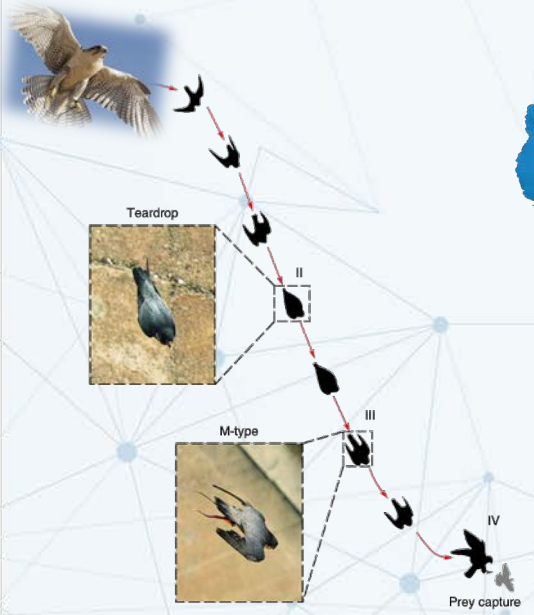
Experiencias en el uso de solvers compresibles robustos y adaptivos.



Guillermo Castro

- Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Nordeste

- Laboratorio de Mecánica Computacional, IMIT-UNNE, CONICET

- Applied Mathematics and Computational Science, Extreme Computing Research Center, King Abdullah University of Science and Technology

Seminario del Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica
02 de Noviembre de 2022

CONTENIDOS

1 El comienzo de la historia

2 Problemas discutidos aquí

3 El método de energía/entropía y el esquema SBP-SAT

4 Algoritmos de entropía estable y el esquema SSDC para CFD compresible

5 Qué nos permite realizar esta tecnología?

6 Resumen

CRÉDITOS

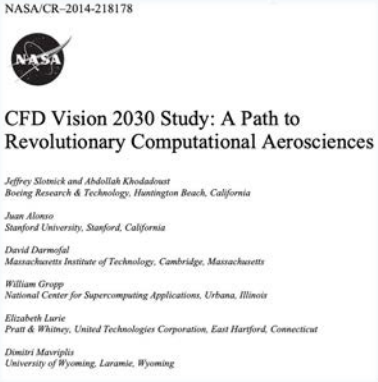
- Matteo Parsani (KAUST, ECRC, KSA)
- Lisandro Dalcin (KAUST, ECRC, KSA)
- David C. del Rey Fernández (Waterloo University, CA)
- Stefano Zampini (KAUST, ECRC, KSA)
- Bilel Hadri (KAUS, KSL, KSA)
- David E. Keyes (KAUST, ECRC, KSA)
- Hendrik Ranocha (Hamburg University, GER)
- Mark Carpenter (NASA, USA)

-Miembros del AANSLab: Rasha Al Jahdali, Shyma Alhuwaider, Nadezhda Briantceva, Mohammed Sayyari, Irving Reyna Nolasco, Aimad Er-Ray, Diego Rojas, Radouan Boukharfane, Hua Shen…

1

El comienzo de la historia

El comienzo …


NASA/CR-2014-218178

CFD Vision 2030 Study: A Path to Revolutionary Computational Aerosciences

Jeffrey Slotnick and Abdollah Khodadoust
Boeing Research & Technology, Huntington Beach, California

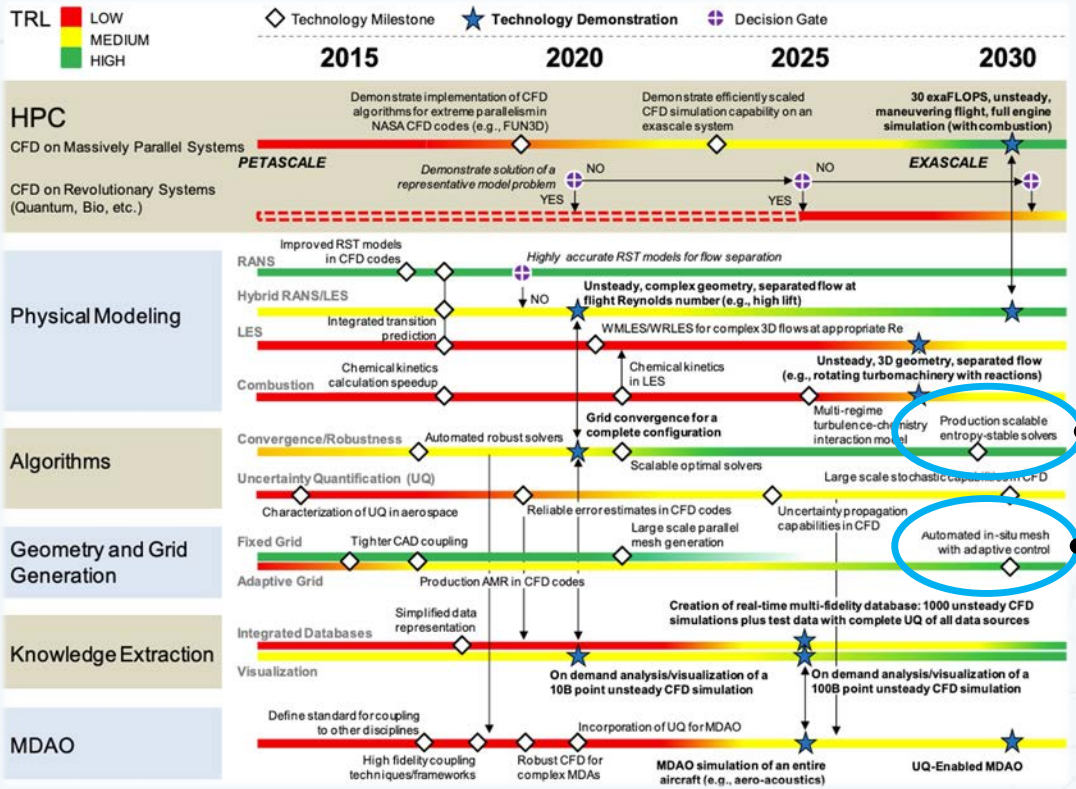
Juan Alonso
Stanford University, Stanford, California

David Darmofal
Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts

William Gropp
National Center for Supercomputing Applications, Urbana, Illinois

Elizabeth Lurie
Pratt & Whitney, United Technologies Corporation, East Hartford, Connecticut

Dimitri Mavriplis
University of Wyoming, Laramie, Wyoming



Último 8/9 años

Solvers con entropía estable para "producción" (~2028)

Adaptación automática de malla (~ 2029)

2

Problemas discutidos aquí

Problemas principales (y su solución) discutidos aquí

- Solver de alto orden, escalable, compressible, con adaptación *hp* y entropía estable (~ 2028).
  - Conservación y estabilidad de entropía en condiciones de contorno “wall”.
  - Automatización de malla con control adaptivo (adaptación *hp*).
  - Esquemas de Runge-Kutta estables y adaptivos con estabilidad de entropía.
  - Solver para cálculo de alto desempeño (HPC) adaptivo con estabilidad de entropía, 2021.

