With funding from the:

Federal Ministry
of Research, Technology
and Space

GFZ Helmholtz-Zentrum
für Geoforschung

NAAICE

Network-Attached Accelerators In Heterogeneous Computing Environments

Netzwerkgekoppelte Beschleuniger für energieeffizientes heterogenes High-Performance Computing

Abschlussbericht des Teilvorhabens:

KI-Unterstützte Simulationen des reaktiven Transports als Workload für Netzwerkgekoppelte Beschleuniger

des

GFZ Helmholtz-Zentrum für Geoforschung

im Verbundprojekt mit den Projektpartnern:

Universität Potsdam (UP)

Fraunhofer Heinrich Hertz Institut (HHI)

Zuse-Institut Berlin (ZIB)

PERFACCT GmbH

Förderprogramm Green HPC

Förderkennzeichen 16ME0625

Laufzeit: 12.09.2022 – 31.03.2026

Autor: Dr. Marco De Lucia

Datum: 24. August 2026

Inhaltsverzeichnis

1 Kurzbericht **2**

2 Eingehende Darstellung **4**

2.1 Einführung und Projektziele 4

2.2 Arbeitspaket 4: Anwendungsoptimierung durch NAA-Einsatz 5

2.3 Arbeitspaket 5: Beschleunigung von KI-Workloads über NAAs 8

2.4 Arbeitspaket 6: Profiling und Monitoring der Energieeffizienz 12

3 Zusammenfassung und Verwertungsplan **12**

3.1 Verwertung 13

3.2 Publikationen, Vorträge und weitere Verbreitung 14

1 Kurzbericht

Aufgabenstellung

Das Teilvorhaben des GFZ Helmholtz-Zentrums für Geoforschung (im Folgenden **GFZ**) im Verbundprojekt NAAICE verfolgte das Ziel, eine geowissenschaftliche HPC-Anwendung als Workload für netzwerkgekoppelte FPGA-Beschleuniger (Network-Attached Accelerators, **NAAs**) zu erschließen und die Einsatzmöglichkeiten moderner KI-Methoden in diesem Kontext zu untersuchen. Die Aufgabe war somit doppelt motiviert: einerseits sollte die Anwendung **POET** (*POtsdam rEactive Transport Simulator* [1, 2]), ein am GFZ in Kooperation mit der Universität Potsdam (UP) entwickelter, gekoppelter Simulator geochemischer Wechselwirkungen zwischen Fluiden und Gesteinen im Untergrund, für das NAA-Offloading vorbereitet und angepasst werden; andererseits sollten KI-basierte Ersatzmodelle für die rechenintensive Geochemiekomponente entwickelt, optimiert und hinsichtlich ihrer Tauglichkeit für NAA-Auslagerung bewertet werden. Das GFZ übernahm dabei die Leitung der anwendungsorientierten Arbeitspakete 4 und 5 sowie eine unterstützende Rolle in Arbeitspaket 6.

POET ist insofern eine exemplarische HPC-Anwendung für das Vorhaben, als sie klassische numerische Ansätze (Lösung von Transportgleichungen) mit datengetriebenen KI-Methoden verbinden kann - ein Muster, das in den Geowissenschaften zunehmend verbreitet ist und für das die Eignung von NAAs sowohl im traditionellen als auch im KI-getriebenen Rechenbetrieb demonstriert werden sollte. Die gesellschaftliche Relevanz liegt auf der Hand: reaktiver Transport wird eingesetzt zur Langzeitprognose der Sicherheit nuklearer Endlager in geologischen Formationen sowie zur Bewertung von Gasspeicherprojekten und geothermischer Nutzung des Untergrunds.

Das GFZ brachte umfangreiche Vorarbeiten in das Projekt ein. Mit POET [1] lag ein bereits MPI-parallelisierter, lauffähiger Prototyp eines reaktiven Transportsimulators vor, der geochemische Teilprozesse über eine Kopplung mit dem etablierten Geochemiesimulator PHREEQC und eine beschleunigende verteilte Hash-Tabellen-Schicht (DHT-Lookup) realisiert. Frühere Arbeiten [2] hatten gezeigt, dass ein DHT-basiertes Ersatzmodell erhebliche Beschleunigungen gegenüber einer vollständigen Neuberechnung der Geochemie ermöglicht. Dies war besonders relevant bei bestimmten Konfigurationen der Simulationen, nämlich bei Advektion-dominierten Problemstellungen. Darüber hinaus hatte das GFZ im Rahmen von parallel laufenden Projekten (Helmholtz-Projekt T^6 und EU-Projekt HERMES) erste neuronale Netze als multivariate Regressoren für geochemische Teilprozesse untersucht. Offene Fragen betrafen die Übertragbarkeit dieser Ansätze auf vollständig gekoppelte reaktive Transportsimulationen sowie die FPGA-Portierbarkeit einzelner Anwendungskomponenten - Fragen, die im Mittelpunkt von NAAICE standen.

Projektablauf

NAAICE erfolgte in enger Zusammenarbeit zwischen allen Partnern: über die gesamte Projektlaufzeit fanden 18 gemeinsame Treffen in Potsdam, Berlin in Person und online - sowie zahlreiche bilaterale Meetings statt. GFZ war insbesondere mit UP (Kernentwicklung von POET) und PERFACCT (Profiling und Monitoring) verbunden. Die Zusammenarbeit mit UP war durchgehend besonders eng: die Entwicklung von POET ist seit vor dem Projektbeginn als iterativer Prozess organisiert, bei dem GFZ fachliche Anforderungen aus der Geochemie-Domäne und Validierungsaufgaben übernimmt, während UP die Implementierung in C++ und das Software-Engineering vorantreibt.

Die ursprünglich geplante FPGA-Portierung des Geochemie-Lösers PHREEQC - der bei weitem rechenintensivsten Komponente - erwies sich nach eingehendem Profiling und Analyse als nicht realisierbar; weitere Simulatoren wurden evaluiert, aber ihr Einsatz und die daher ergebende Umstellung hinsichtlich Einarbeitungszeit und Datengrundlage für unrealistisch eingestuft. Das Konsortium entschied, das Transportmodul TUG als Portierungskandidat zu verfolgen. Diese Komponente implementiert ein 2D Finiten Volumen Schema für die Lösung der Diffusionsgleichung mit einem ADI (*Alternating Direction Implicit*) Ansatz auf einem uniformen Grid, welche zusammenfassend in vielen unabhängigen Gauß'schen Eliminationsverfahren für die Inversion tri-diagonaler Matrizen (Thomas Algorithmus) resultiert. Dieser Pivot spiegelt die wissenschaftliche Redlichkeit des Vorgehens wider: statt eine voraussehbar unproduktive Portierung durchzuführen, wurde gemeinsam eine tragfähigere Alternative identifiziert.

Wesentliche Ergebnisse

- **Benchmarkkatalog (M4.1)**: Ein umfassender Katalog an POET-Benchmarksimulationen mit wachsender geochemischer Komplexität (Dolomitisierung, Baryt-Fällung, Sorption von Uran im Tonstein) wurde erstellt und auf der projektinternen GitLab-Instanz dokumentiert.

