

Kurzbericht

StromungsRaum: Neuartige Exascale-Architekturen mit heterogenen Hardwarekomponenten für Strömungssimulationen

Zuwendungsempfänger: Universität zu Köln, Förderkennzeichen: 16ME0710, Laufzeit: 10/2022 – 12/2025, Beteiligte: Axel Klawonn, Martin Lanser, Kyrill Ho

1 Aufgabenstellung

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

2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand

Gebietszerlegungsverfahren gehören zu den wichtigsten numerischen Methoden zur parallelen Lösung großer Gleichungssysteme aus der Simulation partieller Differentialgleichungen. Insbesondere Schwarz-Verfahren haben sich als sehr robuste und skalierbare Algorithmen erwiesen. In den letzten Jahren wurden verstärkt auch nicht-lineare Varianten dieser Methoden untersucht, da sie häufig eine bessere nichtlineare Konvergenz zeigen und sich gut an moderne parallele Rechnerarchitekturen anpassen lassen.

Bislang wurden solche nichtlinearen Verfahren jedoch nur eingeschränkt für komplexe Strömungsprobleme eingesetzt. Insbesondere fehlten Untersuchungen zu Methoden mit sogenannten monolithischen Grobgitterräumen. Vor diesem Hintergrund bestand ein wesentlicher Ausgangspunkt des Teilprojekts der UzK darin, vorhandene nichtlineare Gebietszerlegungsverfahren weiterzuentwickeln und diese basierend auf bestehenden parallele Softwarepakete wie FROSch (Fast and Robust Overlapping

Schwarz) und FEATFLOW implementieren.

3 Planung und Ablauf

Das Projekt war in vier zentrale Arbeitspakete gegliedert: Methodenentwicklung, parallele Implementierung, Skalierung und Performance Engineering sowie Integration und Validierung in StrömungsRaum[®]. Die Arbeiten bauten aufeinander auf und wurden eng verzahnt durchgeführt. Die Beiträge der Projektpartner ergänzten sich dabei komplementär entlang der gesamten Entwicklungskette – von der algorithmischen Weiterentwicklung über die effiziente Umsetzung auf HPC-Systemen bis hin zur Integration in die industrielle Plattform. Der Fokus lag auf der durchgängigen Zusammenführung der Ergebnisse, um eine validierte und direkt nutzbare Gesamtlösung bereitzustellen.

4 Wesentliche Ergebnisse

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

Im Teilprojekt der UzK wurde eine neue für Fluid-Probleme geeignete Variante nichtlinearer Zwei-Level Schwarz-Verfahren entwickelt. Eine parallele und parallel skalierbare Implementierung des Verfahrens wurde zudem erstellt und erfolgreich ins FEATFLOW-Software-Ökosystem integriert. Robustere und schnellere nichtlineare Konvergenz sowie verbesserte Skalierbarkeit konnte nachgewiesen werden.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Während der Projektlaufzeit wurden relevante externe Entwicklungen kontinuierlich beobachtet und in die Arbeiten eingeordnet. Der Fokus lag dabei auf der Überführung wissenschaftlicher Methoden in eine industriell nutzbare Simulationsplattform, wodurch ein eigenständiger Beitrag über reine Prototypen hinaus geleistet wurde. Eine weitere Zusammenarbeit zwischen der UzK und Alexander Heinlein (TU Delft, Niederlande) bestand bzgl. der Implementierungsarbeiten in FROSch.

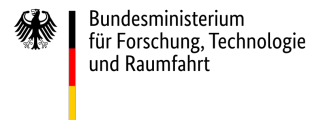
Schlussbericht

Verbundprojekt

StroemungsRaum: Neuartige Exascale-Architekturen mit heterogenen Hardwarekomponenten für Strömungssimulationen

Zuwendungsempfänger	Universität zu Köln
Förderkennzeichen	16ME0710
Laufzeit	10/2022 – 12/2025
Teilprojektleitung	A. Klawonn, Universität zu Köln

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.



Inhaltsverzeichnis

1	Kurze Darstellung des Vorhabens	3
1.1	Aufgabenstellung	3
1.2	Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand . . .	3
1.3	Planung und Ablauf	5
1.4	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	6
2	Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele	7
3	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	12
4	Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	14
5	Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes	15
5.1	Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit	15
5.2	Wissenschaftliche-technische Anschlussfähigkeit	15
6	Neue projektrelevante FE-Ergebnisse von dritter Stelle	16
7	Erfolgte und geplante Veröffentlichungen	17
8	Sonstige Literatur	17

1 Kurze Darstellung des Vorhabens

1.1 Aufgabenstellung

Im Projekt “Neuartige Exascale-Architekturen mit heterogenen Hardwarekomponenten für Strömungssimulationen – StroemungsRaum” bestand die zentrale Aufgabenstellung in der Erweiterung der Skalierbarkeit der Anwenderlösung *StrömungsRaum*®. Hierzu sollte der auf der Open-Source-Software FEATFLOW basierende Simulationskern so weiterentwickelt werden, dass hochskalierbare CFD-Simulationen auf zukünftigen Exascale-Architekturen mit heterogenen Hardwarekomponenten effizient durchgeführt werden können.

Im Fokus stand die Entwicklung und Integration neuer algorithmischer Ansätze zur Verbesserung von Skalierbarkeit und Effizienz. Dazu zählten insbesondere Mehrgitterverfahren für Beschleunigerhardware, hochskalierbare nichtlineare Gebietszerlegungsverfahren für CPU- und GPU-Systeme sowie die Anbindung algebraischer Multilevelverfahren zur Behandlung komplexer Geometrien. Ergänzend sollten zeitparallele Verfahren erschlossen werden, um zusätzliche Parallelisierungspotenziale zu nutzen und die Rechenzeiten zu reduzieren.

Ein weiterer Schwerpunkt der Aufgabenstellung lag im konsequenten Co-Design von Methodenentwicklung und Performance Engineering. Ziel war es, sowohl die Performance auf Knotenebene als auch die globalen Kommunikationsstrukturen zu optimieren, um eine effiziente und energieeffiziente Nutzung zukünftiger Exascale-Hardware zu gewährleisten.

Darüber hinaus sollte sichergestellt werden, dass die entwickelten Verfahren unmittelbar in die bestehende Software-as-a-Service-Umgebung integriert und damit für industrielle Anwendungen nutzbar gemacht werden können. Flankierend war der Aufbau von Kompetenzen im Bereich Exascale-Methoden an den beteiligten Forschungseinrichtungen sowie die Stärkung der Zusammenarbeit vorgesehen.

