

Zwischenbericht 5

Zusammenfassender Bericht	01IH08003 A-E / SKALB
Lattice-Boltzmann-Methoden für skalierbare Multi-Physik-Anwendungen	
Laufzeit des Vorhabens:	01.01.2009 – 31.12.2011
Berichtszeitraum:	01.01.2011 – 30.06.2011

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, 30. Aug. 2011

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 fünften 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 29./30. März fand ein Projekttreffen aller beteiligten Projektpartner in Braunschweig statt. Schwerpunkte waren die bevorstehenden Arbeiten im letzten Projektjahr sowie der BASF-Testcase.

Darüber hinaus gab es wieder bilaterale Treffen, Treffen mit assoziierten Projektpartnern sowie Videokonferenzen, wobei die thematischen Schwerpunkte vor allem auf dem "BASF-Showcase" lagen.

2 Wissenschaftliche Ergebnisse

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

Optimierung bestehender Codes für Standardarchitekturen Die aus dem Projekt gewonnenen Erkenntnisse fließen stetig in die aktuelle Benchmarksuite des RRZE ein. Darin enthaltene Kernel wurden nicht nur in eigenen Ausschreibungen sondern auch bei der Beschaffung des nächsten Bundeshöchstleistungsrechner am Leibniz-Rechenzentrum in Garching eingesetzt. Insbesondere seit der Vorstellung der RRZE-Benchmarksuite auf dem letzten Treffen des Arbeitskreises Supercomputing des Zentrums für Kommunikation und Informationsverarbeitung e.V. (ZKI AK SC) ist die Nachfrage nach der integrierten Benchmarksuite seitens anderer Institutionen aus ganz Deutschland nun aber so hoch, dass beschlossen wurde die Benchmarksuite zeitnah in Teilen quelloffen zur Verfügung zu stellen.

Standardarchitekturen im Umbruch: Optimierung für Multi-Core-CPU's (SSE/AVX)

Mit den kommenden Prozessorgenerationen von AMD und Intel wird SSE2 durch Advanced Vector Extensions (AVX) ergänzt. Mit AVX können gegenüber SSE doppelt so viele Berechnungen gleichzeitig ausgeführt werden. Die C-Intrinsic-Kernel des RRZE wurden daher prototypisch bereits um AVX-Intrinsics erweitert. Ergebnisse anderer Algorithmen legen nahe, dass hierdurch zunächst keine Performancesteigerung an sich zu erreichen ist. Jedoch vergrößert dies die Möglichkeiten, durch zeitlich geblockte Algorithmenausführung zusätzlich Performance zu gewinnen.

Analyse der Open MPI-Codepfade

Das HLRS hat die Open MPI-Implementierung durch Änderungen an der Konfiguration angepasst, um Thread-Safe kompilieren und ausführen zu können. Um nun herauszufinden, welcher Codepfad in der Open MPI-Implementierung für den Infiniband-Stack besonders aufwändig ist, wurde eine Tracing Bibliothek mit geringem Overhead entwickelt. Diese Bibliothek kann beliebig zu jeder Anwendung (oder Open MPI) hinzugelinkt werden. Eine Analyse der damit erzeugten Daten von Sender- und Empfängerprozess zeigt die Anzahl der Aufrufe, die durchschnittliche Prozessor-Taktzyklen pro Funktion und die minimal und maximal gemessenen Taktzyklen. Bemerkenswert ist dabei, dass nur bei sehr wenigen Aufrufen der Infiniband-Verbs Completion-Queue tatsächlich ein Ansprechen des Infiniband-HCAs über den PCIe-Bus erfolgt. Es soll daher künftig untersucht werden, ob die Zahl der Anfragen an das Kernel-Interface (mthca-Modul) reduziert werden kann.

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

Gebietszerlegung und Lastbalanzierung Das iRMB integrierte die Partitionierungsbibliothek Zoltan zur Gebietszerlegung/Lastbalanzierung basierend auf Blöcken. Für die feinere Zerlegung auf Threadebene wurde eine Eigenentwicklung eingesetzt die auf Priority-Queues basiert. Messungen bis zu 1024 Kernen erreichten durchschnittlich mehr als 80 % Effizienz.

