

Zwischenbericht 3

Zusammenfassender Bericht	01IH08003 A-E / SKALB
Lattice-Boltzmann-Methoden für skalierbare Multi-Physik-Anwendungen	
Laufzeit des Vorhabens:	01.01.2009 – 31.12.2011
Berichtszeitraum:	01.01.2010 – 30.06.2010

Beteiligte Projektpartner:

- RRZE Regionales Rechenzentrum Erlangen
- LSS Lehrstuhl für Systemsimulation der Universität Erlangen-Nürnberg
- HLRS Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart
- iRMB Institut für rechnergestützte Modellierung im Bauingenieurwesen der Technischen Universität Braunschweig
- TU-Do Lehrstuhl für Angewandte Mathematik und Numerik zusammen mit dem IT und Medien Centrum der Technischen Universität Dortmund
- IANUS IANUS Simulation GmbH

Projektkoordinator:

Prof. Dr. Gerhard Wellein
Regionales Rechenzentrum Erlangen
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
Martensstraße 1, 91058 Erlangen

Erlangen, 25.8.2010

Vorwort

Das Verbundprojekt *Lattice-Boltzmann-Methoden für skalierbare Multi-Physik-Anwendungen (SKALB)* wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der Initiative *HPC Software für skalierbare Parallelrechner* unter dem Förderkennzeichen 01IH08003 gefördert. Projektstart von SKALB war der 1. Januar 2009. Während der dreijährigen Förderung haben sich die Projektpartner das Ziel gesetzt, gemeinsam die effiziente Implementierung und Weiterentwicklung von Lattice-Boltzmann basierten Strömungslösern zur Simulation komplexer Multi-Physik-Anwendungen auf Rechnern der

Petascale-Klasse voranzutreiben. Dieser Bericht fasst wesentliche Aktivitäten und Ergebnisse des dritten Projekthalbjahres zusammen.

Lattice-Boltzmann-Methoden haben sich in den letzten Jahren als Standardverfahren für numerische Strömungssimulationen etabliert. Besonders bemerkenswert ist, dass dieser Ansatz schnell breite Verwendung auch jenseits der klassischen CFD-Anwendungen gefunden hat und so zum Beispiel in der Verfahrenstechnik oder der Biomedizin eingesetzt wird. Deutschland konnte sich neben den USA als weltweit führend bei der numerischen Umsetzung der Methode insbesondere im Bereich der Hochleistungsrechner etablieren. Um diese führende Stellung auch bei den nun absehbaren technologischen Veränderungen erhalten zu können, haben sich fünf Gruppen aus ganz Deutschland mit ausgewiesener Expertise in den Bereichen Lattice-Boltzmann-Methoden und Höchstleistungsrechnen für das Verbundprojekt SKALB zusammengeschlossen. Bestehende Lattice-Boltzmann-Verfahren sollen so zur Lösung praxisrelevanter Multi-Physik-Anwendungsfälle auf hochskalierenden Parallelrechnern erweitert und optimiert werden. Dabei werden alle Schritte vom Preprocessing über die Simulation bis hin zur Visualisierung adressiert. Mit Blick auf neue und sich abzeichnende (heterogene) Multi-/Many-Core Architekturen sollen schließlich Potenziale und Programmieransätze exemplarisch evaluiert werden. Die umfangreiche Beteiligung assoziierter Unternehmen sichert dem Projekt den Zugriff auf neueste Hardwaretechnologien sowie den Transfer der methodischen Erkenntnisse und Simulationstechniken in die Wirtschaft.

1 Organisatorisches

Die Koordination und Kooperation zwischen sechs Partnern an vier verschiedenen Orten herzustellen und aufrechtzuerhalten, ist von großer Bedeutung für das vorliegende Projekt.

Am 11./12. Februar fand an der TU Dortmund ein persönliches Treffen aller Projektpartner und aktuell involvierten Mitarbeiter mit etwa 25 Teilnehmern statt. Als Vertreter des assoziierten Partners BASF nahm Herr Dr. Winkler teil. Er stellte den BASF-Showcase detailliert vor, woraus sich eine intensive und fruchtbringende Diskussion mit allen Partnern entwickelte.

Weitere gemeinsame öffentliche Projektpräsentationen von verschiedenen Partnern fanden u.a. im Rahmen eines Minisymposiums auf der ECCOMAS 2010¹ (Organisation durch Prof. Turek) und während des Statusseminars der Gauß-Allianz im Juni in Schwetzingen statt.

Darüber hinaus gab es noch zahlreiche bilaterale Treffen, wobei die thematischen Schwerpunkte im abgelaufenen Berichtszeitraum auf den Themen “GPU-Programmierung” und “BASF-Showcase” lagen.

