

# BAŞARIM

## 2022

BİLDİRİ ÖZETLERİ KİTABI



7. ULUSAL YÜKSEK BAŞARIMLI  
HESAPLAMA KONFERANSI



Hewlett Packard  
Enterprise

11-13 MAYIS 2022

SABANCI ÜNİVERSİTESİ

*Altunizade Dijital Kampüs, İstanbul*



TRUBA  
Turkish Science e-Infrastructure

. Sabancı .  
Üniversitesi



ODTÜ  
METU

Bu kitapçığın elektronik haline  
<https://basarim.org.tr/2022>  
adresinden ulaşılabilir.

Bu kitapçık [https://github.com/maximelucas/AMCOS\\_booklet](https://github.com/maximelucas/AMCOS_booklet) adresindeki açık  
kaynak  $\text{\LaTeX}$  şablonu kullanılarak hazırlanmıştır.





# İçindekiler

<b>Hakkında</b>	<b>8</b>
BAŞARIM . . . . .	8
Değerlendirme Komitesi . . . . .	9
Düzenleme Komitesi . . . . .	11
Yerel Organizasyon Komitesi . . . . .	11
<b>Program</b>	<b>12</b>
11 Mayıs Çarşamba . . . . .	12
12 Mayıs Perşembe . . . . .	14
13 Mayıs Cuma . . . . .	16
Çalışma Grubu Toplantıları ve Diğer Oturumlar . . . . .	18
<b>Bildiri Listesi</b>	<b>19</b>
<b>Modeling of flow and mass transfer in virtual porous media</b>	
<i>Aziz Mohammed, Harun Koku</i> . . . . .	19
<b>Orgu Kuantum Renk Dinamiginde <math>\Omega_{cc}</math> Baryonunun Yarı-Leptonik Gecisinin İncelenmesi</b>	
<i>Hüseyin Bahtiyar</i> . . . . .	20
<b>Study of Dilepton Spectrum with Machine Learning Approach at the LHC</b>	
<i>Serpil Y. Kuzu</i> . . . . .	21
<b>Preliminary Data Recognition on Collision Images at Large Hadron Collider with Machine Learning Techniques</b>	
<i>İlkay T. Çakır, Sajad Einy, Sinan Kuday</i> . . . . .	22
<b>Static and Dynamic Modeling of N-Methyl-Indole (N=1-6) in Water at the B3LYP/AMBER Level Using the CO-BRAMM Interface</b>	
<i>Çağlar Karaca, Fehmi Bardak, Etem Köse, Ahmet Ataç</i> . . . . .	23
<b>Ab-initio MD Investigation of Co-based Planar Molecular Catalyst Immersed in Water: H<sub>2</sub> Production Mechanism</b>	
<i>Ipek Güçlü, Yeliz Gürdal</i> . . . . .	24
<b>Theoretical Insight Into Hydrogen Evolution Mechanism of Pentadentate Molecular Catalyst Having Cobalt As Reaction Center</b>	
<i>Ayas Kiser, Yeliz Gürdal</i> . . . . .	25
<b>Effect of Copper-Coated Storage Materials on Reaction Kinetics</b>	
<i>Gamze Atalımiş, Serkan Toros, Nebi Yelegen, Yüksel Kaplan</i> . . . . .	26
<b>Yapay zeka ile hızlandırılmış nano-malzeme keşfi</b>	
<i>Şener Özönder, H. Kübra Küçükkartal</i> . . . . .	27

<b>Size dependent change of mean square displacement in gold nanocrystals: A molecular dynamics simulation</b>	28
<i>Merdan Batyrow, İlknur Eruçar, Hande Öztürk</i>	
<b>Aerodinamik Veritabanı Modellerinin Adaptif Deney Tasarım Yöntemi ile İyileştirilmesi ve Sürecin Hızlandırılması</b>	29
<i>Ertan Demiral, Kivanç Arslan, Çağatay Şahin</i>	
<b>Classification of Stochastic Processes with Topological Data Analysis</b>	30
<i>İsmail Güzel, Atabey Kaygun</i>	
<b>Dağıtık Ortamda Derece İlintileri Bazlı Gerçekçi Çizge Üretilimi</b>	31
<i>Furkan Atas, Mehmet B. Akgün</i>	
<b>A Simplified Methodology For Rotor-Stator Interaction Problems With An Upwind Linearized Harmonic Solver</b>	32
<i>Arash Karshenass, Özgür U. Baran, Onur Ata</i>	
<b>Parallel Performance Comparison of GMRES Type Sparse Matrix Solvers for Inviscid Flux Schemes using Open-Source CFD Solver SU2</b>	33
<i>Uğurtan Demirtaş, Nilay Sezer-Uzol</i>	
<b>Kimyasal tepkimeli türbülanslı akışlar için hesaplamalı akışkanlar dinamiği çözucusü, lestr3d</b>	34
<i>Tamer Şener, Burakhan Şüküroğlu, Ayşe G. Güngör</i>	
<b>RANS and LES of a Turbulent Non-Premixed Flame Using OpenFOAM</b>	35
<i>Yunus E. Karasu, Tuğba Zaman, Ayşe G. Güngör</i>	
<b>Kısmi Karşımlı bir Yanma Odası Tasarımında Girdap Etkilerinin İncelen- mesi</b>	36
<i>Yunus E. Karasu, Tuğba Zaman, Ayşe G. Güngör, Dilay Güleryüz, Emre Böncü, Tahsin B. Kiymaz, Mehmet Karaca, Barış Yılmaz, Christophe Allouis, İskender Gökalp</i>	
<b>Parallel Aeroacoustic Computation of Unsteady Transonic Cavity Flow via Open CFD Source Codes</b>	37
<i>Ali Can Fadıl, Baha Zafer</i>	
<b>Implementations of the Needleman-Wunsch Algorithm for GPU Architec- tures</b>	38
<i>Furkan Kurt, Deniz Turgay Altılar, Ayşe Yılmazer Metin</i>	
<b>Performance Evaluation of CUDA Optimizations for Convolution Opera- tions</b>	39
<i>Burak Topçu, Işıl Öz</i>	
<b>Accelerating Graph Embedding on a Single GPU Using Graph Reordering</b>	40
<i>Amro A. Aljundi, Kamer Kaya</i>	
<b>GPU-accelerated floating random walk based transient heat conduction solver</b>	41
<i>Ersin Yıldız, Altuğ M. Başol</i>	

<b>Feasibility Study of Adding GPU Support to SU2 with ILU(0) Preconditioner</b>	
<i>Najeeb Ahmad, Bilge K. Görür, Ugurtan Demirtaş, Özgür Ateşoğlu, Didem Unat</i>	42
<b>Izometrik Kasılmada Aponevroz Ortusunun Rolu ve Seklinin Eniyileme Yontemiyle Tahminine Yonelik Hesaplamlar</b>	
<i>Şükrü Furkan Taşdemir, Cevat Volkan Karadağ, Ali Fethi Okyar</i>	43
<b>SIMD Instructions for Ethereum Virtual Machine</b>	
<i>Aykut Bozkurt, Can Özturan</i>	44
<b>A Graph Transformation Strategy for Optimizing SpTRSV</b>	
<i>Buse Yılmaz, Abdulkadir F. Yıldız</i>	45
<b>Pekistirmeli ogrenme ile 5G baz istasyonunun otomize olarak yapılandırılması</b>	
<i>H. Tuğrul Erdoğan, Adnan Özsoy</i>	46
<b>Makine Öğrenmesi tabanlı Gerçek Zamanlı Hedef Tespiti için Güç Verimli Paralel Hesaplama</b>	
<i>Alparslan Fişne, Faruk Yavuz, Adnan Özsoy</i>	47
<b>Development of a Generic Neural Network Potential for IR-MOF Series</b>	
<i>Ömer Tayfuroğlu, Abdulkadir Koçak, Yunus Zorlu</i>	48
<b>Tek Boyutlu, Sıralı, Büyük Ölçekli Veri Dizileri için Sıralı Örüntü Madenciliği Yaklaşımı</b>	
<i>Ali Burak Can, Meryem Uzun-Per, Mehmet S. Aktaş</i>	49
<b>Sensitivity Analysis of Federated Learning over Decentralized Data and Communication Rounds</b>	
<i>Mustafa Barış Çamlı, İsmail Arı</i>	50
<b>Çekirdek Sayısının Hesaplamlı Gemi Direnci Analiz Performansına Etkileri</b>	
<i>Ali C. Koyuncuoğlu, Çağrı Aydin, Uğur. O. Ünal, Barış Barlas</i>	51
<b>Kullanılan Çekirdek Sayısının Kapsama Alanı Haritası Çıkarılma Performansına Etkisi</b>	
<i>Uğur Erbaş, Mehmet Barış Tabakçıoğlu</i>	52
<b>Efficient Thread-to-Core Mapping for Application-level Redundant Multithreading</b>	
<i>Sanem Arslan, Osman Ünsal</i>	53
<b>COMDETECTIVE<sup>+</sup>: An Inter-Thread Communication Analyzer for AMD Multicores</b>	
<i>Muhammad A. Sasongko, Milind Chabbi, Paul H. J. Kelly, Didem Unat</i>	54
<b>Approximate Execution of Critical Sections for Performance-Accuracy Trade-off</b>	
<i>Zuhal Altuntas, Sanem Arslan, Betül Boz</i>	55
<b>Paralel İşlerin Çizelgelemesinde İşlemci Tahsisi için Hipersezgisel Yaklaşım</b>	
<i>Gülçin Bolat, Fatih E. Sevilgen</i>	56

<b>Yazar İndeksi</b>	<b>57</b>
<b>Organizasyon Hakkında</b>	<b>60</b>
Sabancı Üniversitesi Altunizade Dijital Kampüse Ulaşım . . . . .	60
<b>Partner Kuruluşlar ve Sponsorlar</b>	<b>62</b>
Sponsorlar . . . . .	62

# Hakkında

## BAŞARIM

Günümüzde yeniliğin ve dijital dönüşümün olduğu her yerde izlerini gördüğümüz Yüksek Başarımlı Hesaplama ile ulusal ölçekte yapılan çalışmaları yaygınlaştırmak, geliştirmek, deneyimleri aktarmak ve bu teknolojiyi kullanan paydaşları bir araya getirmek amacıyla sürdürülmekte olan ULUSAL YÜKSEK BAŞARIMLI HESAPLAMA KONFERANSI'nın yedincisi BAŞARIM 2022 başlığı altında düzenlenecektir. Konferans TÜBİTAK ULAKBİM, Sabancı Üniversitesi, Orta Doğu Teknik Üniversitesi iş birliğiyle ve EuroCC@Türkiye projesinin desteği ile 11-13 Mayıs 2022 tarihleri arasında, sınırlı sayıda yüz yüze (Sabancı Üniversitesi, Altunizade Dijital Kampüs, İstanbul) ve geniş ölçekte çevrimiçi (Zoom webinar, Zoom meeting) katılımlı hibrit yapıda gerçekleştirilecektir.