1.2 Voraussetzungen zur Durchführung und wissenschaftlicher Stand

Die in diesem Projekt zugrundeliegende Strömungssimulationssoftware FEATFLOW ist eine Open Source Software, die sich primär an modernen mathematischen, numerischen und algorithmischen Techniken für die effiziente Simulation von partiellen Differentialgleichungen orientiert und damit offene Schnittstellen für methodische Techniken bietet, die den aktuellen state-of-the-art bzgl. numerischer Simulation, Höchstleistungsrechnen und Performance Engineering darstellen. Im Folgenden er-

läutern wir die wichtigsten methodischen und algorithmischen Komponenten, die in diesem Teilprojekt erweitert und realisiert werden sollen, und stellen dabei auch den zugehörigen Stand der Wissenschaft und Technik dar.

Konkret wurden im Teilprojekt der Universität zu Köln vor allem nichtlineare Schwarz-Gebietszerlegungsverfahren betrachtet.

Generell sind Gebietszerlegungsverfahren robuste und hoch skalierbare, iterative Methoden zur Lösung diskretisierter partieller Differentialgleichungen. Die Robustheit wird durch den Einsatz passender und zum Teil problemabhängiger zweiter Level bzw. Grobgitterprobleme gewährleistet. Speziell für nichtlineare partielle Differentialgleichungen erfreuen sich in den letzten Jahren nichtlineare Gebietszerlegungsansätze einer größer werdenden Beliebtheit. Die Vorteile sind eine oft bessere nichtlineare Konvergenz, eine Verminderung der notwendigen Synchronisationspunkte in einer parallelen Implementierung und eine stärkere Lokalisierung der Rechenarbeit, was insgesamt besser zu modernen Rechnerarchitekturen passt. Nichtlineare Ein- und Zwei-Level-Gebietszerlegungsverfahren wurden bereits erfolgreich zur effizienten Lösung von Navier-Stokes-Problemen eingesetzt [1–4]. Vor Projektstart wurden allerdings nur Grobgitterprobleme betrachtet, die auf einer groben Diskretisierung des Problems basieren. Im Gegensatz dazu haben wir in diesem Projekt Ansätze in den Fokus genommen, die auf den in [5, 6] vorgestellten monolithischen Basisfunktionen basieren. Zudem haben wir erstmals die sehr robusten nichtlinearen Gebietszerlegungsansätze aus [7, 8], für die keine groben Diskretisierungen erforderlich sind, betrachtet. Auch wurden nichtlineare Gebietszerlegungsansätze bereits vor Projektstart für die Simulation von Blutfluss in - zum Teil - patientenspezifischen Blutgefäßen betrachtet [9, 10]. Oft ist es ausreichend, die nichtlinearen Ansätze nur in kritischen Regionen des Berechnungsgebietes zu betrachten. Hier ist die Arbeit [11] wegweisend.

Der Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen (Prof. Dr. Axel Klawonn) hatte ebenfalls bereits vor Projektstart eine langjährige Expertise in der Entwicklung parallel skalierbarer, iterativer Löser für partielle Differentialgleichungen, mit einem Fokus auf der Entwicklung und parallelen Implementierung neuer, robuster und schneller Gebietszerlegungsverfahren und Multilevelmethoden. Die parallelen Umsetzungen in den Paketen Trinos [12] und PETSc [13] werden dabei regelmäßig auf Supercomputern entwickelt und auf diesen getestet und skaliert [14–18]. Bisherige Anwendungen waren in den Bereichen der Kontinuumsmechanik [14, 19, 20]

und der Lebenswissenschaften - darunter Fluid-Simulationen bzw. gekoppelte Anwendungen wie Fluid-Struktur-Interaktion [5, 6]. Zur Lösung der letztgenannten Beispiele wurde sehr erfolgreich das ebenfalls in diesem Projekt weiterentwickelte Paket FROSch [16] verwendet. Im Teilprojekt der Universität zu Köln wurden nun die monolithischen Grobgitterräume aus [5, 6] in die nichtlinearen Zwei-Level-Schwarz-Verfahren aus [7, 8] zur Beschleunigung der nichtlinearen Konvergenz integriert und die resultierenden Verfahren parallel implementiert.

1.3 Planung und Ablauf

Das gesamte Projekt gliedert sich in 4 zentrale Arbeitspakete.

- **AP1 - Methodenentwicklung:** Algorithmische Weiter- und Neueentwicklung von Methoden zur schnelleren und robusteren Lösung von CFD-Problemen, maßgeschneidert für den späteren Einsatz in FEAT und StrömungsRaum und auf modernen Hardware-Architekturen.
- **AP2 - Parallele Implementierung:** Parallele Implementierung der in AP1 entwickelten Verfahren.
- **AP3 - Skalierung und Performance Engineering:** Definition von Benchmarkproblemen (ProxyApps), Skalierbarkeitstests auf modernen Supercomputern und anschließendes sowie begleitendes Performance Benchmarking.
- **AP4 - Integration in FEATFLOW und Validierung in StrömungsRaum:** Integration der parallelen Implementierungen in StrömungsRaum durch schaffung von skalierbaren Software-Interfaces zu FEAT bzw. FEATFLOW.

Die wissenschaftlichen und technischen Beiträge der Projektpartner griffen komplexer ineinander. Die TU Dortmund (TU Do) entwickelte und erweiterte zentrale numerische Kernverfahren, insbesondere im Bereich geometrischer Mehrgittermethoden, zeitsimultaner Newton-Krylov-Mehrgitter-Verfahren sowie Prehandling-basierter Pressure-Poisson-Löser. Die Universität zu Köln (UzK) und die TU Freiberg (TUF) brachten mit FROSch robuste überlappende Schwarz-Gebietszerlegungsverfahren sowie algebraische Mehr-Level-Verfahren ein, die für große und geometrisch anspruchsvolle Fluidprobleme neue Skalierungsoptionen eröffneten. Das Forschungszentrum Jülich trieb (FZJ) die zeitparallelen Integrationsverfahren und deren Portierung auf großskalige HPC-Systeme voran, während FAU Erlangen (FAU) die systematische Performance-Analyse, Proxy-App-basierte Modellierung und hardware-orientierte Optimierung der kritischen Routinen verantwortete. IANUS übernahm die Übersetzung dieser Fortschritte in ein industriell verwertbares Gesamtsystem durch

Integration, Testautomatisierung, Benchmarking, Deployment und Bereitstellung in StrömungsRaum[®].