¹<http://www.eccomas-cfd2010.org/>

Teilweise basierend auf Arbeiten, die im Rahmen von SKALB durchgeführt wurden, sind diverse Partner in Projektskizzen für den zweiten HPC-Call des BMBF involviert. Dabei setzen insbesondere die Projektskizzen HPC-044 (Koordinator: Dr. Sutmann, IAS, FZ Jülich; SKALB-Partner: Prof. Wellein, RRZE) und HPC-067 (Koordinator: Prof. Bastian, IWR, Uni. Heidelberg; SKALB-Partner: Prof. Turek, TuDo) auf SKALB-Arbeiten auf und sollen diese für andere Communities weiterentwickeln und zugänglich machen.

2 Wissenschaftliche Ergebnisse

2.1 WP1: Untersuchungen an prototypischen Benchmarkkernen und Optimierung der LB-Applikationen

Im abgelaufenen Berichtszeitraum beschäftigten sich RRZE und HLRS hier vor allem mit der Frage, ob und in wie weit eine echte asynchrone MPI-Kommunikation applikationsseitig (RRZE) und durch die MPI-Basislibrary (HLRS) unterstützt werden kann.

2.2 WP2: Weiterentwicklung von LB-Methoden für praktische Anwendungen auf hochskalierenden Systemen

Gebietszerlegung und Lastbalancierung

Die beiden Erlanger Codes verfolgen verschiedene Ansätze bei der Repräsentation des Simulationsgebiets:

- WaLBerla (LSS): Repräsentation des gesamten Gebietes durch Patches
- ILBDC (RRZE): Datenhaltung der Fluid-Zellen; Nachbarschaftsbeziehungsliste enthält notwendige Geometrieigenschaften

In WaLBerla werden Lastunterschiede durch das Verteilen von kleineren Untergebieten ausgeglichen. Da hierfür pro Prozess mehrere kleine Untergebiete anstelle eines größeren vonnöten sind, wurde zunächst der durch die kleineren Untergebiete entstehende Einfluss auf die Performance untersucht. Hierbei wurde festgestellt, dass auf aktuellen CPUs der Einfluss vernachlässigbar ist, bei Simulationen auf GPUs jedoch signifikant ist. Außerdem wurden mit Hilfe des in WaLBerla implementierten Ansatzes heterogene Simulationen auf GPUs und CPUs erfolgreich statisch lastbalanciert. Die Ergebnisse wurden gemeinsam vom LSS und RRZE [P1] zur Publikation eingereicht.

Statische Lastbalancierung des Listenansatzes beim ILBDC-Code wird durch Aufteilen der Liste der Fluidzellen in gleich große Stücke erreicht, deren Anzahl den rechnenden Prozessen entspricht. Dadurch ist die Rechenlast gleichmäßig verteilt, allerdings kann durch das Zerschneiden der Liste die Anzahl der Kommunikationspartner stark variieren, da beim Zerschneiden keine topologischen Informationen berücksichtigt werden.

Das Aufstellen der Liste erfolgt im einfachsten Fall linear, d.h. die Zellen werden in einer geschachtelten Schleife über die Koordinatenrichtungen besucht. Struktur und Nachbarschaftsbeziehungen (d.h. Kommunikationsbeziehungen) können über ein „blocking“ der Schleifen mit einem Blocking-Faktor (BF) beeinflusst werden. Alternativ können raumfüllende Kurven, wie die Z-Kurve, zum Einsatz kommen.

Tabelle 1 zeigt das Performanceverhalten verschiedener Blocking-Faktoren und raumfüllender Kurven bei der Simulation der Durchströmung der von BASF bereitgestellten Geometrie einer Zylinderschüttung auf einer Cray XT-6 in Abhängigkeit von der Anzahl der Prozesse. Die Verwendung eines Blocking-Faktors oder einer raumfüllenden Kurve ist hinsichtlich der Performance immer von Vorteil. „Optimale“ Blocking-Faktoren können derzeit jedoch nur durch Versuche gefunden werden. Ein systematischer Vergleich mit raumfüllenden Kurven steht noch aus, soll aber als nächstes untersucht werden.

Knoten	Kerne	Performance [MFLUP/s]			Adjazenzliste
		Gesamt	Knoten	Kern	
8	192	600	75,0	3,1	linear
16	384	950	60,0	2,5	linear
32	768	1800	56,2	2,3	linear
64	1536	2733	42,7	1,8	linear
		3359	52,5	2,2	linear $BF = 10$
		3295	51,5	2,1	Z-Kurve
		3490	54,5	2,3	Z-Kurve 2-Bit
128	3072	6121	47,8	2,0	Z-Kurve 2-Bit
256	6144	8069	31,5	1,3	Z-Kurve 2-Bit

Tabelle 1: Performance des ILBDC-Codes bei der Strömungssimulation der Zylinderschüttung der BASF AG (Gebietsdimensionen: 2942x217x220) auf verschiedenen Cray XT-6 Knotenzahlen. Die Anzahl der Kerne entspricht der Anzahl der verwendeten Prozesse. Die Adjazenzliste wurde mit verschiedenen Schematas erstellt: linear, Z-Kurve, Z-Kurve 2 Bit.