## Değerlendirme Komitesi

Adnan Özsoy	Hacettepe Üniversitesi
Ahmet Ercan Topçu	American University of the Middle East
Ahmet Erdem Sarıyuçu	University of Buffalo
Ahmet Fatih Mustaçoğlu	TÜBİTAK BİLGE
Ahmet Sayar	Kocaeli Üniversitesi
Antoine Marion	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Barış Aktemur	Intel GmbH
Barış Ethem Süzek	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Bekir Bediz	Sabancı Üniversitesi
Bora Uçar	ENS Lyon
Bülent Çatay	Sabancı Üniversitesi
Buse Yılmaz	İstanbul Üniversitesi
Can Ozturan	Boğaziçi Üniversitesi
Canan Atilgan	Sabancı Üniversitesi
Cem Sevik	Eskişehir Teknik Üniversitesi
Cevat Şener	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Cevdet Aykanat	Bilkent Üniversitesi
Didem Unat	Koç Üniversitesi
Emre Sururi Taşçı	Hacettepe Üniversitesi
Enver Özdemir	İstanbul Teknik Üniversitesi
Erol Şahin	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Erol Yıldırım	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Ferhat Özgür Çatak	Simula Research Laboratuary
Galip Aydın	Fırat Üniversitesi
Gürhan Gündüz	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Hande Toffoli	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Harun Koku	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Hasan Bulut	Ege Üniversitesi
Hasan Dağ	Kadir Has Üniversitesi
Hasan Kurban	Indiana Üniversitesi
Hilal Arslan	Yıldırım Beyazıt Üniversitesi
Hüsnü Yenigün	Sabancı Üniversitesi
İlker Birbil	University of Amsterdam
Ismail Arı	Özyegin Üniversitesi
Jose L. Abellan	Catholic University Saint Anthony Murcia
Mehmet Dalkılıç	Indiana University

Mehmet Koyutürk	Case Western Reserve University
Mehmet Siddık Aktaş	Yıldız Teknik Üniversitesi
Metin Aktulga	Michigan State University
Metin Muradoğlu	Koç Üniversitesi
Mohammed Alser	ETH Zürich
Mücahid Kutlu	TOBB ETÜ
Murat Keçeli	Argonne National Laboratory
Murat Manguoğlu	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Nilay Sezer Uzol	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Oğuz Gülseren	Bilkent Üniversitesi
Onur Varol	Sabancı Üniversitesi
Osman Barış Malcioğlu	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Osman Serdar Gedik	Ankara Yıldırım Beyazıt Üniversitesi
Özcan Dülger	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Özcan Öztürk	Bilkent Üniversitesi
Pınar Duygulu Şahin	Hacettepe Üniversitesi
Pınar Karagöz	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Reha Oğuz Selvitopi	Lawrence Berkeley National Laboratory
Sinan Kaan Yerli	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Şükrü Torun	Ankara Yıldırım Beyazıt Üniversitesi
Süleyman Eken	Kocaeli Üniversitesi
Tan Nguyen	Lawrence Berkeley National Laboratory
Tandaç Furkan Güçlü	Sabancı Üniversitesi
Tuğba Önal Süzek	Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi
Tuğrul Senger	İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü

## **Düzenleme Komitesi**

Bekir Bediz	Sabancı Üniversitesi
Ahmet Demirelli	Sabancı Üniversitesi
Merve Demirtaş	TÜBİTAK ULAKBİM
Özcan Dülger	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Mehmet Karaca	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Pınar Karagöz	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Kamer Kaya	Sabancı Üniversitesi
Murat Manguoğlu	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Öznur Taştan	Sabancı Üniversitesi
Hande Toffoli	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Özlem Sarı	TÜBİTAK ULAKBİM
Sevil Sarıkurt	TÜBİTAK ULAKBİM
Aras Saygın	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Cevat Şener	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Nilay Sezer Uzol	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Onur Varol	Sabancı Üniversitesi
Hüsnü Yenigün	Sabancı Üniversitesi
Sinan Kaan Yerli	Orta Doğu Teknik Üniversitesi

## **Yerel Organizasyon Komitesi**

Amro Alabsi Aljundi	Sabancı Üniversitesi
Başak Amasya	Sabancı Üniversitesi
Kaya Gökalp	Sabancı Üniversitesi
Şeyma Selcan Mağara	Sabancı Üniversitesi
Arda Şener	Sabancı Üniversitesi
Fatih Taşyaran	Sabancı Üniversitesi
Ahmet Yazıcı	Sabancı Üniversitesi
Ceren Yıldırım	Sabancı Üniversitesi

# Program

## 11 Mayıs Çarşamba

08:30-09:00	<b>Katılımcıların Girişi - Kayıt</b>
09:00-09:45	<b>Açılış Konuşmaları</b> <i>Prof. Hasan Mandal et. al.</i>
09:45-10:45	<b>When HPC Graph Analytics meets Graph Databases</b> <i>Prof. Ümit Çatalyürek</i>
10:45-11:00	<b>KAHVE ARASI</b>
11:00-11:15	<b>Modeling of flow and mass transfer in virtual porous media</b> <i>Aziz Mohammed et al.</i>
11:15-11:30	<b>Örgü Kuantum Renk Dinamiğinde <math>\Omega_{cc}</math> Baryonunun Yarı-Leptonik Geçişinin İncelenmesi</b> <i>Hüseyin Bahtiyar</i>
11:30-11:45	<b>Study of Dilepton Spectrum with Machine Learning Approach at the LHC</b> <i>Serpil Yalçın Kuzu</i>
11:45-12:00	<b>Preliminary Data Recognition on Collision Images at Large Hadron Collider with Machine Learning Techniques</b> <i>İlkay Türkay Çakır et al.</i>
12:00-13:30	<b>ÖĞLE ARASI</b>

	<b>Static and Dynamic Modeling of N-Methyl-Indole (N=1-6) in Water at the B3LYP/AMBER Level Using the COBRAMM Interface</b> <i>Çağlar Karaca et al.</i>
13:30-13:45	<b>Ab-initio MD Investigation of Co-based Planar Molecular Catalyst Immersed in Water: H<sub>2</sub> Production Mechanism</b> <i>Ipek Güçlü et al.</i>
13:45-14:00	<b>Theoretical Insight Into Hydrogen Evolution Mechanism of Pentadentate Molecular Catalyst Having Cobalt As Reaction Center</b> <i>Ayas Kiser et al.</i>
14:00-14:15	<b>Effect of Copper-Coated Storage Materials on Reaction Kinetics</b> <i>Gamze Atalmış et al.</i>
14:15-14:30	<b>Yapay Zeka ile Hızlandırılmış Nano-malzeme Keşfi</b> <i>Sener Özönder et al.</i>
14:30-14:45	<b>Size dependent change of mean square displacement in gold nanocrystals: A molecular dynamics simulation</b> <i>Merdan Batyrow et al.</i>
14:45-15:00	<b>KAHVE ARASI</b>
15:00-15:15	<b>Sponsor Firma Sunumu - NVIDIA</b>
	<b>Aerodinamik Veritabanı Modellerinin Adaptif Deney Tasarım Yöntemi ile İyileştirilmesi ve Sürecin Hızlandırılması</b> <i>Ertan Demiral et al.</i>
15:45-16:00	<b>Classification of Stochastic Processes with Topological Data Analysis</b> <i>İsmail Güzel et al.</i>
16:00-16:15	<b>Dağıtık Ortamda Derece İllintileri Bazlı Gerçekçi Çizge Üretimi</b> <i>Furkan Atas et al.</i>
16:15-16:30	

# 12 Mayıs Perşembe

09:00-09:15 Katılımcıların Girişİ

09:15-10:15 Davetli Konuşma - TBA Prof. Mateo Valero

10:15-10:30 KAHVE ARASI

A Simplified Methodology For Rotor-Stator Interaction Problems With An Upwind Linearized Harmonic Solver

Arash Karshenass et al.

Parallel Performance Comparison of GMRES Type Sparse Matrix

Solvers for Inviscid Flux Schemes on Open-Source CFD Solver SU2

Uğurhan Demirtaş et al.

10:45-11:00

Turbülanslı reaktif akışlar için hesaplamalı akışkanlar dinamiği çözümü, Iestr3d

Tamer Şener et al.

11:00-11:15

RANS and LES of a Turbulent Non-Premixed Flame Using OpenFOAM

Yunus Emre Karasu et al.

11:30-11:45

Kısmı Karışıklı bir Yanma Odası Tasarımında Girdap Etkilerinin İncelenmesi

Yunus Emre Karasu et al.

Parallel Aeroacoustic Computation of Unsteady Transonic Cavity Flow via

Open CFD Source Codes

Ali Can Fadıl et al.

11:45-12:00

12:00-13:30 ÖĞLE ARASI

13:30-13:45 Implementations of the Needleman-Wunsch Algorithm for GPU Architectures

Furkan Kurt et al.

13:45-14:00 Performance Evaluation of CUDA Optimizations for Convolution Operations

Burak Topçu et al.

14:15-14:15 Accelerating Graph Embedding on a Single GPU Using Graph Reordering

Amro Alabsi Aljundi et al.

14:15-14:30 GPU-accelerated Floating Random Walk Based Transient Heat Conduction Solver

Altuğ Melik Başok et al.

14:15-14:30 Feasibility Study of Adding GPU Support to SU2 with ILU(0) Preconditioner

Najeeb Ahmad et al.

14:45-15:00 KAHVE ARASI

15:00-15:30 **Sponsor Firma Sunumu - HPE**

15:30-15:45 **İzometrik Kasılmada Aponevroz Örtüsünün Rolü ve Şeklinin Eniyileme Yöntemiyle Tahminine Yönelik Hesaplamalar**

*Ş. Furkan Taşdemir et al.*

15:45-16:00 **SIMD Instructions for Ethereum Virtual Machine**

*Aykurt Bozkurt et al.*

16:00-16:15 **A Graph Transformation Strategy for Optimizing SpTRSV**

*Buse Yılmaz et al.*

16:15-16:30 **KAHVE ARASI**

16:30-17:50 **5 Dakikalık Tez Yarışması**

19:00-21:30 **Gala Yemeği**

## 13 Mayıs Cuma

09:00-09:15	<b>Pekiştirmeli öğrenme ile 5G baz istasyonunun otomize olarak yapılandırılması</b> <i>H. Tuğrul Erdoğan</i>
09:15-09:30	<b>Makine Öğrenmesi tabanlı Gerçek Zamanlı Hedef Tespiti için Güç Verimli Paralel Hesaplama</b> <i>Alparslan Fişne et al.</i>
09:30-09:45	<b>Development of a Generic Neural Network Potential for IR-MOF Series</b> <i>Ömer Tayfuncuoğlu et al.</i>
09:45-10:00	<b>Tek Boyutlu, Sıralı, Büyük Ölçekli Veri Dizileri için Sıralı Örüntü Madenciliği Yaklaşımı</b> <i>Ali Burak Can et al.</i>
10:00-10:15	<b>Sensitivity Analysis of Federated Learning over Decentralized Data and Communication Rounds</b> <i>Mustafa Barış Çamlı et al.</i>
10:15-10:30	<b>KAHVE ARASI</b>

	<b>Çekirdek Sayısının Hesaplamlı Gemi Direnci Analiz Performansına Etkileri</b> <i>Ali Can Koyuncu et al.</i>
10:30-10:45	<b>Kullanılan Çekirdek Sayısının Kapsama Alanı Haritası Çıkarılma Performansına Etkisi</b> <i>Uğur Erbaş et al.</i>
10:45-11:00	<b>Efficient Thread-to-core Mapping for Application-level Redundant Multithreading</b> <i>Sanem Arslan et al.</i>
11:00-11:15	<b>ComDetective+: An Inter-Thread Communication Analyzer for AMD Multicores</b> <i>Muhammad Aditya Sasongko et al.</i>
11:15-11:30	<b>Approximate Execution of Critical Sections for Performance-Accuracy Tradeoff</b> <i>Zuhal Altuntaş et al.</i>
11:30-11:45	<b>Paralel İşlerin Çizelgelemesinde İşlemci Tahsisinin Hipersezgisel Yaklaşım</b> <i>Gülçin Bolat et al.</i>
11:45-12:00	
12:00-13:30	<b>ÖĞLE ARASI</b>

13:30-15:30 **PANEL**

15:30-15:45 **KAHVE ARASI**

15:45-16:45 **Tez Yarışması Ödülleri ve Kapanış**

# Çalışma Grubu Toplantıları ve Diğer Oturumlar

## 11 Mayıs Çarşamba

11:00-12:00 TRUBA - UHeM Bilgilendirme Oturumu

### Çalışma Grubu Toplantısı

13:30-15:00 Hesaplama Akışkanlar Dinamiği - 1. Oturum  
*Nilay Sezer Uzol et al.*

### Çalışma Grubu Toplantısı

15:15-16:30 Hesaplama Akışkanlar Dinamiği - 2. Oturum  
*Mehmet Karaca et al.* Computhon

## 12 Mayıs Perşembe

### Focus Group Meetup

10:30-12:00 RISCV Architectures  
*Hasan Erdem Yanıtır et al.* Computhon

### Çalışma Grubu Toplantısı

15:00-16:15 Moleküler Dinamik Simülasyonları İçin Yüksek Başarılı Hesaplama Kümelerinin Kullanımı  
*Ezgi Karaca*

## 13 Mayıs Cuma

### Çalışma Grubu Toplantısı

09:00-10:15 Blokzincir 1. Oturum Computhon

### Çalışma Grubu Toplantısı

10:30-12:00 Blokzincir 2.oturum  
Çalışma Grubu Toplantısı  
Büyük Ağ Analizi  
*Pınar Karagöz et al.*

# Bildiri Listesi

Çarşamba 11:00-11:15

BASARIM2022

Oda: 202

## **Modeling of flow and mass transfer in virtual porous media**

**Aziz MOHAMMED, Harun KOKU**

Middle East Technical University Department of Chemical Engineering - Ankara, Turkey

In this work we simulated flow and mass transfer in virtual porous media for a liquid chromatography application. The three-dimensional geometry was formed by a diffusion-limited aggregation approach. The velocity field was obtained using the lattice Boltzmann methodology (LBM) via the PALABOS open-source library with modification. For mass transfer, a tracer-based random walk particle tracking (RWPT) model was used to obtain pulse simulation results.

