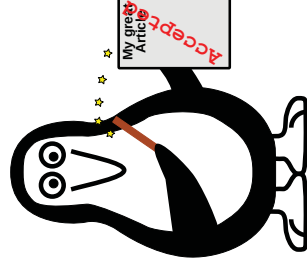


Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
A Look Back at SC 2020 Digital	8
MPI 4.0 is Coming to an	
HPC System Near you Soon	10
KONWIHR Workshop - Fall 2020	
& new mailing list for projects	12
GWK Entscheidung zum Thema NHR	14
Erlangen-Regensburg KONWIHR Team:	
Dem A64FX-Prozessor auf den Zahn gefühlt	16
”Preis für beste Übungsleiter”	19
Ferienakademie 2020/2021	21
Das BEAST im Rechenzentrum	22
SPPEXA Symposium (FRA/GER/JP)	26
Award for Best postgraduate level:	
- Romanian Student 2019	30
- Bulgarian Student 2020	31
Cluster Challenge UK - virtuell	32
Ja wo optimieren sie denn hin?	33
Notiz:*Notiz:*Notiz	35



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: **01.03.2021**

* Quarttel: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quartt: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)

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 Engineer-*
ing (BGCE)

Editorial

Jüngst erreichte mich mal wieder eine Email besonderen Betreffs: „Publish without Rejection“ war da zu lesen. Na, wenn das nicht zum genaueren Studium animiert. Eigentlich stuft ich solches Zeug ja in die Kategorie des unsagbar reichen Industriellen aus Nigeria, dessen Erbe nun an den Mann oder die Frau gebracht werden soll, und werfe es sofort weg. Aber wenn das Quartl-Editorial ansteht, geht man dem „nie wieder eine Rejection“ schon mal nach ...

Und da war dann zu lesen (sic!): „Dear Colleague, according to the research, most articles face the rejection of high impact academic journals. It has also been confirmed that other journals that aspire a high impact standard now follow their example. Therefore, it is important that, as an excellent writer/author in your field, you deserve to be published in a high-impact journal without being rejected. That is why we give our time and effort to give you the honor you deserve and to save you the time and effort you can waste in multiple rejections by reviewing and thoroughly editing your document in search of errors that may cause rejection according to the publication of your journal's editorial policy.“

Es folgen eine Preistabelle, die zwar hinsichtlich der Geschwindigkeit der Dienstleistung (da gibt es „regulär“, „standard“ oder „express“), nicht aber hinsichtlich der Länge des Beitrags differenziert – was schon mal ungewöhnlich ist. Zweitens lässt die sprachliche Qualität der Email zu wünschen übrig – was ja im Grunde heute eher der Regelfall ist; allerdings spricht das nicht gerade für die Qualität des angebotenen Lektoratsservices. Gezeichnet ist die Email mit „Prof. Spencer C. Bowden, Oak-fortress Proofreading International“. Also ein Professor Bowden sollte eigentlich ein anderes Englisch drauf haben, und ein Professor (für was auch immer) allemal. Seine Email-Adresse lautet übrigens manuscript@englishscholars.ga, und die Manuskripte sind zu schicken an contact@oakfortressproofreading.com. Sofort frage ich mich, für was denn das Länderkürzel „ga“ wohl stehen mag – die Antwort lautet Gabun, ein zentralafrikanisches Land an der Westküste Afrikas. Jetzt möchte ich Gabun nicht zu nahe treten, kenne mich dort auch überhaupt nicht aus –

* Notiz * Notiz * Notiz *

Termine 2020/21 (falls Corona es erlaubt)

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **International Supercomputing Conference 2021**
The event for High Performance Computing, Machine Learning and Data Analytics) – ISCDIGITAL:
24.06. - 02.07.2021 <https://www.isc-hpc.com/>
- **Gesellschaft für angewandte Mathematik und Mechanik**
International Association of Applied Mathematics and Mechanics – GAMM Annual Meeting, Kassel, Germany: 15.3.-19.03.2021
<https://jahrestagung.gamm-ev.de/index.php/2020/2020-annual-meeting>

intensiv. Ein Großteil der eigentlichen Arbeit findet asynchron über Slack statt.

- Wir wollen Tool-Entwickler mit involvieren und aktiv interagieren lassen: Wir suchen nach Feedback welche Features fehlen oder nützlich sind, oder wir wollen aktiv Features verwenden und bewerben (wie Annotationen), die viele normale Anwendungs-Codes nicht kennen und nutzen.
- Viele Anwendungsspezialisten können mit Performance-Daten wenig anfangen und haben ihre eigene *Sprache entwickelt*, wie sie über Performance argumentieren oder wie sie ihre algorithmischen Schritte darstellen. Wir möchten diese Darstellungen diskutieren und nach Wegen suchen, wie man Performance-Daten so aufbereitet, das sie auch der Anwender versteht.

Die Kursankündigung in UK ist bisher extrem positiv aufgenommen worden. Insbesondere die Suche nach kompletten Teams motiviert Gruppen hinter größeren Codes sich anzumelden. Es sind aber immer noch Plätze frei - und egal was am 1. Januar 2021 passiert, unsere Grenzen bleiben offen.

<https://tinyurl.com/performanceanalysis2021>

Tobias Weinzierl

aber dass hier das Zentrum höchster sprachlicher Qualität wissenschaftlicher Publikationen liegt oder gar der Garant immerwährender Akzeptanz behelmatet ist, kann ich mir kaum vorstellen.

Also suche ich kurz die Webseite von Oak-fortress auf. Die sieht auf den ersten Blick ganz nett aus, ist aber billig gemacht und enthält keinerlei Information, die über den Inhalt der Email hinausginge; insb. keinerlei Kon-taktdaten. Es finden sich noch mehrere andere Webseiten mit Bezügen zu Oak-fortress, inklusive einiger mit warmendem Inhalt. Und es gibt natürlich noch viel mehr ähnlich dubiose Firmen dieses Genres, manchmal mit durch-aus glanzvollem Namen wie Cambridge Proofreading Service. Also wohl doch kein trotteltiger Lektor, sondern eher ein trotteltiger Gauner. Eigentlich schade – nie mehr einen Artikel abgelehnt zu bekommen, das hätte ja schon seinen Charme gehabt, Gabun hin oder her.

Egal, ob das nun schlichtes Phishing ist, ob sie illegal ein paar Dollars verdienen wollen, oder ob sie so an alle möglichen Manuskripte rankommen wollen (schließlich sei man ja ein „excellent author“) – es ist nicht besonders gut gemacht, aber hat zumindest einen gewissen Unterhaltungswert. Mit der Möglichkeit, dass ein Artikel auch mal abgelehnt wird, werden wir jedenfalls bis auf Weiteres leben müssen.

Und jetzt noch ein Wort zu dem Ereignis, das meinen Schlaf diese Woche noch weiter reduziert hat, als er es eh schon ist – die US-Wahl. Keine Ahnung, was der Stand sein wird, wenn Sie, liebe Leserinnen und Leser, dieses Editorial lesen, Stand heute ist auf jeden Fall, dass die Tage des orangen Popanzes im Weißen Haus gezählt sind. Sleepy Joe hat somit quasi im Schlaf geschafft, was für unsereiner in Old Europe fast eine Selbstverständlichkeit, in USA aber verflucht eng war. Zur Ehrenrettung dieses (in meinen Augen immer noch) grandiosen Landes sei gesagt, dass die Wahlergebnisse in D.C. und Detroit (um nur zwei Beispiele zu nennen) ähnlich zu den Trumpschen Zustimmungswerten in Deutschland waren. Aber es gab eben auch tonnenweise die roten Jünger, oder rot Verblendeten, die den Kommunismus fürchten, in Trump den Auserwählten sehen, und Wahlbetrug auf der ganzen Linie mutmaßen.