Parallel zu den Erlanger Arbeiten wurde am iRMB damit begonnen, eine Methode für die dynamische Lastbalancierung in einer massiv parallelen und heterogenen Umgebung zu implementieren. Der Ansatz basiert auf einem erweiterten verteilten Diffusionsalgorithmus. Ein dezentralisierter Einsatz vermeidet bekannte Beschränkungen für massiv parallele Systeme des sonst oft verwendeten Master-Slave-Prinzips.

Preprocessing und Visualisierung

Das Computational Framework Stereo wurde am HLRS für die effiziente Steuerung paralleler Simulationen mit parallelen Steuerungsclients wie z.B. Paraview erweitert. Nun ist es möglich, die Simulationsprozesse für die Steuerung in Partitionen aufzuteilen und die Partitionen einzeln anzusprechen. Damit muss die Kommunikation nicht mehr über

jeweils einen Prozeß gehen, sondern es können mehrere Wege genutzt werden. Bei Paraview z.B. kann nun jeder Prozeß die für ihn benötigten Daten von der entsprechenden Simulationspartition direkt anfordern. Bei Tests konnten auch merkliche Verbesserungen in den Kommunikationszeiten bei steigender Anzahl an Simulationspartitionen zwischen Simulation und Paraview gemessen werden.

2.3 WP3: Verbesserte numerische Ansätze

Entwicklung numerischer Alternativen

Im Bereich der Erweiterung von unkonventionellen LBM konnten am TU-Do mehrere Fortschritte erzielt werden: Nach dem monolithischen, stationären Ansatz wurden die Diskretisierung und die numerischen Tests auf den anspruchsvollen, instationären Benchmark (umströmter Zylinder) mit Reynolds-Zahl 100 ausgedehnt. Zusätzlich dazu wurde die LBM so erweitert, dass auch nicht-Newtonsche Fluide simuliert werden können. Diese Erweiterung besteht im Wesentlichen darin, den Wert der Relaxationszeit τ lokal so zu bestimmen, dass der benötigte Wert der lokalen Viskosität erhalten bleibt. Die LBM ist für eine derartige Erweiterung sehr gut geeignet, da der Scherspannungstensor lokal in jedem Gitterpunkt berechnet werden kann, ohne dass räumliche Ableitungen des Geschwindigkeitsfeldes nötig wären. Es werden dabei Simulationen für scherratenabhängige Viskositätsmodelle durchgeführt, insbesondere auf dem Power-Law basierende Rechnungen für die Benchmark-Fälle „umströmter Zylinder“ und „driven cavity“. Das Projekt befindet sich in der Evaluierung und Ergebnisse werden mit solchen des hochoptimierten Paketes FEATFLOW verglichen.

Am iRMB wurde ein Cascaded-LB-Kollisionsoperator in einem D2Q9-LBM-Code prototypisch implementiert. Mit diesem Modell können sehr hohe Re-Zahlen ohne zusätzliches Turbulenzmodell simuliert werden. Erste Simulationen mit Re-Zahl 100.000 und 1.000.000 wurden bereits durchgeführt. Besonders interessant an den Ergebnissen ist die Differenz des Ablösungswinkels der Wirbel an einem umströmten Zylinder. Diese Ergebnisse werden z.Zt. noch im Detail untersucht. Deshalb ist für den nächsten Berichtszeitraum geplant, Testfälle mit Re-Zahlen zwischen 100.000 und 1.000.000 in 10 Stufen zu simulieren und die auftretenden Drag- und Lift-Werte zu bestimmen. Ziel ist dabei die Überprüfung der Eignung des neuen Modells zur Reproduktion der bekannten Drag-Crisis, welche im Erfolgsfall einen großen Fortschritt im Bereich der LB-Turbulenzmodellierung darstellen würde.

Adaptivität

Am TU-Do konnten auch bei der adaptiven Gitterverfeinerung für die beiden eingesetzten Techniken - Gitterdeformation kombiniert mit konformen, lokalen Verfeinerungen in 2D bzw. reine Gitterdeformation in 3D – wesentliche Fortschritte erzielt werden. Beispielsweise konnte gezeigt werden, wie und bis zu welchem Grad die numerischen Ergebnisse von Simulationen mit konformen Verfeinerungen des Gitters verbessert werden können.

