

# **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



- Einsatz robuster Algorithmen
- Skalierbarkeit der Lösungsmethode
- Effizienzsteigerung durch Adaptivität

Abbildung: Gasturbine (VDI)

## Motivation

Vollständig gekoppelter Lösungsansatz für Navier-Stokes Gleichungen (Darwish 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 block-strukturierten, 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, incompressible 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 konvektiver Term der Temperaturgleichung (Galpin et al.)

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

- Diskretisierung unter Verwendung der druckgewichteten Interpolation

# Implementierung - System algebraischer Gleichungen

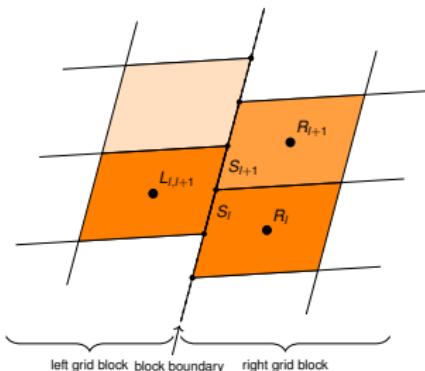
$$a_P^{u_i} u_{P,i} + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{u_i} u_{F,i} + a_P^{u_i,p} p_P + \underbrace{\sum_{F \in NB(P)} a_F^{u_i,p} p_F}_{\text{Pressure-velocity coupling}} + \underbrace{a_P^{u_i,T} T_P}_{\text{Boussinesq approximation}} = b_{P,u_i}$$

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

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

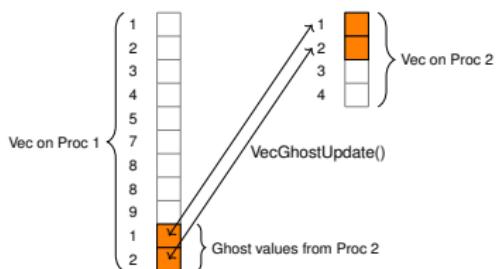
# Implementierung - Blockränder und Parallelisierung

- Behandlung der Blockränder nach Lilek et. al
- Nutzen von PETSc Datenstrukturen zur MPI-Parallelisierung
- spezielle Vektorobjekte zur Verwaltung von Ghost-Values
- Nur ein Prozessor berechnet Matrixkoeffizienten für Blockübergänge

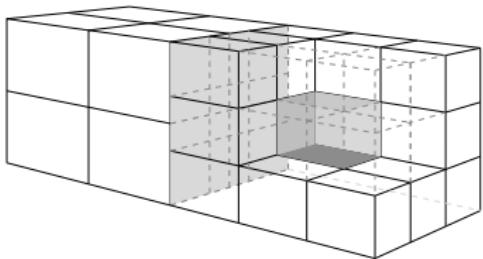


3	6	9		
2	5	8		
1	4	7	1	3

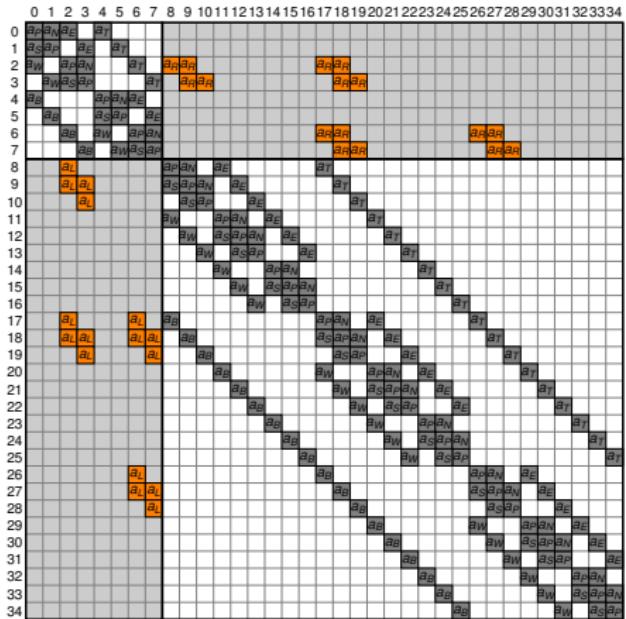
Block 1 on Proc 1      Block 2 on Proc 2



