4

Algoritmos de entropía estable y el esquema SSDC para CFD compresible

Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles

Es un problema bien formulado?
(Clay Mathematics Institute Millenium Prizes)

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \sum_{m=1}^{3} \frac{\partial \boldsymbol{F}_{x_m}^{(I)}}{\partial x_m} = \sum_{m=1}^{3} \frac{\partial \boldsymbol{F}_{x_m}^{(V)}}{\partial x_m}, \qquad \forall\,(x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \quad t \geq 0,$$

$$\boldsymbol{Q}\,(x_1, x_2, x_3, t) = \boldsymbol{G}^{(B)}\,(x_1, x_2, x_3, t)\,, \quad \forall\,(x_1, x_2, x_3) \in \Gamma, \quad t \geq 0,$$

$$\boldsymbol{Q}\,(x_1, x_2, x_3, 0) = \boldsymbol{G}^{(0)}\,(x_1, x_2, x_3, 0)\,, \quad \forall\,(x_1, x_2, x_3) \in \Omega.$$

Qué se sabe?

- No existe una teoría general para conservación no-lineal que pueda usarse.
- Una estimación de la estabilidad no es suficiente (para cons. no-lineal).
- **Fundamental (no queremos que la solución falle - ”blow up”)!**

Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles

A nivel contínuo, el análisis de entropía (método de energía/entropía) conduce a:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega} S\mathrm{d}\Omega = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\eta \leq \boxed{\sum_{m=1}^{3}\int_{\Gamma}\left(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F}_{x_m}^{(V)} - F_{x_m}\right)n_{x_m}\mathrm{d}\Gamma} - \boxed{DT,} \qquad \text{where} \qquad \boxed{S = -\rho s.}$$

Término de BCs

Disipación

Función de Entropía

Usando los esquemas diseñados de DG colocado con entropía estable (de cualquier orden), obtenemos:

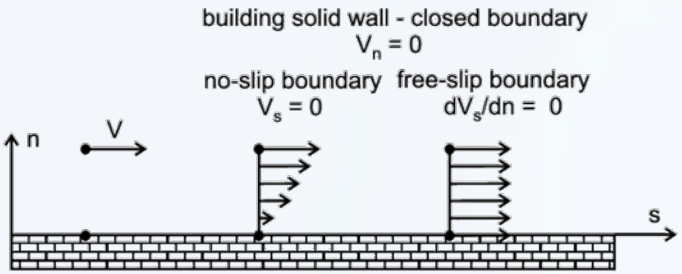
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{1}^{\top}\widehat{\mathsf{P}}\,\boldsymbol{S} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\eta \leq \boxed{\mathbf{BT}} - \boxed{\mathbf{DT}}$$

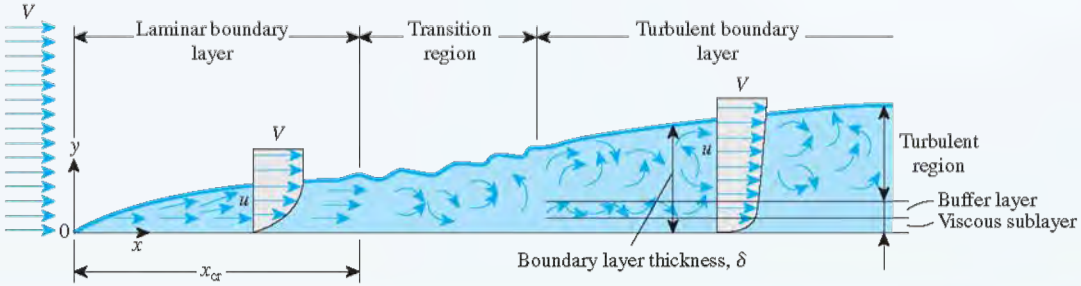
Mimético!

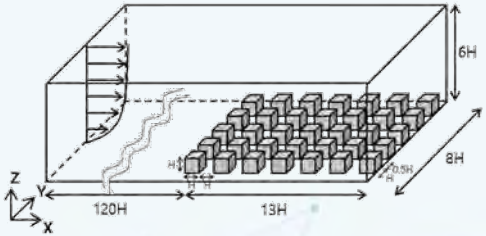
Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles

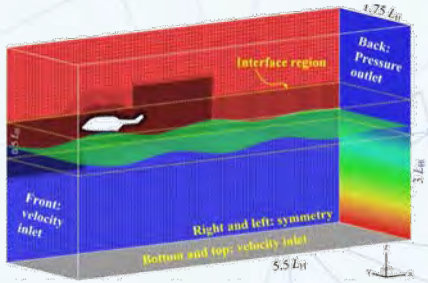
Condiciones de borde de pared (wall)

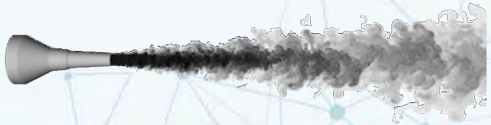
Qué prescribe la condición de borde de pared al campo de velocidad?











Condiciones de borde de pared con entropía estable

Se reformula la semi-discretización utilizando un enfoque DG local y penalización interna (LDG-IP) y utilizando el esquema de términos de aproximación simultánea (simultaneous-approximation-terms, SAT):

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}_l}{\partial t} + \sum_{m=1}^{3} \left(\mathsf{P}_{x_{m,l}}^{-1} \Delta_{x_m,l} \bar{\boldsymbol{f}}_{x_{m,l}}^{(I)} - \sum_{j=1}^{3} \mathsf{D}_{x_{m,l}} \left[\mathsf{C}_{m,j,l} \right] \boldsymbol{\Theta}_{x_j,l} \right) = \sum_{m=1}^{3} \mathsf{P}_{x_{m,l}}^{-1} \boldsymbol{g}_{x_m,l}^{(BC),q},$$

Elemento a la "izquierda"

$$\boldsymbol{\Theta}_{x_m,l} - \mathsf{D}_{x_{m,l}} \boldsymbol{w} = \mathsf{P}_{x_{m,l}}^{-1} \boldsymbol{g}_{x_m,l}^{(BC),\Theta}, \quad m = 1, 2, 3,$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}_r}{\partial t} + \sum_{m=1}^{3} \left(\mathsf{P}_{x_{m,r}}^{-1} \Delta_{x_m,r} \bar{\boldsymbol{f}}_{x_{m,r}}^{(I)} - \sum_{j=1}^{3} \mathsf{D}_{x_{m,r}} \left[\mathsf{C}_{m,j,r} \right] \boldsymbol{\Theta}_{x_j,r} \right) = \sum_{m=1}^{3} \mathsf{P}_{x_{m,r}}^{-1} \boldsymbol{g}_{x_m,r}^{(BC),q},$$

Elemento a la "derecha"

$$\boldsymbol{\Theta}_{x_m,r} - \mathsf{D}_{x_{m,r}} \boldsymbol{w} = \mathsf{P}_{x_{m,r}}^{-1} \boldsymbol{g}_{x_m,r}^{(BC),\Theta}, \quad m = 1, 2, 3.$$

