorithms for multi-dimensional time series appeared [5]. In case of multi-dimensional matrix profile, multiple distance matrices—one for each dimension—is computed, which results in the evaluation of a 3D distance matrix (see Figure 1). Moreover, the evaluation of correlation structure among dimensions (e.g., temporal correlations of different sensors) is an additional aspect of the problem, and for this reason, the distance profiles are sorted (see the yellow arrow in Figure 1, which illustrates the direction of sorting the elements of distance matrices).

This article introduces a summary of our approach for deploying the multi-dimensional matrix profile on High Performance Computing systems that was introduced at ISC'20 [6], and after blood, toil, tears and sweat of last minute submission received the Hans Meuer Best Paper Award.

Multi-Dimensional Parallel Matrix Profile: $(MP)^N$

We introduce our massively parallel algorithm for the computation of multi-Dimensional matrix profiles called $(MP)^N$ (stands for Multi-dimensional Parallel Matrix Profile). $(MP)^N$ is built on top of the state-of-the-art algorithms for computation of matrix profiles, and extends them to utilize capabilities of HPC systems. It partitions the time series along records and allows the distribution of the computation of distance matrices, and sorts among multiple workers, e.g., cores of a multiprocessor, with minimum communication during the computation phase.

Iterative Computation and Optimizations: $(MP)^N$ uses an in-place iterative approach for the computation of the distance matrices based on a streaming dot product formulation developed by Zimmerman et al. [7]. This iterative approach can be summarized in the following steps: (1) compute one row of the distance matrices for all the dimensions using an in-situ streaming dot product formulation. (2) sort the computed row along the dimensions. (3) update the matrix profile and matrix profile index by comparing the values if the latest computed rows of the distance matrices.

We further exploit the symmetric structure of the distance matrices¹ and only compute the upper triangular parts of them and then compensate for the lower parts by updating the matrix profiles and matrix profile indices accordingly. Moreover, as the computation of distance matrices and matrix profile updates has a different access pattern than the sorting kernels, we use a column-wise data layout for the former and row-wise layout combined with a double buffering scheme for the later. This enables vectorization of all the underlying kernels.

Partitioning Scheme: The iterative computation of the distance matrix and matrix profile, as introduced earlier, is an *embarrassingly-parallel* workload. Therefore, each process performs the steps, that are discussed earlier, indepen-

¹The distance matrices are symmetric only in case of self-join problems.

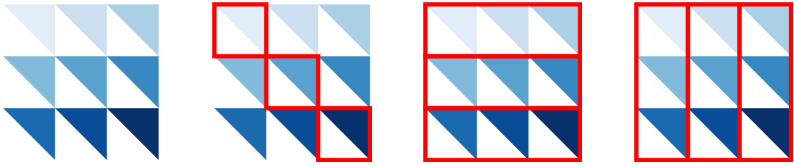


Figure 2: Illustration of the virtual topology of MPI processes in communicators. Each triangle with a distinct color intensity represents a separate MPI process working on a distinct part of the distance matrices. The red boxes represent exclusive process sets in communicators.

dently. Figure 2 (left) schematically illustrates the distribution of workload among multiple processes—nine processes in this case. Note that $(MP)^N$ computes the matrix profile by evaluating only the upper triangular parts of the partitioned distance matrix. The second sketch from left in Figure 2 shows the communicator used in I/O phases. We use only MPI processes responsible on the diagonals of the virtual topology for I/O. This allows us to reduce the pressure on the parallel file system caused by the large amount of I/O operations (*IOP*), which would otherwise degrade the I/O performance. In addition, $(MP)^N$ uses a data distribution and a final aggregation step to collect the partial results from different processing units. The right two sketches in Figure 2 represent row- and column-wise communicators used to distribute the data into MPI processes and aggregate them after partial computations. The data distribution and aggregation are realized using MPI operations `MPI_Ibcast` and `MPI_Ireduce` respectively on the illustrated communicators.