Der Ansatz des LSS existiert als Prototyp. Er basiert auch auf Blöcken, die allerdings in einer Octree-Struktur organisiert sind. Eine initiale Verteilung der Teilgebiete auf die Prozesse wird entweder durch raumfüllende Kurven (Morton-Order, Hilbert-Kurve) oder einem eigenen Algorithmus durchgeführt. Die Eigenentwicklung basiert auf einem Prozessgraphen arbeitenden Greedy-Algorithmus. Als Testszenario diente ein partikuläre Strömung, deren Analyse zeigte, dass durchschnittlich die Last eines Prozesses nur um 10 % von dem Prozess mit der Maximallast abweicht.

Das für die aktuelle Berichtsperiode des RRZEs vorgesehene Arbeitspaket *Statische Gebietszerlegung unter Berücksichtigung inhomogener Netzwerktopologien* musste verschoben werden. Für die Partitionierung ist zum einen ein Vergleich mit etablierten Methoden der Graphpartitionierung (Metis, Zoltan, PT-Scotch, etc.) wünschenswert. Die Integration von PT-Scotch bereitete allerdings erhebliche Probleme und führte zu Verzögerungen. Zum anderen fehlen aktuell die nötigen Zugänge zu Hochleistungsrechnern mit unterschiedlichen Netzwerktopologien.

Computational Framework Steereo und Covise Im Computational-Framework Steereo wurde u.a. das für den ILBDC-Code nötige Fortran-Interface implementiert. Die Verbesserungen werden unter <http://steereo.hlrs.de/> zugänglich gemacht. Nach einigen wesentliche Änderungen und Bug-Fixes an Steereo konnte so der Erlanger ILBDC-Code in einer ersten Version in das Framework integriert werden.

Der BASF-Testfalls konnte bisher durch Covise wegen seiner Größe nicht dargestellt werden. Die Daten werden nun auf einem vereinfachten Gitter dargestellt, welches das Datenaufkommen soweit reduziert, dass mehrere Partitionen und mehrere Zeitschritte visualisiert werden konnten.

2.3 WP3: Verbesserte numerische Ansätze

Die Arbeiten an verbesserten/alternativen numerischen Ansätzen werden weiterhin im Wesentlichen von TU-Do gemacht und komplementieren die sonstigen Arbeiten.

Das Softwarepaket FEAST Im Bereich der Ausnutzung moderner Mehr- und Vielkernarchitekturen als Beschleunigerhardware wurde weiter am Subsystem für numerische lineare Algebra und lokale Löser gearbeitet. Insbesondere im Bereich von GPU-Kernen wurde zusätzlich zu den in den letzten Berichtszeiträumen entwickelten Implementierungen der Operatoren mit CUDA auch ein OpenCL-Backend evaluiert. Als Schnittstelle für den Applikationsprogrammierer wurde das auf hardwareorientierten Expression Templates (ET) basierende Framework weiter ausgebaut. Nachdem eine Implementierung des Löserkonzeptes ScaRC als ein wesentliches Ergebnis bisheriger Berichtszeiträume vorlag, wurde der vorhandene Code an wesentlichen Stellen komplettiert und erweitert. Kern der derzeitigen Bemühungen ist nun (nach Fertigstellung des MPI-basierten Codes) eine Konzentration auf die Datenschicht (die lokale Zusammenfassung der Freiheitsgrade in sogenannten *Matrixpatches*).

Fortführung der Entwicklung von FE-gMG Hier lag der Fokus im aktuellen Berichtszeitraum auf der Anwendung stärkerer Glätter und einer detaillierten Evaluierung auf modernen GPUs. Zentraler Kernel der gesamten Löserpipeline ist das auf der ELLPACK-R Speichertechnik basierende (sparse) Matrix-Vektor-Produkt (SpMV). Alle Löserkomponenten können darauf zurückgeführt werden: Grobgitterlöser (CG bzw. BiCGStab), Glätter (vorkonditionierte Richardson-Iteration) und Gittertransfer. Dadurch gelingt eine sehr flexible Implementierung, die insbesondere unabhängig von der Problemdimension, dem verwendeten finiten Element, dem verwendeten Vorkonditionierer im Glättungsoperator und der Beschaffenheit des Gitters ist. Um die Leistung des gesamten FE-gMG zu evaluieren, wurden zunächst zwei auf vorassemblierten Matrizen (als Annäherung an die Inverse der Steifigkeitsmatrix) basierende Vorkonditionierer evaluiert: Einfache Jacobi Vorkonditionierung und stärkere Vorkonditionierung mit *Sparse Approximated Inverse* (SPAI).