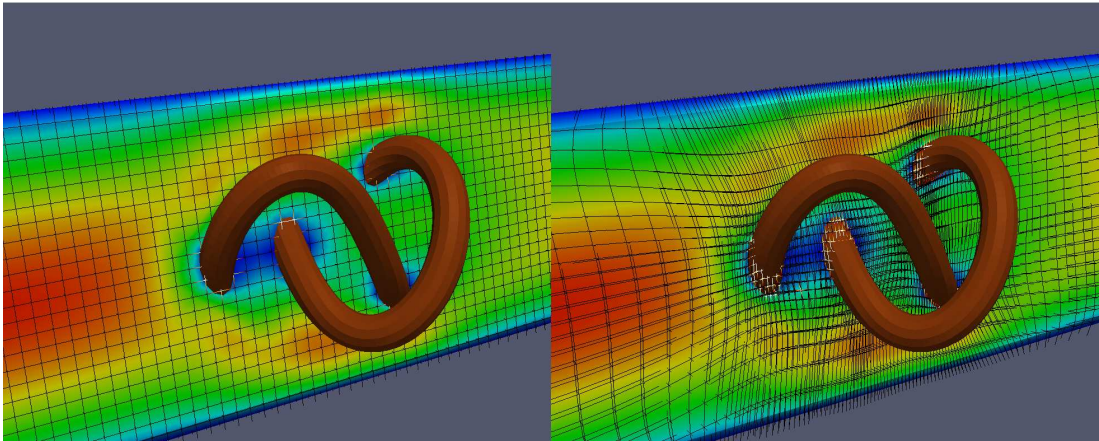


Abbildung 1: Gitterdeformation: Homogene Gitterverteilung (links) und adaptive Konzentration der Gitterpunkte (rechts)

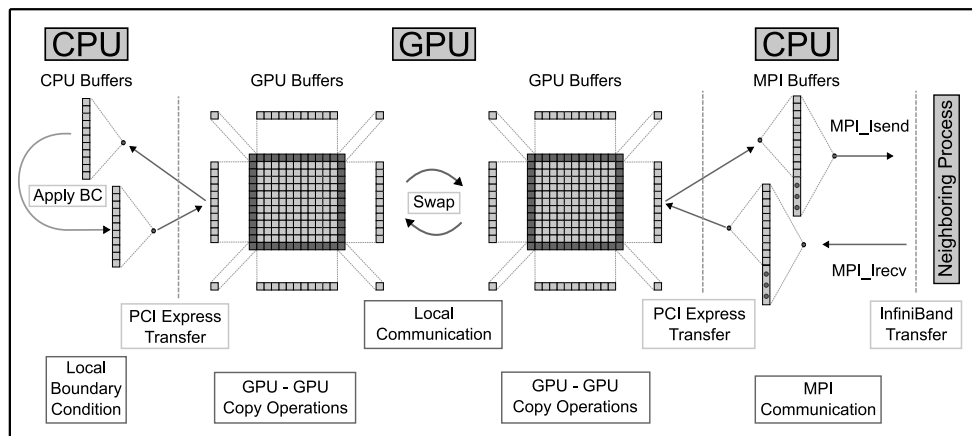


Abbildung 2: Schema der Multi-GPU Implementierung in WaLBerla.

Abbildung 1 zeigt ein Beispiel für eine Gitterdeformation in 3D. Gitterpunkte werden in der Nähe der interessanten Geometrie konzentriert. Dabei bleiben Zahl und Nachbarschaftsbeziehungen der Gitterpunkte bestehen; lediglich die örtliche Konzentration wird variiert.

2.4 WP4: Hardwarenahe Implementierung auf Nicht-Standardprozessoren

Im Berichtszeitraum wurden vom LSS und RRZE gemeinsam optimierte GPU-Implementierungen und deren bestmögliche Integration in das WaLBerla-Software-Framework verstärkt untersucht.

Desweiteren wurden erste Arbeiten für heterogenen Simulationen auf GPUs und CPUs durchgeführt. Skizzen der resultierenden Implementierungen in WaLBerla sind in Abb. 2

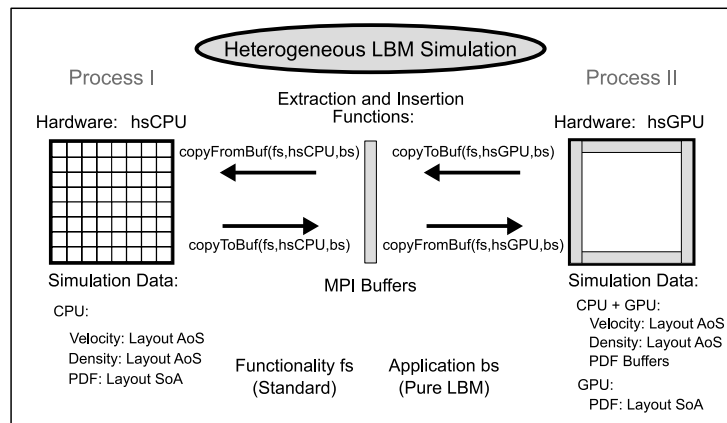


Abbildung 3: Heterogene Simulationen auf GPUs und CPUs. Die gezeigte Simulation wird auf einer CPU und einer GPU ausgeführt. Hierbei dient der MPI-Puffer als Schnittstelle zwischen beiden Architekturen. Somit müssen lediglich entsprechende Funktionen ausgewählt werden, um die zu sendenden Daten aus den jeweiligen architektur-spezifischen Datenstrukturen zu kopieren und im spezifizierten Layout in die MPI-Puffer einzufügen.