End-to-End Parallelization: Our prototype implementation uses an end-to-end parallelization, in which all the steps of the computation are fully parallelized. These steps are illustrated in Figure 3: the first step contains the construction of the virtual topology of the processes, and the creation of the MPI communicators that we described earlier using `MPI_Comm_create` and `MPI_Comm_split` operations. Next, we use MPI collective I/O func-

tionality to read the data into the processes on the diagonals of the virtual topology. In the next step, we use broadcast operations on the row- and column-wise communicators and prepare the data in each process. This step is followed by independent partial computation of matrix profiles in the processes. The next step aggregates the partial results using MPI User Defined Reduction (UDR) operations over the row- and column-wise communicators. In the final step, the processes on the diagonals of the virtual topology use MPI collective I/O functionality to write the final matrix profile and index to the parallel file system.

Evaluations

We conduct a wide set of experiments to demonstrate the performance of our implementation of $(MP)^N$. All our experiments are carried out on the *SuperMUC-NG*² system at the Leibniz Supercomputing Centre (LRZ). Our code is implemented in C++ and uses double-precision floating-point values in the kernels. We use the Intel C++ compiler v19.0 update 4.0 for compilation, and unless otherwise noted, we use Intel MPI. All our scaling experiments are executed using 48 MPI processes per node and each MPI process is mapped to one physical core. Moreover, all input sets are randomly generated sequences, as the performance is agnostic to the input data used.

Overview of the Conducted Experiments: Our experiments include the correctness and numerical stability of the results, which were validate for various problems sizes and numbers of processes. We further analyze the single core performance of our implementation and observe that the overall runtime

²<https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/SuperMUC-NG>



Figure 3: Illustration of steps of the end-to-end parallelization in $(MP)^N$ on distributed memory HPC systems.

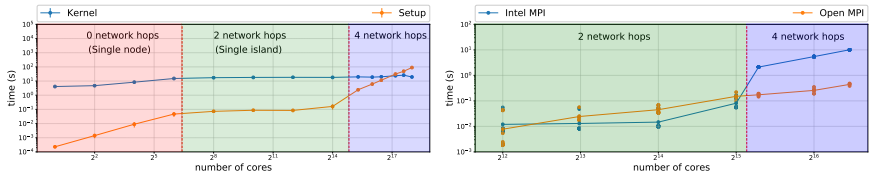


Figure 4: Weak scaling of $(MP)^N$, illustrating the time spent in the kernels and the main time consuming step, i.e., *Setup*.

of $(MP)^N$ is dominated by the sorting kernels, and the *AVX-512-bitonic* sort that is the *Skylake*-specific implementation of bitonic sort, developed by Bramas et al. [8] performs even better than the vendor implementation. We further evaluate the single-node performance of $(MP)^N$ on the SuperMUC-NG and achieve the memory bandwidth utilization that matches the STEAM benchmark. We develop an analytical performance model for various steps of the $(MP)^N$ that we introduced earlier and validate the model using experimental data from the runs on the SuperMUC-NG. We are not going to discuss all these experiments in details, however, we provide the scaling results and discuss the overheads in extreme scale in the following.

Scaling Results: Figure 4 shows our results for weak scaling experiments. Here, we fix the workload per core n_{core} to 2048. This results in a global problem size of $n = 2048$ on 1 node with 1 core, scaling up to $n = 1M$ on 5462 nodes with 262144 cores. We observe an ideal scaling of kernel execution time, illustrated in Figure 4, Left. In addition to that, we can clearly observe the effect of the network topology of the SuperMUC-NG on the performance of the *Setup* step. Although we encounter a significant increase ($\sim 58\%$) in time spent the *Setup* step when we use four hops of the fat tree interconnect (see the areas with light blue background color in Figure 4), this overhead lies within an acceptable range, as setup time is problem independent and scales only with the number of MPI processes.

Scaling Overheads: Even though the setup overheads can be absorbed by

the runtime in the more common weak scaling scenario, it clearly represents a performance problem. Further, by comparison with our performance model, we also see that this is not a property of the algorithm, but rather of the system. Upon further investigation, we trace the overhead back to the creation of the column- and row-wise communicators using `MPI_Comm_split` in the *Setup* step when using the default Intel MPI implementation. Subsequent experiments with alternative MPI implementations (see Figure 4, Right) have shown significantly better scaling for the `MPI_Comm_split` operation, indicating a non-scalable implementation by the vendor, which needs to be resolved.