Neue FEM für die Lattice-Boltzmann-Gleichung Als wesentliches Mittel zum Erreichen hoher numerischer Effizienz bei der Lösung voll implizit gekoppelter Systeme wurde das spezielle Sortierverfahren hervorgehoben, das die Gitterpunkte für jede diskrete Geschwindigkeit anordnet und somit die Transportschritte als untere Dreiecksmatrizen realisiert. Dies ermöglicht eine algebraische Reformulierung des diskreten Gleichungssystems, die mit mehrgittervorkonditionierten Krylov-Raum-Verfahren zu sehr guten linearen Lösern führt.

Dieses Konzept ist indirekt auf bestimmte Diskretisierungstechniken übertragbar, im Moment sind erste Ansätze mit *discontinuous Galerkin* am ehesten mit der ursprünglichen Methode kompatibel.

2.4 WP4: Hardwarenahe Implementierung auf Nicht-Standardprozessoren

Am iRMB wurde der Testfall der Drag Crisis (Zylinder im Kanal) definiert und mit dem 2D-Modell des Cascaded-Lattice-Boltzmann gerechnet. Trotz eines recht groben Gitters

wurde durch die dreifache Gitterverfeinerung ein Einfluss des groben Gitters auf das Simulationsergebnis vermieden. Die Simulation mit sehr hohen Reynolds-Zahlen, bis 10.000.000 zeigt Ergebnisse die grundsätzlich mit Experimenten übereinstimmen, jedoch noch weiterer Untersuchungen bedarf, da Kenntnisse aus dem 3D Fall nicht direkt auf das zweidimensionale Problem übertragen werden können.

WaLBerla wurde erfolgreich auf die GPU-Cluster Judge (Jülich Super Computing Center) und Tsubame 2 (Tokyo Institute of Technology, Japan) portiert (LSS und RRZE). Erste Tests zeigen ein gutes Skalierungsverhalten. Detaillierte Skalierungsstudien wurden vorbereitet und werden derzeit ausgeführt.

2.5 WP5: Industriekontakte und Definition von Showcases

Das Hauptaugenmerk der Arbeiten von IANUS lag im Berichtszeitraum unverändert auf der Koordination des BASF-Showcases und der Vorbereitung eines weiteren Benchmarks. Die Geometrie des BASF-Showcases wurde in verschiedenen Diskretisierungsstufen durch die Arbeitsgruppen in Braunschweig, Stuttgart und Erlangen als Voxel-Struktur generiert. Als Vergleichsgröße diente eine diskrete Repräsentation der Geometrie auf Basis der Fictitious Boundary Methode mit Featflow. Die Übereinstimmung der Geometrien ist vergleichsweise gut. Strömungssimulationen wurden durch die Gruppen in Braunschweig, Erlangen und Dortmund durchgeführt wobei die Feldgrößen Druck und Geschwindigkeit miteinander verglichen wurden. Für die von BASF vorgegebene Geometrie wurden die Prozessgröße der Leerrohrgeschwindigkeit über eine Größenordnung variiert und in zwei LBM-Codes (iRMB und RRZE) und dem FEM-Löser FeatFlow (TU-Do) berechnet und gegeneinander getestet. Besonders bei geringen Geschwindigkeiten scheinen akustische Wellen die Konvergenz des Finite-Differenzen-Lattice-Boltzmann-Lösers stark zu beeinflussen, welche den Einsatz von speziellen Randbedingungen erfordert (iRMB). Ein bis zwei weitere Größenordnungen sollen bei der Parameterstudie noch abgedeckt werden, um die Anforderungen aus der Industrie zu erfüllen. Ebenso werden noch Vergleichsberechnungen mit waLBerla folgen.

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 weiterhin 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.

Für den von BASF vorgestellten Showcase wurden von allen Partnern Rechnungen durchgeführt. Der qualitative Vergleich von Ergebnissen sieht sehr vielversprechend aus. Der abschliessende quantitative Vergleich steht im letzten Projekthabljahr noch an.

3 Stand des Vorhabens, Erreichbarkeit der Ziele und Zielsetzung

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

Einzig auf die bereits früher 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.

