



# Schlussbericht

Sebastian Schöps

---

## Verbundprojekt

**TIME-X: TIME parallelisation for eXascale computing and beyond**

**Zuwendungsempfänger** Technische Universität Darmstadt

**Förderkennzeichen** 16HPC047

**Laufzeit** 04/2021 – 03/2024

**Teilprojektleitung** S. Schöps, TU Darmstadt

---

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

SPONSORED BY THE



Federal Ministry  
of Education  
and Research

## **Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Kurze Darstellung des Vorhabens</b>	<b>3</b>
1.1	Aufgabenstellung . . . . .	3
1.2	Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand . . .	3
1.3	Planung und Ablauf . . . . .	6
1.4	Zusammenarbeit mit anderen Stellen . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises</b>	<b>10</b>
<b>5</b>	<b>Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes</b>	<b>11</b>
5.1	Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit . . . . .	11
5.2	Wissenschaftliche-technische Anschlussfähigkeit . . . . .	11
<b>6</b>	<b>Neue projektrelevante FE-Ergebnisse von dritter Stelle</b>	<b>12</b>
<b>7</b>	<b>Erfolgte und geplante Veröffentlichungen</b>	<b>12</b>
<b>8</b>	<b>Sonstige Literatur</b>	<b>12</b>

## **1 Kurze Darstellung des Vorhabens**

### **1.1 Aufgabenstellung**

Computersimulationen sind heutzutage ein essenzielles Werkzeug der Natur- und Ingenieurwissenschaften. Um durch rechnergestützte Simulationen Rückschlüsse auf reale Anwendungen ziehen zu können, werden immer komplexere mathematische Modelle benötigt, die wiederum zu wachsendem Rechenbedarf führen. Selbst moderne Höchstleistungsrechner können diesen Rechenbedarf nicht decken und erfordern eine weitere Steigerung ihrer Rechenleistung, in den Exascale-Bereich und darüber hinaus. Um die größere Parallelität der Hardware in solchen Exascale-Systemen auch ausnutzen zu können, müssen Algorithmen „parallelisierbar“ sein, d.h. möglichst viele Teile eines Algorithmus müssen unabhängig voneinander und gleichzeitig ausführbar sein. Die Lösung von zeitabhängigen Problemen erfolgt allerdings bisher sequenziell: Ausgehend von einem Anfangszustand wird die Lösung Schritt für Schritt bis zum Endzustand bestimmt.

Das Ziel des Projekts TIME-X war die Entwicklung neuer, parallelisierbarer Algorithmen für zeitabhängige Simulationen, die bisher aufgrund ihres immensen Rechenaufwandes nicht in einem angemessenen Zeitrahmen durchführbar waren. Diese Algorithmen zielen darauf ab, eine Parallelisierung entlang der Zeitdimension zu ermöglichen und sollten in Software-Bibliotheken bereitgestellt werden. Die Parallelisierung der Lösung zeitabhängiger Probleme ist ein notwendiger Schritt, um die Rechenkraft zukünftiger Höchstleistungsrechner im und jenseits des Exascale Bereichs effizient für modellbasierte Vorhersagen nutzen zu können. Durch den immer größer werdenden Bedarf an Simulationen gerade auch in der industriellen Anwendung können diese neuen Algorithmen auch in der Wirtschaft eine wichtige Rolle spielen.

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

### **1.2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand**

In der Vergangenheit konzentrierte sich die Entwicklung paralleler Methoden überwiegend auf Zerlegungen des räumlichen Rechengebiets. So wurden vierdimensionale Probleme (drei räumliche und eine zeitliche Dimension) nur entlang der drei räumlichen Richtungen parallelisiert, wobei die zeitliche Dimension als Engpass übrig blieb.

Dieser Ansatz hat sich in der Vergangenheit bewährt und kann bis zu Hunderttausenden von Kernen skaliert werden, was bisher keine größere Einschränkung darstellte: Die ständig steigende Geschwindigkeit der Prozessoren allein reichte aus, um die geforderte Zunahme der Rechenleistung zu kompensieren. Mit der Verlagerung hin zu massiver Parallelität stößt dieser Ansatz jedoch auf zwei grundlegende Arten an seine Grenzen.

