

# **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



- Effizienzsteigerung durch Adaptivität
- Skalierbarkeit der Lösungsmethode
- Einsatz robuster Algorithmen
- 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 Lösen
- 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
- implizite Berücksichtigung des Druckgradienten
- diskretisierte Massenerhaltungsgleichung

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

- druckgewichtete Interpolation zur Massenflussberechnung

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

# Implementierung - Temperaturkopplung

- Diskretisierung der Boussinesq Approximation des Auftriebsterms  $\rho\beta(T - T_0) g_i$
- 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

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

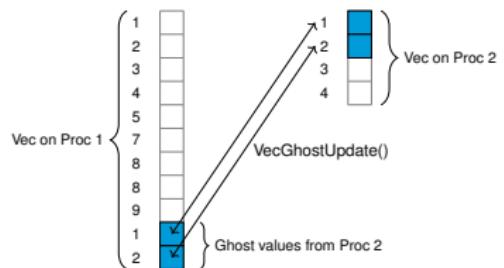
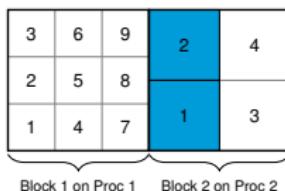
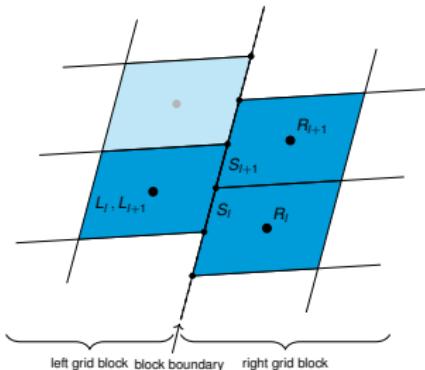
$$a_P^p p_P + \sum_{F \in NB(P)} a_F^p p_F + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \left( a_P^{p,u_j} u_{P,j} + \sum_{F \in NB(P)} a_F^{p,u_j} u_{F,j} \right)}_{\text{Pressure-velocity coupling}} = b_{P,p}$$

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

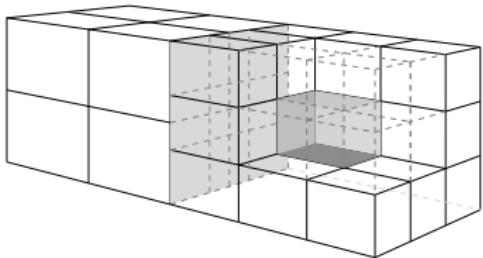
# Implementierung

## - Blockränder und Parallelisierung

- Behandlung der Blockränder nach Lilek et al. (1997)
- 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