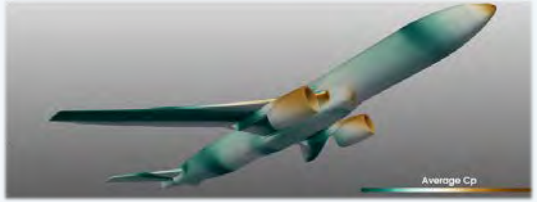
Condiciones de borde de pared con entropía estable

El análisis de entropía para la condición térmica expresa que:

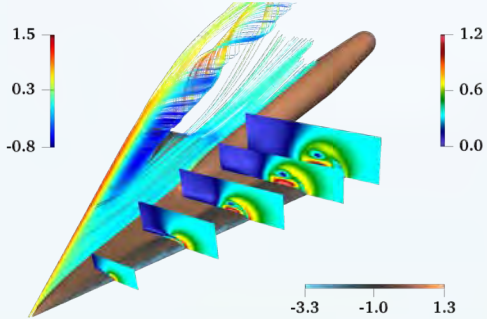
$$g(t) = \kappa \frac{\partial T}{\partial n} \frac{1}{T} \rightarrow \text{Heat entropy flow!}$$

Supersonic wedge (Schardin's experiment)

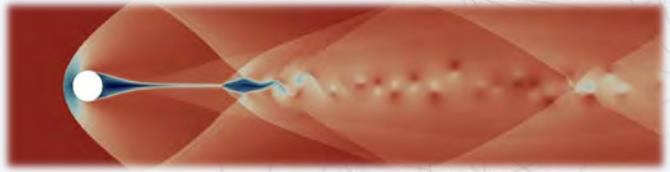
NASA common research model



Delta wing



Supersonic cylinder

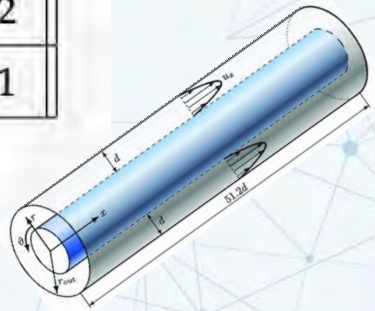


Condiciones de borde de pared con entropía estable

Estudio de convergencia para el flujo en una cañería con sección transversal anular (orden de precisión = *p + 1*):

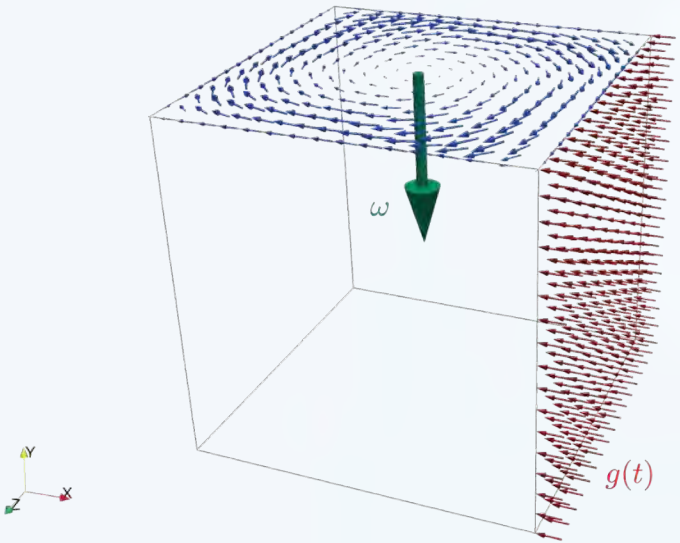
Grid	L^1	Rate	L^2	Rate	L^∞	Rate
4	4.54e-03	-	9.55e-03	-	4.70e-02	-
8	4.48e-04	-3.34	9.58e-04	-3.32	6.31e-03	-2.90
16	1.89e-05	-4.57	5.68e-05	-4.08	5.14e-04	-3.66
32	5.98e-07	-4.98	2.34e-06	-4.60	2.76e-05	-4.22
64	2.22e-08	-4.75	7.65e-08	-4.95	1.13e-06	-4.61

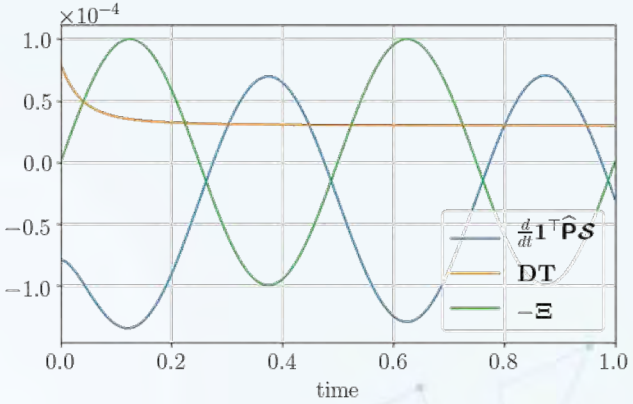
Table $p = 4$; error in the axial velocity.

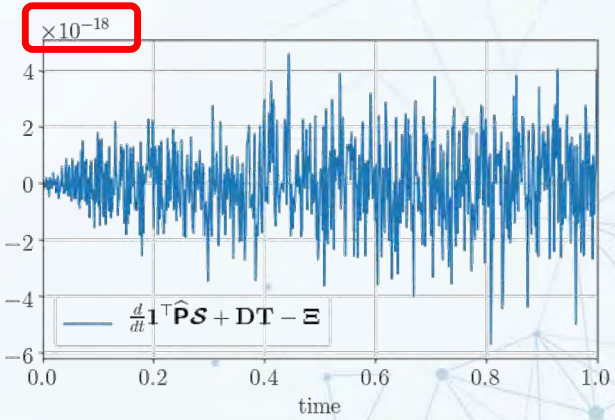


Condiciones de borde de pared con entropía estable

Flujo en cavidad con flujo de calor:





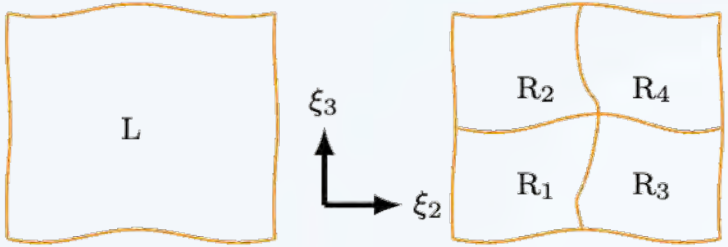


Adaptación *hp*: cuándo la necesitamos?