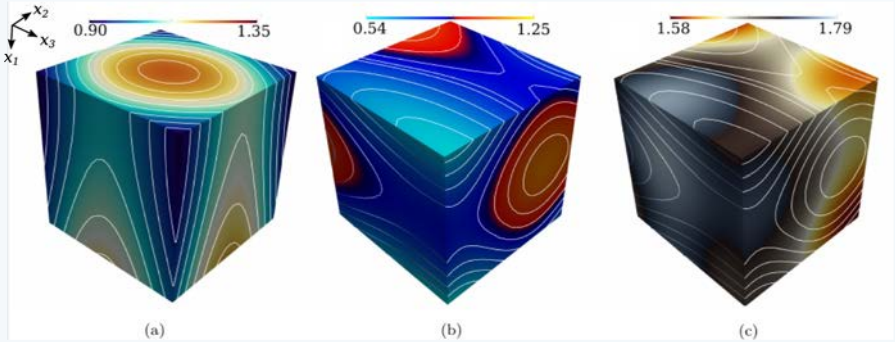
Algunos papers relacionados: enorme trabajo interdisciplinario

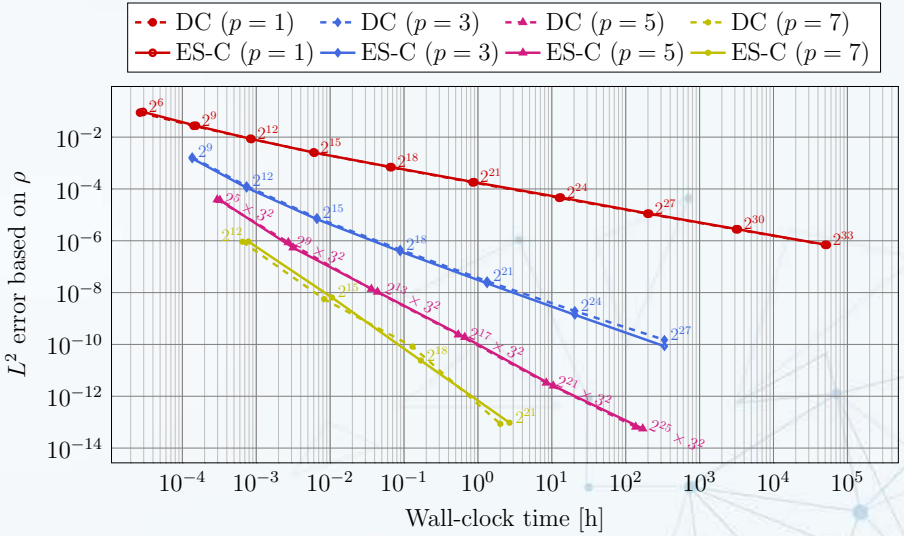
- R. Al Jahdali, L. Dalcin, R. Boukharfane, I. R. Nolasco, D. E. Keyes, and M. Parsani. Optimized explicit Runge–Kutta schemes for high-order collocated discontinuous Galerkin methods for compressible fluid dynamics. *Computers and Mathematics with Applications*, **2022**.
- M. Parsani, R. Boukharfane, I. R. Nolasco, D. C. Del Rey Fernández, S. Zampini, B. Hadri, and L. Dalcin. High-order accurate entropy-stable discontinuous collocated Galerkin methods with the summation-by-parts property for compressible CFD frameworks: Scalable SSDC algorithms and flow solver. *Journal of Computational Physics*, 424, **2021**.
- D. Rojas, R. Boukharfane, L. Dalcin, D. C. Del Rey Fernández, H. Ranocha, D. E. Keyes, and M. Parsani. On the robustness and performance of entropy stable collocated discontinuous Galerkin methods. *Journal of Computational Physics*, 426, **2021**.
- D. C. Del Rey Fernández, M. H. Carpenter, L. Dalcin, S. Zampini, and M. Parsani. Entropy stable *h/p* nonconforming discretizations with the summation-by-parts property for the compressible Euler and Navier–Stokes equations. *Springer-Nature Partial Differential Equations and Applications*, 1, **2020**.
- I. R. Nolasco, L. Dalcin, D. C. Del Rey Fernández, S. Zampini, and M. Parsani. Optimized geometrical metrics satisfying free-stream preservation. *Computer & Fluids*, 207, **2020**.
- D. C. Del Rey Fernández, M. H. Carpenter, L. Fredrich, A. R. Winters, G. J. Gessner, L. Dalcin, and M. Parsani. Entropy stable *p*-nonconforming discretization with the summation-by-parts property for the compressible Navier–Stokes equations. *Computer & Fluids*, 210, **2020**.
- H. Ranocha, L. Dalcin, and M. Parsani. Fully discrete explicit locally entropy-stable schemes for the compressible Euler and Navier–Stokes equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 80(5), 569–587, **2020**.
- H. Ranocha, M. Sayyari, L. Dalcin, M. Parsani, and D. I. Ketcheson. Relaxation Runge–Kutta methods: fully-discrete explicit entropy-stable schemes for the compressible Euler and Navier–Stokes equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 42 (2), A612-A638, **2020**.
- L. Dalcin, D. Rojas, S. Zampini, D. C. Del Rey Fernández, M. H. Carpenter, and M. Parsani. Conservative and entropy stable solid wall boundary conditions for the compressible Navier–Stokes equations: Adiabatic wall and heat entropy transfer. *Journal of Computational Physics*, 397(1), **2019**.
- L. Friedrich, A. R. Winters, D. C. Del Rey Fernández, G. J. Gassner, M. Parsani, and M. H. Carpenter. An entropy stable *h/p* non-conforming discontinuous Galerkin method with the summation-by-parts property. *Journal of Scientific Computing*, 77(2), **2018**.