- **FPGA-Portierung der TUG-Komponente:** Das Profiling ergab, dass PHREEQC für eine sinnvolle FPGA-Portierung strukturell ungeeignet ist. Stattdessen wurde das 2D-Transportmodul TUG (ADI-Schema, Thomas-Algorithmus) als geeigneter Kandidat identifiziert und ein eigener **TUG-Benchmarkkatalog** für das NAA-Offloading erstellt. Das GFZ validierte zudem, dass einfache Rechengenauigkeit (*float*) für TUG keine signifikante Genauigkeitseinbuße gegenüber doppelter Genauigkeit (*double*) bedeutet - ein wichtiges Ergebnis für die FPGA-Portierung. **Die erfolgreiche Validierung der NAA-ausgelagerten TUG-Komponente erwies eine vielversprechende Energieersparnis.**

- **KI-Ersatzmodelle:** Verschiedene Netztopologien für geochemische Ersatzmodelle wurden systematisch untersucht; das Netz-Training und die Anbindung via C-Python-Schnittstelle und eine eigene CUDA-basierte Implementierung wurden in POET integriert, sodass GPU- und FPGA-gestütztes, inkrementelles Training während der Simulation möglich ist. Allerdings stellten sich die ursprünglich als "hinreichend genau" eingestuften Netztopologien bei vollständig gekoppelten Simulationen als **unzureichend** heraus; umfangreiche Nacharbeiten (Datenstratifizierung, Feature Engineering, massenerhaltende Verlustfunktionen) verbesserten die Akzeptanzrate der Vorhersage von KI auf ca. 50 %, was allerdings **nicht zu einer Beschleunigung der gekoppelten Simulationen führen** konnte.

- **Wissenschaftliche Außenwirkung**: POET wurde auf mehreren internationalen Konferenzen vorgestellt. Seine Architektur ist ein Novum in der geowissenschaftlichen Domäne; die im Projekt verbesserte `litephreeqc` Schnittstelle wurde anschließend auch in weiteren Simulatoren eingebaut. Darüber hinaus entstanden mehrere Publikationen in Fachjournals und Konferenzbeiträgen in der geowissenschaftlichen Domäne.

2 Eingehende Darstellung

2.1 Einführung und Projektziele

Die Simulation des reaktiven Transports - also der gekoppelten Wechselwirkungen von Fluidbewegung in porösen Medien, von Transport der gelösten Spezies und von den geochemischen Reaktionen dieser Spezies mit Gesteinsmineralen - stellt trotz jahrzehntelanger Forschung eine Herausforderung für den wissenschaftlichen Rechenbetrieb dar. Der Flaschenhals für diese Klasse an Modellen liegt dabei hauptsächlich bei der numerischen Lösung der Chemie: für jede Gitterzelle und jeden Zeitschritt muss ein nichtlineares Gleichungssystem mit nicht-konstanten Koeffizienten gelöst werden, das typischerweise durch spezialisierte Löser basierend entweder auf dem Massenwirkungsgesetz oder auf Minimierung der Gibbs'schen Energie erfolgt. Die spezialisierten Löser evaluieren dabei erst die Thermodynamik basierend auf der totalen Masse der Elemente, die in einer wässrigen Lösung vorkommen. Basierend auf der Thermodynamik werden dann die Reaktionen - Ausfällung oder Auflösung von einem Mineral, Kationenaustausch oder Oberflächenkomplexierung - bestimmt. Falls kinetische Kontrolle der Reaktionen spezifiziert ist, muss ein kinetisches Gesetz in der Zeit integriert werden, was die Evaluation von mehreren Gleichgewichtszuständen benötigt, mit erheblich höherem Rechenaufwand. Dies macht selbst für mittelgroße 2D-Domänen Rechenzeiten im Bereich von Stunden bis Tagen auf modernen Multi-Core-Clustern erforderlich - eine Limitierung, die den Einsatz der Methode für gesellschaftlich relevante Fragestellungen wie die Langzeitsicherheit nuklearer Endlager erheblich einschränkt. Dieser Rechenaufwand führt zu einer Vereinfachung sowohl der räumlichen Auflösung der Modelle - die meisten Papers sind begrenzt auf 1- oder 2-D Simulationen, und somit dienen nur zum Prozessverständnis und nicht zu quantitativen Aussagen über reale, komplexe geologische Systeme - und der Chemie selbst, insofern beispielsweise die Zeitabhängigkeit der chemischen Reaktionen vernachlässigt wird und nur unter der Annahme eines lokalen thermodynamischen Gleichgewichts gerechnet werden, oder nur ein Teil der möglichen Reaktionen abgebildet werden.

POET [1, 2] ist ein open-source wissenschaftlicher Simulator, entwickelt in Kooperation zwischen der Universität Potsdam und GFZ, der gekoppelte reaktive Transportsimulationen im HPC-Bereich ermöglicht. Es basiert auf der Kopplung von einer effizienten Bibliothek für die Berechnung des Transportes - insbesondere der Diffusion von gelösten Spezies in räumlich heterogenen porösen Medien - und dem verbreiteten Softwarepaket PHREEQC [3] als Geochemie-Löser. POET ist konzipiert, um Ansätze zur Beschleunigung der Simulationen insbesondere im HPC-Bereich zu testen. Es verfügt über ein sehr effizient skalierendes `master-worker` Parallelisierungsschema, wobei die verteilten Arbeitspakete aus nicht benachbarten Gridelementen bestehen. Weiterhin verfügt POET über zwei komplementäre *Approximate Computing* Beschleunigungsansätze: ein DHT-basiertes Lookup bereits berechneter Geochemielösungen, und die Möglichkeit, Ersatzmodelle für die Geochemie neben PHREEQC abzufragen. Letzteres erfolgt durch den eingebauten R-Interpreter und wurde während des NAAICE-Vorhabens auch um den c-python Interpreter erweitert. Somit kann ein Nutzer ein vortrainiertes KI-Modell auf Laufzeit aufrufen; die KI-Vorhersagen, die ein Plausibilitätscheck nicht überstehen, werden nachfolgend numerisch mithilfe von PHREEQC gelöst. Somit ist die POET Anwendung in besonderem Maße geeignet, die Bandbreite des NAAICE-Ansatzes zu demonstrieren - von klassischem HPC-Offloading bis hin zu modernen KI-Methoden.

Das GFZ war federführend für die Arbeitspakete 4 (*Anwendungsoptimierung durch NAA-Einsatz*) und 5 (*Beschleunigung von KI-Workloads über NAAs*) und beteiligte sich an AP6 (*Profiling und Moni-*

toring der Energieeffizienz). Insgesamt beantragte das GFZ 18 Personenmonate für Dr. De Lucia und eine Stelle für studentische Hilfskraft. Die HiWi-Stelle konnte jedoch nur teilweise besetzt werden; die entsprechenden Mittel wurden zum erhöhten Forschungsbedarf in AP5 und für die Abdeckung der kostenneutralen Verlängerung um 6 Monate eingesetzt. Nachfolgende Abschnitte beschreiben die Ergebnisse der Arbeitspakete.