Letzteres übrigens ein Kuriosum: Normalerweise beschwert sich doch die Opposition über Wahlbetrug (Russland, Belarus, Türkei, Venezuela, Ungarn, Polen, die Liste ließe sich fast beliebig fortsetzen). Hier aber beschwert sich die Regierung, der Machthaber, dass „die anderen“ (wer auch immer – z.B. die republikanischen (!) Regierungen von Arizona und Pennsylvania?) sich gegen die Machthaber verschworen haben und nun den greatest President ever um seinen mehr als verdienten Wahlerfolg bringen wollen. Nun denn. Schade nur, dass ich die Geschichtsbücher von 2070 wohl nicht mehr lesen können werde... Über die Episode 2016-2020, aber auch über die kommende. Sprüche wie „Wir werden die Wahrheit über die Fakten stellen“, oder das Verwechseln von Ehefrau und Schwester erinnern ja schon an die zweite Amtszeit eines Heinrich Lübke. Aber was auch kommen mag, es kann nur besser werden.

Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen allen, liebe Leserinnen und Leser, eine schöne und ruhige Weihnachtszeit, mit möglichst wenigen Corona-Beeinträchtigungen (und ich meine jetzt nicht den Verzicht auf Schwachsinn à la Ischgl)! Bleiben Sie gesund und haben Sie viel Spaß mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

Ja wo optimieren sie denn hin?

Performance ist ja so eine Sache. Nie gut genug, aber jeder weiss, wo sie verloren geht. Nur wenn man sie dann wirklich sucht, dann heisst es *ja wo iss se denn (verloren gegangen)?*.

Im Königreich läuft ja seit einiger Zeit das ganz eigene HPC-Programm namens ExCALIBUR. Jetzt können wir uns über Umfang und Motivation dahinter streiten, aber der Name ist wenigstens richtig gut. Teil dieses Programmes ist die Idee, ein Training-Programm für Supercomputing aufzusetzen. In einigen Brainstorming-Sessions der involvierten alten Männer (das gäbe jetzt Luft und Raum sowohl über Diversität als auch Agilität zu philosophieren) wurde schnell klar gemacht, dass eigentlich ja genug Training da sei über PRACE und Co. Aber irgendwie ist es dann doch erstaunlich, wie wenig (systematisch) Performance-Analyse bei großen Projekten betrieben wird.

Deshalb haben wir uns in Durham jetzt zusammengetan: Brian Wylie aus Jülich bringt die Tool-Kompetenz ein. Alastair Basden ist der HPC Manager in Durham für die DiRAC-Maschinen. Das ist praktisch die ganze Physik-HPC-Meute. Marion ist seit kurzem N8 CIR RSE Theme Lead (N8 sind die forschungstärksten acht Unis im Norden). Und ich bin auch noch da.

Zusammen haben wir eine ganze Performance-Analysis-Workshop-Series (tolles Wort im Deutschen mit den englischen Begriffen) zusammengestellt. Da gibt es ein paar Besonderheiten:

- Es ist eine ganze Serie von Workshops und wir suchen nach kompletten Teams, die an den Workshops teilnehmen mit dedizierten Codes. Die Idee ist, dass immer nur wenige Tools pro Workshop-Tag diskutiert werden und die Teams dann diese Tools über ca. einen Monat auf ihre Codes werfen. Im Idealfall begleitet uns ein Team über ein gutes halbes Jahr und verbessert über diesen Zeitraum die Performance systematisch.
- Die Workshops sind virtuell, relativ kurz (ein halber Tag plus) und

Cluster Challenge UK - virtuell

Cluster Challenges sind ja ein prima Ding: Da rollt man Bare-Metal in eine Halle und am Ende der Competition siegt das Team, dass am meisten Science aus dem Ding rausquetscht hat. Und dazwischen stehen ganz viel Leute um das Team rum, essen Kekse und trinken Kaffee. All das geht in Corona-Zeiten nicht mehr so einfach.

In England gibt es seit Generationen die Computing Insight UK – eine Art nationale ISC – und schon einige Zeit spukt die Idee herum, dass man doch eine Cluster-Challenge organisieren könnte. In Durham sind wir schon zweimal angesprochen worden, ob wir ein Team zusammenstellen würden, aber dann kam nie der Call.

Dieses Jahr war es dann aber so weit: Es gibt eine UK Cluster Challenge. Und natürlich sind wir dabei, denn (a) haben wir gerade einen Summit in Betrieb genommen – damit haben gewisse Firmen ein Interesse, ein Challenge-Team zu pushen - und (b) haben wir im zweiten Jahr einen Master in Scientific Computing and Data Science in Durham. Da muss doch was gehen.

Gehen tut natürlich nix, denn das Land ist de facto im Shutdown. Deshalb ist auch die Cluster Challenge virtuell. Statt Kabellegen musste das Team jetzt Quantum-Computing Challenges lösen, Wetter-Codes mit OpenACC optimieren, Benchmarks durchrödeln, und so weiter und so fort. Acht Challenges standen an und – tara – wir haben gewonnen!

Schuld daran ist nicht zuletzt Holger Schulz, der mit mir zusammen an ExaHyPE im Rahmen des UK Exascale Programmes arbeitet. Jede Woche hat er sich mit den Studenten zusammengezoomed. Da wurde dann auch schon mal ein Crash-Kurs in Scheduling gegeben oder eine Team-Reflektion angesetzt: warum nur war man schon wieder von Liverpool versenkt worden? Aber am Ende hat es gereicht und ich bin stolz auf unsere Studis ...

Schau mer mal, ob in Frankfurt was geht,

Tobias Weinzierl

Iterationsschleife

N=37

02. Dezember 2020

Sprechen Sie mir einfach langsam nach^a: Man kann natürlich darüber diskutieren. Also grundsätzlich kann man darüber diskutieren. Nur jetzt, gerade in dieser Situation, ist es schwierig. Es ist ja nicht so, dass man nicht darüber diskutieren könnte. Sovieles gibt es was man diskutieren müsste und sollte und könnte und dürfte und möchte.

Es wäre ja auch lachhaft, wenn man gerade darüber nicht diskutieren dürfte. Im Gegenteil, man muss sogar darüber diskutieren. Man muss es klar und deutlich ansprechen und man muss es beim Namen nennen. Nicht jetzt - aber im Prinzip schon und unbedingt auch offen und kontrovers – alternativ dazu auch einfach transparent. Ja, es ist geradezu eine staatsbürgerliche Pflicht^b, jetzt und hier auch Stellung^c zu beziehen und sich eine Meinung zu bilden. Natürlich. Gerade wir müssen uns besonders dafür engagieren, dass wir eine Diskussion beginnen und das Für und Wider abwägen. Oder vielleicht doch wieder das Führen?

Wobei: staatsbürgerliche Pflicht ist ja ein Widerspruch in sich selbst oder eine *contradictio in adiecto*^d. Man könnte nun ausführlich den Begriff der *contradictio in adiecto* diskutieren. Das würde auch eine Seite füllen, vielleicht zwei. Aber wie war das noch mit der staatsbürgerlichen Pflicht? Spricht nicht das Grundgesetz von der Freiheit des Christenmenschen und dem Streben nach Glück?