Aufgrund von Personalfuktuation und dadurch entstandenen Personalmangel beim Projektpartner HLRS wurden in Abstimmung mit dem Projektträger einige Arbeitspakete von Stuttgart nach Erlangen transferiert. Durch Aufstockung der an SKALB arbeitenden Mitarbeiter in Erlangen konnten die verlagerten Arbeitspunkte dort erfolgreich bearbeitet werden.

Im abgelaufenen Berichtszeitraum wurde von den meisten Partnern wieder auf internationalen Konferenzen über Ergebnisse aus dem Projekt vorgetragen. Eine Auswahl von Publikationen und Vorträge für den Berichtszeitraum ist dem Anhang beigefügt und vollständig auch auf der Webseite www.skalb.de verfügbar.

Die Firma IANUS betreut und koordiniert unverändert die Arbeiten für den industriellen Showcase des assoziierten Partners BASF.

4 Fortschreibung des Verwertungsplans

Die bisherigen Arbeiten der Projekts sind auf großes Interesse gestoßen, was sich in der Vielzahl von (eingeladenen) Vorträgen zeigt. Hervorzuheben sind hierbei die Lattice-Boltzmann-Minisymposa auf der SIAM CSE und ParCFD-Konferenz, sowie die von Prof. Wellein und Dr. Zeiser (beide RRZE) organisierte Special Session *Lattice-Boltzmann-Verfahren* auf der ParCFD für die elf Beiträge aus acht Ländern zugelassen werden konnten.

Die Arbeiten des HLRS am Voxelizer und am Computational Steering sind online allgemein zugänglich.

Wirtschaftliche Erfolgsaussichten Im Rahmen der nun abgelaufenen 30 Monate konnten an allen in SKALB eingebrachten LBM-Codes erhebliche Verbesserungen erzielt werden. Hinsichtlich Funktionsumfang und Stabilität konnte für die adressierten Einsatzgebiete die Qualität weiter deutlich gesteigert werden. Performance und Skalierbarkeit liegt deutlich über den Kenngrößen kommerzieller Codes. Die Kommerzialisierung einzelner durch SKALB geförderter Entwicklungen wird derzeit sowohl in Braunschweig als auch in Erlangen untersucht.

Zur Zeit finden Gespräche des iRMB mit der Technologietransferstelle der TU Braunschweig statt, um die Möglichkeiten einer Beteiligung der iTUBS-GmbH an dem Projekt zu eruieren. Weiterhin finden Testevaluationen bei der Siemens AG in München statt, die eine Beteiligung prüft.

Das RRZE führt derzeit Gespräche mit der Firma FMP Technology GmbH, um zu sehen, in wieweit Lattice-Boltzmann-Simulationen zur Optimierung von Bauteilen eines Automobilzulieferers gewinnbringend eingesetzt werden können.

Für IANUS steigen die wirtschaftlichen Erfolgsaussichten mit zunehmender Projektlaufzeit.

Wissenschaftliche oder technische Erfolgsaussichten Alle an SKALB beteiligten Gruppen sind mit ihren Codes international führend aufgestellt, was durch die zahlreichen Publikationen und eingeladenen Vorträge bei internationalen Konferenzen gezeigt wird. Die Simulationsprogramme werden für eine Vielzahl von unterschiedlichen Forschungsprojekte eingesetzt und haben sich zu wichtigen Werkzeugen entwickelt.

Wissenschaftliche Anschlussfähigkeit Die Lattice-Boltzmann-Codes der Gruppen sind auch im internationalen Vergleich sehr leistungsfähig und nahe am bzw. teilweise sogar über dem Niveau vergleichbarer (kommerzieller) Tools und werden täglich in den Gruppen eingesetzt. Neben bereits bestehenden nationalen und internationalen Kooperationen kommen vermehrt neue in- und ausländische Forscher auf einzelne Gruppenmitglieder zu, um von den gewonnenen Erfahrungen zu profitieren. Unterschiedliche Forschungsprojekte sind in der Vorbereitung, die eine wissenschaftliche aber auch finanzielle Fortsetzung der Aktivitäten über die Projektlaufzeit von SKALB sicherstellen sollen.

Das Seminar *Lattice Boltzmann Methods: Theory, Applications, and Implementations* wurde erstmals im Sommersemester 2011 von der HPC-Gruppe des RRZE angeboten und befasste sich mit Themen rund um die Lattice-Boltzmann-Theorie und deren effiziente Implementierung. So konnten Studierende des Studiengangs *Computational Engineering* in die Thematik eingeführt werden.