Left element:

p_{L},

$\mathsf{D}^{\mathrm{L}}_{\xi_l}, \mathsf{Q}^{\mathrm{L}}_{\xi_l}, \mathsf{E}^{\mathrm{L}}_{\xi_l}$

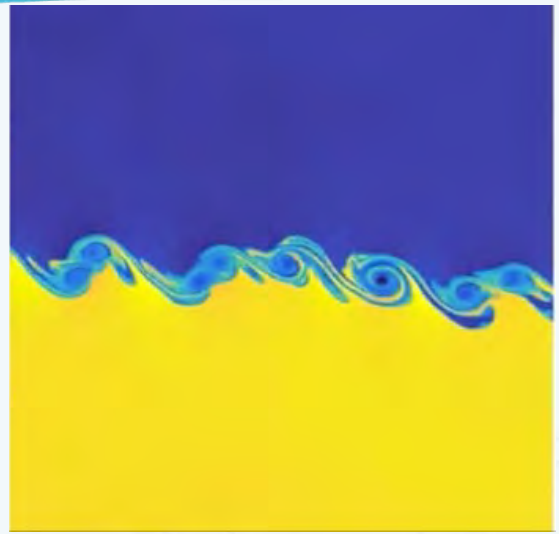


Right elements:

p_{R_f},

$\mathsf{D}^{\mathrm{R}_f}_{\xi_l}, \mathsf{Q}^{\mathrm{R}_f}_{\xi_l}, \mathsf{E}^{\mathrm{R}_f}_{\xi_l}$,

$f = 1, 2, 3, 4$



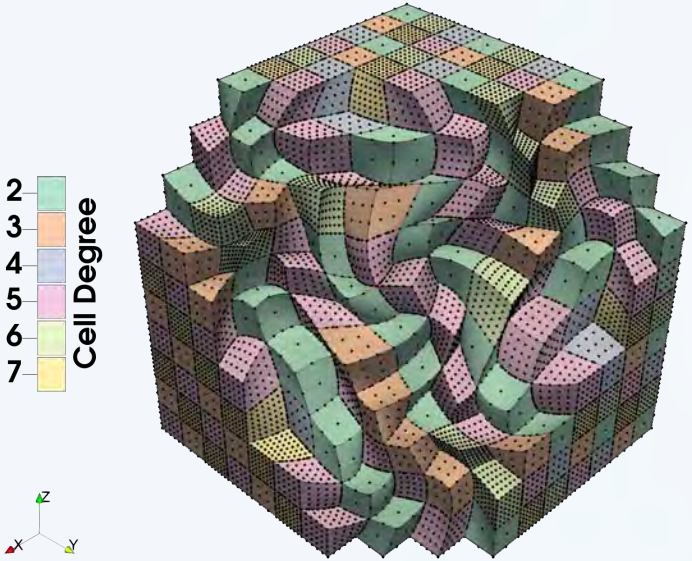
Video realizado por Kevin Schaal (Hidelberg University)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega} S \mathrm{d}\Omega = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\eta \leq \sum_{m=1}^{3}\int_{\Gamma}\left(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{(V)}_{x_m} - F_{x_m}\right) n_{x_m}\mathrm{d}\Gamma - DT, \qquad \text{where} \qquad S = -\rho s.$$

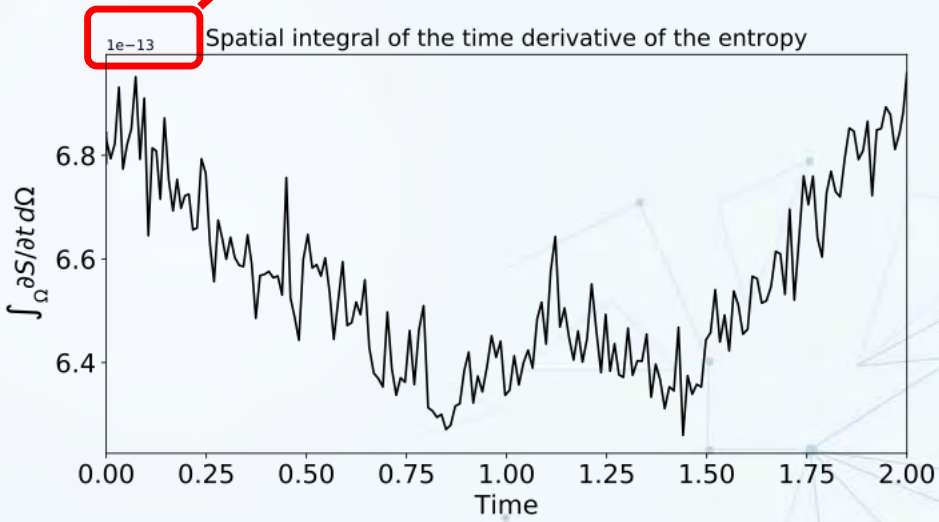
Solución: crear un operador SBP basado en un elemento “macro” y usar las condiciones establecidas por la ley de conservación geométrica para satisfacer la ecuación de arriba (*es decir*, conservación y estabilidad de entropía).

Adaptación *hp*: verificación de la conservación de entropía

Propagación de vórtice isentrópico:



10^{-13} (doble) precisión de máquina



La entropía es conservada tal y como se demuestra teóricamente.

Integración temporal: esquemas Runge-Kutta

Idea: escalar los “pesos” del esquema Runge-Kutta

$$y_i = u^n + \Delta t \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, f(t_n + c_j \Delta t, y_j), \qquad i \in \{1, \ldots, s\},$$

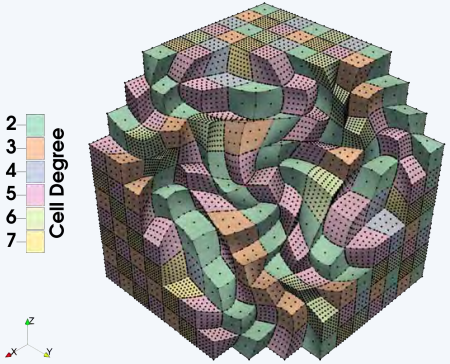
$$u_{\tilde{\gamma}}^{n+1} = u^n + \tilde{\gamma}_n \Delta t \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_n + c_i \Delta t, y_i), \quad f_0 = f(t_n, u^n).$$

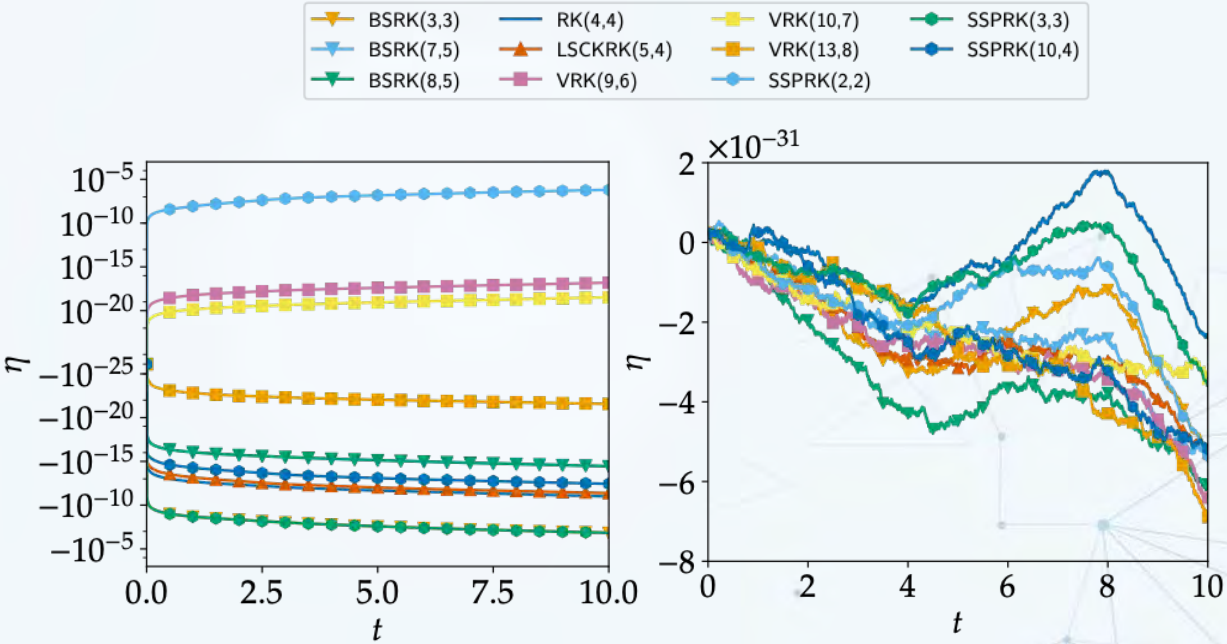
Para el esquema de relajación global:

$$r(\tilde{\gamma}) = \eta\left(u^n + \tilde{\gamma}\Delta t \sum_{i=1}^{s} b_i f_i\right) - \eta(u^n) - \tilde{\gamma}\Delta t \sum_{i=1}^{s} b_i < \eta'(y_i), f_i > .$$

Integración temporal: esquemas Runge-Kutta

Propagación de vórtice isentrópico:

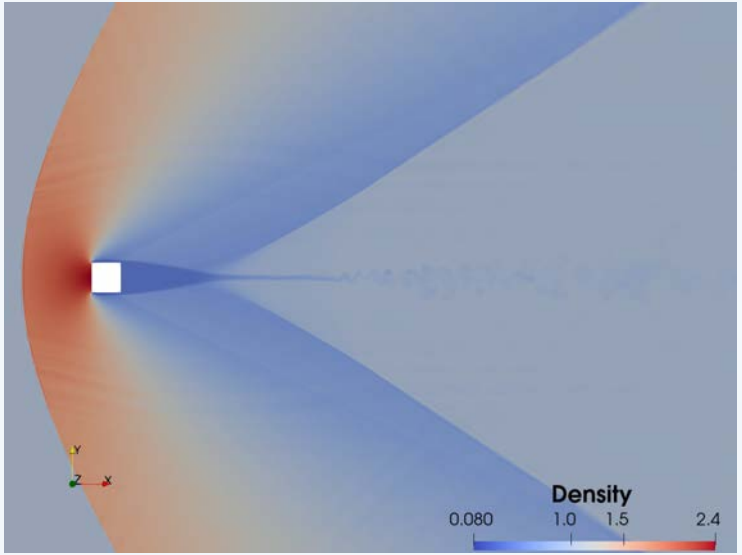




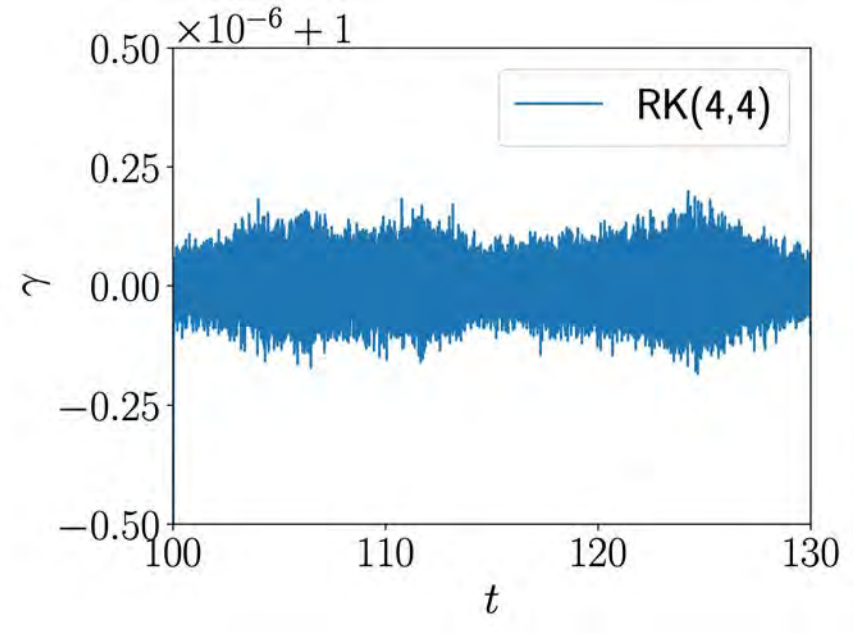
La entropía es conservada tal y como se demuestra teóricamente.

Integración temporal: esquemas Runge-Kutta

Flujo supersónico alrededor de una barra prismática de sección cuadrada:



Evolución en el tiempo del factor de relajación



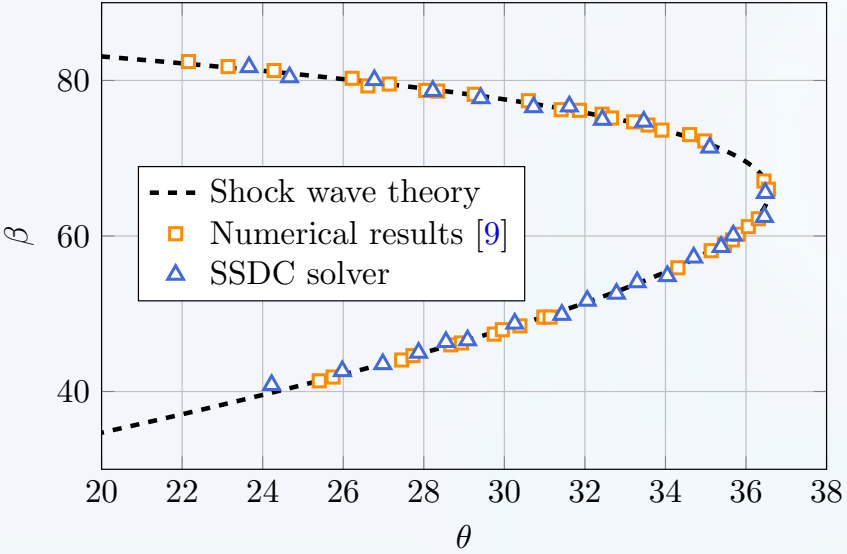
5

Qué nos permite realizar esta tecnología?

Flujo supersónico alrededor de un cilindro dentro de un conducto

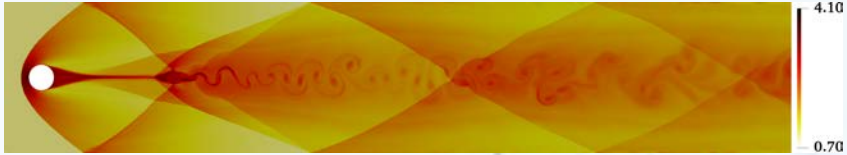
Setup:

- *Re* = 10^4.
- *Ma* = 3.5.
- Esquemas de 2do a 5to orden.
- ~33.95 x 10^3 DOFs .

