GEFÖRDERT VOM

Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

TWT

Schlussbericht

für das Verbundvorhaben

REGALE

Offene Architektur für die nächste Generation von Exascale-fähigen HPC-Anwendungen im zukünftigen Supercomputing

Zuwendungsempfänger	TWT GmbH Science & Innovation
Förderkennzeichen	16HPC041

Laufzeit des Projektes	01.04.2021 – 31.03.2024
Berichtszeitraum	01.04.2021 – 31.03.2024
Datum	30.08.2024
Version	1
Status	final

Vorgelegt beim Projektträger	VDI/VDE Innovation + Technik GmbH Nadine Kabbeck Steinplatz 1 10623 Berlin

Vorgelegt durch	TWT GmbH Science & Innovation Philippe Mauri Industriestrasse 6 70565 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

I. Voraussetzungen & Planung des Vorhabens 4
A. Aufgabenstellung 4
B. Voraussetzungen des Vorhabens 5
C. Planung und Ablauf des Vorhabens 6
D. Wissenschaftlicher und technischer Stand zum Vorhabenbeginn 8
1. Im Bereich Energie Effizienz von HPC 8
2. Im Bereich mechanische Simulationen für Materialuntersuchungen 9
E. Zusammenarbeit mit anderen Stellen 12
II. Ergebnisse des Vorhabens 13
A. Ergebnisse 13
1. Use Case Beschreibung 13
2. Die MSolve Software - Hauptmerkmale und Anpassungen 14
3. Durchgeführte Arbeiten 17
a) MSolve-Melissa-Kupplung 17
4. Ergebnisse der Analysen 18
5. Stochastische Optimierungsanalyse mit Melissa 19
6. Zusammenfassung 21
B. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit 21
C. Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse 22
1. Wirtschaftliche Erfolgsaussichten 22
2. Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten 22
3. Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit 22
D. Bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens 23
E. Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse 23

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Übersicht der REGALE Arbeitspakete 6
Abbildung 2: Geplanter zeitlicher Ablauf 7
Abbildung 3: REGALE-Arbeitsplan auf einen Blick 7
Abbildung 4: (a) Stoßfänger eines Lastkraftwagens aus Stahl und (b) Stoßfänger eines Sportwagens aus Polymerwerkstoff 14
Abbildung 5: Die Methode CreateModel() der Klasse TruckBumperImpact, die die Erstellung des Finite-Elemente-Modells für die LKW-Stoßfängersimulation verwaltet. 15
Abbildung 6: Die Methode RunTest () der Klasse TruckBumperImpactTest ist die Hauptmethode, die die Aufprallsimulation des Lkw-Stoßfängers auslöst. 15
Abbildung 7: Die Methode SolveModel () der Klasse TruckBumperImpactTest ist die Methode, die die Lösung des nichtlinearen dynamischen Problems übernimmt. 15
Abbildung 8: Die Methode RunTest () der Klasse RegaleSolidShellFinalModelImpact ist die Hauptmethode, die die Aufprallsimulation des vorderen Stoßfängers initiiert. 16
Abbildung 9: Die Methode CreateModel () der Klasse RegaleMersBumperModelSolidShell, die die Erstellung des Finite-Elemente-Modells für die Aufprallsimulation des Stoßfängers übernimmt. 16
Abbildung 10: Die Methode SolveModel () der Klasse RegaleSolidShellFinalModelImpact ist die Methode, die die Lösung des nichtlinearen dynamischen Problems übernimmt. 16
Abbildung 11: Vergleich zwischen MSolve und ANSYS in Bezug auf die maximale Durchbiegung des Stoßfängers für das Modell in Abbildung 4b. 18
Abbildung 12: (a) Ein einzelnes CNT, modelliert als äquivalentes Balkenelement, (b) ein RVE aus CNT-verstärktem Polymer und (c) ein aus dem Verbundwerkstoff hergestellter Auto-Stoßfänger. 18
Abbildung 13: Ergebnisse der Crash-Simulation in Bezug auf die absorbierte Energie und die maximale Durchbiegung des Stoßfängers während des Aufpralls bei steigendem CNT-Gehalt in der Polymermatrix. 19
Abbildung 14: Ergebnisse der Crash-Simulation in Bezug auf die absorbierte Energie und die maximale Durchbiegung des Stoßfängers während des Aufpralls bei steigendem CNT-Gehalt in der Polymermatrix. 20
Abbildung 15: Dissipierte Energie bei steigendem CNT-Anteil im Grundmaterial. 20
Abbildung 16: Absorbierte Energie bei steigendem CNT-Gehalt im Wirtsmaterial (60 % Volumenprozent der plastischen Zone). 21

I. Voraussetzungen & Planung des Vorhabens

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 16HPC041 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

A. Aufgabenstellung

Die Supercomputer der nahen Zukunft werden sich in vielerlei Hinsicht von den heutigen HPC-Systemen (High Performance Computing) unterscheiden. Der Prozess hin zu mehr Rechenleistung erfordert eine Abkehr vom traditionellen Ansatz der "Skalierung durch einfaches Hinzufügen weiterer Bausteine" und muss sich auf Innovationen in allen Bereichen stützen, wobei die drei wichtigsten Herausforderungen zu berücksichtigen sind: Skalierbarkeit der Leistung, Energieeffizienz und Belastbarkeit.

Das REGALE-Projekt ist im April 2021 an den Start gegangen. Es zielt darauf ab, einen Software-Stack zu entwickeln, der nicht nur in der Lage ist, die HPC-Systeme von morgen effizienter zu machen. Er wird auch offen und skalierbar für massive Supercomputer sein. REGALE will den Weg für HPC-Anwendungen der nächsten Generation zu Exascale-Systemen bereiten. Um dies zu erreichen, definiert das Projekt eine offene Architektur, baut ein Prototypsystem auf und integriert in dieses System eine angemessene Verfeinerung, um Supercomputersysteme mit den Mechanismen und Richtlinien für eine effektive Ressourcennutzung und Ausführung komplexer Anwendungen auszustatten.

REGALE bringt führende Supercomputing-Akteure, angesehene Akademiker, europäische Spitzen-Supercomputing-Zentren und Endnutzer aus kritischen Zielsektoren zusammen und deckt die gesamte Wertschöpfungskette bei Systemsoftware und Anwendungen für Technologien im Hochleistungsbereich ab.

Da Exascale-Systeme fast vor unserer Haustür stehen, müssen wir uns jetzt darauf konzentrieren, wie wir das Beste aus diesen großen Investitionen für den gesellschaftlichen Wohlstand und das Wirtschaftswachstum herausholen können.

Die übergreifende Optimierung der oben genannten Kernprozesse stellt aufgrund der Berücksichtigung der bestehenden Abhängigkeiten ein enormes Innovationspotential dar im Vergleich zu der bisherigen Vorgehensweise der separaten bzw. aufeinanderfolgenden Optimierung einzelner Prozesse. Damit leistet das Verbundvorhaben einen relevanten Beitrag zum förderpolitischen Ziel einer leistungsfähigen und effizienten Verwendung der Ressourcen.

Das REGALE Projekt verfolgt 3 strategische Hauptziele:

- Hauptziel 1: Effiziente Nutzung der Ressourcen
- Hauptziel 2: Breite Anwendbarkeit
- Hauptziel 3: Einfache und flexible Nutzung von Supercomputing-Diensten

Die TWT GmbH ist in den Arbeitspakten AP1, AP4, AP5 und AP6 beteiligt und bearbeitete, innerhalb dieser, folgende Zielsetzungen und Aufgabenstellungen:

- Hauptziel von AP1 „Requirements, Architecture and Evaluation“ ist die Definition der REGALE-Architektur. Um diese Definition zu unterstützen, werden Anforderungen von Industriepartnern und Pilotanwendungen gesammelt, um die Bedürfnisse von Endnutzern und Anwendungsentwicklern zu erfassen. Dazu werden auch Anforderungen von Supercomputing-Zentren erfasst, um die Bedürfnisse und Einschränkungen des tatsächlichen Betriebs des REGALE-Systems zu verstehen. Dadurch wird der Ansatz auch mit ersten Leistungsergebnissen optimiert, die Architekturdefinition mit einer ständigen Leistungsbewertung im Verlauf der Projektdurchführung weitergeführt und schließlich am Ende des Projekts projektweite Bewertungsergebnisse vorgelegt.
- Im AP4 „Exascaling the REGALE pilots“ werden durch Piloten die Fähigkeiten der REGALE-Architektur anhand Industrienahen Anwendungsfällen ausgewertet. Im Rahmen des AP4 hat TWT, in Zusammenarbeit mit der NTUA, an Pilot 5 “Design eines Stoßfängers aus kohlenstoffverstärkten Polymeren” beigetragen. Die geleistete Arbeit in Pilot 5 und dessen Ergebnisse werden in Kapitel II detailliert. Das Ziel von WP4 ist es, die nächste Generation von HPC-Anwendungen zu entwickeln.
- Im AP5 „Innovation Management“ werden Themen wie Dissemination der Ergebnisse, Kommunikation und Verwertungsplanung angegangen.
- Die Rolle von AP6 „Project Management“ ist die Planung und Terminierung sowie die Berichtserstattung.

B. Voraussetzungen des Vorhabens

Für das Verbundprojekt und dessen Bearbeitung haben sich 16 Partner zusammengeschlossen, darunter 8 Partner unterschiedlicher Größe aus der Industrie, 7 Partner aus der Wissenschaft sowie 2 Supercomputing-Zentren.

Eine wichtige Voraussetzung für das Verbundvorhaben ist die zielführende Zusammenarbeit zwischen den Partnern, verbunden mit kontinuierlichen Abstimmungen und Austauschterminen. Gleichzeitig ist die unkomplizierte Bereitstellung von Informationen sowie der notwendigen erforderlichen Daten für eine erfolgreiche Bearbeitung des Verbundprojektes unabdingbar.

Zusätzlich sind ein ausreichender Zugriff auf europäische HPC-Einrichtungen sowie das Feedback der HPC-Gemeinschaft und Stakeholders ausschlaggebend für die Durchführung des Projekts.

C. Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Verbundvorhaben REGALE unterteilt sich in 6 verschiedene Arbeitspakete. Die verschiedenen Verbundpartner sind je nach eigenem gesetztem Schwerpunkt unterschiedlich in den Arbeitspakten repräsentiert. Die Bearbeitung der APs erwartet somit eine stetige Abstimmung untereinander. Abbildung 1 zeigt die Organisation innerhalb von REGALE auf.

