

Kurzbericht

Teilvorhaben

PDExa–DG: Diskontinuierliche Galerkin–Methoden für partielle Differentialgleichungen

Projektnummer: 16ME0638

Teilvorhaben	Arbeitsgruppe	Adresse	Ansprechperson
PDExa-DG	TUM-LNM	Technische Universität München Boltzmannstraße 15 85748 Garching b. München	Prof. Dr. Wolfgang A. Wall wolfgang.a.wall@tum.de +49 89 289-15300

als Teil des Gesamtvorhabens:

PDExa: Optimierte Softwaremethoden für die Lösung partieller Differentialgleichungen auf Exascale–Supercomputern

Richtlinie: Neue Methoden und Technologien für das
Exascale–Höchstleistungsrechnen (SCALEXA)

Koordination: Prof. Dr. Martin Kronbichler

Laufzeit: 1.10.2022 - 30.09.2025

1 Aufgabenstellung

Das Teilvorhaben zielte darauf ab, methodische Neu- und Weiterentwicklungen für exascale-fähige Löser zu erforschen und die daraus resultierenden algorithmischen Fortschritte in die Softwarebibliothek ExaDG zu überführen. Zentral war die Konzeption numerischer, hochskalierbarer DG-Verfahren, um ExaDG zur effizienten Simulation anwendungsnaher Strömungsprobleme zu befähigen. Ausgangspunkt waren bestehende DG-Diskretisierungen für Tensorprodukt-Gitter sowie matrixfreie Operatorimplementierungen, die bereits auf hohe Rechenleistung und parallele Skalierbarkeit ausgelegt waren. Für den wissenschaftlichen Kontext bestand die Herausforderung darin, komplexe geometrische Konfigurationen wie tetraedrische oder gemischte Gitter zu unterstützen und gleichzeitig die physikalische Genauigkeit, Zeitschrittgröße und Lösereffizienz zu optimieren.

2 Ablauf des Vorhabens

Das Teilvorhaben wurde in zwei Hauptbereiche gegliedert: Erstens die Erweiterung des Löser auf zusätzliche Elementtypen, insbesondere tetraedrische und gemischte Gitter, um geometrisch komplexe Anwendungen effizient abzubilden, und zweitens die Entwicklung und Optimierung fortschrittlicher Lösungsverfahren, einschließlich $H(\text{div})$ -konformer Finite-Elemente, (semi-)impliziter Zeitintegrationsverfahren und leistungsfähiger Vorkonditionierer. Parallel wurden Maßnahmen zur Skalierbarkeit auf Exascale-Architekturen umgesetzt. Abschließend wurde die Praxistauglichkeit durch zwei anwendungsnahe Multiphysik-Simulation demonstriert.

3 Wesentliche Ergebnisse

Im Rahmen des Teilvorhabens konnten mehrere zentrale Fortschritte erzielt werden, dazu zählen die Unterstützung neuer Geometrien, divergenzfreie Elementtypen, Optimierung der Node-Level Performance, Skalierbarkeit und Anwendungsstudien.

ExaDG unterstützt nun Simplex-Elemente, wodurch realistische, komplexe Geometrien in Industrie- und Biomedizin-Anwendungen abgebildet werden können. Eine prototypische Integration gemischter Gitter in ExaDG wurde erfolgreich realisiert und die dafür benötigten Pyramiden-Elemente höherer Ordnung wurden in deal.II ergänzt, inklusive der erforderlichen Quadraturregeln.

Die Software kann nun ebenfalls die $H(\text{div})$ -konformen Raviart-Thomas Finite-Elemente verwenden. Diese erhöhen die physikalische Genauigkeit der Simulationen, insbesondere bei divergenzfreien Strömungen. Semi-implizite Zeitintegrationsverfahren ermöglichen größere Zeitschritte und reduzieren so die Anzahl der benötigten Schritte bei fast gleich bleibendem Rechenaufwand. Leistungsfähige Vorkonditionierer gestalten das Lösen der entstehenden linearen Gleichungssysteme effizient. Diese Kombination erlaubt eine hohe Genauigkeit bei gleichzeitig verbesserter Rechenleistung.

Die matrixfreie Operatorauswertung auf tetraedrischen Gittern wurde umfassend

optimiert. Zentrale Maßnahmen umfassten SIMD-fähige Datenlayouts für Elementtypen ohne triviale Tensorproduktstruktur, die Einführung von Batching-Strategien zur effizienten Umsetzung von Matrix-Matrix-Operationen und die Reduktion von Overhead für kontinuierliche und diskontinuierliche Diskretisierungen. Durch diese Optimierungen konnten Durchsatzsteigerungen von einem Faktor drei erreicht werden und gegenüber vergleichbaren matrixbasierten Verfahren wird damit ein bis zu sechsfach höherer Durchsatz erzielt.

Durch graphbasierte Partitionierung, geometrieabhängige Zellgewichte und Optimierungen der Datenlokalität konnte unsere Software eine hohe Skalierbarkeit aufrechterhalten. Die Nutzung elementlokaler Vorkonditionierer trägt zusätzlich zur Effizienzsteigerung bei, insbesondere für Simplex Elemente.

Um die Anwendungsrelevanz zu steigern, wurde die Kopplung des Strömungslösers an skalar und kontinuierlich modellierten Transportprozessen verbessert. Zusätzlich wurden ein Modul eingefügt, welches effizient Partikelbewegungen in Strömungen simulieren kann.

ExaDG wurde in realistischen Szenarien erprobt, darunter die Simulation der Luftströmung in der menschlichen Lunge mit komplexen Ein- und Ausströmrandbedingungen sowie partikelbeladener Strömung. Als ein zweiter Testcase wurde die Verteilung von Schadstoffen in der Luft über der Wirtsbudenstraße des Oktoberfestes simuliert. Hierbei konnte gezeigt werden, dass die Methoden nicht nur numerisch stabil und skalierbar sind, sondern auch für praxisrelevante Industrie- und Biomechanik-Szenarien einsetzbar sind.

4 Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die Arbeiten wurden in enger Zusammenarbeit mit den Projektpartnern durchgeführt, insbesondere mit den Arbeitsgruppen von Prof. Kronbichler, Prof. Kormann, Prof. Anzt und Prof. Schulz. Der wissenschaftliche Austausch erfolgte sowohl im Rahmen mehrerer gemeinsamer Treffen und Coding-Camps, als auch durch regelmäßige Einzeltreffen und wöchentliche Meetings.

Darüber hinaus wurde eine Zusammenarbeit mit dem SCALEXASchwesterprojekt ADAPTEX initiiert. Ziel dieser Kooperation war die Entwicklung einer Schnittstelle zur Kopplung der Bibliotheken deal.II und t8code. Die Zusammenarbeit ermöglichte erste Strömungssimulationen auf dynamisch verteilten und adaptiv verfeinerten gemischten Gittern.

5 Fazit

Das Teilvorhaben hat erfolgreich dazu beigetragen, ExaDG zu einer leistungsfähigen, skalierbaren und industriefähigen Simulationssoftware weiterzuentwickeln. Sowohl methodisch als auch in der Softwareinfrastruktur wurden wesentliche Fortschritte erzielt, die die Nutzung von ExaDG für komplexe, realistische und praxisrelevante Anwendungen ermöglichen und gleichzeitig die Grundlage für zukünftige Exascale-Simulationen legen.