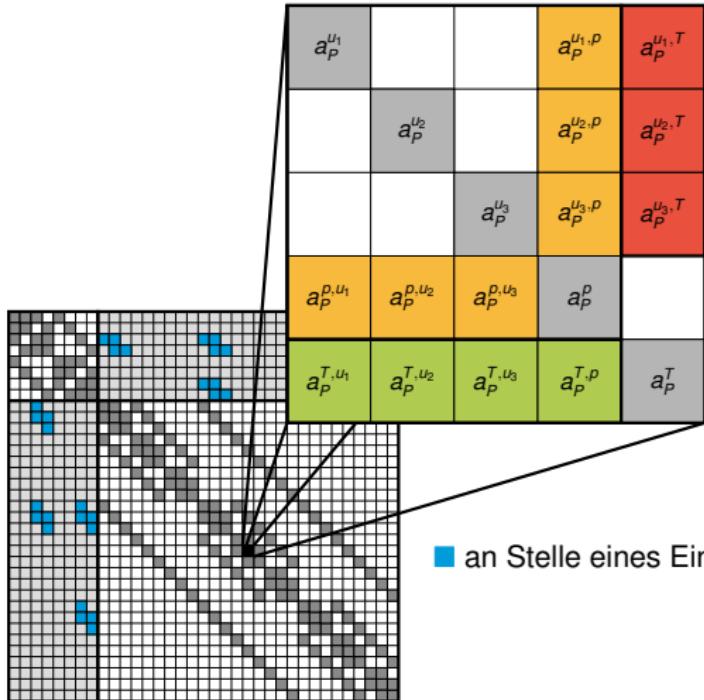


**Abbildung:** Blockstrukturiertes Gitter und resultierende Matrixbelegung für eine Variable ohne Kopplung

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34		
0	$a_{P,N}$	$a_C$	$a_T$																																		
1	$a_S$	$a_P$	$a_E$	$a_T$																																	
2	$a_W$	$a_P$	$a_N$	$a_T$	$a_{P,N}$																																
3	$a_W$	$a_S$	$a_P$	$a_T$	$a_{P,N}$																																
4	$a_B$		$a_{P,N}$	$a_C$																																	
5	$a_B$		$a_O$	$a_P$	$a_E$																																
6		$a_B$	$a_N$	$a_P$	$a_N$																																
7		$a_B$	$a_W$	$a_S$	$a_P$																																
8			$a_L$			$a_{P,N}$	$a_E$																														
9			$a_L$	$a_Q$																																	
10			$a_Q$																																		
11				$a_N$																																	
12					$a_W$																																
13						$a_W$																															
14							$a_W$																														
15								$a_W$																													
16									$a_W$																												
17									$a_Q$																												
18									$a_Q$																												
19										$a_B$																											
20										$a_B$																											
21											$a_B$																										
22											$a_B$																										
23											$a_B$																										
24											$a_B$																										
25												$a_B$																									
26												$a_B$																									
27												$a_B$																									
28													$a_B$																								
29													$a_B$																								
30													$a_B$																								
31													$a_B$																								
32													$a_B$																								
33													$a_B$																								
34													$a_B$																								