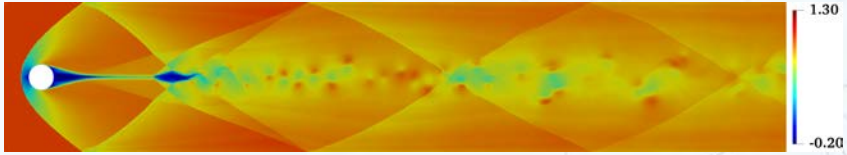


θ (ángulo de deflexión) vs β (ángulo de onda de choque)

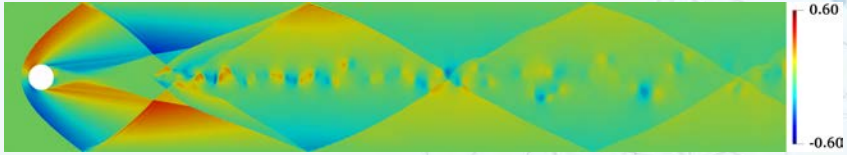
(a) Density, ρ.



(b) Temperature, $\mathcal{T}$.



(c) Velocity component in the x_1 direction, $\mathcal{U}_1$.

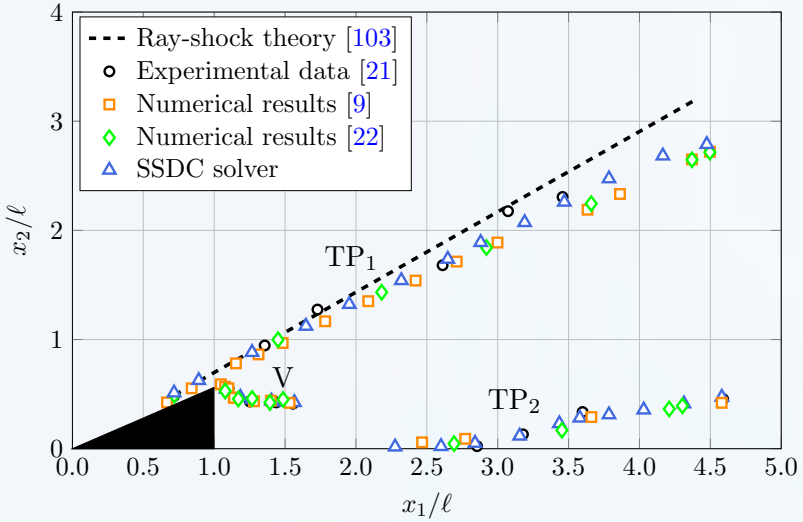


(d) Velocity component in the x_2 direction, $\mathcal{U}_2$.

Experimento de Schardin

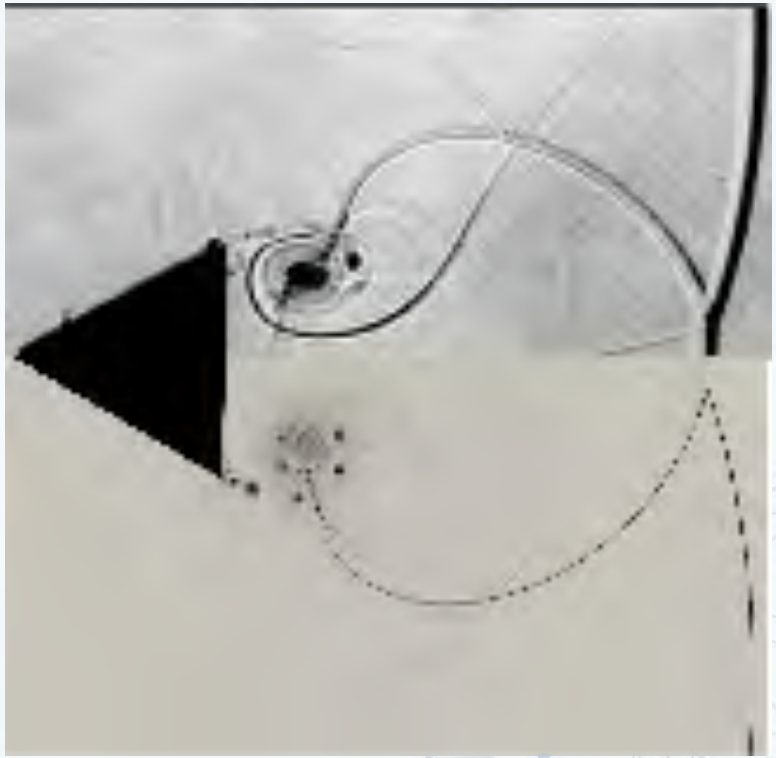
Setup:

- *Re* = 2.15 x $10^{5.}$
- *Ma* = 1.34.
- Esquemas de 2do a 6to orden.
- 1.3 x 10^{6} DOFs .



Ubicación del punto “triple”.

Schlieren



Experiment

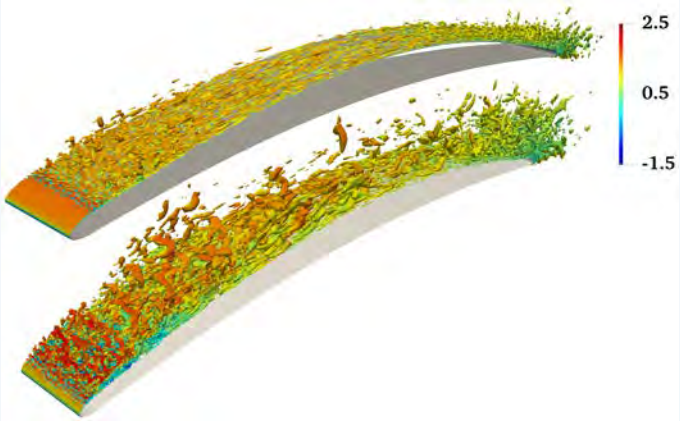
SSDC

Perfil alar Valeo-CD

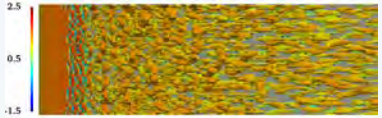
Setup:

- *Re* = 8.30 x $10^{5.}$
- *Ma* = 0.3.
- Esquemas de 3er a 8vo orden.

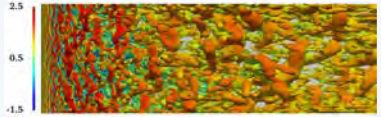
Case	$\mathrm{Ma} = \frac{\mathcal{U}_\infty}{\sqrt{\gamma R T_\infty}}$	$\mathrm{Re} = \frac{\mathcal{U}_\infty c}{\nu}$	AoA	L_{x_3}	N_{cells}	p	#DOFs
AOA4p2	0.3	8.30×10^5	4°	10% c	8.500×10^5	2	2.295×10^7
AOA4p6	0.3	8.30×10^5	4°	10% c	6.864×10^4	6	2.354×10^7
AOA7p3	0.3	8.30×10^5	7°	10% c	8.500×10^5	3	5.440×10^7
AOA7p7	0.3	8.30×10^5	7°	10% c	1.086×10^4	7	5.558×10^7



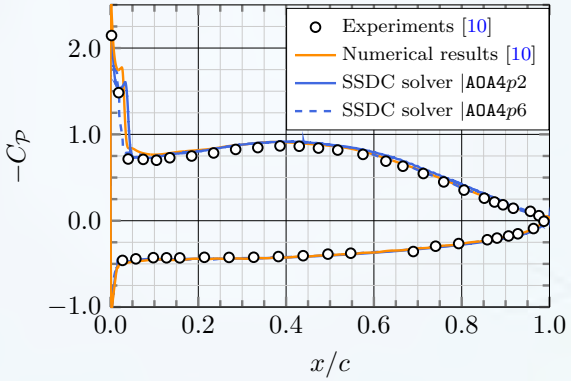
(a) Global view for the case AOA4p6 (top) and AOA7p7 (bottom).