### **Index Terms**

Chromatography, Random Walk, Flow simulation, mass transfer.

# Orgu Kuantum Renk Dinamiginde $\Omega_{cc}$ Baryonunun Yarı-Leptonik Gecisinin İncelenmesi

Hüseyin BAHTİYAR

Mimar Sinan Güzel Sanatlar Üniversitesi Fizik Bölümü - İstanbul, Türkiye

Tılsımlı parçacıkların yarı leptonik bozunmalarını incelenmesi, standart modeli test etmede öne çıkan bir yöntemdir. Tılsımlı baryon sektörünün zayıf bozunmalarındaki son zamanlarda geliştirilen deneylerden gelen motivasyon ile 2+ 1 çeşnili örgüler üzerinde  $\Omega_{cc}^+ \rightarrow \Omega_c^0 \ell^+ \nu$  geçişinin form faktörleri incelenmiştir. Öncelikte iki ve üç nokta fonksiyonları hesaplanmış, boyutsuz projeksiyonlu korelatörler çıkarılmış ve form faktörler oluşturulması için korelatörler birleştirilmiştir. Sıfır aktarılan momentum limitinde  $f_1$  ve  $g_1$  form faktörleri hesaplanmış diğer modellerle uyumlu olduğu gözlemlenmiştir.

## Anahtar Kelimeler

Tılsımlı baryonlar, yarıleptonik form faktörler, Orgu KRD

## Study of Dilepton Spectrum with Machine Learning Approach at the LHC

Serpil Yalçın KUZU

Firat University Faculty of Science, Department of Physics - Elazig, Turkey

Machine learning (*ML*) application in diverse fields has been favored to elevate the performance of human endeavors due to its effectiveness in solving different types of real-world issues requiring intensive computation. In particle physics, the investigation of dimuons ( $\mu^+\mu^-$ ) has an important role to understand various systems produced at high energy collisions. The absence of strong interaction makes these lepton pairs suitable to examine particles such as  $J/\psi$ ,  $\Upsilon$  and  $Z$  boson. Dimuons can be identified by sophisticated techniques depending on cut-based methods as other particle analyses. In this contribution, the implementation of Random Forest and Weighted Random Forest ML models for defining dimuon pairs produced in proton-proton collisions at 7TeV at the LHC are discussed.

### Index Terms

Dimuon, lepton pairs, particle analysis, random forest, weighted random forest, machine learning.

# Preliminary Data Recognition on Collision Images at Large Hadron Collider with Machine Learning Techniques

**İlkay Türk ÇAKIR<sup>1,2</sup>, Sajad EINY<sup>3</sup>, Sinan KUDAY<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> Ankara University Faculty of Engineering, Department of Artificial Intelligence Data Engineering - Ankara, Turkey

<sup>2</sup> Giresun University Faculty of Engineering, Department of Energy Systems Engineering - Giresun, Turkey

<sup>3</sup> İstanbul Aydin University, Faculty of Engineering, Department of Computer Engineering - İstanbul, Turkey

<sup>4</sup> Ankara University, Faculty of Science, Department of Physics - Ankara, Turkey

A preliminary analysis have been implemented to distinguish good events in Monte Carlo (MC) data using image recognition tools. All images from MC simulations are created with DELPHES detector program with ATLAS detector card. The experimental dataset contains some of the signal events in three different forms: side front, and -plane. We increased the number of images to 600 with improving image resolution, and quality by utilizing Image Data Augmentation code from Keras (Python deep learning API). Furthermore, we utilized transfer learning from ImageNet database due to overfitting problems. Different types of well-known models are employed for classification task such as VGG16, VGG19, Resnet 50, MobileNetv2 and Xception.

## Index Terms

ATLAS, machine learning, deep learning algorithm, Delphes

# Static and Dynamic Modeling of N-Methyl-Indole (N=1-6) in Water at the B3LYP/AMBER Level Using the COBRAMM Interface

Caglar KARACA<sup>1</sup>, Fehmi BARDAK<sup>2</sup>, Etem KOSE<sup>3</sup>, Ahmet ATAC<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Manisa Celal Bayar University Applied Research Center - Manisa, Turkey

<sup>2</sup> Manisa Celal Bayar University Department of Physics - Manisa, Turkey

<sup>3</sup> Manisa Celal Bayar University Technical Sciences Vocational School - Manisa, Turkey

Computational dynamic emission spectroscopy in rigid medium solvents is a highly difficult technique. In recent years, technological improvement makes realistic models capable of experimental observables is possible. In this study, we have improved a successful simulation strategy in excitation and emission energies using hybrid models. The selected high layer target molecules and low and mobile layer water molecules are optimized with together. The hybrid QM/MM level is a powerful tool to efficiently is described the interactions of a molecule with its solvent medium. In this context, we simulate static and dynamic excited and emission spectra using COBRAMM interface protocol at the B3LYP/AMBER for rigid solvent models, TIP3P models are used within the mobile MM layer up to 50 nanometers radius away, for methyl derivatives of indole to a room-temperature. The QM/MM optimization calculations give us reliable structures both ground and excited states. Energy fluctuation of systems involves four states starting on the S0-S3, computations have been carried out by the same level for 150 femtoseconds. These calculated processes in ultrafast time scale have been explained how the evolution of excited and emission spectra when solvent molecules are movable. S0 and S1 geometry optimization of molecule in water droplet consisting of 500 TIP3P water are computed B3LYP/6-311++G(d,p) basis set and all low and mobile layer data was obtained Amber GAFF force field.

S1 state geometry is converged approximately within 120 optimization cycles while the S0 optimization cycle takes longer time because of librational movements of water. Because this librational motion causes chaos at the RMS/D value, the number of mobile molecules has been reduced from the optimization steps. The energy difference between the first excited and ground state has a fluctuating character. The distribution of these fluctuations has been analyzed to create Fluctuating Gap Distribution (FGD) which reveals the most appropriate excitation/emission wavelengths.

## Index Terms

QM/MM md, Absorption and Emission, Lineer Response Theory

# Ab-initio MD Investigation of Co-based Planar Molecular Catalyst Immersed in Water: H<sub>2</sub> Production Mechanism

**İpek GÜCLÜ, Yeliz GÜRDAL**

Adana Alparslan Türkeş Science and Technology University Bioengineering Department - Adana, Turkey

The common use of hydrogen as a renewable energy source has been one of today's challenge which if solved can replace dependence on fossil fuels. One of the sustainable way of H<sub>2</sub> production is photo-catalytic water reduction reaction catalyzed by molecules having transition metals as reaction centers. In this work, we theoretically investigate water reduction mechanism of planar Cobalt based catalyst by employing Ab-initio Molecular Dynamics (AIMD) and Metadynamics (MTD) simulations. We model the first electron injection intermediate step of the ECEC reaction mechanism of the water reduction reaction. We identify the solvent response following the electron injection.

## Index Terms

Ab-initio Molecular Dynamics, Density Functional Theory, Cobalt-Bipyridine-Based Catalysts, Water Reduction

# Theoretical Insight Into Hydrogen Evolution Mechanism of Pentadentate Molecular Catalyst Having Cobalt As Reaction Center

Ayas KİSER, Yeliz GÜRDAL

Adana Alparslan Türkeş Science and Technology University Bioengineering Department - Adana, Turkey

Hydrogen ( $H_2$ ) molecule is a significant carrier of energy that is found naturally in biomass, water, and hydrocarbon. In this study, by applying Abinitio Molecular Dynamics simulations, we theoretically investigate water reduction mechanism of Co-based poly-pyridyl catalyst having octahedral coordination. For the hydrogen production cycle, ECEC mechanism is utilized and each intermediate step is simulated in order to determine the allowed spin states as well as solvent response around the reaction center. We demonstrate that, following the first electron injection, it is more likely for the catalyst to continue to the first protonation intermediate step with singlet multiplicity. Subsequently, following the first protonation step, Co center gains the required proton from the water molecule in the first solvation shell. Along the simulation, fast rotation of the nearest water molecule certifies the efficiency of the  $CoPy_5$  for the water reduction reaction.

## Index Terms

Ab-initio molecular dynamics,  $H_2$  production, water reduction

## Effect of Copper-Coated Storage Materials on Reaction Kinetics

Gamze ATALMIŞ<sup>1</sup>, Serkan TOROS<sup>2</sup>, Nebi YELEGEN<sup>1</sup>, Yüksel KAPLAN<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Niğde Ömer Halisdemir University Mechanical Engineering Department, Prof. Dr. T. Nejat Veziroglu Clean Energy Research Center - Nigde, Turkey

<sup>2</sup> Niğde Ömer Halisdemir University - Nigde, Turkey

In this study, hydrogen storage in metal hydride reactors was investigated numerically. A mathematical model including complex heat and mass transfer, which considers the flow occurring during the hydrogen charge/discharge process in metal hydride reactors, has been developed. In the experimental study, the thermal conductivity of the storage material, which was coated with copper and turned into pellets, was improved by 500-750 percent in order to accelerate the hydrogen charge/discharge processes and to get the needed hydrogen in a short time and at the desired flow rates. The developed macro modeling was solved numerically with the help of the COMSOL Multiphysics® software package. A two-dimensional axisymmetric model was developed to study the hydrogen absorption reaction. Simulation studies have shown that permeability of the metal hydride to be used in the study and thermal conductivity are essential for the optimization design of the metal hydride tank.

### Index Terms

hydrogen storage, metal hydride, two-dimensional axisymmetric.

## Yapay zeka ile hızlandırılmış nano-malzeme keşfi

**Şener ÖZÖNDER<sup>1</sup>, H. Kübra KÜÇÜKKARTAL<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> İstinye Üniversitesi Elektrik-Elektronik Mühendisliği - İstanbul, Türkiye

<sup>2</sup> Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Bilgisayar Mühendisliği - Eskişehir, Türkiye

Kimyasallar, ilaçlar, biyomalzemeler ve alaşımlar gibi malzemelerin çalışılması uzun yıllara yayılan süreçler gerektirmektedir. Ayrıca bu malzemelerin bulunan fiziksel ve kimyasal özellikleri pratik uygulamalar için aranan özelliklerle aynı olmayabilir. Bu uzun süreç yeni yapay zeka ve optimizasyon yöntemleriyle tersine çevrilebilir. Bir malzemeyi ve onun yapısal olarak yakın türevlerini sağlamak yerine, o malzemenin tüm olası türevlerini içeren kimyasal veya yapısal parametre uzayı hızlı ve akıllı bir şekilde taranarak istenilen fiziksel veya kimyasal özelliğe sahip malzeme yapısı bulunabilir. Bu amaçla Bayes optimizasyonu, Gauss regresyonu ve yapay sinir ağları hem laboratuvara sentez ile hem de bilgisayar ortamında simülasyonlar ile malzeme keşfini hızlandırmak için kullanılabilir.

