

Raport de Cercetare

Grant: METODE MODERNE DE CALCUL PARALEL PENTRU SIMULAREA NUMERICA A CURGERII FLUIDELOR ȘI APLICAȚII LA MAȘINI ȘI SISTEME HIDROPNEUMATICE (A2101)

Autor: SUSAN-RESIGA Romeo

Universitatea: "POLITEHNICA" din TIMIȘOARA

Contribuțiile științifice ale echipei de cercetare în cadrul prezentului proiect se încadrează în tendința conturată pe plan mondial în domeniul utilizării sistemelor de calcul cu memorie distribuită pentru soluționarea în paralel a aplicațiilor științifice mari. Pe lângă elucidarea aspectelor legate de instalarea și testarea infrastructurii software de calcul paralel pe clustere de calculatoare, în cadrul grantului au fost dezvoltate aplicații practice care soluționează probleme ingineresti concrete. În acest sens, rezultatele obținute utilizând atât software de concepție proprie cât și pachete de software comercial (spre exemplu FLUENT) au fost unanim apreciate la prestigioasele forumuri științifice internaționale la care au participat de membrii echipei de cercetare în perioada 2002-2004.

Contribuții la dezvoltarea cunoașterii în domeniu

- dezvoltarea, implementarea și utilizarea de noi modele și algoritmi numerici de calcul paralel pentru mecanica fluidelor ;
- promovarea în comunitatea științifică și academică din România a noilor tehnici de calcul paralel pentru soluționarea problemelor științifice și ingineresti, ce utilizează cu maxima eficiență infrastructura de calcul existentă și nu necesită investiții hardware/software suplimentare.
- elaborarea de teze de doctorat : "Metode Numerice pt. Determinarea Câmpurilor Tridimensionale în Rotoarele Turbinelor Francis", susținută în 2002 de ing. S. Muntean și apreciată cu Magna cum Laudae, "Metode Numerice Calcul al Câmpurilor Tridimensionale în Distribuitorul și Rotorul turbinei Kaplan", doctorand ing. D. Balint, "Metode de Simulare Numerică ale Curgerii Reale prin Rețele Plane de Profile", doctorand inf. Teodora Frunză, "Modele Discrete pt. Fluide Complexe", doctorand fiz. A. Cristea.

Contribuții la dezvoltarea învățământului superior ;

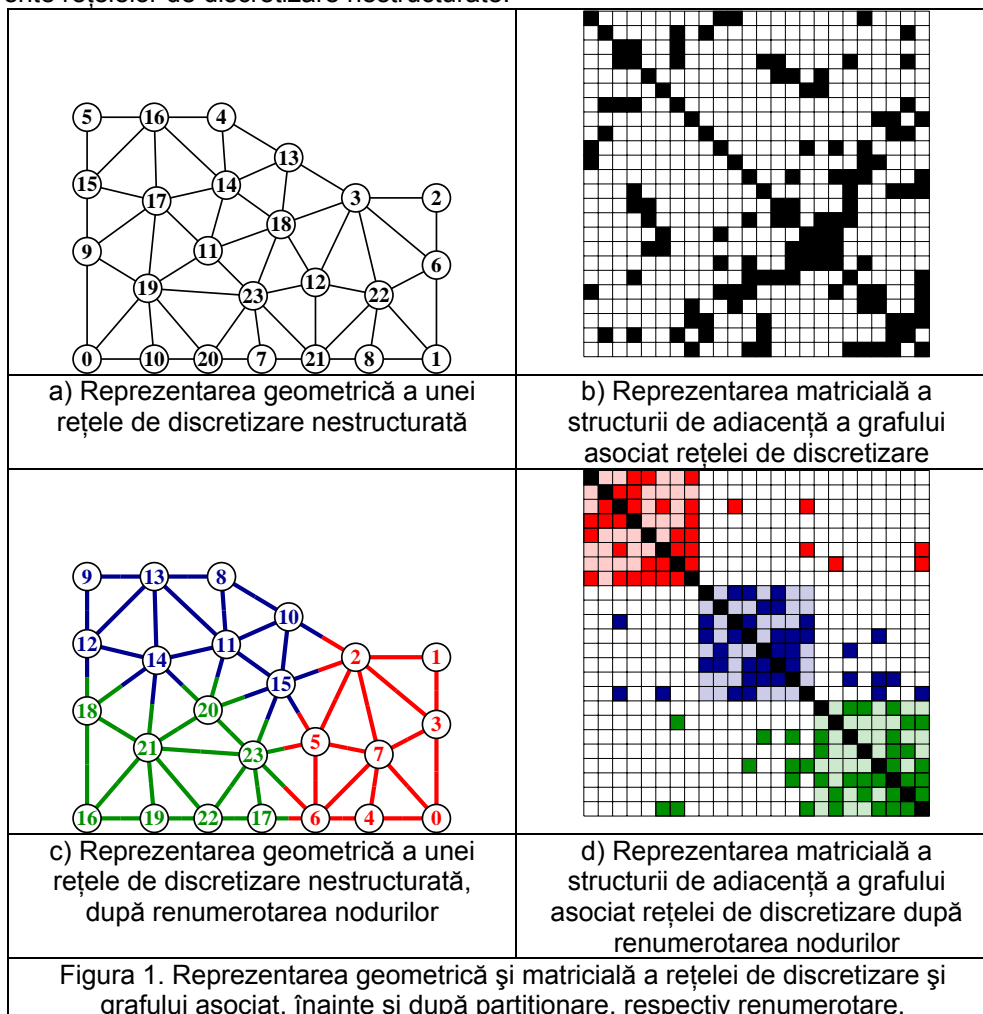
- dezvoltarea conținutului a noi discipline ingineresti moderne, ce utilizează calculul numeric pentru proiectarea, analiza și optimizarea echipamentelor hidraulice
- dezvoltarea Laboratorului de Simulare Numerică și Calcul Paralel din cadrul Universității "Politehnica" din Timișoara, în care își desfășoară activitatea studenții din anii IV-V de la Facultățile de Mecanică, respectiv Automatică și Calculatoare (elaborare proiecte de an și proiecte de diplomă), precum și studenții de la studii master (laborator, lucrări de dizertație), respectiv doctoranzi. Dezvoltarea acestui laborator se referă la instalarea și testarea unor biblioteci software (standard MPI : Message Passing Interface) pentru aplicații de calcul paralel, respectiv pentru calcule științifice și ingineresti (PETSc – Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation ; ParMETIS – descompunere de grafuri asociate rețelelor de discretizare ; SuperLU/BLAS/LAPACK - algebra liniară și soluționare de sisteme de ecuații utilizând matrici rare), pe platforme LINUX sau WINDOWS.