Doch nicht ganz. Das Grundgesetz kennt die Würde des Menschen. Auch schon etwas. Allemal besser jeden-falls als nur von der Freiheit des Christenmenschen zu sprechen denn es gibt – so hört man – auch solche die da keine Christenmenschen, sondern einfach nur so (ist das schon diskriminierend?) Menschen sind.

^aGehen Sie dazu gerne auf den Balkon oder besuchen Sie eines der geschlossenen Theater, denn die Bühnen eignen sich für das freie Sprechen besonders und sind jetzt leer.

^bHierzu beachten Sie bitte die Ausführungen eines gewissen Immanuel Kant zum Thema Pflicht und Neigung.

^cStellung zu beziehen hier nicht als im militärischen Sinn zu verstehen und auch bitte in keinem anderen Sinn, der einem in den Sinn kommen könnte (man beachte, dass einem der Sinn in den Sinn kommen kann auch wenn einem der Sinn nach etwas gänzlich Anderem steht!) sondern ausschließlich im Sinne einer inhaltlichen Stellungnahme.

^dDer Autor pflegt mitunter den Umgang mit Lateinlehrem und liest dann mühsam und mit Genuss lateinische Texte. Also warum nicht auch einmal hier damit renommieren?

Und auch das Glück steht nicht im Grundgesetz aber auch nicht in der amerikanischen Verfassung. Dort findet man es nur in der declaration of independence – ein Begriff der schon wieder irritiert, denn was will ein Mensch der sterblich ist von Unabhängigkeit sprechen, wo er doch schon morgen der Frau des Ackermanns aus Böhmen^a folgen wird. Wer nun das wieder ist, wissen Sandra Richter^b und jede gut sortierte Buchhandlung^c.

Gibt es im Grundgesetz auch Pflichten für die Bürger wie etwa die Pflicht zur Beteiligung an der politischen Diskussion? Nicht einmal eine Wahlpflicht findet sich im Grundgesetz. Und wie ist das dann mit den staatsbürgerlichen Pflichten? Ist eine dann eine Staatsbürgerin, so stellt sich doch die Frage nach den Verpflichtungen. Freiheiten sind ausreichend definiert im Grundgesetz. Die Pflichten sind schwerer zu finden^d.

Zunächst ist da die Staatsgewalt verpflichtet. Was genau die Staatsgewalt ist, bleibt ein wenig unklar, denn schon unmittelbar nach der Verpflichtung der Staatsgewalt fächert sich das Grundgesetz auf, lässt das Deutsche Volk sich bekennen und bindet dann die Gesetzgebung, die vollziehende Gewalt (vielleicht ist das die Staatsgewalt?) und die Rechtsprechung an die Grundrechte. Aber vermutlich findet der interessierte Staatsbürger allerlei Geschlechts^e die Antwort auf die Frage nach der Staatsgewalt in akademischen Kommentaren zum Grundgesetz beantwortet.

^aHierzu kontaktieren Sie gerne Johannes Tepl.

^bSandra Richter, Direktorin des Deutschen Literaturarchivs in Marbach, ein Ort der berühmt für das Schillersche Geburtshaus ist aber noch berühmter für die Suche der Queen nach den horses, die sie fälschlich in Marbach vermutet hat, wo diese doch in Wirklichkeit in Marbach auf der schwäbischen Alb zu finden gewesen wären, womit wir wieder einmal Grund zur Annahme haben, dass Karl Marx keinesfalls recht hatte, wenn er annahm, ein Leben im Überfluss würde den Menschen dazu bringen, sich den höheren Dingen des Lebens zuzuwenden – außer man hält das Reiten auf einem Pferd für ein höheres Ding, was rein physisch nicht zu bestreiten wäre.

^cZerknirscht gebe ich zu, dass diesem Hinweis schwer zu folgen ist, da Buchhandlungen sich munter zu Orten des esoterischen Klimbims entwickelt haben und daher eine gut sortierte Buchhandlung so selten geworden ist wie der papilio machaon – auch bekannt als Schwalbenschwanz. Hinweise auf wirklich gut sortierte Buchhandlungen nimmt der Autor nicht dankend entgegen.

^dDie Schwierigkeiten beim Finden der Pflichten könnten ein Grund dafür sein, dass diese meist stärker vernachlässigt werden als die Freiheiten.

^eIm Folgenden wird mit der männlichen Form immer auch die Vielzahl der Geschlechter mitgedacht ohne dass der Autor eine Einschränkung seiner Leserschaft vornehmen möchte.

Award for Best Bulgarian Informatics Student at postgraduate level!



Our former PhD candidate Dr. Nikola Tchipev has recently won the John Atanasov award from the Bulgarian president for his PhD thesis. This "John Atanasov" Award of the President of the Republic of Bulgaria has been awarded since 2003 to Bulgarian scientists in the field of computer science. The official award ceremony took place on October 5th in the Emblem Hall at the Kniaz Aleksandar Dondukov Boulevard 2 in Sofia.

Find more:

- <https://www.president.bg/cat37/5/About-award-John-Atanasov.html&lang=en>
- [https://www.novinite.com/articles/184094/Bulgarian+President+Honours+15+Bulgarian+Scientists+with](https://www.novinite.com/articles/184094/Bulgarian-President+Honours+15+Bulgarian+Scientists+with)
- <https://newsbeezer.com/bulgariaeng/zlatko-minev-from-yale-university-is-the-2020-john-atanasov-award-winner/>

Award for Best Romanian Student at postgraduate level in Europe in 2019



This year's "Heinz Schwärtzel Dissertation Award" for the best PhD thesis in foundations of informatics in Munich will be shared among two researchers: Salomon Sickert from Javier Esparza's chair and Ionut-Gabriel Farcas from SCCS Chair. Congrats across the ocean to Ionut!

The Heinz Schwärtzel Award for foundations of informatics has been awarded annually since 2006. It is aimed at excellent doctorates from the three Munich universities. The founder is Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Heinz G. Schwärtzel, honorary professor at the TUM Faculty of Informatics since 1991. The award is particularly important to promote fundamental research in computer science.

Unklar ist aber auch, wovor die staatliche Gewalt die Würde des Menschen schützt. Denn da die staatliche Gewalt die menschliche Würde schützt, könnten nur nicht-staatliche Gewalten die Würde des Menschen angreifen. Das aber wären dann einfach nur die anderen Menschen. Somit bestünde die Pflicht der Staatsgewalt darin, die Würde der Menschen vor den Menschen zu schützen. Eine Aufgabe die schwer werden kann, wenn die Menschen (also der eine Teil davon) die Staatsgewalt dazu nutzen, um die Menschen (also den anderen Teil davon) zu entwürdigen – in welchem Fall die Staatsgewalt die Würde der Menschen vor der Staatsgewalt zu schützen hätte. Impliziert das auch den Schutz der Menschen vor den Menschen oder löst sich in Krisenzeiten die Würde des Menschen vom Menschen und schwebt irgendwie frei im Raum, getrennt von ihrem Eigentümer oder Besitzerin^a? Aber gut: Der Präsident hat ja schon versprochen, sein Amt friedlich abzugeben^b. Ist das schon ein Erfolg der Demokratie?

Gut das wir darüber gesprochen haben. Eine offene Diskussion ist natürlich das Beste um mit der Situation fertig zu werden. Wollte Herr Lauterbach vielleicht noch etwas ergänzen? Und möchte uns sonst noch jemand die Welt erklären?