und 3 zu sehen. Ein weiteres Hauptaugenmerk lag auf dem Vergleich der GPU-Implementierung mit Multi-Core-CPU-Implementierungen. Hierbei wurde besonderer Wert auf einen "fairen" Vergleich von GPUs und CPUs gelegt, um real nutzbare Vorhersagen treffen zu können, d.h. eine Einschätzung und erste Tests, wie sich GPU-Cluster verhalten. Erste Ergebnisse wurden bereits international präsentiert [T6] und zur Veröffentlichung eingereicht [P1].

Hinsichtlich Optimierungsstrategien für GPUs hat sich ein reger Austausch zwischen den beiden Erlanger Partnern und der Braunschweiger Gruppe etabliert, der weiter ausgebaut werden soll.

2.5 WP5: Industriekontakte und Definition von Showcases

BASF Showcase

Der Schwierigkeitsgrad des von BASF vorgeschlagenen Showcases (Reaktionsrohr) kann durch Hinzunahme von physikalischen Effekten, z.B. Wärme- und Stoffaustausch, sukzessive gesteigert werden. Es wurde bereits jetzt mit den ersten Arbeiten zur Berechnung der reinen Hydrodynamik begonnen, wobei der von BASF vorgegebene Fluiddurchsatz bereits herausfordernd ist. Verschiedene Geometriebeschreibungen des Rohres und der darin enthaltenen Schüttung wurden von Herrn Dr. Winkler (BASF) in Form von STL-Dateien bereit gestellt. Diese wurden von IANUS zusammen mit einer Fallbeschreibung über die interne Kommunikationsplattform (BSCW) den Partnern zugänglich gemacht.

BASF führt auch selbst Simulationen mit (teilweise angepassten) kommerziellen Codes durch und vergleicht diese mit den Ergebnissen umfangreicher Versuchsreihen im eigenen Technikum. Diese Daten eignen sich sehr gut zum späteren Vergleich von Genauigkeit und Performance der innerhalb von SKALB verwendeten Methoden. Die BASF-Ergebnisse sind den SKALB-Partnern noch nicht zugänglich, um ergebnisorientierten Modifikationen in den numerischen Berechnungen vorzubeugen.

Das HLRS hat für Gruppen, die keinen eigenen STL-Konverter haben, die Voxelisierung der Geometriedaten für den BASF-Showcase übernommen und stellt die Daten allen Partnern bereit.

Es haben bereits alle Partner mit ihren Codes (soweit vorhanden) erste Testrechnungen durchgeführt. Umfangreichere Produktionsrechnungen sind für den nächsten Berichtszeitraum vorgesehen.

2.6 Zusammenfassung des Projektfortschritts

Das Projekt liegt bei den wesentlichen Arbeitspaketen innerhalb des Projektplans.

Die Arbeiten im Bereich des AP4.a (GPUs) wurden im Vergleich zum Antrag verstärkt. Dies liegt zunächst an den in den vorangegangenen Zwischenberichten genannten (zu Projektbeginn nicht absehbaren) technologischen Veränderungen (Abkündigung IBM-Cell-Prozessor und NEC-Vektorrechner), wodurch entsprechende Ressourcen in AP1.d und AP4.b freigesetzt wurden. Verstärkt wird dies durch den bisher sehr erfolgreichen Verlauf der Arbeiten in AP4.a. Bei der effizienten parallelen Nutzung von GPU-Clustern für LBM-basierte Strömungslöser sind die Partner international führend und sehr sichtbar.

Sehr erfreulich entwickeln sich derzeit auch die Arbeiten in den verschiedenen Gruppen zu den Themen Gebietszerlegung, Lastbalancierung und Adaptivität (AP2). Hier konnte zwischenzeitlich bei vielen Ansätzen gezeigt werden, dass die im Antrag formulierten Zugänge effizient umsetzbar sind. Auch in diesem Themengebiet profitiert der Projektfortschritt von der ursprünglichen Entscheidung, die Entwicklung mehrerer spezialisierter Programmpakete weiterzuführen. Nur so war es möglich, einfache, effiziente und auf LBM-Applikationsfelder spezialisierte Strategien zu implementieren, die den bekannten und breit verfügbaren Tools (wie etwa Metis/ParMetis) im jeweils gegebenen Anwendungsfall deutlich überlegen sind.

Erfreulich ist auch, dass für den im Februar von BASF vorgestellten Showcase von allen Partnern erste Rechnungen durchgeführt wurden, die die Basis für weitere Arbeiten in den kommenden Quartalen bilden.