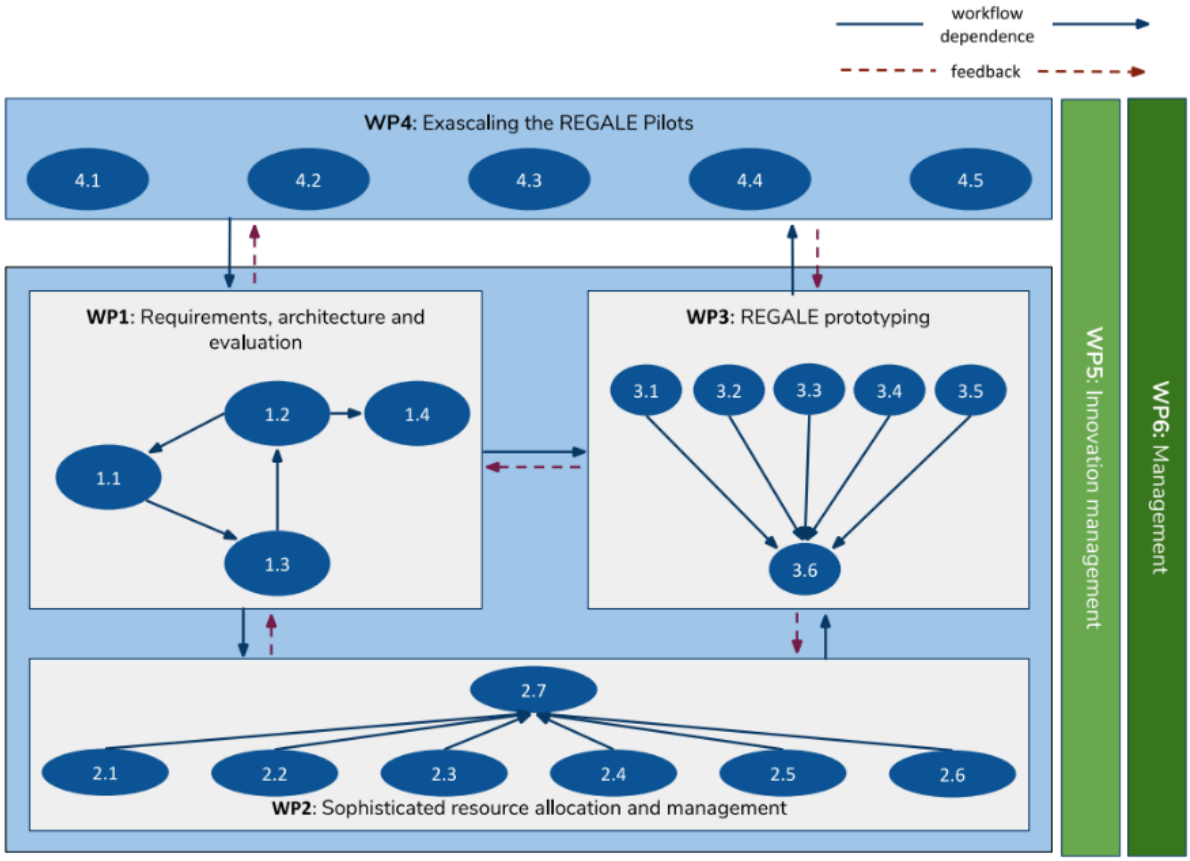

Abbildung 1: Übersicht der REGALE Arbeitspakete

TWT war an den Arbeitspaketen 1,4,5 und 6 über die gesamte Projektlaufzeit beteiligt.

Die für TWT beizutragenden Hauptergebnisse ergeben sich zu:

1. Entwicklung einer modifizierten Kontakt-Finite-Elemente-Formulierung für die Crash-Simulation in Multiskalensystemen
2. Kopplung des entwickelten Codes mit Teilen der REGALE Architektur
3. Ableitung optimaler Routen für das Materialdesign eines Stoßfängers
4. Verwertungsmaßnahmen zur Förderung der Projektergebnisse bei relevanten Unternehmen aus der Automobil- und Transportindustrie sowie bei akademischen Einrichtungen

Der geplante zeitliche Ablauf der Arbeitspakete zu Beginn des Vorhabens wird in Abbildung 2 dargestellt. Die grünen Balken symbolisieren hierbei definierte Deliverables.

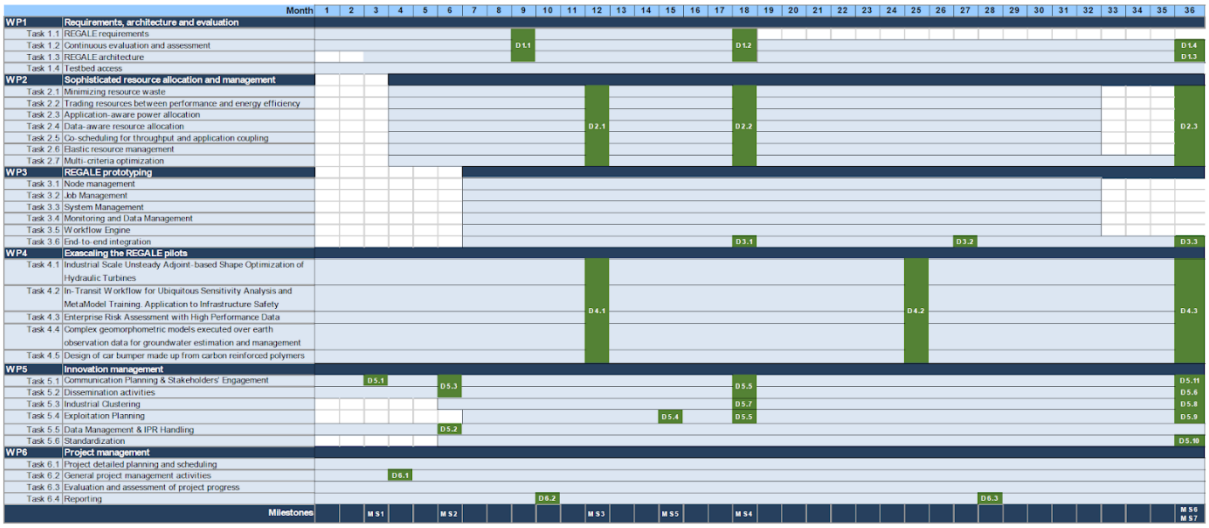

Abbildung 2: Geplanter zeitlicher Ablauf

Selbst mit einem Start während der Corona-Krise ist es dem Verbundvorhaben REGALE gelungen, rechtzeitig zu starten und durch wöchentliche Arbeitspakettermine den Zeitplan einzuhalten. Dadurch konnten auch alle 28 geplante Deliverables fristgerecht oder mit minimaler Zeitabweichung abgegeben werden.

In Abbildung 3 sind nochmal die wichtigsten Herausforderungen und Meilensteine über die Projektlaufzeit dargestellt.

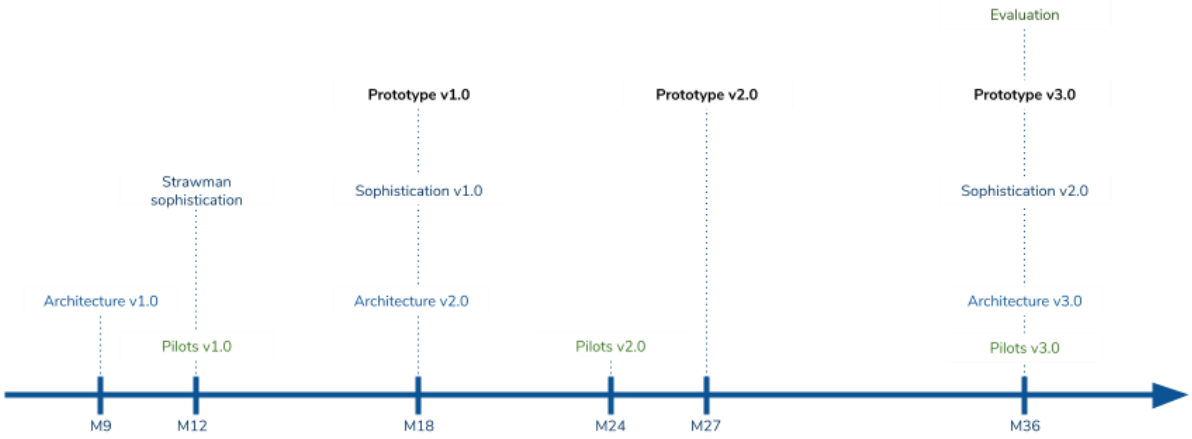

Abbildung 3: REGALE-Arbeitsplan auf einen Blick

D. Wissenschaftlicher und technischer Stand zum Vorhabenbeginn

1. Im Bereich Energie Effizienz von HPC

Mit dem Ende der Dennard'schen Skalierung wurde im letzten Jahrzehnt eine [1] kontinuierliche Steigerung der Leistungsdichte beobachtet, die erforderlich ist, um jede neue Prozessorgeneration mit ihrer maximalen Leistung zu betreiben. Supercomputing-Installationen haben unter diesem Anstieg der Leistungsdichte gelitten, der im Laufe der Jahre die Kosten für die Energieversorgung und Kühlung in die Höhe getrieben hat. Zwar wurden effizientere Kühltechniken eingeführt, um die Energieverschwendung auf der Infrastrukturebene zu verringern, z. B. Warmwasser- und Freikühlung [2, 3], und es wurden spezialisiertere Rechenelemente mit einem höheren Anteil an Vektor- und SIMD-Einheiten im Vergleich zu Allzweckprozessoren entwickelt, doch bleibt in der Praxis noch viel zu tun, um die Energieverschwendung während der Berechnungen zu verringern [4, 5].