2.2 Arbeitspaket 4: Anwendungsoptimierung durch NAA-Einsatz

Erstellung des Benchmarkkatalogs

Das GFZ definierte einen Katalog an Benchmarksimulationen mit steigender Komplexität der abgebildeten geochemischen Systeme und Rechenaufwand und somit den Partnern unterschiedliche Workload-Profile für das Profiling und die Portierungsarbeiten bereitstellte. Die definierten Benchmarks umfassen drei geochemische Prozesse, die jeweils auf unterschiedlichen Gittern gelöst werden: (a) eine Reaktion der Dolomitisierung, ein klassisches Benchmark-Szenario für die RTM-Community (Benchmark `dolo`); (b) eine Reaktion, bei der das Strontium-Sulfat-Mineral Celestit gelöst wird und dabei Baryt ausfällt (`barite`); (c) sowie die Diffusion von Uran in Tonstein mit komplexem Kationenaustausch und Oberflächenkomplexierung an unterschiedlichen Tonfraktionen (`surfex`). Letzterer ist mit 21 transportierten Elementen (inklusive aller Oxidationsnummern für Schwefel, Uranium und Eisen) und 83 gesamten geochemischen Parametern bei weitem der komplexeste und besitzt unmittelbare Relevanz für die Bewertung nuklearer Endlager [4, 5]. Dieses Benchmark erforderte auch die Erweiterung der POET-Anbindung zu PHREEQC, um die geochemischen Prozesse Kationenaustausch und Oberflächenkomplexierung behandeln zu können. Szenarien existieren in kleineren Varianten, für Tests auf einzelnen multi-core Workstations, und einer HPC-Variante; die Unterschiede betreffen ausschließlich die Gittergröße und Randbedingungen, nicht die chemischen Prozesse selbst. In der in POET implementierten sequentiellen, nicht iterativen Kopplung zwischen Transport und Geochemie muss eine unabhängige Lösung eines Chemieproblems pro Gitterzelle gerechnet werden; somit ist die Gittergröße der größte limitierende Faktor für die Simulationen. Die Lösung der Partialdifferentialgleichungen des Transports ist umgekehrt global, und eine unabhängige Lösung muss für jede transportierte Konzentration erzeugt werden. Tabelle 1 fasst die definierten Benchmarks, ihren Rechenaufwand und Gittergröße zusammen.

Benchmark	Gittergröße	# Mobilen/Total	Chem. RT	Trans. RT	# Iter.
dolo - Test	100 × 100	7 / 9	1.63 s	0.11	10
dolo - Inter	200 × 400	7 / 9	27621 s	1648 s	20 000
dolo - Large	2000 × 4000	7 / 9	10871 s	1019 s	500
barite	200 × 200	7 / 9	1442 s	2.0 s	50
surfex	1000 × 1000	21 / 83	15669 s	298 s	100

Tabelle 1 Benchmarkkatalog der POET-Simulationen (M4.1). RT = Rechenzeit (sequentieller Ansatz ohne Parallelisierung); Chem./Trans. = Anteil Geochemie/Transport an der Gesamtrechenzeit. Es ist klar ersichtlich, dass die Geochemie den dominanten Rechenbeitrag leistet. Gridgröße ist der

Die Verhältnisse in Tabelle 1 machen unmittelbar deutlich, warum die Geochemie-Komponente der natürliche erste Kandidat für eine Auslagerung war: der Chemie-Anteil an der Rechenzeit übersteigt

den Transportanteil um eine bis zwei Größenordnungen. Der Benchmarkkatalog wurde auf der GitLab-Instanz des GFZ dokumentiert und ist dauerhaft zugänglich.

Meilenstein **M4.1** (Benchmarkkatalog) wurde im Jahr 2023 fristgerecht erreicht.

Insbesondere der `surfex` Benchmark diente als Basis für die Implementierung einer Sensitivitätstudie zur Sorption von Uran in Abhängigkeit der räumlichen Variabilität einer Tonformation. Diese Studie erfolgte im Rahmen eines Erasmus+-Austauschs mit Universität Bologna; Ergebnisse aus der entstandenen Masterarbeit wurden international vorgestellt und führten anschließend zu einer Veröffentlichung [5].

Profiling und Identifikation des Auslagerungskandidaten

Basierend auf dem Benchmarkkatalog führte PERFACCT ein detailliertes Profiling der POET-Anwendung durch. Das ernüchternde Ergebnis: PHREEQC - trotz seiner dominanten Rechenzeit der eigentlich naheliegende Kandidat - ist für eine sinnvolle FPGA-Portierung schlicht nicht geeignet. Die Gründe sind sowohl algorithmischer als auch softwaretechnischer Natur: der Kern des Solvers kombiniert ein iteratives Newton-Raphson-Verfahren mit nichtkonstanten Termen mit einem Simplex-Algorithmus für den algebraischen Teil, und die Funktionen haben sehr kurze individuelle Laufzeiten, werden aber in schneller Folge aufgerufen - ein Muster, das eine FPGA-Portierung nur mit unrealistisch großem Aufwand sinnvoll machen würde. Weitere alternative Geochemielöser wurden vom GFZ evaluiert, wie beispielsweise Orchestra [6] und Reaktoro [7]. Diese Umstellung, und vor allem die dafür benötigte Einarbeitungszeit und die Anpassung der Datengrundlage wurden allerdings für unrealistisch in der Projektlaufzeit eingeschätzt.

Stattdessen wurde das Transportmodul **TUG** (*Transport on Uniform Grids*) als Auslagerungskandidat identifiziert, das ein 2D-ADI-Schema (*Alternating Direction Implicit*) zur Lösung der Diffusionsgleichung implementiert. Dieses Schema besitzt mehrere Eigenschaften, die es für ein FPGA-Offloading eignen: zum einen ist es parallelisierbar, basierend auf der Lösung vieler tridiagonaler Gleichungssysteme, für die der hocheffiziente Thomas-Algorithmus einsetzbar ist; weiterhin ist die Operationsstruktur regelmäßig und vorhersagbar - ganz im Gegensatz zu dem iterativen Newton-Verfahren, das für die Lösung eines geochemischen Problems zugrunde liegt. Zudem ließ sich zeigen, dass TUG keinen messbaren Genauigkeitsverlust aufweist, wenn man von doppelter auf einfache Rechengenauigkeit wechselt, was für FPGA-Implementierungen ein entscheidender Vorteil ist.

Das GFZ erstellte einen eigenen TUG-Benchmarkkatalog (Tabelle 2 und Abbildungen 1), der von den ursprünglichen POET-Benchmarks abgeleitet wurde und ebenso auf GitLab dokumentiert ist.[1] Hierbei wurden Benchmarks mit anisotropischen und räumlich heterogenen Diffusionskoeffizienten und komplexere Randbedingungen im Vergleich zu den gekoppelten POET-Simulationen. Meilenstein **M4.2** (Profiling und Identifikation des Auslagerungskandidaten) wurde damit Anfang 2024 vollständig erreicht.

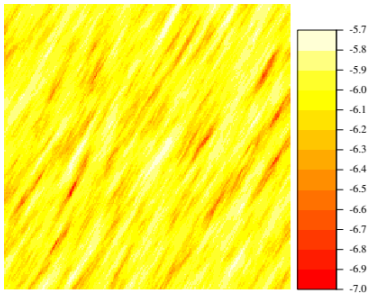
Offloading und Validierung

Die technische Umsetzung der Auslagerung - die Vorbereitung von TUG für die High-Level-Synthese (HLS), die Integration der Middleware aus AP2 und die FPGA-Portierung - wurde von UP, ZIB und HHI durchgeführt; das GFZ validierte die Ergebnisse und stellte die Benchmark-Referenzläufe bereit.

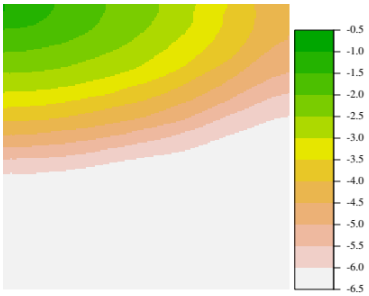
[1] https://git.gfz-potsdam.de/naaice/naaice_tug_input

Benchmark	Gittergröße	Zeitschritt	# Iter.	α	# Mobilen	Init
barite_200	200×200	1000 s	50	heter., aniso.	7	homog.
barite_large	1000×1000	1000 s	50	homog., 1E-6	7	heter.
surfex	200×100	3600 s	20	homog. 1.1E-12	21	homog.
dolo_inter	200×400	200 s	50	homog. 1.E-5	8	homog.
dolo_inter_200	200×200	200 s	50	homog. 1.E-5	8	homog.