Conclusions

In this work, we present a summary of our developed solution $(MP)^N$ for the mining of large-scale multi-dimensional time series targeting CPU-based HPC systems. $(MP)^N$ enables the computation of large matrix profiles—as a modern data mining approach—on an HPC system and makes it thereby applicable to large-scale real-world problems. Our parallelization scheme enables scaling up to 256K cores, providing highly scalable throughput and accuracy. In our experiments, we performed the fastest and largest ($1M \times 128$) multi-dimensional matrix profile ever computed with a projected kernel performance of 1.3 Petaflop/s.

Amir Raoofy
Roman Karlstetter
Dai Yang
Carsten Trinitis
Martin Schulz

References

- [1] C. M. Yeh et al.: *Matrix Profile I: All Pairs Similarity Joins for Time Series: A Unifying View That Includes Motifs, Discords and Shapelets.*

- International Conference on Data Mining (ICDM). 1317–1322. 2016.
- [2] N. Shakibay Senobari et al.: *Using the Similarity Matrix Profile to Investigate Foreshock Behavior of the 2004 Parkfield Earthquake*. AGU Fall Meeting, S51B-03, Dec-2018.
- [3] Hoang Anh et al.: *Matrix Profile V: A Generic Technique to Incorporate Domain Knowledge into Motif Discovery*. Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 125–134. 2017.
- [4] Hoang Anh et al.: *The Swiss Army Knife of Time Series Data Mining: Ten Useful Things You Can Do with the Matrix Profile and Ten Lines of Code*. Data Mining and Knowledge Discovery. 949–979. 2020.
- [5] Yeh et al.: *Matrix Profile VI: Meaningful Multidimensional Motif Discovery*. IEEE International Conference on Data Mining (ICDM). 565–574. 2017.
- [6] Raoofy et al.: *Time Series Mining at Petascale Performance*. Springer International Publishing. High Performance Computing. 104–123. 2020.
- [7] Zimmerman et al.: *Matrix Profile XIV: Scaling Time Series Motif Discovery with GPUs to Break a Quintillion Pairwise Comparisons a Day and Beyond*. Proceedings of the ACM Symposium on Cloud Computing. 2017.
- [8] Berenger Bramas: *A Novel Hybrid Quicksort Algorithm Vectorized using AVX-512 on Intel Skylake*. International Journal of Advanced Computer Science and Applications. 74–86. 2019.

ISC 2020 = ISC Digital

Eine jährliche Tradition, aber trotzdem ganz anders



Jeden Juni versammelt sich die gesamte HPC Gemeinschaft in Frankfurt zur jährlichen ISC (International Supercomputing Conference) – das war eigentlich auch für 2020 geplant, doch die globale Pandemie kam leider dazwischen und verhinderte den erhofften und erwartenden persönlichen Austausch von Ideen, Innovationen und Erfahrungen. Um jedoch die Tradition wenigstens zum Teil zu erhalten und auch um das umfangreiche technische Programm bestehend aus einer Vielzahl von bereits begutachteten und technisch hochwertigen Einreichungen nicht zu verlieren, hatte das Organisationsteam der ISC den schweren Entschluss gefasst, ISC 2020 virtuell als ISC Digital abzuhalten, an den gleichen Daten wie die ursprüngliche Konferenz: 22.-25. Juni 2020.

Das virtuelle Format, das einen Großteil des technischen Programmes enthielt, und die Entscheidung der ISC Veranstalter dieses Event der HPC Gemeinde kostenfrei zur Verfügung zu stellen, machte das Event zu einem großen Erfolg: über 4.700 Teilnehmer – mehr als je zuvor – nahmen an der virtuellen Konferenz teil und konnten 160 Präsentationen verfolgen. Einer der Höhepunkte war die große Konferenzeröffnung, die live ausgestrahlt wurde und bei der natürlich auch die traditionelle Präsentation der Top500 Liste nicht fehlen durfte, zumal diese eine neue Nummer 1 präsentieren konnte: das neue installierte Fugaku System bei RIKEN in Kobe, Japan, wahrscheinlich die letzte pre-Exascale Maschine auf diesem Spitzenplatz.

