

Implementierung und Untersuchung einer hoch effizienten Methode zur Druck-Geschwindigkeits-Kopplung Masterthesis



Fabian Gabel

Kolloquium, XX.XX.2015

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

Motivation

Herausforderungen für CFD-Applikationen:

- schnelle Verfügbarkeit von Simulationsergebnissen
- Ergebnisse mit hoher Genauigkeit
- Umgang mit komplexen Geometrien
- multiphysikalische Problemstellungen



- Einsatz robuster Algorithmen
- Skalierbarkeit der Lösungsmethode
- Effizienzsteigerung durch Adaptivität
- Umgang mit Variablenkopplung

Abbildung: Gasturbine (VDI)

Motivation

Vollständig gekoppelter Lösungsansatz für Navier-Stokes Gleichungen (Darwish et al. 2009):

- Semi-implizite Druck-Geschwindigkeits-Kopplung statt sequentieller Lösung
- Robuster Algorithmus ohne Unterrelaxation

Neue Herausforderung:

- Umgang mit Speicheranforderungen
- Auswahl geeigneter skalierbarer Gleichungslöser

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

Aufgabenstellung und Bearbeitung

- Implementierung eines vollständig gekoppelten Lösungsansatzes
 - Finite-Volumen Diskretisierung der 3d Navier-Stokes Gleichungen auf blockstrukturierten, lokal verfeinerten Gittern mit hängenden Knoten
 - Kopplungsansätze für Temperaturgleichung
 - MPI-Parallelisierung des Lösungsansatzes mit PETSc
- Skalierbarkeitsuntersuchung auf HHLR
- Performancevergleich mit herkömmlichem SIMPLE Verfahren für unterschiedliche Testfälle
 - Manufactured Solution
 - Kanalströmung mit komplexem Hindernis
 - Strömung in beheizter Kavität (Adaption MIT - Benchmark)

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

Implementierung - Diskretisierung

- Finite-Volumen Methode für stationäre, inkompressible Navier-Stokes Gleichungen
- standardmäßige Diskretisierung der konvektiven und viskosen Terme
- diskretisierte Massenerhaltungsgleichung

$$\sum_{f \in \{w, s, b, t, n, e\}} u_{i,f} n_{f_i} S_f = 0$$

- druckgewichtete Interpolation zur Massenflussberechnung

$$u_{i,f}^{(n)} = \left[(1 - \gamma_f) u_{i,P}^{(n)} + \gamma_f u_{i,Q}^{(n)} \right] \\ - \left((1 - \gamma_f) \frac{V_P}{a_P^{u_i}} + \gamma_f \frac{V_Q}{a_Q^{u_i}} \right) \left[\underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_f^{(n)}}_{- \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_P^{(n-1)} + \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_Q^{(n-1)} \right)} \right]$$

Implementierung - Temperaturkopplung

- Diskretisierung der Boussinesq Approximation des Auftriebsterms $\rho\beta(T - T_0)$
- implizit oder explizit
- Newton-Raphson Linearisierung des konvektiven Terms der Temperaturgleichung (Galpin et al. 1986)

$$(u_{j,f} T_f)^{(n)} \approx \underline{u_{j,f}^{(n-1)} T_f^{(n)}} + u_{j,f}^{(n)} T_f^{(n-1)} - u_{j,f}^{(n-1)} T_f^{(n-1)}$$

- Diskretisierung unter Verwendung der druckgewichteten Interpolation

Implementierung

- System algebraischer Gleichungen

$$a_P^{u_i} u_{P,i} + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{u_i} u_{F,i} + a_P^{u_i,p} p_P + \underbrace{\sum_{F \in NB(P)} a_F^{u_i,p} p_F}_{\text{Pressure-velocity coupling}} + \underbrace{a_P^{u_i,T} T_P}_{\text{Boussinesq approximation}} = b_{P,u_i}$$