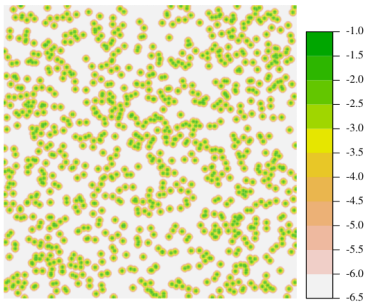
Tabelle 2 Benchmarkkatalog für die TUG-spezifische Anwendung.



(a) Räumlich heterogener Diffusionskoeffizient ($\log_{10}$) im TUG-Benchmark `barite_200`



(b) $\log_{10}$Ba-Konzentration nach 50 Iterationen (TUG-Benchmark `barite_200`)



(c) $\log_{10}$Ba-Diffusion aus zufällig verteilten *seeds* (TUG-Benchmark `barite_large`)

Abbildung 1: NAA-TUG-Benchmarks: Zwei Benchmarks für das Offloading der Transportkomponente TUG. Die räumliche Heterogenität des Diffusionskoeffizienten und die komplexen Konzentrationsmuster illustrieren die Realitätsnähe der Benchmarks.

Im Rahmen der Optimierung der CPU-seitigen Baseline hat GFZ durch sorgfältige Analyse der Ergebnisse festgestellt, dass die TUG-Komponente keinen Genauigkeitsverlust aufweist, wenn die einfache *floating point* Darstellung genutzt wird anstatt *double*. Weiterhin erbrachte die Entfernung der `Eigen`-Bibliothek zugunsten eigener Datenstrukturen für den Benchmark `barite_large` eine zusätzliche erhebliche Laufzeitreduktion. Insgesamt erzielten beide Verbesserungen eine Beschleunigung von ca. 46 % in Rechenzeit und eine Energieeinsparung von ca. 50 % im Vergleich zu der Referenz - ein Ergebnis, das für sich bereits ein bedeutsamer Beitrag zur Effizienzverbesserung ist, noch vor jeglichem FPGA-Einsatz.

Kontinuierliche Weiterentwicklung von POET

Neben den projektspezifischen Arbeiten wurden POET und seine Komponenten über die gesamte Projektlaufzeit kontinuierlich weiterentwickelt, immer in sehr enger Kooperation zwischen Universität Potsdam und GFZ.

Besonders erwähnenswert ist eine neue PHREEQC-Schnittstelle, die nach der Initialisierung direkt auf Speicherdatenstrukturen operiert und somit den overhead der textbasierten API der `PHREEQC-RM` Anbindungspakets vermeidet. Diese Schnittstelle wurde `litephreeqc` genannt, und bietet sowohl eine günstigere API für die Initialisierung der geochemischen Simulationen als auch ein tabellarisches Serialisierungsformat aller Input- und Outputdaten aus dem geochemischen Löser, welche die Kopplung zu weiteren Transportsimulatoren deutlich vereinfacht (Abbildung 2). `litephreeqc` wurde anschließend auch im BMWK-Projekt “THC Prognos” (FKZ: 03EE4056A) für die Kopplung mit dem Finite-

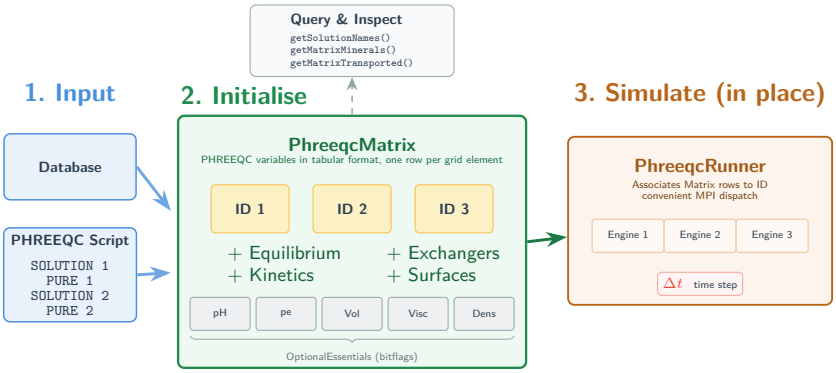


Abbildung 2: Schematische Darstellung der `litephreeqc` API, und insbesondere des `PhreeqcMatrix`-Serialisierungsformats zum Austausch mit Transportsimulatoren.

Elemente-Simulator GOLEM übernommen [8], was die Breitenwirkung der NAAICE-Entwicklungsarbeit unterstreicht.

Das R-Paket `PoetUtils`[2] wurde am GFZ entwickelt, um Datenauswertung der POET Simulationen in der R Umgebung zu ermöglichen. Das Paket unterstützt verschiedene Datenausgabeformate von POET, vom R-spezifischen komprimierten binären Format `qs` und `qs2`, die Konversion zu VTK-Ausgabeformaten für die Visualisierung mit ParaView, und die Konversion zu und von HDF5-Format mit der inzwischen definierten POET-angepassten Datenhierarchie, welches zum Datenaustausch zwischen POET und Python insbesondere für die KI-Läufe dient. `PoetUtils` hat Datenauswertung und -prozessierung, Visualisierung bis hin zur Analyse der KI-Ergebnisse aus der R Software-Umgebung ermöglicht.

Die TUG-Komponente wurde im letzten Projektjahr um neue Transportschemata (Advektion-Diffusion in zylindrischen Koordinaten und Erweiterung auf 3D in kartesischen Koordinaten) im Rahmen des Praktikums von Linus Kittan (University of Idaho, USA) und ihre API verbessert.

POET selbst hat von der gemeinsamen Arbeit von Universität Potsdam und GFZ in NAAICE und im Rahmen verschiedener Masterarbeiten und Studentenprojekte enorm profitiert. Die einzelnen erzielten Erweiterungen bezüglich der technischen Anbindung der unterschiedlichen KI-Komponenten sind in Kapitel 2.3 aufgelistet. Die zahlreichen Verbesserungen und Bugfixes sowie die Erweiterung der Dokumentation und des Benchmarkkatalogs positionieren POET als vorreitendes Framework für die KI-gestützte Beschleunigung reaktiver Transportsimulationen, mit internationaler Resonanz und direkter Anbindung in weiteren Projekten, darunter im HERMES Arbeitspaket des EURAD II EU-finanzierten Verbundprojektes.

Darüber hinaus hat das GFZ die Plattform für kollaborative Zusammenarbeit `gitlab` zur Verfügung gestellt und gepflegt. In der git-Gruppe `naaice` wurden mehrere einzelne Repositories beheimatet, sowohl für interne Projektzwecke, als auch für die weitere Dissemination der entstandenen open source Softwarekomponenten. Eine Übersicht ist in Tabelle 3 gegeben.