### Anahtar Kelimeler

malzeme keşfi, makine öğrenmesi, yapay zeka, Bayes optimizasyonu, Gauss regresyonu, yapay sinir ağları, grafen.

# Size dependent change of mean square displacement in gold nanocrystals: A molecular dynamics simulation

**Merdan BATYROW<sup>1</sup>, İlknur ERUÇAR<sup>2</sup>, Hande ÖZTÜRK<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Özyegin University Dept. of Mechanical Engineering - İstanbul, Turkey

<sup>2</sup> Özyegin University Dept. of Natural and Mathematical Sciences - İstanbul, Turkey

Mean square displacements (MSDs) of 5, 10, 15, 20, and 30 nm diameter spherical gold nanocrystals were studied with Molecular Dynamics (MD) simulations at room temperature and below. Our analyses show that there is a strong size and temperature dependency of the MSD of spherical gold nanocrystals. Moreover, these displacements increase radially from the center of the nanocrystals and reach a maximum at the surface layers due to the presence of undercoordinated surface atoms and their relatively unrestricted motions. Results of this work will be useful to understand the effect of nanocrystal size on quantifying the amplitude of atomic vibrations and their effects on measured intensities from their x-ray diffraction data.

## Index Terms

Molecular dynamics simulations, gold nanocrystal, mean square displacement, x-ray diffraction, Debye-Waller factor.

# Aerodinamik Veritabanı Modellerinin Adaptif Deney Tasarım Yöntemi ile İyileştirilmesi ve Sürecin Hızlandırılması

**Ertan DEMİRAL, Kivanç ARSLAN, Çağatay ŞAHİN**

ROKETSAN A.Ş. Aerodinamik Teknoloji Geliştirme Birimi - Ankara, Türkiye

Aerodinamik veritabanı modellerinin doğruluk seviyesi uçuş mekaniği çalışmalarının başarımı açısından kritik öneme sahiptir. Yüksek doğruluklu veritabanı modeli oluşturulması hem aerodinamik analiz yöntemine hem de analizlerin gerçekleştirileceği uçuş koşullarının doğru belirlenmesine bağlıdır. Bu çalışmada, aerodinamik veritabanı analizleri uçuş koşullarının adaptif deney tasarım yöntemi ile belirlenmesi amaçlanmıştır. Yapılan çalışmaların sonuçlarına göre, adaptif deney tasarım yöntemi örneklendirmeleri ile oluşturulan sürüklendirme katsayıları modelinin doğruluk seviyesi statik deney tasarım yöntemi örneklendirmeleri ile oluşturulan modele göre iyileştirilmiştir. Bununla beraber, adaptif deney tasarım çalışmaları grafik işlemci birimi sistemleri üzerinde yürütüllererek süreç hızlandırılmıştır.

## Anahtar Kelimeler

adaptif deney tasarım, aktif öğrenme, gauss süreci, aerodinamik

# Classification of Stochastic Processes with Topological Data Analysis

**İsmail GÜZEL, Atabey KAYGUN**

İstanbul Technical University Mathematical Engineering - İstanbul, Türkiye

In this study, we examine if engineered topological features can distinguish time series sampled from different stochastic processes with different noise characteristics, in both balanced and unbalanced sampling schemes. We compare our classification results against the results of the same classification tasks built on statistical and raw features. We conclude that in classification tasks of time series, different machine learning models built on engineered topological features perform consistently better than those built on standard statistical and raw features.

## Index Terms

persistent homology, stochastic process, machine learning, feature engineering

# Dağıtık Ortamda Derece İlintileri Bazlı Gerçekçi Çizge Üretilimi

**Furkan ATAS, Mehmet Burak AKGÜN**

TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi Bilgisayar Mühendisliği - Ankara, Türkiye

Çizge üreteçleri, yeni geliştirilen topolojik algoritmaları test etmek için kullanılan araçlardır. Algoritmalar gerçek sistemler üzerinde çalıştırılmadan önce, yapay çizgeler üzerinde performansları değerlendirilir. Bu testlerin sonucuna göre algoritmada gerekli düzenlemeler yapılır ve tekrar test edilir. Bu döngü, algoritmanın performansı istekleri karşılayacak seviyeye gelinceye kadar devam eder. Fakat algoritmanın test edildiği yapay çizgenin ait olduğu alanın çizge özelliklerini taşıyıp taşımaması, test sonuçlarının gerçeğe yakınlığında doğrudan etkin bir role sahiptir. Örneğin, yeni tasarılanan bir ağ protokolünü test etmek için bir sosyal ağ kullanmak, araştırmacıların ağ protokolünün gerçek performansını görmesine engel olacaktır. Dolayısıyla yapay olarak üretilen çizgenin mümkün olduğunda gerçekçi olması gereklidir. Rastgele üretilen bir çizgenin ait olduğu alana dair karakteristik özelliklerini korumak için gerçek bir çizgeyi kopyalamak en iyi yoldan biridir. Derece ilintileri bazlı yaklaşımlar çizgenin farklı derecelerdeki kenar-düğüm olasılıklarını kullanarak, verilen bir çizgeyi kopyalar. Günümüzde, internet erişiminin hem insanlar hem de cihazlar için kolaylaşmasıyla, üretilen veri hızla arttı. Büyük veri bir çok alanda kaçınılmaz hale geldi. Çizge verilerinin de büyük bir kısmı büyük veri seviyelerine geldi. Geleneksel tek makineli veri analitik çözümleri geniş ölçekli veriyi işlemek için yetersiz kaldı. Bu problemleri birleştirdiğimizde, büyük veri seviyesinde gerçekçi çizge üretimi problemi ortaya çıkmıştır. Bu çalışmada, Dk serisi kullanarak ölçülebilir algoritmaların tasarımları dağıtık olarak çalıştırılması gerçekleştirilmiştir.

## Anahtar Kelimeler

dağıtık hesaplama, yapay çizge üretimi, derece ilintileri, dk serisi

# A Simplified Methodology For Rotor-Stator Interaction Problems With An Upwind Linearized Harmonic Solver

Arash KARSHENASS, Özgür Uğraş BARAN, Onur ATA

Middle East Technical University Mechanical Engineering Department - Ankara, Turkey

The family of harmonic techniques for flow problems is an approach for solving unsteady but temporally periodic problems. These problems are often found in industrial applications such as turbomachinery, helicopter, aeromechanic, noise generation. Time-accurate solutions to such problems are computationally expensive. The harmonic methods are preferred in such problems as they benefit the temporal periodicity for solving the time-independent governing equations in the frequency domain. The linearized harmonic method (LH) is the less sophisticated member of the family of harmonic flow solvers. LH methods allow the mean and perturbed flowfield to be solved separately and in sequence. Simplifications lead to the LH method allow solutions with less computational cost than more advanced harmonic methods. In this study, we assess the performance of a new LH method in turbomachinery flows. For this purpose, inviscid, ideal gas is considered as the working fluid with a novel upwind flux discretization scheme. An explicit multistage Runge-Kutta method is applied for solving LH equations for compressible flow within a compressor stage where shocks are present within the channel. LH model is developed with Loci framework and coupled with a modified version of flowPsi open-source CFD solver. The test case involves the flowfield within the NASA rotor-stator37 stage. For simplicity, it is assumed that generated disturbance waves only affect the stator domain and hence, only unsteady flowfield in the stator is investigated. The model can be extended to take the rotor domain also into account. Comparing LH results to those from time-accurate shows that LH resulted in over-amplification of unsteady effect, but much sharper discontinuities can be captured compared to the time-accurate solver.

## Index Terms

unsteady, turbomachine, stage37, rotor-stator, harmonic, linearized, Steger-Warming, upwind

# Parallel Performance Comparison of GMRES Type Sparse Matrix Solvers for Inviscid Flux Schemes using Open-Source CFD Solver SU2

**Uğurtan DEMİRTAŞ, Nilay SEZER-UZOL**

Middle East Technical University Dept. of Aerospace Engineering - Ankara, Turkey

Computational Fluid Dynamics (CFD) is used in aerospace engineering design and analysis for aerodynamic database generation, investigation of wing/control surface interactions and aerodynamic stability analysis. Due to the need for lower computational times in design, implicit solvers are generally used in many CFD flow solvers. Implicit solvers being stable allow to use higher CFL (Courant-Friedrich-Lowy) numbers, larger than unity, to increase convergence for both steady and dual time stepping unsteady CFD cases. This comes with a price of solving block type sparse matrices that must be constructed and solved at each iteration on a CFD run. Since the nonlinearity of coupled Navier Stokes equations are stemmed from inviscid flux terms as in Euler equations which has no diffusion term unlike Navier Stokes equations, the condition number of block matrices are affected by the inviscid flux scheme used as well as Mach number in the domain. In this study, the effects of the inviscid flux scheme over the parallel performance of GMRES (General Minimizing RESidual) solvers used in open source CFD code SU2 are investigated.

## Index Terms

CFD, Parallel Computing, Sparse Matrix Solvers, SU2

# **Kimyasal tepkimeli türbülanslı akışlar için hesaplamalı akışkanlar dinamiği çözümü, lestr3d**

**Tamer ŞENER, Burakhan ŞÜKÜROĞLU, Ayse G. GUNGOR**

İstanbul Teknik Üniversitesi Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi - İstanbul, Türkiye

Tepkime sonucunda olusacak türler ile taze, yanmamış gazların karışılmasını sağlamak üzere yanma odalarında genellikle türbülanslı akış tercih edilir. Bu gibi problemlerde, kimyasal tepkime ile türbülansın etkilesimi sebebiyle ortaya çıkan akış yapılarının zaman ve uzay ölçekleri oldukça küçülür ve bu yapıların zengin fizигini modelleyebilmek üzere yüksek başarımı hesaplama ihtiyacı doğar. Kullanılan yazılımin ise yüksek başarımı hesaplama platformlarında kullanılan çekirdek sayısı artısı ile hesaplama hızında artış gözlemlenmeli ve bu yazılım platformdan bağımsız olmalıdır. Bu sebeple bu çalışmada, türbülanslı yanma benzetimleri için geliştirilen paralel akış çözümü lestr3d, yüksek başarımı platformlarda test edilmiş ve bu yazılımın ölçeklenebilir olduğu gösterilmiştir. Ayrıca, çekirdek sayısı ile hızlanma performansı tür deklemlerinin çözülmESİ ve çözülmemesi durumunda test edilmiştir. Bununla beraber bu yazılım farklı platformlarda, UHeM ve TRUBA, çalıştırılarak aynı sonucu verdiği ve platformdan bağımsız olduğu gösterilmiştir. Bunlara ek olarak akış çözümü lestr3d'nin türbülanslı küt bir cisim etrafındaki akış benzetimi sonuçları deneysel sonuçlar ile kıyaslanmış ve bu sonuçların birbiri ile uyumlu olduğu gösterilmiştir.

## **Anahtar Kelimeler**

Türbülanslı akışlar, Yanma, Yüksek Başarımı Hesaplama, Paralel Programlama, Büyük Girdap Benzetimi

# RANS and LES of a Turbulent Non-Premixed Flame Using OpenFOAM

**Yunus Emre KARASU, Tuğba ZAMAN, Ayşe G. GÜNGÖR**

İstanbul Technical University Faculty of Aeronautics and Astronautics - İstanbul, Turkey

This paper presents numerical simulations of non-premixed methane-air diffusion flame, Sandia Flame D. The numerical simulations are performed with OpenFOAM. Reynolds averaged Navier–Stokes (RANS) approach is employed with different combustion and radiation models, and chemistry mechanisms. The results are compared with each other and against experimental data. It is found that the partially stirred reactor (PaSR) combustion model gives accurate results considering its computational cost and numerical accuracy with reduced GRI-Mech 3.0 and P1 radiation heat transfer model. RANS results are in reasonable agreement with experimental data and computationally affordable. Subsequently, large eddy simulation (LES) approach is employed. LES gives very good predictions of temperature profiles and species mixing. Although LES approach comes with increased CPU cost, it is required for simulating time-dependent flow characteristics and dynamics of the flame alongside enhanced numerical accuracy of mean profiles.