Por qué esquemas de alto orden?

Flujo supersónico con el método de soluciones fabricadas:

$$
\begin{cases}
\rho &= \rho^0 + \rho^{x_1}\sin\left(\frac{\alpha_\rho^{x_1}\pi x_1}{L}\right) + \rho^{x_2}\cos\left(\frac{\alpha_\rho^{x_2}\pi x_2}{L}\right) + \rho^{x_3}\sin\left(\frac{\alpha_\rho^{x_3}\pi x_3}{L}\right),\\
\mathcal{U}_1 &= \mathcal{U}_1^0 + \mathcal{U}_1^{x_1}\sin\left(\frac{\alpha_1^{x_1}\pi x_1}{L}\right) + \mathcal{U}_1^{x_2}\cos\left(\frac{\alpha_1^{x_2}\pi x_2}{L}\right) + \mathcal{U}_3^{x_3}\cos\left(\frac{\alpha_1^{x_3}\pi x_3}{L}\right),\\
\mathcal{U}_2 &= \mathcal{U}_2^0 + \mathcal{U}_2^{x_1}\cos\left(\frac{\alpha_2^{x_1}\pi x_1}{L}\right) + \mathcal{U}_2^{x_2}\sin\left(\frac{\alpha_2^{x_2}\pi x_2}{L}\right) + \mathcal{U}_2^{x_3}\sin\left(\frac{\alpha_2^{x_3}\pi x_3}{L}\right),\\
\mathcal{U}_3 &= \mathcal{U}_3^0 + \mathcal{U}_3^{x_1}\sin\left(\frac{\alpha_3^{x_1}\pi x_1}{L}\right) + \mathcal{U}_3^{x_2}\sin\left(\frac{\alpha_3^{x_2}\pi x_2}{L}\right) + \mathcal{U}_3^{x_3}\cos\left(\frac{\alpha_3^{x_3}\pi x_3}{L}\right),\\
\mathcal{P} &= \mathcal{P}^0 + \mathcal{P}^{x_1}\sin\left(\frac{\alpha_\mathcal{P}^{x_1}\pi x_1}{L}\right) + \mathcal{P}^{x_2}\sin\left(\frac{\alpha_\mathcal{P}^{x_2}\pi x_2}{L}\right) + \mathcal{P}^{x_3}\cos\left(\frac{\alpha_p^{x_3}\pi x_3}{L}\right).
\end{cases}
$$

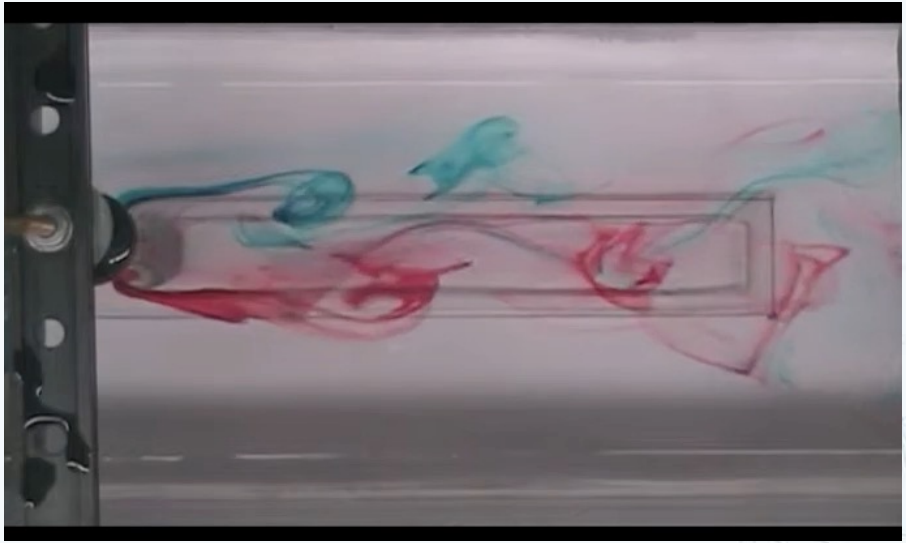




Por qué esquemas de alto orden?

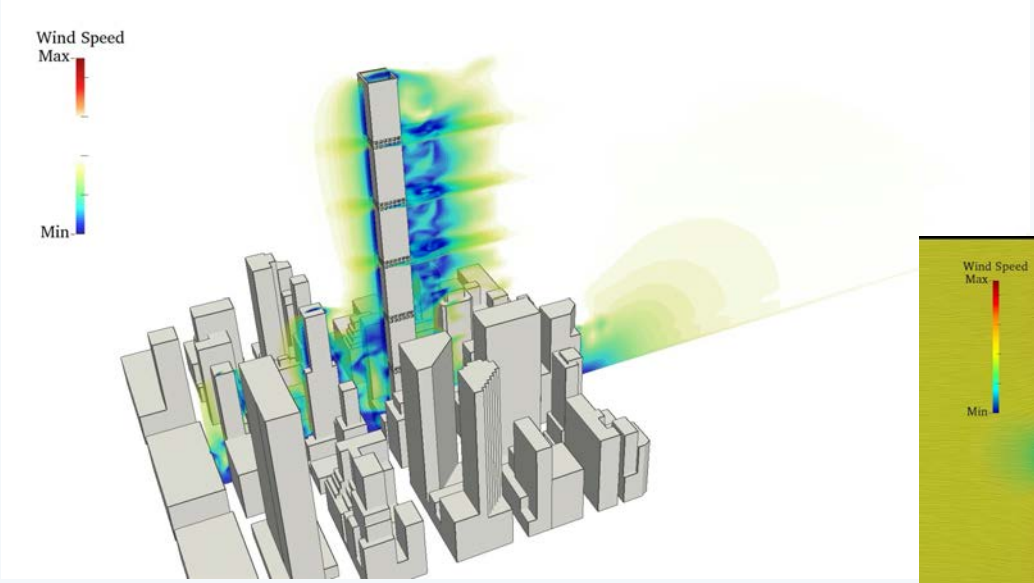
Flujo alrededor de un cilindro circular: controlar el desprendimiento de vórtices es clave en diversas aplicaciones en ingeniería:

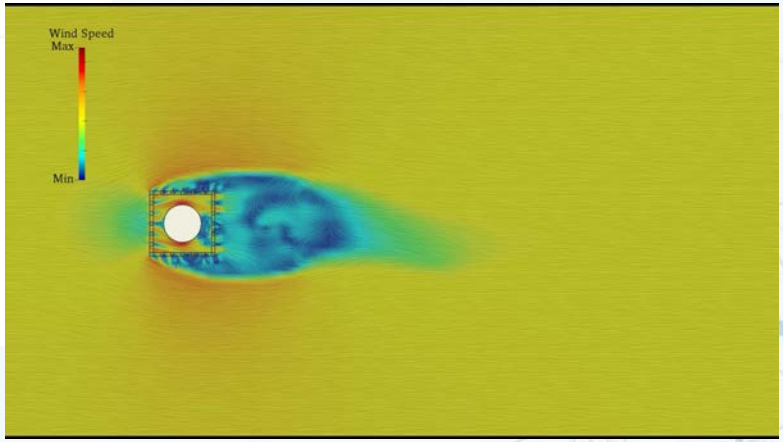
- Reducción de vibraciones y ruido
- Reducción del arrastre
- Suprimir o retrasar la separación de vórtices



Por qué esquemas de alto orden?

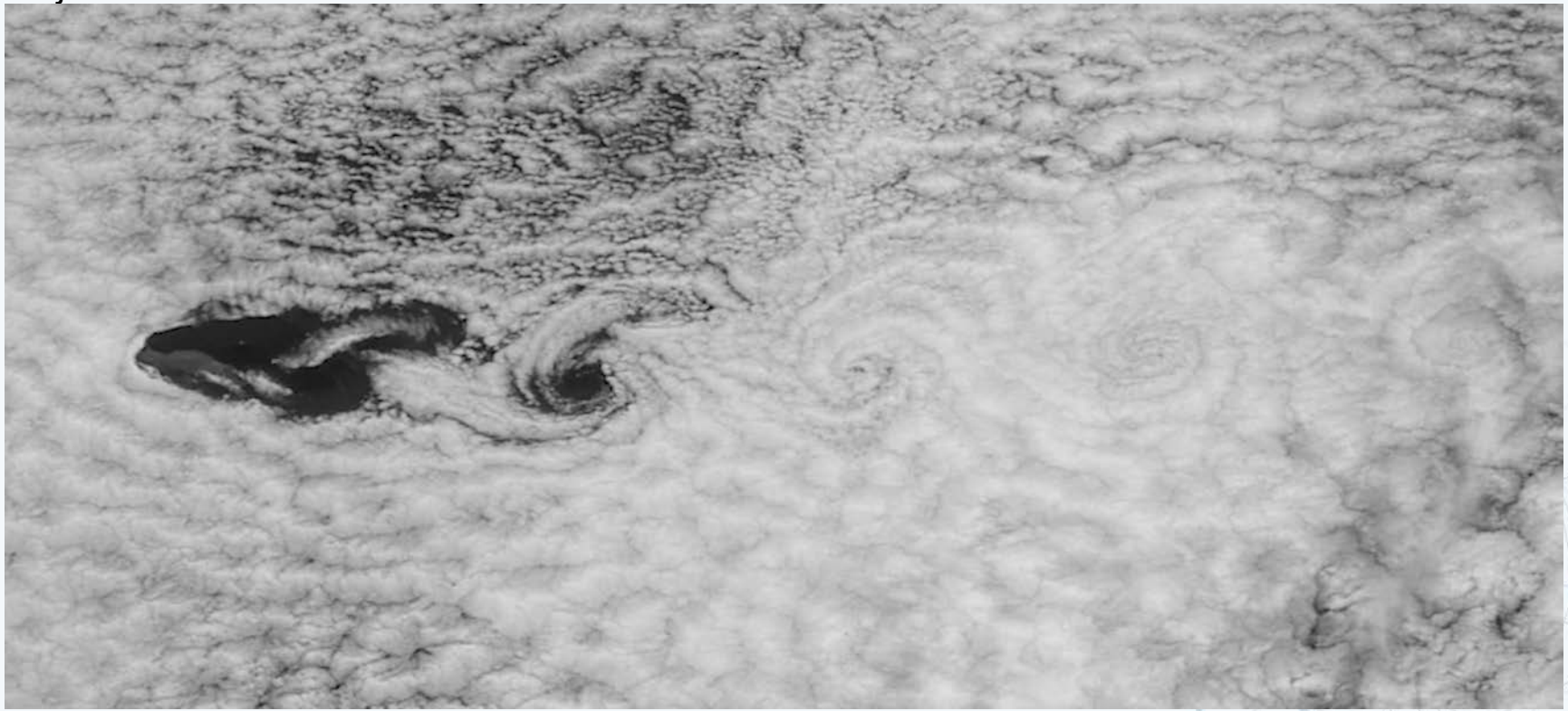
Edificaciones en altura, efectos sobre dispersión de contaminantes, confort