Die Entwickler von Prozessoren haben sich mit diesem Aspekt befasst, indem sie in ihre Produkte eine feinere und intelligentere Unterstützung für die Energieverwaltung integriert haben, um automatisch einen Kompromiss zwischen Leistung und Stromverbrauch zu finden [6]. In der Tat ermöglichen Strategien für ein energiesparendes Design, dass die Rechenressourcen ihre Leistung mit dem Stromverbrauch in Einklang bringen können, indem sie in energiesparenden Betriebsarten arbeiten. Diese Energiezustände werden durch Dynamic and Voltage Frequency Scaling (DVFS) (auch bekannt als Leistungszustände oder P-Zustände), Clock Gating oder Throttling-Zustände (T-Zustände) und Leerlaufzustände, die ungenutzte Ressourcen abschalten (C-Zustände), erreicht. Während die eingebauten Hardware- und Betriebssystemrichtlinien anwendungsunabhängig sind, wurden in den letzten Jahren mehrere Ansätze vorgeschlagen, die es dem Endbenutzer ermöglichen, sie im Benutzerraum [7, 8] und zur Ausführungszeit [9] zu steuern.

Die erste Familie von Ansätzen zielt darauf ab, einen Kompromiss zwischen Stromverbrauch und Leistung zu finden, um Energieeffizienz zu erreichen [7]. Diese Techniken untersuchen die Verwendung von HW-Energiemanagement-Reglern und Anwendungsparametern, um die Abhängigkeit von Ausführungszeit (Time-to-Solution, TtS), durchschnittlicher Leistung und Energie (Energy-to-Solution, EtS) in Bezug auf diese Regler und Parameter zu untersuchen. Die zweite Familie von Ansätzen konzentriert sich auf die Verbesserung der Anwendungsleistung unter einer Leistungsbegrenzung [8, 10]. Diese Ansätze zielen auf leistungsbegrenzte Systeme, Rechenknoten und Verarbeitungselemente ab. Sie stützen sich auf die Fähigkeit zur Laufzeit, die kritische Aufgabe in der Anwendung zu verfolgen; dann wird das Energiebudget des Knotens/Sockels/Kerns, auf dem die kritische Aufgabe ausgeführt wird, dynamisch gelockert, während das Energiebudget der nicht kritischen Ressourcen verschärft wird. Die dritte und letzte Gruppe von Ansätzen zielt darauf ab, die IT-Energieverschwendung zu reduzieren, indem die Leistung der Verarbeitungselemente verringert wird, wenn sich die Anwendung in einer Phase mit verfügbarem Kommunikationsschlupf befindet [11]. Mit diesen Ansätzen wird versucht, zur Laufzeit Bereiche des Anwendungsausführungsflusses zu isolieren, die mit einem reduzierten P-Zustand ausgeführt werden können, ohne die Anwendungsleistung zu beeinträchtigen.

Aus früheren Arbeiten geht hervor, dass es erhebliche Möglichkeiten gibt, die Rechenkapazität zu erhöhen oder den Energiebedarf heutiger HPC-Lösungen zu verringern. Cesarini et al. [12] demonstriert eine Energieeinsparung von 22 % bei der Anwendung des ACM Gordon Bell Prize-Gewinners OMEN mit vernachlässigbarem TtS-Overhead (<0,4 %).

Die vorgenannten Ansätze ermöglichen jedoch keine globale, koordinierte Steuerung eines HPC-Systems in Bezug auf Leistung/Stromverbrauch/Energie: Sie arbeiten entweder mit unterschiedlicher Granularität, haben einen begrenzten Optimierungsumfang oder sind für einen bestimmten Anbieter oder eine bestimmte Softwareschicht implementiert. Leistungsmanagement und Energieeffizienz in großem Maßstab erfordern einen ganzheitlichen Ansatz, bei dem verschiedene Komponenten, die auf unterschiedlicher Granularität arbeiten, zusammenarbeiten, um eine hohe Leistung und einen hohen Systemdurchsatz zu erreichen. In diesem Sinne definiert die PowerAPI-Spezifikation eine Reihe von Abstraktionen und Schnittstellen zwischen verschiedenen Akteuren und HPC-Systemkomponenten für die Leistungs-/Energiemessung und -steuerung, wodurch die Implementierung eines Software-Stacks für die Energieverwaltung auf verschiedenen Architekturen erleichtert wird. Die HPC PowerStack-Arbeitsgruppe3 geht noch einen Schritt weiter und fördert die Standardisierung des Software-Stacks für das Energiemanagement von HPC-Systemen durch die Verallgemeinerung der Hardware-/Software-Schnittstellen auf Knotenebene. Dies beinhaltet die Verallgemeinerung von: (i) die Hardware-/Software-Schnittstellen auf Knotenebene zur Steuerung des Stromverbrauchs der Hardware auf niedriger Ebene (Knotenmanager); (ii) die Schnittstellen zwischen den Binärdateien und dem Code der Anwendung, den Energiemanagement-Laufzeiten (Jobmanager) und dem Knotenmanager; (iii) die Schnittstellen zwischen dem Jobmanager, dem Knotenmanager und dem Jobplaner/Ressourcenmanagement und den Richtlinien auf Rechenzentrumsebene (Systemmanager).

Ein besonderer Schwerpunkt des PowerStack-Projekts ist der Konsens zwischen den Komponenten, die bei der Entscheidungsfindung und Steuerung des Systems auf unterschiedlicher Granularität arbeiten.

2. Im Bereich mechanische Simulationen für Materialuntersuchungen

Die zunehmenden sozioökonomischen Bedenken hinsichtlich der Verkehrssicherheit und des Kraftstoffverbrauchs haben dazu geführt, dass die Notwendigkeit der Konstruktion leichterer und crashsicherer Strukturen immer mehr erkannt wird. In der Automobilindustrie ist die strukturelle Aufprallsicherheit, die sich auf das Verhalten des Fahrzeugs bei einem Aufprall bezieht, eine wichtige Anforderung an die Konstruktion von Fahrzeugteilen, da sie die Sicherheit der Passagiere in solchen Szenarien erhöhen muss. So spielt beispielsweise das Stoßfängersystem eine wichtige Rolle bei der Verbesserung der Sicherheit von Fahrgästen und Fußgängern, da es bei einem Aufprall ein Maximum an kinetischer Energie absorbiert und die Schäden an empfindlichen Fahrzeugteilen minimiert. Gleichzeitig hat die rasante Motorisierung dazu geführt, dass aus Gründen des Energieverbrauchs und des Umweltschutzes die Leichtbauweise des Fahrzeugs zwingend erforderlich ist. Aus diesen

Gründen ist in den letzten Jahren ein wachsendes Interesse an der Forschung und Entwicklung im Bereich der Aufprallsicherheit zu verzeichnen, wobei der Schwerpunkt auf innovativen Materiallösungen liegt, die eine erhöhte Aufprallsicherheit mit geringem Gewicht kombinieren [13,14]. Dazu gehören faserverstärkte Verbundwerkstoffe wie bidirektionale E-Glas/Epoxid-Laminate [15], glasmatte Thermoplaste mit kurzen Glasfasern [16] und Kenaf/Glasfasern [17].

In allen Fällen führte die Zugabe von Fasern in das Polymer zu verbesserten mechanischen Eigenschaften (Zugfestigkeit, Biegemodul und Festigkeit), aber die Schlagzähigkeit des Verbundstoffs blieb unbefriedigend. Als Alternative zu Naturfasern werden auch mit Kohlenstoffnanoröhren (CNT) verstärkte Polymerverbundwerkstoffe als leistungsstarke Materialien für die Entwicklung von Fahrzeugteilen in Betracht gezogen.

In den letzten Jahrzehnten wurden CNT aufgrund ihrer hervorragenden mechanischen und physikalischen Eigenschaften in der Polymerwerkstoffindustrie in großem Umfang eingesetzt. Sie zeichnen sich durch hervorragende thermische [18] und elektrische Eigenschaften [19], ein hohes Elastizitätsmodul [20] und eine niedrige Dichte aus, was sie ideal für Hochleistungs-Multifasern und -Verbundwerkstoffe macht.

In strukturellen Anwendungen machen ihre unglaubliche Festigkeit und ihre Nanodimensionen CNTs als mechanische Verstärkung einzigartig. Darüber hinaus zeichnen sich CNT-verstärkte Verbundwerkstoffe durch gute Kerbschlagzähigkeit, Schlagzähigkeit und interlaminare Scherfestigkeit aus [21]. Dies wird auf die Fähigkeit der CNTs zurückgeführt, im Vergleich zum unverstärkten Polymer mehr Schlagenergie zu absorbieren, was zu einer bemerkenswerten Verbesserung der Schlagzähigkeit beiträgt. Die hohe Energieabsorption von CNT-verstärkten Polymeren zusammen mit ihrer geringen Dichte und der erhöhten Festigkeit, Steifigkeit und Bruchfestigkeit [22] machen sie zu hervorragenden Kandidaten für Fahrzeugteile. Obwohl CNTs das Potenzial haben, hochleistungsfähige Verbundwerkstoffe zu schaffen, behindert der hohe Aufwand, der für experimentelle Untersuchungen ihres Verhaltens erforderlich ist, den Fortschritt in diesem Bereich. Ein vielversprechender Ansatz zur Überwindung dieses Problems ist die Anwendung von Berechnungsmethoden, die es den Forschern ermöglichen, eine große Anzahl von Materialkombinationen und mikrostrukturellen Konfigurationen mit geringen Investitionen in Bezug auf Geld, Zeit und Arbeit zu untersuchen. Die Entwicklung genauer numerischer Modelle für nanoverstärkte Verbundwerkstoffe ist jedoch ein sehr schwieriges Problem im Bereich der Computermechanik, da die Modellierung der verschiedenen physikalischen Gesetze, die das Problem auf verschiedenen Längenskalen regeln, sehr komplex ist [23].

Nr.	Literaturquelle
[1]	H. Esmaeilzadeh, et al. Dark silicon and the end of multicore scaling, IEEEMicro, vol. 32(3), pp. 122–134, 2012.