În cel de-al doilea an de derulare a prezentului Grant CNCSIS tip A, au fost continuate cu succes studiile și cercetările în vederea dezvoltării și perfecționării de tehnici noi și performante pentru simularea numerică a curgerilor în mașini și echipamente hidraulice. Activitatea bogată a echipei de cercetare a grantului, și nivelul de maturitate al rezultatelor obținute au justificat includerea lor într-o monografie care să prezinte problematica tehnicilor de calcul paralel din perspectiva dezvoltării de software pentru sisteme cu memorie distribuită, respectiv din perspectiva aplicațiilor ingineresti de înalt nivel utilizând software expert. Monografia editată de membrii echipei de cercetare conține sinteza rezultatelor din ultimul an, precum și rezultate anterioare care au pavat drumul spre abordarea complexă a curgerilor cu aplicații tehnice. Pe lângă aceasta, membrii echipei de cercetare a grantului au elaborat și prezentat la prestigioase forumuri științifice naționale și internaționale o serie de 11 lucrări. Vom prezenta în cele ce urmează principalele rezultate incluse în cele cinci capitole ale monografiei editată în cadrul grantului.

Primul capitol al cărții este o succintă introducere în problematica sistemelor de calcul paralel, și a necesității utilizării lor pentru soluționarea problemelor ingineresti. Un exemplu convingător care ilustrează necesarul de resurse de calcul pentru soluționarea completă prin simulare numerică directă

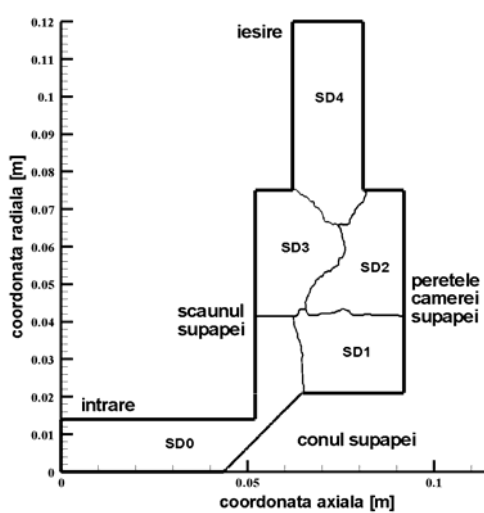
a unei curgeri simple arată că simpla utilizare a “forței brute” de calcul nu este posibilă. Prin urmare, eforturile trebuie concentrate atât în direcția dezvoltării unor modele matematice simplificate care să surprindă corect principalele aspecte ale fenomenului fizic și a metodelor numerice de soluționare a ecuațiilor și sistemelor de ecuații cu derivate parțiale, cât și în direcția utilizării cu maximă eficiență a resurselor de calcul existente. Cartea prezintă eforturile colectivului de autori în cea de a doua direcție, atât prin dezvoltarea de software de concepție proprie, cât și prin utilizarea de software expert pe sisteme de calcul paralel cu memorie distribuită de tip computer cluster. Direcția în care și-au orientat cercetările, direcție care corespunde tendinței actuale pe plan mondial de minimizare a investițiilor suplimentare în resurse hardware concomitent cu utilizarea eficientă a resurselor deja disponibile, este cu atât mai relevantă pentru comunitatea științifică din România.

Capitolul al doilea abordează algoritmi de soluționare a sistemelor mari de ecuații algebrice, aceasta fiind componenta aplicațiilor de calcul științific care solicită cele mai mari resurse de timp de calcul și memorie pentru stocarea datelor. Se arată că soluționarea sistemelor mari de ecuații se poate efectua practic numai prin metode iterative, pentru că metodele directe de eliminare Gaussiană generează implicit o matrice densă de dimensiuni foarte mari, iar timpul de calcul devine prohibitiv. Sunt prezentate principalele metode moderne de soluționare iterativă, cu algoritmi corespunzători în meta-lingaj. Pentru fiecare algoritm sunt prezentate avantajele specifice, dar și limitările, împreună cu particularitățile de implementare. Una din concluzii este că soluționarea iterativă a sistemelor de ecuații depinde esențial de eficiența efectuării produselor matrice-vector. Prin urmare, restul capitolului este dedicat prezentării structurilor de date corespunzătoare stocării matricilor rare, precum și distribuirii structurilor de date pe sisteme cu memorie distribuită. Problema se traduce în termenii partiționării grafului asociat rețelei de discretizare, care în reprezentare matricială corespunde structurii elementelor nenule din matrice, astfel încât numărul de laturi tăiate să fie minim, Figura 1. Se arată clar că această cerință conduce și la minimizarea comunicării inter-procesoare la efectuarea produsului matrice-vector. Capitolul conține și o aplicație de generare și partiționare a structurilor de date aferente rețelelor de discretizare nestructurate.

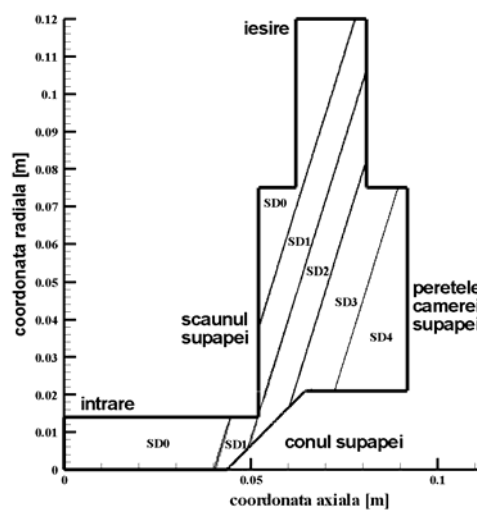


În cel de-al treilea capitol este prezentată o aplicație completă de calcul paralel realizată de autori. Problema aleasă spre soluționare corespunde modelului matematic ce descrie curgerea plană a fluidului perfect, iar soluționarea numerică se face cu metoda elementului finit. Aplicația este dezvoltată utilizând PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computations), o bibliotecă dezvoltată la Argonne National Laboratory special pentru scrierea aplicațiilor de calcul științific de înaltă performanță pe sisteme de calcul paralel. Această alegere, împreună cu utilizarea tehnicilor de programare structurată oferă cititorului un excelent exemplu pentru dezvoltarea de aplicații proprii. Prezentarea în detaliu a documentației funcțiilor și structurilor de date utilizate, precum și a codului sursă permit urmărirea pas cu pas a tuturor detaliilor de implementare.