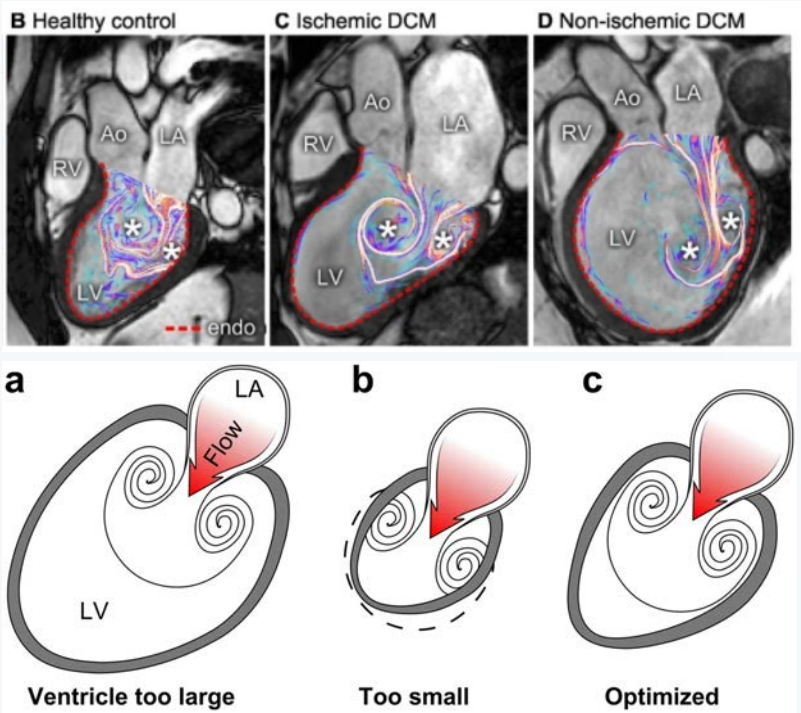
Por qué esquemas de alto orden?

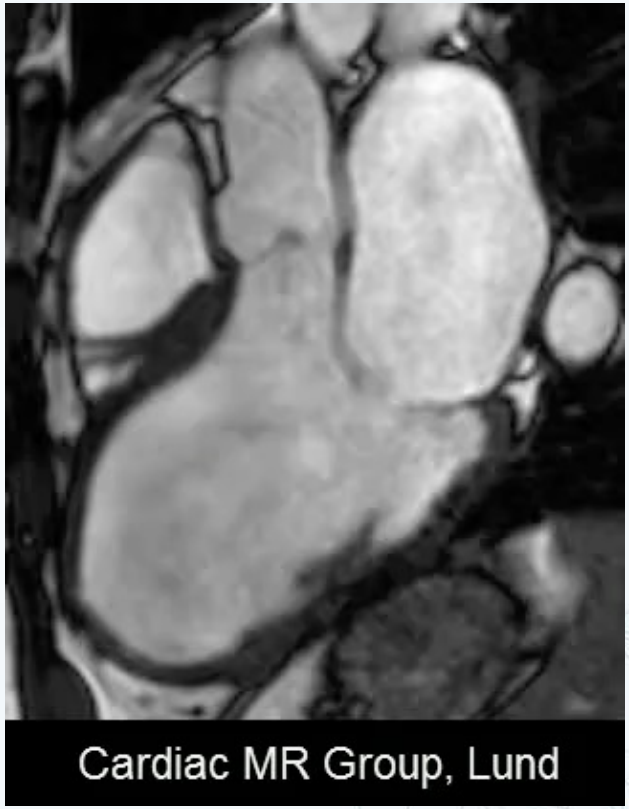
Flujo de viento alrededor de islas



Por qué esquemas de alto orden?

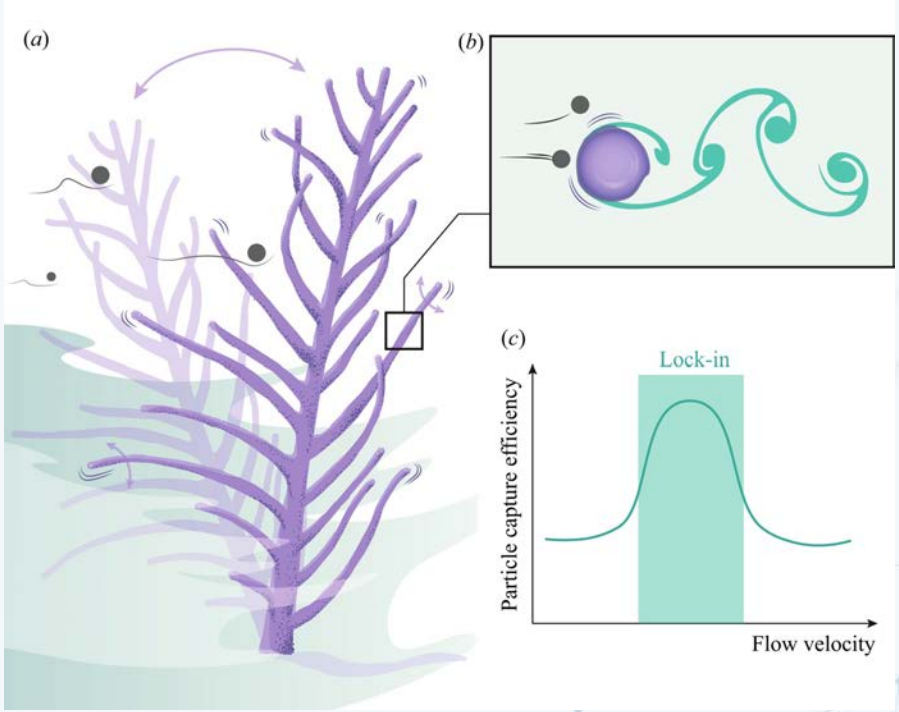
Vórtices en el corazón (heart ring vortices)



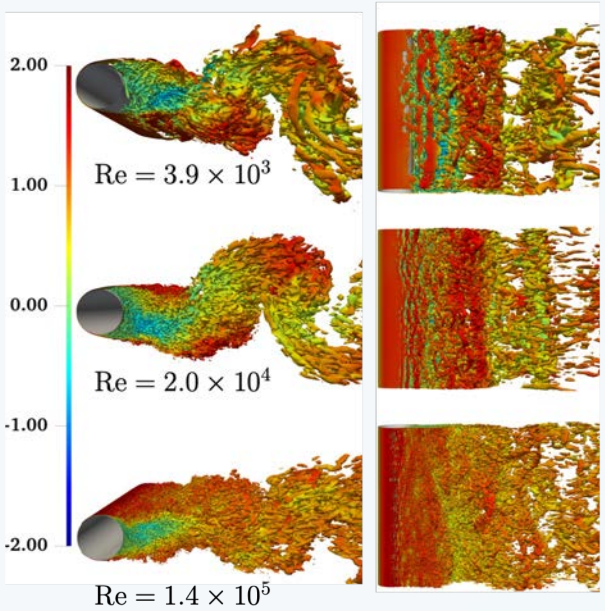


Por qué esquemas de alto orden?