[2]	H. Shoukourian, et al. Analysis of the efficiency characteristics of the first high-temperature direct liquid-cooled petascale supercomputer and its cooling infrastructure, JPDC, vol. 107, pp. 87– 100, 2017
[3]	C. Conficoni, et al. Hpc cooling: A flexible modelling tool for effective design and management, IEEE Transactions on Sustainable Computing, pp. 1–1, 2018.
[4]	J. J. Dongarra, et al. Top500 supercomputer sites, https://www.top500.org/lists, 2019, accessed 29 March 2019.
[5]	W.-c. Feng and K. Cameron, The green500 list: Encouraging sustainable supercomputing, vol. 40, no. 12. IEEE, 2007.
[6]	T. Rosedahl, et al. Power/performance controlling techniques in openpower, in High-Performance Computing, Springer, 2017,pp. 275–289
[7]	F. Fraternali, et al. Quantifying the impact of variability and heterogeneity on the energy efficiency for a next-generation ultra-green supercomputer, IEEE TPDS, vol. 29, no. 7, pp.1575–1588, 2018.
[8]	J. Eastep, et al. Global extensible open power manager: A vehicle for hpc community collaboration on co-designed energy management solutions, in High Performance Computing. Springer International Publishing,2017,pp. 394–412.
[9]	D. Li, et al. Hybrid mpi/openmp power-aware computing, IPDPS'10, pp. 1–12.
[10]	A. Borghesi, et al. Scheduling-based power capping in high performance computing systems, Sustainable Computing: Informatics and Systems, vol. 19, pp. 1–13, 2018.
[11]	D. Cesarini, et al. Countdown: A run-time library for application-agnostic energy saving in mpi communication primitives, ANDARE '18, pp. 2:1–2:6.
[12]	Cesarini, D., et al. COUNTDOWN Slack: a Run-time Library to Reduce Energy Footprint in Large-scale MPI Applications. arXiv preprint arXiv:1909.12684.
[13]	Y. Zhang, P. Zhu, G. Chen, Z. Lin, Study on structural lightweight design of automotive front side rail based on response surface method, The Journal of Mechanical Design 129 (5) (2007) 553–557. https://doi.org/10.1115/1.2712223
[14]	J. Fang, G. Sun, N. Qiu, N. H. Kim, Q. Li, On design optimization for structural crashworthiness and its state of the art, Structural and Multidisciplinary Optimization 55 (2017) 1091–1119.
[15]	S. Prabhakaran, K. Chinnarasu, M. S. Kumar, Design and fabrication of composite bumper for light passenger vehicles, International Journal of Modern Engineering Research 2 (4) (2012) 2552–2556.
[16]	R. Hosseinzadeh, M. M. Shokrieh, L. B. Lessard, Parametric study of automotive composite bumper beams subjected to low-velocity impacts, Composite Structures 68 (4) (2005) 419–427.
[17]	M. Davoodi, S. Sapuan, D. Ahmad, A. Ali, A. Khalina, M. Jonoobi, Mechanical properties of hybrid kenaf/glass reinforced epoxy composite for passenger car bumper beam, Materials & Design 31 (10) (2010) 4927–4932.
[18]	S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tom´anek, Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 4613–4616. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.4613. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.4613.
[19]	T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. Hiura, J. W. Bennett, H. F. Ghaemi, T. Thio, Electrical conductivity of individual carbon nanotubes, Nature 382 (1996) 54–56.
[20]	M. Treacy, T. Ebbesen, J. Gibson, Exceptionally high young's modulus observed for individual carbon nanotubes, Nature 381 (6584) (1996) 678–680. https://doi.org/10.1038/381678a0.

[21]	N. Sapiai, A. Jumahat, J. Mahmud, Mechanical properties of functionalised cnt filled kenaf reinforced epoxy composites, Materials Research Express 5 (4) (2018) 045034.
[22]	Z. Benzait, L. Trabzon, A review of recent research on materials used in polymer-matrix composites for body armor application, Journal of Composite Materials 52 (23) (2018) 3241–3263.
[23]	S. A. Parvin, N. A. Ahmed, A. M. Fattahi, Numerical prediction of elastic properties for carbon nanotubes reinforced composites using a multi-scale method, Engineering with Computers (2020) 1–12

Tabelle 1: Verwendete Fachliteratur

E. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

In regelmäßigen Online-Meetings, mehreren Präsenztreffen und verschiedenen Projekt Reviews haben die REGALE-Partner an verschiedenen inhaltlichen Aufgaben und Herausforderungen gearbeitet. Die Ergebnisse der Treffen konnten kontinuierlich in die Liefergegenstände der Arbeitspakete eingepflegt werden.

Zusätzlich hat die TWT für Pilot 5 von AP4 wöchentliche Termine zwischen der TWT und NTUA organisiert, um die Zusammenarbeit und den Wissensaustausch zu stärken. Dies ermöglichte auch, Probleme frühzeitig zu erkennen und gegenzusteuern.

Eine Übersicht der wichtigsten Projekttreffen mit einer Beteiligung der TWT ist nachfolgend aufgelistet:

- 07.04.2021 & 16.04.2021 1st Plenary meeting: Kick-Off (Virtual)
- 10.11.2021 2nd Plenary meeting: Sprint Review (Virtual)
- 10-11.05.2022 3rd Plenary meeting: Sprint Review Athens, Greece
- 13.12.2022 Midterm Project review, Luxembourg
- 20-22.03.2023 4th Plenary meeting: Sprint Review Munich, Germany
- 13.07.2023 5th Plenary meeting: Workshop AP1/AP3 Munich, Germany
- 20.09.2023: 6th Plenary meeting: Sprint Review (Virtual)
- 13-14.03.2024: 7th Plenary meeting: Final Sprint Review Bologna, Italy
- 23.05.2024 Final Project Review (Virtual)

II. Ergebnisse des Vorhabens

A. Ergebnisse

Im Rahmen von REGALE wurden fünf Pilotprojekte ausgewählt, die für die nächste Generation von High-Performance Computing (HPC)-Anwendungen stehen. Diese haben einen hohen Datenbedarf, einschließlich komplexer Daten und Kontrollpfade, die komplexe Arbeitsabläufe mit extremen und/oder anspruchsvollen Anforderungen an Ressourcen darstellen. Die unterschiedlichen Eigenschaften der Piloten trugen zur Mitgestaltung der REGALE-Architektur und zur kontinuierlichen Evaluierung des REGALE-Prototyps bei. Die Piloten wurden aus folgenden Kriterien ausgewählt: a) Sie zeigen umfangreiche Herausforderungen in Bezug auf die Ressourcenanforderungen, d.h. Jeder Pilot zeigt mindestens eine der nicht-trivialen Anforderungen der Kopplung von HPC-Berechnungen mit extremer E/A, HPDA- und Streaming-Analytik, KI-Pipelines, um unser System mit einem vollständigen Spektrum von Anwendungsanforderungen mitzugestalten, b) sie stammen aus einer Vielzahl von Zielsektoren, um unsere Wirkung zu maximieren (erneuerbare Energien, Energieerzeugung, Risikobewertung in Unternehmen, intelligente Landwirtschaft und Automobilbau), und c) sie werden von Domänenexperten entwickelt und genutzt, die nicht unbedingt mit der Nutzung von HPC-Systemen vertraut sind, um den gesamten Weg zur Ausführung dieser Anwendungen in Großsystemen zu verfolgen und die Ausweitung der HPC-Nutzung auf weitere industrielle Nutzer zu unterstützen.

In den folgenden Abschnitten wird auf Pilot 5 „Entwurf eines Auto-Stoßfängers aus kohlenstoffverstärkten Polymeren“ und die Zusammenarbeit zwischen TWT und NTUA eingegangen. Das Tool und der betreffende Testfall sind zu finden unter: https://github.com/mgroupntua/carbumpercrashsimulation.

1. Use Case Beschreibung

Polymere sind leicht und flexibel, haben aber im Vergleich zu konkurrierenden Materialien wie Stahl eine relativ geringe Festigkeit. Nanomaterialien aus Kohlenstoff wie Graphen (G) und/oder Kohlenstoffnanoröhren (CNT) sind aufgrund ihrer außergewöhnlichen mechanischen, elektrischen und thermischen Eigenschaften ideale Bestandteile für verstärkte Verbundwerkstoffe (RCs). Als solche sind sie für viele Industriebereiche von großem Interesse. Dieses Pilotprojekt befasst sich mit der Entwicklung eines Stoßfängers aus CNT- und Graphen-(G)-verstärkten Verbundwerkstoffen, der bei einem Aufprall ein besseres mechanisches Verhalten als herkömmliche Stoßfänger aufweisen soll. Ziel ist es, ein optimales Materialdesign (Gewichtsanteil der CNTs/Gs, Orientierung usw.) durch Optimierungsalgorithmen zu erreichen, die entsprechend modifiziert werden, um die Auswirkungen von Ungewissheiten in der Geometrie und Dispersion der Einschlüsse im Ausgangspolymer zu berücksichtigen. Die Lösung dieses stochastischen Optimierungsproblems kann durch die Kombination von evolutionären Algorithmen mit Monte-Carlo-Simulationen erreicht werden. Diese sind in der Regel sehr komplex und

erfordern einen hohen Rechenaufwand. Wir wollen diesen Arbeitsablauf in Melissa ausdrücken, um eine bessere Leistung zu erzielen.

2. Die MSolve Software - Hauptmerkmale und Anpassungen

Die ausgearbeitete Pilotstudie hat als Grundlage ein multiskaliges Finite-Elemente-Modell, das Crash-Simulationen unterzogen wird. Diese Pilotstudie wurde in der MSolve-Softwareplattform implementiert, einer Open-Source-HPC-orientierten Multiphysik-Plattform, die von der MGroup in NTUA entwickelt wurde. In diesem Zusammenhang wurde eine Kontakt-Finite-Elemente-Bibliothek entwickelt und zu MSolve hinzugefügt, um den Anforderungen dieses Problemtyps gerecht zu werden.

Für die Analyse wurden zwei reale Stoßfängergeometrien betrachtet (siehe Abb. 4.a und 4.b) und die entsprechenden Finite-Elemente-Modelle in MSolve entwickelt.

