

Суперкомпьютерные дни в России

2024

международная научная конференция

23 - 24 сентября

Towards an Adaptation of the NonLinear Harmonics Method Realized in an Unstructured Flow Solver for Simulation of Turbomachinery Problems on Supercomputers



А.П. Дубень¹, Р.А. Загитов^{2,1}, Н.В. Шуваев^{2,1}, О.В. Маракуева^{2,1} ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва Инженерный центр численных исследований, г. Санкт-Петербург



23 сентября 2024 г., г. Москва

Турбомашины: турбины и компрессоры





двухконтурный турбореактивный двигатель

- Множество ступеней (статор+ротор)
- Большое и разное количество лопаток на венце (статор или ротор)
- Множество дополнительных устройств





центробежный компрессор

центробежный компрессор

Axial Turbine Stage

Ступень осевой турбины







Ключевые эффективные технологии для турбомашин



- Mixing plane (**MP**), поверхность смешения
 - о один межлопаточный канал на венец
 - не учитывается неравномерность в окружном направлении
 - о условия окружной периодичности
- Реализовано¹ в NOISEtte

- Non-Linear Harmonics (**NLH**), нелинейный гармонический анализ
 - учет нестационарных возмущений, связанных с частотами следования лопаток соседних венцов
 - о один межлопаточный канал на венец
 - условия окружной периодичности (обобщенные условия периодичности для гармоник)



¹A.P. Duben, A.V. Gorobets, O.V. Marakueva, N.V. Shuvaev, R.A. Zagitov, S.A. Soukov. Supercomputer Simulations of Turbomachinery Problems with Higher Accuracy on Unstructured Meshes // In: Voevodin, V., Sobolev, S., Yakobovskiy, M., Shagaliev, R. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13708. Springer, Cham. pp. 356–367 (доклад на конференции Суперкомпьютерные дни в России 2022)

Нелинейный гармонический анализ (NLH)

- Для оценки основных аэродинамических характеристик узлов (массовый расход G, степень повышения полного давления π, КПД η), как правило, достаточно учета только стационарной части взаимодействия венцов. Но
 - о нельзя получить аэродинамические нагрузки на лопатки, акустику (а с NLH можно)
 - о может неточно описывать аэродинамику во внутренних неосесимметричных частях турбомашин
- Метод нелинейных гармоник (или нелинейный гармонический анализ, NLH, Non-Linear Harmonics)^{1,2} является мощным инструментом моделирования периодических нестационарных гидродинамических течений
 - о в основном используется для моделирования сложных нестационарных эффектов в турбомашинах
 - позволяет значительно сократить время проведения расчётов, по сравнению с обычными нестационарными расчётами
- NLH реализован в Numeca Cadence FINE/Turbo, работающем на структурированных сетках



напорные дуги

- Цель работы разработка и эффективная реализация метода NLH MP в рамках вершинно-центрированного конечно объемного вычислительного алгоритма NOISEtte
 - о работающего на неструктурированных сетках
 - о основанного на схемах повышенной точности

¹He, L. and Ning, W., 1998, "Efficient Approach for Analysis of Unsteady Viscous Flows in Turbomachines", AIAA Journal, Vol. 36, No. 11. ²Vilmin, S, Lorrain, E, Hirsch, C, & Swoboda, M. "Unsteady Flow Modeling Across the Rotor/Stator Interface Using the Nonlinear Harmonic Method." Proceedings of the ASME Turbo Expo 2006: Power for Land, Sea, and Air. Volume 6: Turbomachinery, Parts A and B. Barcelona, Spain. May 8–11, 2006. pp. 1227-1237. ASME.



Уравнения RANS



$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}^{C}(\mathbf{Q}) = \nabla \cdot \mathcal{F}^{D}(\mathbf{Q}, \nabla \mathbf{Q})$$

$$\mathbf{Q} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E)^T \qquad \mathcal{F}^C = \left(\mathbf{F}_x^C, \mathbf{F}_y^C, \mathbf{F}_z^C\right) = \begin{pmatrix} \mathbf{m} \\ \mathbf{u} \otimes \mathbf{m} + p \mathbf{I} \\ (E+p)\mathbf{u} \end{pmatrix} \qquad \mathcal{F}^D = \left(\mathbf{F}_x^D, \mathbf{F}_y^D, \mathbf{F}_z^D\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{q} \end{pmatrix}$$

$$p = (\gamma - 1)\rho e$$

- *р* плотность
- **m** = *ρ***u** моменты
- $\mathbf{u} = \{u_x, u_y, u_z\} \text{скорость}$
- р-давление
- е удельная внутренняя энергия
- $E = \rho \left(e + \frac{u^2}{2} + k \right)$ полная энергия на единицу объема
- $k = 0.5 u_j'^2$ кинетическая энергия турбулентности
- *γ* показатель адиабаты
- δ_{ij} символ Кронекера

