Efficient Numerical Methods for Fluid- and Electrodynamics on Massively Parallel Systems

Effiziente numerische Methoden der Fluid- und Elektrodynamik auf massiv parallelen Systemen

Von der Fakultät für Maschinenwesen der
Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Jens Zudrop

Berichter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Sabine Roller
Univ.-Prof. Georg May, Ph. D.
Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Martin Frank
Prof. Pietro Asinari, Ph. D.

Tag der mündlichen Prüfung: 09.12.2015

Industriemathematik und Angewandte Mathematik

Jens Zudrop

Efficient Numerical Methods for Fluid- and Electrodynamics on Massively Parallel Systems

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek
The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at http://dnb.d-nb.de.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2015)

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4407-2
ISSN 1615-6390

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen
Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9
Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Zeit als Doktorand an der German Research School for Simulation Sciences (GRS), RWTH Aachen. Meine Anstellung wurde aus dem BMBF-Projekt *HISEEM* gefördert - an dieser Stelle einen herzlichen Dank an alle Projektpartner.

Ein herzlicher Dank gilt auch Prof. Sabine Roller für die Ermöglichung dieser Arbeit und die gute Atmosphäre innerhalb der Arbeitsgruppe. Ein ganz besonders herzlicher Dank gilt aber vor allem Prof. Pietro Asinari vom Politecnico Torino, Italien und Prof. Jan S. Hesthaven von der École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Schweiz, die mich während meiner Zeit als Doktorand im Bereich der Lattice Boltzmann und Diskontinuierlichen Galerkin Verfahren unterstützt und auf höchstem fachlichen Niveau begleitet haben. Natürlich gilt Prof. Georg May und Prof. Martin Frank ein Dank für die Unterstützung bei der Entstehung dieser Dissertation. Darüber hinaus möchte ich mich vielmals bei Harald Klimach für die hervorragende fachliche Betreuung bedanken. Ohne die hervorragende Zusammenarbeit hätte diese Dissertation in dieser Form nicht entstehen können. Der fachliche Austausch mit allen beteiligten Personen war stets sehr angenehm und auf höchstem Niveau.

Bedanken möchte ich mich auch bei meinen Kollegen Matthias Johannink, Kannan Masilamani und Simon Zimny für ihre Unterstützung. Vielen Dank auch an Adrian Spona, Beate Pütz und Annelie Fischbach für die Hilfe bei den zahlreichen administrativen Angelegenheiten die im Laufe dieser Arbeit angefallen sind.

Herzlich Bedanken möchte ich an dieser Stelle bei meinen Eltern, meiner Familie und meinen Freunden für die Unterstützung. Ein ganz besonderer Dank gilt meiner Lena für die Hilfe, Unterstützung und den unschätzbaren Rückhalt.

Jens Zudrop

Zusammenfassung

Im Laufe des letzten Jahrzehnts ist die Rechenleistung verfügbarer Computer exponentiell schnell gewachsen. Moderne "High Performance Computer" stellen zur Zeit einige Peta-FLOPS an Rechenleistung bereit. Andererseits gibt es jedoch nur wenige numerische Algorithmen, die diese Rechenleistung wirklich nutzen können. Dies ist zum einen den numerischen Methoden an sich, und zum anderen den zugehörigen Algorithmen und Implementierungen geschuldet. In dieser Dissertation werden numerische Verfahren zur Lösung von Erhaltungsgleichungen entwickelt und analysiert, die diese Probleme durch ein "Co-design" des Verfahrens und effizienter Algorithmen umgehen.

Der erste Teil befasst sich mit so genannten Multikomponenten-Strömungen. Bei diesen handelt es sich um Fluide, die aus einer homogenen Mischung verschiedener Stoffe bestehen. Sie sind von großer Bedeutung bei einer Vielzahl von Problemen in Wissenschaft und Technik, wie beispielsweise der Elektrodialyse. Zur numerischen Lösung der Strömungsgleichungen wird in dieser Arbeit ein Lattice Boltzmann Verfahren entwickelt, das sowohl die Navier-Stokes Gleichungen für den Impulstransport als auch die Maxwell-Stefan Beziehungen für den diffusiven Massentranport einer nicht-idealen Mischung löst. Letztere beinhaltet konzentrationsabhängige thermodynamische Faktoren und Maxwell-Stefan Diffusivitäten. Darüber hinaus wird ein Kopplungsansatz entwickelt, der die Einbindung quasi-stationärer elektrischer Feldkräfte für nicht elektroneutrale Fluide ermöglicht. Die einfache algorithmische Struktur des Lattice-Boltzmann Verfahrens macht dieses Schemata ideal geeignet für eine massiv parallele Implementierung. Numerische Experimente zeigen die große Effizienz des Verfahrens auf.