# Implementierung

## - Assemblierung mit Kopplung



# 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 (coupled scalar equation) then
        SOLVE scalar equation
    end if
end while
if (decoupled scalar equation) then
    SOLVE scalar equation
end if
```

# 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** (coupled scalar equation) **then**

*SOLVE* scalar equation

**end if**

**end while**

**if** (decoupled scalar equation) **then**

*SOLVE* scalar equation

**end if**

# Inhalt

---

Motivation

Aufgabenstellung und Bearbeitung

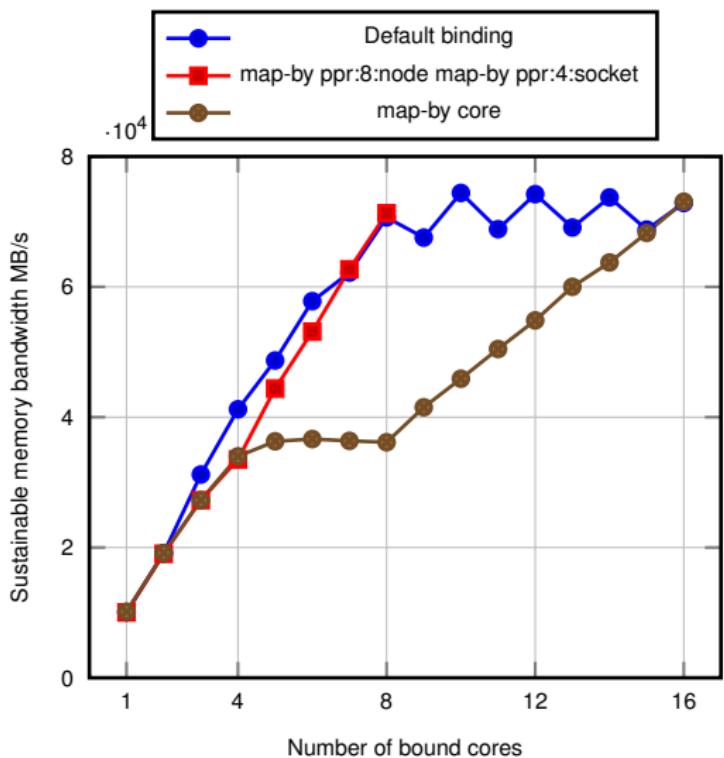
Implementierung

Performanceuntersuchung

Fazit und Ausblick

# McCalpin STREAM Benchmark

## - Sustainable Memory Bandwidth



- Nutzung eines Knotens der MPI1-Sektion (Sandy-Bridge) des HHLR
- low-level Benchmark
- für bandbreitenlimitierte Programmperformance
- TRIAD KERNEL:  
 $a[i] = b[i] + \text{scalar} * c[i]$

# Manufactured Solution

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

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

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

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

