

# Higher-Order DGFEM Transport Calculations on Polytope Meshes for Massively-Parallel Architectures

#### Michael W. Hackemack

Chair: Jean C. Ragusa

Committee Members: Marvin L. Adams, Jim E. Morel, Nancy M. Amato

External Advisor: Troy Becker

Department of Nuclear Engineering Texas A&M University College Station, TX, 77843, USA mike\_hack@tamu.edu



- Overview
- Polytope Finite Element Basis Functions
  - Linear Basis Functions on 2D Polygons
  - Quadratic Serendipity Basis Functions on 2D Polygons
  - Linear Basis Functions on 3D Polyhedra
- 3 Diffusion Synthetic Acceleration on Polytopes
  - Theory
  - MIP Diffusion Form
- Proposed Work and Current Status
- Ongoing Work



## The Continuous-Energy Transport Equation

$$\left[\mathbf{\Omega}\cdot
abla+\sigma_t(\mathbf{r},E)
ight]\psi(\mathbf{r},E,\mathbf{\Omega})=\int_{A\pi}\int_0^\infty\,\sigma_s(\mathbf{r},E',E,\mathbf{\Omega}',\mathbf{\Omega})\psi(\mathbf{r},E',\mathbf{\Omega}')dE'd\Omega'+Q(\mathbf{r},E,\mathbf{\Omega})$$

r - neutron position (cm)

E - neutron energy (eV)

 $\Omega$  - neutron solid angle (steradians)

 $\psi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$  - angular flux

 $Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$  - distributed neutron source

 $\sigma_t(\mathbf{r}, E)$  - total macroscopic cross section (1/cm)

 $\sigma_s(\mathbf{r}, E', E, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega})$  - total

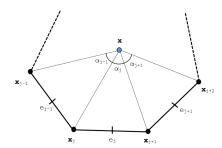
- Other physics communities are now employing polytope grids due to decreased cell/face counts (CFD in particular)
- They allow for transition elements between different domain regions
- Hanging nodes from non-conforming meshes are not necessary
- Independently-generated simplicial grids (i.e. created in parallel) can be stitched together with polytones without communicating the whole mesh across process.

- Other physics communities are now employing polytope grids due to decreased cell/face counts (CFD in particular)
- They allow for transition elements between different domain regions
- Hanging nodes from non-conforming meshes are not necessary
- Independently-generated simplicial grids (i.e. created in parallel) can be stitched together with polytopes without communicating the whole mesh across processor

- Other physics communities are now employing polytope grids due to decreased cell/face counts (CFD in particular)
- They allow for transition elements between different domain regions
- Hanging nodes from non-conforming meshes are not necessary
- Independently-generated simplicial grids (i.e. created in parallel) can be stitched together with polytopes without communicating the whole mesh across processor

- Other physics communities are now employing polytope grids due to decreased cell/face counts (CFD in particular)
- They allow for transition elements between different domain regions
- Hanging nodes from non-conforming meshes are not necessary
- Independently-generated simplicial grids (*i.e.* created in parallel) can be stitched together with polytopes without communicating the whole mesh across processors

Linear Basis Functions on 2D Polygons



5 / 33

Linear Basis Functions on 2D Polygons

## Wachspress Rational Functions



## Piecewise Linear Functions



#### Mean Value Coordinates



# Maximum Entropy Coordinates



Proposed Work and Current Status

Ongoing Work

= 1= 990°

November 24, 2015

10 / 33

**POLYFEM** 

Quadratic Serendipity Basis Functions on 2D Polygons

.0

Proposed Work and Current Status

Ongoing Work

<ロ > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 □ < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回

November 24, 2015

11 / 33

**POLYFEM** 

Linear Basis Functions on 3D Polyhedra

Proposed Work and Current Status

Ongoing Work

4日 → 4団 → 4 差 → 4 差 → 2 1 至 り 4 ○ ○

November 24, 2015

12 / 33

DSA on Polytopes

•0 00

Theory

Proposed Work and Current Status

Ongoing Work

4日 → 4団 → 4 差 → 4 差 → 2 1 至 り 4 ○ ○

November 24, 2015

13 / 33

DSA on Polytopes

00

Theory

MIP Diffusion Form

## The Diffusion Equation and Boundary Conditions

DSA on Polytopes

## The Diffusion Equation

$$-\nabla \cdot D\nabla \Phi(\mathbf{r}) + \sigma \Phi(\mathbf{r}) = q(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{r} \in \mathcal{D}$$

#### Boundary Conditions

$$\begin{split} \Phi(\mathbf{r}) &= \Phi_0(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{r} \in \partial \mathcal{D}^d \\ - D \partial_n \Phi(\mathbf{r}) &= J_0(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{r} \in \partial \mathcal{D}^n \\ \frac{1}{4} \Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} D \partial_n \Phi(\mathbf{r}) &= J^{inc}(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{r} \in \partial \mathcal{D}^r \end{split}$$

DSA on Polytopes

MIP Diffusion Form

Overview

# Symmetric Interior Penalty (SIP) Form

#### Bilinear Form

$$\begin{split} \textbf{a}(\Phi,b) &= \left\langle D\vec{\nabla}\Phi,\vec{\nabla}b\right\rangle_{\mathcal{D}} + \left\langle \sigma\Phi,b\right\rangle_{\mathcal{D}} \\ &+ \left\{\kappa_{e}^{\textit{SIP}}\llbracket\Phi\rrbracket,\llbracket b\rrbracket\right\}_{E_{h}^{i}} - \left\{\llbracket\Phi\rrbracket,\{\{D\partial_{n}b\}\}\right\}_{E_{h}^{i}} - \left\{\{\{D\partial_{n}\Phi\}\},\llbracket b\rrbracket\right\}_{E_{h}^{i}} \\ &+ \left\{\kappa_{e}^{\textit{SIP}}\Phi,b\right\}_{\partial\mathcal{D}^{d}} - \left\{\Phi,D\partial_{n}b\right\}_{\partial\mathcal{D}^{d}} - \left\{D\partial_{n}\Phi,b\right\}_{\partial\mathcal{D}^{d}} + \frac{1}{2}\Big\{\Phi,b\Big\}_{\partial\mathcal{D}^{r}} \end{split}$$

## Linear Form

$$\ell(b) = \left\langle q, b \right\rangle_{\mathcal{D}} - \left\{ J_0, b \right\}_{\partial \mathcal{D}^n} + 2 \left\{ J_{inc}, b \right\}_{\partial \mathcal{D}^n}$$

•00000

000000

000000

000000

000000

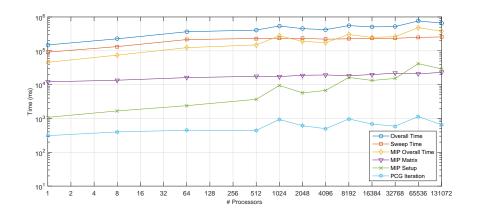
000000

000000

000000

000000

000000



000000

Additional Material

Additional Material

Additional Material