Gleich anschließend gab es eine Reihe von Vorträgen, die den Kampf gegen COVID-19 und den Einsatz von HPC in diesen Vorhaben zum Thema hatten – mit Sprechern von drei Kontinenten wurde deutlich, wie international diese Aufgabe und wie wichtig die Rolle des HPCs dabei ist um z.B. geeignete Impfstoffe zu finden. Aus Bayerischer Sicht war dabei besonders erfreulich, dass das Leibniz Rechenzentrum gleich von zwei Sprechern – Rick Stevens von Argonne National Laboratory und Peter Coveney vom University College London – explizit für seine aktive Rolle in diesen Unternehmungen, erwähnt wurde.

Das weitere Programm zog sich über drei Tage und brachte die gewohnten hochwertigen und vielfältigen Beiträge von begutachteten Konferenzpaper und Postern, eingeladenen Vorträgen bis hin zum gewohnten Vendor-Showdown. Eines der paper, das den Hans Meuer Best Paper Award gewonnen hatte, findet sich übrigens auch als Kurzfassung in diesem Quartl. Aus persönlicher Sicht auch sehr erfreulich war, dass das PhD Forum, das ich zusammen mit Olga Pearce vom Lawrence Livermore National Laboratory leiten durfte, in vollem Umfang stattfand und es jungen Wissenschaftlern, die kurz vor ihrer Promotion stehen, auch in diesem Jahr die Möglichkeit gab auf einer großen Bühne ihre Arbeiten zu präsentieren. Das ganze technische Programm ist übrigens – auch ein Vorteil der virtuellen Ausführung – komplett und kostenfrei auf YouTube verfügbar, unter:

<https://www.youtube.com/user/VideoISCEvents/playlists>

Trotz dieses Erfolgs, des reibungslosen Ablaufs und der breiten und höchstspannenden technischen Präsentationen, fehlte jedoch etwas – es wurde klar wie wichtig doch der persönliche Kontakt, die vielen extra Seiten-Veranstaltungen und das kurze Gespräch auf dem Gang sind. Für nächstes Jahr ist daher nur zu hoffen, dass sich die HPC Gemeinde wieder persönlich in Frankfurt versammeln kann. Als Program Chair für ISC 2021 kann ich Ihnen nur sagen, daß wir schon jetzt an einem wieder sehr spannenden Programm arbeiten und ich hoffe Sie alle in Frankfurt vom 27.6. bis 1.7.2021 begrüßen zu dürfen.

Program Chair, ISC 2021
Martin Schulz, TUM

Über den neuen Impact der Informatik

Bekanntlich erlebt die Informatik ja gerade einen Höhenflug. Digitalisierung, Big Data, KI linksrum und rechtsrum – alles inzwischen wohlbekannt. Aber dass wir auch in Sachen Ethik zum Trendsetter avancieren, erscheint dann doch als neu. Dank an Carsten Trinitis für den Hinweis!

Im Rezensionsforum literaturkritik.de erschien Ende Juni ein Beitrag von Sabine Koloch: *Braucht die Germanistik einen Ethikkodex? An den Deutschen Germanistenverband*. Ohne da jetzt ins Detail gehen, geschweige denn diese Frage beantworten zu wollen, sei auf Gliederungspunkt 1 verwiesen: *Der Anstoß: Die Ethischen Leitlinien der Gesellschaft für Informatik e.V.*. Dann wird fleißig zitiert, wie man das in Fächern wie der Germanistik halt so macht (zumindest unserer Meinung nach ...). „*Die GI war für mich der entscheidende Auslöser, einen Ethikkodex für die Germanistik anzuregen. Ich bin voll der Wertschätzung für die Ethischen Leitlinien der GI. Vielen Dank dafür!*“ – so ist zu hören und lesen.

Also – Glückwunsch an die beteiligten Kolleginnen und Kollegen. Da wurde also nicht nur ein wichtiges und auf viel Beachtung stoßendes Papier erarbeitet, sondern auch noch viel für das Image der Disziplin getan. Weiter so!

Siehe auch https://literaturkritik.de/public/artikel.php?art_id=1408&ausgabe=51

Hans-Joachim Bungartz.

8. BGCE Student Paper Price



Auf der SIAM CS&E Konferenz 2021, die vom 1.–5. März 2021 in Fort Worth, Texas, stattfinden wird, wird der 8. BGCE Student Paper Preis³ für hervorragende studentische Arbeiten im Bereich des Computational Science and Engineering vergeben werden.