•
$$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_{ij}\} = 2\mu_{\text{eff}}\left(S_{ij} - \delta_{ij}\frac{1}{3}\text{div}\mathbf{u}\right)$$

• $S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$

• $\mu_{\rm eff} = \mu + \mu_{\rm t}$ - молекулярная и турбулентная вязкость

•
$$\mathbf{q} = -\frac{\mu_{\text{eff}}}{\gamma_{\text{Pr}}} \nabla e$$
 – вектор тепловых потоков

Форма решения



Будем предполагать следующий вид решения для $\mathbf{Q} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E)^T : \mathbf{Q} = \overline{\mathbf{Q}} + \mathbf{Q}'$

$$\mathbf{Q}' = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} \left(\widetilde{\mathbf{Q}}_{k} e^{i\omega_{k}t} + \widetilde{\mathbf{Q}}_{-k} e^{i\omega_{-k}t} \right) = \sum_{k=1}^{N} \left(\mathcal{R}\{\widetilde{\mathbf{Q}}_{k}\} \cos(\omega_{k}t) - \Im\{\widetilde{\mathbf{Q}}_{k}\} \sin(\omega_{k}t) \right)$$

- $\omega_k = k \omega_{\mathrm{BPF}}$ гармоники
- $\omega_{\mathrm{BPF}} = M \cdot \Omega_r$ первая гармоника, связанная с частотой следования лопаток (BPF – blade passing frequency) соседних венцов (Ω_r – частота вращения турбомашины)
- *N* число гармоник
 - о чем больше, тем лучше
 - о определяется вычислительными возможностями

- $\widetilde{\mathbf{Q}}_k$ и $\widetilde{\mathbf{Q}}_{-k}$ комплексно сопряженые
- **Q**' описывают периодические возмущения, связанные с частотой прохождения лопаток





Уравнения для средних значений $\overline{\mathbf{Q}}$

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{Q}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}^{c}(\overline{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q}') = \nabla \cdot \mathcal{F}^{D}(\overline{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q}')$$

$$\mathcal{F}^{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{\bar{m}} \\ \mathbf{\bar{u}} \otimes \mathbf{\bar{m}} + \bar{p}\mathbf{I} \\ (\bar{E} + \bar{p})\mathbf{\bar{u}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{\overline{u'}} \otimes \mathbf{\overline{m'}} \\ \mathbf{\overline{(E' + p')u'}} \end{pmatrix} \qquad \qquad \mathcal{F}^{D} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{\overline{\sigma' \cdot u}} \end{pmatrix}$$

•
$$\overline{\mathbf{m}} = \overline{\rho \mathbf{u}}$$

• $\sigma = \{\sigma_{ij}\} = 2\mu_{\text{eff}}\left(S_{ij} - \delta_{ij}\frac{1}{3}\operatorname{div}\overline{\mathbf{u}}\right)$
• $S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i}\right)$
• $\mu_{\text{eff}} = \overline{\mu} + \overline{\mu}_{\text{t}}$

Дополнительные замыкающие соотношения:

•
$$\overline{f'g'} = 2\sum_{k=1}^{N} (\mathcal{R}\{f'\}\mathcal{R}\{g'\} + \Im\{f'\}\Im\{g'\})$$

• $\sigma' = \{\sigma'_{ij}\} = 2\mu_{\text{eff}}\left(\frac{S'_{ij}}{s_{ij}} - \delta_{ij}\frac{1}{3}\operatorname{div}\mathbf{u}'\right)$
• $S'_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}\right)$
• $\mathbf{u}' = \frac{(\rho \mathbf{u})' - \overline{\mathbf{u}}\rho'}{\overline{\rho}}$