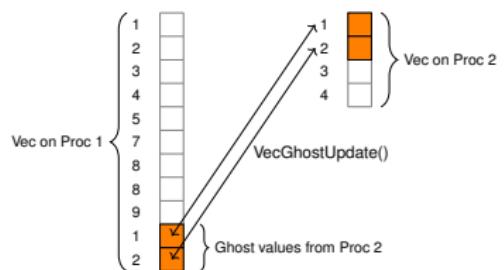
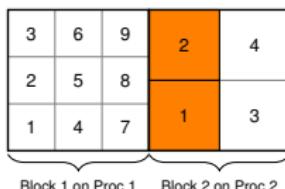
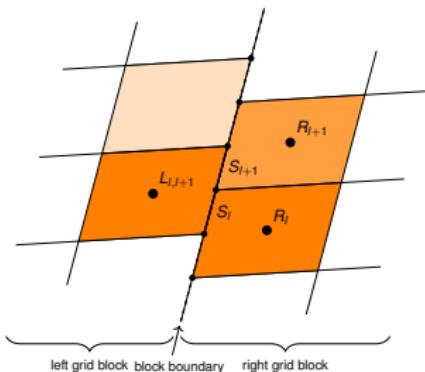
$$a_P^p p_P + \sum_{F \in NB(P)} a_F^p p_F + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \left(a_P^{u_j,p} u_{P,j} + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{p,u_j} u_{F,j} \right)}_{\text{Pressure-velocity coupling}} = b_{P,p}$$

$$a_P^T T_P + \sum_{F \in NB(P)} a_F^T T_F + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \left(a_P^{T,u_j} u_{P,j} + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{p,u_j} u_{F,j} \right) + a_P^{T,p} p_P + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{T,p} p_F}_{\text{Newton-Raphson linearization}} = b_{P,T}$$

Implementierung

- Blockränder und Parallelisierung

- Behandlung der Blockränder nach Lilek et. al
- Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc)
- PETSc Datenstrukturen zur MPI-Parallelisierung des Lösen
- spezielle Vektorobjekte zur Verwaltung von Ghost-Values
- nur ein Prozessor berechnet Matrixkoeffizienten für Blockübergänge



Implementierung - Assemblierung

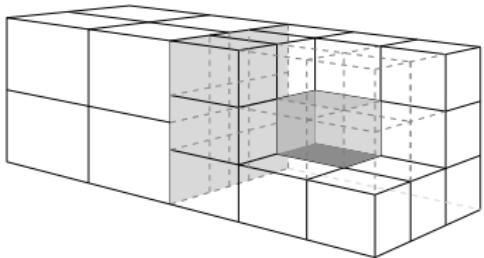
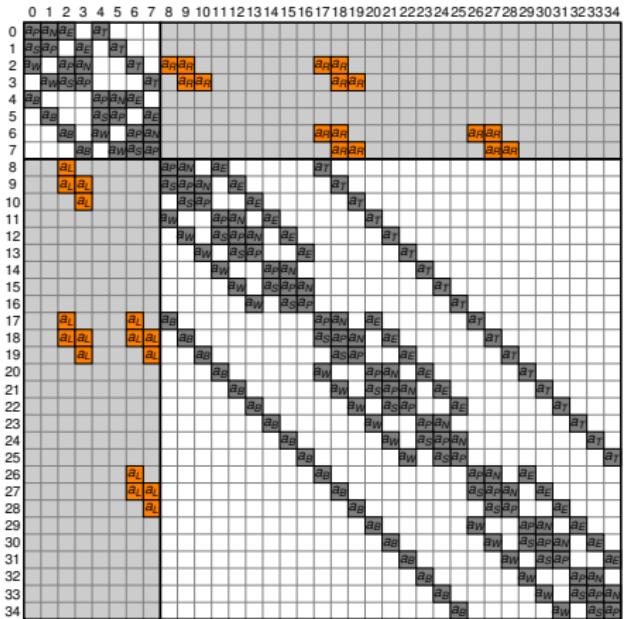
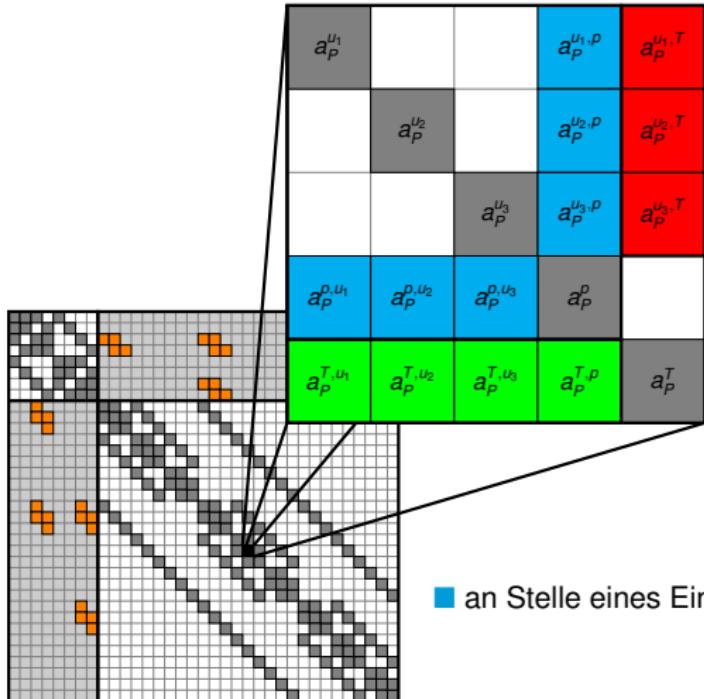