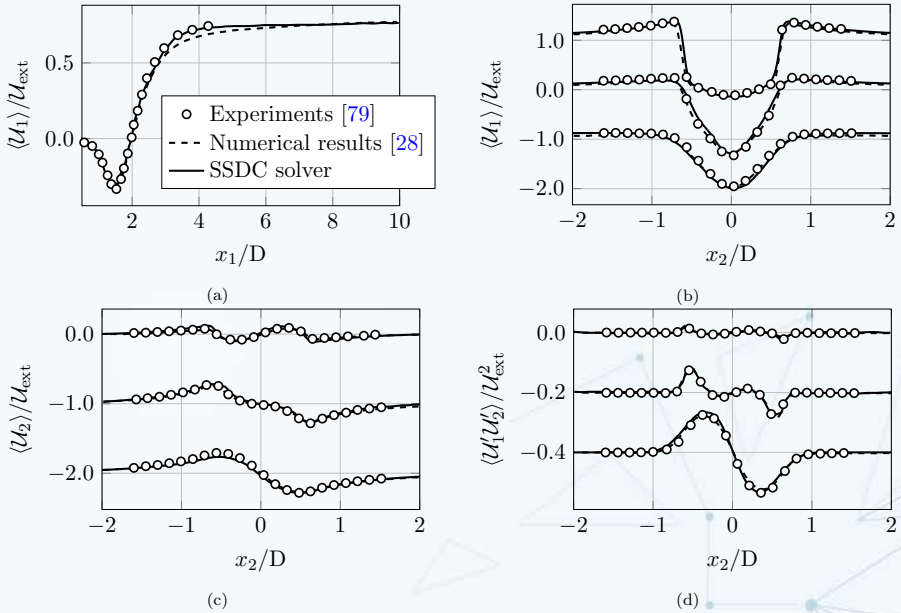
Corales blandos



Por qué esquemas de alto orden?

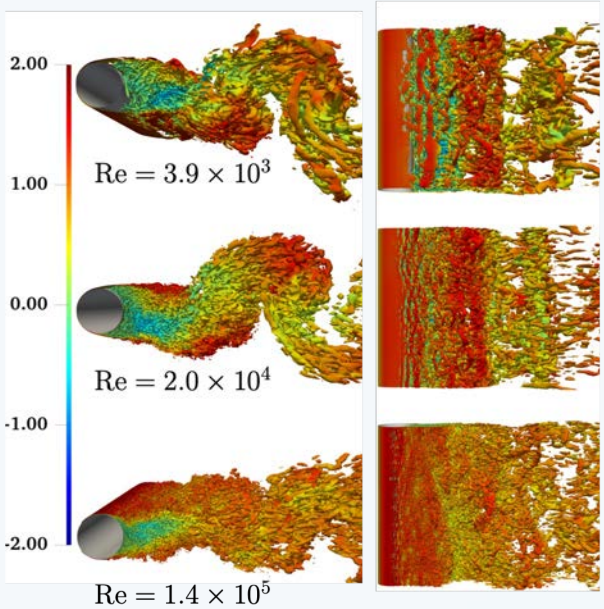


Resultados para *Re* = 3.9 x 10^3

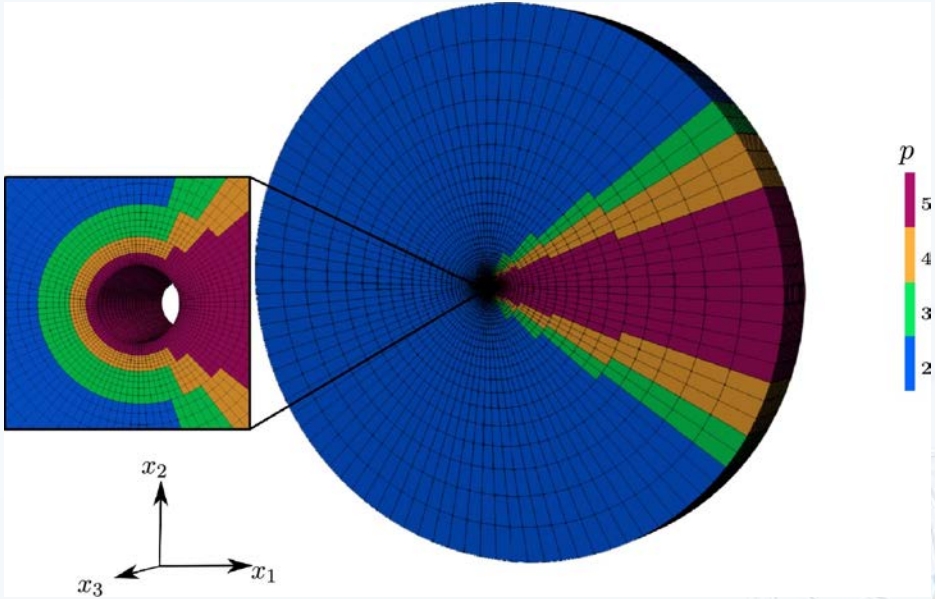


- Una única configuración (basada en *Re* = 3.9 x 10^3).
- Speedup y costo *vs.* 2nd order solvers: 7% (~10k), 22% (~25k), y 38% (~34k) (wall-clock time/USD).

Por qué esquemas de alto orden?

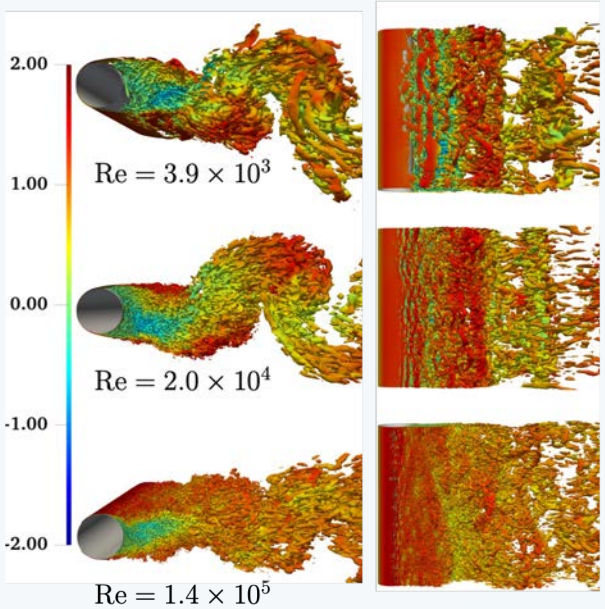


Distribución del grado de los polinomios.
No. total de elementos ~ 8.9 x 10^4 – No. total de DOFs ~ 1.4 x 10^7