Уравнения для пульсаций \mathbf{Q}' и амплитуд гармоник $\widetilde{\mathbf{Q}}_k$



$$\frac{\partial \mathbf{Q}'}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}^{c}(\overline{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q}') = \nabla \cdot \mathcal{F}^{D}(\overline{\mathbf{Q}}, \mathbf{Q}') \qquad \frac{\partial \widetilde{\mathbf{Q}}_{k}}{\partial t} + i\omega_{k}\widetilde{\mathbf{Q}}_{k} + \nabla \cdot \mathcal{F}^{c}(\overline{\mathbf{Q}}, \widetilde{\mathbf{Q}}_{k}) = \nabla \cdot \mathcal{F}^{D}(\overline{\mathbf{Q}}, \widetilde{\mathbf{Q}}_{k})$$

$$\mathcal{F}^{C} = \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{u}} \otimes \overline{\mathbf{m}} + \overline{\mathbf{u}} \otimes \widetilde{\mathbf{m}} + \widetilde{p}\mathbf{I} \\ (\widetilde{E+p})\overline{\mathbf{u}} + (\overline{E}+\overline{p})\widetilde{\mathbf{u}} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{F}^{D} = \begin{pmatrix} 0 \\ \widetilde{\boldsymbol{\sigma}} \\ \widetilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overline{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \widetilde{\mathbf{u}} - \widetilde{\boldsymbol{q}} \end{pmatrix}$$

•
$$\tilde{\sigma} = \{\tilde{\sigma}_{ij}\} = 2\mu_{\text{eff}}\left(\tilde{S}_{ij} - \delta_{ij}\frac{1}{3}\text{div}\tilde{\mathbf{u}}\right)$$

• $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)$

Дополнительные замыкающие соотношения:

•
$$\widetilde{(fg)} = \tilde{f}\bar{g} + \tilde{g}\bar{f}$$

• $\widetilde{\mathbf{u}} = \frac{\widetilde{\mathbf{m}} - \widetilde{\rho}\overline{\mathbf{u}}}{\overline{\rho}}$
• $\widetilde{p} = (\gamma - 1) \left[\widetilde{E} - \frac{1}{2} (\widetilde{\mathbf{m}}\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{m}\widetilde{\mathbf{u}}) \right]$



• $\mu_{\text{eff}} = \bar{\mu} + \bar{\mu}_{\text{t}}$

Особенности численной реализации NLH¹ (1/2)

- Уравнения для гармоник:
 - о разделяются на действительную и мнимую часть
 - 2⋅5⋅N общее число уравнений (N число гармоник)
 - о уравнения для различных гармоник не зависят друг от друга
- Конвективные потоки на основе схемы Роу
 - о собственные значения вычисляются через осредненные переменные
 - для вычисления предраспадных значений Q
 ^Q_{kj} и Q
 ^Q_{jk} может использоваться реконструкция с помощью схемы EBR²

 $\mathbf{F}_{jk} = \frac{1}{2} \Big(\mathcal{F}(\overline{\mathbf{Q}}_j, \widetilde{\mathbf{Q}}_{jk}) + \mathcal{F}(\overline{\mathbf{Q}}_k, \widetilde{\mathbf{Q}}_{kj}) \Big) \cdot \mathbf{n}_{jk} \\ - \mathbf{S}_{jk}(\overline{\mathbf{Q}}_j) \left| \overline{\mathbf{A}}_{jk}(\overline{\mathbf{Q}}_j) \right| \mathbf{S}_{jk}^{-1}(\overline{\mathbf{Q}}_j) (\widetilde{\mathbf{Q}}_{kj} - \widetilde{\mathbf{Q}}_{jk})$

• Вязкие потоки – в рамках реализованной в NOISEtte схемы³

× Z Y R



 ¹A.P. Duben, R.A. Zagitov, N.V. Shuvaev. Nonlinear Harmonics Method for Supercomputer Simulations of Fluid Dynamics in Turbomachines with Higher Accuracy on Unstructured Meshes // Lobachevskii Journal of Mathematics, No. 8 2024
 ²Abalakin I, Bakhvalov P, Kozubskaya T. Edge-based reconstruction schemes for unstructured tetrahedral meshes. Internat J Numer Methods Fluids 2016;81:331–56

³Bakhvalov P, Surnachev M. Method of averaged element splittings for diffusion terms discretization in vertex-centered framework. J Comput Phys 2022;450:110819.