Abbildung: Blockstrukturiertes Gitter und resultierende Matrixbelegung für eine Variable ohne Kopplung



Implementierung

- Assemblierung mit Kopplung



unterschiedliche Kopplungsterme:

- blau: Druck-Geschwindigkeit
- rot: Geschwindigkeit-Temperatur
- grün: Temperatur-Geschwindigkeit/Druck

- an Stelle eines Eintrags steht eine dicht besetzte 5×5 Matrix

Implementierung - Lösungsalgorithmus

Algorithm 1 SIMPLE Algorithm

```
INITIALIZE variables
while (convergence criterion not accomplished) do
    SOLVE linearized momentum balances
    CALCULATE mass fluxes
    SOLVE pressure correction equation to assure continuity
    UPDATE pressure
    UPDATE velocities and mass fluxes
    if (decoupled scalar equation) then
        SOLVE scalar equation
    end if
end while
```

Implementierung - Lösungsalgorithmus

Algorithm 2 Fully Coupled Solution Algorithm

INITIALIZE variables

while (convergence criterion not accomplished) **do**

if (temperature coupling) **then**

SOLVE the linear system for velocities, pressure and temperature

else

SOLVE the linear system for velocities and pressure

end if

CALCULATE mass fluxes

if (decoupled scalar equation) **then**

SOLVE scalar equation

end if

end while

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

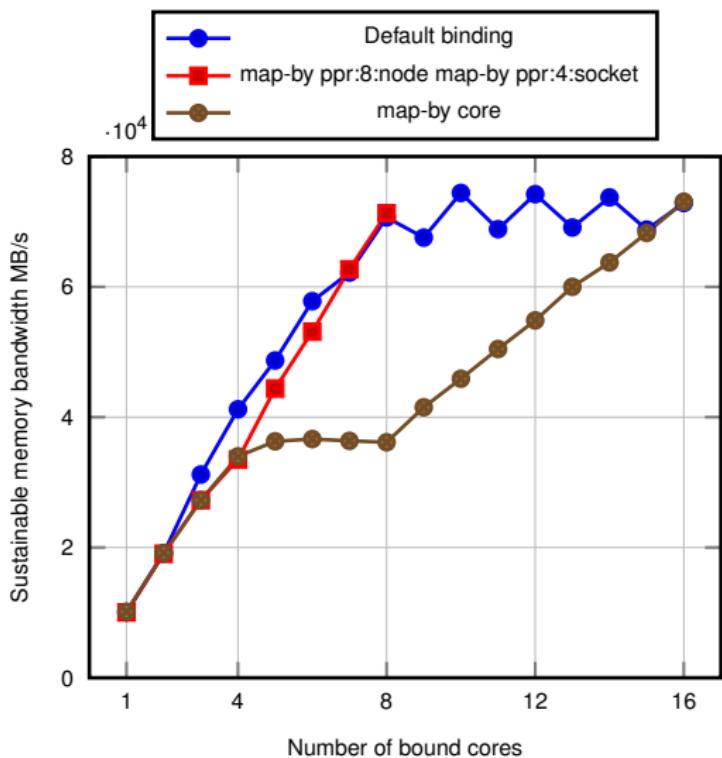
Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

STREAM Benchmark

- Sustainable Memory Bandwidth



- Nutzung eines Knotens der MPI1-Sektion (Sandy-Bridge) des HHLR
- low-level Benchmark
- Für bandbreitenlimitierte Programmperformance
- Vectortriade:
 $a[i] = b[i] + scalar * c[i]$