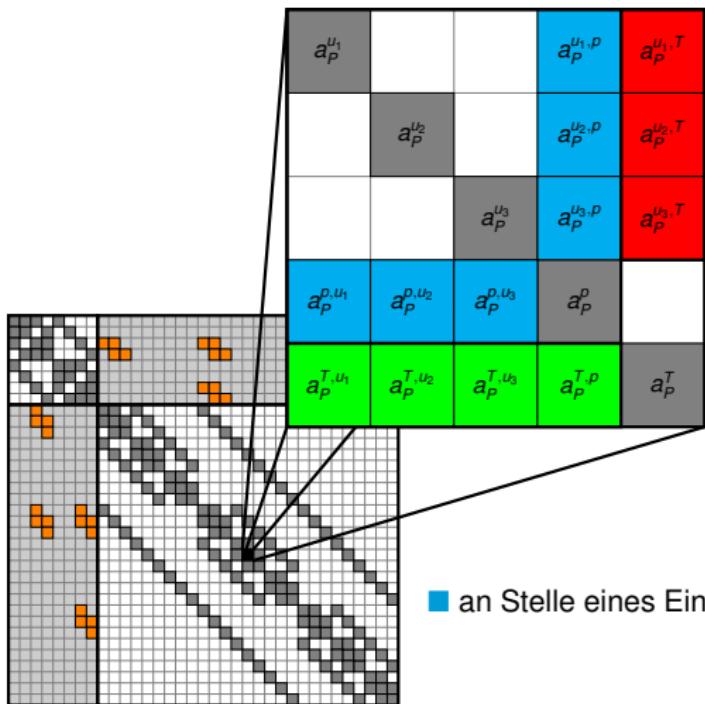
# Implementierung - Assemblierung



**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

---

## 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

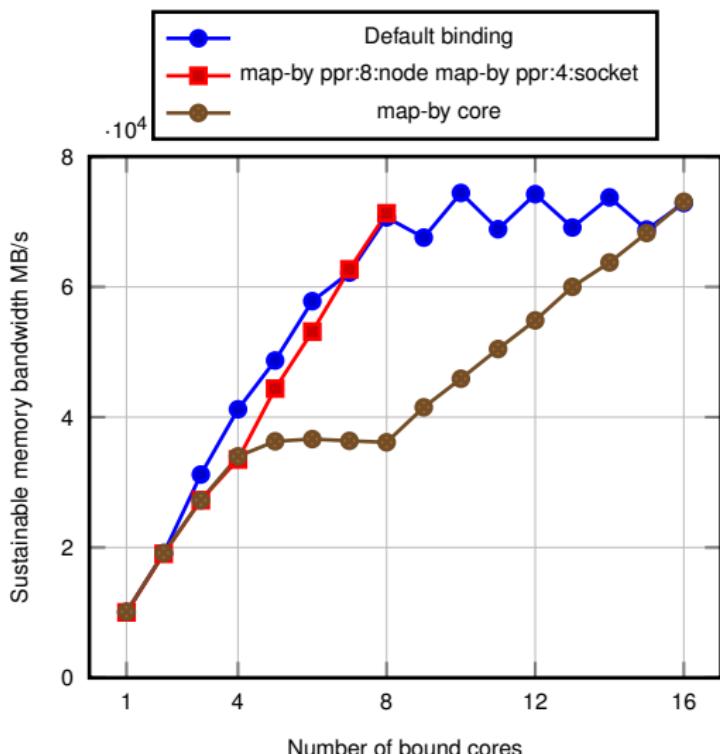
Aufgabenstellung und Bearbeitung

Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

# STREAM Benchmark - Sustainable Memory Bandwidth



- Nutzung eines Knoten der MPI1-Sektion des HHLR
- Low-level bechmark
- Für bandbreitenlimitierte Programmperformance
- Vectortriade:  
 $a[i] = b[i] + scalar * c[i]$

# Manufactured Solution

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

$$u_1 = 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_2 + 2 \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_3$$

$$u_2 = 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_3 - 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_1$$

$$u_3 = -2 \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_1 - 2 \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_2$$