Im Rahmen eines Minisymposiums auf der SIAM Konferenz *Mathematical and Computational Issues in the Geosciences* im März 2011 in Long Beach hat sich eine internationale Zusammenarbeit konstituiert. Mit dem Ziel, verschiedene Ansätze zur Flachwassersimulation auf GPUs miteinander sowohl numerisch als auch bezogen auf die Leistung zu vergleichen, haben sich Mitarbeiter der Arbeitsgruppe aus Dortmund, vom SINTEF Oslo,

Norwegen, des Tokyo Institute of Technology, Japan und von der Universidad de Granada, Spanien zusammengeschlossen.

Im Bereich der hardware-orientierten Optimierung und Black-Box-Vorkonditionierung sind die Kooperationen von TU-Do mit R. Strzodka (MPI Informatik) und der Arbeitsgruppe Heuveline/Weiß (KIT Karlsruhe) hervorzuheben.

Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit Die in SKALB erarbeiteten Methoden und verbesserten Programmimplementierungen sind eine Grundlage für die weitere Drittmittelwerbung der Antragsteller auf nationaler und internationaler Ebene geworden. Unterschiedliche Vorbereitungen für mögliche Forschungsprojekte sind angelaufen.

Als Basis für eine wirtschaftliche Anschlussfähigkeit ist für IANUS zudem wichtig, den direkten Kontakt zu Industriekunden weiter auszubauen.

Am HLRS wurde damit begonnen, den Molekulardynamik-Code „ls1-MarDyn“, der im ersten HPC-Call des BMBF im IMEMO-Projekt gefördert wurde, mit Hilfe von Steereo an das Covise-(COLlaborative VISualization and SIMulation Environment)-System des HLRS zu koppeln. Damit soll auch dort eine interaktive Visualisierung und Steuerung über ein einheitliches Interface ermöglicht werden.

Zur Gruppe von Prof. Roller von der German Research School for Simulation Sciences in Aachen besteht Kontakt, so dass in SKALB gewonnenen Erkenntnisse teilweise auch dem BMBF-Projekt *HISSEM* aus dem 2. HPC-Call zu gute kommen können.

5 Dissemination

- Organisation mehrerer Minisymposia durch SKALB-Mitarbeiter auf der SIAM-Konferenz "Computational Science and Engineering 2011":
 - GPU Optimized CFD Applications Utilizing the Lattice Boltzmann Method, Christian Feichtinger (LSS), Christian Janßen (iRMB) — 8 Beiträge
 - Numerical Methods for Microfluidics, Stefan Donath (LSS), Liviu Clime — 8 Beiträge
 - Cracking Hard Nuts - Simulating Complex Flows Beyond Hundred Thousand Cores, Jan Götz (LSS) — 4 Beiträge
- Organisation eines Lattice-Boltzmann-Minisymposiums auf der ParCFD-Konferenz durch Prof. Wellein und Dr. Zeiser (RRZE) mit 4 Vorträgen von SKALB-Mitarbeitern.
- Organisation einer zweitägigen Lattice-Boltzmann-Special-Session auf der ParCFD-Konferenz durch Prof. Wellein und Dr. Zeiser (RRZE) mit elf Vorträgen von Gruppen aus acht Ländern (zwei weitere Vorträge aus SKALB und ein weiterer Vortrag eines SKALB-Mitarbeiters im regulären Konferenzprogramm).

- Ausrichtung eines GPU-Workshops am Zentralinstitut für Scientific Computing der FAU-Erlangen-Nürnberg.
- Die Publikation [P4] zu FE-gMG wurde mit dem Young Researcher Best Paper Prize der Civil Comp. Press ausgezeichnet.