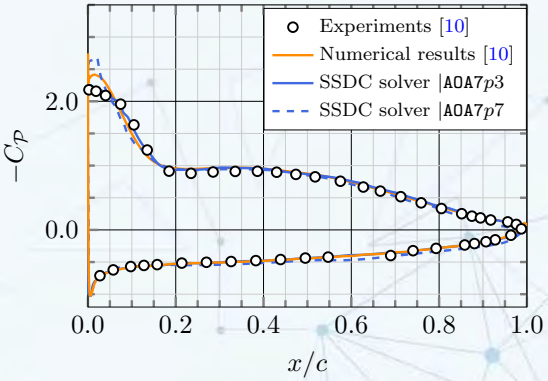
(b) Top view for the case AOA4p6.



(c) Top view for the case AOA7p7.



(a) AoA = 4°.

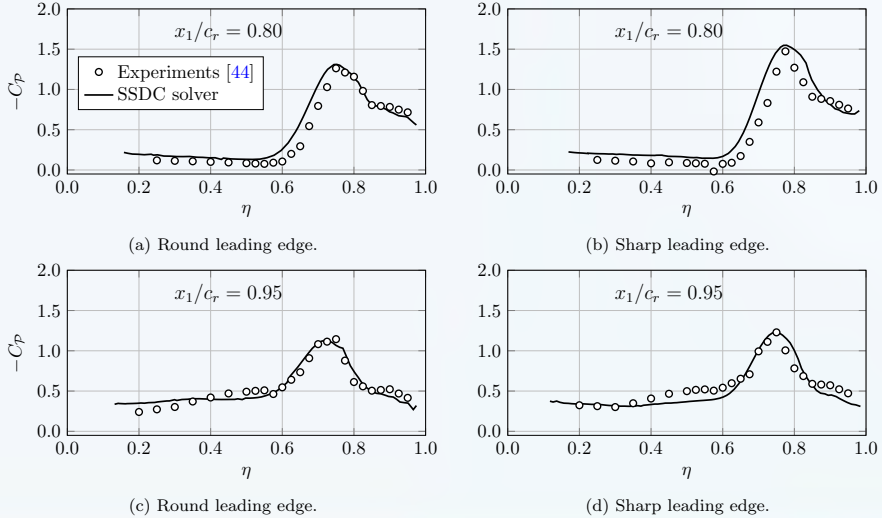


(b) AoA = 7°.

Ala Delta

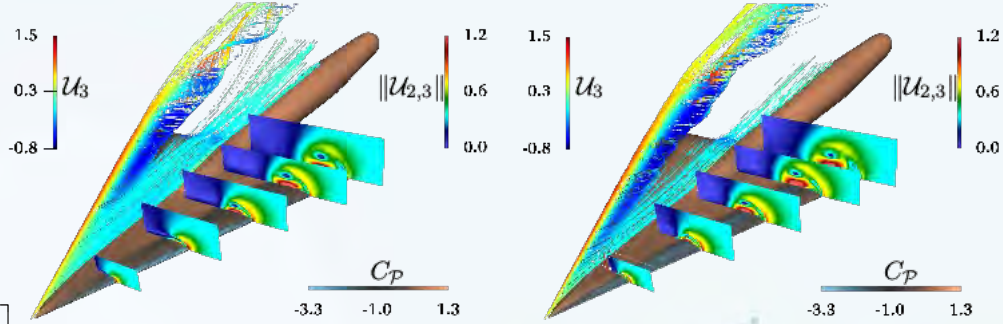
Setup:

- *Re* = 10^6.
- *Ma* = 0.07.
- AoA = 13º.
- 100 x 10^6 DOFs.

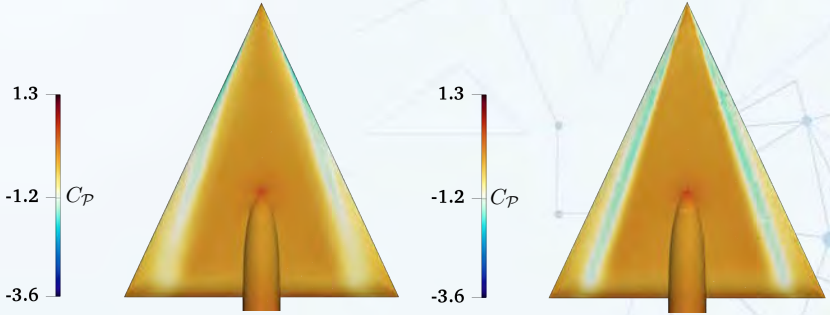


(a) Round leading edge. (b) Sharp leading edge.

(c) Round leading edge. (d) Sharp leading edge.



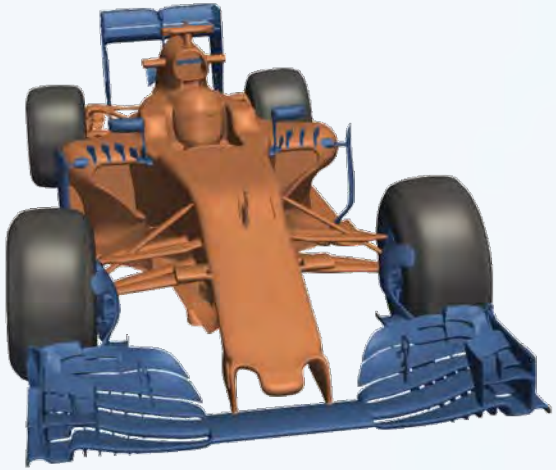
(a) Round leading edge. (b) Sharp leading edge.

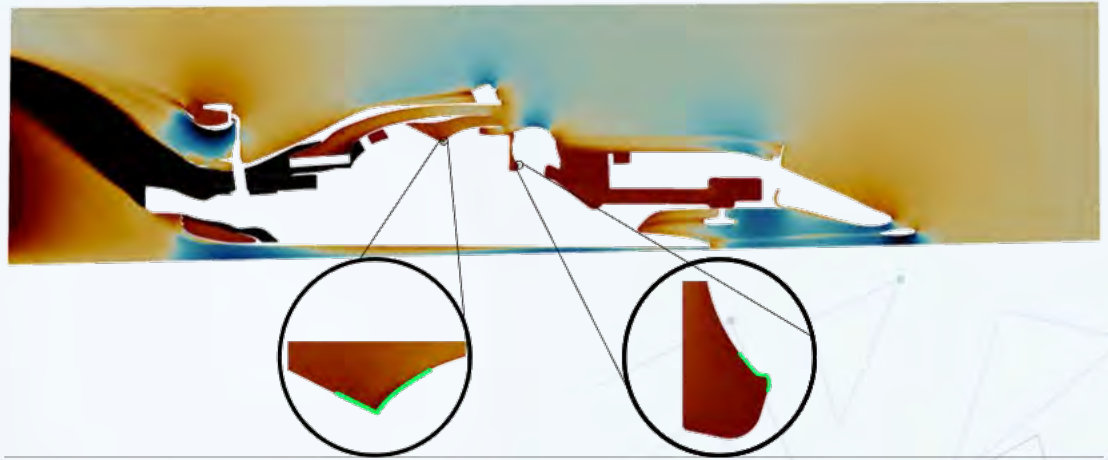


(a) Round leading edge. (b) Sharp leading edge.