Manufactured Solution

- divergenzfreie Lösung für Geschwindigkeit
- $\mathbf{u} = \nabla \times \Psi$

$$u_1(\mathbf{x}) = 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_2 + 2 \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_3$$

$$u_2(\mathbf{x}) = 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_3 - 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_1$$

$$u_3(\mathbf{x}) = -2 \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_1 - 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_2$$

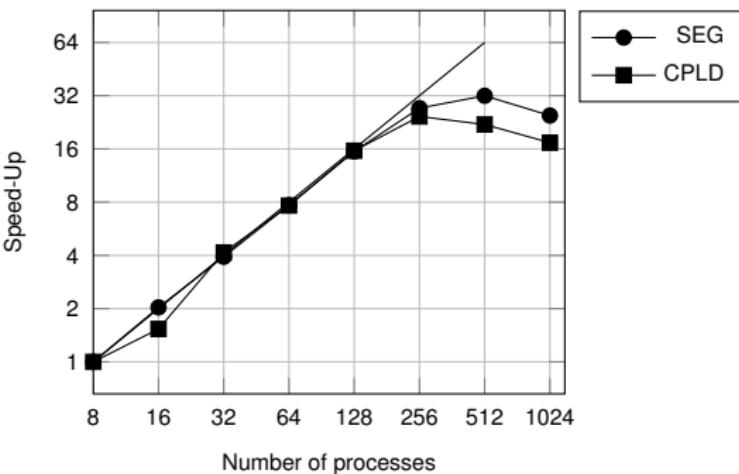
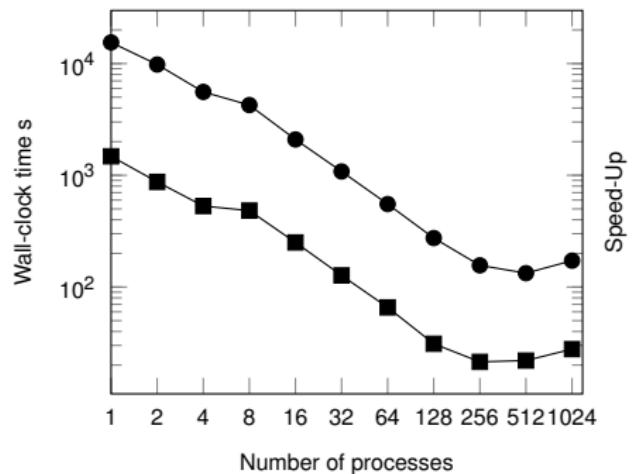
- Lösungen für Druck und Temperatur

$$p(\mathbf{x}) = \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$$

$$T(\mathbf{x}) = \sin(x_1^2) \cos(x_2^2) \sin(x_3^2).$$

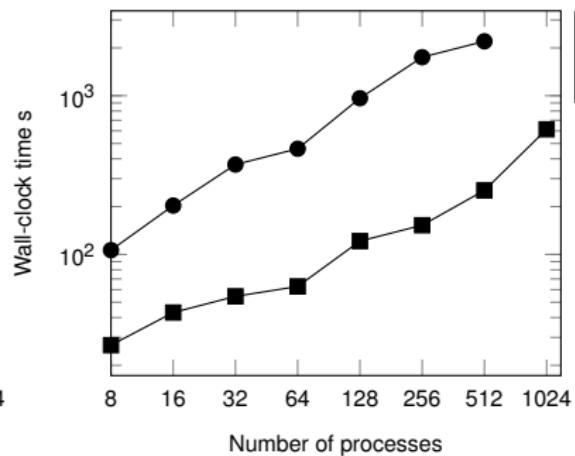
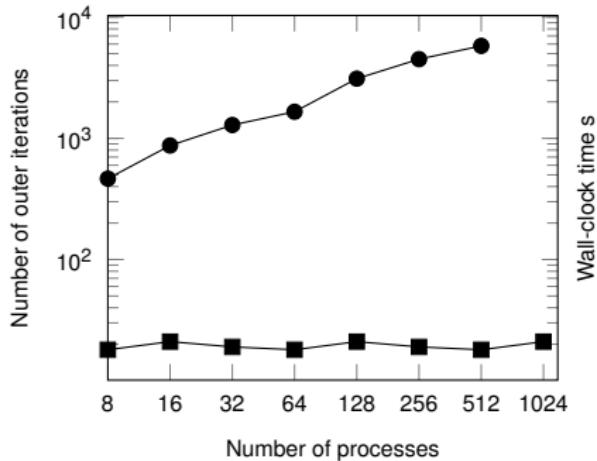
- Problemgebiet so wählen, dass Kontinuität im diskreten Sinne global erfüllt wird