3 Stand des Vorhabens, Erreichbarkeit der Ziele, Zielsetzung und Verwertungsplan

Gegenüber dem Antrag haben sich hinsichtlich der Ziele und Zielsetzung keine nennenswerten Veränderungen ergeben.

Einzig auf die oben genannte Verschiebung der Ressourcen, weg von der Optimierung für Vektorrechner und IBM-Cell-Systeme, hin zur Programmierung und Nutzung (hoch) paralleler GPU-Cluster, sei an dieser Stelle nochmals hingewiesen.

Im abgelaufenen Berichtszeitraum wurde von allen Partnern wieder auf zahlreichen internationalen Konferenzen über Ergebnisse aus dem Projekt vorgetragen. Insbesondere die genannten parallelen GPU-Arbeiten stießen auf großes Interesse. Eine komplette Liste der (eingereichten) Publikationen, Vorträge und Tutorials für den Berichtszeitraum ist dem Anhang beigelegt und auch auf der Webseite www.skalb.de verfügbar.

Exemplarisch sollen an dieser Stelle auf Veranstaltungen hingewiesen werden die aus dem Projekt heraus organisiert wurden oder bei denen mehrere Partner Arbeiten des Projektes vorstellten:

- Minisymposium auf der ECCOMAS CFD 2010 Konferenz im Juni in Lissabon [T2, T6, T13]. Organisation durch Prof. Turek.
- Beiträge zum HPC Statusseminar der Gauß-Allianz [T5, T8, T10, T21] im Juni in Schwetzingen.
- Vorträge [T1, T7, T11, T14, T22] mehrerer aktuell in SKALB geförderter Mitarbeiter bei der Konferenz “Facing the Multicore-Challenge” im März in Heidelberg.

Im Rahmen des Kurzlehrgang „Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen“ am Lehrstuhl für Strömungsmechanik (LSTM) in Erlangen konnten Arbeiten aus SKALB auch zahlreichen Teilnehmern aus Industrie und Wirtschaft vorgestellt werden [T15, T19, T24].

Die beiden Erlangener Codes waLberla und ILBDC sind Teil der Benchmark-Suite für die derzeit laufende Ausschreibung des Petascale-Rechners (SuperMUC) des LRZ München. Leistungszusagen für beide Codes auf bis zu 8.000 Prozessoren sind von den Anbietern zu liefern.

Die Firma IANUS betreut und koordiniert derzeit die Arbeiten für den industriellen Showcase des assoziierten Partners BASF. Wie den Teilprojektberichten zu entnehmen ist, haben alle Gruppen zügig mit einer Bearbeitung des Testfalls begonnen, so dass wir zuversichtlich sind, dem assoziierten Partner tragfähige Resultate liefern zu können.

Anhang

Veröffentlichungen

- [P1] C. FEICHTINGER, J. HABICH, T. ZEISER, G. HAGER UND G. WELLEIN. A flexible patch-based lattice Boltzmann parallelization approach for heterogeneous GPU–CPU Clusters. *Submitted to Parallel Computing, Elsevier, Special Issue: Emerging Programming Paradigms for Large-Scale Scientific Computing* (2010).
- [P2] C. FEICHTINGER, S. DONATH, H. KÖSTLER, J. GÖTZ UND U. RÜDE. WaLBerla: HPC software design for computational engineering simulations. *Submitted to Journal of Computational Science, Elsevier, Special Issue: Simulation Software for Supercomputers* (2010).
- [P3] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. Efficient finite element multigrid solvers for unstructured CFD/CSM problems on GPUs. Abstract eingereicht in: Second International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering, Special Session on GPU-based Modeling and Simulation in Computational Engineering (Juli 2010).
- [P4] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. Lattice-Boltzmann simulation of the shallow-water equations with fluid-structure interaction on multi- and manycore processors. In R. KELLER, D. KRAMER UND J.-P. WEISS (Hrsg.), „Facing the Multicore Challenge“, S. 99–112 (März 2010).
- [P5] M. GEVELER, D. RIBBROCK, S. MALLACH UND D. GÖDDEKE. A simulation suite for lattice-Boltzmann based real-time CFD applications exploiting multi-level parallelism on modern multi- and many-core architectures. Eingereicht in: Journal of Computational Science (März 2010).
- [P6] D. GÖDDEKE. „Fast and Accurate Finite-Element Multigrid Solvers for PDE Simulations on GPU Clusters“. Dissertation, Technische Universität Dortmund, Fakultät für Mathematik (Mai 2010). <http://hdl.handle.net/2003/27243>.
- [P7] D. GÖDDEKE UND R. STRZODKA. Cyclic reduction tridiagonal solvers on GPUs applied to mixed precision multigrid. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems, Special Issue: High Performance Computing with Accelerators* (März 2010).
- [P8] D. GÖDDEKE UND R. STRZODKA. Mixed precision GPU-multigrid solvers with strong smoothers. In J. J. DONGARRA, D. A. BADER UND J. KURZAK (Hrsg.), „Scientific Computing with Multicore and Accelerators“. CRC Press (Jan. 2011). To appear.
- [P9] T. HÜBNER. „Spezielle Diskretisierungs- und Lösungsmethoden für die diskrete Boltzmann Gleichung auf unstrukturierten Gittern“. Dissertation, TU Dortmund, Fakultät für Mathematik (2010). Eingereicht Juli 2010.
- [P10] T. HÜBNER UND S. TUREK. Efficient monolithic simulation techniques for the stationary lattice Boltzmann equation on general meshes. *Computing and Visualization in Science* **13**(3), 129–143 (März 2010).