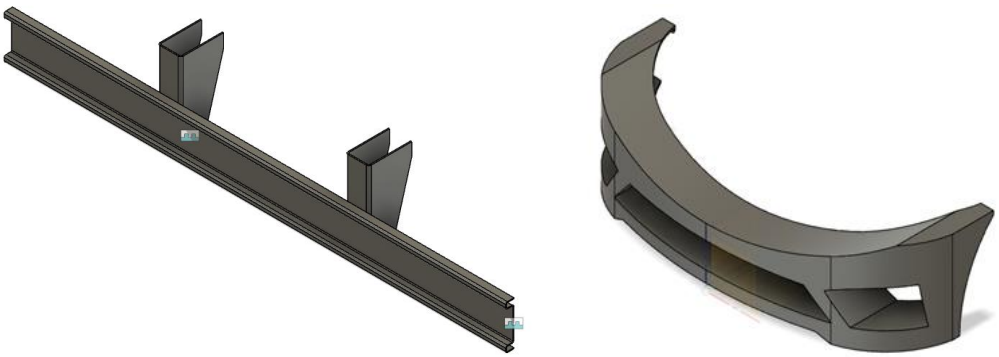

Abbildung 4: (a) Stoßfänger eines Lastkraftwagens aus Stahl und (b) Stoßfänger eines Sportwagens aus Polymerwerkstoff

Für das Modell des hinteren Lkw-Stoßfängers (Abbildung 4.a) wurden zwei Hauptklassen geschrieben, die sich mit der Erstellung des Finite-Elemente-Modells (Geometrie, Knotenkoordinaten, Materialeigenschaften der Elementkonnektivität, Rand- und Anfangsbedingungen) und dem entsprechenden Test befassen, der als Eingabe das Finite-Elemente-Modell übernimmt, den Solver und die Parameter des dynamischen Analysators definiert und die Aufprallsimulation durchführt. Innerhalb der Klasse TruckBumperImpact übernimmt die Methode CreateModel() (Abbildung 5) die Erstellung des Finite-Elemente-Modells, wobei sie als Eingabe Informationen über die Konnektivität der Finite-Elemente, die Knotenkoordinaten und bestimmte Materialeigenschaften sowie die notwendigen Informationen für die Definition der Kontaktelemente erhält, die für die Simulation der Wechselwirkungen zwischen dem Stoßfänger und dem Impaktor zuständig sind. Die Hauptmethode, die die Simulation ausführt, ist RunTest() der Klasse TruckBumperImpactTest (Abbildung 6). Die Ausgabe der Methode CreateModel() ist das endgültige Finite-Elemente-Modell, das als Eingabe in der Methode SolveModel(Model model) der Klasse TruckBumperImpactTest verwendet wird, die das algebraische Modell und den Solver sowie die nichtlinearen iterativen und dynamischen Analysatoren (Abbildung 7) definiert, die für die Lösung des vorliegenden nichtlinearen dynamischen Problems verwendet wurden.

```
2 references
public class TruckBumperImpact
{
    public static readonly double expected_solution_node862_TranslationZ = 0.025324;//Velocity 5d, 0.0475sec, peek

    //public static readonly double expected_solution_node1105_TranslationZ = 1.4061e-002;//Velocity 5d, 0.0475sec, VonMisesMaterial3D 15%
    //public static readonly double expected_solution_node1105_TranslationZ = 0.085521;//Velocity 25d, 0.0055sec, ElasticMaterial3D
    //public static readonly double expected_solution_node1105_TranslationZ = 0.13072;//Velocity 15d, 0.015sec, VonMisesMaterial3D
    //public static readonly double expected_solution_node1105_TranslationZ = 0.0733;//Velocity 10d, 0.0127sec, VonMisesMaterial3D
    //const double yStress = 275000000d;
    //const double yStress = 475000000d;
    const double yStress = 550000000d;
    //const double hardening = 11394144382.2006;
    //const double hardening = 35294117647.0588;
    const double hardening = 53750000000.00;

    1 reference | 0/1 passing
    public static Model CreateModel(ImportedData importedData, double modulusOfElasticity)
    {
        var model = new Model();
        var YoungMod = modulusOfElasticity;
```

Abbildung 5: Die Methode CreateModel() der Klasse TruckBumperImpact, die die Erstellung des Finite-Elemente-Modells für die LKW-Stoßfängersimulation verwaltet.

```
0 references
public static class TruckBumperImpactTest
{
    private static List<(INode node, IDofType dof)> watchDofs = new List<(INode node, IDofType dof)>();
    [Fact]
    0 references
    private static void RunTest()
    {
        ImportedData importedData = new ImportedData();
        importedData.ImportSlaveSurfaceConnectivity("SlaveSurfaceConnectivity.txt");
        importedData.ImportMasterSurfaceConnectivity("MasterSurfaceConnectivity.txt");
        importedData.ImportNodes("BumperImpactNodes.txt");
        //importedData.ImportFixedNodes("BumperImpactFixedNodesList.txt");
        importedData.ImportElementsConnectivity("BumperImpactConnectivity.txt");
        //importedData.ImportSlaveSurfaceConnectivity("TruckImpactor2SlaveConnect.txt");
        //importedData.ImportMasterSurfaceConnectivity("TruckImpactor2MasterConnect.txt");
        //importedData.ImportNodes("TruckImpactor2Nodes.txt");
        importedData.ImportFixedNodes("TruckImpactor2ConstrainedNodes.txt");
        //importedData.ImportElementsConnectivity("TruckImpactor2Connectivity.txt");
        //var E = 215.0 * 1e9;
        var E = 7.8713 * 1e9;
        var model = TruckBumperImpact.CreateModel(importedData, E);
        var log = SolveModel(model);
        Assert.Equal(TruckBumperImpact.expected_solution_node862_TranslationZ, log.DOFValues[watchDofs[0].node, watchDofs[0].dof], precision: 3);
    }
```

Abbildung 6: Die Methode RunTest () der Klasse TruckBumperImpactTest ist die Hauptmethode, die die Aufprallsimulation des Lkw-Stoßfängers auslöst.

```
1 reference | 0/1 passing
private static DOFSLog SolveModel(Model model)
{
    //var solverFactory = new SkylineSolver.Factory();
    var solverFactory = new SuiteSparseSolver.Factory();
    var algebraicModel = solverFactory.BuildAlgebraicModel(model);
    var solver = solverFactory.BuildSolver(algebraicModel);
    var problem = new ProblemStructural(model, algebraicModel);

    //var linearAnalyzer = new LinearAnalyzer(algebraicModel, solver, problem);
    //var loadControlAnalyzerBuilder = new LoadControlAnalyzer.Builder(algebraicModel, solver, problem, numIncrements: 1);
    var loadControlAnalyzerBuilder = new LoadControlAnalyzerWithTrialsForResidualEvaluation.Builder(algebraicModel, solver, problem, numIncrements: 1);
    loadControlAnalyzerBuilder.MaxIterationsPerIncrement = 100;
    loadControlAnalyzerBuilder.ResidualTolerance = 0.01;
    var loadControlAnalyzer = loadControlAnalyzerBuilder.Build();
    var dynamicAnalyzerBuilder = new NewmarkDynamicAnalyzer.Builder(algebraicModel, problem, loadControlAnalyzer, timeStep: 0.0002, totalTime: 0.02);
    dynamicAnalyzerBuilder.SetNewmarkParametersForConstantAcceleration();

    var dynamicAnalyzer = dynamicAnalyzerBuilder.Build();

    watchDofs.Add((model.NodesDictionary[862], StructuralDof.TranslationZ));
    loadControlAnalyzer.LogFactory = new LinearAnalyzerLogFactory(watchDofs, algebraicModel);

    dynamicAnalyzer.Initialize();
    dynamicAnalyzer.Solve();

    //return (DOFSLog)linearAnalyzer.Logs[0];
    return (DOFSLog)loadControlAnalyzer.Logs[0];
}
```

Abbildung 7: Die Methode SolveModel () der Klasse TruckBumperImpactTest ist die Methode, die die Lösung des nichtlinearen dynamischen Problems übernimmt.

Für den vorderen Stoßfänger wurde ein ähnlicher Ansatz gewählt. In der RunTest()-Methode der Klasse RegaleSolidShellFinalModelImpact (Abbildung 8) wird das vollständige Finite-Elemente-Modell mit allen Informationen über seine Knotenkoordinaten, Konnektivität, Rand- und Anfangsbedingungen und die Materialeigenschaften erstellt, wobei als Eingabedateien Informationen über die Geometrie und die potenzielle Kontaktzone mit der Methode CreateModel() der Klasse RegaleMersBumperModelSolidShell (Abbildung 9) verwendet werden. Das Modell, das die Ausgabe dieser Methode ist, wird dann als Eingabe

für die Methode SolveModel() verwendet, in der das algebraische Modell, der Solver sowie das inkrementelle, iterative Lösungsverfahren des dynamischen Problems definiert werden und die Lösung erfolgt (Abbildung 10).

```
0 references
public static class RegaleSolidShellFinalModelImpact
{
    private static List<(INode node, IDofType dof)> watchDofs = new List<(INode node, IDofType dof)>();
    [Fact]
    ● | 0 references
    private static void RunTest()
    {
        ImportedDataSecondModel importedData = new ImportedDataSecondModel();
        importedData.ImportNodes("RegaleHEX8RefinedMeshNodalCoord.txt");
        importedData.ImportElementsConnectivity("RegaleHEX8RefinedMeshElementConnect.txt");
        importedData.ImportFixedNodes("RegaleBumperNodalSupportsList.txt");
        importedData.ImportNorthEastSlaveSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedslaveConnectNE.txt");
        importedData.ImportNorthWestSlaveSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedslaveConnectNW.txt");
        importedData.ImportSouthEastSlaveSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedslaveConnectSE.txt");
        importedData.ImportSouthWestSlaveSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedslaveConnectSW.txt");
        importedData.ImportNorthEastMasterSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedmasterConnectNE.txt");
        importedData.ImportNorthWestMasterSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedmasterConnectNW.txt");
        importedData.ImportSouthEastMasterSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedmasterConnectSE.txt");
        importedData.ImportSouthWestMasterSurfaceConnectivity("RegaleHEX8RefinedmasterConnectSW.txt");



        //var E = 3.5 * 1e9;//PEEK
        var E = 7.8713 * 1e9;//3%
        var model = RegaleMersBumperModelSolidShell.CreateModel(importedData, E);
        var log = SolveModel(model);
        Assert.Equal(RegaleMersBumperModelSolidShell.expected_solution_node1105_TranslationZ, log.DOFValues[watchDofs[0].node, watchDofs[0].dof], precision: 3);
    }
```

Abbildung 8: Die Methode RunTest () der Klasse RegaleSolidShellFinalModelImpact ist die Hauptmethode, die die Aufprallsimulation des vorderen Stoßfängers initiiert.

```
2 references
public class RegaleMersBumperModelSolidShell
{
    public static readonly double expected_solution_node1105_TranslationZ = 0.085521;
    const double yStress = 0.025 * 1e9;
    const double hardening = 0.35 * 1e9;
    const int noElemntsBumper = 179490;
    const int numberOfElementsImpactor = 384;
    const int numberOfNodesBumper = 218802;
    const int numberOfNodesImpactor = 680;


    1 reference | ● 0/1 passing
    public static Model CreateModel(ImportedDataSecondModel importedData, double modulusOfElasticity)
    {
        var model = new Model();
        var YoungMod = modulusOfElasticity;
```