Manufactured Solution - Strong-Scaling



- 128x128x128 Unbekannte auf Prozesse verteilt
- ab 256 Prozessoren zu wenig Unbekannte pro Prozess

Manufactured Solution - Weak-Scaling



- 32x32x32 Unbekannte pro Prozess
- gekoppelter Algorithmus skaliert
- Implementierung skaliert nicht (Präkonditionierer)

Kanalströmung - Problemstellung

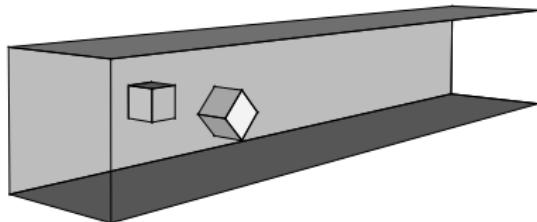


Abbildung: Skizze der Kanalströmung

- Würfel als Hindernisse
- parabolisches Einstromprofil
- $Re \approx 20$
- laminare Strömung
- nichttriviale Blockübergänge

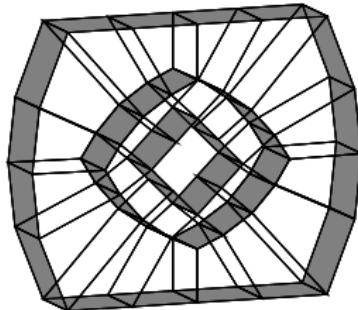
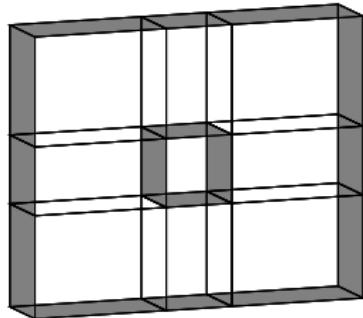


Abbildung: Blocking der Umgebung der Hindernisse im Kanal

Kanalströmung - Druck-Geschwindigkeits-Kopplung

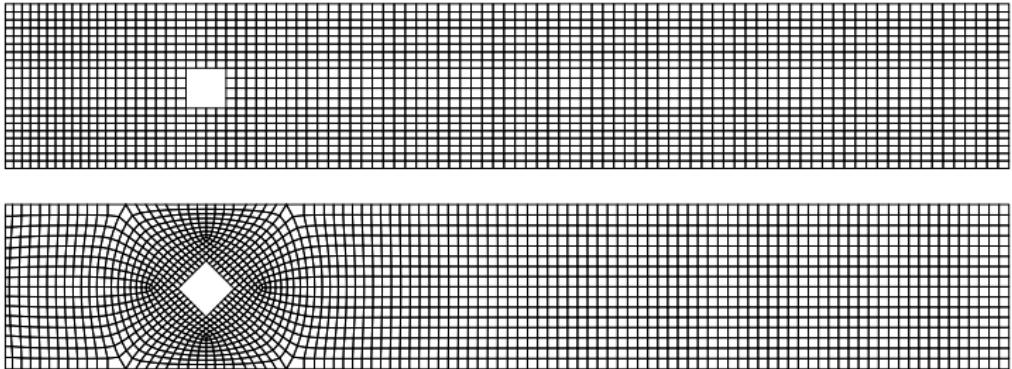


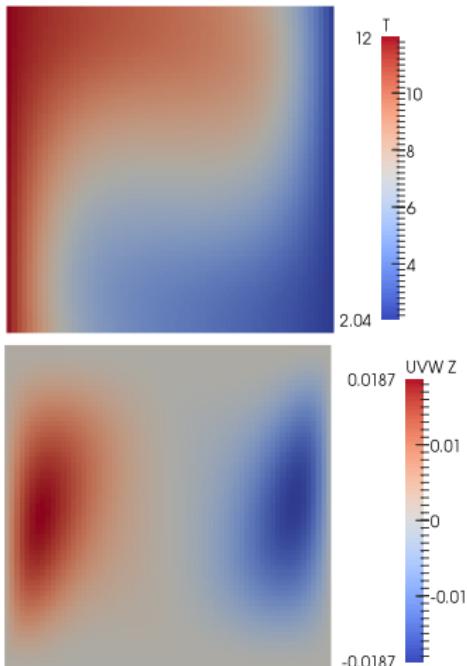
Abbildung: Numerisches Gitter am West- und Ostrand der Kanalströmung