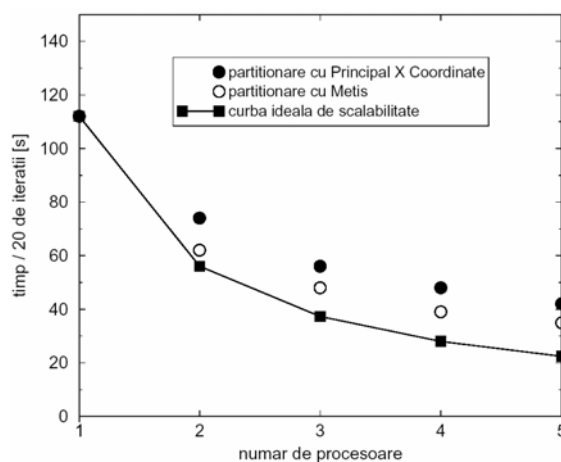
Al patrulea capitol prezintă soluționarea unor probleme ingineresti din domeniul curgerii în echipamente de acționare hidraulică, utilizând codul comercial FLUENT. O analiză atentă a problemei permite definirea unui domeniu de analiză bi-dimensional corespunzător semiplanului meridian al domeniului 3D axial-simetric pentru supapa hidraulică de siguranță analizată. În continuare se analizează în detaliu partiționarea acestui domeniu pe un sistem cu până la 5 procesoare, și se prezintă performanțele diferitelor metode utilizate. Se arată clar influența pe care o are asupra scalabilității comunicația între procesoare în procesul de soluționare, Figura 3. Ultima secțiune a capitolului este dedicată unei tehnici originale de analiză a datelor numerice, dezvoltată de autori, care permite descrierea cantitativă concisă a structurii vârtejurilor din camera supapei de presiune analizată, utilizând modelul de vârtej Batchelor.



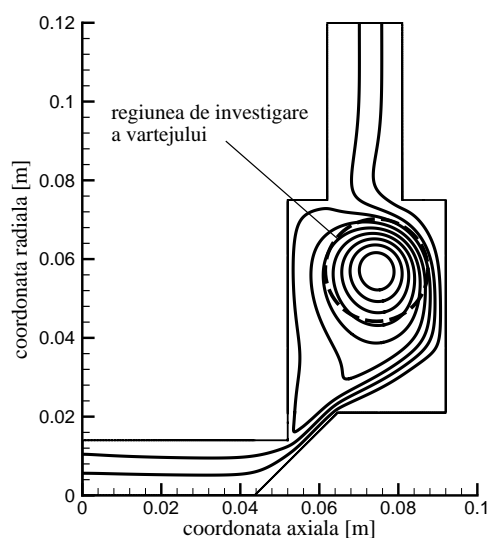
a) Partiționarea domeniului cu METIS graph partitioner



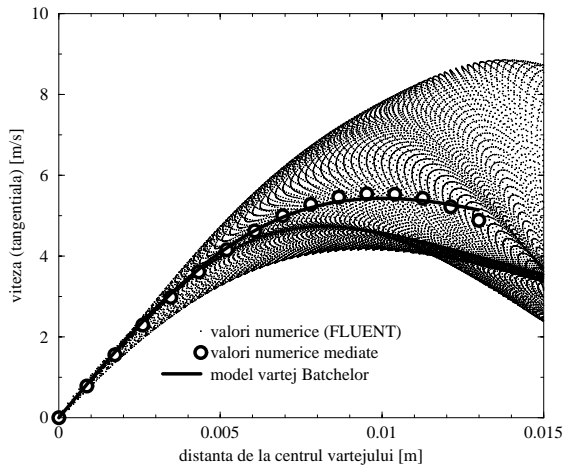
b) Partiționarea domeniului de analiză după axele principale



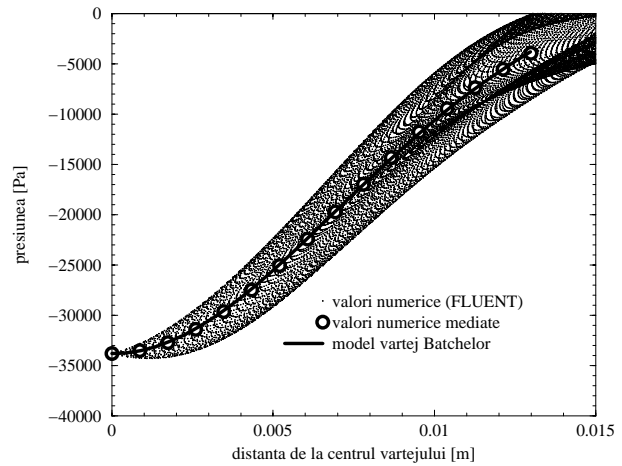
c) Analiza scalabilității soluționării curgerii în supapă



d) Linii de curent în semiplanul meridian și regiunea de investigare a vârtejului



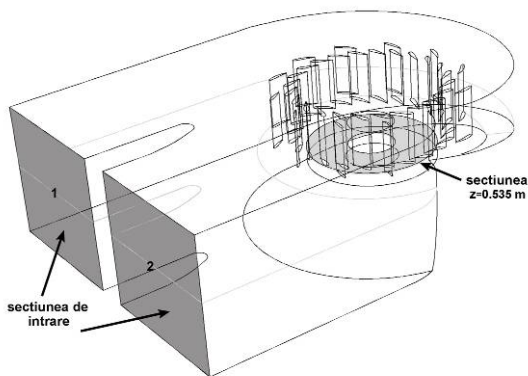
e) Modelul de vârtej Batchelor aplicat distribuției de viteză în vârtej.