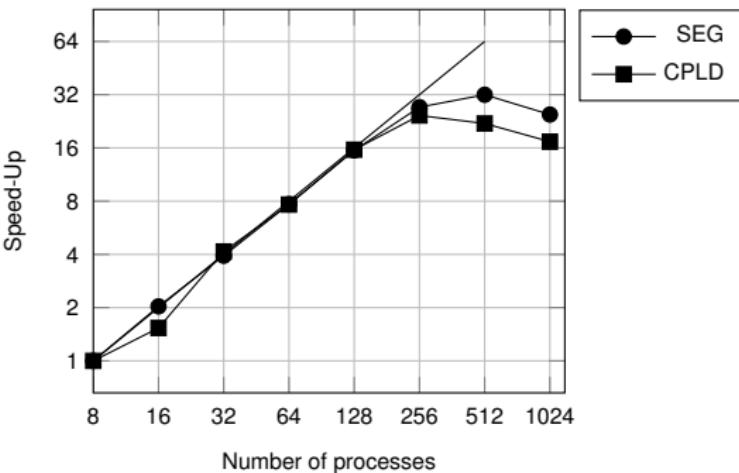
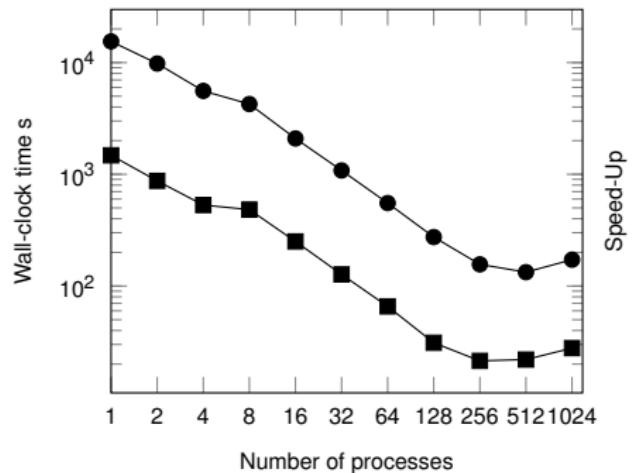
- Lösungen für Druck und Temperatur

$$p = \sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \cos(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$$

$$T = \sin(x_1^2) \cos(x_2^2) \sin(x_3^2).$$

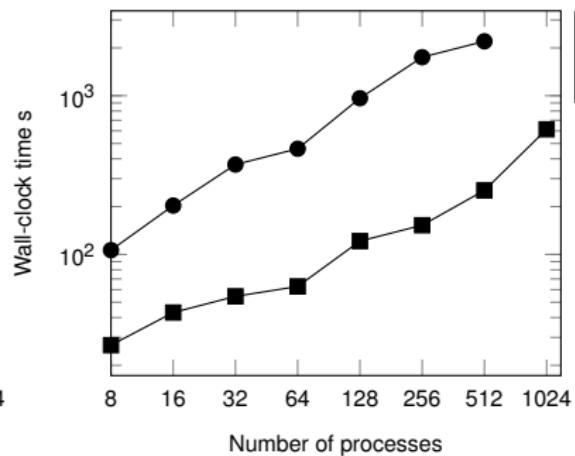
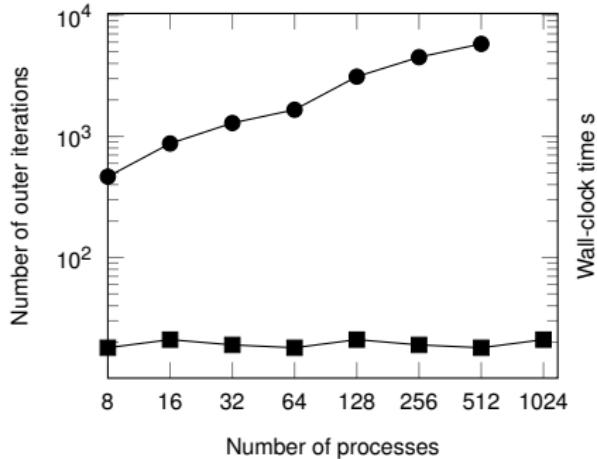
- Problemgebiet so wählen, dass Kontinuität im diskreten Sinne global erfüllt wird