2.3 Arbeitspaket 5: Beschleunigung von KI-Workloads über NAAs

Das Arbeitspaket 5 begann planmäßig im Projektmonat 16 (Dezember 2023). Die Grundidee besteht darin, die teuren PHREEQC-Berechnungen durch neuronale Netze zu ersetzen, sobald diese hinrei-

[2] https:git.gfz.de/naaice/PoetUtils

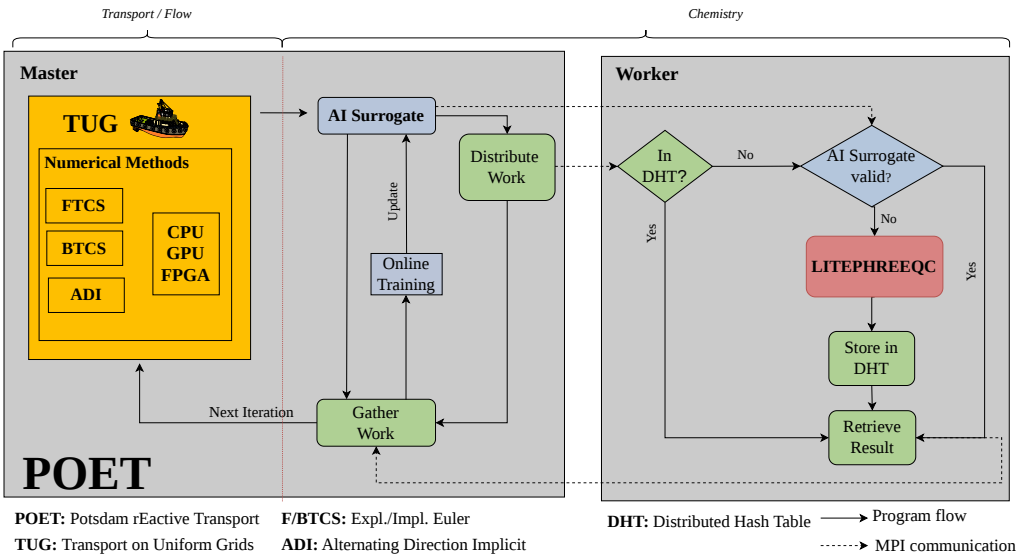


Abbildung 3: Schematische Darstellung der POET Anwendung beim Projektende. Die Highlights sind das *online training*-Komponente für die KI-Ersatzmodelle, die Anbindung zu PHREEQC durch den eigenen Wrapper `litephreeqc` und die verschiedene numerische Methoden implementiert in der TUG Bibliothek TUG, die von Auslagerung auf GPU und FPGA profitiert.

URL	Beschreibung	Offen
poet	POET Anwendung	Ja
litephreeqc	UP-GFZ PHREEQC Wrapper	Ja
naa-communication-prototype	Prototyp-Middleware zu NAAs	Ja
cuda-training	CUDA-beschleunigt Ersatzmodelle	Ja
tug-offloading	TUG-Anwendung für FPGA	Ja
poet-dummy	Dummy naa_server für Testing	Ja
NAAICE_Tug_Input	TUG Benchmarkkatalog	Ja
ai-benchmarks-utils	Benchmarkkatalog für POET KI-Ersatzmodelle	Ja
ai-surrogate-poet	Serialisierungskomponente für KI-Gewichte, Daten, und Metadaten für FPGA-Offloading von POET	Ja
PoetUtils	R-Paket für Datenauswertung und Visualisierung	Nein

Tabelle 3 Liste der git-Repositories aus Projekt NAAICE - mit Präfix `git.gfz.de/naaice/` versehen.

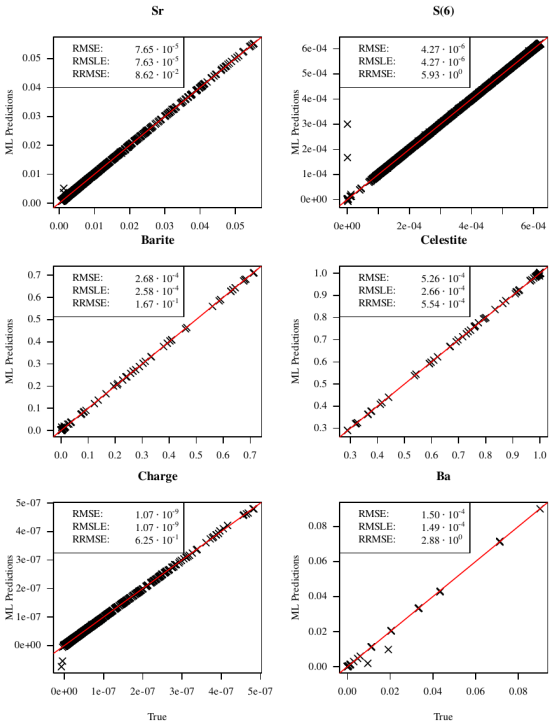
chend genaue Vorhersagen liefern - und die Netze während der Simulation inkrementell nachzutrainieren, wenn neue Datenpunkte außerhalb des bereits abgedeckten Parameterraums auftreten. Das Training dieser Netze soll seinerseits auf NAAs ausgelagert werden.

Die Grundlage bildeten Vorarbeiten des GFZ aus dem Projekt T[6] sowie die Masterarbeit von Robert Engelmann (UP, 2019). Als Referenz-Backend für Training und Inferenz wurden die verbreiteten Bibliotheken `keras` und `TensorFlow` gewählt.

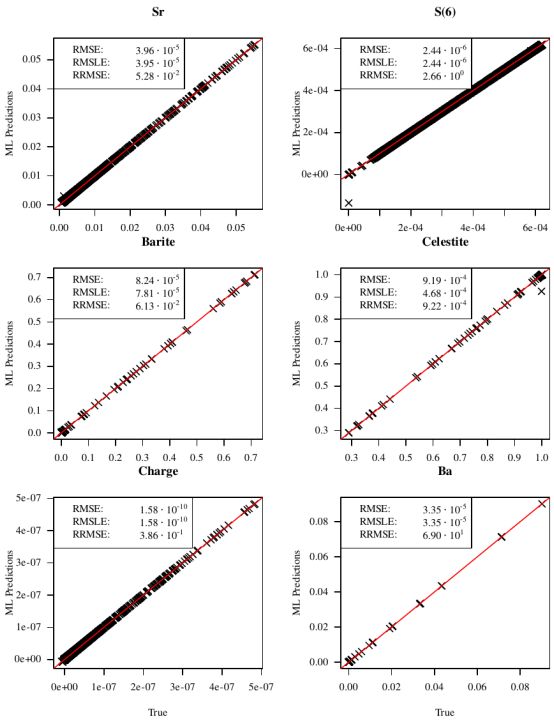
Systematische Untersuchung der Netztopologien

Das GFZ untersuchte systematisch verschiedene Aspekte der Modellentwicklung für die Benchmarks `barite` und `dolo`: Pre-Processing (Min-Max-Normalisierung, Standardisierung, logarithmische Skalierung der einzelnen Variablen), Aktivierungsfunktionen (ReLU, Leaky ReLU, tanh), Verlustfunktionen, One-Hot-Encoding für Minerale sowie die Regression der POET-Outputs gegenüber den Änderungsraten. Zwei Netztopologien wurden besonders verfolgt: ein *kleines* Netz mit zwei *hidden layers* (128 Neuronen, 18 953 Parameter) und ein *großes* Netz (Lagen 512, 1024, 512; 802 313 Parameter), das mit größerem *Batch-Size* eine messbare GPU-Auslastung erzeugt. Die Datensätze enthielten rund 130 000 Punkte (9 Eingangs- und Ausgangsvariablen), generiert aus den ersten Iterationen einer POET-Simulation.

Wie Abbildung 4 zeigt, ist der Unterschied zwischen kleiner und großer Topologie hinsichtlich der Validierungsgenauigkeit für den Testszenario `barite_200` gering. Es ist hierbei auch zu beachten, dass die Anwesenheit von wenigen Ausreißer nicht problematisch ist, weil die POET-Architektur von Anfang an ein Plausibilitätscheck der multivariaten KI-Vorhersagen hinsichtlich Massenerhaltung zwischen Inputs und Outputs auf Laufzeit vorsieht; die festgestellte Ausreißer werden mit dem Plausibilitätskriterium gefangen.