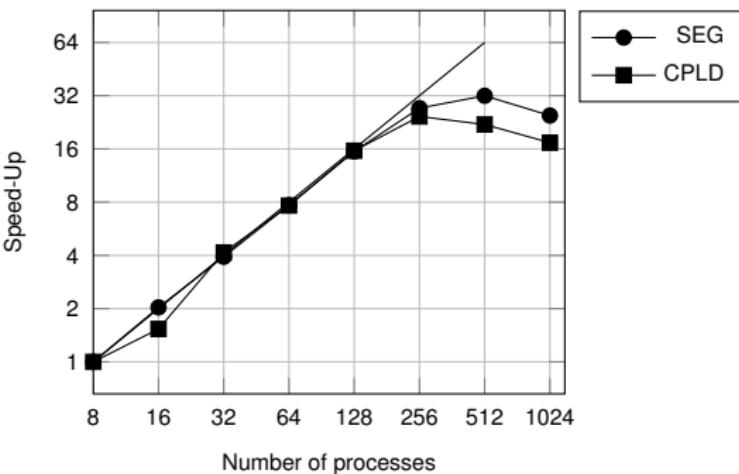
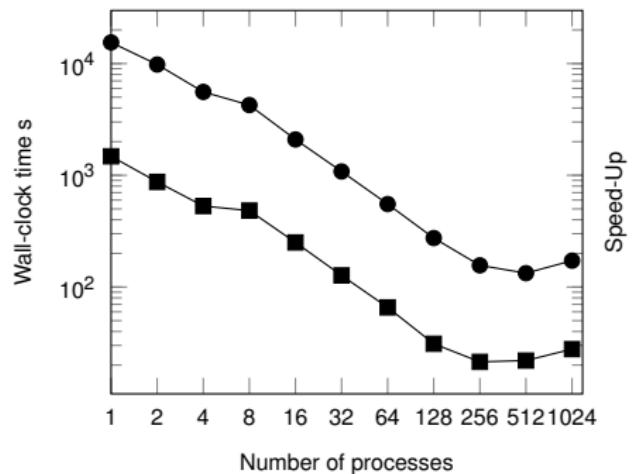
- Lösungen für Druck (und Temperatur)

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

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

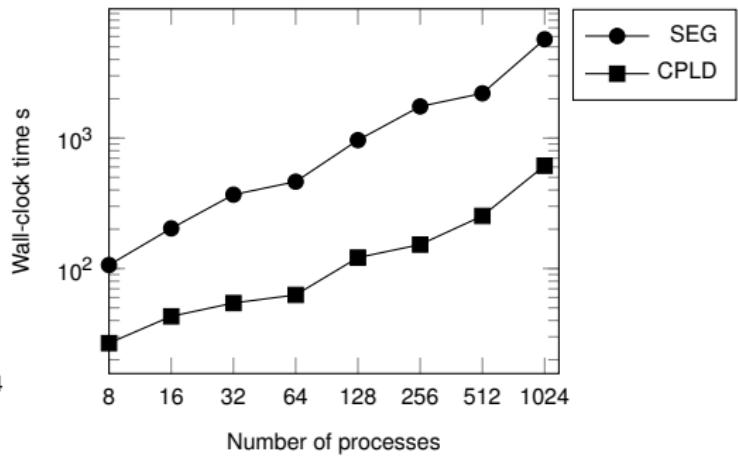
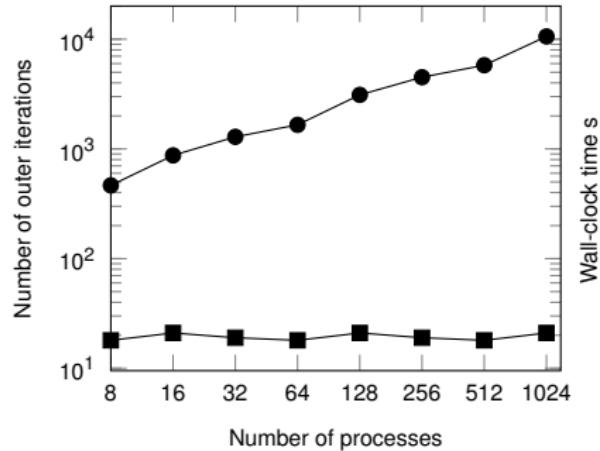
- Problemgebiet so wählen, dass Kontinuität im diskreten Sinne global erfüllt wird

# 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

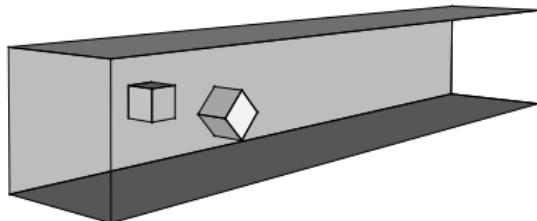


Abbildung: Skizze der Kanalströmung

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

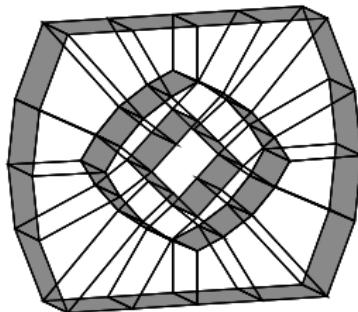
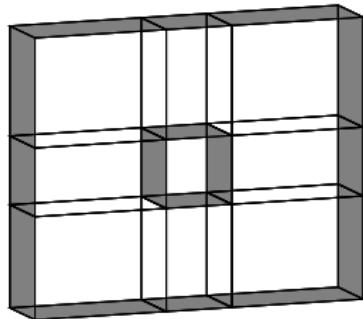
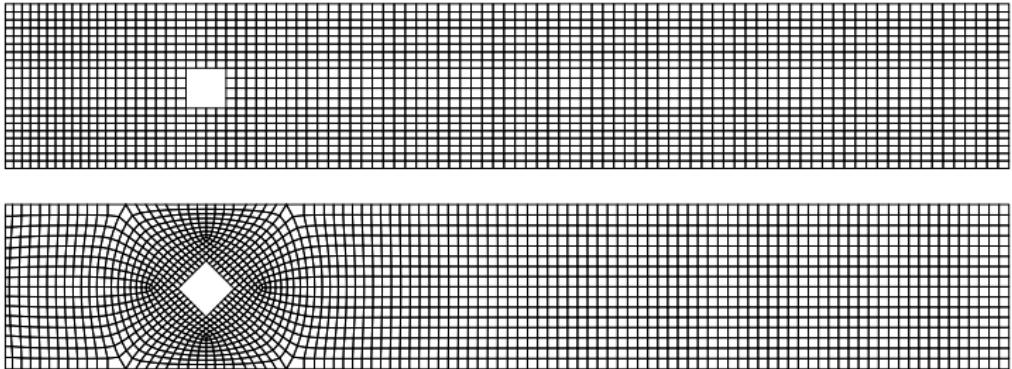


Abbildung: Blocking der Umgebung der Hindernisse im Kanal

# Kanalströmung - Druck-Geschwindigkeits-Kopplung



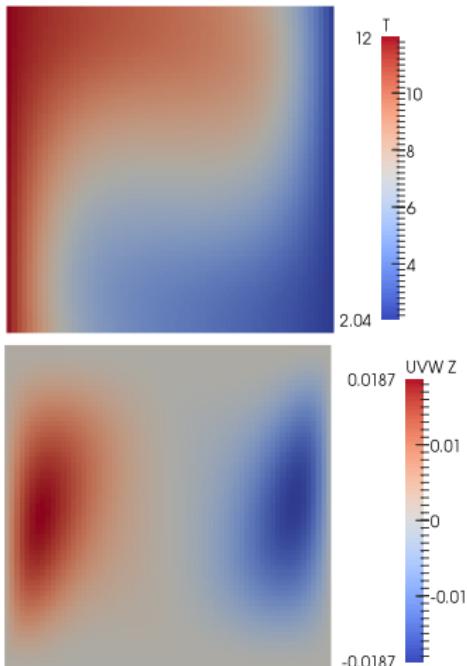
**Abbildung:** Numerisches Gitter am West- und Ostrand der Kanalströmung

**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 der 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 22. 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.