Tabelle: Ergebnisse der Performance Untersuchung der Kanalströmung für unterschiedliche Anzahl an Unbekannten zum Vergleich des SIMPLE (SEG) und vollständig gekoppelten (CPLD) Lösungsalgorithmus

No. of Unknowns	SEG - time s	CPLD - time s	SEG - its	CPLD - its
75768	0.2226E+02	0.2674E+02	151	67
408040	0.4053E+03	0.1499E+03	355	42
2611080	1.1352E+05	0.3105E+04	1592	39



Beheizte Kavität - Problemstellung



- Testfall mit natürlicher Konvektion
- starke Kopplung, da Strömung getrieben durch Temperaturdifferenzen
- 3d Kavität mit isothermer Ost- (kalt) und Westwand (heiß)
- alle übrigen Wände adiabat
- $Ra \approx 10^4$
- stationäre, laminare Strömung

Abbildung: Temperatur-und w -Geschwindigkeitsfeld

Beheizte Kavität - Temperaturkopplung

Tabelle: Performance des SIMPLE Algorithmus (SEG) und des gekoppelten Algorithmus (CPLD) mit impliziter Boussinesq Approximation (TCPLD) und semi-impliziter Temperatur-Geschwindigkeits/Druck-Kopplung (NRCPLD).

Resolution	Solver configuration	Time s	No. Non-linear its.
32x32x32	SEG	0.3719E+02	203
	CPLD	0.6861E+02	62
	TCPLD	0.1012E+03	31
	NRCPLD	0.2153E+02	22
64x64x64	SEG	0.1997E+04	804
	CPLD	0.7687E+03	63
	TCPLD	0.1278E+04	59
	NRCPLD	0.4240E+03	17
128x128x128	SEG	0.5197E+05	3060
	CPLD	0.1860E+05	74
	TCPLD	0.1950E+05	50
	NRCPLD	0.6155E+04	18

Inhalt

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

Fazit und Ausblick

- MPI parallelisierte Implementierung eines vollständig gekoppelten Lösungsverfahrens
- 3d blockstrukturierte Gitter mit hängenden Knoten
- unterschiedliche Methoden zur Temperaturkopplung
- Untersuchung der Skalierbarkeit auf HHLR
- Performancevergleich mit SIMPLE Löser

weiterer Forschungsbedarf:

- instationäre laminare Strömungen bei hohen Rayleighzahlen
- implizite Kopplung im Kontext von Turbulenz, Mehrphasenströmungen, etc.
- matrixfreie Präkonditionierer
- physikbasierte Präkonditionierer (SIMPLE(R) oder andere Schur-Komplement Präkonditionierung)
- spezielle algebraische Mehrgitter Präkonditionierer

Literatur I

-  Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M. F., Brown, J., Brune, P., Buschelman K., Eijkhout, V., Gropp, W. D., Kaushik D., Knepley, M. G., Curfman McInnes, L., Rupp, K., Smith, B. F. and Zhang H., PETSc Web Page.
<http://www.mcs.anl.gov/petsc> (zuletzt besucht am 12. März 2015).

-  Darwish M., Sraj, I. und Moukalled, F.,
A Coupled Finite Volume Solver for the Solution of Incompressible Flows on Unstructured Grids.
Journal of Computational Physics, 228(1):180–201, 2009.

-  Galpin, P. F. und Raithby, G. D.,
Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow:
Treatment of the Temperature-Velocity Coupling.
Numerical Heat Transfer, 10(2):105–129, 1986.

Literatur II

-  **Krajic, C. M. und Vuik, C.**
SIMPLE-Type Preconditioners for Cell-Centered, Colocated Finite Volume Discretization of Incompressible Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations.
International Journal for Numerical Methods in Fluids, 71(7):830–849, 2013.
-  **Lilek, Ž., Muzaferija, S., Perić, M. und Seidl, V.**,
An Implicit Finite-Volume Method Using Nonmatching Blocks of Structured Grid.
Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 32(4):385–401, 1997.
-  **Vakilipour, S. und Ormiston, S. J.**,
A Coupled Pressure-Based Co-Located Finite-Volume Solution Method for Natural-Convection Flows.
Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 61(2):91–115, 2012.