Die Rechenkosten für die numerische Lösung eines Anfangswertproblems können sehr grob als die Anzahl der Zeitschritte multipliziert mit den Rechenkosten pro Schritt geschätzt werden. Bei Problemen fester Größe (*starke Skalierung*) muss die Effizienz der räumlichen Parallelisierung unweigerlich irgendwann abnehmen, da jeder Kern immer weniger Berechnungen und immer mehr Kommunikation durchführt. Daher kann die Parallelisierung im Raum allein die Kosten pro Zeitschritt nur bis zu einem gewissen Minimum reduzieren, welches von den verwendeten Methoden, ihrer Implementierung und der verwendeten Hardware bestimmt wird. Insbesondere bei Simulationen über lange Zeiträume mit kleinen Schritten (z. B. bei Einschwingvorgängen von Maschinen, Molekulardynamik- oder Klimasimulationen) kann das daraus resultierende begrenzte Potenzial für räumliche Parallelisierung immer noch zu unzumutbar langen Zeiten bis zur Lösung führen. Selbst wenn einzelne Simulationen durchgeführt werden können, verhindern übermäßig lange Laufzeiten (z.B. mehrere Monate bei Paleo-Klimasimulationen oder ein Jahr bei einem typischen ITER-Fall in der Fusionsenergie) die Untersuchung eines großen Bereichs von Parametern.

Auch bei der Nutzung der zusätzlichen Parallelität in Exascale-Systemen zur Behandlung von Problemen zunehmender Größe (*schwache Skalierung*) stellt sich die Frage, inwieweit die zusätzlichen Kosten einer höheren Auflösung durch mehr Ressourcen kompensiert werden können: Wenn die räumliche Auflösung erhöht wird, muss auch die zeitliche Auflösung erhöht werden, um entweder Stabilitäts- (CFL-Bedingung) oder Genauigkeitsanforderungen zu erfüllen. Dies bedeutet unweigerlich, dass mehr Zeitschritte berechnet werden müssen. Selbst wenn man von einer perfekten schwachen Skalierung der räumlichen Algorithmen und ihrer Implementierung ausgeht (was an sich schon eine enorme Herausforderung darstellt), bleibt die Rechenzeit pro Zeitschritt konstant, was zu einem linearen Anstieg der Laufzeit mit der zeitlichen Auflösung führt, wenn die Gesamtzahl der Zeitschritte wächst.

Um diese beiden Grenzen zu umgehen, haben sich zeitparallele Verfahren in den letzten Jahren als spannende Ergänzung zu raum-parallelen Ansätzen etabliert. Der

erste PinT-Algorithmus wurde bereits 1964 von J. Nievergelt vorgeschlagen [1]. Da die relativ bescheidene Anzahl von Rechenkernen durch einen rein raum-parallelen Ansatz leicht ausgenutzt werden konnte, lag das Thema für viele Jahre brach, abgesehen von kurz aufflackerndem Interesse an zeitlichen Multigitterverfahren in den späten 1980er und frühen 1990er Jahren, siehe z.B. [2–4].

Mitte der 2000er Jahre kam der exponentielle Anstieg der Prozessor-Taktfrequenzen zum Stillstand, da die physikalischen Grenzen der elektronischen Komponenten auf einem Chip erreicht wurden. Nichtsdestotrotz ging die Steigerung der Rechenleistung weiter, wenn auch jetzt durch die schrittweise Erhöhung der Anzahl der Kerne. Damit änderten sich schlagartig die Herausforderungen für die Entwickler numerischer Algorithmen: Wurde Software vorher automatisch schneller, einfach durch steigende Taktfrequenzen der Prozessoren, so erzwingt die wachsende Anzahl an Kernen jetzt zusätzliche Parallelisierung, um die Rechenleistung einer neuen Prozessorgeneration ausnutzen zu können. Numerische Algorithmen mussten sich (und müssen sich weiterhin) an die veränderte Hardware anpassen, und das Interesse an PinT-Methoden erwachte wieder. Zunächst beschränkten sich die Aktivitäten auf das Feld der angewandten Mathematik und waren eher theoretischer und akademischer Natur. Inzwischen jedoch sind PinT-Methoden ein aktives Forschungsgebiet im Überlappungsbereich von Mathematik, Computational Science & Engineering, dem Hochleistungsrechnen und einigen prominenten Anwendungsfeldern. Die meisten der derzeit in Europa aktiven Gruppen haben an TIME-X teilgenommen und die wesentlichen Gruppen in Nordamerika sind durch Kooperationen mit dem Projekt verbunden.

