LIÈGE université Library

https://lib.uliege.be

https://matheo.uliege.be

Comparison of linear solvers for the incompressible Navier-Stokes equations in PFEM simulations

Auteur : Ghalem, Rayane
Promoteur(s) : Boman, Romain
Faculté : Faculté des Sciences appliquées
Diplôme : Master en ingénieur civil en aérospatiale, à finalité spécialisée en "aerospace engineering"
Année académique : 2025-2026
URI/URL : http://hdl.handle.net/2268.2/26083

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.

Comparison of linear solvers for the incompressible Navier-Stokes equations in PFEM simulations

Abstract

PFEM3D is an in-house C++ software developed at the LTAS-MN2L laboratory of the University of Liège for simulating incompressible free-surface flows using the Particle Finite Element Method. At each implicit time step, the dominant computational cost is the repeated resolution of large sparse nonsymmetric linear systems arising from the Monolithic Navier-Stokes discretization. The initial Eigen LU solver required approximately ten days for a dam break simulation with 50 000 particles, motivating a systematic comparison of available solvers. This work benchmarks direct and iterative sparse linear solvers on a three-dimensional dam break problem (50 000 to 300 000 particles) and validates the findings on a laser track benchmark involving phase change and thermo-mechanical coupling.

Among the four direct solvers evaluated (SuperLU Dist, Intel MKL DSS, Panua PARDISO, PaStiX LU), MKL DSS, PaStiX LU, and Panua PARDISO demonstrate competitive performance with nested dissection ordering, exhibiting empirical time complexities of approximately $O(\text{nnz}^2)$. PaStiX LU achieves $O(\text{nnz}^{1.66})$ at 32 threads, while Panua PARDISO attains the highest parallel efficiency at $E = 0.41$ for $n = 300\,000$ particles. All direct solvers share an $O(\text{nnz}^{4/3})$ memory growth due to fill-in, restricting applicability to problems below approximately 1 200 000 particles.

Iterative solvers from the AMGCL library (BiCGStab and unrestarted GMRES with ILU(0) preconditioning) substantially outperform all direct solvers, achieving Performance Improvement Factors of approximately 870 and 890 respectively relative to Eigen LU at 32 threads, with memory scaling only linearly in the number of particles. The ILU(0) preconditioner is recommended over ILUT as it requires no parameter tuning. The convergence tolerance is a critical parameter: an optimal range of $[10^{-6}, 10^{-1}]$ is established, with 10^{-4} as the recommended default. BiCGStab outperforms GMRES for $n \leq 150\,000$ particles, while GMRES becomes competitive at $n = 300\,000$.

On the laser track benchmark, GMRES with tolerance 10^{-2} achieves the lowest cumulative CPU time ($\approx$31 000 s), compared to $\approx$51 000 s for MKL DSS and $\approx$96 000 s for PaStiX. These results confirm the generality of the solver selection guidelines while highlighting that the convergence tolerance must be adapted to the problem physics. The findings are consolidated into a practical decision tree for solver selection in incompressible fluid PFEM3D simulations.