Fabrizio De André^c singt „Mia madre mi disse non devi giocare con gli zingari nel bosco“.

Die Iterationsschleife droht zu divergieren!!! Doch Fabrizio zeigt uns den Weg.

„dite a mia madre che non tornerò!“

M. Resch

^aDie Frage von Besitz und Eigentum ist juristisch sauber definiert. Die Würde mag allerzeit Ihr Eigentum sein, sie ist aber nicht immer in ihrem Besitz, wenn jemand Ihnen diese Würde genommen hat. Sie sind dann besitzlos in Sachen Würde aber rechtlich betrachtet nicht unbedingt eigentumslos in Bezug auf Ihre Würde. Das allerdings ist ein schwacher Trost.

^bZugebenermaßen hat er nur angekündigt, das Wohnhaus des Präsidenten zu verlassen. Aber schließlich hofft der Mensch solange er schreibt!

^cFabrizio Cristiano De André (1940 – 1999) war ein italienischer Cantautore (zu Deutsch etwa: ein Liedermacher).

A Look Back at SC 2020 Digital

We have all (almost) gotten used to virtual conferences, and we all have our opinions on their impact, usefulness and reach. But SC is not a normal conference, in physical or virtual form, and hence, its digital version this year was widely anticipated. Extended to almost two weeks, SC 2020 featured all the usual aspects of its program from tutorials (featuring many usual suspects and well-known presenters) and workshops in the week prior to the main event, to a fascinating keynote – given by Prof. Bjorn Stevens from the Max Planck Institute for Meteorology in Hamburg with a highly engaging Q&A session – as well as an interesting tech papers and posters program.

More prominent than usual, due to the virtual format, a wide range of BoFs were also held, each featuring both a presentation and a Q&A component. These proved to be extremely valuable to engage the community and to drive new activities. This included the usual Top500 BoF confirming RIKEN's Fugaku dominant role as the fastest machine, as well as BoFs on MPI and OpenMP, each featuring new versions of their standards, MPI 4.0 and OpenMP 5.1, respectively. A preview of MPI 4.0 can also be found in this edition of Quartl.

In addition to the technical program, SC 2020 also featured a virtual exhibition hall with vendor talks (without the deafening background noise of a show floor), many attempts of virtual events, including a virtual 3D beer garden – with virtual 3D beer – organized by LRZ, as well as – yes, also this year – swag. While I am still waiting on mine, some in my group have already gotten theirs (see picture) and it seems that this was even better than non-virtual years.

Hence, despite some technical snags in the preparations and the video setup, the overall concept worked and the SC community managed to put on an impressive and interesting conference. However, it was somewhat rooted in conventional scheduling and events, not taking full advantage of the new medium's capabilities, which was a bit disappointing. Nevertheless, I would consider this a success, although, such a virtual event will never be able to fully replace an in-person event, filled with hallway conversations, show-floor gossip and social evening events. Let's hope this will not become

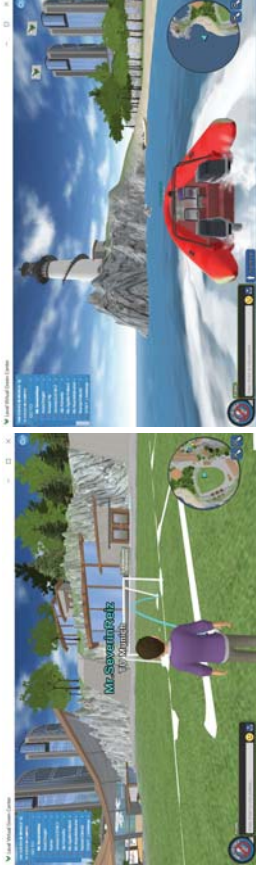


Abbildung 1: Die etwas spezielle Konferenzsoftware - links und rechts konnte man sich zeitgleich mit Leuten unterhalten, *networken* sozusagen.

Meine Frage im Plenum, wo denn das beste japanische Restaurant zu finden sei, wurde mit einer Flut von Smileys beantwortet.

PS: Übrigens, im Oktober 2020 haben wir einen Artikel in den SIAM News *SPPEXA: Software for Exascale Computing* geschrieben.

PS2: Übrigens, unser vorheriger SPPEXA Programm-Manager Benjamin Uekermann beginnt im Januar eine Professur an der Uni Stuttgart. Herzlichen Glückwunsch!

Severin Reiz

- Yasunori Kimura (*Supervisory Innovation Coordinator, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*)

Das Symposium begann mit einer Einführung, und dann 8-minütigen Blitzvorträgen zu den Themen: wo kann HPC in der AI-Revolution mitspielen? Warum sind Förderungen (auch auf tri-lateralen Boden) notwendig? Am Ende gab's (wie üblich) eine einstündige Panel-Diskussion. Als Antwort kam viel über energieeffiziente Berechnung (Energy Efficient AI), Hardware-aspekte (tensor cores, intel special instructions, specific ASICS, Google TPU, Graphcore) und die Notwendigkeit skalierbare Bibliotheken zu entwickeln. Zum letzteren diskutierten wir das Beispiel Sci-kit learn, in der nur 8% der Matrix-Aufrufe zu BLAS Routinen gehen.

Letztendlich waren alle aber enttäuscht darüber, dass sich trotz der Mühen nach SPPEXA (läuft dieses Jahr final aus) kaum (bis keine) Förderungen im HPC Markt auf internationaler (außereuropäischer) Ebene gibt. Die Japaner waren mit ihren Werten und dem Wissenschaftsethos ein toller Partner. Die Hoffnung stirbt ja bekanntlich zuletzt.

Soziales Computer-Spiel statt Konferenz-Essen:

Die Konferenz machte vor Prominenten nicht halt - Donnerstag früh sprach zum Beispiel Yann LeCun, einer der ersten und bekanntesten Machine Learning Wissenschaftler. Organisatoren wollten sichtlich mittels der Konferenzsoftware eine öde, langweilige Videokonferenz vermeiden. Jeder Teilnehmer war eine selbst-erstellte Figur, und zum Konferenzsaal ging man „zu Fuß“, vor Ausstellungen (Poster) sah man die Vortragenden, und zum Kaffee konnte man sich an virtuelle Tische setzen.

Zwar mag der eine es „affig“ finden, wenn nun ein kleines Computer Mensch'chen einen Vortrag hält, aber so sehr jeder da über seinen Schatten (und technische Hürden) springen musste, meist kam's gut an. Einige berichteten darüber, dass sie am Wochenende davor mit ihren Kindern Motorboot um die Konferenzinsel gefahren sind, beim Fussballfeld lernte man schnell fremde Menschen kennen. Ich selbst sprach mit einer Koordinatorin vom DAAD, und durch den „Sport“ war die Hürde zum Gespräch sehr gering.

the new norm and that we can assemble again at SC 2021 in St. Louis, MO, USA. Until then, stay healthy and safe.



Figure 1: Picture: OpenMP SC 2020 Swag (courtesy of Alexis Engelke, TUM)

Martin Schulz

MPI 4.0 is Coming to an HPC System Near you Soon - Feedback wanted -

The Message Passing Interface (MPI) continues to be the dominant programming approach for HPC systems. It's comprehensive API provides a widely accepted, portable and highly efficient programming abstraction to help orchestrate and execute scalable parallel applications.

