

Сравнение методов аппроксимации градиентов в схемах семейства WENO

С. Бахнэ, С. Босняков, С. Михайлов, **А. Трошин**

Центральный аэрогидродинамический институт
Московский физико-технический институт

2018

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-08-01436 А

План доклада

- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

Мотивация исследования

- Фокус на вихреразрешающих расчетах (LES/DES)
- Имеем на данный момент:
 - **Стабильный код (ZEUS)**
 - ▶ метод конечных объемов
 - ▶ структурированные сетки
 - ▶ 2 порядок точности
 - ▶ конвективные потоки: WENO A
 - ▶ **диффузионные потоки: центральные разности**
 - **Исследовательский код (Zoom)**
 - ▶ метод конечных элементов (PMГ)
 - ▶ неструктурированные сетки
 - ▶ порядок точности $K + 1$, где $K = 0 - 5$
 - ▶ диффузионные потоки: схема Bassi-Rebay 2

Мотивация исследования

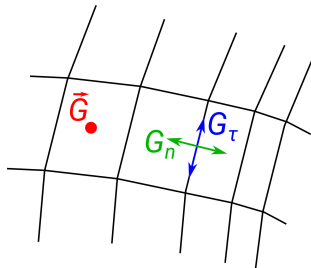
Структура уравнений:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F}_{\text{conv}}(U) + \nabla \cdot \vec{F}_{\text{diff}}(U, \vec{G}) = S(U, \vec{G}),$$

$$U = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho k, \rho \omega], \quad G = \nabla U$$

Требуются градиенты:

- в центрах ячеек (\vec{G}) — для источников
- на гранях ячеек в касательном направлении (G_τ) — для потоков
- на гранях ячеек в нормальном направлении (G_n) — для потоков



Подход к анализу аппроксимаций:

- одномерное скалярное приближение на неравномерном шаблоне:

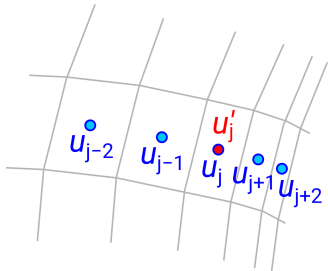
$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F_{\text{conv}}(u)}{\partial x} + \frac{\partial F_{\text{diff}}(u, u')}{\partial x} = S(u, u'), \quad \text{где} \quad u' = \frac{\partial u}{\partial x}$$

- 1 Мотивация исследования
- 2 **Вычисление градиентов в центре ячейки**
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

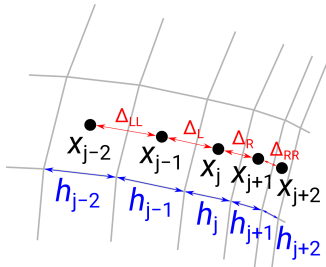
Вычисление градиентов в центре ячейки.

Обозначения

Даны u_{j-k}, \dots, u_{j+k} . Найти u'_j .



Геометрия:



$$\Delta u_L = u_j - u_{j-1}$$

$$\Delta u_R = u_{j+1} - u_j$$

$$\Delta_L = x_j - x_{j-1} = 0.5 \cdot (h_j + h_{j-1})$$

$$\Delta_R = x_{j+1} - x_j = 0.5 \cdot (h_{j+1} + h_j)$$

Случай равномерной сетки: $h = \Delta_L = \Delta_R$

Вычисление градиентов в центре ячейки.

Базовая реализация в ZEUS

[В.В. Власенко, 2007]

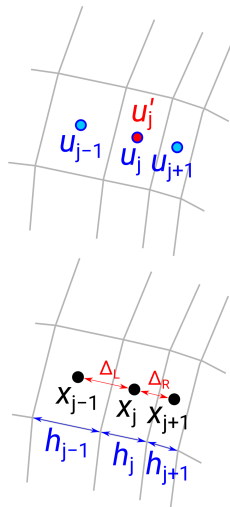
- трехточечный шаблон
- второй порядок на неравномерной сетке

- $$u'_j = \frac{\Delta u_L \cdot \Delta_R^2 + \Delta u_R \cdot \Delta_L^2}{\Delta_L \cdot \Delta_R^2 + \Delta_R \cdot \Delta_L^2} + O(\Delta^2)$$

- в случае равномерной сетки переходит в

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} + O(h^2)$$

Далее обозначается gc-3.