Obwohl das Thema erst in jüngster Zeit an Bedeutung gewonnen hat, gibt es eine lange Liste bedeutender Beiträge zu diesem Bereich, die mehr als drei Jahrzehnte zurückreicht. Die folgende Liste hebt einige wichtige Errungenschaften vor TIME-X hervor, bei denen die Partner des TIME-X-Konsortiums eine wesentliche Rolle gespielt haben:

- 1990: Groß-skaliger Speedup (1024 Kerne) gegenüber seriellem Zeitschrittverfahren demonstriert [5]
- 2002: Erste Belege für Einsparungen von Rechenzeit für Anwendungen aus der Finanzmathematik [6]
- 2002: Erste Resultate für Moleküldynamiksimulationen [7]



- 2012: Erste extremskalige Performance-Studie auf 262 144 Kernen [8]
- 2013: Micro-Macro Parareal für Probleme mit unterschiedlichen Zeitskalen [9]
- 2014: Erste Ergebnisse einer vollständig 3D-getriebenen Hohlraumströmung für einen parallelen Raum-Zeit-Ansatz [10]
- 2018: Erste erfolgreiche HPC-Ergebnisse für die linearen rotierenden Flachwasser-gleichungen auf der rotierenden Kugel [11]
- 2020: Nutzung von PinT-Methoden in der Industrie zur Beschleunigung der Simu-lation elektrischer Maschinen [12]

Dies ist nur ein kleiner Auszug aus den Publikationen der letzten 50 Jahre, bei denen PinT eine Rolle gespielt hat. Eine deutlich umfangreichere, aktuelle Übersicht mit mehr als 500 Einträgen ist auf der PinT Community Website zu finden: <https://parallel-in-time.org/references/>. Bei all diesen Ergebnissen standen stets die Algorithmen, deren Implementierung oder die Anwendung im Vordergrund. Die Arbeitspakete des TIME-X-Projekts haben sich daher vorwiegend auf diese drei Aspekte konzentriert.

### 1.3 Planung und Ablauf

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

Arbeitspaket WP1 “Coordination & Management” befasste sich mit dem Management des Projekts und bedurfte der Mitarbeit aller Projektpartner. Arbeitspaket WP2 “HPC & Implementation” arbeitete “hardware-nah“ und lieferte die notwendigen Konzepte und Software, um zeitparallele Algorithmen auf Höchstleistungsrechnern effektiv einzusetzen. Die Resultate aus WP2 waren notwendig, um die theoretisch erwartbare Leistung von zeitparallelen Verfahren auch auf realen massiv-parallelen Rechnern zu realisieren. Arbeitspaket WP3 “Algorithms” lieferte neue mathematische Entwicklungen, um zeitparallele Methoden in neuen Kontexten einsetzbar und für Anwender attraktiver zu machen. Arbeitspaket WP4 “Applications” befasste sich mit der Demonstration des Potenzials von zeitparallelen Methoden in Anwendungen in den Bereichen der Wettervorhersage, Medizin, E-Mobilität und Teilchenbeschleunigung. Arbeitspaket WP5 “Impact maximisation” beinhaltete Maßnahmen zur Maximierung des erzielten Nutzens der gewonnenen Forschungsergebnisse. Das Zusammenspiel dieser