## **Index Terms**

Turbulent combustion, methane-air flame, RANS, LES, high performance computing.

## Kısmi Karışıklı bir Yanma Odası Tasarımında Girdap Etkilerinin İncelenmesi

**Yunus Emre KARASU<sup>1</sup>, Tuğba ZAMAN<sup>1</sup>, Ayşe Gül GÜNGÖR<sup>1</sup>, Dilay GÜLERYÜZ<sup>2</sup>,  
Emre BÖNCÜ<sup>2</sup>, Tahsin Berk KIYMAZ<sup>2</sup>, Mehmet KARACA<sup>3</sup>, Barış YILMAZ<sup>4</sup>,  
Christophe ALLOUIS<sup>5</sup>, İskender GÖKALP<sup>5</sup>**

<sup>1</sup> İstanbul Teknik Üniversitesi Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi - İstanbul, Türkiye

<sup>2</sup> Orta Doğu Teknik Üniversitesi Makina Mühendisliği Bölümü - Ankara, Türkiye

<sup>3</sup> Orta Doğu Teknik Üniversitesi Havacılık ve Uzay Mühendisliği Bölümü - Ankara, Türkiye

<sup>4</sup> Marmara Üniversitesi Makina Mühendisliği Bölümü - İstanbul, Türkiye

<sup>5</sup> Orta Doğu Teknik Üniversitesi Makina Mühendisliği Bölümü - Ankara, Türkiye

Bu çalışmada, kanatçıklı bir geometriye sahip, on karışısız bir yanma odasının soguk akış analizleri üç farklı model için gerçekleştirilmştir. Sayısal olarak kanatçıkları modellemek yüksek hesaplama maliyetlerini de beraberinde getirdiği için kanatçık geometrisi kullanılmadan akısa girdap etkisi kazandırmayı hedefleyen iki farklı model geliştirilmştir. Ücüncü modelde yanma odası kanatçık ile birlikte modellenmiştir. Tüm modeller ile elde edilen sonuçlar deneyel veriler ile kıyaslanmıştır.

Giriste girdap etkisi kazandırılmış olan kanatçiksız model, eksenel ve tegetsel hızlarda deneye yakın sonuçlar elde etmistir. Merkezi sirkulasyon bölgesinin yakalanmasında yalnızca kanatçık geometrisi dahil edilen model deneye yakınsamaktadır.

### Anahtar Kelimeler

Girdap etkisi, büyük girdap benzesimi, numerik analiz, OpenFOAM

# Parallel Aeroacoustic Computation of Unsteady Transonic Cavity Flow via Open CFD Source Codes

**Ali Can FADIL, Bahar ZAFER**

İstanbul Technical University Department of Aeronautical Engineering and Astronautical Engineering - İstanbul, Turkey

Cavity flow research has been ongoing experimentally since the 1940 s, especially for weapon bay use in fighter aircraft. With the development of technology, experimental studies have begun to be simulated. With the emergence of High-Performance Clusters, the success of these simulations has increased and simulation studies have begun to replace experimental studies. In this paper, an open rectangular, unsteady transonic cavity with a length to depth ratio of 5 , Mach number 0.85 and Reynolds number of approximately  $6.5 \times 10^6$  was simulated using High-Performance Cluster. Likewise cavity doors were used to model a real weapon bay. Detached Eddy Simulation was used to resolve turbulent properties in the flow domain. Results compatible with experimental results were obtained with OpenFOAM® , an open-source CFD code based on the finite volume method.

## Index Terms

Cavity Flow, OpenFOAM, Aeroacoustics, Parallel CFD

# Implementations of the Needleman-Wunsch Algorithm for GPU Architectures

Furkan KURT, Deniz Turgay ALTILAR, Ayşe Yılmazer METİN

Istanbul Technical University Department of Computer Engineering - Istanbul, Turkey

Abstract-Similarity search is a fundamental yet timeconsuming algorithm in bioinformatics. Many dynamic programming-based and heuristic algorithms are proposed to solve alignment problems. The Needleman-Wunsch algorithm is a well-known dynamic programming-based algorithm for global sequence alignments. The algorithm has  $O(n^2)$  time and space complexity. The quadratic complexity limits the use of the algorithm with relatively smaller sequences. Various parallel and distributed methods were proposed to overcome the quadratic complexity of the algorithm.

In this paper, we describe a graphics processing unit(GPU) kernel to parallelize and reduce the execution time of the algorithm. We propose a new data partitioning method representation to increase the data transfer throughput between the GPU and the host. We implemented the serial approach of the algorithm and various parallel CUDA methods. We also used CUDA Cooperative Groups for the first time in Needleman-Wunsch algorithm parallelization. The evaluation shows that the new implementation is increased the performance of the algorithm 60 times for similarity score calculations, and 17 times for the alignment calculations.

## Index Terms

parallel computing, sequence alignment, bioinformatics

# Performance Evaluation of CUDA Optimizations for Convolution Operations

**Burak TOPÇU, İşıl ÖZ**

İzmir Institute of Technology Computer Engineering Department - İzmir, Turkey

Convolution operations are important for image processing and deep learning applications. With a large amount of data and independent computations, the execution time of convolutions can be reduced substantially by GPU acceleration. CUDA programming model offers architecture-aware performance optimizations for programs running on GPU devices by employing software techniques. In this work, we perform a set of CUDA optimizations for multidimensional convolution operations implemented in the Polybench benchmark suite. Specifically, we utilize constant memory, shared memory, CUDA streams, and their combinations. We systematically apply the optimizations and present the results by comparing both execution time and resource utilization. Our results demonstrate that combined optimizations achieve up to 1.6 times speedup compared to the baseline implementations.

## Index Terms

Convolution, CUDA, Optimization

# Accelerating Graph Embedding on a Single GPU Using Graph Reordering

**Amro Alabsi ALJUNDI, Kamer KAYA**

Sabancı University Faculty of Engineering and Natural Sciences  
VERİM, Center of Excellence in Data Analytics - Istanbul, Turkey

**Abstract-**Graph embedding is the process of converting the irregular connectivity information of a graph into a structured,  $d$ -dimensional latent vector representation. This representation enables utilizing decades of existing machine learning models for graph-specific tasks such as link prediction and node classification. The excellent performance of graph embedding comes at the cost of memory and time, and the ever-increasing size of real-world graphs only exasperates these costs. Numerous algorithms accelerate graph embedding both on the CPU and on memory-limited GPUs. To alleviate the memory burden of graph embedding on GPUs, many of these algorithms will partition the parameter space of the problem into evenly sized parts that fit the GPU memory. In this work, we show that reordering graphs as a pre-processing step can substantially improve the speed of partition-based graph embedding algorithms.

## **Index Terms**

Graph embedding, GPU programming, reordering, high-performance computing

# GPU-accelerated floating random walk based transient heat conduction solver

**Ersin YILDIZ, Altuğ Melik BAŞOL**

Özyegin University Department of Mechanical Engineering - İstanbul, Turkey

Solving diffusion processes with random walk Monte Carlo methods offers certain advantages over the discretization-based methods. One of the main advantages of these types of methods is that they can solve for the temperature at only selected points as opposed to the other discretization-based methods that require solving for the entire physical domain even though the temperature at a single physical point is of interest. In this study, a floating random walk (FRW) method, a type of meshless random walk method, has been implemented on graphics processors. In this method, the integral representing the analytical solution at a local point is evaluated by the statistical sampling from the possible random paths between the point and the domain boundaries. The implementation has been verified on two test problems with analytical solutions. The standard deviations in the results were quantified running the test problems with the increasing number of particles. Except for a deficient number of particles, the GPU-accelerated solver showed a clear speed advantage over the serial code running on the CPU. Running the solver with 105 particles resulted in an x100 speed-up on a gaming-level graphics card. Finally, the implemented solver was also tested on a more realistic transient heat conduction problem and the results were compared with laplacianFoam, an implicit finite volume based transient heat conduction solver available in OpenFOAM. It was found that the GPU-accelerated solver with 106 particles runs about x10 faster in comparison to laplacianFoam running in serial on CPU. It is anticipated that a further increase in the speed-up could be reached by parallelizing the algorithm on multiple graphics processors.

## Index Terms

heat conduction, random walk, floating random walk, Monte Carlo, graphics processing unit, GPU

# Feasibility Study of Adding GPU Support to SU2 with ILU(0) Preconditioner

Najeeb AHMAD<sup>1</sup>, Bilge Kaan GÖRÜR<sup>2</sup>, Uğurtan DEMİRTAŞ<sup>2</sup>, Özgür ATEŞOĞLU<sup>2</sup>, Didem UNAT<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Koç University - İstanbul, Turkey

<sup>2</sup> Roketsan Missiles, Inc. - Ankara, Turkey

The open source computational analysis tool SU2 employs various linear solvers and preconditioners, all of which are currently written for commodity CPUs. Incomplete LU (ILU) is one such important preconditioner available in SU2, often used in linear solvers such as GMRES. In this work, we implement GPU-based ILU(0) preconditioner in SU2 using NVIDIA cuSPARSE library, evaluate its execution time on an NVIDIA Tesla V100 GPU for two input mesh sizes and compare its performance with state-of-the-art multicore AMD Epyc and Intel Cascade Lake CPUs. The implementation shows 22% (8M mesh size) and 30% (13M mesh size) speedups against AMD Epyc while slowdowns of 26%(8M mesh) and 11%(13M mesh) against Intel Cascade Lake CPU. We observe that while the cuSPARSE triangular solve (compute phase) takes lesser time for both mesh sizes than it takes on the CPU, the matrix update and cuSPARSE ILU(0) factorization (build phase) overshadows this gain on Intel Cascade Lake and results in a slowdown. In conclusion, it is important to have efficient implementations of both the build and compute phases for a significant overall performance gain on the GPU versus CPU for ILU(0) preconditioning in SU2.

## Index Terms

SU2, ILU Preconditioner, CUDA, cuSparse

# Izometrik Kasılmada Aponevroz Ortusunun Rolu ve Seklinin Eniyileme Yontemiyle Tahminine Yonelik Hesaplama

**Şükrü Furkan TAŞDEMİR, Cevat Volkan KARADAĞ, Ali Fethi OKYAR**

Yeditepe Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği Bölümü - İstanbul, Turkey

Bu çalışmada sayısal olarak modellenmiş kurbaga gastrocnemius (*plantaris longus*) kasının sonlu elemanlar yontemiyle yapılan kasılma benzetimi (simülasyon) ile üzerinde tasıldığı ince bir zar olan aponevroz ortusunun geometrisinin bulunmasına çalışılmıştır. Her bir örnek için çözüm üretilmesi standart bir ofis bilgisayarında ortalama 200 saniyelik işlem süresi gereklidir. Ortalama geometrisinin tanımlanmasında gereken parametrelerin fazlalığı, çok yüksek sayıda yerel minimum değerlerinin eliminasyonu gerekliliği ve belirli bir karar uzayında en iyinin bulunması gereklidir. Genetik algoritma kullanılarak yapılması hedeflenen ortalama geometrisinin eniyileme süreci için yaklaşık 20 bin işlemci-saat ihtiyacı basgostermektedir. Bu ihtiyaç göz önüne alınarak Ulusal Hesaplama Merkezi'ne (UHEM) proje başvurusunda bulunulmuş ve çalışmaların devamı orada yapılmıştır. UHEM'de MATLAB-FEAP paralel işlem senaryosu oluşturulmuştur. Olusturulan bu senaryo ile oncelikle parametre uzayının taraması ve ardından aponevroz ortalama geometrisinin bulunması çalışması başarı ile tamamlanmıştır. Sonuç olarak, elde edilen aponevroz ortusunun fizyolojik ve mekanik bulguları irdelenmiştir.