Im zweiten Teil werden spektrale Discontinuous Galerkin Verfahren für hyperbolische und konvektionsdominierte (nicht-)lineare Erhaltungsgleichungen betrachtet. Diese Art von Gleichungen stellen für hohe Ordnungsverfahren ein Problem dar, da Diskontinuitäten in den exakten Lösungen zu so genannten Gibbs Oszillationen führen. Diese zerstören dem erstem Anschein nach die schnelle Fehlerkonvergenz im punktweisen Sinne, und somit die Effizienz des Discontinuous Galerkin Verfahrens hoher Ordnung. In dieser Dissertation wird jedoch gezeigt, dass adjungiert-konsistente, spektrale Discontinuous Galerkin Verfahren die Information hoher Ordnung in den Momenten der Lösung erhalten. Ein postprocessing Schritt reduziert die Gibbs Oszillationen und stellt die punktweise Konvergenz höherer Ordnung wieder her. Die Effizienz eines solchen Verfahrensansatzes auf massiv parallelen Systemen wird anhand verschiedener Testfälle aufgezeigt. Dies beinhaltet beispielsweise die akustische Schallabstrahlung eines supersonischen Freistrahls und die Einbettung von Geometrie für die Maxwell Gleichungen.

Der letzte Teil ist der Implementierung dieser Algorithmen für verteilte, auf Baumstrukturen basierenden Gittern gewidmet. Diese erlauben eine vollständige Parallelisierung der beschriebenen Löser, inklusive pre- und postprocessing. Verschiedene Algorithmen und Datenstrukturen werden aufgezeigt, die die effiziente Implementierung des Lattice Boltzmann und Discontinuous Galerkin Verfahrens erlauben. So werden Simulationen mit mehreren Milliarden Freiheitsgraden ermöglicht.

Abstract

In the last decade, computer technology has evolved rapidly. Modern high performance computing systems offer a tremendous amount of computing power in the range of a few peta floating point operations per second. In contrast, numerical software development is much slower and most existing simulation codes cannot exploit the full computing power of these systems. Partially, this is due to the numerical methods themselves and partially it is related to bottlenecks within the parallelization concept and its data structures. The goal of the thesis is the development of numerical algorithms and corresponding data structures to remedy both kinds of parallelization bottlenecks. The approach is based on a co-design of the numerical schemes (including numerical analysis) and their realizations in algorithms and software.

The first part of this thesis deals with complex, non-ideal multicomponent flows. These kind of flows appear in many applications in science and engineering, such as electrodialysis. For these applications complex mass, momentum and energy transport processes among the species play an important role. A novel Lattice Boltzmann method (LBM) is presented, which recovers the Navier-Stokes equations and the Maxwell-Stefan diffusion relation of complex, non-ideal mixtures; this includes concentration dependent diffusivities, as well as thermodynamic factors. Furthermore, a coupling to classical schemes is derived to include quasi-electrostatic interactions among the species when the fluid is not electro-neutral. The simple algorithmic structure of the LBM makes the presented scheme an ideal candidate for massively parallel computing systems and numerical experiments demonstrate the computational efficiency of the model.

The second part of this thesis covers high order schemes, in particular Discontinuous Galerkin methods (DG), for hyperbolic conservation laws. It is a well-known fact that high order methods suffer from Gibbs oscillations when applied to problems with discontinuous solutions. These oscillations seem to destroy high order convergence at first glance, which makes the scheme less efficient. On the other side, it is shown in this thesis that adjoint-consistent DG methods maintain high order accuracy in terms of moments when applied to problems with discontinuous solutions; pointwise high order accuracy can be recovered after post-processing. It is demonstrated that such a combination of high order methods and post-processing is extremely efficient on modern high performance computing systems. A number of applications, from noise generation of supersonic free-stream jet flow to Maxwell equations with embedded boundaries, is presented.

The last part of this thesis is devoted to tree-based implementations of the previously mentioned numerical methods. These require a minimal set of global information, and as such they are highly scalable and well suited for distributed architectures. They enable the realization of end-to-end parallel simulation concepts, in which every part of the numerical solver, from mesh generation to post-processing, is inherently parallel. A number of algorithms and data structures is presented to achieve this goal. The tree based LBM and DG solvers enable large scale simulations in complex scenarios.

Contents