- [P11] D. KOMATITSCH, G. ERLEBACHER, D. GÖDDEKE UND D. MICHÉA. High-order finite-element seismic wave propagation modeling with MPI on a large GPU cluster. *Journal of Computational Physics* **229**, 7692–7714 (Juni 2010).
- [P12] D. KOMATITSCH, D. GÖDDEKE, G. ERLEBACHER UND D. MICHÉA. Modeling the propagation of elastic waves using spectral elements on a cluster of 192 GPUs. *Computer Science – Research and Development* **25**(1–2), 75–82 (Mai 2010). Special Issue: Proceedings ISC’10.
- [P13] D. RIBBROCK, M. GEVELER, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. Performance and accuracy of lattice-Boltzmann kernels on multi- and manycore architectures. In P. M. SLOOT, G. VAN ALBADA UND J. J. DONGARRA (Hrsg.), „International Conference on Computational Science (ICCS’10)“, Nr. 1 in *Procedia Computer Science*, S. 239–247 (Mai/Juni 2010).
- [P14] M. SCHÖNHERR, K. KUCHER, M. GEIER, M. STIEBLER, S. FREUDIGER UND M. KRAFCZYK. Multi-thread implementations of the lattice boltzmann method on non-uniform grids for cpus and gpus. *Submitted to Computers & Mathematics with Applications, Elsevier* (2010).
- [P15] H. STENDEL. Parallel programming on hybrid hardware: Models and applications. Masterarbeit, Georg-Simon-Ohm-Hochschule Nürnberg (2010).
- [P16] S. TUREK, D. GÖDDEKE, C. BECKER, S. H. BUIJSSEN UND H. WOBKER. FEAST – Realisation of hardware-oriented numerics for HPC simulations with finite elements. *accepted for publication in Concurrency and Computation, Practice and Experience, Special Issue Proceedings of ISC 2008* (Dez. 2009).
- [P17] S. TUREK, D. GÖDDEKE, S. H. BUIJSSEN UND H. WOBKER. Hardware-oriented multigrid finite element solvers on GPU-accelerated clusters. In J. J. DONGARRA, D. A. BADER UND J. KURZAK (Hrsg.), „Scientific Computing with Multicore and Accelerators“. CRC Press (Jan. 2011). To appear.
- [P18] M. WITTMANN, G. HAGER UND G. WELLEIN. Multicore-aware parallel temporal blocking of stencil codes for shared and distributed memory. In „Proceedings of the Workshop on Large-Scale Parallel Processing (LSPP) 2010, Atlanta, USA“ (2010).
- [P19] H. WOBKER. „Efficient Multilevel Solvers and High Performance Computing Techniques for the Finite Element Simulation of Large-Scale Elasticity Problems“. Dissertation, TU Dortmund, Fakultät für Mathematik (März 2010). <http://hdl.handle.net/2003/26998>.

Vorträge

- [T1] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. Lattice-Boltzmann simulation of the shallow-water equations with fluid-structure interaction on multi- and manycore processors. Facing the Multicore-Challenge, Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Germany (März 2010).