Der projektspezifische Mehrwert lag gerade nicht in der bloßen Parallelität dieser Arbeiten, sondern in ihrer konvergenten Zusammenführung. Die im Verbund entwickelten Verfahren wurden so in eine Plattform eingebettet, in der neue Löser und Laufzeitoptimierungen unter realen Randbedingungen gegen Referenzfälle, Prozessdaten, Ergebnisdarstellungen und Nutzerinteraktionen geprüft werden konnten. Damit entstand ein Entwicklungspfad, in dem jeder Partnerbeitrag nicht nur wissenschaftlich bewertbar, sondern auch hinsichtlich seines operativen Nutzens für Stabilität, Laufzeit, Genauigkeit und Skalierbarkeit des Gesamtsystems messbar wurde.

Das Teilprojekt der Universität zu Köln ist an allen vier APs in diversen Unterarbeitspaketen beteiligt. Verantwortlich ist das Teilprojekt dabei für APs zum Thema der nichtlinearen Gebietszerlegungsverfahren. Auf diese wird in diesem Abschlussbericht entsprechend im Detail eingegangen. In AP1.2 werden neue Zwei-Level Gebietszerlegungsverfahren für Fluid-Probleme entwickelt. In AP1.3 der lokalisierte Einsatz in speziellen Regionen mit hoher Nichtlinearität. Die neuen Zwei-Level-Verfahren werden in AP2.2 konsequent in die parallele Softwareumgebung bestehend aus FROSch (Fast and Robust Overlapping Schwarz) und der FEDDLib implementiert. In AP3 werden Skalierbarkeitstests für Benchmarkprobleme durchgeführt. Die für die Performance kritischen Kernels sind dabei identisch zu jenen des linearen Schwarz-Vorkonditionierers, z.B. das Aufstellen und Lösen des Grobgitterproblems. Aufgrund der gleichen Software-Basis fließen die in FROSch erzielten Fortschritte der Teilprojekte der TU Freiberg und der FAU direkt in die Software ein. Hier ist die UzK für keines der Unterarbeitspakete direkt verantwortlich und wir verweisen auf die Berichte der Teilprojekte der TU Freiberg und der FAU. In AP4.1 wird ein skalierbares Interface zwischen den nichtlinearen Schwarz-Verfahren in der FEDDLib und FEAT3 geschaffen. Weitere Details zu der Umsetzung der Planung und den Erfolgen finden sich in Kapitel 2.

1.4 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Über die enge Kooperation innerhalb des Konsortiums hinaus gab es im Rahmen dieses Teilprojektes regen Austausch mit den FROSch-Entwicklern im In- und Ausland; siehe <https://shylu-frosch.github.io/team/>, sowie mit der internationalen Sparse-Solver-Community bestehend aus Trilinos-, PETSc- und Hypre-Entwicklern. Bei der Entwicklung von robusten nichtlinearen Drei-Level Schwarz-Verfahren wurde mit

Alexander Heinlein (TU Delft, Niederlande) zusammengearbeitet.

2 Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele

Das Vorhaben *StroemungsRaum* verfolgte das Ziel, die industrielle Simulation-as-a-Service-Plattform StrömungsRaum[®] durch die systematische Integration exascale-relevanter Methoden, skalierbarer Löseransätze und hardware-naher Performance-Optimierungen substanziell weiterzuentwickeln. Ausgangspunkt war die im industriellen Einsatz etablierte Kopplung der Cloud-Plattform mit dem Simulationskern FEATFLOW. Die wissenschaftlich-technische Herausforderung bestand darin, die in den Teilvorhaben der Verbundpartner entwickelten Verfahren nicht isoliert zu demonstrieren, sondern in eine durchgängig nutzbare, belastbare und für Nicht-HPC-Expertinnen und -Experten zugängliche Anwenderlösung zu überführen. Im Zentrum stand damit nicht allein die Entwicklung neuer Algorithmen, sondern deren reproduzierbare, validierte und produktionsnahe Bereitstellung innerhalb eines Live-Systems.

Die Projektlogik war dabei explizit vertikal angelegt: Methodenentwicklung, parallele Implementierung, Performance Engineering, Systemintegration, Referenzfall-Definition, Benchmarking und Webservice-Bereitstellung wurden nicht als getrennte Ketten, sondern als eng gekoppelte Entwicklungsstufen behandelt. Gerade diese Durchgängigkeit war entscheidend, um wissenschaftliche Fortschritte in einen für Endnutzer unmittelbar wahrnehmbaren Mehrwert zu übersetzen. Der Nutzen des Verbunds entstand somit wesentlich daraus, dass die Beiträge der Partner nicht auf dem Niveau einzelner Prototypen verblieben, sondern über FEATFLOW in StrömungsRaum[®] integriert, über CI/CD abgesichert und im laufenden System test- und bewertbar gemacht wurden.

Das hier präsentierte Teilprojekt hat zu den Arbeitspaketen und Projektzielen wie folgt beigetragen:

Das Kernziel des Teilvorhabens war die algorithmische Entwicklung und parallele Implementierung von nichtlinearen Gebietszerlegungsverfahren, genauer gesagt nichtlinearer Schwarz-Verfahren, im Software-Paket FROSch. Zudem stand die Nutzbarmachung der Verfahren in FEAT im Zentrum. Zu diesem Zweck wurde im Projektrahmen in Zusammenarbeit mit der TU Dortmund ein Interface zwischen FROSch und FEAT implementiert. Abweichend zu dem ebenfalls entwickelten Interface für

lineare Probleme, benötigen nichtlineare Schwarz-Verfahren Gitterinformationen aus FEAT und der Datenaustausch muss auf Ebene der Finiten Elemente geschehen. Hier reichte ein einfacher Austausch von Steifigkeitsmatrizen nicht aus - der Löser ist nicht rein algebraisch.

AP1 - Methodenentwicklung Die Arbeiten zu nichtlinearen Zwei-Level-Schwarz-Verfahren stellen einen der algorithmisch innovativsten Ansätze des Projekts dar, da diese Klasse von Algorithmen bislang nicht auf komplexe Navier-Stokes-Gleichungen angewendet wurde. Ein Großteil der Arbeit in diesem Teilprojekt floss dementsprechend in die algorithmische Weiterentwicklung der Verfahren und die Suche nach optimalen Parametern, insbesondere dem optimalen Grobgitterraum. Zunächst wurde in [21] erstmals überhaupt ein nichtlineares Schwarz-Verfahren mit monolithischem Grobgitterraum für ein Fluid-Problem getestet und war in der Lage, speziell für hohe Reynolds-Zahlen, das klassische Newton-Verfahren im Hinblick auf die nichtlineare Konvergenz und Robustheit zu übertreffen. Diese ersten Resultate wurden in MATLAB berechnet und dienten als erfolgreicher Prototyp für die parallele Implementierung im FROSch-Framework. Exemplarische Resultate finden sich in Abb. 1. Die Resultate dienen als ein erster Nachweis, dass nichtlineare Schwarz-Verfahren das Potential haben, eine wesentlich schnellere Konvergenz zu erzeugen und das für komplexe nichtlineare Fluid-Probleme. **Hiermit können die Meilensteine 1.2.1 und 1.2.2 als erfolgreich erreicht betrachtet werden.**

