

Sachbericht – Teil I – zu PDExa-MF: Skalierende matrixfreie Algorithmen für Finite-Elemente-Verfahren hoher Ordnung

im Rahmen von: **PDExa: Optimierte Softwaremethoden für die Lösung partieller
Differentialgleichungen auf Exascale-Supercomputern**

Projektnummer: 16ME0637K

Prof. Dr. Martin Kronbichler, Ruhr-Universität Bochum

1 Überblick

Das Projekt PDExa arbeitete an der Entwicklung neuer Softwaremethoden für die Simulation von partiellen Differentialgleichungen, welche sowohl die Ressourcen innerhalb der Rechenknoten eines Parallelrechners als auch das massiv parallele Zusammenspiel eines Gesamtrechners der Exascale-Klasse möglichst effizient nutzen sollen. Im Projekt wurden fortschrittliche mathematische Zutaten verknüpft mit raffinierten Implementierungen. Der Ausgangspunkt der Methoden in PDExa ist die Beobachtung, dass viele Simulationswerkzeuge letztlich auf die häufige Lösung von großen linearen Gleichungssystemen führen, welche mit den Grundrechenarten in extremer Zahl auf Großrechnern gelöst werden. Auf größter Skala kommen in der Regel iterative Lösungsverfahren zum Einsatz, die wiederholt Matrix-Vektor-Produkte berechnen und mit den Resultaten eine anfängliche Näherungslösung schrittweise verbessern. Da der Speicherzugriff im Vergleich zu Berechnungen auf modernen Rechnern verhältnismäßig teurer ist, ist es oft von Vorteil in Bezug auf Recheneffizienz und Energieeinsatz, wenn die großen Matrizen gar nicht erst vorberechnet und im Speicher abgelegt werden, sondern durch matrixfreie Implementierung die Anwendung der Matrizen auf Vektoren ohne das explizite Bilden der Matrix direkt dargestellt wird. Das bedeutet, dass der Speicherzugriff zugunsten von eigentlich redundanten Rechenoperationen reduziert wird. Mit matrixfreien Implementierungen der aktuellen Generation konnte das Verbundprojekt Methoden höherer formeller Konvergenzordnung mit ähnlichen Geschwindigkeit pro Freiheitsgrad umzusetzen wie traditionelle Verfahren niedrigerer Ordnung. Die höhere Genauigkeit der Neuentwicklungen impliziert in Praxis eine Reduktion der Rechenkosten. Die Implementierungen wurde über Performance-Modelle wie Roofline verfolgt und quantifiziert, um mittels Performance-Engineering eine führende Stellung bei der Node-Level-Leistung zu erreichen. Das Teilprojekt PDExa-MF hatte als Koordination des Verbundvorhabens PDExa zudem eine Schlüsselrolle bei der Bereitstellung der Entwicklungen als Open-Source-Software. Das Teilprojekt machte wesentliche Beiträge zur weithin genutzten Finite-Elemente-Bibliothek deal.II und der Anwendung von modernen numerischen Methoden in der Strömungsmechanik über die Software ExaDG.

2 Ablauf des Vorhabens

Das Teilvorhaben war in zwei Hauptbereiche gegliedert, erstens die Entwicklung von matrixfreien Algorithmen für Beschleunigerhardware und insbesondere GPUs, und zweitens die Entwicklung von hocheffizienten Vorkonditionierungsverfahren für implizite Zeitschrittverfahren, welche im Einklang mit matrixfreien Implementierungen die bestmögliche Anwendungsperformance im Sinne einer minimalen Lösungszeit erreichen soll. Hierbei wurden fortschrittliche numerische Algorithmen, wie hochgenaue räumliche und zeitliche Diskretisierungen und Strukturhaltung, betrachtet, welche den Wert der Berechnungen maximieren sollen. Diese Maßnahmen wurden mit Blick auf Skalierbarkeit auf Exascale-Architekturen verschiedener Anbieter umgesetzt.