# SIMD Instructions for Ethereum Virtual Machine

**Aykut BOZKURT, Can ÖZTURAN**

Recently, Ethereum and its smart contracts have become very popular. Hence, there is an urgent need for higher transaction throughput on Ethereum blockchains. Ethereum Virtual Machine (EVM) is a Turing-complete computer which executes Ethereum bytecode-encoded instructions for smart contracts. Every instruction uses 256-bit wide stack items as input and output operands. They pop the required inputs from the stack and push the result onto it after an execution. A gas consumption cost is assigned to them relative to the complexity of the instruction as it prevents halting problem. Consumed gas multiplied by gas price is charged as transaction fee by the transaction sender to mitigate Denial of Service (DoS) attacks can be avoided. The current supported instruction set has some weaknesses. Firstly, transactions containing large sized vector operations require excessive amount of gas cost. Secondly, transaction throughput is limited because of no parallelism in execution. Therefore, we extend the EVM instruction set by Single Instruction Multiple Data (SIMD) operations in order to benefit from data-level parallelism based on Ethereum improvement proposal EIP-616. We show how EVM can benefit from SIMD instructions by lowering gas consumption and increasing transaction throughput.

## Index Terms

Computer Society, IEEE, ethereum, EVM

# A Graph Transformation Strategy for Optimizing SpTRSV

**Buse YILMAZ, Abdulkadir Furkan YILDIZ**

Istinye University Dept. of Software Engineering - Istanbul, Turkey

Sparse triangular solve (SpTRSV) is an extensively studied computational kernel. An important obstacle in parallel SpTRSV implementations is that in some parts of a sparse matrix the computation is serial. By transforming the dependency graph, it is possible to increase the parallelism of the parts that lack it. In this work, we present an approach to increase the parallelism degree of a sparse matrix, discuss its limitations and possible improvements, and we compare it to a previous manual approach. The results provide several hints on how to craft a collection of strategies to transform a dependency graph.

## **Index Terms**

Sparse Triangle Solve, spTRSV, sparse matrix, graph transformation, parallel computing

## **Pekistirmeli öğrenme ile 5G baz istasyonunun otomize olarak yapılandırılması**

**H. Tugrul ERDOĞAN, Adnan ÖZSOY**

Hacettepe Üniversitesi Bilgisayar Mühendisliği Bölümü - Ankara, Türkiye

Halihazırda iletişim teknolojilerini yaygın olarak kullanmaktadır. Yakın gelecekte ise 5G teknolojileri ile iletişim teknolojilerinin sunacağı yeni kapasite ve olanaklar ile de daha farklı alanlarda da telekomünikasyon teknolojilerinin kullanıldığını görmek hiç de şaşırtıcı olmaz. 5G teknolojilerinin ise; sektördeki büyük beklenilere cevap olarak, yenilikçi tasarım ve altyapı farklılıklarını ile konumlanacağı şimdiden görülmektedir. Bu yenilikçi tasarım ve altyapı farklılıklarını, var olan problemleri çözerken aslında henüz karşılaşmadığımız yeni problemleri de bugüne taşıyacaktır. Bu çalışma ile 5G altyapısı ile potansiyel problemlerden birisi olarak kendisini göstermeye başlayan baz istasyonu kaynak paylaşım problemini yapay zeka yöntemleri ile çözmeye çalıştık.

# Makine Öğrenmesi tabanlı Gerçek Zamanlı Hedef Tespiti için Güç Verimli Paralel Hesaplama

Alparslan FİŞNE<sup>1</sup>, Faruk YAVUZ<sup>1</sup>, Adnan ÖZSOY<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ASELSAN A.Ş. Aselsan Araştırma Merkezi - Ankara, Türkiye

<sup>2</sup> Hacettepe Üniversitesi Bilgisayar Mühendisliği - Ankara, Türkiye

Bu çalışmada, eşik tabanlı Sabit Yanlış Alarm Oranı (SYAO) radar hedef tespit yöntemine göre daha yüksek doğruluk sunan makine öğrenmesi tabanlı radar hedef tespiti için güç-verimli ve gerçek zamanlı hesaplama tasarımları anlatılmaktadır. SYAO yöntemine benzer şekilde iki boyutlu (2B) tarama yaparak hedef varlığını kontrol eden makine öğrenmesi uygulaması, Evrişimsel Sinir Ağrı (Convolutional Neural Network, CNN) modeli içermektedir. CNN modelinin taramalı hesaplama yapısından dolayı tekraren veriler işlemeye alındığı için hesaplama kaybı gerçekleşmektedir. Önerilen katman optimizasyonları sayesinde taramalı yöntem kaldırılarak ve paralel hesaplama yapılarak gerçek zamanlı hesaplama sağlanmıştır. Güç-verimli bir hesaplama mimarisi için Jetson AGX Xavier GPGPU birimiyle 15 W ve 30 W güç modlarında Intel Xeon W-2123 CPU biriminden sırasıyla 1.2x ve 2x hızlanma sağlanmış olup düşük güç tüketimi ile gerçek zamanlı tespit uygulaması başarıyla gerçekleştirılmıştır.

## Anahtar Kelimeler

Makine öğrenmesi, radar hedef tespiti, katman optimizasyonu, enerji verimli hesaplama, GPGPU.

# Development of a Generic Neural Network Potential for IR-MOF Series

Ömer TAYFUROĞLU, Abdulkadir KOÇAK, Yunus ZORLU

Gebze Technical University Department of Chemistry - Gebze, Kocaeli, Turkey

Abstract-Metalorganic frameworks (MOFs) with their exceptional porous and organized structures have been subject of numerous applications. Predicting macroscopic properties from atomistic simulations require the most accurate force fields, which is still a major problem due to MOFs' hybrid structures governed by covalent, ionic and dispersion forces. Application of ab-initio molecular dynamics to such large periodic systems are thus beyond the current computational power. Therefore, alternative strategies must be developed to reduce computational cost without losing reliability. In this work, we describe the construction of a generic neural network potential (NNP) for IRMOFn series ( $n = 1, 4, 7, 10$ ) trained by PBE-D4/def2-TZVP reference data of MOF fragments. We validated the resulting NNP on both fragments and bulk MOF structures by prediction of properties such as equilibrium lattice constants, phonon density of states and linker orientation. The energy and force RMSE values for the fragments are only 0.0017 eV/atom and 0.15eV/, respectively. The NNP predicted equilibrium lattice constants of bulk structures, which are not included in training, are off by only 0.2-2.4% from experimental results. Moreover, our fragment trained NNP greatly predicts phenylene ring torsional energy barrier, equilibrium bond distances and vibrational density of states of bulk MOFs. The publicly available pre-trained model opens the door to investigate different aspects of IRMOFs at the first principle level accuracy.

## Index Terms

Machine learning, Metal-organic framework, Neutral network potential, DFT

# Tek Boyutlu, Sıralı, Büyük Ölçekli Veri Dizileri için Sıralı Örüntü Madenciliği Yaklaşımı

**Ali Burak CAN<sup>1</sup>, Meryem UZUN-PER<sup>1,2</sup>, Mehmet S. AKTAŞ<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> BiletBank Research and Development Center, Akdeniz PE-TUR A.S - Istanbul, Turkey

<sup>2</sup> Istanbul Health and Technology University Computer Engineering Department- Istanbul, Turkey

<sup>3</sup> Computer Engineering Department, Yıldız Technical University - Istanbul, TurkeyYıldız Technical University Computer Engineering Department - Istanbul, Turkey

Sıralı örüntü madenciliği algoritmaları, belirli bir sıraya dayalı olarak bir araya gelmiş sıralandırılmış veri dizileri (içinde bir ya da birden fazla eleman bulunan veri dizileri - 1-sequence, n-sequence) üzerinde, sıralı örüntülerin bulunmasını sağlayan gözetimsiz makine öğrenmesi algoritmalarıdır. Literatürde, bu kategoride yer alan algoritmaları inceledigimizde; bu algoritmaların, uzunluğu birden fazla olan sıralı veri dizileri (n-sequences) için optimize edildikleri görülmektedir. Buradan yola çıkarak, genom dizisi verileri gibi, tek eleman içeren (1-sequence) sıralı veri dizilerinden oluşan veri setlerine yönelik optimize edilmiş sıralı örüntü tespiti algoritmalarına ihtiyaç olduğu görülmektedir. Bu araştırma kapsamında, tek elemanlı sıralı veri dizileri (1-sequence) içeren veri setleri üzerinde, sıralı örüntülerin yüksek performanslı bir şekilde tespit edilebilecek bir algoritmanın tasarılanması ve geliştirilmesi problemi üzerinde çalışılmaktadır. Yine bu araştırma kapsamında, tek bir bilgisayarın veri saklama ortamlarında (bellek ve fiziksel disk) tutulamayacak büyülüklükte olan veri setleri üzerinde, sıralı örüntülerin tespitine olanak verecek bir sıralı örüntü madenciliği algoritması üzerinde çalışılmaktadır. Önerilen algoritmanın çalışırken ihtiyaç duyduğu zaman ve bellek gereksinimleri deneysel olarak irdelenmiştir. Elde edilen sonuçlar, önerilen algoritmanın literatürde yer alan benzer kategorideki algoritmalarla, aynı doğruluk derecesine ulaşırken, daha az çalışma süresine sahip olduğunu göstermektedir. Elde edilen sonuçlar umit vericidir.

## Anahtar Kelimeler

Sıralı Örüntü Madenciliği, GSP, PrefixSpan, Spark

# Sensitivity Analysis of Federated Learning over Decentralized Data and Communication Rounds

Mustafa Barış ÇAMLI, İsmail ARI

Ozyegin University - İstanbul, Turkey

Federated Learning (FL) refers to distributed learning via exchange of model metadata instead of raw data among the clients servers in a centralized architecture or among peers in a decentralized architecture. It is quickly becoming the defacto standard in Machine Learning (ML) due to its network efficiency and privacy-preservation. However, there are several issues that need to be resolved, which require a sensitivity analysis of FL techniques to decentralized data and federation parameters. In this paper, we focus on federated learning with a client-server architecture. The clients train neural network (NN) models with their local data while the server takes weighted average of all models exchanged in periodic communication rounds. A Convolutional Neural Network (CNN) model is trained in a federated way over different image classification benchmark datasets. Our results demonstrate the effects of (1) datasets having independent identically distributed (IID) vs. non-IID as well as balanced vs. unbalanced distributions, (2) number of communication rounds between clients and the server, and (3) the initial model selection in the distributed setting. In near future, we plan to extend our analysis to peer-to-peer architectures.

## Index Terms

Federated learning, neural networks, model training, communication round, IID, unbalanced, decentralized.

# Çekirdek Sayısının Hesaplama Gemi Direnci Analiz Performansına Etkileri

**Ali Can KOYUNCUOĞLU, Çağrı AYDIN, Uğur Oral ÜNAL, Barış BARLAS**

İstanbul Teknik Üniversitesi Gemi İnşaatı ve Deniz Bilimleri Fakültesi Gemi İnşaatı ve Gemi Makineleri Mühendisliği - İstanbul, Türkiye

Bu çalışmada Hesaplama Akışkanlar Dinamiği vasıtasyyla bir açık deniz destek gemisi modelinin dalgalı su koşullarında iki serbestlik dereceli akış simülasyonları İstanbul Teknik Üniversitesi bünyesinde bulunan Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi imkanlarından faydalananarak gerçekleştirilmiştir. Yüksek işlem gücü gerektiren çalışmada gemi modelinin ek dalga direncinin yanısıra farklı çekirdek sayılarının hesaplama sistemi performansına olan etkisi incelenmiştir. Hesaplama üç boyutlu, sıkıştırılabilir RANS denklemlerinin SST  $k-\omega$  modeli ile birlikte çözümünü içermektedir. Serbest su yüzeyi VoF metodu kullanılarak modellenmiştir. Ağ örgüsü hücre sayısının performansa etkisinin anlaşılması maksadıyla iki farklı ağ yoğunluğu uygulanmıştır. Simülasyonlarda 128 çekirdek sayısına sahip 4 hesaplama sunucusu kullanılmıştır. Çekirdek sayısı sistematik olarak artırılarak temel performans parametrelerindeki değişim gözlenmiştir.