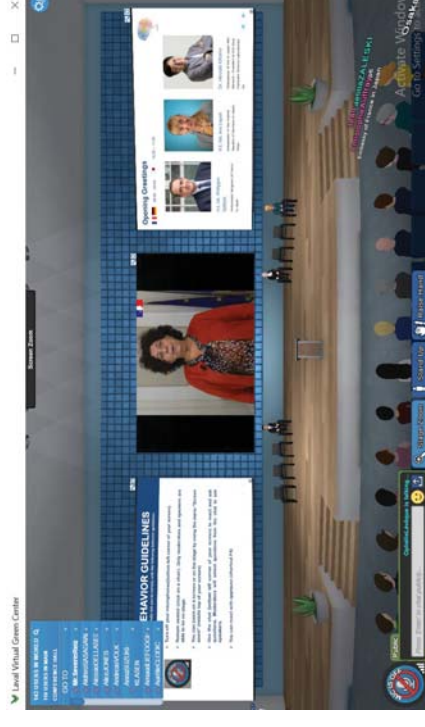
Its definition is driven by the MPI Forum, the standardization body for the MPI Standard, which consists of a large number of volunteers, dedicated to maintaining the standard and to evolving it to match the needs of current and future users, applications and systems. The current version of MPI, published by the MPI Forum in 2015, is MPI 3.1, and since then the MPI Forum has been working on a new major version, via quarterly in-person meetings, countless virtual working group TelCons, and even adjusting its rules to mitigate the impact of the COVID-19 pandemic, enabling virtual voting meetings for the first time in the forum's history.

As a result of this work, the MPI Forum published a Release Candidate for a new version, MPI 4.0, during SC 2020 in November, which contains significant additions, some long requested by users, and some opening up MPI to new domains and use cases. The draft was presented as part of the SC 2020 MPI Forum BoF and can be viewed on the forum's website <http://www.mpi-forum.org/>.

One of the most anticipated additions is the, so called, BigCount extension, which allows the usage of communication routines with "count" arguments of more than 32bit. In order to avoid backwards compatibility problems, the new version of the standard will now feature a series of additional routines that provide large count types and with that the needed functionality, awaited by many users.

MPI 4.0 will also feature several new communication routines, including persistent collectives, enabling users to predefine repeated collective communication and with that allowing for novel optimizations in MPI libraries. Further, the standard will feature a new type of communication, called par-

„AI workshops“, „AI in Healthcare“, etc. Für unsreiner, der Videokonferenzen mit den einschlägigen Diensten kennt, war die Software „Laval Virtual Green Center“ ein Novum – und ein echter Spaßfaktor (siehe Screenshots). Eröffnen durfte das Ganze kein geringer als die französische Bildungsministerin Frédérique Vidal. Von deutscher Seite sprach die Botschafterin in Tokio Ina Lepel, und von Japan der oberste Wissenschaftskordinator Dr. Hiroaki Kitano.



Französische Bildungsministerin Frédérique Vidal mit der Eröffnungsrede

Parallel session – High Performance Computing for AI:

- Stéphane Requena (Chief Technical Officer, GENCI)
- Nahid Emad (Professor, University of Paris Saclay/ Versailles)
- Matthias Weidmüller (Professor Quantum Physics, Uni Heidelberg)
- Severin Reiz (Research associate, SCCS, TUM)
- Satoshi Matsuoka (Director RIKEN, R-CCS)



Abbildung 1: Die BEAST-Testumgebung zur Erforschung der Computertechnologie von Morgen. Foto: LRZ

SPPEXA auf trilaterallem Symposium (FRA/GER/JP)



Human-centric Artificial Intelligence (AI)

Wie schon seit 2017 steht im November für SPPEXA meist ein tri-lateraler Workshop in Japan an. 2018 war das federführend von uns (SCCS) in der deutschen Botschaft in Tokyo organisiert; nun hat (wieder) die französische Botschaft in Tokyo das Zepter in die Hand genommen, und pandemiebedingt zusammen mit dem DWIH (Deutschen Wissenschafts-und Innovationshaus) in Tokyo die Konferenz virtuell organisiert. SPPEXA ist nun nur noch ein Anhängsel (in der Session „HPC for AI“) und im größeren folgt das der Serie

tioned communication, which enables the efficient sending and receiving of subblocks of communication buffers using light-weight routines, laying the groundwork for direct communication from compute accelerators, like GPUs.

Another, almost revolutionary, addition will be the concept of MPI Sessions. It allows users to replace the current model of single MPI-InitFinalize pairs coupled with a predefined MPI-COMM-WORLD communicator, with a new model that allows repeated initializations (e.g., per library), resource isolation between sessions, and opens the door for future extensions in dynamic process management.

Other additions to MPI 4.0 include a set of routines enabling better mappings to modern node and system architectures, which is crucial due to the rising complexity of HPC systems; a more defined way to handle and mitigate errors, which is a first step to full fault tolerance support; a new tools interface based on events, which enables a new generation of trace driven MPI tools; and many more smaller fixes, additions and clarifications.

Overall, MPI 4.0 presents a major step forward in the evolution of MPI. The forum plans to ratify the new standard early in 2021, but feedback can still be incorporated. Hence, we encourage the community to take a look at the release candidate for MPI 4.0 and provide the MPI forum with feedback, comments and suggestions. We will do our best to integrate them. Further, the forum is already looking forward to MPI 4.1 and/or MPI 5.0 and also for this we encourage the community to participate. If you are interested, please reach out and we will be happy to include you.

Martin Schulz

KONWIHR Workshop



Fall 2020 & new mailing list for projects

Establishing an active community involves regular communication with the people that comprise the community. For this purpose, the competence network for scientific high-performance computing in Bavaria organizes regular welcoming workshops for its new projects. The following projects from recent application rounds (mainly 2020-1) participated in our third workshop on October 7, 2020:

- High-order matrix-free finite element implementations with hybrid parallelization and improved data locality
– Dr. Kronbichler / Prof. Wall (TUM)
- Semiempirische Molekülorbital-Theorie für sehr große Systeme
– Markus Walther, Dr. Hennemann, Prof. Clark (FAU)
- Talking Hands – creating HPC processes for improved person and gesture detection and recognition on a large audiovisual dataset
– Dr. Uhrig (FAU)
- Embedding Python COSIPY in WRF for improved simulations over glaciers – Dr. Collier (FAU)
- COPI:GLECHA: Code Optimierung für die interferometrische Auswertung von Satellitendaten zur globalen Bestimmung von Gletscherhöhenänderungen – Philipp Malz, Prof. Braun (FAU)
- High Performance Emulation for File System like I/O (HIPEF)
– Tobias Olenyi, Dr. Richter
- Spacefilling Fractal Tilings – Lorenzo Newman, Prof. Arndt

You can find more details about these projects at

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

Anwendungen diese Flexibilität auch wirklich ausnutzen, da bei Standard-Funktionalitäten wie Fließkomma nach IEEE CPUs und GPUs oft schneller und effizienter sind. Auch ist die Konfiguration der FPGAs komplex, sie erfordert eine andere Expertise als die Software-Entwicklung. Zwar stellen die meisten Hersteller Bibliotheken mit vorgefertigten Lösungsansätzen zur Verfügung, doch sind diese im HPC oft kaum nutzbar. Es gibt aber signifikante Fortschritte: „Inzwischen ist es auch möglich, C- oder C++-Code über spezielle Compiler in eine FPGA-Konfiguration zu überführen“, erläutert Weidendorfer. „Trotzdem muss man als Programmierer genau wissen, welche Codemuster in eine effiziente Konfiguration abgebildet werden können.“ In welchem Ausmaß FPGAs auf BEAST untersucht werden, ist noch nicht ausgemacht. Fest steht jedoch, dass das Testbed kontinuierlich um neue Technologien erweitert werden soll.