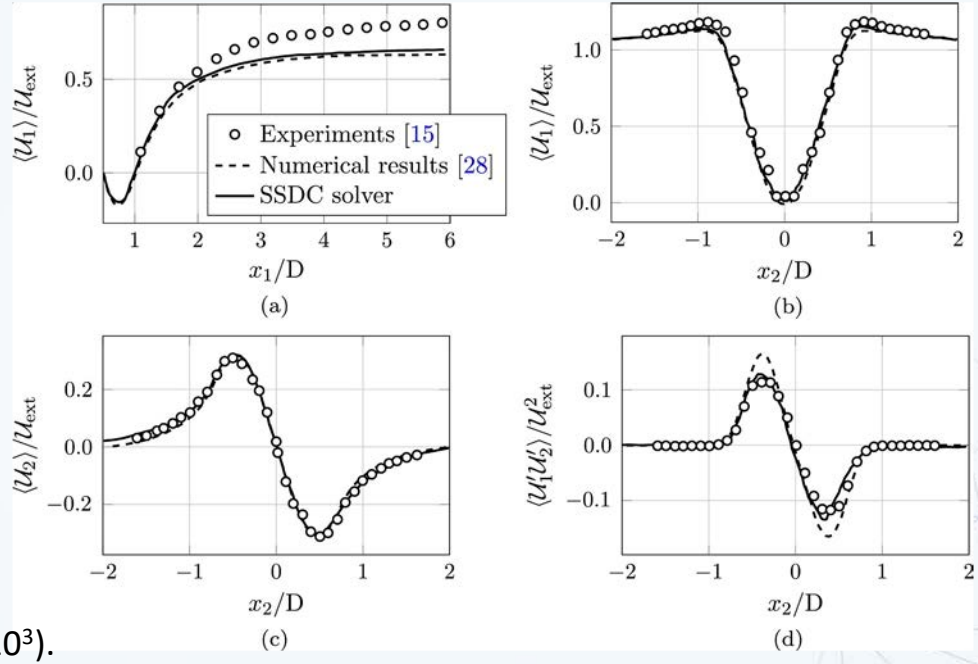


- Una única configuración (basada en *Re* = 3.9 x 10^3).
- Speedup y costo *vs.* 2nd order solvers: 7% (~10k), 22% (~25k), y 38% (~34k) (wall-clock time/USD).

Por qué esquemas de alto orden?



Resultados para *Re* = 1.4 x 10^5



- Una única configuración (basada en *Re* = 3.9 x 10^3).
- Speedup y costo *vs.* 2nd order solvers: 7% (~10k), 22% (~25k), y 38% (~34k) (wall-clock time/USD).

Por qué la estabilidad de entropía?

Ecuaciones de Euler y Navier-Stokes compresibles
(uno los problemas del milenio del Clay Mathematics Institute)

Dado un funcional C^3 de entropía, $S(Q) = -\rho s$, y condiciones iniciales lo suficientemente suaves, $Q(x,0)$, para que las variables conservativas a tiempo t_f, $Q(x,t_f)$, sean acotadas, es suficiente con que el funcional de entropía esté acotado. Esta relación se refleja mediante la expresión:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{Q}(x,t_f)^\top \boldsymbol{Q}(x,t_f)\,\mathrm{d}x \leq \frac{\boxed{\mathcal{C}}}{\left[\boxed{\frac{\partial^2 S}{\partial \boldsymbol{Q}^2}(t_f)}\right]_{\min}} + \int_{\boxed{\Omega}} \boldsymbol{Q}(x,0)^\top \boldsymbol{Q}(x,0)\,\mathrm{d}x$$

Dafermos 2010; Svärd 2013.

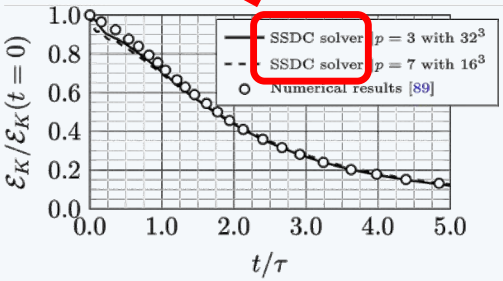
Constante (acotada)

Hessiano a tiempo final t_f

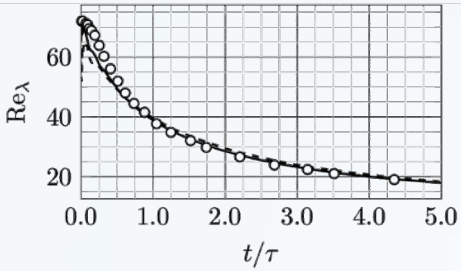
Dominio donde se resuelve la PDE

Por qué la estabilidad de entropía?

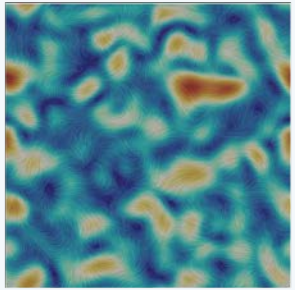
SSDC solver desarrolado en KAUST



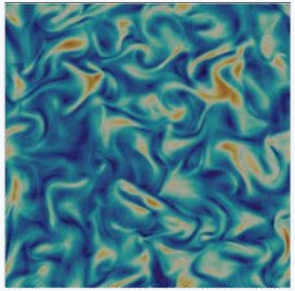
(a) Turbulent kinetic energy.



(b) Reynolds number based on Taylor microscale.



(a) $t/\tau = 0$.



(b) $t/\tau = 2$.