3 Wesentliche Ergebnisse

Dar Projektziel einer höheren Ausführungsgeschwindigkeit von Simulationssoftware für partielle Differentialgleichungen zielte auf drei wesentliche Eigenschaften moderner Supercomputer: Das Potential matrixfreier Algorithmen liegt darin, die teureren Datenzugriffe zugunsten zusätzlicher Berechnungen zu reduzieren. Es wurde in einem ersten Schritt als an einer breiten Anwendbarkeit mit vielen möglichen partiellen Differentialgleichungen einerseits und Hardwareanbietern andererseits gearbeitet. Zweitens zeichnet sich die Exascale-Generation durch starken Fokus auf Beschleunigerhardware wie Grafikprozessoren (GPUs) aus, wofür im Projekt Abstraktionsschichten mittels der Kokkos-Bibliothek entwickelt wurden. Anhand verschiedener möglicher Ansätze konnten bessere Algorithmen entwickelt werden, eine Entscheidung, die auch abhängig von der Hardware und den zu modellierenden Differentialgleichungen ist. Drittens wurden im Rahmen des Projekts auch der Einsatz von Hardware mit gemischter Genauigkeit neben den klassischen Algorithmen mit 64-Bit-Gleitkommazahlen etabliert, etwa durch das Nutzen von 32-Bit-Gleitkommazahlen in einem Strömungslöser und weiterführende Untersuchungen mit noch niedriger Genauigkeit. Diese Zahlenformate reduzieren den Speicherzugriff und erlauben oft auch höhere arithmetische Rechenleistung. Jedoch muss für reduzierte Genauigkeit sichergestellt werden, dass die Gesamtgenauigkeit und essentiellen mathematischen Eigenschaften der Simulation beibehalten werden, was durch neue Forschung gelöst wurde.

Diese Entwicklungen wurden flankiert durch zwei wichtige methodische Entwicklungen. Einerseits forschte das Teilprojekt PDExa-MF an neuen iterativen Lösungsverfahren, welche mit matrixfreien Implementierungen harmonisieren und dabei die Gesamtrechenzeit minimieren. Hierbei ging es vor allem darum, durch implizite Verfahren für die Darstellung von zeitabhängigen Problemen die Zahl der Gesamtschritte zur Lösung eines Problems zu reduzieren. Dies ist insbesondere in Bezug auf den Datenaustausch und die Synchronisation zwischen parallelen Recheneinheiten von Vorteil und stellt eine effizientere Nutzung der größten Maschinen sicher. Die entscheidende Komponente sind hier neu entwickelte Vorkonditionierer, die auch bei transportdominierten Prozessen, wie turbulenten Strömungen, gut funktionieren. Andererseits wurde in der Arbeitsgruppe auch an verbesserten Zeitschrittalgorithmen für die Simulation von inkompressiblen turbulenten Strömungen gearbeitet. Das Ziel dieser Aktivität war es, bei den für die Kommunikation vorteilhaften größeren Zeitschritten auch die Gesamtgenauigkeit und Robustheit hoch zu halten.

4 Zusammenarbeit und Fazit

Das Teilprojekt PDExa-MF spielte eine Schlüsselrolle im Projekt PDExa, da es die mathematisch-algorithmischen Entwicklungen in PDExa-LA (Prof. H. Anzt; Dr. M. Koch) und PDExa-MP (Prof. K. Kormann; Dr. I. Dravins) verband mit Performance-Modellierung von PDExa-PP (Prof. M. Schulz; U. Saroliya) und mit den Anwendungen in Mechanik von PDExa-DG (Prof. W. A. Wall, D. T. Still). Diese Brückenrolle ermöglichte den engen Kontakt mit einer Vielzahl von spannenden Herausforderungen und neuen Perspektiven. Der Kontakt wurde sowohl durch persönliche Treffen vor Ort als auch wöchentliche virtuelle Besprechungen im Projektteam sowie virtuelle Einzeltreffen aufrecht erhalten.

Zudem gab es vom Projekt PDExa regelmäßig Kontakt mit anderen Verbundprojekten in der SCALEXA-Initiative. Zum einen waren die jährlichen Treffen bei der HPC-Statuskonferenz in den Jahren 2023–2025 sehr wertvoll, um mit verwandten Projekten Herausforderungen und Lösungen zu diskutieren. Ein enger Kontakt bestand insbesondere mit den Projekten ADAPTEX und StroemungsRaum, mit denen gemeinsame Vorträge erstellt wurden, aber auch mit dem Projekt EXASIM gab es regelmäßig Austausch. Der Austausch und gegenseitige Ansporn sind Schlüssel für effektiven wissenschaftlichen Fortschritt.