Offen für Forschung und Lehre

Mit BEAST ist also möglich, was an einem produktiven System wie SuperMUC-NG undenkbar wäre: Systeme neu konfigurieren, mit unterschiedlichen Codes und Betriebssystemvarianten/-einstellungen konfrontieren, nach den eigenen Vorstellungen zusammenstellen. Und dabei beobachten, wie sie unter den verschiedenen Bedingungen arbeiten. Das ist natürlich nicht nur für das LRZ interessant. Deswegen wurde BEAST für ausgewählte Forscher:innen geöffnet, die sich mit den kommenden Hardware-Generationen befassen. Zudem wird mit BEAST die bestehende Kooperation mit der Ludwig-Maximilians-Universität und der Technischen Universität München vertieft. So bekommen Student:innen Gelegenheit, BEAST für ihre Abschlussarbeiten zu nutzen. Und auch Praktika bietet Weidendorfer auf dem Testbed schon im aktuellen Wintersemester an, in Zusammenarbeit und mit kräftiger Unterstützung durch die Lehrstühle von Prof. Kranzlmüller (LMU) und Prof. Schulz (TUM). Hier können sich angehende Informatiker:innen in die unterschiedlichen Technologien einarbeiten und Kontakte zu Forschung und Industrie knüpfen.

Jan Schulze

auf 48 ARM-Kerne mit 32 GB RAM als High Bandwith Memory (HBM). In der kommerziellen Version, wie sie am LRZ im Einsatz ist, müssen die Anwender:innen leider mit einer kleinen Einschränkung leben. Weidendorfer erläutert: „In der Variante, die in unserem HPE-System verarbeitet ist, wurde das Netzwerk auf dem A64FX-Chip selbst deaktiviert. Wir nutzen deswegen Infiniband über PCIe für die Anbindung der Knoten.“ Ein weiteres Fragezeichen dieser Architektur sieht Weidendorfer im verfügbaren RAM. Da dieser fest integriert ist, sind Erweiterungen nicht möglich. Und 32 GB pro Knoten sind im Vergleich zu den 96 GB pro Knoten am SuperMUC-NG tendenziell knapp bemessen. „Man wird wohl bei A64FX mehr Knoten benötigen als bislang“, vermutet Weidendorfer. Er sieht den Vorteil des ARM-Prozessors vor allem im schnellen Speicherzugriff und bei der Verarbeitung der Daten in dessen breiten Vektor-Einheiten.

Experimentierfeld

Auf den ersten Blick scheint es etwas verwunderlich, dass keine Systeme des Branchenprimus Intel im ersten Anlauf von BEAST integriert wurden. Doch dafür gibt es einen Grund: SuperMUC-NG basiert komplett auf Intel-CPU's, und kann in bestimmtem Rahmen selbst für Vergleichsmessungen genutzt werden. Auch sind bei aktuellen Produktlinien nur wenige neuen Erkenntnisse zu erwarten. Allerdings ist das LRZ durchaus an den kommenden GPU's von Intel interessiert. Host-Systeme dafür sollen mittelfristig mit der jüngsten Generation der Intel-Xeon-Prozessoren (Codennamen Cooper Lake und Ice Lake) aufgebaut werden. In diesen wurden laut Weidendorfer einige neue Merkmale wie 16-Bit-Float (Bfloat16) für Gleitkommaoperationen implementiert, mit dem KI-Anwendungen signifikant beschleunigt werden können.

Aber auch Technologien, die ihr Potenzial im HPC-Bereich erst noch zeigen müssen, können ihren Platz auf BEAST finden: „BEAST ist auch für experimentelle Technologien offen, die vielleicht erst in fünf bis zehn Jahren interessant sind“, so Weidendorfer. Dazu gehören zum Beispiel FPGAs (Field Programmable Gate Arrays). Der HPC-Einsatz von FPGAs wird EU-weit in verschiedenen Projekten untersucht. Denn auf der einen Seite sind sie durch die konfigurierbare Logik sehr flexibel, auf der anderen Seite müssen

A new mailing list for projects

A common wish of our projects is a common platform to share HPC knowledge among funded projects. Listening to this feedback, we started a new mailing list:

`konwihr-projects@lists.lrz.de`

If you have received funding from KONWIHR or would like to support the current projects, you can subscribe using the Mailman interface. While the new mailing list still has to break the ice, we are confident that there is a lot worth discussing, including common patterns among KONWIHR projects, as well as, HPC literature & resources.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

`info@konwihr.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.konwihr.de/how-to-apply/>

Gerasimos Chourdakis



Freitag der 13...

Abbildung 1: Logo des NHR@FAU

... GWK Entscheidung zum Thema NHR¹

Die Auguren waren besorgt ob des verhängnisvollen Datums und auch die Auspizien waren alles andere als eindeutig. In Franken verharrte eine Schar tapferer HPC-Frauen/-Männer zur Mittagszeit des 13.11.2020 ob der finalen GWK-Entscheidung. Gerüchte gab es viele, Informationen waren rar. Zahlreiche Stämme zogen in den Wettbewerb, ob alle das Ziel erreichten war unklar. Gegen 12:30 war es dann soweit: Die „Dukes of Franconia“ hatten sich dem Schicksal gestellt und gewonnen. „Wir freuen uns Ihnen mitteilen zu können, dass Ihre Antragstellung erfolgreich war, und möchten Ihnen zur Aufnahme in die gemeinsame Förderung sehr herzlich gratulieren.“, lautete die Mitteilung und die Erleichterung war in der fränkischen Schar mit Händen greifbar. Ein freudiges „Toll“ und ein ebenso enthusiastisches „Bassd scho“ machte in Erlangen und den Home-offices der Umgebung die Runde.

Was war passiert? Hier können wir auf die Formulierung des Staatsministeriums zurückgreifen, die auch dem Außenstehenden einen Einblick in das Geschehene gibt:

Die Friedrich-Alexander-Universität (FAU) Erlangen-Nürnberg wird ab 2021 einer von bundesweit acht Standorten im neu eingerichteten „Nationalen Hochleistungsrechnen an Hochschulen (NHR)“ und erhält in diesem Zug einen nationalen Hochleistungsrechner. Wissenschaftsminister Bernd Sibler freute sich über den Beschluss, den die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz (GWK) heute in einer Videokonferenz gefasst hatte. ... Bund und Länder hatten Ende 2018 vereinbart, eine bundesweite Rechner- und Kompetenzinfra-

¹Hintergrundinformation für Leser ohne NHR-Hintergrund: Die Gemeinsame Wissenschaftskonferenz gibt bekannt welche Zentren in das Programm „Nationales Hochleistungsrechnen“ aufgenommen wird.

zeit auf SuperMUC-NG belegen. Bei hunderten von Projekten mit zahlreichen selbstprogrammierten Codes keine leichte Aufgabe. Daraus entsteht dann eine Benchmark-Suite, die fortlaufend gepflegt und um erwartete zukünftige Anforderungen rund um Big-Data und KI erweitert wird, um bei anstehenden Kaufentscheidungen eine sinnvolle Abbildung der konkreten Workloads zur Hand zu haben: „Wird eine neue Maschine beschafft, gibt man diesen Benchmark an die Anbieter. Diese versprechen uns dann die mit ihrem System erreichbare Leistung“, so Weidendorfer. „Bei der Abnahme ist eben diese Aussage ein wichtiges Kriterium, ob das System wie vereinbart läuft.“ Stehen den Anbietern nur die eigentlichen Codes zu Verfügung, müssen diese oft an aktuelle Beschleuniger erst angepasst werden – ein erheblicher Aufwand, den Anbieter oft scheuen und dann wegen Unsicherheit nur geringere Leistung versprechen. Deshalb soll die Benchmark-Suite nach Möglichkeit Varianten für aktuelle Beschleuniger enthalten.