Precisión

	Degree	1	2	3	4
ES-C	4^3	✓	✓	✓	✓
	8^3	✓	✓	✓	✓
	16^3	✓	✓	✓	✓
	32^3	✓	✓	✓	✓
	64^3	✓	✓	✓	✓
SF-KG	4^3	×	✓	✓	✓
	8^3	×	✓	✓	✓
	16^3	×	✓	✓	✓
	32^3	×	✓	✓	✓
	64^3	✓	✓	✓	✓
DC	4^3	×	×	×	×
	8^3	×	×	×	×
	16^3	×	×	×	✓
	32^3	×	×	✓	✓
	64^3	✓	✓	✓	✓

SSDC

Galerkin Discontínuo (DG) colocado, Split Form (Kennedy - Gruber).

Galerkin Discontínuo (DG) colocado – probablemente la mayoría de los solvers DG.

Tamaño de la malla

3

El método de energía/entropía y el esquema de sumatoria por partes

El esquema de sumatoria por partes (SBP)

- Es un método sistemático para diseñar nuevos esquemas con propiedades **demostrables** (estable, conservativo, preciso, etc.).
- **Simple**: Requiere conocimientos básicos de algebra lineal/cálculo para realizar las pruebas.
- **Discretización agnóstica** (diferencias finitas, volúmenes finitos, elementos finitos contínuos y discontínuos, reconstrucción de flujo, etc.).
- Permite la construcción de **operadores miméticos** (consistencia matemática/física).

El esquema de sumatoria por partes (SBP)

Conceptos importantes:

1. Probar estabilidad al nivel contínuo (la norma de la solución debe estar acotada por los datos del problema).
2. Usar el esquema SBP para “imitar” término a término el análisis del punto 1!

Ingredientes clave:

1. El método de energía/entropía.
2. Operadores SBP/SAT.

El método de energía/entropía

- Simple metodología para construir estimaciones.
- Puede utilizarse tanto a nivel contínuo como a nivel discreto.

Ejemplo: ecuación de advección

$$\frac{\partial U}{\partial t} + a\frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad t \geq 0, \quad x \in [x_L, x_R], \quad a > 0,$$
$$U(x_L, t) = G, \quad t \geq 0,$$
$$U(x, 0) = I, \quad t = 0, \quad x \in [x_L, x_R].$$

El método de energía/entropía

1. Multiplicar la PDE por la solución, $\mathrm{U(x,t)}$, e integrar en el espacio:

$$\int_{x_L}^{x_R} U \frac{\partial U}{\partial t} \mathrm{d}x + a \int_{x_L}^{x_R} U \frac{\partial U}{\partial x} \mathrm{d}x = 0.$$

2. Usar la regla de **integral por partes** para el término espacial:

$$\int_{x_L}^{x_R} U \frac{\partial U}{\partial t} \mathrm{d}x + \frac{a}{2} U^2 \Big|_{x_L}^{x_R} = 0.$$

3. Luego, **regla de la cadena**, seguida por la **regla de Leibniz** para el término temporal:

$$\frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}||U||^2}{\mathrm{d}t} + \frac{a}{2} U^2 \Big|_{x_L}^{x_R} = 0, \quad ||U||^2 \equiv \int_{x_L}^{x_R} U^2 \mathrm{d}x.$$

El método de energía/entropía

4. Integrando en el tiempo y aplicando las condiciones de borde e iniciales:

$$||U||^2 = ||I||^2 - a\int_0^T U^2(x_R,t)\mathrm{d}t + a\int_0^T G^2\mathrm{d}t$$

$$\boxed{||U||^2 \leq} ||I||^2 + a\int_0^T G^2\mathrm{d}t = \boxed{\text{DATA.}}$$

Por lo tanto, **estable**.

Pregunta: Podemos replicar este análisis a nivel semi-discreto?

Operadores SBP

Los operadores SBP aparecieron en el contexto de los métodos de diferencias finitas. Aquí, usamos el método de Galerkin Discontínuo (DG) colocado con la propiedad SBP.

Contruimos el operador SBP de la siguiente manera:

1. $\mathsf{D}_x \boldsymbol{x}^k = k\boldsymbol{x}^{k-1}, \quad k = 0, 1, .., p$
2. $\mathsf{D}_x \equiv \mathsf{P}_x^{-1}\mathsf{Q}_x$
3. $\mathsf{Q}_x \equiv \mathsf{S}_x + \frac{1}{2}\mathsf{E}_x$
4. $\mathsf{E}_x \equiv diag(-1, 0, \ldots, 0, 1)$

$$\int_{x_L}^{x_R} V\frac{\partial U}{\partial x}\mathrm{d}x + \int_{x_L}^{x_R} U\frac{\partial V}{\partial x}\mathrm{d}x = VU|_{x_L}^{x_R}.$$

$$\boldsymbol{v}^T\mathsf{P}_x\mathsf{D}_x\boldsymbol{u} + \boldsymbol{u}^T\mathsf{P}_x\mathsf{D}_x\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\mathsf{E}_x\boldsymbol{u}$$

Mimético!

Operadores SBP

Forma Semi-discreta

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} + a\boxed{\mathrm{D}_x}\boldsymbol{u} + \boxed{\boldsymbol{bc}} = 0$$

Operador SBP

Término de condiciones de borde

PDE (a nivel contínuo)

$$\frac{\partial U}{\partial t} + a\frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad t \geq 0, \quad x \in [x_L, x_R], \quad a > 0,$$

$$U(x_L, t) = G, \quad t \geq 0,$$

$$U(x, 0) = I, \quad t = 0, \quad x \in [x_L, x_R].$$

Operador SBP + método de energía

Aplicando el método de energía a la ecuación de advección:

$$||\boldsymbol{u}(T)||^2_{\mathsf{P}_x} = ||\boldsymbol{I}||^2_{\mathsf{P}_x} - \int_0^T \left(a\boldsymbol{u}^T \mathsf{E}_x \boldsymbol{u} + \boxed{2\boldsymbol{u}^T \mathsf{P}\boldsymbol{bc}}\right) \mathrm{d}t$$

Término con las condiciones de borde

Si el término "***bc***" se construye apropiadamente,

$$||\boldsymbol{u}(T)||^2_{\mathsf{P}_x} \leq ||\boldsymbol{I}||^2_{\mathsf{P}_x} + \int_0^T G^2 \mathrm{d}t = \mathrm{DATA}$$

Nivel semi-discreto

$$||U||^2 \leq ||I||^2 + a\int_0^T G^2 \mathrm{d}t = \mathrm{DATA}$$

Nivel Contínuo