Die verbesserte Skalierbarkeit und schnellere Laufzeit der an der TU Freiberg entwickelten linearen Drei-Level Schwarz-Verfahren kann aus algorithmischer Sicht nicht ohne Weiteres in nichtlineare Gebietszerlegungsverfahren integriert werden. Auf eine detaillierte Erläuterung der algorithmischen Schwierigkeiten verzichten wir hier, aber der Kern des Problems ist, dass in nichtlinearen Schwarz-Verfahren der Vorkonditionierer auf natürliche Weise im linearisierten Problem integriert ist. Ein Austausch des Vorkonditionierers ausschließlich im linearen System ist somit nicht möglich ohne die Konvergenz zu beeinträchtigen. Um zukünftig auch die gemeinsame Nutzung von nichtlinearen Verfahren und Drei-Level Ansätzen zu gewährleisten, haben wir verschiedene Varianten gänzlich neuer nichtlinearer Drei-Level Schwarz-Verfahren entwickelt. Einige Ergebnisse, hier exemplarisch für ein nichtlineares Elastizitätsproblem, finden sich in Tabelle 1. Die Ergebnisse zeigen, dass verschiedene Varianten von nichtlinearem Drei-Level Schwarz klassisches Newton-Verfahren im Hinblick auf die nichtlineare Konvergenz schlagen. **Die Arbeiten an nichtlinearen Drei-Level-varianten geht über die ursprüngliche Planung des Projektes hinaus.**

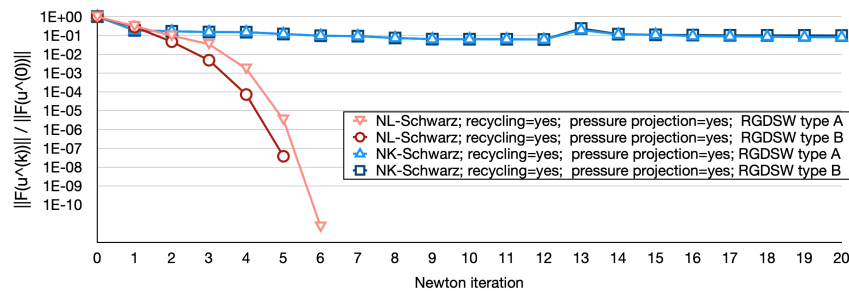


Abb. 1: Vergleich von Newton-Krylov mit einem linearen Schwarz-Vorkonditionierer und dem neuen nichtlinearen Schwarz-Verfahren. Der Test ist ein klassisches Lid-Driven Cavity Problem bei Reynolds-Zahl $Re = 1500$. Zwei verschiedene Grobgitterräume vom Typ RGDSW (Reduced Generalized Dryja-Smith-Widlund) wurden verglichen. In [21] wurden weitere verschiedene Parameter verglichen.

Die ausgezeichneten Eigenschaften bzgl. Konvergenz und Skalierbarkeit (s. nächsten Abschnitt) der entwickelten nichtlinearen Verfahren machten einen lokalisierten Einsatz für den Projektfortschritt überflüssig, weshalb das AP 1.3 nach einigen initialen Tests nicht weiterverfolgt wurden. **Somit wurde auch Meilenstein 1.3.1 als nicht mehr sinnvoll betrachtet.**

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass im Bereich der algorithmischen Entwicklung die Ziele des Teilprojekts erreicht und teilweise sogar übertroffen wurden, vor allem durch die Entwicklung von nichtlinearen Drei-Level Varianten.

AP2 - Parallele Implementierung Als erster Schritt wurde die prototypische MATLAB-Implementierung in die in-house Finite-Elemente-Software-Bibliothek FEDDLib übertragen. Diese ist stark gekoppelt an das Paket FROSch (Fast and Robust Overlapping Schwarz), welches eine parallele Implementierung algebraischer linearer Schwarz-Verfahren ist und die parallel effiziente lineare Algebra von Trilinos nutzt. Die Integration nichtlinearer Schwarz-Verfahren war ein aufwendiger Prozess, da FROSch konzeptionell ein algebraischer linearer Löser ist, nichtlinearer Schwarz-Verfahren jedoch immer Informationen wie das Finite-Elemente-Gitter benötigen sowie Zugriff auf nichtlineare Löser. Dennoch konnten die meisten effizienten Funktionen aus FROSch, beispielsweise zur Berechnung der Grobgitterbasisfunktionen, ausgenutzt werden. Somit flossen auch sämtliche Fortschritte im Performance-Benchmarking an FROSch in Zusammenarbeit mit der FAU Erlangen-Nürnberg in die nichtlinearen Löser. Schlussendlich war die Integration der nichtlinearen Schwarz-Verfahren in das Software-Ökosystem aus FEDDLib und FROSch erfolgreich und wurde in [22, 23] dokumentiert. In dieser Arbeit finden sich auch einige erfreuliche

Tab. 1: Verschiedene Zwei- und Drei-Level Schwarz-Verfahren. **NK** steht für klassisches Newton-Krylov mit einem linearen Schwarz-Vorkonditionierer und **NL** steht für nichtlineares Schwarz. Die Kürzel *aa* oder *mm* beschreiben die Kopplung zwischen den jeweiligen Leveln, wobei *a* für additiv und *m* für multiplikativ steht. Der Test ist der eines sich unter einer Volumenlast durchbiegenden Balkens, wobei die Kraft von links nach rechts zunimmt. Die Anzahl nichtlinearer Iterationen sowie die Anzahl GMRES Iterationen in Klammern wird verglichen. Zu erkennen ist, dass die Drei-Level Varianten von nichtlinearem Schwarz an die Performanz der Zwei-Level Varianten heranreichen und insbesondere NK ausstechen.