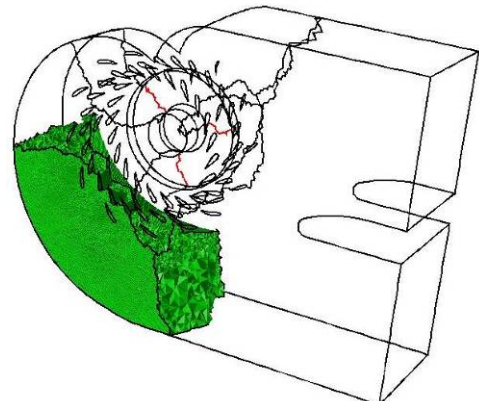
f) Modelul de vârtej Batchelor aplicat distribuției de presiune în vârtej.

Figura 3. Utilizarea calculului paralel pentru simularea curgerii în supape hidraulice de siguranță și utilizarea modelului de vârtej Batchelor pentru descrierea cantitativă a structurii câmpului hidrodinamic în camera supapei.

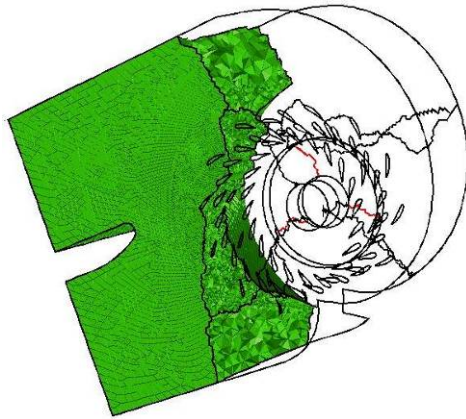
Ultimul capitol evidențiază avantajele utilizării calculului paralel pentru soluționarea problemelor complexe tridimensionale corespunzătoare curgerii în turbine hidraulice. Sunt prezentate aplicații de o deosebită valoare practică privind curgerea în diferitele componente ale traseului hidraulic al turbinei Kaplan. Mai întâi este prezentată metodologia de calcul paralel pentru simularea curgerii în domeniul complet al camerei spirale și distribuitorului turbinei Kaplan. O atenție deosebită a fost acordată alegerii corecte a metodei de partiționare a domeniului, astfel încât comunicarea inter-procesoare să fie minimizată. Ca rezultat, pentru probleme 3D cu peste 1 milion de celule scalabilitatea pe un număr de până la 5 procesoare este aproape identică cu cea teoretică datorită ponderii mici a timpului de comunicare în raport cu timpul de calcul, Figura 4. Pentru analiza curgerii în porțiunea paletată a traseului hidraulic de turbină Kaplan metodologia dezvoltată de autori conține două nivele de descompunere a domeniului de analiză. Primul nivel corespunde unei descompuneri pe criterii de natură hidrodinamică, definindu-se separat probleme cu condiții la limită pentru curgerea absolută în distribuitorul turbinei, respectiv pentru curgerea relativă în rotor. Continuitatea câmpului de viteză și presiune la interfața artificial definită este asigurată prin metoda interfeței de amestec, pentru care autorii au conceput algoritmi originali de mediere circumferențială a datelor. Al doilea nivel corespunde unei descompuneri algebrice, corespunzătoare partiționării rețelei de discretizare a domeniului tridimensional corespunzător numărului de procesoare utilizate. Sunt prezentate în detaliu subdomeniile rezultate pentru partiționarea domeniului până la cinci procesoare, astfel încât comunicarea inter-procesoare să fie minimizată, Figura 5. Și în acest capitol se acordă o atenție aparte analizei câmpului hidrodinamic obținut, pentru desprinderea unor concluzii de utilitate practică, inginerească, în procesul de proiectare și/sau optimizare a geometriei turbomașinilor hidraulice.



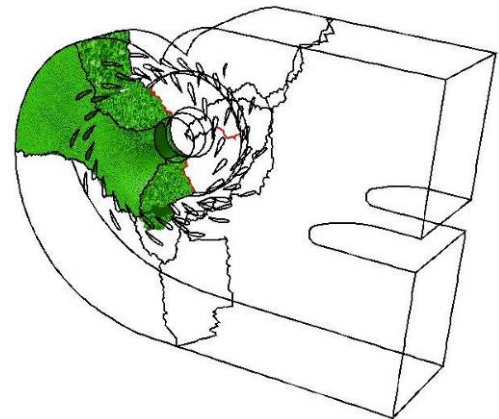
a) Domeniul de analiză pentru distribuitorul turbinei Kaplan