Stifter des Preises ist die Bavarian Graduate School of Computational Engineering (BGCE), die als Elitestudiengang im Elitenetzwerk Bayern ein gemeinsames Aufsatzmodul für die besten und motiviertesten Studierenden der internationalen Masterprogramme Computational Engineering (CE) der Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) sowie Computational Mechanics (COME) und Computational Science and Engineering (CSE) an der TU München (TUM) darstellt. Die Gewinnerin bzw. der Gewinner des Preises wird im kommenden Sommer eine Woche lang kostenlos Bayern, die FAU und die TUM besuchen und intensiven Kontakt zu Vertretern der BGCE pflegen. Das Hauptanliegen des Preises ist es, exzellente Studierende im Bereich CS&E zu fördern und internationalen Austausch in einer frühen Karrierephase zu unterstützen.

Für den BGCE Student Paper Preis können sich Masterstudent*innen und Doktorand*innen bewerben, indem sie ein kurzes Paper von maximal vier Seiten einreichen. Die Preis-Finalist*innen werden ihre Arbeit in einem speziellen "CS&E Student Prize Minisymposium" auf der SIAM CS&E 2021 vorstellen—ob in personam oder online ist aktuell noch offen, stattfinden wird die Konferenz aber auf jeden Fall. Die Paper und Vorträge werden dann von einer internationalen Jury bewertet. Ausgeschlossen von der Teilnahme sind lediglich Studierende der FAU und der TUM.

³<https://www.bgce.de/news/bgce-student-paper-prize/>

Einreichungsschluss für den BGCE Student Paper Prize ist der **06.12.2020**. Beiträge werden bitte in pdf-Format an **ivana.jovanovic@tum.de** geschickt. Wir freuen uns neben den traditionell zahlreichen internationalen Einreichungen natürlich auch über viele Beiträge aus dem Quartl-Land!

Die Preisträger der vergangenen sieben BGCE-Preise sind:

- 2019: Elizabeth Qian (MIT) and Zakia Zainib (SISSA)
- 2017: Robert Gantner (ETH Zürich)
- 2015: David Emerson (Tufts)
- 2013: Tobin Isaac (ICES, UT Austin)
- 2011: Andrea Manzoni (EPF Lausanne)
- 2009: Gisela Widmer (ETH Zürich) and Chad Lieberman (MIT)
- 2007: Alfonso Bueno Orovio (Universidad de Castilla-La Mancha, Spain)

Tobias Neckel

Ausgezeichnete Daten-Forschung



In den mehr als 6480 Computerknoten des SuperMUC-NG arbeiten rund 15 Millionen Sensoren, die unterschiedlichste Daten aus dem System sammeln. „In Vorbereitung auf Exascale-Zeiten werden die Hochleistungsrechner immer komplexer“, erklärt Alessio Netti, Informatiker am Leibniz-Rechenzentrum (LRZ) in Garching. „Damit diese Systeme stabil laufen, besser steuerbar werden und vor allem deutlich weniger Energie verbrauchen, brauchen wir mehr Wissen und damit mehr Daten“. Gleich zwei Projekte aus dem Umfeld des LRZ, die sich mit Betriebsdaten von Hochleistungsrechnern befassen, wurden Ende Juni ausgezeichnet: Die Jury der Stockholmer ACM HDPC 2020 honorierte das LRZ-Tool Wintermute https://www.youtube.com/watch?v=U_6IFTkzjRA als eines der innovativsten Analyseverfahren für High Performance Computing (HPC). Auf der ISC 2020 in Frankfurt gewann wiederum ein Forscherteam um Amir Raoofy von der Technischen Universität München (TUM) den Hans-Meuer-Preis für die beste Arbeit <https://2020.isc-program.com/presentation/?id=pap191&sess=sess341> über eine neue Matrix zur Analyse von Langzeitdaten auf Supercomputer (die Kurzform dazu in diesem Quartl! Anm. d. Redaktion)

Die richtigen Daten sammeln und auswerten

Sensoren liefern bereits alle möglichen Informationen aus Supercomputern, etwa zu Temperatur, Leistung, Belastung und Beanspruchung von Komponenten. Am LRZ entstand bereits die Open-Source-Software Data Center Data Base (DCDB), die Daten von Millionen Sensoren einsammelt und so die Kontrolle von SuperMUC-NG und CoolMUC-3 ermöglicht. Um diese Systeme auch effizient steuern zu können, braucht es ein Analyse-Tool, vor allem aber eine Systematik zur Auswertung dieser Daten.