Anhang: ausgewählte Veröffentlichungen & Vorträge

Veröffentlichungen

- [P1] S. H. BUIJSSEN. „Efficient Multilevel Solvers and High Performance Computing Techniques for the Finite Element Simulation of the Transient, Incompressible Navier–Stokes Equations“. Dissertation, TU Dortmund, Fakultät für Mathematik (2011). in Vorbereitung.
- [P2] C. FEICHTINGER, S. DONATH, H. KÖSTLER, J. GÖTZ UND U. RÜDE. WaLBerla: HPC software design for computational engineering simulations. *Journal of Computational Science* **1**(2), 105–112 (2011).
- [P3] M. GEVELER. „Multi-level parallel FEM Simulators for Continuum Mechanics“. Dissertation, Technische Universität Dortmund, Fakultät für Mathematik (Jan. 2012). Provisorischer Titel, in Vorbereitung.
- [P4] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE, P. ZAJAC UND S. TUREK. Efficient finite element geometric multigrid solvers for unstructured grids on GPUs. In P. IVÁNYI UND B. H. TOPPING (Hrsg.), „Second International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering“, S. 22 (Apr. 2011). Young Researcher Best Paper Award.
- [P5] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE, P. ZAJAC UND S. TUREK. Towards a complete FEM-based simulation toolkit on GPUs: Geometric multigrid solvers. In „23rd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics (Par-CFD’11)“ (Mai 2011).
- [P6] M. GEVELER, D. RIBBROCK, S. MALLACH, D. GÖDDEKE UND S. TUREK. A simulation suite for Lattice-Boltzmann based real-time CFD applications exploiting multi-level parallelism on modern multi- and many-core architectures. *Journal of Computational Science* **2**, 113–123 (Jan. 2011).
- [P7] M. GEVELER, D. RIBBROCK, S. MALLACH UND D. VAN DYK. HONEI Project Homepage (2007–2011).
- [P8] D. GÖDDEKE UND R. STRZODKA. Cyclic reduction tridiagonal solvers on GPUs applied to mixed precision multigrid. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems* **22**(1), 22–32 (Jan. 2011).
- [P9] D. GÖDDEKE UND R. STRZODKA. Mixed precision GPU-multigrid solvers with strong smoothers. In „IMA Annual Program Year Workshop High Performance Computing and Emerging Architectures“, University of Minnesota, Minneapolis (Jan. 2011).
- [P10] T. HÜBNER. „A Monolithic, Off-Lattice Approach to the Discrete Boltzmann Equation with Fast and Accurate Numerical Methods“. Dissertation, Technische Universität Dortmund, Fakultät für Mathematik (März 2011).

- [P11] T. HÜBNER UND S. TUREK. Efficient nonstationary simulations with an unstructured, monolithic Boltzmann discretization. (2011). in Vorbereitung.
- [P12] K. MASILAMANI, S. GANGULY, C. FEICHTINGER UND U. RÜDE. Hybrid lattice-Boltzmann and finite-difference simulation of electroosmotic flow in microchannel. *Fluid Dynamics Research* **43**(2), 1–25 (2011).
- [P13] D. RIBBROCK. „Numerical and algorithmic Concepts for FEM Software on Manycore Architectures“. Dissertation, Technische Universität Dortmund, Fakultät für Mathematik (Jan. 2012). Provisorischer Titel, in Vorbereitung.

Vorträge

- [T1] S. DONATH UND U. RÜDE. Capillary Flows with Parallel Free-Surface Lattice Boltzmann Method. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T2] C. FEICHTINGER. WaLBerla: Heterogeneous Simulation of Particulate Flows on GPU Clusters. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T3] C. FEICHTINGER, J. HABICH, H. KÖSTLER, U. RÜDE UND G. WELLEIN. WaLBerla: Heterogeneous Simulation of Particulate Flows on GPU Clusters. ParCDF 2011, Minisymposium ”Scalable Lattice Boltzmann Method Applications: Best practices on CPU and GPU clusters”, Barcelona, Spain (May 2011).
- [T4] M. GEVELER. Complex shallow water simulations through lattice-Boltzmann-based mesoscopic numerical treatment exploiting hybrid compute nodes. In „SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences: Shallow Water Simulations on Graphics Processing Units“ (März 2011).
- [P4] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE, P. ZAJAC UND S. TUREK. Efficient finite element geometric multigrid solvers for unstructured grids on GPUs. In P. IVÁNYI UND B. H. TOPPING (Hrsg.), „Second International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering“, S. 22 (Apr. 2011). Young Researcher Best Paper Award.
- [P5] M. GEVELER, D. RIBBROCK, D. GÖDDEKE, P. ZAJAC UND S. TUREK. Towards a complete FEM-based simulation toolkit on GPUs: Geometric multigrid solvers. In „23rd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics (Par-CFD’11)“ (Mai 2011).
- [T7] D. GÖDDEKE. Fast and accurate finite-element multigrid solvers for PDE simulations on GPU clusters (Apr. 2011). Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen, Germany.
- [T8] D. GÖDDEKE. Finite element methods on GPU systems (Juni 2011). CEA-EDF-INRIA Summer School: Toward petaflop numerical simulation on parallel hybrid architectures, Sophia-Antipolis, France.