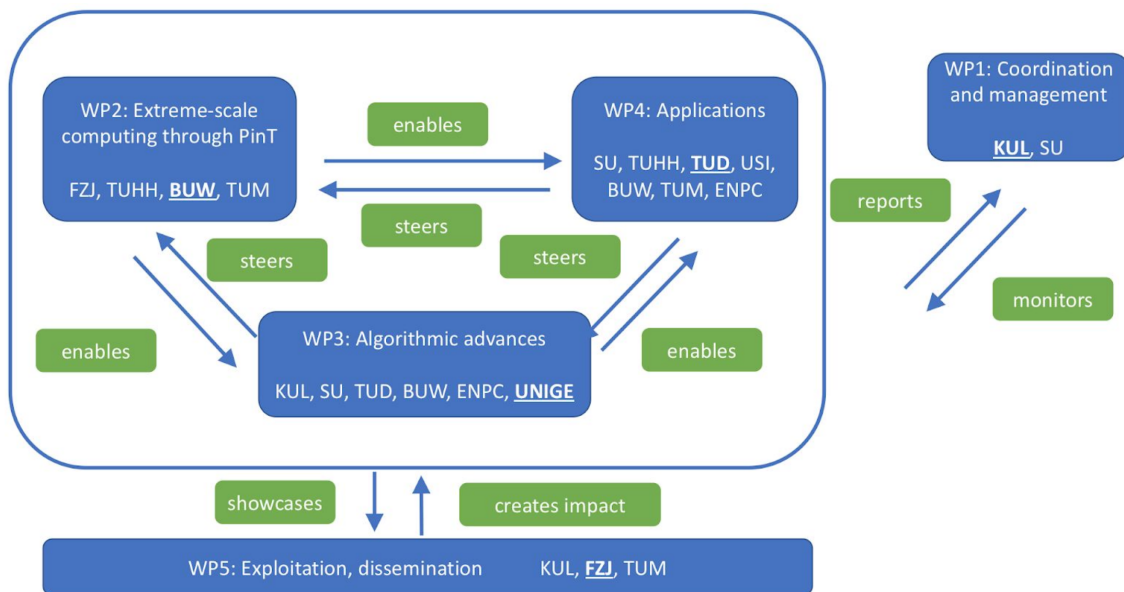


Abb. 1: Darstellung der Arbeitspakete, ihr Zusammenspiel und die jeweils beteiligten Partner.

Arbeitspakete ist in Abbildung 1 dargestellt.

TIME-X war ein relativ großes Projekt mit ehrgeizigen interdisziplinären Zielen, was eine geeignete Managementstruktur erforderte. Um ein synergetisches Umfeld zu schaffen, hat das Konsortium seine Managementstruktur auf die DESCAs-Vorlage<sup>1</sup> gestützt, die Leitlinien für ein effizientes Forschungsmanagement enthält. In TIME-X wurden die folgenden Konsortialgremien eingerichtet:

- das Steering Committee, bestehend aus einem Mitglied pro Partnereinrichtung, als oberstes Entscheidungsgremium des Konsortiums;
- das Scientific Executive Board, bestehend aus dem wissenschaftlichen Leiter und den Leitern der Arbeitspakete, als Aufsichtsorgan für den wissenschaftlichen Fortschritt des Projekts;
- das Projektmanagement-Team, bestehend aus dem Koordinator und einem Management-Support-Team, das den Koordinator und das Scientific Executive Board bei der laufenden Verwaltung des Projekts unterstützt.

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

<sup>1</sup><https://www.desca-agreement.eu/desca-model-consortium-agreement/>

## 1.4 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Die Projektpartner haben umfangreich mit großen Teilen der internationalen PinT-Community und darüber hinaus kooperiert. Die Arbeiten aus TIME-X sind in gemeinsamen Publikationen und Software-Releases, aber auch in thematisch verwandten Projekten verwertet worden.

Die TUDa hat neben den projektinternen Partnern vor allem mit der Robert Bosch GmbH und der Europäischen Organisation für Kernforschung (CERN) zusammengearbeitet. Das war bereits im Antrag angelegt, beide Partner hatten dem Antrag Letter of Interest beigefügt und waren im industriellen Beirat vertreten. Gegen Ende des Projekts hat sich eine neue Zusammenarbeit mit Siemens Digital Industries Software ergeben.

## 2 Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele

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

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

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

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

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

- **T3.1:** Optimization and optimal control. Es konnten neuartige Probleme formuliert bzw. Optimierungsalgorithmen entwickelt werden, die zum einen die Parallelität in der Zeit, aber auch die durch Unsicherheiten verursachten Schwankungen besser und effizienter handhaben können, siehe z.B. [13, 14].
- **T3.2:** Uncertainty quantification (UQ). Es wurden Arbeiten zur Kombination mit Optimierung (siehe T3.1) und PinT-Verfahren untersucht. Die Arbeiten zu UQ mit PinT sind noch nicht publiziert und werden durch ein -Folgeprojekt der EU weiterverfolgt.

- **T3.3:** Multiscale propagators. Unter anderem wurde ein neuartiges Verfahren entwickelt, das basierend auf der Idee der Multiscale propagators es ermöglicht, differential-algebraische Gleichungen mittels PinT zu lösen, siehe z.B. [15].
- **T4.2:** Electromagnetics: Es konnten signifikante Beschleunigungen für praxisrelevante Simulationsmodelle von Energiewandlern im Kontext der E-Mobilität (elektrische Maschinen, Transformatoren) und Teilchenbeschleunigern erzielt werden, z.B. [16, 17].