Вычисление градиентов в центре ячейки.

Идея повышения точности

На равномерном пятиточечном шаблоне [B. Fornberg, 1988]:

$$u'_j = \frac{u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}}{12h} + O(h^4)$$

Эквивалентная форма записи:

$$u'_j = \frac{4u'_{(j\pm1)} - u'_{(j\pm2)}}{3} + O(h^4), \quad u'_{(j\pm1)} = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}, \quad u'_{(j\pm2)} = \frac{u_{j+2} - u_{j-2}}{4h}$$

Сохраним эту форму на неравномерном шаблоне, вычисляя $u'_{(j\pm1)}$ и $u'_{(j\pm2)}$ по методу гс-3.

- доказано: такой подход имеет 2 порядок точности
- ожидается пониженный уровень ошибки по сравнению с гс-3

Далее этот метод обозначается гс-3+3.

Вычисление градиентов в центре ячейки. Повышение порядка точности

Рассмотрим интерполяционную формулу Лагранжа для производных:

$$u'_j \approx \sum_{\substack{i=-N/2 \\ i \neq 0}}^{N/2} \left(\frac{u_{j+i} - u_j}{x_{j+i} - x_j} \cdot \prod_{\substack{k=-N/2 \\ k \neq 0, i}}^{N/2} \frac{x_j - x_{j+k}}{x_{j+i} - x_{j+k}} \right)$$

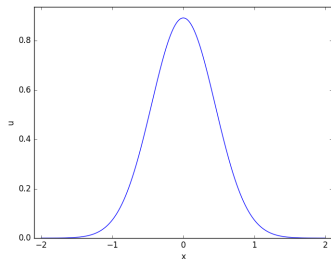
- при $N = 2$ формула совпадает с методом gc-3
- **доказано:** при $N = 4$ формула имеет 4 порядок точности на неравномерном шаблоне
- порядок точности при $N > 4$ еще не установлен

Данную формулу при $N = 4$ будем обозначать gc-5.

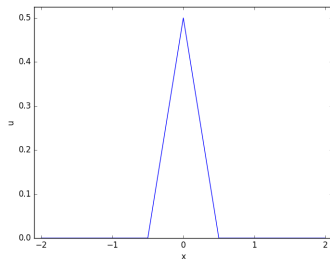
Тестовые функции

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right),$$

где $D = 1$, $t = 0.1$.



$$u(x) = \begin{cases} x + 1/2, & x \in [-1/2, 0] \\ 1/2 - x, & x \in [0, 1/2] \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$



Двигаемся вдоль оси x с заданным шаблоном. Рассматриваются:



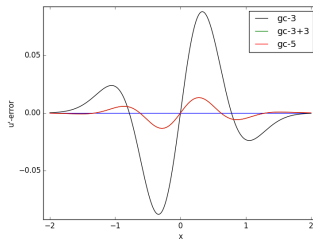
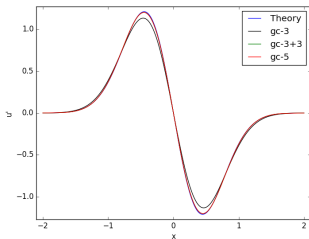
(равномерный шаблон)



(геометрическая прогрессия)

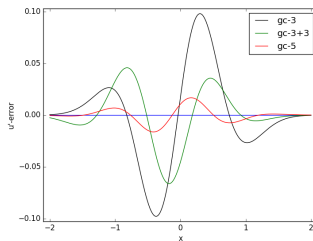
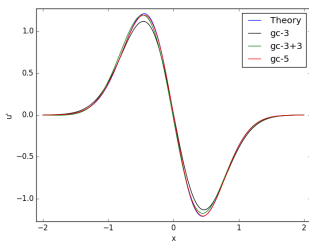
Тестирование. Функция Гаусса

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gc-3	0.088	0.0015
gc-3+3	0.013	3e-5
gc-5	0.013	3e-5