Erste Knoten sind installiert

Zudem sind die Benchmarks für den Betrieb des Testbeds BEAST unverzichtbar, um unterschiedliche Technologien vergleichen zu können. Das Ziel ist es, möglichst viele unterschiedliche Systeme von potenziellen Zulieferern hier in einer einheitlichen Umgebung zu betreiben und zu testen. Bereits installiert sind drei unterschiedliche Teil-Systeme: Zum einen wurden Knoten auf Basis aktueller AMD-Rome-Prozessoren mit MI50-GPUs des gleichen Herstellers installiert. Neben dieser x86-Architektur wurden zudem Knoten mit den auf ARM basierenden Prozessoren Marvell ThunderX2 implementiert, die durch Nvidia-GPUs vom Typ Tesla V-100 unterstützt werden. Der jüngste Zugang: Der ebenfalls auf ARM-basierende Fujitsu-Prozessor A64FX in Form einer HPE CS500. Das Besondere an diesem Neuzugang ist seine CPU. Denn der A64FX kommt beim derzeit schnellsten Supercomputer der Welt zum Einsatz, dem japanischen Fugaku.

Was den A64FX so leistungsfähig macht, ist das hier großteils umgesetzte Konzept eines Systems on a Chip (SoC). Der Chip verfügt über alle grundlegenden Komponenten wie Recheneinheiten, Netzwerk-Switch und PCIe-Interface sowie eng angebundenes RAM auf demselben Träger, was den Prozessor extrem schnell und effizient macht. Der A64FX kommt insgesamt

Das BEAST im Rechenzentrum



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Mit BEAST setzt das LRZ ein zentrales Vorhaben der Hightech Agenda der Bayerischen Staatsregierung im Programm „Future Computing“ um: Ein Testbed, mit dem aktuelle und kommende Technologien verglichen und bewertet, und mit dessen Hilfe dann Empfehlungen für zukünftige Systeme am LRZ erstellt werden. ARM-Prozessoren, GPUs und weitere interessante Ansätze werden hier auf ihre Eignung für HPC und die spezifischen Codes der LRZ-Benutzer:innen getestet. Im ersten Schritt wurden drei unterschiedliche Systeme aufgenommen, der weitere Ausbau ist fest geplant.

Welche Technologien passen zu den LRZ-Workloads?

Dr. Josef Weidendorfer, Leiter der Future-Computing-Gruppe am LRZ, präzisiert: „Welche Technologien sind für künftige HPC-Systeme am LRZ interessant und passen zu den Codes, die aktuell bei uns laufen? Und wie sehen die Programmiermodelle der Hersteller dafür aus? Kommende HPC-Systeme sollten trotz steigender Komplexität einfach zu nutzen sein, aber dennoch bestmögliche Leistung bringen. Wir können von den Nutzer:innen unserer Systeme nicht erwarten, dass sie sich in jedes Hersteller-spezifische Programmiermodell einarbeiten – beziehungsweise wollen wir nicht, dass sie sich selbst ein Ei legen, indem nach aufwendiger Anpassung ihrer Codes auf das eine System das Spiel wieder von vorne beginnt, wenn die nächste Maschine gekauft wird. Also suchen wir hier nach Lösungen, die über möglichst viele Architekturen hinweg möglich sind.“ Mit BEAST möchte das LRZ letztlich in der Lage sein, die Anforderungen für künftig zu beschaffenden Maschinen genauer zu erarbeiten und dabei nicht nur den Angaben und Versprechen der Hersteller vertrauen zu müssen, sondern auch selbst bestätigen zu können.

Eine wichtige Rolle spielen dabei Benchmarks. Um die Realität möglichst genau abzubilden, verbessert die Future-Computing-Gruppe automatische Werkzeuge zur Identifikation repräsentativer Codes, die aktuell viel Rechen-

struktur für komplexe Computersimulationen einzurichten, deren technische und methodische Anforderungen die Kapazitäten einer einzelnen Hochschule übersteigen. Hierfür werden in den nächsten zehn Jahren insgesamt bis zu 625 Millionen Euro zur Verfügung gestellt, die Hälfte davon durch den Bund ².

Konkret heißt das, dass an der FAU ab 1.1.2021 ein HPC-Zentrum für 10 Jahre finanziert wird (Zentrum für Nationales Hochleistungsrechnen Erlangen, NHR@FAU), das nicht nur Rechenleistung auf Tier-2 national anbietet, sondern auch die existierenden Aktivitäten im Support, Training und Forschung für HPC deutlich ausbauen kann.

Besondere Schwerpunkte werden dabei in den Bereichen Simulationen Atomistischer Strukturen, Performance Engineering, Codegenerierung und iterative Löser gesetzt. Diese ergänzen die entsprechenden Schwerpunkte der sieben weiteren ausgewählten Zentren Aachen, Berlin, Darmstadt, Dresden, Göttingen, Karlsruhe und Paderborn. Innerhalb Bayerns bettet sich NHR@FAU natürlich in unseren etablierten KONWIHR-Verbund ein und bietet vielfältige Möglichkeiten der Zusammenarbeit.

Die nachhaltige und langfristige Förderung des KONWIHR und die entsprechenden Projektarbeiten unter Einbezug der Erlanger HPC-Gruppe waren dabei eine zentrale Säule des erfolgreichen NHR-Antrags. Doch wie so oft fiel der Entschluss sich in die Schlacht zu wagen bei einer Versammlung der Hauptlinge – in unserem Falle eine KONWIHR Direktoriungssitzung im Sommer 2018.

Über die neuen Möglichkeiten und Perspektiven des NHR@FAU werden wir in neuen Kommunikationsformen (siehe www.hpc.fau.de für aktuelle Ankündigungen zu virtuellen Veranstaltungen zu diesem Thema) und ganz klassisch in den nächsten KONWIHR Quartals berichten.

Gerhard Wellein

²<https://www.stmwk.bayern.de/pressemitteilung/12088/nr-263-vom-13-11-2020.html>

Erlangen-Regensburg KONWIHR Team:



Dem A64FX-Prozessor auf den Zahn geföhlt

Angesichts des ganzen Trubels um den Fugaku-Supercomputer (aktuelle Top500 #1 – mit Abstand) und seine 48-Kern-A64FX-CPU war es höchste Zeit für eine eingehende Analyse dieses Boliden. Bei einer Spitzenleistung von etwa 3 Tflop/s (bei doppelter Genauigkeit) und einer Speicherbandbreite von fast 1 Tbyte/s zu seinem lokalen 32 GB großen High-Bandwidth-Memory (HBM) ist der A64FX-Prozessor sicherlich aktuell eines der interessantesten Stücke Silizium, die es im Hochleistungsrechnen gibt. Ein kleiner Bruder des Fugaku-Systems wird unter dem Namen „QPACE 4“ am Physikalischen Institut der Universität Regensburg betrieben, welches zufälligerweise auch eines der aktuellen KONWIHR-Basisprojekte beherbergt. Was liegt da näher als sich gemeinsam mit den Kollegen um Prof. Tilo Wettig an die Arbeit zu machen und den Prozessor gemeinsam genauer unter die Lupe zu nehmen? Obwohl dem System in Regensburg der Fujitsu-Compiler und das Tofu-Netzwerk fehlten, entwickelte sich eine spannende Zusammenarbeit, die zu interessanten und zum Teil überraschenden Ergebnissen führte. Diese haben wir in einer gemeinsamen Arbeit zusammengefasst, die auf dem PMBS20-Workshop (SC20) mit dem „Best Short Paper Award“ ausgezeichnet wurde:

C. L. Alappat, J. Laukemann, T. Gruber, G. Hager, G. Wellein, N. Meyer, and T. Wettig: Performance Modeling of Streaming Kernels and Sparse Matrix-Vector Multiplication on A64FX. Accepted for the 11th International Workshop on Performance Modeling, Benchmarking and Simulation of High Performance Computer Systems (PMBS). Preprint: arXiv:2009.13903 <https://arxiv.org/abs/2009.13903>

Ferienakademie: Absage 2020 & Planung 2021

FERIENAKADEMIE

Wie so vieles ist auch die 37. Ferienakademie im Sarntal (Südtirol), die von der TU München, der FAU Erlangen-Nürnberg und der Universität Stuttgart gemeinsam organisiert wird, der Corona-Pandemie dieses Jahr zum Opfer gefallen. Wir hoffen natürlich—nicht nur wegen der Ferienakademie sondern v.a. auch wegen der Gesundheit potentiell betroffener Patienten—auf eine Normalisierung der Lage bis nächsten Sommer.



Abbildung 1: Auch die Ferienakademie musste wegen Corona abgesagt werden.

Die Planungen für das Kursprogramm der Ferienakademie in 2021 sind bereits in vollem Gange - einige der Kurse aus 2020 können wir ins kommende Jahr „retten“ und durch neue Themen ergänzen. So können wir auch 2021 ein buntes und facettenreiches Programm für die Studierenden anbieten! Alle weiteren Informationen und Entwicklungen sind unter www.ferienakademie.de abrufbar.

Tobias Neckel

In der Mastervorlesung erhalten die Studierenden einen Einblick in den stetig wachsenden Bereich der Uncertainty Quantification (UQ). Behandelte Themen sind hierbei z.B. Monte Carlo Methoden, Stochastic Collocation/Galerkin, sowie eine Einführung in die Sensitivitätsanalyse und Software für UQ. Im Laufe der Lehrveranstaltung bearbeiten die Studierenden nicht nur die klassischen Übungsblätter, sondern bekommen auch drei Programmierblätter. Dies soll ein tieferes Verständnis für die gelehrteten Methoden vermitteln, sowie Stolperfallen und Tricks aufzeigen, die bei der Implementierung oft anfallen.

Friedrich Menhorn



Abbildung 1: Bild zeigt die „Best Short Paper“ Urkunde.

Darüber hinaus haben Christie Alappat und Jan Laukemann die Ergebnisse anschaulich und prägnant in ihrem Vortrag für den virtuellen Workshop dargestellt. Und natürlich ist dieser öffentlich im YouTube-Channel der HPC Gruppe des RRZE für Interessierte abrufbar: <https://youtu.be/nqrrTCLTPDw>
 Eine erweiterte Version des Vortrags wurde kürzlich im Rahmen eines Webinars des EoCoE-Projektes ³ aufzeichnet und liefert noch mehr Details: <https://youtu.be/SrWT831KVgs>

Insgesamt zeigt sich, dass der Prozessor in Rechenschleifen wie der dünn besetzten Matrix-Vektor-Multiplikation (SpMV) das Potenzial der Hardware mit den gewohnten Programmiersprachen ausspielen kann. Bezüglich der Implementierung duldet er aber deutlich weniger Nachlässigkeiten als die x86-Platzhirsche von Intel oder AMD und stellt so die Compiler vor einige Herausforderungen.

³<https://www.eocoe.eu>

Die Potentiale des A64FX gegenüber seinen CPU-Konkurrenten – wenn man denn alles (Datenlayout und Implementierung) richtig macht – zeigt die abschließende Darstellung. Hier wird für große, dünn besetzte Matrizen die SpMV-Performance eines A64FX Knotens (1 x 48 Kerne @ 1,8GHz, A64FX = FX 700) mit einem Intel Xeon Platinum 8280 Knoten (2 x 28 Kerne @ 2.7 GHz, Intel = CLX) sowie einem AMD EPYC 7742 Knoten (2 x 64 Kerne @ 2.25 GHz, AMD = ROME) verglichen. Meist kann der A64FX seinen Bandbreitenvorteil von 2x bis 3x ausspielen.

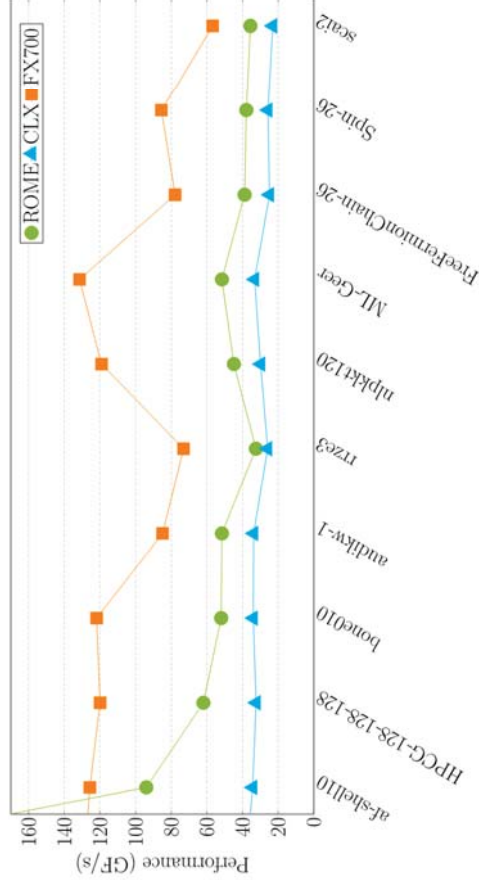


Abbildung 2: Performancevergleich auf verschiedenen Rechenknoten für ausgewählte große dünn besetzte Matrizen.

Gerhard Wellein



SCCS: „Preis für beste Übungsleiter“

Friedrich Menhorn, Doktorand am Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen (Prof. H.-J. Bungartz), wurde bei der Verleihung der Lehrpreise ⁴ der Fakultät für Informatik mit einem der Lehrpreise für beste Übungsleitung für das Studienjahr 2018/2019 für die Lehrveranstaltung „**Algorithms for Uncertainty Quantification**“ ausgezeichnet.

Die Verleihung selbst stand unter dem Coronastern. Normalerweise findet die Verleihung immer im Zuge des Sommerfestes der Fakultät statt, welches dieses Jahr jedoch abgesagt wurde. So waren nur die Preisträger eingeladen, unter Sicherheitsabstand und Platzzuweisung wurde sich im HS1 eingefunden und auch eine offizielle Preisübergabe war nicht möglich. Stattdessen wurde den Laudatios gelauscht, applaudiert und alle gingen danach ihres Weges. Für Zuschauer wurde per Livestream übertragen und die Urkunde wurde anschließend postalisch zugestellt—ganz kontaktlos.



⁴<https://www.in.tum.de/news-single-view/article/preisverleihung-2020/>