### 3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Förderung wurde zum großen Teil für die Finanzierung von wissenschaftlichen Mitarbeitenden verwendet, die die vorgestellten Arbeiten durchgeführt haben. Der Rest der Zuwendung wurde für Reisen von und zu Kooperationspartnern sowie für den Besuch von Konferenzen und Workshops verwendet, um die Arbeiten und das Projekt selbst vorzustellen.

Die im Rahmen dieses Projektes durchgeführten Arbeiten bedeuteten sowohl für die beteiligten Arbeitsgruppen als auch die PinT-Community in Deutschland und Europa einen wesentlichen Fortschritt: In dem Bereich der numerischen Verfahren (WP3) als auch in der Implementation (WP2) konnten entscheidende Schritte hin zu hochaufgelösten, robusten und effizienten HPC-gestützten Simulationen gemacht werden, die vorher in dieser Form undenkbar waren. Diese konnten in WP4 in verschiedene Anwendungen gebracht werden, so dass durch dieses Projekt auch der Nachweis der Praxistauglichkeit für industriell relevante Problemstellungen geleistet werden konnte.

Die in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten stellten einen erheblichen Mehraufwand für alle Partner dar, welcher nur mit Hilfe zusätzlicher Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu bewältigen war.

### 4 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

An der TUDa wurde die Zuwendung primär dazu verwendet, bis zu zwei wissenschaftliche Mitarbeiter/innen zu finanzieren, die in WP3 und WP4 die Forschung vorangetrieben haben.

Der Rest der Zuwendung wurde für Reisen von und zu Kooperationspartnern sowie für den Besuch von Konferenzen und Workshops verwendet.

Jahr	Personal		Reisen		Total
	EU	BMBF	EU	BMBF	
2021	36.611,05	12.053,86	-	-	48.664,91
2022	12.344,20	12.627,63	-	-	24.971,83
2023	57.840,54	23.928,61	770,20	-	82.539,35
2024	11.750,54	5.035,80	-	-	16.786,34
<b>Total</b>	<b>118.546,33</b>	<b>53.645,90</b>	<b>770,20</b>	<b>-</b>	<b>172.962,43</b>

Tab. 1: Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises (in EUR)

## 5 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

### 5.1 Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Die TUDa hat keine wirtschaftliche Verwertung geplant, kooperiert aber mit der Robert Bosch GmbH und Siemens Digital Industries Software in Folgeprojekten, so dass es über diese Partner zur wirtschaftlichen Verwertung von Ergebnissen kommen wird.

### 5.2 Wissenschaftliche-technische Anschlussfähigkeit

Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse wurden auf etlichen internationalen Fachtagungen (u.a. auf den PinT Workshops und ausgewählten SIAM Konferenzen) vorgestellt und mit der Community diskutiert. Die wesentlichen Neuerungen wurden in verschiedenen wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht oder sind bereits eingereicht, siehe Abschnitt 2. Zudem wurden Fortschritte bei der Entwicklung der verwendeten Software in Form neuer Releases veröffentlicht, siehe ebenfalls Abschnitt 2.

TIME-X hat die Community in Deutschland, Europa und der Welt deutlich enger zusammenrücken lassen und als Katalysator gewirkt. Neben dem wissenschaftlichen Fortschritt wurden auch neue Beziehungen geknüpft, die für zukünftige Kooperationen und Projekte wichtig sind. So sind bspw. mehrere gemeinsame Anträge im Rahmen der Inno4Scale-Initiative von EuroHPC aus dem TIME-X-Konsortium entstanden. Hier haben sich Partner aus der Community zusammengetan, die vor TIME-X keine wissenschaftlichen Kooperationen gepflegt haben.

Die TUDa konnte mittlerweile den Sonderforschungsbereich TRR 361 bei der DFG erfolgreich einwerben, der sich mit neuartigen Modellen und Simulationsmethoden für elektrische Maschinen beschäftigt. Hier konnte signifikant auf den Vorarbeiten von



Time-X aufgebaut werden. Darüberhinaus stellt die EU im Inno4Scale-Programm Folgemittel bereit, um die Ergebnisse aus Task T3.2 zur Praxisreife bringen.

## 6 Neue projektrelevante FE-Ergebnisse von dritter Stelle

Es sind keine für das Teilprojekt relevanten Ergebnisse von dritter Stelle bekannt.