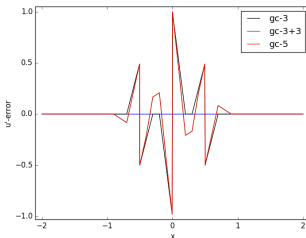
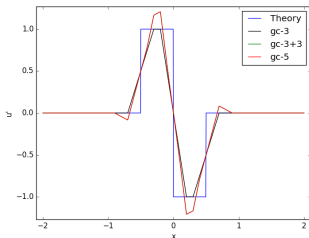
- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$



	L0	L2
gc-3	0.098	0.0019
gc-3+3	0.066	0.0007
gc-5	0.017	5e-5

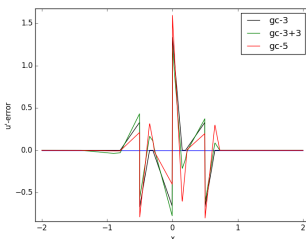
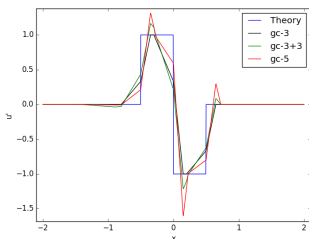
Тестирование. Кусочно-линейная функция

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gc-3	1.000	0.0500
gc-3+3	1.000	0.0451
gc-5	1.000	0.0451

- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$



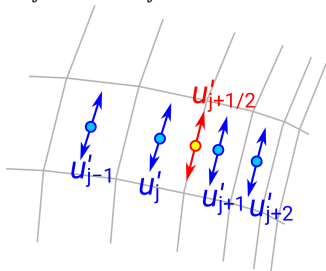
	L0	L2
gc-3	1.333	0.0510
gc-3+3	1.215	0.0461
gc-5	1.594	0.0476

- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 **Вычисление касательных градиентов на грани ячейки**
 - **Методы аппроксимации**
 - **Тестирование методов**
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

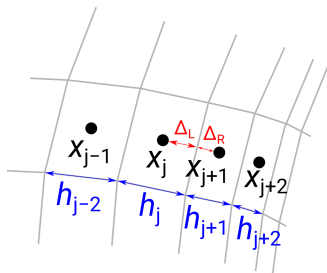
Касательные градиенты на грани ячейки.

Базовая реализация в ZEUS

Даны $u'_{j-k}, \dots, u'_{j+k+1}$. Найти $u'_{j+1/2}$.



Геометрия:



Базовый алгоритм — линейная
2-точечная интерполяция:

$$u'_{j+1/2} = \frac{u'_j \Delta_R + u'_{j+1} \Delta_L}{\Delta_L + \Delta_R} + O(\Delta^2)$$

$$\Delta_L = x_{j+1/2} - x_j = 0.5 \cdot h_j$$

$$\Delta_R = x_{j+1} - x_{j+1/2} = 0.5 \cdot h_{j+1}$$

[В.В. Власенко, 2007]

Далее обозначается gt-2.

Касательные градиенты на грани ячейки.

Идея повышения точности

На равномерном четырехточечном шаблоне [B. Fornberg, 1988]:

$$u'_{j+1/2} = \frac{-u'_{j-1} + 9 u'_j + 9 u'_{j+1} - u'_{j+2}}{16} + O(h^4)$$

Эквивалентная форма записи:

$$u'_{j+1/2} = \frac{9 u'_{(j\pm 1)} - u'_{(j\pm 2)}}{8} + O(h^4), \quad u'_{(j\pm 1)} = \frac{u'_{j+1} + u'_j}{2}, \quad u'_{(j\pm 2)} = \frac{u'_{j+2} + u_{j-1}}{2}$$

Сохраним эту форму на неравномерном шаблоне, вычисляя $u'_{(j\pm 1)}$ и $u'_{(j\pm 2)}$ по методу gt-2.

- доказано: такой подход имеет 2 порядок точности
- ожидается пониженный уровень ошибки по сравнению с gt-2

Далее этот метод обозначается gt-2+2.