Distribución del coeficiente de presión.

Automóvil de F1





Solvers comerciales de amplio uso han fallado (*NaN*)

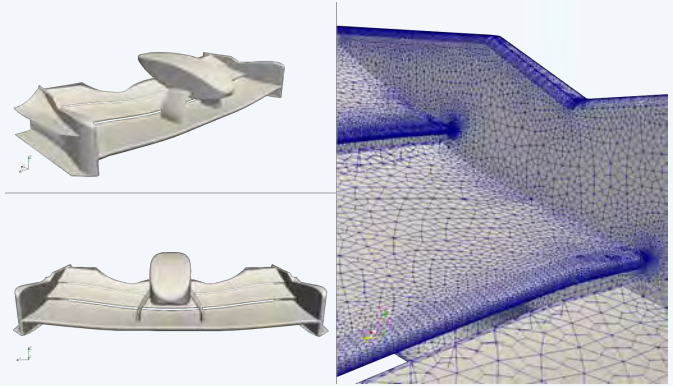
Automóvil completo de F1 (McLaren): nunca fue simulado con un solver Navier–Stokes compresible de alto orden, adaptivo y con conservación de entropía.

Alerón frontal F1

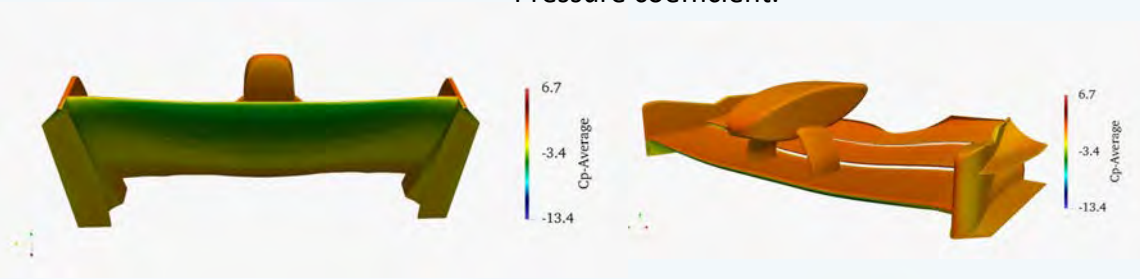
Automóvil McLaren F1 - Imperial front wing:

- ~250 x 10^6 DOFs.
- KAUST SSDC solver.
- 64,000 CPU cores Shaheen XC40.

Geometría y zoom cerca de la malla de superficie:

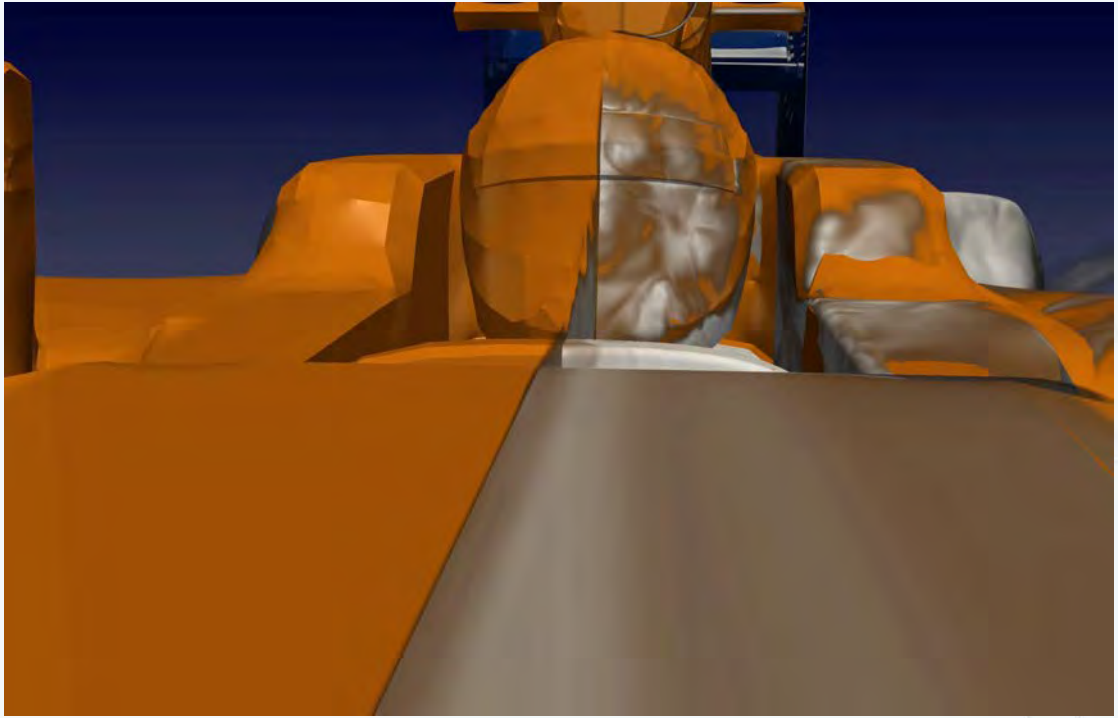


Pressure coefficient.



Automóvil F1 completo

0.8×10^{12} DOFs

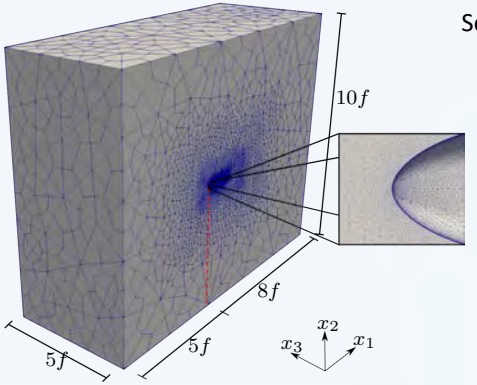


Experimento “juncture flow” de la NASA

Simulación del flujo alrededor del avión complete con un solver de alto orden con adaptación *hp*:

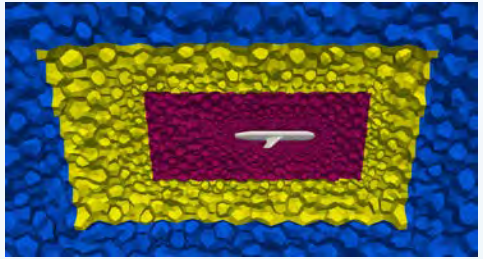
- No de Reynolds: $Re = 2.4 \times 10^6$.
- No de Mach: $Ma = 0.189$.
- Ángulo de ataque: $AoA = -2.5^o$.