Abbildung 9: Die Methode CreateModel () der Klasse RegaleMersBumperModelSolidShell, die die Erstellung des Finite-Elemente-Modells für die Aufprallsimulation des Stoßfängers übernimmt.

```
1 reference | ● 0/1 passing
private static DOFSLog SolveModel(Model model)
{
    //var solverFactory = new DenseMatrixSolver.Factory();
    //solverFactory.IsMatrixPositiveDefinite = false;
    //var solverFactory = new SkylineSolver.Factory();
    var solverFactory = new SuiteSparseSolver.Factory();
    var algebraicModel = solverFactory.BuildAlgebraicModel(model);
    var solver = solverFactory.BuildSolver(algebraicModel);
    var problem = new ProblemStructural(model, algebraicModel);
    var loadControlAnalyzerBuilder = new LoadControlAnalyzerWithTrialsForResidualEvaluation.Builder(algebraicModel, solver, problem, numIncrements: 1);
    //var loadControlAnalyzerBuilder = new LoadControlAnalyzer.Builder(algebraicModel, solver, problem, numIncrements: 1);
    loadControlAnalyzerBuilder.MaxIterationsPerIncrement = 100;
    loadControlAnalyzerBuilder.ResidualTolerance = 0.0001;
    var loadControlAnalyzer = loadControlAnalyzerBuilder.Build();
    var dynamicAnalyzerBuilder = new NewmarkDynamicAnalyzer.Builder(algebraicModel, problem, loadControlAnalyzer, timeStep: 0.0001, totalTime: 0.01);//0
    dynamicAnalyzerBuilder.SetNewmarkParametersForConstantAcceleration();
    var dynamicAnalyzer = dynamicAnalyzerBuilder.Build();
    watchDofs.Add((model.NodesDictionary[135240], StructuralDof.TranslationY));//Check solution with Ansys and find node!
    loadControlAnalyzer.LogFactory = new LinearAnalyzerLogFactory(watchDofs, algebraicModel);
    dynamicAnalyzer.Initialize();
    dynamicAnalyzer.Solve();
    return (DOFSLog)loadControlAnalyzer.Logs[0];
}
```

Abbildung 10: Die Methode SolveModel () der Klasse RegaleSolidShellFinalModelImpact ist die Methode, die die Lösung des nichtlinearen dynamischen Problems übernimmt.

Weitere Code-Implementierungen umfassten die Erweiterung der UQ von MSolve und die Optimierung der peripheren Module, um das stochastische Optimierungsproblem zu formulieren und zu lösen. Dies würde die endgültigen Materialdesigns liefern, die durch eine Kombination von evolutionären Algorithmen und Monte-Carlo-Simulationsmethoden zum optimalen Gesamtverhalten mit der geringsten Variabilität führt.

3. Durchgeführte Arbeiten

Im Rahmen des REGALE-Projekts konzentrierten sich die Bemühungen auf fünf Ziele: (i) die Entwicklung einer modifizierten Kontakt-Finite-Elemente-Formulierung für die Crash-Simulation in Multiskalensystemen, (ii) die Kopplung zwischen MSolve und Melissa, (iii) die Ableitung optimaler Routen für das Materialdesign, demonstriert durch Anwendungen von industriellem Interesse, (iv) die Leistungsbewertung und (v) die Verwertungsmaßnahmen zur Förderung der Projektergebnisse bei relevanten Unternehmen aus der Automobil- und Transportindustrie sowie bei akademischen Einrichtungen. Um diese Ziele zu erreichen, arbeitete die TWT während der gesamten Projektlaufzeit eng mit der NTUA zusammen. In diesem Abschnitt gehen wir näher auf die Maßnahmen ein, die für die MSolve-Melissa-Kopplung durchgeführt wurden, und stellen die Analyseergebnisse für die optimalen Materialdesigns vor.

a) MSolve-Melissa-Kupplung

Der Einführungsprozess begann mit der Installation von Spack auf dem Grid5000-Standort in Nancy (Frankreich). Spack ist ein wissenschaftlicher Paketmanager, der so konzipiert ist, dass er reibungslos nur mit Berechtigungen auf Benutzerebene funktioniert. Mit Hilfe von Spack installierten wir die wichtigsten Komponenten des Melissa-Frameworks, darunter die "melissa-api" mit ihren Abhängigkeiten und die Melissa-Python-Module ("py-melissa-core"). Gleichzeitig wurde auf der Grundlage von dokumentierten Beispielen ein C-Wrapper entwickelt, der die MPI-Funktionen nutzt und die Melissa-Kommunikation durch die Kernfunktionen melissa_init", melissa_send" und melissa_finalize" geschickt verwaltet. Dieser Wrapper orchestriert die Ausführung unseres spezialisierten MSolve-Experiments (ein Stoßstangenkollisionsexperiment), das auf die .NET-Laufzeitumgebung angewiesen ist, indem er aktiv Streams von der Standardeingabe liest.

Zusätzlich wurden Konfigurationsschritte unternommen, um eine problemlose Integration mit unserer Berechnungsumgebung (Grid5000) zu gewährleisten. Der Versuchsaufbau wurde genau auf den OAR-Scheduler abgestimmt, um die Aufgabenverteilung und die Ressourcennutzung zu optimieren. Schließlich wurden die Vorverarbeitungsbefehle sorgfältig so konfiguriert, dass sie auf jedem reservierten Knoten ausgeführt werden, um die Einheitlichkeit der Laufzeitabhängigkeiten zu gewährleisten.

4. Ergebnisse der Analysen

Die beiden von uns zur Verfügung gestellten Pkw-Stoßfänger (Abbildungen 4a und 4b) wurden zunächst zum Testen des Codes und zur Validierung unseres Codes im Vergleich zu anderer kommerzieller Software (ANSYS Engineering Simulation Software) verwendet.

Die in MSolve erzielten Analyseergebnisse stimmten sehr gut mit denen von ANSYS überein, wie aus Abbildung 11 ersichtlich ist.

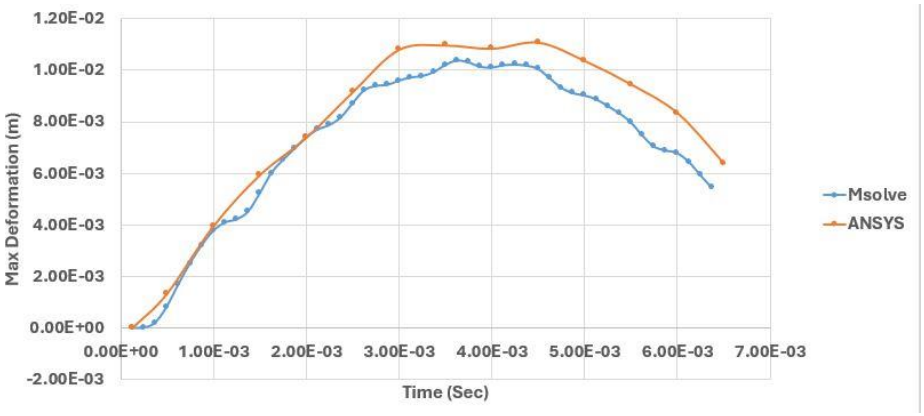

Abbildung 11: Vergleich zwischen MSolve und ANSYS in Bezug auf die maximale Durchbiegung des Stoßfängers für das Modell in Abbildung 4b.

Der nächste Schritt bestand darin, die herkömmlichen Stoßstangenmaterialien durch CNT-verstärkte Polymere zu ersetzen. Zu diesem Zweck entwickelten wir für jeden Stoßfänger ein Multiskalenmodell, das aus drei Skalen besteht: (i) auf der Nanoskala modellierten wir die CNTs als äquivalente Balkenelemente, (ii) auf der Mesoskala betrachteten wir ein repräsentatives Volumenelement (RVE) des CNT-verstärkten Polymers und (iii) auf der Makroskala modellierten wir den CNT-verstärkten Stoßfänger, wie in Abbildung 12 dargestellt.

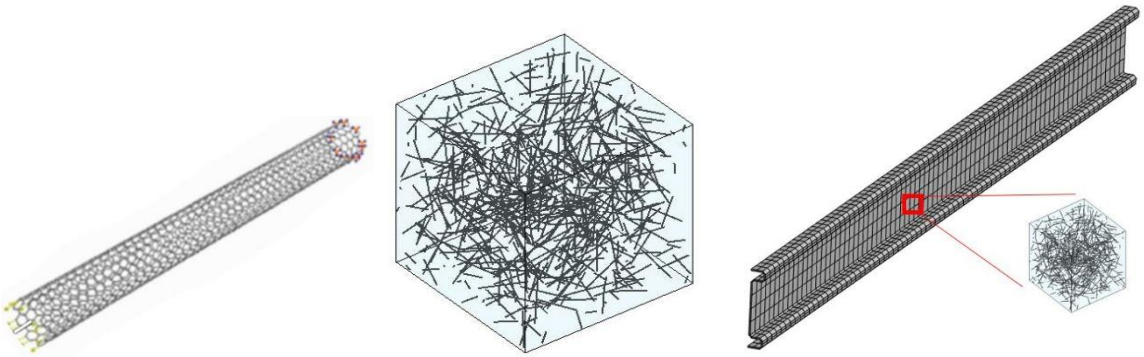

Abbildung 12: (a) Ein einzelnes CNT, modelliert als äquivalentes Balkenelement, (b) ein RVE aus CNT-verstärktem Polymer und (c) ein aus dem Verbundwerkstoff hergestellter Auto-Stoßfänger.

Anhand dieses Multiskalenmodells des Stoßfängers haben wir Aufprallsimulationen durchgeführt, um zu untersuchen, welche Verbesserungen wir durch die Zugabe von beliebig ausgerichteten CNTs zum Polymermatrixmaterial, in diesem Fall PEEK (Polyetheretherketon), erzielen können. Abbildung 13 zeigt den Zuwachs der absorbierten Energie des Stoßfängers

beim Aufprall, wenn wir den Gewichtsanteil der CNTs erhöhen, sowie die gewünschte Verringerung der maximalen Durchbiegung des Stoßfängers.