Касательные градиенты на грани ячейки. Повышение порядка точности

Рассмотрим интерполяционную формулу Лагранжа:

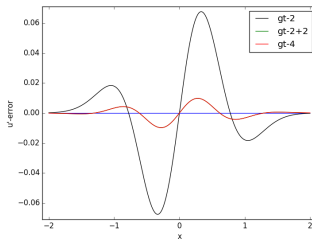
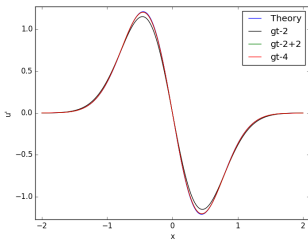
$$u'_{j+1/2} \approx \sum_{i=-N/2+1}^{N/2} \left(u'_{j+i} \cdot \prod_{\substack{k=-N/2+1 \\ k \neq i}}^{N/2} \frac{x_{j+1/2} - x_{j+k}}{x_{j+i} - x_{j+k}} \right)$$

- при $N = 2$ формула совпадает с методом gt-2
- **доказано:** при $N = 4$ формула имеет 4 порядок точности на неравномерном шаблоне

Данную формулу при $N = 4$ будем обозначать gt-4.

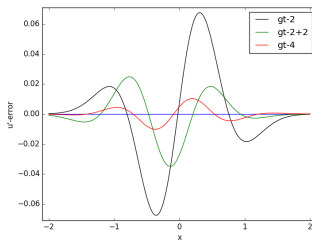
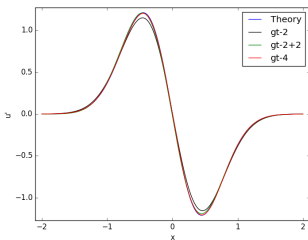
Тестирование. Функция Гаусса

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gt-2	0.068	0.0009
gt-2+2	0.010	1.7e-5
gt-4	0.010	1.7e-5

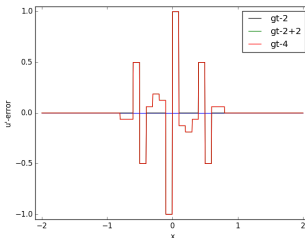
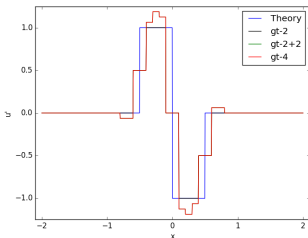
- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$



	L0	L2
gt-2	0.068	0.0009
gt-2+2	0.035	0.0002
gt-4	0.010	1.9e-5

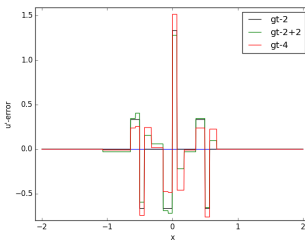
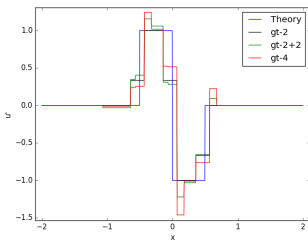
Тестирование. Кусочно-линейная функция

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gt-2	1.000	0.0749
gt-2+2	1.000	0.0781
gt-4	1.000	0.0781

- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$

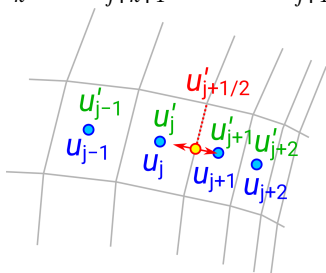


	L0	L2
gt-2	1.333	0.0713
gt-2+2	1.280	0.0724
gt-4	1.515	0.0826

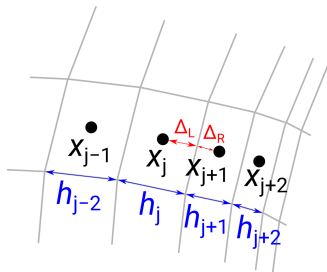
- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 **Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки**
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

Нормальные градиенты на грани ячейки

Даны $u_{j-k}, \dots, u_{j+k+1}$ и $u'_{j-k}, \dots, u'_{j+k+1}$. Найти $u'_{j+1/2}$.