Modelo en túnel de viento



(a)

Setup computacional con SSDC



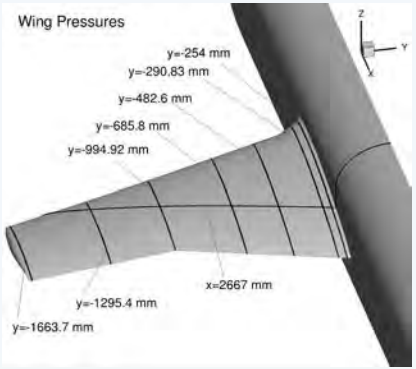
(b)

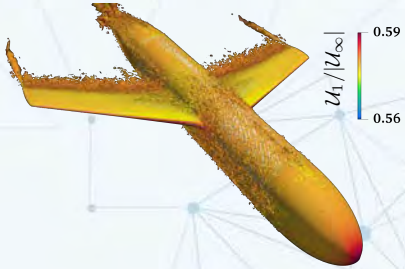
Experimento “juncture flow” de la NASA

Simulación del flujo alrededor del avión complete con un solver de alto orden con adaptación *hp*:

- ~600 x 10^9 DOFs.
- Aproximadamente 10 millones de horas core.

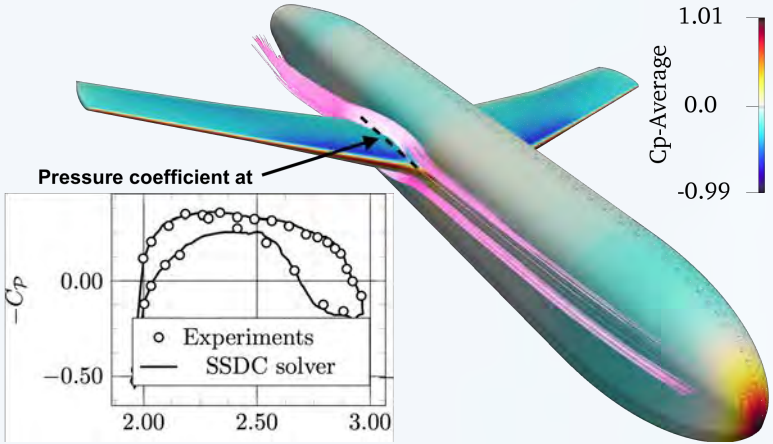
Ubicación de las mediciones:



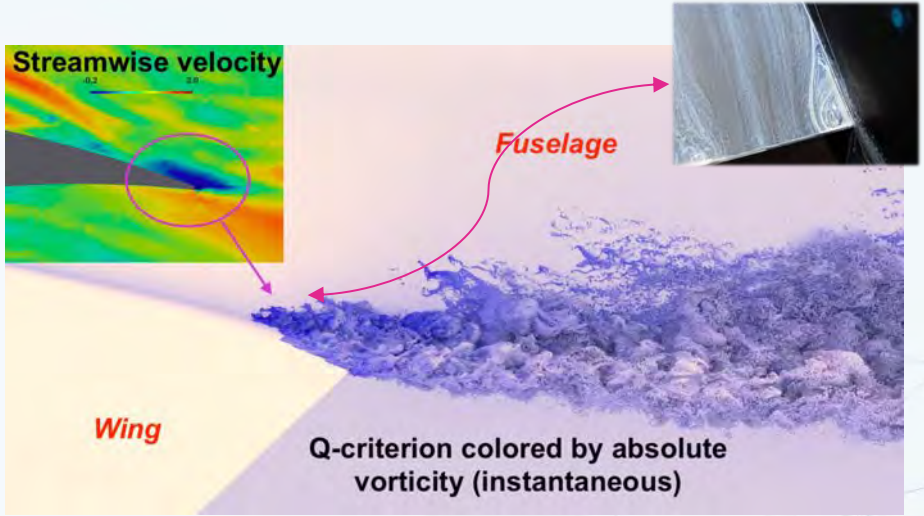


Experimento “juncture flow” de la NASA

Excelente concordancia con los datos experimentales:



Experimento en túnel de viento

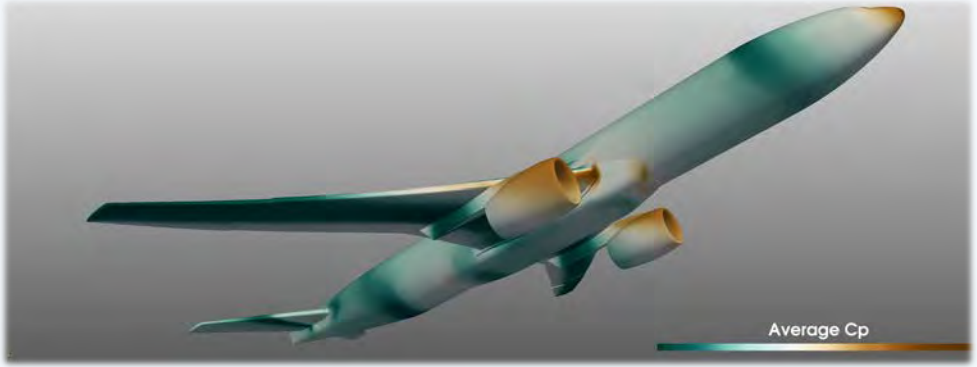


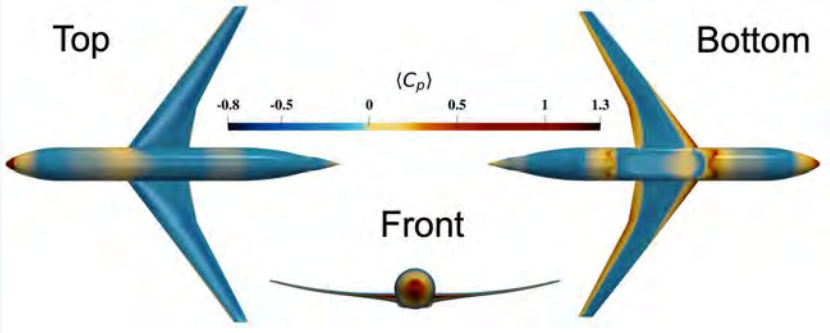
El costo de la simulación completa resultó muy cercano al requerido por códigos de bajo orden (2021 AIAA SciTech Conference). Simulaciones actuales con SSDC mostraron un ahorro en tiempo del 18% (para un proyecto que precisa de 20M horas core, significa un ahorro de ~USD 100K y 5 días de cómputos usando 16k CPU cores en Shaheen)

NASA common research model

Setup:

- $Re = 5 \times 10^{6}$.
- $Ma = 0.85$.
- AoA = 2.75°.
- Large-eddy simulation (LES)
- 0.7×10^{12} DOFs.





6

Resumen

Dónde estamos?

- Solver de alto orden, escalable, compresible, 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.

Dónde estamos?

- Desafíos por resolver:
  - Positividad.
  - Integración temporal implícita – precondicionamiento.

Como comunidad se ha realizado un gran paso. Se ha demostrado que los esquemas de atlo orden (Nek5000, PyFR, MFEM, SSDC, y otros) pueden ser robustos y muy eficientes en la era actual de supercomputadoras “Petascale” y se espera mucho más en la futura era de las “Exascale”.

HALCÓN PEREGRINO

Muchas gracias por su atención!