(a) Kleines Netz (18 953 Parameter, Lagen: 128/128)



(b) Großes Netz (802 313 Parameter, Lagen: 512/1024/512)

Abbildung 4: Validierung der optimalen KI-Netztopologien für den Benchmark `barite_200`. Die Genauigkeit des großen Netzes ist nur marginal besser als die des kleinen - ein wichtiges Ergebnis für die Wahl der Topologie, da das kleine Netz deutlich schneller zu trainieren ist.

Einmal allerdings in gekoppelten POET-Simulationen eingebaut, zeigte sich eine fundamentale Schwierigkeit, die über den Rahmen von NAAICE hinaus von Bedeutung ist: die Netze, die als "hinreichend genau" beim offline-Training erschienen, haben sich in vollständig gekoppelten Simulationen häufig als unzureichend erwiesen. Fehler in der KI-Vorhersage akkumulieren sich über viele Zeitschrit-

te, und die Massenbilanzfehler, welche als Kriterium für die Akzeptanz der KI-Vorhersage ausgewählt wurden, überschreiten die akzeptablen Grenzen. Nur ein Bruchteil der KI-Vorhersagen - anfangs weit unter 50 % - bestand die Massenbilanzprüfung und konnte somit tatsächlich die PHREEQC-Berechnung ersetzen.

Um dieses Problem anzugehen, wurden mit großer Unterstützung von UP verschiedene Strategien untersucht: Datenstratifizierung basierend auf der An- oder Abwesenheit von Mineralen (Baryt und Celestit im `barite`-Benchmark), ein Schwellenwert über die Cl-Konzentration als Signal für die Ankunft der reaktiven Lösung, Feature Engineering (z.B. Ba$\times$S, Sr$\times$S als zusammengesetzte Merkmale), Überabtastung seltener Konfigurationen sowie die Einbettung von Massenerhaltungsbedingungen in die Verlustfunktion (angelehnt an Physics-Informed Neural Networks, PINNs). Am Ende des Projekts konnte die Akzeptanzrate auf ca. 50 % gesteigert werden, was eine nennenswerte Verbesserung darstellt, aber trotzdem **keine Beschleunigung der Simulationen** entspricht. Zudem pflanzten sich die geringen Ungenauigkeiten der KI-Vorhersagen während der gekoppelten Simulationen fort, was zu erheblichen Konvergenzfehlern in späteren Iterationen führte, so dass keine KI-unterstützte Simulation das vorgesehenen Ende erreichen konnte. Insgesamt ließ sich kein KI-Ersatzmodell identifizieren, dessen Vorhersagequalität ausreichte, um im laufenden Betrieb tatsächlich Laufzeit- und Energieeinsparungen zu erzielen: Der durch ungenaue Vorhersagen verursachte Mehraufwand für das Retraining überstieg den potenziellen Laufzeitgewinn durch zutreffende Vorhersagen deutlich.

Ein wichtiger Befund aus einer parallelen Literaturstudie [9] - einem 2025 veröffentlichten Benchmarkvergleich verschiedener ML-Methoden für geochemische Surrogate - bestätigt die Schwierigkeit: selbst unter idealisierten Bedingungen (gleichmäßige Latin-Hypercube-Beprobung des Parameterraums) liefern neuronale Netze für geochemische Systeme noch nicht in allen Fällen die erforderliche Präzision. Der GFZ-eigene DecTree-Ansatz [10, 11] - eine Kombination aus rekursiver Partitionierung und Multilevel-B-Spline-Interpolation - schnitt besser ab als neuronale Netze und Gaußsche Prozesse. **Für den Einsatz von Neuronalen Netzen in komplexen reaktiven Transportsimulationen verbleiben weitere offene Forschungsfragen, die in weiteren Projekten adressiert werden müssen.**

Integration in POET

Die technische Integration in POET wurde hauptsächlich von UP durchgeführt, auch im Rahmen verschiedener vom GFZ mitbetreuten Abschlussarbeiten und studentischen Projekten ([12], [13]). Die `keras`/`TensorFlow`-Anbindung über die C-Python-Schnittstelle erwies sich dabei als die energieeffizienteste Lösung für das offline-Training und für die Inferenz unter den getesteten Frameworks. Das inkrementelle Training der Netze während einer gekoppelten Simulation wurde in POET eingebaut, und die NAA-Middleware für das FPGA-Offloading wurde von UP ebenso in POET integriert. Zusätzlich setzte die UP eine CUDA-basierte, optimierte Variante des KI-Trainings um. Somit, ergänzend zum `keras`-basierten Training, wurde eine weitere GPU-Referenz für den Vergleich mit dem FPGA-Training geschaffen. **Meilenstein M5.2** (GPU-Referenzimplementierung) wurde damit planmässig erreicht.

NAA-basiertes Training

Aufgrund der festgestellten Ungenauigkeit aller getesteten Netze, wurde im weiteren Projektverlauf ausschließlich das initiale Vortrainieren der KI-Ersatzmodelle betrachtet. Hierfür entwickelte die UP einen POET-Dummy, der dem HHI die Entwicklung des FPGA-Designs erleichterte, indem externe Abhängigkeiten entfielen und lediglich das Nachtrainieren emuliert wurde.

Das HHI führte die Messungen der GPU-Varianten auf einer Nvidia-V100-Karte durch, wobei 100 Epochen bei einer Batchgröße von 512 zugrunde gelegt wurden; die Messungen für den FPGA erfolgten hingegen auf einem Bittware IA 840f. Dabei zeigte sich, dass die FPGA-Variante der `keras`-Implementierung sowohl in Bezug auf die Laufzeit als auch auf den Energieverbrauch überlegen war. Der Vergleich zwischen dem FPGA und der selbst entwickelten, optimierten CUDA-Implementierung ergab, dass das Training auf der CUDA-Version zwar eine höhere Geschwindigkeit erreicht, der FPGA insgesamt jedoch einen geringeren Energieverbrauch aufweist. Diese Ergebnisse wurden auch in einer Veröffentlichung erfasst [14].

Diese Erkenntnisse und technische Entwicklungen sind auf einer Seite vielversprechend für die geowissenschaftliche Community, insofern Teile der rechenintensiven Simulationen optimierbar sind; auf der anderen Seite, bleibt der Forschungsbedarf, um die optimale Anwendung von neuronalen Netzen als Ersatzmodell für Geochemie zu identifizieren.

2.4 Arbeitspaket 6: Profiling und Monitoring der Energieeffizienz

Die GFZ-Beteiligung an AP6 beschränkte sich plangemäß auf 3 Personenmonate, konzentriert in der zweiten Projekthälfte. Die Hauptaufgabe des GFZ bestand darin, die von PERFACCT entwickelten Werkzeuge **EVL** (*Experiment Validation Layer*) und **RTV** (*Reference-Target-Validator*) in den GFZ-Simulationsworkflow zu integrieren, damit POET-Simulationen mit verschiedenen Parametrisierungen (Anzahl der CPU-Kerne, Einsatz von KI-Modellen, DHT-Lookup, ...) automatisiert aufgesetzt und gegen Referenzergebnisse validiert werden können.