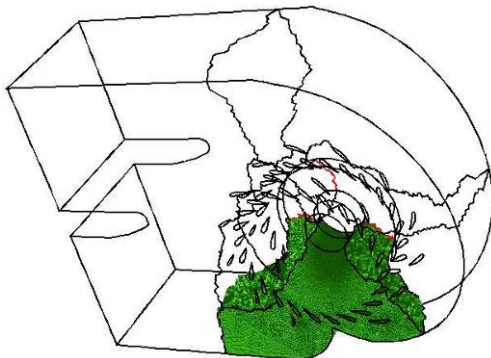
b) Subdomeniul #0



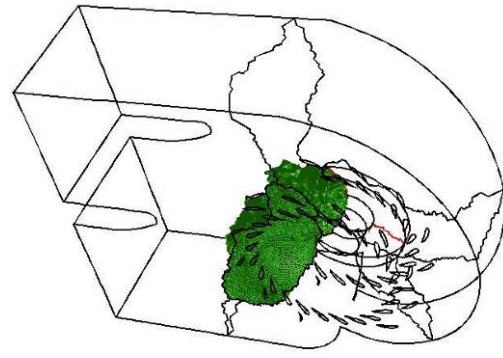
c) Subdomeniul #1



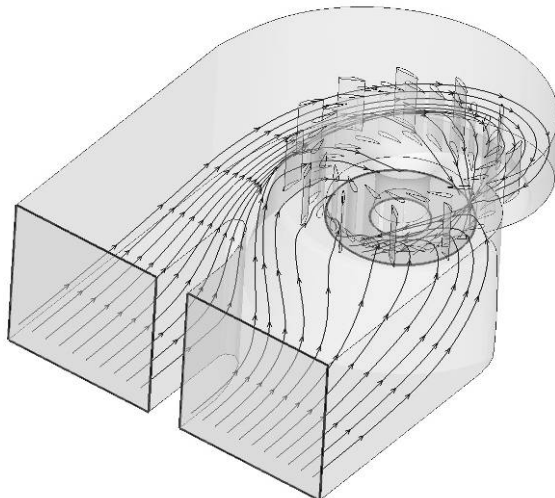
d) Subdomeniul #2



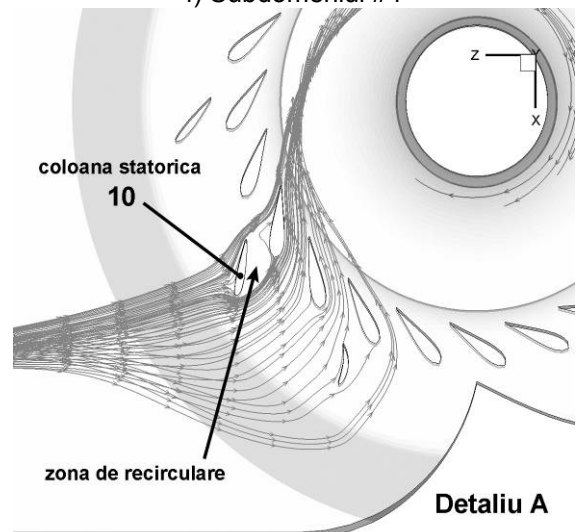
e) Subdomeniul #3



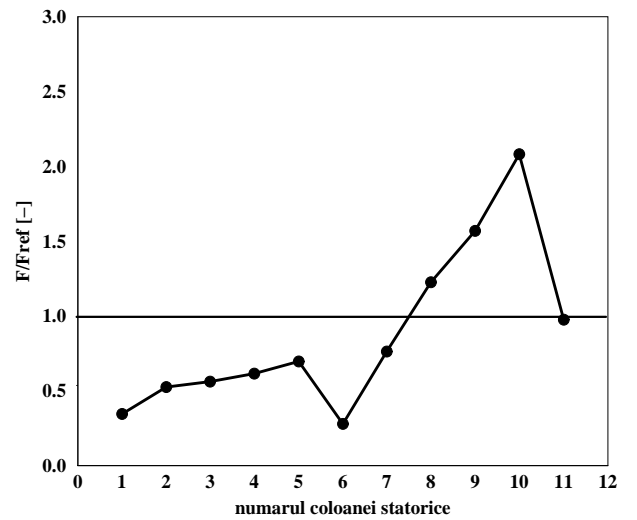
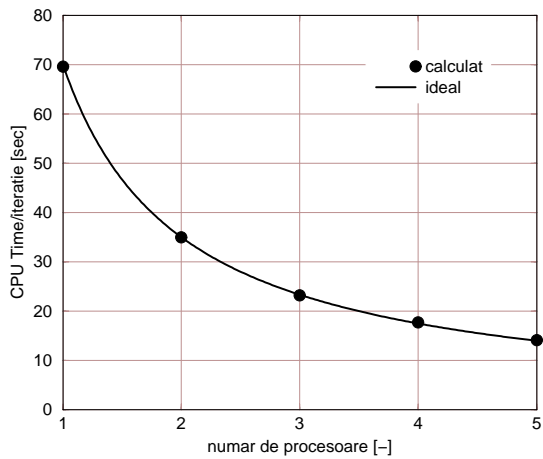
f) Subdomeniul #4



g) Linii de curent pentru curgerea în distribuitorul turbinei Kaplan



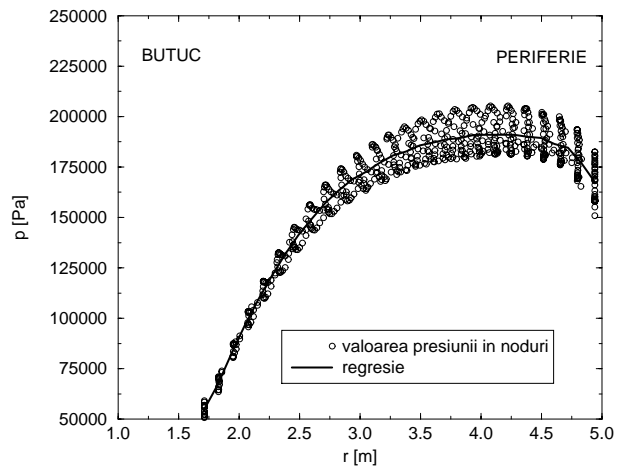
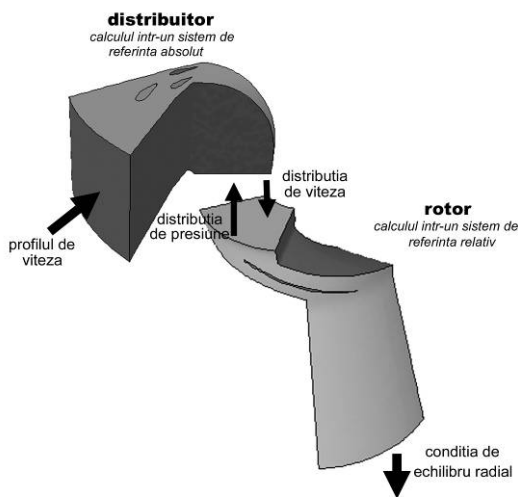
h) Evidențierea curgerii cu desprinderi pe unele palete statorice ale turbinei Kaplan



i) Scalabilitatea calculului paralel pentru simularea curgerii în camera spirală și distribuitorul turbinei Kaplan (1319405 celule).

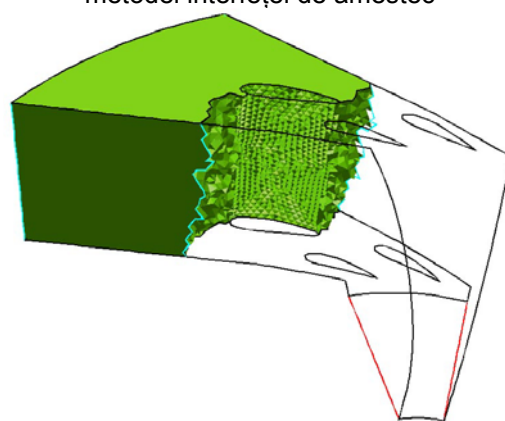
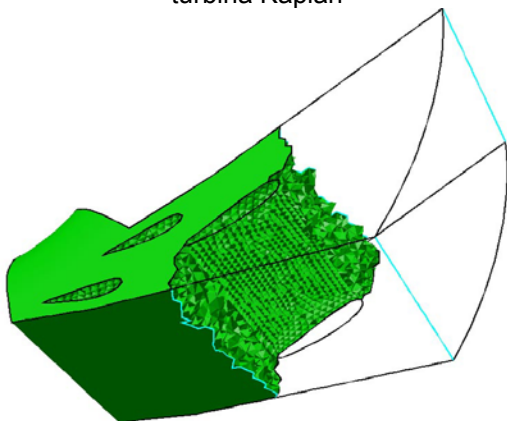
j) Forța pe paletele statorice, cu evidențierea încărcării paletelor incorect dispuse.