Neo-Hooke; Homogeneous; with rotations outer its (GMRES its) with increasing load $p = 4; H/h = 8; \text{overlap } \delta = 1$ 16×16 subdomains; 4×4 subregions					
method /load	With rotations				
	2	5	10	12.5	15
NL; two-level	3 (90)	3 (91)	3 (96)	3 (98)	3 (103)
NK; two-level	4 (103)	5 (135)	6 (166)	7 (214)	fail
NL; three-level; aa	4 (155)	4 (160)	5 (220)	5 (224)	5 (228)
NL; three-level; mm	3 (96)	4 (136)	4 (134)	4 (136)	4 (140)
NL; three-level; mm; BFGS	3 (96)	4 (136)	4 (134)	4 (136)	4 (140)
NK; three-level; mm	4 (117)	5 (150)	6 (188)	7 (236)	fail

Skalierbarkeitsresultate und einige Beispiele, wo nichtlineares Schwarz die klassischen Verfahren auch im Hinblick auf die Zeit zur Lösung und der Skalierbarkeit schlägt. Ein Vergleich der Robustheit gegenüber hohen Reynolds-Zahlen findet sich in Abb. 2. Die exzellente parallele Skalierbarkeit wird durch die Ergebnisse in Abb. 3 demonstriert. Insgesamt ist die parallele Implementierung und Integration in FROSch gelungen und die nichtlinearen Schwarz-Verfahren zeigen für Benchmark-Probleme wie Lid-Driven-Cavity eine deutliche Beschleunigung und vor allem eine Steigerung der Robustheit gegenüber klassischen Newton-Verfahren. Die Ziele in diesem Bereich und auch die **Meilensteine 2.2.1 und 2.2.2 wurden somit weitestgehend erreicht**, einzig Rechnungen auf größeren Clustern und Rechnungen für komplexere Fluid-Probleme stehen noch aus und konnten aufgrund der gekürzten Projektlaufzeit und des verspäteten Projektstarts nicht mehr rechtzeitig durchgeführt werden.

AP3 - Skalierung und Performance Engineering Über entsprechende erfolgreiche Skalierbarkeitstests im Teilprojekt haben wir im vorigen Abschnitt bereits detailliert berichtet. Die Performance-Untersuchung der nichtlinearen Schwarz Implementierung ergab, dass die wesentlichen Performance-Bottlenecks alle bei der Lösung

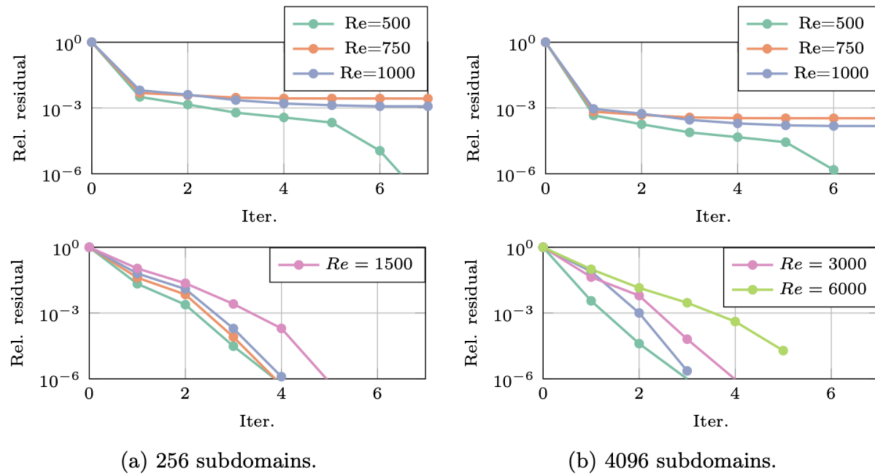


Abb. 2: Vergleich von nichtlinearem Schwarz und Newton-Krylov-Schwarz für verschiedene Reynolds-Zahlen. Parallele Resultate für ein Lid-Driven-Cavity-Problem mit 256 bzw. 4096 Teilgebieten und MPI ranks, berechnet mit FROSch und FEDDLib.

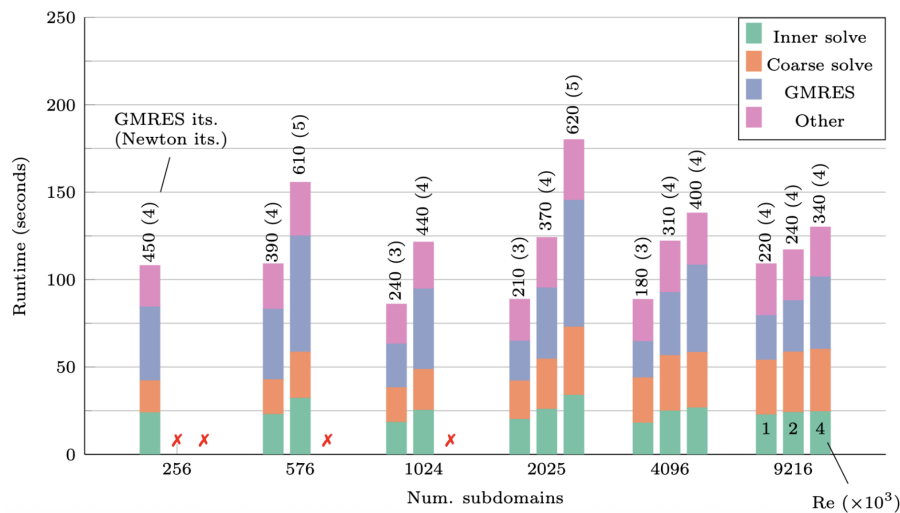


Abb. 3: Parallele Skalierbarkeit von nichtlinearem Schwarz in FROSch. Ein rotes x bedeutet hier Nicht-Konvergenz des Verfahrens. Es ist aber anzumerken, dass dies vor allem für Probleme mit kleinem Grobgitterraum und wenigen Teilgebieten passiert. Ein reichhaltiger Grobgitterraum ist notwendig, damit nichtlineare Zwei-Level Schwarz-Verfahren ihre volle Stärke entfalten. Zudem sei gesagt, dass Newton-Krylov in allen diesen Fällen ebenfalls nicht konvergiert hat.

der linearisierten Probleme auftreten bzw. im Aufstellen und Lösen des linearisierten Grobgitterproblems. Diese sind identisch zu den Performance-Bottlenecks der linearen Schwarz-Verfahren. Konsequenterweise verweisen wir für die detaillierte Beschreibung der Erfolge in diesem Bereich auf die Abschlussberichte der Teilprojekte der TU Freiberg und der FAU. Die erzielten Verbesserungen fließen über das FROSch-Paket direkt in unsere nichtlinearen Löser ein.