## Anahtar Kelimeler

gemi direnci, ek dalga direnci, HAD, çekirdek, paralel hesaplama

# Kullanılan Çekirdek Sayısının Kapsama Alanı Haritası Çıkarılma Performansına Etkisi

**Uğur ERBAŞ, Mehmet Barış TABAKCIOĞLU**

Bursa Teknik Üniversitesi Elektrik-Elektronik Mühendisliği - Bursa, Türkiye

Son zamanlarda iletişim teknolojisinin gelişmesi ve nüfusun artmasıyla birlikte baz istasyonlarına olan ihtiyaç da artmıştır. Bunun yanında yeni gelişen 5G teknolojisinde çok sayıda baz istasyonuna ihtiyaç duyulacağı tahmin edilmektedir. Bu çalışmada küçük bir bölgenin 3 boyutlu dijital verileri kullanılmıştır. İlk olarak MATLAB programında 3 boyutlu yeryüzü haritası çıkarılmıştır. Ardından iki farklı nokta seçilmiş ve kısa çizgilerle 2 boyutlu haritalar oluşturulmuştur. Baz istasyonlarının doğru pozisyonlara yerleştirilebilmesi için elektrik alanlarını doğru tahmin etmek ve kapsama alanı belirlemek çok önemlidir. Bu nedenle işin izleme algoritması ile yansyan, direkt ve kırınan tüm işinler belirlenmiştir. Kapsama alanlarının belirlenebilmesi için elektrik alanlarının hesaplanması gerekmektedir. Bu çalışmada Uniform Kırınım Teorisi (UKT) ve Geometrik Optik (GO) modeliyle elektrik alanlar hesaplanmış; bir merkez noktası seçilmiş, 3000 metre için elektrik alanları hesaplanmış ve kapsama alanı haritası çizilmiştir. Kapsama alanı haritalarına bakıldığından girişimlerden kaynaklı dalgalanmaların olduğu ve merkez noktadan uzaklaşıkça elektrik alanlarının azaldığı görülmektedir. Yüksek başarılı hesaplama teknikleri kullanılarak kapsama alanı haritası oluşturmak için gerekli çözüm süreleri çekirdek sayısına bağlı olarak karşılaştırılmıştır. Genel olarak kullanılan çekirdek sayısı arttıkça çözüm süresi azalmıştır.

## Anahtar Kelimeler

Baz istasyonu konuşlandırması, Kapsama alanı haritası, İşin izleme tekniği, Geometrik optik, UKT.

# Efficient Thread-to-Core Mapping for Application-level Redundant Multithreading

Sanem ARSLAN<sup>1</sup>, Osman ÜNSAL<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Marmara University Computer Engineering Department - İstanbul, Turkey

<sup>2</sup> Barcelona Supercomputing Center - Barcelona, Spain

Redundant multithreading (RMT) is an effective thread-level replication method to improve the reliability requirements of applications. Although it significantly improves the robustness of applications, it comes with additional performance overhead since the redundant threads might share the same core resources. In our previous study [1], we presented an efficient software-level RMT approach, where we execute the most critical code regions with three threads to correct errors. In this study, we focus on further improving the performance of our software-level RMT method by presenting a set of different thread-to-core mapping alternatives. We provide different static mapping methods, which require preliminary information about the applications, such as execution time or cache usage behaviors, and a dynamic mapping method, which maps threads to cores dynamically at runtime without requiring any prior information. Experimental results show that the dynamic mapping method outperforms all static methods in addition to our baseline model, where the thread-to-core mappings are left to the operating system, by 8%, 7%, and 20% based on average speedup, harmonic speedup, and mean slowdown metrics.

## Index Terms

- [1] S. Arslan and O. Unsal, "Efficient selective replication of critical code regions for sdc mitigation leveraging redundant multithreading," *The Journal of Supercomputing*, vol. 77, p. 14130 – 14160, 2021.

# COMDETECTIVE<sup>+</sup>: An Inter-Thread Communication Analyzer for AMD Multicores

Muhammad Aditya SASONGKO<sup>1</sup>, Milind CHABBI<sup>2</sup>, Paul H. J. KELLY<sup>3</sup>, Didem UNAT<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Koç University - İstanbul, Turkey

<sup>2</sup> Scalable Machines Research - California, USA

<sup>3</sup> Imperial College - London, UK

Abstract-AMD Processors have become more widely used in recent years due to the high performance yet low power consumption of the Ryzen series. Along with the increasing popularity of this processor series, there is also a rising need for profiling tools that can identify performance bottlenecks with low overheads in these machines. One common source of performance bottlenecks in multithreaded programs running on multicore systems is inter-thread communication.

We propose ComDETECTIVE<sup>+</sup>, an inter-thread communication analyzer that leverages the existing hardware features in AMD processors to support low-overhead detection of communications. It employs the instruction-based sampling (IBS) facility available in current AMD CPU cores to sample memory accesses, and debug registers to intercept communications involving the sampled memory accesses. In addition to detecting communications, COMDETECTIVE<sup>+</sup> also differentiates the communications into true sharing and false sharing, and attributes the communications to their locations in source code. We perform an experimental study to evaluate the accuracy, time, and memory overheads of this tool. Our tool exhibits high accuracy while introducing 2.8× runtime and 1.92× memory overheads, which are much lower than the overheads of existing cycle-accurate simulators and code instrumentation-based tools.

## Index Terms

PMUs, performance analysis, multicore

# Approximate Execution of Critical Sections for Performance-Accuracy Tradeoff

Zuhal ALTUNTAŞ, Sanem ARSLAN, Betül BOZ

Marmara University Computer Engineering Department - İstanbul, Turkey

Approximate computing enhances performance and energy efficiency of applications, while still achieving acceptable accuracy. Some of the multithreaded applications can tolerate the accuracy loss when critical sections are approximately executed, which in turn will eliminate the synchronization overhead of these applications and increase their performance. In this study, our objective is to explore the behavior of the critical sections and selectively skip the ones yielding performance improvements with an acceptable accuracy loss. We have observed the behaviour of 49 critical sections of 2 selected applications. Our experimental study indicates that skipping 76% of the critical sections offers 2.5x performance gain with 16% accuracy loss for Raytrace whereas 1.4x performance improvement with 17% accuracy loss is obtained for Radiosity on the average when 36% of the critical sections are skipped.

## Index Terms

approximate computing, multithreaded application, critical section, performance, accuracy

# Paralel İşlerin Çizelgelemesinde İşlemci Tahsisi İçin Hipersezgisel Yaklaşım

**Gülçin BOLAT, Fatih Erdoğan SEVİLGEN**

Gebze Teknik Üniversitesi Bilgisayar Mühendisliği Bölümü - Kocaeli, Türkiye

Paralel bilimsel uygulamaların çizelgelenmesi kaynakların verimli kullanılması ve işlemlerin tamamlanma süresinin azaltılması için oldukça önemlidir. Paralel uygulamalar veri paralelliği ve işlem paralelliği içerir. Çoklu işlemcili sistemlerde sadece işlem paralelliği içeren uygulamaların çizelgelenmesi probleminin NP-Tam problem olduğu bilinmektedir. Veri paralel işlemlerinde eklenmesi ile problem daha da zorlaşmaktadır. Yapılan çalışmalarda problemin işlemci tahsisi ve çizelgeleme aşaması için çeşitli algoritmalar önerilmiştir. Bu çalışmada işlemci tahsisi süreci için çeşitli sezgisel algoritmalar ve genetik algoritma birlikte kullanılarak özgün bir hipersezgisel yaklaşım sunulmaktadır. Deneysel sonuçlar, algoritmanın açgözülü algoritmalar ile karşılaştırıldığında daha iyi performans sonuçları sunduğunu göstermektedir.

## Anahtar Kelimeler

Statik Çizelgeleme, Veri Paralelliği, İşlemci Tahsisi, Genetik Algoritma

# Yazar İndeksi

Najeeb Ahmad	İstanbul, Türkiye	nahmad16@ku.edu.tr
Mehmet Burak Akgün	Ankara, Türkiye	m.akgun@etu.edu.tr
Mehmet Siddık Aktaş	İstanbul, Türkiye	aktas@yildiz.edu.tr
Amro Alabsi Aljundi	İstanbul, Türkiye	amroa@sabanciuniv.edu
Christophe Allouis	Ankara, Türkiye	callouis@metu.edu.tr
Deniz Turgay Altılar	İstanbul, Türkiye	altilar@itu.edu.tr
Zuhal Altuntas	İstanbul, Türkiye	zuhal.altuntas@marmara.edu.tr
İsmail Arı	İstanbul, Türkiye	ismail.ari@ozyegin.edu.tr
Kivanç Arslan	Ankara, Türkiye	kivanc.arslan@roketsan.com.tr
Sanem Arslan	İstanbul, Türkiye	sanem.arslan@marmara.edu.tr
Onur Ata	Ankara, Türkiye	ata.onur@metu.edu.tr
Ahmet Ataç	Manisa, Türkiye	ahmet.atac@cbu.edu.tr
Gamze Atalmış	Niğde, Türkiye	gamzee_umudum@hotmail.com
Furkan Atas	Ankara, Türkiye	fatas@etu.edu.tr
Özgür Ateşoğlu	Ankara, Türkiye	oatesoglu@gmail.com
Çağrı Aydın	İstanbul, Türkiye	aydincagri@itu.edu.tr
Hüseyin Bahtiyar	İstanbul, Türkiye	huseyin.bahtiyar@msgsu.edu.tr
Fehmi Bardak	Manisa, Türkiye	fehmi.bardak@cbu.edu.tr
Barış Barlas	İstanbul, Türkiye	barlas@itu.edu.tr
Altuğ Melik Başol	İstanbul, Türkiye	altug.basol@ozyegin.edu.tr
Merdan Batyrow	İstanbul, Türkiye	merdan.batyrov@ozu.edu.tr
Gülçin Bolat	Kocaeli, Türkiye	gbolat2018@gtu.edu.tr
Emre Böncü	Ankara, Türkiye	emre.boncu@metu.edu.tr
Betül Boz	İstanbul, Türkiye	betul.demiroz@marmara.edu.tr
Aykut Bozkurt	-	-
Mustafa Barış Çamlı	İstanbul, Türkiye	mustafa.camli@ozu.edu.tr
Ali Burak Can	İstanbul, Türkiye	aliburak.can@petour.com
Milind Chabbi	Kaliforniya, ABD	milind@scalablemachines.org
Ertan Demiral	Ankara, Türkiye	ertan.demiral@roketsan.com.tr
Uğurtan Demirtaş	Ankara, Türkiye	ugurtan.demirtas@roketsan.com.tr
Sajad Einy	İstanbul, Türkiye	sajadeiny@aydin.edu.tr
Uğur Erbaş	Bursa, Türkiye	ugur.erbas@btu.edu.tr
H. Tuğrul Erdoğan	Ankara, Türkiye	tugrulerdogan@hacettepe.edu.tr
İlknur Eruçar	İstanbul, Türkiye	ilknur.erucar@ozyegin.edu.tr
Ali Can Fadıl	İstanbul, Türkiye	-
Alparslan Fişne	Ankara, Türkiye	afisne@aselsan.com.tr
İskender Gökalp	Ankara, Türkiye	igokalp@metu.edu.tr
Bilge Kaan Görür	Ankara, Türkiye	bkaangorur@gmail.com
İpek Güçlü	Adana, Türkiye	-
Dilay Güleryüz	Ankara, Türkiye	dilay.guleryuz@metu.edu.tr