Das GFZ schlug spezifische Validierungsmetriken vor, die für geochemische Ausgabegrößen geeignet sind (u.a., relative RMSE für Konzentrationen, die eine Verteilung auf logarithmischer Skala aufweisen), die PERFACCT anschließend in EVL integrierte. Außerdem wurde das binäre, komprimierte POET-Ausgabeformat in das Validierungsframework eingebunden. Zur Anbindung an das RTV-Framework, das Python-basiert arbeitet, entwickelte das GFZ Pipelines zu Formatkonversion und entsprechende Beispielkonfigurationen.

3 Zusammenfassung und Verwertungsplan

Die im Antrag definierten Hauptziele konnten im NAAICE-Projekt erfolgreich realisiert werden: Netzwerkgebundene Beschleuniger (NAAs) in Form von FPGAs wurden vollständig in das HPC-Rechenzentrum integriert. Dabei wird die gesamte Kette abgedeckt: von der Hardware-Integration über die Middleware-Entwicklung bis hin zur praxisnahen Anwendungsoptimierung, wo die Anwendung sowohl klassische Numerik als auch Methoden der künstlichen Intelligenz vorsieht. Das Potenzial zur Energie- und Laufzeiteinsparung konnte praktisch belegt und aufgezeigt werden, wie sich der Energieverbrauch in modernen Rechenzentren reduzieren lässt.

Das GFZ-Teilvorhaben im Rahmen von NAAICE hat drei Jahre intensiver Kooperation mit den Verbundpartnern geprägt und dabei sowohl originäre geowissenschaftliche Beiträge geleistet als auch wesentliche technische Grundlagen für die Nutzung von NAAs in einer realen HPC-Anwendung geschaffen. Die von GFZ erreichten Hauptziele umfassen:

- Erfassung eines Benchmarkkatalogs für gekoppelte reaktive Transportsimulationen und für eigenständige Diffusionssimulationen;

- Erweiterung und Optimierung des gekoppelten reaktiven Simulators POET: die TUG-Komponente wurde ausgelagert und das inkrementelle, nebenläufige Nachtrainieren von KI-Ersatzmodellen ermöglicht;

Die wichtigsten Erkenntnisse lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

Zur FPGA-Portierung (AP4): PHREEQC als prototypischer Geochemielöser und offensichtlichster Kandidat für eine Auslagerung auf FPGA ist strukturell für Portierung ungeeignet - ein Befund, der sorgfältige Analyse erforderte und der das Konsortium zwang, einen anderen Weg zu gehen. Das Transportmodul TUG erwies sich als tragfähige Alternative, und die im Rahmen der Vorbereitung der Auslagerung durchgeführten Optimierungen erbrachten bereits auf der CPU eine Energieeinsparung von ca. 50 %, noch vor dem FPGA-Einsatz. Jedenfalls, im Hinblick auf die Qualität und Einsetzbarkeit der High-Level-Synthese (HLS), mit der FPGAs in Hochsprachen wie C++ auch ohne spezialisiertes Hardware-Know-how programmiert werden sollen, ist derzeit für eine breitere Adoption für Domänenwissenschaftler nicht einsehbar.

Zu KI-Ersatzmodellen (AP5): Die Verwendung neuronaler Netze als Ersatzmodell für geochemische Berechnungen in gekoppelten Simulationen stellt sich als erheblich schwieriger heraus als es die Vorarbeiten und die Genauigkeiten beim Vortrainieren nahelegten. Die Anforderungen an die Massenbilanzerhaltung sind streng, weil sich Fehler in der sequentiellen Kopplung Transport-Chemie fortpflanzen. Eine Akzeptanzrate von ca. 50 % am Projektende ist ein realistisches und ehrliches Ergebnis, das den Stand der Technik korrekt widerspiegelt und wichtige Impulse für die Weiterentwicklung gibt - insbesondere in Richtung physikalisch informierter Netze und besserer Strategien zur Datenbeprobung und -augmentation.

Ein Überblick über die gesamten Meilensteine und ihren Erfolg ist in der folgenden Tabelle dargestellt:

MS	Verantw.	Beschreibung	Status
M4.1	GFZ	Benchmarkkatalog	Erreicht (mit Revision)
M4.2	GFZ, PERF	Profiling, Auslagerungskandidat identifiziert	Erreicht (2024)
M4.4	GFZ, PERF	NAA-POET-Validierung (TUG)	Erreicht (2025)
M5.1	GFZ	Optimale KI-Workloads	Erreicht (mit Revision), **unbefriedigend**

3.1 Verwertung

POET hat sich als vollwertige Forschungsplattform etabliert, die inzwischen von Studierenden und Kooperationspartnern aus verschiedenen Ländern genutzt wird. Durch zahlreiche Vorträge bei internationalen Fachkonferenzen und wichtigen Workshops wurden die NAAICE-Entwicklungen und Erkenntnisse in der Geowissenschaftsgemeinschaft präsentiert, was zu anschließenden Kooperationen und Austausch geführt haben.

Anschlussfähigkeit: GFZ ist an dem HERMES Arbeitspaket im Rahmen des EURAD II europäischen Verbundprojekts mitbeteiligt. Dieses internationale Projekt befasst sich mit Ersatzmodellen in reaktiven Transportsimulationen spezifisch für Fragestellungen der Sicherheitsbewertung von nuklearer Endlagerung - GFZ bringt Erkenntnisse und Benchmarks aus NAAICE und promoviert den Einsatz von POET an einem breiteren Publikum.

Insbesondere der `litephreeqc`-Wrapper hat schon während der Projektlaufzeit Verwendung in einem weiteren Simulator im Rahmen des BMWK-Projektes "THC Prognos" (FKZ: 03EE4056A) gefunden. Somit erzielt das GFZ, immer in Kooperation mit UP, langfristigere Kapazitäten für die Weiterentwicklung und Wartung dieser Software. Weitere Projektanträge basierend auf den Vorarbeiten und die erzielten Entwicklungen und Softwarekomponenten aus NAAICE sind zur Zeit der Erfassung dieses Berichtes in Bearbeitung, beispielsweise durch eine gemeinsame Skizze mit UP beim PTKA im Rahmen des Förderungsprogramm des Bundes zur nuklearen Endlagerung.

Alle in NAAICE entwickelten Softwarekomponenten sind grundsätzlich unter open source-Lizenzen veröffentlicht. Die Verbreitung erfolgt durch die git-repositories auf den GFZ gitlab-Instanzen (cfr. Tabelle 3) und in Einzelfällen durch Archivierung auf Plattformen wie Zenodo, beispielsweise [15].

Aus Sicht des GFZ sind planmäßig keine schutzrechtliche oder wirtschaftliche Verwertungsmöglichkeiten entstanden.

3.2 Publikationen, Vorträge und weitere Verbreitung

Im Folgenden sind die wissenschaftlichen Ausgaben des GFZ-Teilvorhabens aufgeführt, die Ergebnisse aus NAAICE kommuniziert haben.

