

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)

Copyright Shaker Verlag 2016

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

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 Petaflops 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 Elektrolyse. 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 Massentransport 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 ersten 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 electro-dialysis. 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

List of Figures	xi
List of Tables	xvii
Nomenclature	xix
Notation	xxiii
1. Introduction	1
1.1. Motivation	1
1.2. Goal of this thesis	2
1.3. Related work	3
1.4. Outline	5
2. Mathematical models	7
2.1. Continuum mechanics	8
2.1.1. Time-domain electrodynamics - Maxwell's equations	8
2.1.2. Inviscid, compressible fluid flow - Euler equations	10
2.1.3. Viscid, compressible fluid flow - Navier-Stokes equations	12
2.1.4. Isothermal, low-Mach fluid flow - Incompressible Navier-Stokes equations	13
2.1.5. Multicomponent low-Mach fluid flow	14
2.2. Kinetic theory	16
2.2.1. Ideal gases - Boltzmann equation	17
2.2.2. Multicomponent ideal gases	20
3. Lattice Boltzmann methods	23
3.1. Lattice Boltzmann methods for incompressible fluid flow	24
3.1.1. Asymptotic analysis	27
3.1.2. Boundary conditions	31
3.2. Lattice Boltzmann model for non-ideal mixtures	34
3.2.1. Semi-discretization in phase-space	34
3.2.2. Semidiscrete asymptotic analysis - the diffusive limit	37
3.2.3. Activity coefficients and thermodynamic factors	57
3.2.4. Concentration dependent diffusivities	59
3.2.5. Multiple relaxation time Lattice Boltzmann model	61
3.2.6. Temporal discretization	62

3.2.7. Boundary conditions	67
3.2.8. Coupled electro-convection-diffusion	72
3.3. Concluding remarks	72
4. Discontinuous Galerkin methods	75
4.1. A short reminder on spectral methods	76
4.2. Discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conservation laws	79
4.3. De-aliasing, stability and variational crimes	84
4.3.1. Co-volume filtering	88
4.4. Discontinuous Galerkin methods for higher order equations	91
4.4.1. Symmetric Interior Penalty for Poisson equation	92
4.5. Shock capturing - Gibbs oscillations and post-processing for discontinuous solutions	93
4.5.1. High order convergence of moments	95
4.5.2. Padé approximants and Gegenbauer reprojection	114
4.5.3. Modal filtering	115
4.6. Some specific Discontinuous Galerkin discretizations	118
4.6.1. Time-domain electrodynamics	118
4.6.2. Time-domain electrodynamics with hyperbolic divergence cleaning	126
4.6.3. Inviscid, compressible flows	130
4.6.4. Viscid, compressible flows	133
4.7. Embedded boundaries	138
4.7.1. Embedded boundary methods for time-domain Maxwell equations	139
4.8. Runge-Kutta Discontinuous Galerkin methods	142
4.8.1. Some notes on the CFL condition and co-volume filtering	143
4.9. Concluding remarks	144
5. Numerical algorithms on distributed trees for high performance computing	147
5.1. Distributed trees and space filling curves	149
5.1.1. Mesh generation	151
5.1.2. Generating meshes with embedded geometries	152
5.2. Lattice Boltzmann methods on octrees	153
5.2.1. Performance of the multicomponent Lattice Boltzmann method	155
5.3. Discontinuous Galerkin methods on octrees	158
5.3.1. Polynomial spaces	159
5.3.2. Fast polynomial transformations	162
5.3.3. Maxwell equations	165
5.3.4. Efficient implicit-mixed-explicit Runge-Kutta methods for Maxwell equations with embedded boundaries	165
5.3.5. Compressible Euler equations	167
5.3.6. Compressible Navier-Stokes equations	169
5.3.7. Local refinement with hanging h/p -nodes	171
5.4. The massively parallel solver <i>ATELES</i>	175
5.4.1. Efficient data structures and parallelization concept	175

5.5.	Performance	178
5.5.1.	Performance measures and test setup	178
5.5.2.	Performance maps and scalability results	179
5.5.3.	Intra-element shared memory parallelization	183
5.6.	Some remarks on parallel post-processing	185
5.6.1.	Visualization of high order information	186
5.7.	Concluding remarks	187
6.	Numerical results	189
6.1.	Multicomponent flows	189
6.1.1.	Poiseuille flow	190
6.1.2.	Stefan tube	191
6.1.3.	Diffusive double layer	192
6.1.4.	Taylor dispersion	197
6.1.5.	Multicomponent channel flow around multiple obstacles	198
6.1.6.	Multicomponent flow in a porous media	199
6.2.	Electrodynamics	205
6.2.1.	Embedded 2D cavities	205
6.2.2.	Plane wave scattering by 3D sphere	211
6.2.3.	Plane wave scattering by an aircraft configuration	215
6.3.	Fluid flow	221
6.3.1.	One-dimensional Riemann problems	221
6.3.2.	Two-dimensional Riemann problems	227
6.3.3.	Numerical convergence analysis for the compressible Navier-Stokes equations	234
6.3.4.	Taylor-Green vortex	237
6.3.5.	Two-dimensional supersonic free-stream jet	244
6.3.6.	Three-dimensional transonic free-stream jet	247
7.	Conclusion and future work	251
A.	Appendix	253
A.1.	Thermodynamic factors in the Maxwell-Stefan formulation	253
A.2.	Analysis of the multicomponent Boltzmann equation	254
A.2.1.	\mathcal{H} -theorem for multicomponent ideal gases	254
A.2.2.	Asymptotic analysis	257
A.3.	Mathematical details of the multicomponent Lattice Boltzmann Method	269
A.3.1.	Second moment of the second order asymptotic expansion	269
A.3.2.	Species momentum transport equation	271
A.3.3.	First order asymptotic expansion term with external forces	271
A.3.4.	Second moment of the second order asymptotic expansion with external forces	272
A.4.	Three-dimensional MRT Lattice-Boltzmann matrices	273

A.5. Viscosity tensors for the three-dimensional compressible Navier-Stokes equation	274
A.6. Brinkman penalization for the compressible Navier-Stokes equation . . .	278
A.6.1. Interior Penalty Discontinuous Galerkin discretization of the Brinkman penalized Navier-Stokes equations	279
A.7. Butcher-tableau for the third order IMEX time integrator	280
A.8. Efficient algorithms for the discrete Navier-Stokes equation	281
A.9. Simulation parameters	281
A.10. Coefficients for the numerical convergence analysis for the Navier-Stokes equations	285
References	287