Геометрия:



Линейная 2-точечная интерполяция

$$u'_{j+1/2} = \frac{u'_j \Delta_R + u'_{j+1} \Delta_L}{\Delta_L + \Delta_R} + O(\Delta^2)$$

приводит к потере четно-нечетного взаимодействия \Rightarrow не используется

$$\Delta_L = x_{j+1/2} - x_j = 0.5 \cdot h_j$$

$$\Delta_R = x_{j+1} - x_{j+1/2} = 0.5 \cdot h_{j+1}$$

Нормальные градиенты на грани ячейки. Базовая реализация в ZEUS

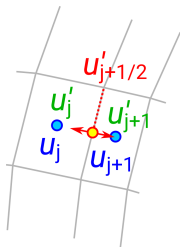
[В.В. Власенко, 2007]

- двухточечный шаблон, двухшаговый алгоритм
- второй порядок на неравномерной сетке

- $$u'_{j+1/2} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta_L + \Delta_R} - \frac{(\Delta_R - \Delta_L)(u'_{j+1} - u'_j)}{\Delta_L + \Delta_R} + O(\Delta^2)$$

- u'_{j+1} и u'_j вычисляются по методу gc-3
- в случае равномерной сетки переходит в

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + O(h^2)$$



Далее обозначается gn-2.

Нормальные градиенты на грани ячейки.

Идея повышения точности

На равномерном четырехточечном шаблоне [B. Fornberg, 1988]:

$$u'_{j+1/2} = \frac{9 u'_{(j\pm 1)} - u'_{(j\pm 2)}}{8} + O(h^4).$$

Сохраним эту форму на неравномерном шаблоне, вычисляя $u'_{(j\pm 1)}$ и $u'_{(j\pm 2)}$ по методу gn-2:

$$u'_{(j\pm 1)} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta_L + \Delta_R} - \frac{(\Delta_R - \Delta_L) (u'_{j+1} - u'_j)}{\Delta_L + \Delta_R}$$

$$u'_{(j\pm 2)} = \frac{u_{j+2} - u_{j-1}}{\Delta_{LL} + \Delta_{RR}} - \frac{(\Delta_{RR} - \Delta_{LL}) (u'_{j+2} - u'_{j-1})}{\Delta_{LL} + \Delta_{RR}}$$

- доказано: такой подход имеет 2 порядок точности
- ожидается пониженный уровень ошибки по сравнению с gn-2

Далее этот метод обозначается gn-2+2.

Нормальные градиенты на грани ячейки.

Повышение порядка точности

Выведена 4-точечная формула 3 порядка на неравномерном шаблоне:

$$u'_{j+1/2} = A u_{j-1} + B u_j + C u_{j+1} + D u_{j+2} + O(\Delta^3), \text{ где}$$

$$A = \frac{6h_j h_{j+1} + 2h_j h_{j+2} - 4h_{j+1}^2 - 2h_{j+1} h_{j+2}}{h_{j-1}^3 + 5h_{j-1}^2 h_j + 3h_{j-1}^2 h_{j+1} + h_{j-1}^2 h_{j+2} + 8h_{j-1} h_j^2 + 9h_{j-1} h_j h_{j+1} + 3h_{j-1} h_j h_{j+2} + 2h_{j-1} h_{j+1}^2 + h_{j-1} h_{j+1} h_{j+2} + 4h_j^3 + 6h_j^2 h_{j+1} + 2h_j^2 h_{j+2} + 2h_j h_{j+1}^2 + h_j h_{j+1} h_{j+2}}$$

$$B = \frac{-6h_{j-1} h_{j+1} - 2h_{j-1} h_{j+2} - 12h_j h_{j+1} - 4h_j h_{j+2} + 4h_{j+1}^2 + 2h_{j+1} h_{j+2}}{h_{j-1} h_j^2 + 3h_{j-1} h_j h_{j+1} + h_{j-1} h_j h_{j+2} + 2h_{j-1} h_{j+1}^2 + h_{j-1} h_{j+1} h_{j+2} + h_j^3 + 3h_j^2 h_{j+1} + h_j^2 h_{j+2} + 2h_j h_{j+1}^2 + h_j h_{j+1} h_{j+2}}$$