Figura 4. Utilizarea calculului paralel pentru analiza curgerii în distribuitorul turbinei Kaplan



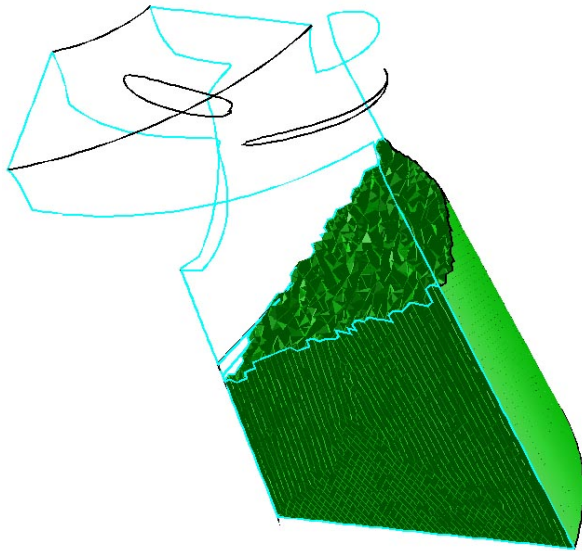
a) Descompunerea fizică a traseului hidraulic în turbina Kaplan

b) Mediere circumferențială a presiunii în cadrul metodei interfeței de amestec

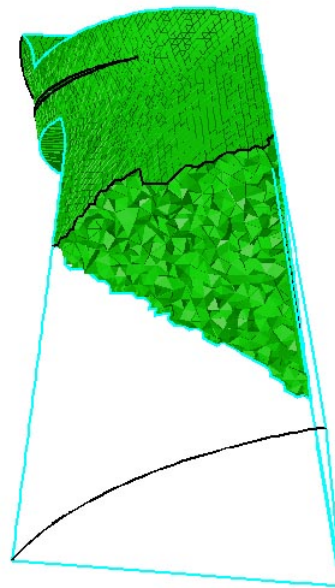
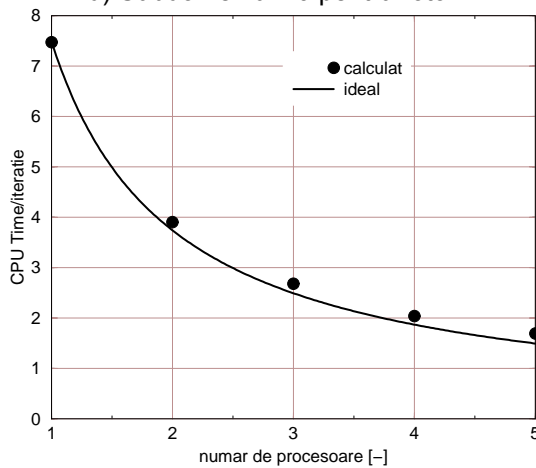


c) Subdomeniul #0 pentru distribuitor

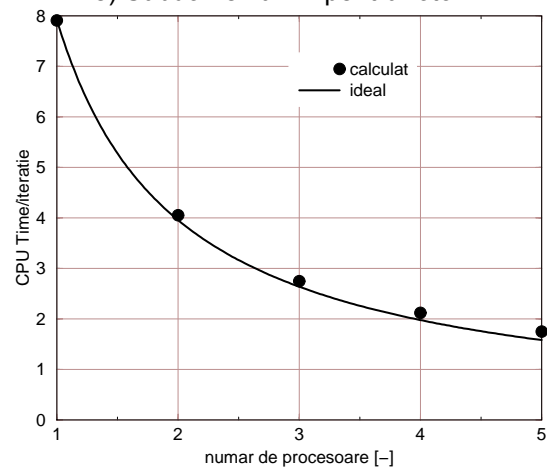
c) Subdomeniul #1 pentru distribuitor



d) Subdomeniul #0 pentru rotor

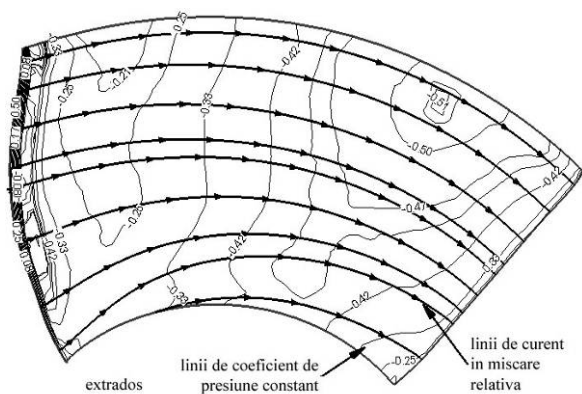


e) Subdomeniul #1 pentru rotor

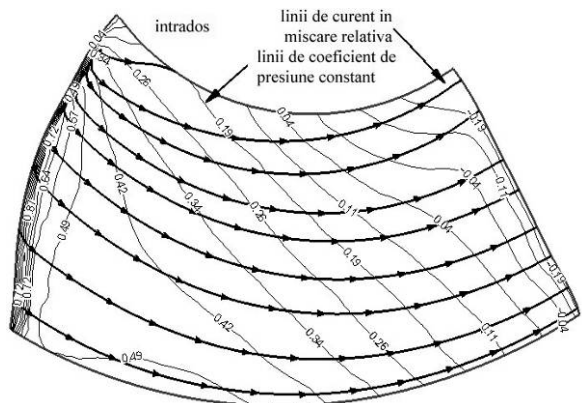


f) Scalabilitatea pentru calculul curgerii în distribuitorul turbinei Kaplan (162360 celule).

g) Scalabilitatea calculului curgerii pentru rotorul turbinei Kaplan (168943 celule).



h) Reprezentarea liniilor de curent în mișcare relativă suprapuse peste liniile coeficientului de presiune constantă pe extradosul paletii rotorice a turbinei Kaplan.



g) Reprezentarea liniilor de curent în mișcare relativă suprapuse peste liniile coeficientului de presiune constantă pe intradosul paletii rotorice a turbinei Kaplan.