AP4 - Software-Interface zu FEAT Eine Schwierigkeit nichtlinearer Gebietszerlegungsverfahren ist es, dass sie generell nicht algebraisch sind. Das bedeutet, dass sie nicht ohne weitere Daten und Informationen beispielsweise auf eine gegebene Jacobi-Matrix angewendet werden können. Die meisten nichtlinearen Löser sind nicht-algebraisch. Dies ist jedoch bei den linearen Zwei- oder Drei-Level Schwarz-Lösern in FROSch nicht so. Resultierend arbeitet das von der TU Freiberg und TU Dortmund zusammen entwickelte Interface zwischen FROSch und FEAT durch Übergabe der Matrix aus FEAT an den Löser in FROSch. Dies ist jedoch nicht genügend Information für die nichtlineare Schwarz-Verfahren. Somit musste das Interface erweitert werden, sodass ebenfalls Gitterinformationen von FEAT in die FEDDLib übertragen werden können. Die Assemblierung der nötigen Operatoren im nichtlinearen Löser erfolgt schließlich durch elementweisen Zugriff aus der FEDDLib auf FEAT3. Die gesamte Integration der Software war trotz der erhöhten Schwierigkeiten erfolgreich und das gesamte Kopplungskonzept kann in Abb. 4 betrachtet werden. In Abb. 5 finden sich Lid-Driven-Cavity Resultate, die zeigen, dass nichtlineare Schwarz Löser nun für Probleme in FEAT genutzt werden können. Das Interface ist zudem parallel skalierbar und effizient. Zusammenfassend wurden die nichtlinearen Schwarz-Verfahren erfolgreich innerhalb der Projektlaufzeit in FEAT nutzbar gemacht und **Meilensteine 4.1.1 und 4.1.2 wurden erreicht.**

3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Das Projektkonsortium hat durch seine Zusammensetzung aus Universitäten, Forschungseinrichtungen mit HPC-Betrieb, Nutzenden von HPC-Software und einem KMU eine interdisziplinäre Bearbeitung des Forschungsthemas gewährleistet, die aufgrund der hohen Komplexität der Aufgabenstellung und dem sowohl wissenschaftlichen also auch wirtschaftlichen Risiko nur mit Fördermitteln finanzierbar war. Der erhebliche Mehraufwand war nur mit Hilfe zusätzlicher, qualifizierter Mitarbeiter:innen zu bewältigen. In der für das Forschungszentrum Jülich maßgeblichen Programm-orientierten Förderung (PoF) ist dieser Aufwand nicht vorgesehen gewesen,

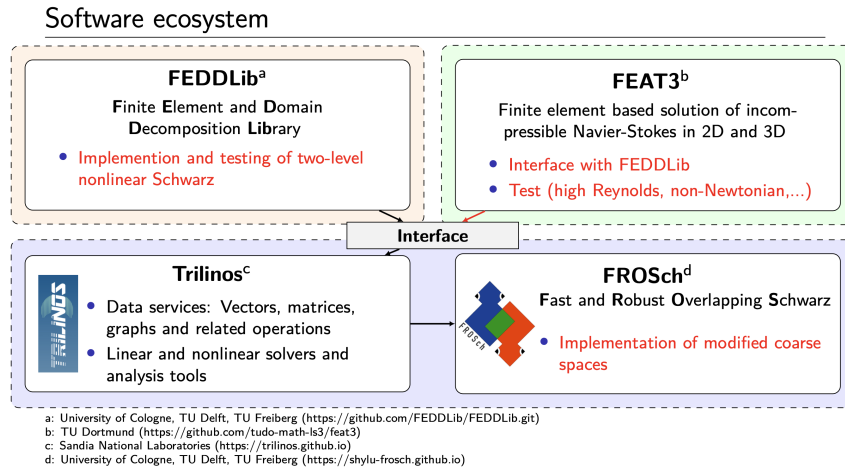


Abb. 4: Schematische Übersicht über die Kopplung der im Projekt genutzten Software-Pakete.

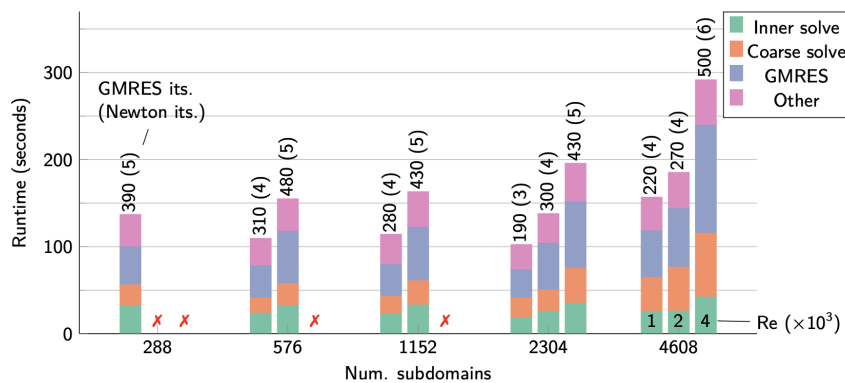


Abb. 5: Parallele Skalierbarkeit von nichtlinearem Schwarz für ein Fluid-Problem aus FEAT, berechnet unter Nutzung des Interfaces.

so dass hier eine gesonderte Förderung durch das BMFTR notwendig wurde. Auch der Einstieg eines KMU wie IANUS in dieses Feld war ohne Förderung unmöglich. Insbesondere aus Sicht des Simulationsdienstleistungsgeschäftes ist die ausländische Konkurrenz in Form von generalistischen Softwarelösungen sehr stark. Mit *StrömungsRaum*® wurde zwar ein grundsätzlich ganz anderer Ansatz an den Markt gebracht, da er auf individuellen, stabilen, hochverfügbaren und schnellen Simulationslösungen basiert. Dieser kann aber nur erfolgreich sein, wenn man Vorteile insbesondere durch geringere Stückkosten der Simulationen generieren kann. Europäische Initiativen versuchen zwar, KMU mit Accelerator Programmen wie EIC zu stärken und auch die HPC Infrastruktur stärker in den Vordergrund zu stellen und Industrie mit Datacentern stärker zu vernetzen (z.B. EuroCC). Um deutsche Digitalprodukte in diesem Bereich weiter voranzutreiben, ist aber eine nationale Drittmittelbeteiligung unerlässlich, da diese Instrumente eher nicht auf der wissenschaftlichen Ebene greifen, sondern an Scaleup und Marktdurchdringung nahezu fertiger Lösungen ansetzen.