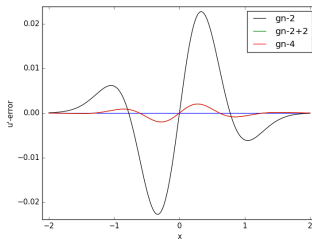
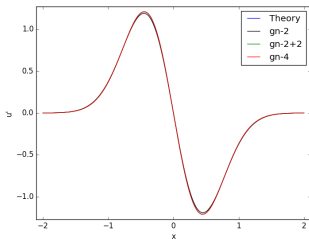
$$C = \frac{-2h_{j-1} h_j + 4h_{j-1} h_{j+1} + 2h_{j-1} h_{j+2} - 4h_j^2 + 12h_j h_{j+1} + 6h_j h_{j+2}}{h_{j-1} h_j h_{j+1} + h_{j-1} h_j h_{j+2} + h_{j-1} h_{j+1}^2 + h_{j-1} h_{j+1} h_{j+2} + 2h_j^2 h_{j+1} + 2h_j^2 h_{j+2} + 3h_j h_{j+1}^2 + 3h_j h_{j+1} h_{j+2} + h_{j+1}^3 + h_{j+1}^2 h_{j+2}}$$

$$D = \frac{2h_{j-1} h_j - 2h_{j-1} h_{j+1} + 4h_j^2 - 6h_j h_{j+1}}{h_{j-1} h_j h_{j+1} + h_{j-1} h_j h_{j+2} + 2h_{j-1} h_{j+1}^2 + 3h_{j-1} h_{j+1} h_{j+2} + h_{j-1} h_{j+2}^2 + 2h_j^2 h_{j+1} + 2h_j^2 h_{j+2} + 6h_j h_{j+1}^2 + 9h_j h_{j+1} h_{j+2} + 3h_j h_{j+2}^2 + 4h_{j+1}^3 + 8h_{j+1}^2 h_{j+2} + 5h_{j+1} h_{j+2}^2 + h_{j+2}^3}$$

Данную формулу будем обозначать gn-4.

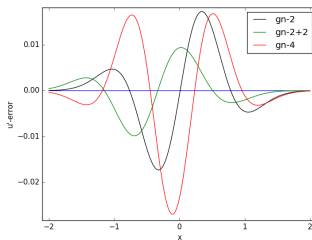
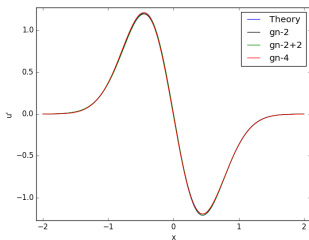
Тестирование. Функция Гаусса

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gn-2	0.023	0.0001
gn-2+2	0.002	7.2e-7
gn-4	0.002	7.2e-7

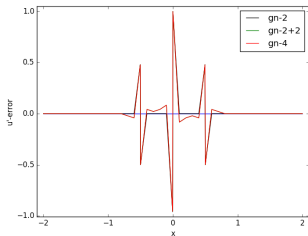
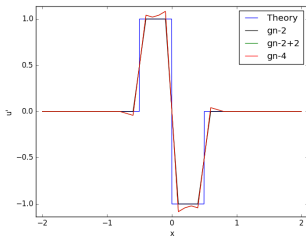
- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$



	L0	L2
gn-2	0.017	5.8e-5
gn-2+2	0.010	2.0e-5
gn-4	0.027	0.0001

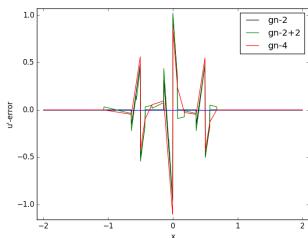
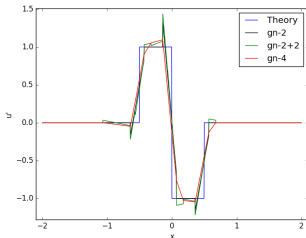
Тестирование. Кусочно-линейная функция

- Равномерный шаблон $h_j = [0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2]$



	L0	L2
gn-2	1.000	0.0250
gn-2+2	1.000	0.0235
gn-4	1.000	0.0235

- Геометрическая прогрессия $h_j = [0.2q^{-2}, 0.2q^{-1}, 0.2, 0.2q, 0.2q^2]$, $q = 2$