## 7 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

Die Schlüsselpublikationen sind:

- [13] Mona Fuhrländer and Sebastian Schöps. Hermite-type modifications of BO-BYQA for optimization with some partial derivatives. *Optim. Eng.* **24** (2023). arXiv:2204.05022.
- [14] Jens Hahne, Iryna Kulchytska-Ruchka, Björn Polenz, Stephanie Friedhoff, Stephan Ulbrich, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time optimization of induction motors. *J. Math. Ind.* **13** (2023).
- [15] Idoia Cortes Garcia, Iryna Kulchytska-Ruchka, and Sebastian Schöps. Parareal for index two differential algebraic equations. *Numer. Algorithm.* **91** (2022). arXiv:2107.07755.
- [16] Idoia Cortes Garcia, Iryna Kulchytska-Ruchka, Markus Clemens, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time solution of eddy current problems using implicit and explicit time-stepping methods. In 19th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020) (Pisa, Italy, 2020). arXiv:2012.07603.
- [17] Erik Schnaubelt, Mariusz Wozniak, Julien Dular, Idoia Cortes Garcia, Arjan Verweij, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time integration of transient phenomena in no-insulation superconducting coils using Parareal. In Scientific Computing in Electrical Engineering SCEE 2024, Mathematics in Industry (Springer, 2025). Accepted, arXiv:2404.13333.

## 8 Sonstige Literatur

- [1] J. Nievergelt. Parallel methods for integrating ordinary differential equations. *Commun. ACM* **7**, 731–733 (1964), [\[link\]](#).
- [2] W. Hackbusch. Parabolic multi-grid methods. *Computing Methods in Applied Sciences and Engineering*, VI 189–197 (1984), [\[link\]](#).

- [3] Ch. Lubich and A. Ostermann. Multi-grid dynamic iteration for parabolic equations. *BIT Numerical Mathematics* **27**, 216–234 (1987), [\[link\]](#).
- [4] Graham Horton. Time-Parallel Multigrid Solution of the Navier-Stokes Equations. In Brebbia, C., Peters, A. and Howard, D. (eds.) *Applications of Supercomputers in Engineering II*, 435–445 (Springer Netherlands, 1991), [\[link\]](#).
- [5] D. E Womble. A time-stepping algorithm for parallel computers. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* **11**, 824–837 (1990), [\[link\]](#).
- [6] Guillaume Bal and Yvon Maday. A "Parareal" time discretization for non-linear PDE's with application to the pricing of an American Put. In Pavarino, L. and Toselli, A. (eds.) *Recent Developments in Domain Decomposition Methods*, vol. 23 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 189–202 (Springer Berlin, 2002), [\[link\]](#).
- [7] L. Baffico, S. Bernard, Yvon Maday, Gabriel Turinici, and G. Zérah. Parallel-in-time molecular-dynamics simulations. *Phys. Rev. E* **66**, 057701 (2002), [\[link\]](#).
- [8] Robert Speck, Daniel Ruprecht, Rolf Krause, Matthew Emmett, Michael L. Minion, Mathias Winkel, and Paul Gibbon. A massively space-time parallel N-body solver. In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '12*, 92:1–92:11 (IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, USA, 2012), [\[link\]](#).
- [9] F. Legoll, T. Lelièvre, and G. Samaey. A Micro-Macro Parareal Algorithm: Application to Singularly Perturbed Ordinary Differential Equations. *SIAM Journal on Scientific Computing* **35**, A1951–A1986 (2013), [\[link\]](#).
- [10] Roberto Croce, Daniel Ruprecht, and Rolf Krause. Parallel-in-Space-and-Time Simulation of the Three-Dimensional, Unsteady Navier-Stokes Equations for Incompressible Flow. In Bock, H. G., Hoang, X. P., Rannacher, R. and Schlöder, J. P. (eds.) *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes – HPSC 2012*, 13–23 (Springer International Publishing, 2014), [\[link\]](#).
- [11] M. Schreiber and R. Loft. A parallel time integrator for solving the linearized shallow water equations on the rotating sphere. *Numerical Linear Algebra with Applications* (2018), [\[link\]](#).
- [12] Denys Bast, Iryna Kulchytska-Ruchka, Sebastian Schöps, and Oliver Rain. Ac-