Ayşe Gül Güngör	İstanbul, Türkiye	gungoray@itu.edu.tr
Yeliz Gürdal	Adana, Türkiye	ygurdal@atu.edu.tr
İsmail Güzel	İstanbul, Türkiye	iguzel@itu.edu.tr
Yüksel Kaplan	Niğde, Türkiye	yaplan@ohu.edu.tr
Çağlar Karaca	Manisa, Türkiye	caglar.karaca@cbu.edu.tr
Mehmet Karaca	Ankara, Türkiye	mkaraca@metu.edu.tr
Cevat Volkan Karadağ	İstanbul, Türkiye	volkaradag@gmail.com
Yunus Emre Karasu	İstanbul, Türkiye	karasuy19@itu.edu.tr
Arash Karshenass	Ankara, Türkiye	-
Kamer Kaya	İstanbul, Türkiye	kaya@sabanciuniv.edu
Atabay Kaygun	İstanbul, Türkiye	kaygun@itu.edu.tr
Paul H. J. Kelly	Londra, Birleşik Krallık	p.kelly@imperial.ac.uk
Ayas Kiser	Adana, Türkiye	-
Tahsin Berk Kiymaz	Ankara, Türkiye	berk.kiymaz@metu.edu.tr
Abdulkadir Koçak	Kocaeli, Türkiye	kocak@gtu.edu.tr
Harun Koku	Ankara, Türkiye	harunk@metu.edu.tr
Etem Köse	Manisa, Türkiye	etem.kose@cbu.edu.tr
Ali Can Koyuncuoğlu	İstanbul, Türkiye	koyuncuoglu19@itu.edu.tr
H. Kübra Küçükcartal	Eskişehir, Türkiye	hkubrakucukkartal@gmail.com
Sinan Kuday	Ankara, Türkiye	skuday@ankara.edu.tr
Furkan Kurt	İstanbul, Türkiye	kurtfu@itu.edu.tr
Serpil Yalçın Kuzu	Elazığ, Türkiye	skuzu@firat.edu.tr
Ayşe Yılmazer Metin	İstanbul, Türkiye	yilmazerayse@itu.edu.tr
Aziz Mohammed	Ankara, Türkiye	aziz.mohammed@metu.edu.tr
Ali Fethi Okyar	İstanbul, Türkiye	okyar@yeditepe.edu.tr
Uğur Oral Ünal	İstanbul, Türkiye	ounal@itu.edu.tr
İşıl Öz	İzmir, Türkiye	isiloz@iyte.edu.tr
Şener Özönder	İstanbul, Türkiye	ozonder@umn.edu
Adnan Özsoy	Ankara, Türkiye	adnan.ozsoy@hacettepe.edu.tr
Can Özturan	-	-
Hande Öztürk	İstanbul, Türkiye	hande.ozturk@ozyegin.edu.tr
Çağatay Şahin	Ankara, Türkiye	cagatay.sahin@roketsan.com.tr
Muhammad Aditya Sasongko	İstanbul, Türkiye	msasongkol17@ku.edu.tr
Tamer Şener	İstanbul, Türkiye	senerata@itu.edu.tr
Fatih Erdoğan Sevilgen	Kocaeli, Türkiye	sevilgen@gtu.edu.tr
Nilay Sezer-Uzol	Ankara, Türkiye	nuzol@metu.edu.tr
Burakhan Şüküroğlu	İstanbul, Türkiye	sukuroglu20@itu.edu.tr
Mehmet Barış Tabakçıoğlu	Bursa, Türkiye	mehmet.tabakcioglu@btu.edu.tr
Şükrü Furkan Taşdemir	İstanbul, Türkiye	sukrufurkan.tasdemir@std.yeditepe.edu.tr
Ömer Tayfuroğlu	Kocaeli, Türkiye	otayfuroglu@gtu.edu.tr
Burak Topçu	İzmir, Türkiye	buraktopcu@iyte.edu.tr
Serkan Toros	Niğde, Türkiye	serkantoros@ohu.edu.tr
İlkay Türk Çakır	Giresun, Türkiye	ilkay.turk.cakir@cern.ch
Özgür Uğraş Baran	Ankara, Türkiye	ubaran@metu.edu.tr
Didem Unat	İstanbul, Türkiye	dunat@ku.edu.tr
Osman Ünsal	Barselona, İspanya	osman.unsal@bsc.es

Meryem Uzun-Per	İstanbul, Türkiye	meryem.uzunper@petour.com
Faruk Yavuz	Ankara, Türkiye	farukyavuz@aselsan.com.tr
Nebi Yelegen	Niğde, Türkiye	nebiyelegen@ohu.edu.tr
Ersin Yıldız	İstanbul, Türkiye	ersin.yildiz@ozu.edu.tr
Abdulkadir Furkan Yıldız	İstanbul, Türkiye	abdulkadir.yildiz@stu.istinye.edu.tr
Barış Yılmaz	İstanbul, Türkiye	byilmaz@marmara.edu.tr
Buse Yılmaz	İstanbul, Türkiye	buse.yilmaz@istinye.edu.tr
Baha Zafer	İstanbul, Türkiye	-
Tuğba Zaman	İstanbul, Türkiye	zaman20@itu.edu.tr
Yunus Zorlu	Kocaeli, Türkiye	yzorlu@gtu.edu.tr

# Organizasyon Hakkında

**Talks** will be held at the **Conference Hall-Auditorium** of PRBB. It is situated on the first floor of the central courtyard and has independent access from the rest of the building (through stairs located at the ground floor, main entrance of PRBB).

**Coffee breaks and lunches** will be offered in the half-covered terrace in front of the main entrance of the conference hall.

The **poster session** will be held on Tuesday and Wednesday night on the **ground floor** of the PRBB.

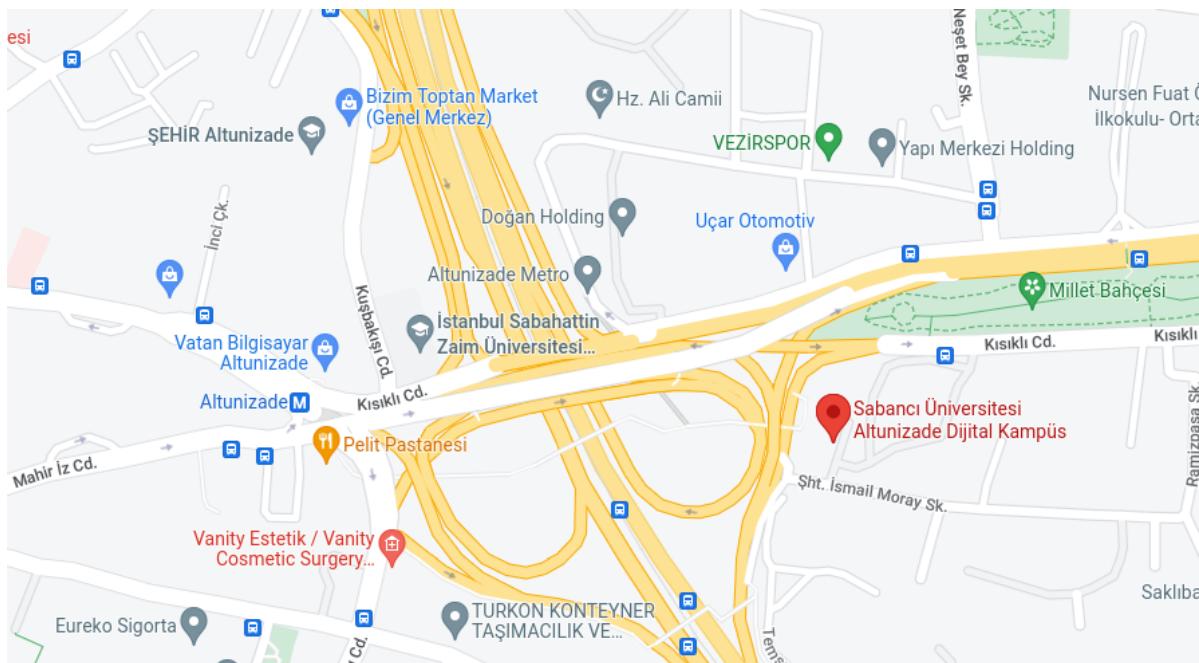
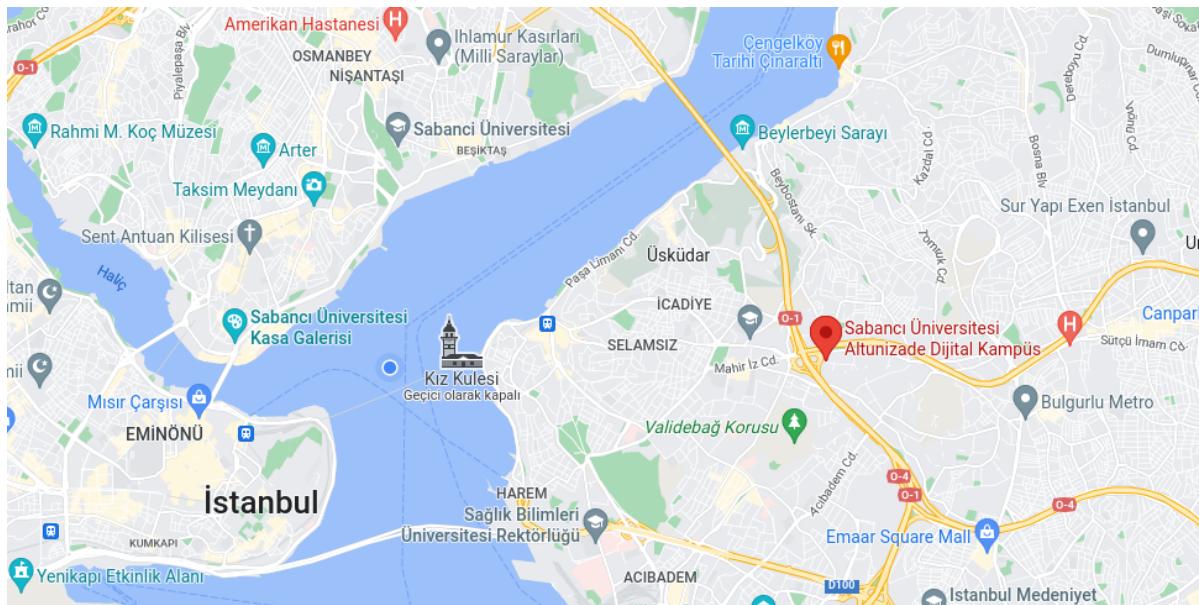
Wi-Fi will be available during the conference. The PRBB also provides access to an eduroam network.

The **conference dinner** will be held at the "The best restaurant", at Some Street, 39, Barcelona.

## Sabancı Üniversitesi Altunizade Dijital Kampüse Ulaşım

Küçük Çamlıca Mahallesi Şehit İsmail Moray Sokak No:3 Kısıklı/Altunizade34696 Üsküdar/İstanbul

- Üsküdar / Çekmeköy M5 metro ile Altunizade indikten sonra 2 numaralı çıkış takip edildikten sonra kampüs hemen yanıdır.
- Metrobüs ile de Altunizade durağında indikten sonra tam karşınızda bulunmaktadır.
- **Not: Kampüs otoparkı özel araç ile gelmek isteyen katılımcıların kullanımı için yeterli kapasiteye sahip değildir.**



# Partner Kuruluşlar ve Sponsorlar

BASARIM 2022 konferansı Türkiye YBH Yetkinlik Merkezi tarafından EuroCC projesi çerçevesinde düzenlenmiştir. EuroCC, Avrupa Yüksek Performanslı Hesaplama Ortak Girişimi'nden (JU) tarafından Avrupa Birliği'nin Ufuk 2020 Araştırma ve Yenilik Programlarının desteğini almıştır (951732 sayılı hibe sözleşmesi).

## Sponsorlar









<https://www.basarim.org.tr/>