# Manufactured Solution - Strong-Scaling



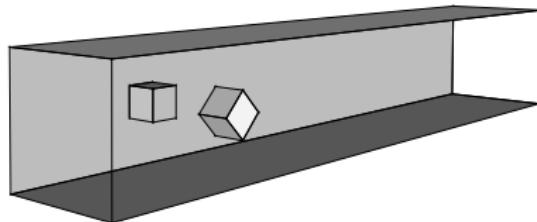
- 128x128x128 Unbekannte auf Prozesse verteilt
- ab 256 Prozessoren zu wenig Unbekannte pro Prozess

# Manufactured Solution - Weak-Scaling



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

# Kanalströmung - Problemstellung



- Würfel als Hindernisse
- Parabolisches Einstromprofil
- $Re \approx 20$
- Laminare Strömung

Abbildung: Sketch of the channel flow problem

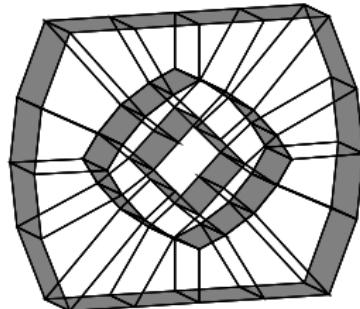
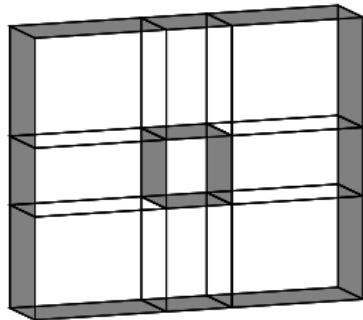
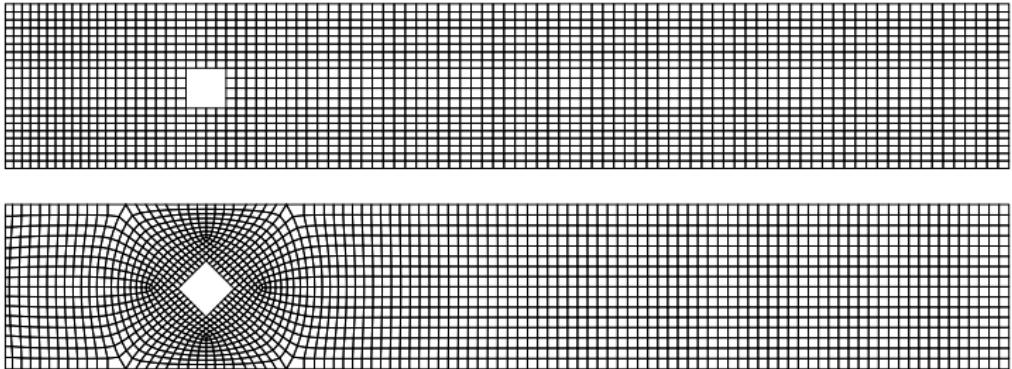


Abbildung: Blocking for the two different obstacles within the problem domain of the channel flow



# Kanalströmung - Druck-Geschwindigkeitskopplung



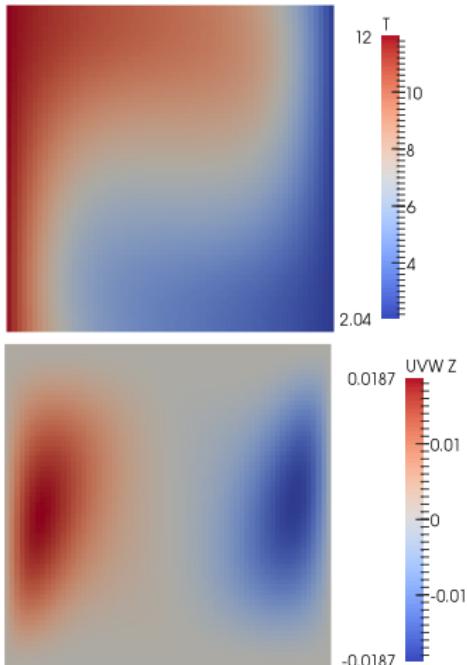
**Abbildung:** West and east boundary of the numerical grid for the channel flow problem

**Tabelle:** Performance analysis results of the channel flow problem for different numbers of unknowns comparing the segregated (SEG) to the fully coupled (CPLD) solution algorithm using one process on the MPI2 section of the HHLR supercomputer.

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
- dreidimensionale Kavität mit beheizter Ost- und Westseite
- 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), 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

# Ausblick