Die Zusammensetzung des Projektkonsortiums mit seinem klaren Schwerpunkt in Deutschland, mit der Thematik und der konkreten Ausrichtung auf exascale-fähige Strömungssimulation mit industrieller Relevanz ist einzigartig. Eine anderweitige Förderung etwa durch das BMWF war nicht denkbar, da erst in diesem Projekt die entscheidenden Schritte hin zu einer Nutzbarmachung der Technologie für industriell relevante Probleme erreicht wurden. Umgekehrt war aufgrund des Umfangs und der Ausrichtung die Einwerbung von DFG-Mitteln in dieser Form nicht realistisch. Allein durch Nutzung bilateraler Förderprogramme (bspw. innerhalb der Helmholtz-Gemeinschaft) war die Erreichung des Gesamtziels nicht realisierbar. Aufgrund der essentiellen deutschen Kompetenzen, der Zielsetzung und der hier vorliegenden technisch-methodischen Tiefen kamen europäische Fördermittel (z.B. durch EuroHPC JU, Horizon Europe oder Centers of Excellence (CoE), aber auch durch etwaige bilaterale Calls bspw. mit Frankreich) ebenfalls nicht in Frage.

4 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Dieser Abschnitt enthält Angaben zu den aufgewendeten Personal- und Reisekosten im Verbundvorhaben StroemungsRaum.

Für die Durchführung des Vorhabens wurde an der UzK ein Fördervolumen von 209.476,97 € abgerufen, siehe Tabelle 2. An der UzK wurde die Zuwendung primär dazu verwendet, einen wissenschaftlichen Mitarbeiter zu finanzieren. Der Rest der Zuwendung wurde für Reisen von und zu Kooperationspartnern sowie für die aktive

Kostenart	2022	2023	2024	2025	Summe
Personalkosten		51.489,48	71.956,71	78.629,39	202.075,58
Reisekosten		281,40	3.634,11	3.485,88	7.401,39
Sonstiges					
Summe	0	51.770,88	75.590,82	82.115,27	209.476,97

Tab. 2: Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises (in EUR)

Teilnahme an Konferenzen und Workshops zur Vorstellung der erzielten Resultate verwendet. Hinzu kommt die Projektpauschale in Höhe von 41.895,39 €, was sich insgesamt auf 250.897,54 € Fördervolumen summiert.

5 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

5.1 Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Die Universität zu Köln hat keine wirtschaftliche Verwertung geplant.

5.2 Wissenschaftliche-technische Anschlussfähigkeit

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

Besonders hervorzuheben ist die erfolgreiche Überführung von Verfahren aus den Bereichen Mehrgitter, Gebietszerlegung, Zeitparallelisierung und Prehandling in ein gemeinsames Gesamtsystem mit kontinuierlicher Integrations- und Testlogik. Auf dieser Grundlage konnten neue Leistungsklassen für industrierelevante CFD-Szenarien erschlossen werden. Die Ergebnisse zeigen damit, dass exascale-orientierte Methodenentwicklung dann einen hohen Verwertungsgrad erreicht, wenn sie nicht nur auf Rechensystemen skaliert, sondern zugleich über standardisierte Integrationspfade in anwendungsnahe Plattformen übersetzt wird.

Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse wurden auf verschiedenen internationalen

Fachtagungen (ECCOMAS, ENUMATH, SIAM, GAMM) vorgestellt und dort diskutiert. Die wesentlichen Neuerungen wurden in verschiedenen wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht, sind eingereicht oder werden vorbereitet.

Konkret wurden die im Laufe des Projekts gewonnenen Ergebnisse der UzK unter anderem auf folgenden internationalen Tagungen vorgestellt: der ECCOMAS (2024), der Domain Decomposition Conference (2024,2025) und der SIAM Conference on Parallel Processing (2024,2026). Durch das Projekt wurde ferner die Zusammenarbeit der UzK insbesondere mit den regionalen Partnern TUDo und FZJ formalisiert und weiter vertieft. Dies trägt zum einen zu einer Verbreiterung der Expertisen bei, zum anderen bietet eine solche Kooperation vielfältige Möglichkeiten zur weitergehenden Antragstellung im Bereich der Strömungssimulationen, paralleler Löser oder des Exascale-Computings auf EU-Ebene (EuroHPC), auf Bundesebene (z.B. BMBF, BMWK) und auch Länderebene (z.B. MKW in NRW).

6 Neue projektrelevante FE-Ergebnisse von dritter Stelle

Während der Projektlaufzeit wurden die relevanten Fortschritte im Umfeld von Exascale-Computing, zeitparallelen Integrationsverfahren, Gebietszerlegungsmethoden, Performance Engineering und GPU-orientierten Lösertechniken kontinuierlich beobachtet und in die Projektarbeit eingeordnet. Für das Vorhaben war dabei weniger die Existenz einzelner externer Forschungsbeiträge entscheidend als die Frage, inwieweit diese in eine industriell nutzbare und dauerhaft betreibbare Simulationsplattform überführt werden können. Genau an dieser Stelle unterscheidet sich das Vorhaben wesentlich vom Stand externer Entwicklungen: Der Projektfortschritt bestand nicht nur in der Adaption wissenschaftlicher Methoden, sondern in deren kontrollierter Operationalisierung innerhalb eines livefähigen SaaS-Systems.

Die im Projekt verfolgte Verbindung aus FEATFLOW, FROSch-nahen Erweiterungen, zeitparallelen Ansätzen, GPU-Portierung, Performance-Modellierung und CI/CD-gestützter Integration stellt daher einen eigenständigen Innovationsbeitrag dar. Sie hebt die Ergebnisse über den Charakter isolierter Laborprototypen hinaus und schafft einen Verwertungsgrad, der für industrielle Anwender entscheidend ist.

Spezifisch für das Teilprojekt der UzK wurde die Expertise von Alexander Heinlein (TU Delft) im Bereich der linearen Löser in FROSch in Anspruch genommen, vor allem bei der initialen Beratung in Implementierungsfragen.

7 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

- Two-level nonlinear Schwarz methods - a parallel implementation with application to nonlinear elasticity and incompressible flow problems, K. Ho, A. Klawonn, and M. Lanser [23]
- Nonlinear monolithic two-level Schwarz methods for the Navier-Stokes Equations, A. Klawonn and M. Lanser [21]
- Nonlinear Two-Level Schwarz Methods: A Parallel Implementation in FROSch, A. Heinlein, K. Ho, A. Klawonn, and M. Lanser [22]
- **(geplant)** Three-level nonlinear Schwarz methods, A. Heinlein, A. Klawonn, and M. Lanser