Mit Wintermute präsentierte Netti bei der HDPC <http://www.hpdc.org/2020/> ein generisches Klassifizierungsmodell <https://gitlab.lrz.de/dcdb/dcdb/-/blob/master/analytics/README.md#dcdbanalytics> und damit eine Grundlage für die Operational Data Analytics (ODA). Sie soll ein möglichst umfassendes Bild von Supercomputern liefern und Prognosen sowie Anpassungen rund um die Technik ermöglichen. Dazu verarbeitet Wintermute Informationen, die in Komponenten erzeugt (In-Band-Daten) oder von diesen versendet werden (Out-of-Band-Daten), entweder in einem Streaming-Verfahren, kontinuierlich (Online-Verarbeitung) oder nur bei explizitem Bedarf (On-Demand-Verarbeitung). Anhand von drei Fallstudien aus dem CoolMUC-3 zeigt der LRZ-Informatiker, mit welchen Daten sich etwa Anomalien in einzelnen Rechnerknoten aufspüren lassen, um sie auszutauschen oder zu optimieren. Auch der Energieverbrauch lässt sich mit Wintermute und ausgesuchten Monitoring-Daten <https://gitlab.lrz.de/dcdb/dcdb> nachverfolgen und anpassen. Außerdem zeigt das Open-Source-Tool, wo Computertechnologie für Engpässe bei der Simulation und Modellierung sorgt. „Wintermute nutzt Methoden des maschinellen Lernens, um die Operational Data Analytics aussagekräftiger und damit noch leistungsfähiger zu machen“, so Netti. „Das Tool wurde so konzipiert, dass es in jedes bestehende Monitoringsystem integriert werden kann“. Darauf verweist auch der Name: Wintermute heißt eine künstliche Intelligenz, die sich in einer Science-Fiction-Trilogie <https://de.wikipedia.org/wiki/Neuromancer-Trilogie> von William Gibson mit einer weiteren vereinigt und zur - besseren - digitalen Lebensform wird. Die Erkenntnisse aus Wintermute können helfen, Computersysteme der Zukunft zu verbessern.

Ein skalierbarer Ansatz für die Analyse riesiger Zeitreihen

Auch Amir Raoofy, wissenschaftlicher Mitarbeiter am TUM-Lehrstuhl für Rechnerarchitektur und parallele Systeme von Professor Martin Schulz, arbeitet mit Daten, die tausende Sensoren aus Supercomputern oder aus den Überwachungssystemen von Kraftwerken über Wochen oder sogar Jahre liefern. Ihn interessiert jedoch, wie SuperMUC-NG und CoolMUC-3 mit den riesigen Datenmengen umgehen. „Mit Hilfe von Matrix-Profil-Algorithmen

lassen sich Zeitreihen nach Mustern und Ähnlichkeiten durchsuchen“, umreißt Raoofy das Problem. „Aber sie lassen sich nur schwer skalieren und sind nicht für HPC-Systeme geeignet“. Allerdings erfordert die Auswertung großer Zeitreihen Supercomputing: Wer wissen will, unter welchen Bedingungen eine Gasturbine zuverlässig läuft und wann die ersten Komponenten reparaturanfällig werden, sollte viele Daten prüfen können. Die Rechenleistung und Fähigkeiten von Supercomputern ermöglichen solche Analysen erst im Verein mit skalierbaren Algorithmen. Raoofy und Kollegen entwickelten den nun preisgekrönten skalierbaren Ansatz $(MP)^N$. Dieser kann auf bis zu 256.000 Rechnerkernen, das sind rund 86 Prozent der Rechenressourcen des SuperMUC-NG, effizient ausgeführt werden. Dass er exakte Berechnungen liefert, wurde mit Leistungsdaten des SuperMUC-NG getestet. Zurzeit wird der Algorithmus zur Analyse von Daten, die zwei Gasturbinen der Stadtwerke München liefern, eingesetzt. TurbO heißt das Projekt, das die Bayerische Forschungsförderung fördert. „In unseren Experimenten haben wir das schnellste und größte jemals berechnete mehrdimensionale Matrixprofil durchgeführt“, berichtet Raoofy. „Wir erreichten eine projizierte Kernleistung von 1,3 Petaflop.“ So können Supercomputer wie der SuperMUC-NG die Daten aus langen Zeitreihen schnell und effizient auswerten - Wissenschaft und Technik werden das zu nutzen wissen.