Figura 5. Soluționarea curgerii în porțiunea paletată a traseului hidraulic al turbinei Kaplan folosind descompunerea fizică a domeniului (distribuitor și rotor) și metoda interfeței de amestec, respectiv descompunerea algebrică (partiționarea rețelei de discretizare) pentru calculul paralel.

În concluzie, putem aprecia că lucrarea de față prezintă la un înalt nivel științific problematica utilizării calculului paralel pentru soluționarea problemelor de curgere a fluidelor. Dezvoltările teoretice, dezvoltarea de programe originale de calcul, precum și aplicațiile de înalt nivel prezentate relevă performanțele științifice și nivelul de maturitate atins de Școala Timișoarană de Hidrodinamică. Promovarea tehnicilor moderne de modelare numerică a curgerii a fost și este continuu impulsionată de Dl. Academician prof.dr.ing. Ioan Anton, mentorul și îndrumătorul colectivului de autori. Semnificativ în acest sens este că trei dintre autori și-au elaborat tezele de doctorat sub îndrumarea domniei sale, iar al patrulea se află în programul de elaborare a tezei. Strategia promovată de-a lungul deceniilor de Academicianul Ioan Anton în direcția formării de colective multidisciplinare, constituite din cadre didactice, cercetători științifici, doctoranzi și studenți, de la Universitatea „Politehnica” din Timișoara și de la Filiala Timișoara a Academiei Române își arată din plin roadele și prin realizările colectivului de autori ai acestei cărți. Considerăm că prin publicarea în cadrul unei monografii a rezultatelor studiilor și cercetărilor echipei de cercetare a grantului va spori semnificativ accesul tuturor cercetătorilor sau utilizatorilor interesați la o sursă de informare care contribuie semnificativ la utilizarea cu maximă eficiență a resurselor de calcul deja disponibile în universități și institute de cercetare (rețele de calculatoare) pentru soluționarea unor probleme științifice și ingineresti de o reală importanță practică.

Curgerea în partea finală (aval) a traseului hidraulic al turbinelor este influențată atât de câmpul hidrodinamic de la ieșirea din rotor, cât și de geometria complexă tridimensională a tubului de aspirație. La rândul ei, curgerea în tubul de aspirație influențează comportarea globală a mașinii atât prin valoarea coeficientului de recuperare a presiunii realizat, precum și prin caracterul stabil/instabil al curgerii cu vârtej corespunzătoare. Cum transformarea energiei cinetice de la ieșire din rotor în energie potențială de presiune are loc preponderent în conul tubului de aspirație, pentru turbina Francis din Figura 6 a fost considerată o geometrie simplificată a tubului de aspirație, care să permită investigarea aspectelor fundamentale ale curgerii utilizând atât modelări analitice cât și numerice.