8 Sonstige Literatur

- [1] Li Luo, Xiao-Chuan Cai, Zhengzheng Yan, Lei Xu, and David E. Keyes. A multilayer nonlinear elimination preconditioned inexact Newton method for steady-state incompressible flow problems in three dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.* **42**, B1404–B1428 (2020), [\[link\]](#).
- [2] Li Luo, Lulu Liu, Xiao-Chuan Cai, and David E. Keyes. Fully implicit hybrid two-level domain decomposition algorithms for two-phase flows in porous media on 3D unstructured grids. *J. Comput. Phys.* **409**, 109312, 19 (2020), [\[link\]](#).
- [3] Li Luo, Xiao-Chuan Cai, and David E. Keyes. Nonlinear preconditioning strategies for two-phase flows in porous media discretized by a fully implicit discontinuous Galerkin method. *SIAM J. Sci. Comput.* **43**, S317–S344 (2021), [\[link\]](#).
- [4] Xiao-Chuan Cai, David E. Keyes, and Leszek Marcinkowski. Non-linear additive Schwarz preconditioners and application in computational fluid dynamics. In *Special Issue: LMS Workshop on Domain Decomposition Methods in Fluid Mechanics*, vol. 40(12), 1463–1470 (Wiley, 2002), [\[link\]](#).
- [5] Alexander Heinlein, Christian Hochmuth, and Axel Klawonn. Monolithic overlapping Schwarz domain decomposition methods with GDSW coarse spaces for incompressible fluid flow problems. *SIAM Journal on Scientific Computing* **41**, C291–C316 (2019), [\[link\]](#).
- [6] Alexander Heinlein, Christian Hochmuth, and Axel Klawonn. Reduced dimension

- GDSW coarse spaces for monolithic Schwarz domain decomposition methods for incompressible fluid flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **121**, 1101–1119 (2020), [link].
- [7] Alexander Heinlein and Martin Lanser. Additive and hybrid nonlinear two-level Schwarz methods and energy minimizing coarse spaces for unstructured grids. *SIAM J. Sci. Comput.* **42**, A2461–A2488 (2020), [link].
- [8] Alexander Heinlein, Axel Klawonn, and Martin Lanser. Adaptive nonlinear domain decomposition methods. *SIAM J. Sci. Comput.* (2022). Accepted for publication, Preprint at <https://kups.ub.uni-koeln.de/52537/>.
- [9] Rongliang Chen, Bokai Wu, Zaiheng Cheng, Wen-Shin Shiu, Jia Liu, Liping Liu, Yongjun Wang, Xinhong Wang, and Xiao-Chuan Cai. A parallel non-nested two-level domain decomposition method for simulating blood flows in cerebral artery of stroke patient. *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.* **36**, e3392, 20 (2020).
- [10] Li Luo, Wen-Shin Shiu, Rongliang Chen, and Xiao-Chuan Cai. A nonlinear elimination preconditioned inexact Newton method for blood flow problems in human artery with stenosis. *J. Comput. Phys.* **399**, 108926, 20 (2019), [link].
- [11] S. Gong and X.-C. Cai. A nonlinear elimination preconditioned inexact Newton method for heterogeneous hyperelasticity. *SIAM J. Sci. Comput.* **41**, S390–S408 (2019).
- [12] <https://trilinos.github.io>.
- [13] Satish Balay, Shrirang Abhyankar, Mark F. Adams, Steven Benson, Jed Brown, Peter Brune, Kris Buschelman, Emil M. Constantinescu, Lisandro Dalcin, Alp Dener, Victor Eijkhout, William D. Gropp, Václav Hapla, Tobin Isaac, Pierre Jolivet, Dmitry Karpeev, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Fande Kong, Scott Kruger, Dave A. May, Lois Curfman McInnes, Richard Tran Mills, Lawrence Mitchell, Todd Munson, Jose E. Roman, Karl Rupp, Patrick Sanan, Jason Sarich, Barry F. Smith, Stefano Zampini, Hong Zhang, Hong Zhang, and Junchao Zhang. PETSc Web page. <https://petsc.org/> (2021), [link].
- [14] Axel Klawonn, Martin Lanser, and Oliver Rheinbach. FE²TI: Computational scale bridging for dual-phase steels. In *IOS Series Advances in Parallel Computing, Volume 27, Parallel Computing: On the Road to Exascale; Proceedings*

- of *ParCo2015*, 797–806 (2016). Also TUBAF Preprint: 2015-12, <http://tu-freiberg.de/fakult1/forschung/preprints>.
- [15] Axel Klawonn, Martin Lanser, and Oliver Rheinbach. Toward extremely scalable nonlinear domain decomposition methods for elliptic partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.* **37**, C667–C696 (2015), [\[link\]](#).
- [16] Alexander Heinlein, Axel Klawonn, Sivasankaran Rajamanickam, and Oliver Rheinbach. FROSch: A fast and robust overlapping Schwarz domain decomposition preconditioner based on Xpetra in Trilinos. In *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XXV*, 176–184 (Springer International Publishing, 2020), [\[link\]](#).
- [17] Alexander Heinlein, Oliver Rheinbach, and Friederike Röver. Parallel scalability of three-level FROSch preconditioners to 220 000 cores using the theta supercomputer. *SIAM J. Sci. Comput.* (2022). [Http://dx.doi.org/10.1137/21M1431205](http://dx.doi.org/10.1137/21M1431205), in press. Preprint at <https://tu-freiberg.de/fakult1/forschung/preprints>.
- [18] Alexander Heinlein, Axel Klawonn, Martin Lanser, and Janine Weber. A frugal FETI-DP and BDDC coarse space for heterogeneous problems. *Electron. Trans. Numer. Anal.* **53**, 562–591 (2020), [\[link\]](#).
- [19] Axel Klawonn, Stephan Köhler, Martin Lanser, and Oliver Rheinbach. Computational homogenization with million-way parallelism using domain decomposition methods. *Comput. Mech.* **65**, 1–22 (2020), [\[link\]](#).
- [20] Axel Klawonn, Martin Lanser, Oliver Rheinbach, and Matthias Uran. Fully-coupled micro–macro finite element simulations of the nakajima test using parallel computational homogenization. *Computational Mechanics* **68**, 1153–1178 (2021), [\[link\]](#).
- [21] Axel Klawonn and Martin Lanser. Nonlinear monolithic two-level Schwarz methods for the Navier-Stokes equations (2024), [\[link\]](#). Accepted for publication in Proceedings of the DD28 Conference, Springer Nature, [2409.03041](#).
- [22] Alexander Heinlein, Kyrill Ho, Axel Klawonn, and Martin Lanser. Nonlinear two-level schwarz methods: A parallel implementation in frosch (2024), [\[link\]](#). [2410.24138](#).
- [23] Kyrill Ho, Axel Klawonn, and Martin Lanser. Two-level nonlinear Schwarz

methods - a parallel implementation with application to nonlinear elasticity and incompressible flow problems (2026), [\[link\]](#). 2603.24542.