- [T2] D. GÖDDEKE, S. H. BUIJSSEN, H. WOBKER UND S. TUREK. GPU cluster computing for FEM with applications in CFD and CSM (Juni 2010). ECCOMAS-CFD 2010, Lisbon, Portugal.
- [T3] H.KÖSTLER. Numerical algorithms on multi-GPU architectures. 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, Yokohama, Japan (März 2010).
- [T4] D. JENZ UND M. BERNREUTHER. The computational steering framework Steereo. Para 2010, Reykjavik (Juni 2010).
- [T5] D. JENZ UND M. BERNREUTHER. A framework for computational steering. CiHPC Competence in High Performance Computing, HPC Status Conference of Gauß-Allianz e.V, Schwetzingen, Germany (Juni 2010).
- [T6] J.HABICH, C. FEICHTINGER, T. ZEISER, G. HAGER UND G. WELLEIN. Performance modeling and optimization for 3D lattice Boltzmann simulations on highly parallel on-chip architectures: GPUs vs. multi-core CPUs. ECCOMAS CFD, Lisbon, Portugal (Juni 2010).
- [T7] J.HABICH, T. ZEISER UND G. W. G. HAGER AND. Performance modeling and multi-core-aware optimization for 3D parallel lattice Boltzmann simulations. Facing the Multicore-Challenge, Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Germany (März 2010).
- [T8] K.IGLBERGER. Towards direct numerical simulation of a billion fully resolved rigid bodies immersed in a fluid. CiHPC Competence in High Performance Computing, HPC Status Conference of Gauß-Allianz e.V, Schwetzingen, Germany (Juni 2010).
- [T9] D. KOMATITSCH, D. GÖDDEKE, G. ERLEBACHER UND D. MICHÉA. Modeling the propagation of elastic waves using spectral elements on a cluster of 192 GPUs. ISC'10 (Mai 2010).
- [T10] M. KRAFCZYK, B. AHRENHOLZ, S. FREUDIGER, M. GEIER, M. SCHÖNHERR UND K. KUCHER. Massively parallel simulation of three-dimensional transient coupled CFD problems with kinetic methods. CiHPC Competence in High Performance Computing, HPC Status Conference of Gauß-Allianz e.V, Schwetzingen, Germany (Juni 2010).
- [T11] K. KUCHER, S. FREUDIGER, M. GEIER, M. STIEBLER UND M. KRAFCZYK. A multi-core implementation of the lattice boltzmann method for non-uniform grids. Facing the Multicore-Challenge, Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Germany (März 2010).
- [T12] D. RIBBROCK, M. GEVELER, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. Performance and accuracy of lattice-Boltzmann kernels on multi- and manycore architectures. International Conference on Computational Science (ICCS'10) (Mai/Juni 2010).
- [T13] M. SCHÖNHERR, M. GEIER, M. STIEBLER UND M. KRAFCZYK. A lattice boltzmann 3d-gpu-implementation on non-uniform grids. ECCOMAS CFD, Lisbon, Portugal (Juni 2010).

- [T14] M. SCHÖNHERR, M. GEIER, M. STIEBLER UND M. KRAFCZYK. A lattice-boltzmann cuda-gpu-implementation on non-uniform grids. Facing the Multicore-Challenge, Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Germany (März 2010).
- [T15] S.DONATH. Parallel free/surface extension of the lattice-Boltzmann method. Kurzlehrgang NUMET, Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Erlangen, Germany (Feb. 2010).
- [T16] S.DONATH, V. BUWA UND U. RÜDE. Experimental verification of the parallel free surface lattice Boltzmann method in waLBerla. ParCFD 2010, Kaohsiung, Taiwan (Mai 2010).
- [T17] U.RÜDE. Peta-scale computing for the direct numerical simulation of particle laden flows. International Workshop on Scientific Computing and Nonlinear Partial Differential Equations, Jiuzhaigou National Park, China (Juni 2010).
- [T18] U.RÜDE. Simulating complex flows on 300,000 compute cores. Einladung des State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing (LSEC) der Academy of Sciences, Beijing, China (Mai 2010).
- [T19] G. WELLEIN. Effiziente Nutzung von Hochleistungsrechnern in der Strömungsmechanik. Kurzlehrgang NUMET Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen, Lehrstuhl für Strömungsmechanik (Feb. 2010).
- [T20] G. WELLEIN. Supercomputing und Multicore-Systeme. Ohm-Hochschule Nürnberg, Fachbereich EFI (Juni 2010).
- [T21] G. WELLEIN, G. HAGER, M. WITTMANN, J. HABICH UND J. TREIBIG. Multicore-aware parallelization strategies for efficient temporal blocking. CiHPC Competence in High Performance Computing, HPC Status Conference of Gauß-Allianz e.V, Schwetzingen, Germany (Juni 2010).
- [T22] M. WITTMANN. A pipelined, multicore-aware approach to parallel temporal blocking of stencil codes for shared and distributed memory. Facing the Multicore-Challenge, Heidelberger Akademie der Wissenschaften, Germany (März 2010).
- [T23] M. WITTMANN, G. HAGER UND G. WELLEIN. Multicore-aware parallel temporal blocking of stencil codes for shared and distributed memory. LSPP Workshop, IPDPS 2010, Atlanta, USA (Apr. 2010).
- [T24] T. ZEISER. Strömungsberechnung mit Lattice-Boltzmann-Verfahren. Kurzlehrgang NUMET Numerische Methoden zur Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsproblemen, Lehrstuhl für Strömungsmechanik (Feb. 2010).
- [T25] T. ZEISER UND G. HAGER. Thirteen modern ways to fool the masses with performance results on parallel computers. Eingeladener Seminar-Vortrag, iRMB, TU-Braunschweig (Juni 2010).
- [T26] T. ZEISER UND G. HAGER. Thirteen modern ways to fool the masses with performance results on parallel computers. Eingeladener Vortrag auf der NEC-User-Group, Toulouse, Frankreich (Juni 2010).