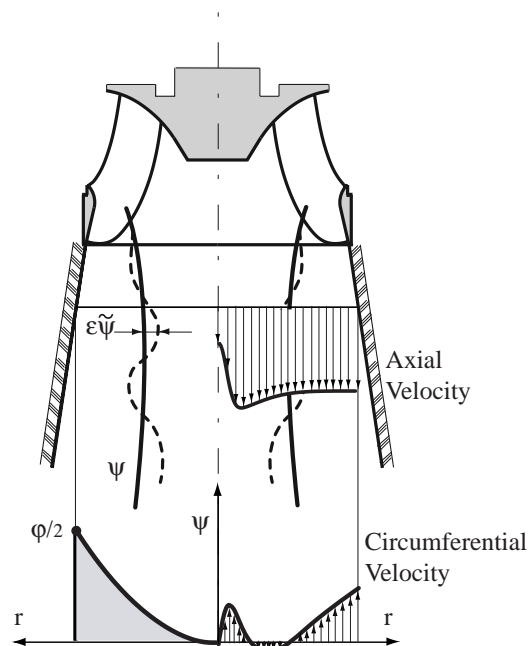


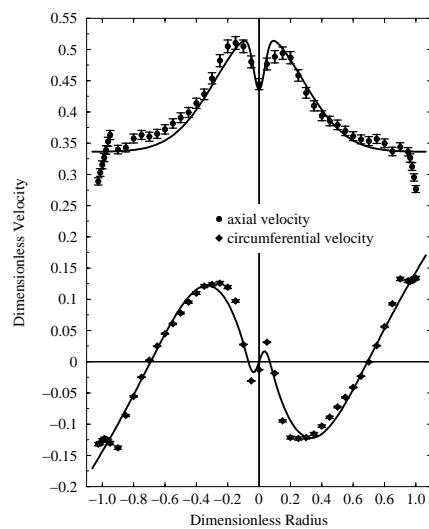
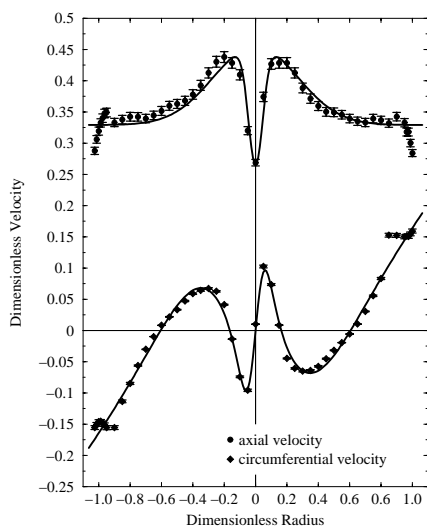
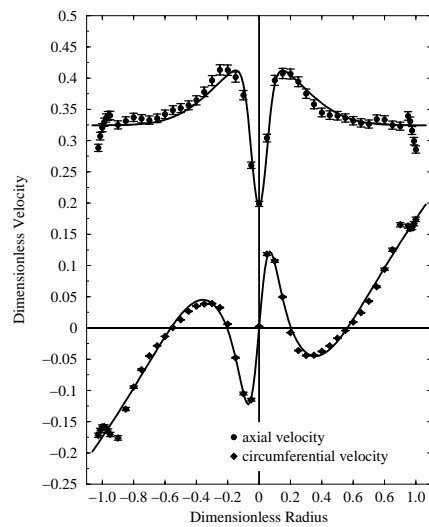
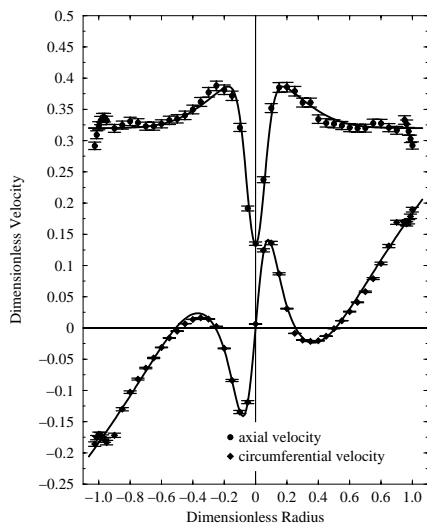
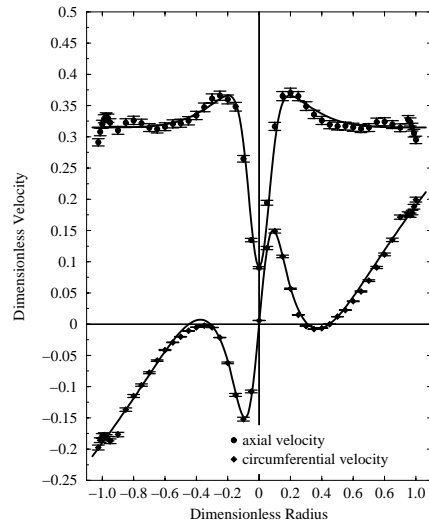
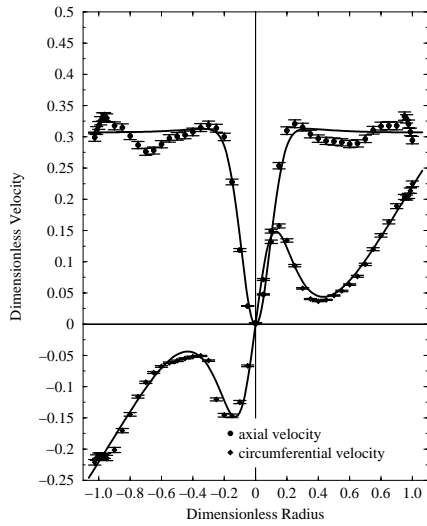
Fig. 6. Secțiune transversală prin turbina Francis, ieșire rotor – intrare tub aspirație, și secțiunea de măsură.

Pentru analiza curgerii cu vârtej în tubul de aspirație a fost dezvoltat mai întâi un model matematic, bazat pe teoria vârtejului Batchelor, capabil să reprezinte corect și precis profilele de viteză axială și tangențială la ieșirea din rotorul turbinei Francis. Relațiile de calcul originale sunt prezentate în Tabelul 1, unde se pot identifica cei opt parametri care iau în considerare vitezele unghiulare, vitezele axiale, și razele caracteristice pentru sistemul de trei vârtejuri suprapuse considerat.

Tabelul 1. Reprezentarea analitică a vitezei tangențiale și axiale la intrarea în tubul de aspirație.

$V_u(r) = \Omega_0 r + \Omega_1 \frac{R_1^2}{r} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{R_1^2}\right) \right] + \Omega_2 \frac{R_2^2}{r} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{R_2^2}\right) \right],$	$V_a(r) = U_0 + U_1 \exp\left(-\frac{r^2}{R_1^2}\right) + U_2 \exp\left(-\frac{r^2}{R_2^2}\right).$
--	---

Figura 7 prezintă profilele de viteză axială și circumferențială măsurate la Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Laboratory for Hydraulic Machines, pentru șase puncte de funcționare ale turbinei caracterizate de cădere constantă și debit variabil. Curbele din Figura 7 corespund relațiilor din Tabelul 1, cu parametrii determinați printr-o procedură specială de tipul celor mai mici pătrate dezvoltată de autori. În concluzie, modelul dezvoltat pentru reprezentarea și analiza curgerii cu vârtej la ieșirea din rotorul turbinei Francis / intrarea în tubul de aspirație oferă o modalitate simplă de analiză și evaluare a funcționării ansamblului rotor-tub de aspirație, evidențiind criteriile de stabilitate ce trebuie satisfăcute pentru evitarea variațiilor bruște (dăunătoare în practica exploatării turbinei) a coeficientului de recuperare a presiunii, și implicit a randamentului global al mașinii odată cu variația debitului turbinat.



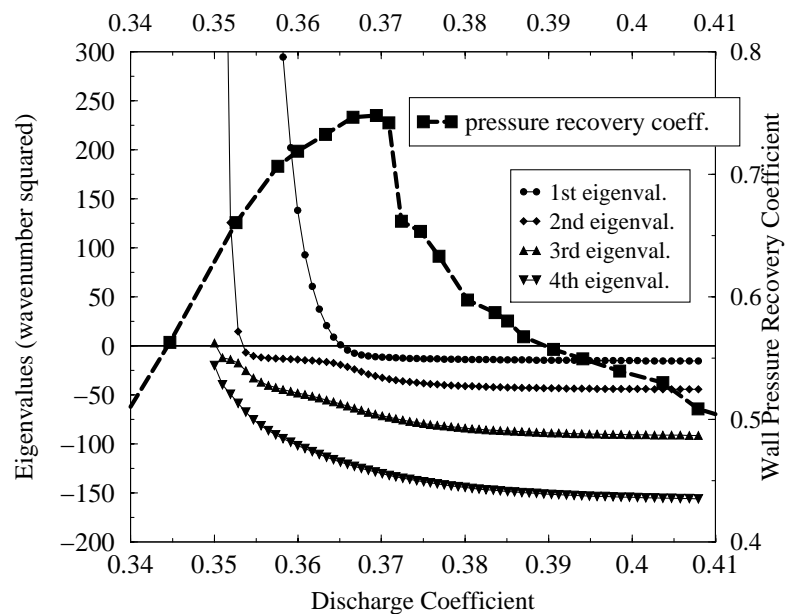


Figura 8. Corelația între valorile proprii rezultate din analiza stabilității curgerii cu vârtej și variația coeficientului de recuperare a presiunii în tubul de aspirație al turbinei hidraulice Francis.