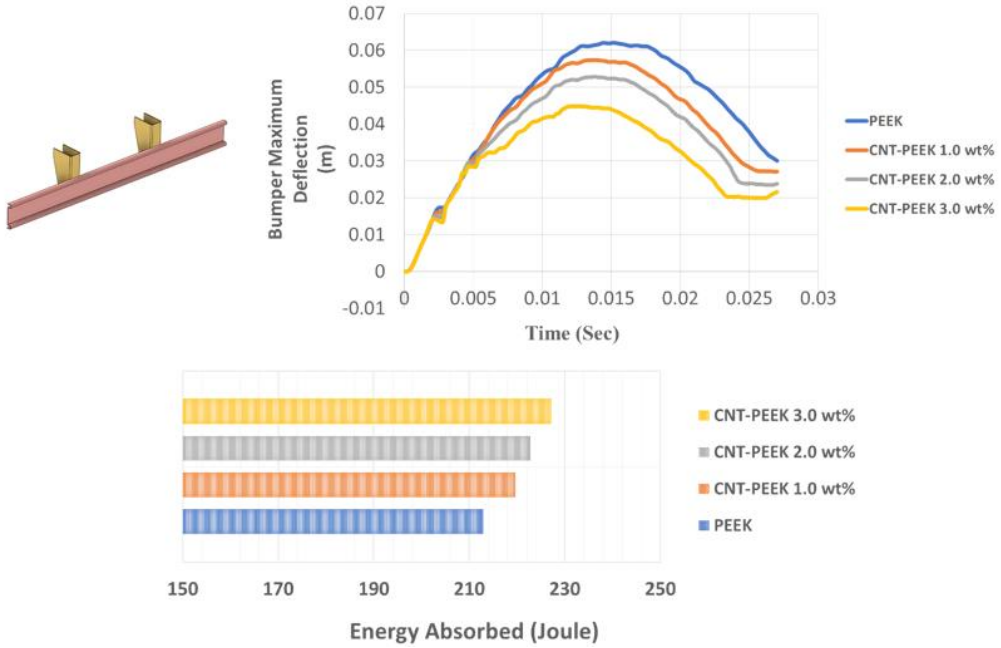

Abbildung 13: Ergebnisse der Crash-Simulation in Bezug auf die absorbierte Energie und die maximale Durchbiegung des Stoßfängers während des Aufpralls bei steigendem CNT-Gehalt in der Polymermatrix.

Die in Abbildung 13 gezeigten Ergebnisse sind sehr vielversprechend, da die Zugabe von CNTs in das Polymer zu einer spürbaren Erhöhung der absorbierten Energie bei gleichzeitiger Verringerung der maximalen Durchbiegung führt.

5. Stochastische Optimierungsanalyse mit Melissa

Der letzte Teil dieser Pilotstudie umfasste die Optimierung der Materialkonfiguration auf mikrostruktureller Ebene, wobei wir optimale CNT-Orientierungen an bestimmten Segmenten des Stoßfängers ableiten wollten, die die absorbierte Energie weiter erhöhen würden. Darüber hinaus haben wir die Aufprallgeschwindigkeit des Stoßfängers als zufälligen Parameter betrachtet, um eine rationalere Darstellung realistischer Szenarien zu erhalten. Die Lösung dieses stochastischen Optimierungsproblems wurde durch eine Kombination aus einem heuristischen Optimierungsalgorithmus (Genetischer Algorithmus, GA) und einer verschachtelten Monte-Carlo-Simulation (MC) für jeden vom GA generierten Parametersatz der Designvariablen (d. h. CNT-Ausrichtungswinkel) erzielt. Bei dieser Analyse benötigte der GA 50 Epochen, um zu konvergieren, wobei die Populationsgröße 10 betrug und jede Bewertung der Fitnessfunktion zusätzliche 1000 MC-Läufe erforderte. Insgesamt waren 500.000 Crash-Simulationen erforderlich, um die Materialdesigns zu erhalten, die die absorbierte Energie maximieren und die Durchbiegung des Stoßfängers minimieren würden.

Die Abbildungen 14-16 zeigen die Ergebnisse der stochastischen Optimierungsanalyse für den in Abbildung 4b dargestellten Stoßfänger. Abbildung 14 zeigt insbesondere die mittlere Verringerung der maximalen Durchbiegung des Stoßfängers bei steigendem CNT-Gehalt in Abhängigkeit von der Zeit. Abbildung 15 zeigt die mittlere Verringerung der dissipierten

Energie, d. h. der Energie, die im Stoßfänger als dauerhafte Verformung (Beschädigung) gespeichert ist. In Abbildung 16 ist der durchschnittliche Anstieg der vom Stoßfänger absorbierten Energie dargestellt. Diese Ergebnisse verdeutlichen die signifikante Verbesserung der Gesamt-Crashsicherheit des Stoßfängers.

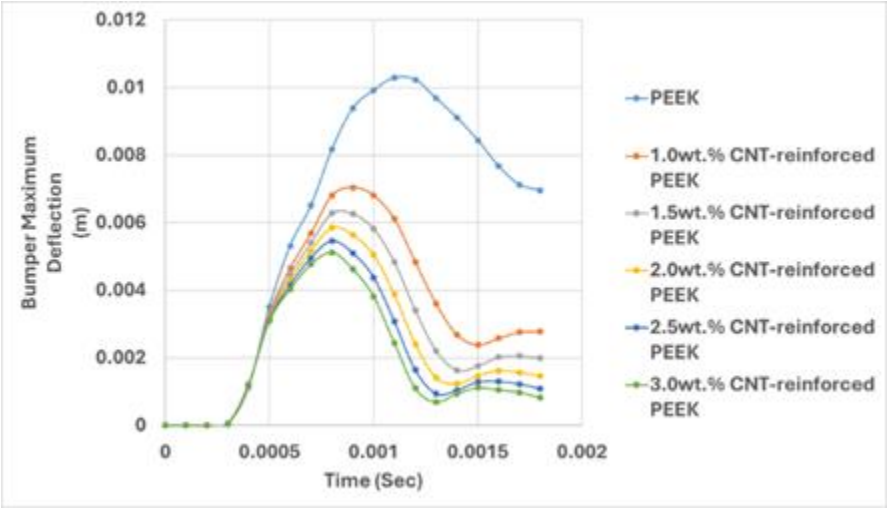

Abbildung 14: Ergebnisse der Crash-Simulation in Bezug auf die absorbierte Energie und die maximale Durchbiegung des Stoßfängers während des Aufpralls bei steigendem CNT-Gehalt in der Polymermatrix.

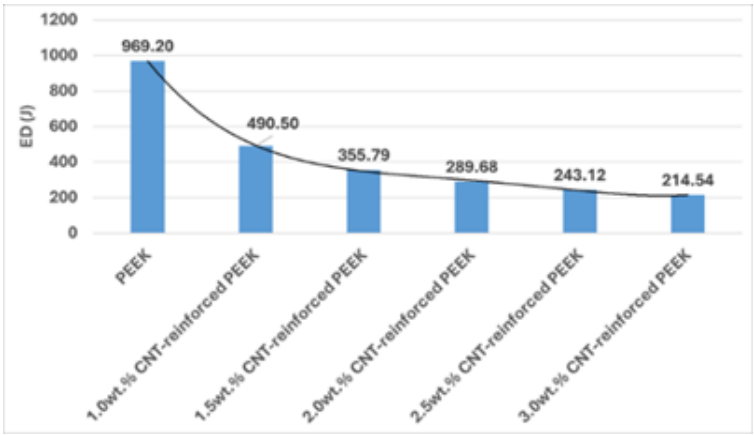

Abbildung 15: Dissipierte Energie bei steigendem CNT-Anteil im Grundmaterial.

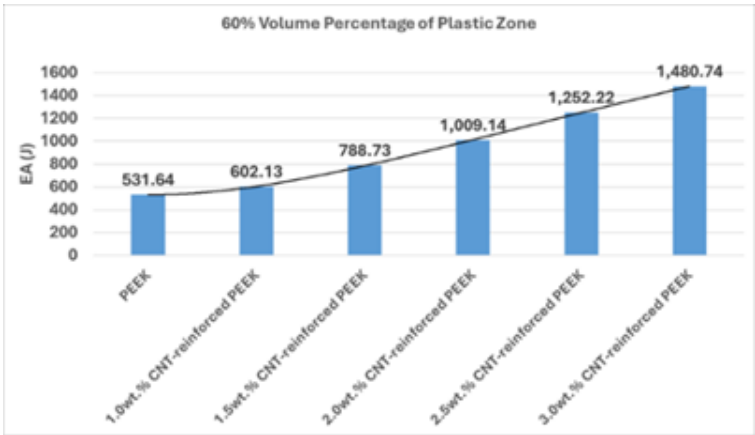

Abbildung 16: Absorbierte Energie bei steigendem CNT-Gehalt im Wirtsmaterial (60 % Volumenprozent der plastischen Zone).

6. Zusammenfassung

Im Rahmen des REGALE-Projekts arbeiteten TWT und NTUA/MGroup eng zusammen, um einen Multiskalen-Finite-Elemente-Code für die Crash-Simulation zu entwickeln. Unter Verwendung dieses Codes wurde dann ein stochastisches Optimierungsproblem formuliert, mit dem Ziel, optimale Materialdesigns für einen innovativen Auto-Stoßfänger aus Kohlenstoff-Nanoröhren-verstärkten Verbundwerkstoffen abzuleiten. Die Lösung dieses Problems wurde durch eine Kombination aus heuristischer Optimierung und Monte-Carlo-Simulation erzielt. Dieser Ansatz erforderte jedoch beträchtliche Rechenressourcen, und der einzige praktikable Ansatz war der Einsatz auf HPC-Systemen, wie dem Grid5000-Supercomputer in Frankreich, den wir für unsere Simulationen gewählt haben. An diesem Punkt spielte der Melissa-Workflow eine wichtige Rolle bei der Beschleunigung des Lösungsprozesses für dieses Problem, da er die Möglichkeit bot, statistische Eigenschaften "on-the-fly" zu berechnen und die Speicheranforderungen zu minimieren. Das Ergebnis der Analyse waren optimale Materialmikrostrukturen, die zu (i) einer geringeren maximalen Durchbiegung, (ii) einer geringeren dissipierten Energie und (iii) einer erhöhten Energieabsorption und einer verbesserten Gesamt-Crashsicherheit des Fahrzeugs führten.

B. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Im Projekt REGALE wurde demonstriert, dass mit angepassten Vorfahren und Methoden eine effizientere Verwendung von Ressourcen im Bereich HPC Rechnungen möglich ist. Mithilfe dieses Ansatzes stehen neue Möglichkeiten für Industrien vor, Simulationen durchzuführen, die heute mit traditionellen Wegen noch als zu „teuer" betrachtet werden. Dank REGALE konnten zum Beispiel Simulationen mit hochkomplexen Materialien durchgeführt werden, die demonstriert haben, dass Kohlenstoffnanoröhren verstärkte Polymerverbundwerkstoffe in bestimmten Themen bessere Leistungen zeigen gegenüber konventionellen Materialien.

Solche Erkenntnisse waren nur durch ein Verbundvorhaben erreichbar, das aus allen möglichen Akteuren der Supercomputing-Welt bestand.

Für die Arbeiten und Ergebnisse der TWT GmbH waren insbesondere die Zusammenarbeit mit den Projektpartnern im AP4 von entscheidender Bedeutung. Das hohe Risiko und der anfängliche Aufwand, die mit diesen innovativen Themen und Entwicklungen verbunden sind, wäre die TWT ohne eine finanzielle Unterstützung und ohne die fachliche Expertise der Partner nicht allein eingegangen.

C. Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse

1. Wirtschaftliche Erfolgsaussichten

Die TWT GmbH sieht sich vornehmlich als Dienstleister für Unternehmen in den Bereichen Automotive, Luft- und Raumfahrt und Medizintechnik. Die erarbeiteten Ergebnisse aus dem REGALE Projekt werden das Service-Portfolio der TWT nachhaltig stärken. Weiterhin werden die gewonnenen Erfahrungen und Kompetenzen dazu beitragen, die TWT GmbH als verlässlichen Partner für zukünftige Kunden- und Forschungsaufträge zu etablieren. Insbesondere im Hinblick auf die Strategie einer „leistungsfähigen und effizienten Verwendung der Ressourcen“ der Bundesregierung werden sich etliche Möglichkeiten ergeben, diese neu gewonnene Expertise innovativ einzusetzen.

2. Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten

Die aktuellen wissenschaftlichen Erkenntnisse geben Grund für eine positive Einschätzung der wissenschaftlichen und technischen Erfolgsaussichten der Projektergebnisse. Das große Interesse der Partnerfirmen des REGALE-Konsortiums und weiterer Fachexperten an der wissenschaftlich-technischen Unterstützung der Arbeiten zeigt den Innovationsbedarf im Projektumfeld. Ideen und Ergebnisse konnten erfolgreich in diversen Akquisetermine bei Kunden und auf Netzwerkveranstaltungen dargestellt werden und sind auf positive Resonanz gestoßen.

3. Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Die Analysen des Standes der Technik, kombiniert mit den momentan vorliegenden Teilergebnissen des Projektes, zeigen bereits heute Ansatzpunkte für weiterführende wissenschaftliche Arbeiten. Die im Projekt verwendeten und entwickelten Technologien werden in allen Bereichen der Firma vorgestellt und Integrations- und Weiterentwicklungsmöglichkeiten sind bereits identifiziert worden. Außerdem besteht vonseiten der Kunden bereits großes Interesse an den Ergebnissen des Projektes.

D. Bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens

Während der Projektdurchführung wurde der Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen verfolgt und bewertet. Hierbei sind von dritter Seite keine Ergebnisse bekannt geworden, die mit den Projektansätzen und -ergebnissen direkt vergleichbar sind oder die für die Durchführung des Vorhabens unmittelbar relevant sind.

E. Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

Im Juli 2023 wurden die ersten Ergebnisse des Projekts auf dem FKFS 23. Internationales Stuttgarter Symposium vorgestellt. Hier war die TWT sowohl in der Vorbereitung als auch in der Durchführung maßgeblich beteiligt. Ein Mitarbeiter war an zwei Tagen am Stand anwesend und hat das Projekt und insbesondere die Beiträge der TWT GmbH vertreten und erläutert.

Zusätzlich hat TWT, in Zusammenarbeit mit NTUA, bei der Gelegenheit ein Paper im Springer Band des 23. Internationalen Stuttgarter Symposiums veröffentlicht (https://doi.org/10.1007/978-3-658-42236-3_14).

TWT und NTUA planen, ein gemeinsames Paper Ende 2024 zu veröffentlichen. Das Paper soll eine Übersicht der letzten Meilensteine im REGALE Projekt und dessen Ergebnisse. Die Erstellung des Papers wurde schon begonnen und das Paper ist gerade in der Reviewphase.

GEFÖRDERT VOM
Bundesministerium für Bildung und Forschung

TWT

Kurzbericht

für das Verbundvorhaben

REGALE

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 16HPC041 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

1. Aufgabenstellung

Das REGALE-Projekt ist im April 2021 an den Start gegangen. Es zielt darauf ab, einen Software-Stack zu entwickeln, der nicht nur in der Lage ist, die HPC-Systeme von morgen effizienter zu machen. Er wird auch offen und skalierbar für massive Supercomputer sein. REGALE will den Weg für HPC-Anwendungen der nächsten Generation zu Exascale-Systemen bereiten. Um dies zu erreichen, definiert das Projekt eine offene Architektur, baut ein Prototypsystem auf und integriert in dieses System eine angemessene Verfeinerung, um Supercomputersysteme mit den Mechanismen und Richtlinien für eine effektive Ressourcennutzung und Ausführung komplexer Anwendungen auszustatten.
Das REGALE Projekt verfolgt 3 strategische Hauptziele: (i) Effiziente Nutzung der Ressourcen, (ii) Breite Anwendbarkeit, (iii) Einfache und flexible Nutzung von Supercomputing-Diesten.

2. Wissenschaftlicher und technischer Stand zum Vorhabenbeginn

a. Im Bereich Energie Effizienz von HPC

Aus früheren Arbeiten geht hervor, dass es erhebliche Möglichkeiten gibt, die Rechenkapazität zu erhöhen oder den Energiebedarf heutiger HPC-Lösungen zu verringern. Cesarini et al. [1] demonstriert eine Energieeinsparung von 22 % bei der Anwendung des ACM Gordon Bell Prize-Gewinners OMEN mit vernachlässigbarem TtS-Overhead (<0,4 %).

Die vorgenannten Ansätze ermöglichen jedoch keine globale, koordinierte Steuerung eines HPC-Systems in Bezug auf Leistung/Stromverbrauch/Energie. Leistungsmanagement und Energieeffizienz in großem Maßstab erfordern einen ganzheitlichen Ansatz, bei dem verschiedene Komponenten zusammenarbeiten, um eine hohe Leistung und einen hohen Systemdurchsatz zu erreichen. In diesem Sinne definiert die PowerAPI-Spezifikation eine Reihe von Abstraktionen und Schnittstellen zwischen verschiedenen Akteuren und HPC-Systemkomponenten für die Leistungs-/Energiemessung und -steuerung, wodurch die Implementierung eines Software-Stacks für die Energieverwaltung auf verschiedenen Architekturen erleichtert wird. Die HPC PowerStack-Arbeitsgruppe3 geht noch einen Schritt weiter und fördert die Standardisierung des Software-Stacks für das Energiemanagement von

HPC-Systemen durch die Verallgemeinerung der Hardware-/Software-Schnittstellen auf Knotenebene.

b. Im Bereich mechanische Simulationen für Materialuntersuchungen

In den letzten Jahrzehnten wurden CNT aufgrund ihrer hervorragenden mechanischen und physikalischen Eigenschaften in der Polymerwerkstoffindustrie in großem Umfang eingesetzt. Sie zeichnen sich durch hervorragende thermische und elektrische Eigenschaften, ein hohes Elastizitätsmodul und eine niedrige Dichte aus, was sie ideal für Hochleistungs-Multifasern und -Verbundwerkstoffe macht.

Obwohl CNTs das Potenzial haben, hochleistungsfähige Verbundwerkstoffe zu schaffen, behindert der hohe Aufwand, der für experimentelle Untersuchungen ihres Verhaltens erforderlich ist, den Fortschritt in diesem Bereich. Ein vielversprechender Ansatz zur Überwindung dieses Problems ist die Anwendung von Berechnungsmethoden, die es den Forschern ermöglichen, eine große Anzahl von Materialkombinationen und mikrostrukturellen Konfigurationen mit geringen Investitionen in Bezug auf Geld, Zeit und Arbeit zu untersuchen. Die Entwicklung genauer numerischer Modelle für nanoverstärkte Verbundwerkstoffe ist jedoch ein sehr schwieriges Problem im Bereich der Computermechanik, da die Modellierung der verschiedenen physikalischen Gesetze, die das Problem auf verschiedenen Längenskalen regeln, sehr komplex ist [2].

[1] Cesarini, D., et al. COUNTDOWN Slack: a Run-time Library to Reduce Energy Footprint in Large-scale MPI Applications.

[2] S. A. Parvin, N. A. Ahmed, A. M. Fattahi, Numerical prediction of elastic properties for carbon nanotubes reinforced composites using a multi-scale method, Engineering with Computers (2020) 1–12

3. Ablauf des Vorhabens

Das Verbundvorhaben REGALE unterteilt sich in 6 verschiedene Arbeitspakete.

Selbst mit einem Start während der Corona-Krise, ist es dem Verbundvorhaben REGALE gelungen rechtzeitig zu Starten und durch wöchentlichen Arbeitspakettermine den Zeitplan einzuhalten. Dadurch konnten auch alle 28 geplante Deliverables fristgerecht oder mit minimaler Zeitabweichung abgegeben werden. Das finale Review des REGALE Projekts fand am 23.05.2024 statt.

4. Wesentliche Ergebnisse

Die für TWT, in Zusammenarbeit mit der NTUA, beizutragenden Hauptergebnisse ergeben sich zu:

1. Entwicklung einer modifizierten Kontakt-Finite-Elemente-Formulierung für die Crash-Simulation in Multiskalensystemen
2. Kopplung des entwickelten Codes mit Teilen der REGALE Architektur
3. Ableitung optimaler Routen für das Materialdesign eines Stoßfängers
4. Verwertungsmaßnahmen zur Förderung der Projektergebnisse bei relevanten Unternehmen aus der Automobil- und Transportindustrie sowie bei akademischen Einrichtungen