- [T9] D. GÖDDEKE. Hardware-oriented finite element multigrid solvers for PDEs (März 2011). ASIM Workshop 2011 - Trends in Computational Science and Engineering-Foundations of Modeling and Simulation, Garching, Germany.
- [T10] D. GÖDDEKE. Mixed-precision GPU-multigrid solvers with strong smoothers and applications in CFD and CSM (Juni 2011). SIMTECH 2011 - International Conference on Simulation Technology, Stuttgart, Germany.
- [T11] D. GÖDDEKE UND R. STRZODKA. Mixed precision GPU-multigrid solvers with strong smoothers (Jan. 2011). IMA Annual Program Year Workshop High Performance Computing and Emerging Architectures, Institute of Mathematics and Its Applications, University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota, USA.
- [T12] J. GÖTZ, K. IGLBERGER, S. DONATH, C. FEICHTINGER UND U. RÜDE. WaLBerla: A software framework for CFD applications on 300.000 Compute Cores. Workshop "Multiscale fluid dynamics with the Lattice Boltzmann Method", Leiden, The Netherlands (Februar 2011).
- [T13] J. GÖTZ, K. IGLBERGER UND U. RÜDE. Direct Numerical Simulation of Particulate Flows on 294912 Processor Cores. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T14] J. HABICH UND C. FEICHTINGER. Performance Optimizations for Heterogeneous and Hybrid 3D Lattice Boltzmann Simulations on Highly Parallel On-Chip Architectures. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T15] J. HABICH, C. FEICHTINGER UND G. WELLEIN. GPU Optimizations at RRZE. ZISC GPU Workshop, FAU, Erlangen (April 2011).
- [T16] J. HABICH, C. FEICHTINGER UND G. WELLEIN. GPGPU implementation of the LBM: Architectural Requirements and Performance Results. ParCDF 2011, special session on LBM, Barcelona, Spain (May 2011).
- [T17] H. KÖSTLER. Numerical Codes on Multi-GPU Architectures. ASIM Workshop on Trends in Computational Science and Engineering, Garching, Germany (March 2011).
- [T18] H. KÖSTLER, C. FEICHTINGER, J. GÖTZ, S. DONATH UND U. RÜDE. HPC Software Design for Computational Engineering Simulations. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T19] U. RÜDE. Simulation and Animation of Complex Flows Using 294,192 Processor Cores. International Conference on Simulation Technology, Stuttgart, Germany (June 2011).
- [T20] U. RÜDE. Towards Exascale Computing Simulation on Millions of Cores. COSSE-Workshop "Mathematics in Waterland", Delft, The Netherlands (Februar 2011).
- [T21] M. SCHÖNHERR, M. GEIER UND M. KRAFCZYK. 3D GPGPU LBM Implementation on Non-Uniform Grids. ParCDF 2011, special session on LBM, Barcelona, Spain (May 2011).

-
- [T22] G. WELLEIN. Application Performance in the Multi-Core Era – Lessons to Be Learned for Exascale Computing (“Tales from the trenches”). invited; SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T23] G. WELLEIN, J. HABICH, G. HAGER UND T. ZEISER. Node-level performance of the lattice Boltzmann method on recent multicore CPUs. ParCDF 2011, special session on LBM, Barcelona, Spain (May 2011).
- [T24] G. WELLEIN, G. HAGER UND J. HABICH. The Lattice Boltzmann Method: Basic Performance Characteristics and Performance Modeling. SIAM CSE 2011, Reno, Nevada, USA (March 2011).
- [T25] G. WELLEIN UND T. ZEISER. Application Performance in the Multi-Core Era – Lessons to Be Learned for Exascale Computing (“Tales from the trenches”). invited; NEC User Group, Prague (June 2011).
- [T26] M. WITTMANN UND T. ZEISER. Domain decomposition and locality optimization for large-scale lattice Boltzmann simulations. ParCDF 2011, special session on LBM, Barcelona, Spain (May 2011).
- [T27] T. ZEISER. Brief introduction to LBM. ParCDF 2011, special session on LBM, Barcelona, Spain (May 2011).