

Kurzbericht

StromungsRaum: Neuartige Exascale-Architekturen mit heterogenen Hardwarekomponenten für Strömungssimulationen

Zuwendungsempfänger: FAU, Förderkennzeichen: 16ME0707,
Laufzeit: 10/2022 – 12/2025, Beteiligte: Gerhard Wellein, Christie Alappat, Dane Lacey

1 Aufgabenstellung

Das Vorhaben *StromungsRaum* hatte zum Ziel, die Simulation-as-a-Service-Plattform *StromungsRaum*[®] durch Integration exascale-relevanter Methoden, skalierbarer Lösungsansätze und Performance-Optimierungen wesentlich weiterzuentwickeln. Grundlage bildete die etablierte Kopplung mit dem Simulationskern FEATFLOW. Zentrale Herausforderung war die Überführung der entwickelten Verfahren in eine robuste, validierte und für industrielle Anwender zugängliche Gesamtlösung. Die Arbeiten folgten einem integrierten Ansatz, bei dem Methodenentwicklung, Implementierung, Performance Engineering und Systemintegration eng verzahnt wurden. Ziel war die durchgängige Integration der Ergebnisse in FEATFLOW und deren Bereitstellung innerhalb von *StromungsRaum*[®], um einen unmittelbar nutzbaren Mehrwert für Endanwender zu schaffen.

2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand

Die SOR-Multigrid-Glättungsroutinen in FEATFLOW dominierten bei wenigen MPI-Prozessen, während sich der Engpass mit steigender Prozesszahl zu globalen Synchronisationswartezeiten verlagerte. Durch die Umstellung auf nicht-blockierende MPI-Kommunikation – auch in den Vanka-Glättern von FEAT3 – konnte die Skalierbarkeit verbessert und Kommunikation mit Berechnung überlappt werden. Zudem erwiesen sich die in FEAT3 erzeugten Matrizen als ungeeignet für cuSPARSE, weshalb gemeinsam mit der TU Dortmund effizientere, handoptimierte CUDA-Kernel entwickelt wurden.

3 Planung und Ablauf

Das Projekt war in vier zentrale Arbeitspakete gegliedert: Methodenentwicklung, parallele Implementierung, Skalierung und Performance Engineering sowie Integra-

tion und Validierung in StrömungsRaum[®]. Die Arbeiten bauten aufeinander auf und wurden eng verzahnt durchgeführt. Die Beiträge der Projektpartner ergänzten sich dabei komplementär entlang der gesamten Entwicklungskette – von der algorithmischen Weiterentwicklung über die effiziente Umsetzung auf HPC-Systemen bis hin zur Integration in die industrielle Plattform. Der Fokus lag auf der durchgängigen Zusammenführung der Ergebnisse, um eine validierte und direkt nutzbare Gesamtlösung bereitzustellen.

4 Wesentliche Ergebnisse

Das wissenschaftlich-technische Ergebnis des Vorhabens besteht in der erfolgreichen Verbindung von Methodenfortschritten aus der numerischen Mathematik, hochparalleler Implementierung und Performance Engineering mit einer industriell verwertbaren Simulationsplattform. Im Projekt wurden neue bzw. erweiterte Löseransätze für raum- und zeitparallele Strömungssimulationen entwickelt, auf moderne HPC- und GPU-Architekturen übertragen, analysiert und in FEATFLOW sowie StrömungsRaum[®] integriert. Entscheidend ist, dass diese Ergebnisse nicht nur in Form separater Forschungsprototypen vorliegen, sondern in einer funktionsfähigen Toolchain zusammenwirken.

Die SOR-Multigrid-Glättungsroutinen in FEATFLOW waren bei kleinen MPI-Prozesszahlen der Haupt-Hotspot, während sich mit steigender Prozesszahl die Dominanz der globalen MPI-Barrieren zeigte und bei über 1000 Prozessen zum dominierenden Laufzeitbeitrag wurde. Um die Skalierung zu hohen Prozesszahlen zu ermöglichen, wurde das Kommunikationsschema auf nicht-blockierende MPI-Aufrufe umgestellt, was auch bei den Vanka-Glättern in FEAT3 erfolgte und zusätzlich eine Überlappung von Kommunikation und Berechnung ermöglichte. Parallel zeigte sich, dass die in FEAT3 erzeugten asymmetrischen dünnbesetzten Matrizen für cuSPARSE ungeeignet sind und das GPU-Potenzial oft wenig ausschöpfen; daher wurden gemeinsam mit der TU Dortmund handoptimierte CUDA-Kernel entwickelt, die für diese Muster höhere Performance erzielten und den Bedarf an einem flexiblen Prototyping-Framework bestätigten.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Während der Projektlaufzeit wurden relevante externe Entwicklungen kontinuierlich beobachtet und in die Arbeiten eingeordnet. Der Fokus lag dabei auf der Überführung wissenschaftlicher Methoden in eine industriell nutzbare Simulationsplattform, wodurch ein eigenständiger Beitrag über reine Prototypen hinaus geleistet wurde.