Fachvorträge und Poster

1. De Lucia, Kühn, Lübke, Schnor: *Combining Machine Learning and Equation Based Models in Reactive Transport: POET*, **Vortrag**, Goldschmidt Conference 2023, Lyon, Frankreich, 9.–14. Juli 2023

2. De Lucia, Kühn, Lübke, Schnor: *Combining Approximated Computing and Hardware Accelerators in Coupled Reactive Transport Simulations: POET*, **eingeladener Vortrag**, EURAD ACED/DONUT Final Workshop, Mechelen, Belgien, 8.–10. November 2023

3. De Lucia, Lübke, Schnor: *2D Simulations of Uranium Diffusion in Clay: Geochemical Surrogate Models and Accelerated Coupled Reactive Transport Simulations with POET*, **Vortrag**, EGU General Assembly 2024, Wien, Österreich, 14.–19. April 2024

4. De Lucia, Lübke, Straile, Signer, Schnor: *Machine Learning and Interpolation from Distributed Hash Tables: POET*, **eingeladener Vortrag**, International Reactive Transport Workshop, Fontainebleau, Frankreich, 23.–25. Oktober 2024

5. De Lucia, Lübke, Straile, Fabbri, Hennig, Schnor: *Large-scale reactive transport simulations of uranium migration in Opalinus Clay accelerated by means of surrogate models*, **Poster**, Clay Conference 2024, Hannover, 24.–29. November 2024

6. De Lucia, Fabbri, Hennig, Kühn: *Effect of spatial variability on uranium diffusion in the three facies of the Opalinus Clay at Mont Terri*, **Poster**, EGU General Assembly 2025, Wien, Österreich, April 2025

7. De Lucia, Lübke, Schnor: *Accelerating Parallel Reactive Transport Simulations by Interpolation from Automatically Clustered Distributed Hash Tables*, **Vortrag**, Goldschmidt Conference 2025, Prag, Tschechien, Juli 2025

Begutachtete Zeitschriftenartikel und Konferenzbeiträge

1. [5]: De Lucia, Fabbri, Hennig: *Effect of spatial variability on uranium dif- fusion in the three facies of the Opalinus Clay at Mont Terri*. Advances in Geosciences 67, 2025.

2. [16]: Christgau, Everingham, De Lucia, Lübke, Puhan, Schelten, Schnor, Signer, Spazier, Stabernack, Steinert und Yahdzhyiev : *On the Usability and Energy Efficiency of High-Level Synthesis for FPGA-based Network-Attached Accelerators*, 34th Heterogeneity in Computing Workshop (HCW), IPDPS 2025, Mailand, 2025.

3. [14] Schelten, Christgau, Hutzler, Kreowsky, De Lucia, Schnor, Signer, Spazier, Stabernack und Yahdzhyiev: *Using FPGA-based Network-Attached Accelerators for Energy- Efficient AI Training in HPC Datacenters*. New Orleans, USA, 33rd Reconfigurable Architectures Workshop (RAW), IPDPS 2026.

Begleitende Qualifizierungsarbeiten

- [12]: Hans Straile (Masterarbeit, UP, 2024): *Efficiency of Neural Network based Surrogate Models for POET*. Hauptimplementierung der KI-Anbindung in POET, mit Betreuung von GFZ.

- Dr.-Ing. Marco Fabbri (Universität Bologna, Erasmus+-Austausch am GFZ, Sept. 2024 – März 2025; Masterarbeit verteidigt 24.3.2025): *Effect of spatial variability on uranium diffusion in the three facies of the Opalinus Clay at Mont Terri*. Die Arbeit stützte sich auf umfangreiche POET-Simulationen (ca. 500 Läufe auf dem GFZ-Cluster), was die Leistungsfähigkeit der entwickelten Anwendung eindrücklich unter Beweis stellte, und diente als Basis für den Zeitschriftenartikel [5].

Literaturverzeichnis

[1] M. Lübke, M. De Lucia, A. Lindemann, H. Signer, B. Schnor und H. Straile. „POET: POtsdam rEactive Transport“. Version 0.4. 2025. doi: 10.5281/zenodo.17433418.

[2] M. De Lucia, M. Kühn, A. Lindemann, M. Lübke und B. Schnor. „POET (v0.1): Speedup of Many-Cores Parallel Reactive Transport Simulations with Fast DHT-Lookups“. *Geoscientific Model Development* 14.12 (2021), S. 7391–7409. doi: 10.5194/gmd-14-7391-2021.

[3] D. L. Parkhurst und C. Appelo. „Description of input and examples for PHREEQC version 3: A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations“. 2013. doi: 10.3133/tm6a43.

[4] T. Hennig und M. Kühn. „Surrogate Model for Multi-Component Diffusion of Uranium through Opalinus Clay on the Host Rock Scale“. *Applied Sciences* 11.2 (2021), S. 786. doi: 10.3390/app11020786.

[5] M. De Lucia, M. Fabbri und T. Hennig. „Effect of spatial variability on uranium diffusion in the three facies of the Opalinus Clay at Mont Terri“. *Advances in Geosciences* 67 (2025), S. 35–44. doi: 10.5194/adgeo-67-35-2025.

[6] J. C. L. Meeussen. „ORCHESTRA: An Object-Oriented Framework for Implementing Chemical Equilibrium Models“. *Environmental Science & Technology* 37.6 (2003), S. 1175–1182. doi: 10.1021/es025597s.

[7] A. M. M. Leal. „Reaktoro: An open-source unified framework for modeling chemically reactive systems. https://reaktoro.org“. 2015.

[8] M. De Lucia, S. Frigo, M. Lübke, M. Cacace, E. Petrova, H. Hofmann, M. Scheck-Wenderoth und G. Blöcher. „Towards fully coupled Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) modelling in advanced reservoir engineering: GOLEM-PHREEQC“. *Advances in Geosciences* 67 (5.2026), S. 117–127. doi: 10.5194/adgeo-67-117-2026.

[9] N. I. Prasianakis, E. Laloy, D. Jacques, J. C. L. Meeussen, G. D. Miron, D. A. Kulik, A. Idiart, E. Demirer, E. Coene, B. Cochepin, M. Leconte, M. E. Savino, J. Samper-Pilar, M. De Lucia, S. V. Churakov, O. Kolditz, C. Yang, J. Samper und F. Claret. „Geochemistry and machine learning: methods and benchmarking“. *Environmental Earth Sciences* 84.5 (18.2025). Number: 5, S. 1–33. doi: 10.1007/s12665-024-12066-3.

[10] M. De Lucia und M. Kühn. „DecTree v1.0 – chemistry speedup in reactive transport simulations: purely data-driven and physics-based surrogates“. *Geoscientific Model Development* 14.7 (29.2021), S. 4713–4730. doi: 10.5194/gmd-14-4713-2021.

[11] M. De Lucia. „DecTree: a physics-based geochemical surrogate for surface complexation of uranium on clay“. *Advances in Geosciences* 65 (2024), S. 45–54. doi: 10.5194/adgeo-65-45-2024.

[12] H. Straile. „Efficiency of Neural Network based Surrogate Models for POET“. Masterarbeit. University of Potsdam, 2024.

[13] M. Hutzler. „GPU vs. CPU Inferenz“. Projektarbeit. 2024.

[14] N. Schelten, S. Christgau, A. Schulte, B. Schnor, H. Signer und B. Stabernack. „Using FPGA-based Network-Attached Accelerators for Energy-Efficient AI Training in HPC Datacenters “. *33rd Reconfigurable Architectures Workshop (RAW), IPDPS 2026*. New Orleans, USA, 2026. (Under Review).

[15] S. Christgau, E. Dylan, F. Mikolajczak, N. Schelten, H. Signer und F. Steinert. „NAAICE Communication Libraries“. Version v0.2. 2026. doi: 10.5281/zenodo.18713976.

[16] S. Christgau, D. Everingham, M. De Lucia, M. L übke, D. Puhan, N. Schelten, B. Schnor, H. Signer, J. Spazier, B. Stabernack, F. Steinert und S. Yahdzhyiev. „On the Usability and Energy Efficiency of High-Level Synthesis for FPGA-based Network-Attached Accelerators“. *34th Heterogeneity in Computing Workshop (HCW), held in conjunction with IPDPS*. Milano, Italy, 2025. doi: 10.1109/IPDPSW66978.2025.00139.