Das mit dem Hans-Meuer-Award ausgezeichnete Paper „Time Series Mining at Petascale Performance“ ist zum freien Download verfügbar.

Sabrina Schulte

LRZ installiert HPE-System Cray CS500 mit Fujitsu A64FX-Prozessoren



Als erstes akademisches Rechenzentrum in der EU nimmt das Leibniz-Rechenzentrum ein HPE-System Cray CS500 mit Fujitsu A64FX-Prozessoren auf ARM-Basis in Betrieb. Dabei handelt es sich um die gleiche Architektur wie bei dem japanischen Höchstleistungsrechner Fugaku, der den ersten Platz in der aktuellen Top500-Liste (Juni 2020) belegt.



Abbildung 1: Foto: HPE/Cray

Die ARM-basierte Architektur in den Fujitsu-Prozessoren, die von Hewlett Packard Enterprise integriert wurde, soll sowohl für traditionelle Modellierungs- und Simulationsaufgaben, als auch für Datenanalysen, maschinelles Lernen und KI-Arbeitslasten geeignet sein. Sie wird in den nächsten Wochen in die LRZ-Testumgebung „BEAST“ (Bavarian Energy, Architecture and Software Testbed) integriert.

Neben dem internen Testbetrieb, soll das System ab dem frühen Herbst für ausgewählte Projekte wie auch für die nächste Generation von HPC-Anwendern zur Verfügung stehen. Anwender haben so die Möglichkeit, die Performance der Fujitsu A64FX-Prozessoren im Alltag mit GPUs und mit üblichen CPUs zu vergleichen. Das LRZ als Rechenzentrum interessiert sich zudem besonders dafür, welche Rechenleistung pro Watt das System liefert. https://www.lrz.de/presse/ereignisse/2020-06-23_LRZ-to-deploy-HPE_s-Cray-CS500-system-to-bring-innovative-architecture-to-the-science-of-its-users/

Sabrina Schulte

New projects - Spring 2020



The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria welcomes the new projects that succeeded in the application round of spring 2020. As every semester, we accepted proposals of “normal” (up to 12 months) and “small” (up to 3 months) projects and we are expecting new applications for the fall round until September 1st.

Normal projects

- *Implementation of multiscale X-DFA - a Fourier analysis for X-ray radiograms* - Manuel Baur, Prof. Thorsten Pöschel (Institute for Multi-scale Simulation, FAU)
- *Talking Hands* - Dr. Peter Uhrig (Chair of English Philology and Linguistics, FAU)
- *Semiempirische Molekülorbital-Theorie für sehr große Systeme* - Prof. Timothy Clark (Computer Chemistry Center, FAU)
- *High-order matrix-free finite element implementations with hybrid parallelization and improved data locality* - Dr. Martin Kronbichler, Prof. Wolfgang A. Wall (Institute for Computational Mechanics, TUM)

Small projects

- *Code Optimierung für die interferometrische Auswertung von Satellitendaten zur globalen Bestimmung von Gletscherhöhenänderungen* - Prof. Matthias Braun (Institute for Geography, FAU)
- *Embedding Python COSIPY in WRF for improved simulations over glaciers* - Dr. Emily Collier (Institute for Geography, FAU)

You can find more details about these projects at

<https://www.konwihhr.de/konwihhr-projects/>

The new projects are going to participate in an online workshop on October 7, presenting their goals and challenges.

KONWIHR-supported software

You can now also find a list of software projects that have been supported by KONWIHR at

<https://www.konwihhr.de/software/>

In case you have received funding for developing software in the past, send us a short description to add your small or larger software project next to deal.II, LIKWID, waLBerla, and more.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihhr.de

Your email will be read carefully and answered by Katrin Nusser or Gerasimos Chourdakis, KONWIHR's current contact people in the Bavarian North and South.