- celerated steady-state torque computation for induction machines using parallel-in-time algorithms. *IEEE Trans. Magn.* **56**, 1–9 (2020). [arXiv:1902.08277](#).
- [13] Mona Fuhrländer and Sebastian Schöps. Hermite-type modifications of BO-BYQA for optimization with some partial derivatives. *Optim. Eng.* **24** (2023). [arXiv:2204.05022](#).
- [14] Jens Hahne, Iryna Kulchytska-Ruchka, Björn Polenz, Stephanie Friedhoff, Stephan Ulbrich, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time optimization of induction motors. *J. Math. Ind.* **13** (2023).
- [15] Idoia Cortes Garcia, Iryna Kulchytska-Ruchka, and Sebastian Schöps. Parareal for index two differential algebraic equations. *Numer. Algorithm.* **91** (2022). [arXiv:2107.07755](#).
- [16] Idoia Cortes Garcia, Iryna Kulchytska-Ruchka, Markus Clemens, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time solution of eddy current problems using implicit and explicit time-stepping methods. In *19th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020)* (Pisa, Italy, 2020), [\[link\]](#). [arXiv:2012.07603](#).
- [17] Erik Schnaubelt, Mariusz Wozniak, Julien Dular, Idoia Cortes Garcia, Arjan Verweij, and Sebastian Schöps. Parallel-in-time integration of transient phenomena in no-insulation superconducting coils using Parareal. In *Scientific Computing in Electrical Engineering SCEE 2024, Mathematics in Industry* (Springer, 2025). Accepted, [arXiv:2404.13333](#).



# Kurzbericht

## TIME-X

### TIME parallelisation for eXascale computing and beyond

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Darmstadt, Förderkennzeichen:

16HPC047,

Laufzeit: 04/2021 – 03/2024, Beteiligte: Sebastian Schöps

## 1 Aufgabenstellung

Rechnergestützte Simulationen erlauben es, Rückschlüsse auf reale Anwendungen und naturwissenschaftliche Fragestellungen zu ziehen. Oft stellen allerdings, trotz diverser Optimierungen von Algorithmen und Software, die limitierte Parallelisierbarkeit und die hieraus resultierenden sehr langen Laufzeiten eine große Herausforderung dar. Um diese zu überwinden, bedarf es neuer & disruptiver Algorithmen.

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

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

## 2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand

Der traditionelle Ansatz der Parallelisierung findet in der räumlichen Dimension statt, indem Berechnungen auf Teilgittern auf unterschiedliche Kerne verteilt werden. Dieser Ansatz stößt aber durch die massive Parallelität auf Hardwareebene verstärkt an seine Grenzen. Insbesondere tritt dies unweigerlich beim “starke Skalierung” auf, da die Kommunikation latenzbedingt die Skalierbarkeit dominiert. Auch ein “schwache Skalierung” führt für zeitabhängige Probleme zwangsläufig durch die CFL-Bedingung in eine limitierte Skalierbarkeit.



Diese Herausforderung benötigt die Entwicklung neuer Algorithmen um diese Skalierbarkeitsbarriere zu durchstoßen. Zunächst beschränkten sich die Aktivitäten in die auf das Feld der angewandten Mathematik und waren eher theoretischer und akademischer Natur. Inzwischen jedoch sind PinT-Methoden ein aktives Forschungsgebiet im Überlappungsbereich von Mathematik, Computational Science & Engineering, dem Hochleistungsrechnen und einigen prominenten Anwendungsfeldern. Die meisten der derzeit in Europa aktiven Gruppen haben an TIME-X teilgenommen und die wesentlichen Gruppen in Nordamerika sind durch Kooperationen mit dem Projekt verbunden.

### **3 Planung und Ablauf**

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

TIME-X war ein relativ großes Projekt mit ehrgeizigen interdisziplinären Zielen gewesen, was eine geeignete Managementstruktur erforderte. Um ein synergetisches Umfeld zu schaffen, hat das Konsortium seine Managementstruktur auf die DESCA-Vorlage<sup>1</sup> gestützt, die Leitlinien für ein effizientes Forschungsmanagement enthält. In TIME-X wurden die folgenden Konsortialgremien eingerichtet:

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

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

### **4 Zusammenarbeit mit anderen Stellen**

Die Projektpartner haben umfangreich mit großen Teilen der internationalen PinT-Community und darüber hinaus kooperiert. Dies ist in gemeinsamen Publikationen und Software-Releases, aber auch in thematisch verwandten Projekten umgesetzt worden.

---

<sup>1</sup><https://www.desca-agreement.eu/desca-model-consortium-agreement/>