	L0	L2
gn-2	1.000	0.0265
gn-2+2	1.021	0.0255
gn-4	1.1045	0.0305

- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

Вихрь Тейлора-Грина. Постановка задачи

W.M. van Rees, A. Leonard, D.I. Pullin and P. Koumoutsakos. A comparison of vortex and pseudo-spectral methods for the simulation of periodic vortical flows at high Reynolds number // J. Comput. Phys. **230**, pp. 2794–2805, 2011

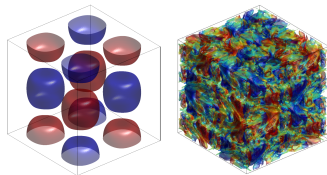
- кубическая область, периодические границы
- DNS, $Re = 1600$
- начальное поле:

$$u = V_0 \sin\left(\frac{x}{L}\right) \cos\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right),$$

$$v = -V_0 \cos\left(\frac{x}{L}\right) \sin\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right),$$

$$w = 0,$$

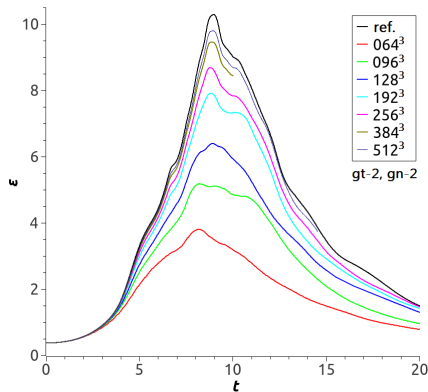
$$p = p_0 + \frac{\rho_0 V_0^2}{16} \left(\cos\left(\frac{2x}{L}\right) + \cos\left(\frac{2y}{L}\right) \right) \left(\cos\left(\frac{2z}{L}\right) + 2 \right)$$



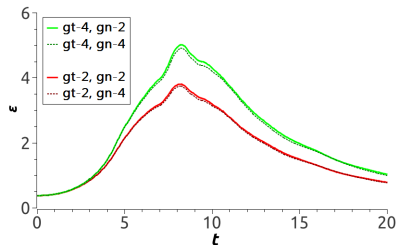
Изоповерхности давления
(DLR, 2011)

Влияние аппроксимации градиентов

Зависимость энтропии $\epsilon = \frac{1}{\rho_0 \Omega} \int_{\Omega} \rho \frac{\omega \cdot \omega}{2} d\Omega$ от времени:



- реконструкция WENO9
- конв. потоки по формуле Poy
- явная 3-шаговая схема RK

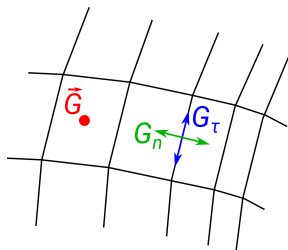


- переход gt-2 \rightarrow gt-4 соответствует измельчению сетки в ≈ 1.5 раза
- эффективный выигрыш по времени счета $1.5^4 \approx 5$ раз

- 1 Мотивация исследования
- 2 Вычисление градиентов в центре ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 3 Вычисление касательных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 4 Вычисление нормальных градиентов на грани ячейки
 - Методы аппроксимации
 - Тестирование методов
- 5 Расчеты распада вихря Тейлора–Грина
- 6 Выводы

Выводы

	\vec{G}	G_τ	G_n
Базовый метод	gc-3: $O(h^2)$	gt-2: $O(h^2)$	gn-2: $O(h^2)$
Метод повышенной точности	gc-3+3: $O(h^{2...4})$	gt-2+2: $O(h^{2...4})$	gn-2+2: $O(h^{2...4})$
Метод повышенного порядка	gc-5: $O(h^4)$	gt-4: $O(h^4)$	gn-4: $O(h^{3...4})$



	Гладкая функция	Функция с изломом
Равномерная сетка	Все уточненные аппроксимации существенно снижают ошибку вычислений	Все уточненные аппроксимации не дают преимуществ перед базовыми методами
Неравномерная сетка	Только методы gc-5 и gt-4 дают преимущество в этом случае	Все уточненные аппроксимации не дают преимуществ перед базовыми методами

Распад вихря Тейлора–Грина:

- основной вклад в уточнение решения — переход к аппроксимации **gt-4**
- уточнение эквивалентно измельчению сетки в 1.5 раза в каждом направлении
- эффективность расчета повышается в $1.5^4 \approx 5$ раз