Together with Prof. Gerhard Wellein and Prof. Hans-Joachim Bungartz (who you can also reach using the same address), we collect and process your proposals two times per year (1st of March and 1st of September). Learn more about how you can apply for funding at:

<https://www.konwihhr.de/how-to-apply/>

Gerasimos Chourdakis

preCICE v2.1 (from home)



While almost every aspect of our lives changed in the past few months, there are fortunately still a few constants in life. The development of our favorite coupling library was little influenced, if not accelerated, by the longer opportunities for concentration (where applicable).

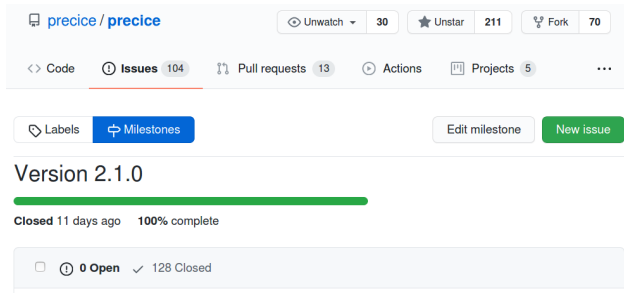
Those of you following the preCICE development since longer will point out that the v1.x cycle had a feature release every 3-4 months, while it took 6 months for v2.1 to come out. Protect yourselves from quick conclusions: this was planned! We are glad for the fast release cycles that allowed us to reach a much more mature state with v2.0, but we have the feeling we caused a bit of nausea to our users on the way.

The release notes (now also as a human-readable news post) are again full of new features, bugfixes, and maintainability improvements. Highlights:

- Rewritten all error messages, which now help you fix mistakes without looking at the documentation. We experience a lot of love from Git every day, so we also wanted to bring such treats to our users.
- Parallel RBF mapping is now also possible with a (slower but simpler) gather-scatter QR-decomposition using the header-only Eigen library. While our PETSc-based GMRES implementation remains the flagship that can show a difference in large cases, the simplicity of Eigen can help new users start with small-/medium-size cases.
- Few people know of the golden section feature that stands between the fast but inaccurate nearest-neighbor mapping and the slower but more accurate RBF-based mapping. This is because the nearest-projection mapping, which combines the best of both worlds, was a bit tricky to setup in some cases, requiring to see triangles where a mesh only provided quads. We now make users' lives easier when working with hexahedral meshes, as one can now give quads simply as... quads. But be assured, a simple-to-use feature very often requires delicate engineering to become one.

- Another powerful feature that was mostly sitting in the closet, oiling its gears and waiting for users, was the “actions”: a set of additional operations that can act on the coupling data at different times. These times were a bit unclear and the documentation scarce. Not anymore! Now a user can easily e.g. sum two meshes after receiving them but before applying a read-mapping to another mesh.

These are only some of the highlights, as in this release a lot of work was again under-the-hood. As Benjamin U. wrote the morning after the long coding days: *“Thanks a lot everybody for the great work for this release. I guess we never had significant contributions from so many contributors. And that’s really great!”*



100% complete: The signal for a (semi-remote) beer!

What features come next? This is, of course, top-secret. But it may be a good time to migrate to a better infrastructure for our CI and system tests, explore other platforms, and restructure our always growing collection of tutorials and documentation. Until then, have a nice summer (and fall)!

Gerasimos Chourdakis

*** Notiz * Notiz * Notiz ***

Termine 2020/21 (falls Corona es erlaubt)

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **Supercomputing 2020**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC20) –
SC 20 in Georgia World Congress Center Atlanta, GA, USA:
15.11.-20.11.2020 <https://sc20.supercomputing.org/>
- **International Supercomputing Conference 2021**
The event for High Performance Computing, Machine Learning and Data Analytics) –
ISC in Frankfurt, Germany:
27.06. - 01.07.2021 <https://www.isc-hpc.com/>

Quartl^{*} - Impressum

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde

Redaktion:

S. Herrmann, S. Seckler, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München, Fakultät für Informatik

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

Tel./Fax: ++49-89-289 18611 / 18607

e-mail: herrmasa@in.tum.de, www5.in.tum.de/quartl

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.12.2020**

* **Quartel** : früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das **Quart** : 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)