Особенности численной реализации^{1,2} NLH

- Граничные условия
 - о вход-выход: схема Роу, $\widetilde{\mathbf{Q}}_{jk} = 0$, $\widetilde{\mathbf{Q}}_{kj}$ из внутренней точки
 - о условия проскальзывания (SLIP) и прилипания (NOSLIP) как в NOISEtte
- Обобщенные условия периодичности для гармоник (со сдвигом по фазе)
- Интегрирование по (псевдо) времени явная схема Рунге-Кутты
 - на внутренних итерациях одновременно решаются уравнения для средних и для гармоник (аналогично [He&Ning, 1998])
- Интегрирование по (псевдо) времени неявная схема BDF1
 - о сначала шаг по средним величинам, потом по гармоникам
 - для гармоник используется солвер бисопряженных градиентов с предобуславливателем такой же, как и для средних переменных
 - о блочная матрица с блоком 10×10
- Распараллеливание (пока) только на CPU гибридное MPI+OpenMP

 ¹A.P. Duben, R.A. Zagitov, N.V. Shuvaev. Nonlinear Harmonics Method for Supercomputer Simulations of Fluid Dynamics in Turbomachines with Higher Accuracy on Unstructured Meshes // Lobachevskii Journal of Mathematics, No. 8 2024
 ²A.P. Duben, R.A. Zagitov, N.V. Shuvaev, O.V. Marakueva. Towards an adaptation of the nonlinear harmonics method realized in an unstructured flow solver for simulation of turbomachinery problems on supercomputers // Lecture Notes in Computer Science, 2024



Матрица: диагональный блок



Матрица: внедиагональный блок





NLH на ротор-статор интерфейсах



- Осредненные переменные по технологии Mixing Plane (MP)
 - о МР одна на ротор-статор интерфейс
- Функциональность МР используется для NLH
 - о реализация близкая к [1]
- На каждой итерации по времени
 - \circ разложение в ряд Фурье по (своим) окружным гармоникам ω_k с каждой из сторон, но для одних и тех же полос
 - о формирование предраспадных значений для гармоник слева (с соседнего венца) и справа (из узла)
 - о солвер Роу для вычисления потоков

¹T. Chen, P. Vasanthakumar, and L. He, "Analysis of unsteady blade row interaction using nonlinear harmonic approach,"AIAA J. of Propulsion and Power 17 (3), 651–658 (2001).





Тестирование MP: Rotor67 (1/2)



Совершенный газ: (С_p- const, γ - const) Модель турбулентности: SST RPM = 16 043 мин⁻¹ Радиальный зазор 0.1016 мм Ротор: 22 лопатки

ГУ на входе:

 $P_0 = 101$ κΠa $T_0 = 288$ K $V_z / |V| = 1$

ГУ на выходе: Варьирование Р₂ или массового расхода G

Сетка: 3 млн. узлов

Эксперимент: [Strazisar et al., 1989]



Strazisar A.J., Wood J.R., Hathaway M.D., Suder K.L. Laser anemometer measurements in a transonic axial-flow fan rotor // National Aeronautics and Administration, Langley research center. Hampton. Virginia. NASA. TP-2879. 1989. 214 p

NLH: тестирование на Rotor67





NLH: тестирование на Rotor67





23 сентября 2024 г., г. Москва

NLH: тестирование на компрессоре ТВЗ-117

- 4 ступени 12-ступенчатый осевой компрессор вертолетного двигателя ТВЗ-117 с отмасштабированным числом лопаток¹
 - о на входе *P*_t=101325 Па, *T*_t=288.15 К
 - о Pout на выходе варьируется
 - о число лопаток 40 на ВНА и на 2 первых роторах, 60 на остальных венцах
 - о RPM=19500 об/мин
 - о сетка 12.6 млн. узлов





¹Д.В. Ворошнин, О.В. Маракуева, А.С. Муравейко. Моделирование нестационарных явлений в осевом компрессоре // Мат. моделирование, 2019 год, том 31, номер 10, стр. 87-97



NLH: тестирование на компрессоре ТВЗ-117





¹Д.В. Ворошнин, О.В. Маракуева, А.С. Муравейко. Моделирование нестационарных явлений в осевом компрессоре // Мат. моделирование, 2019 год, том 31, номер 10, стр. 87-97

23 сентября 2024 г., г. Москва

NLH: распараллеливание



OpenMP на Rotor67 (3.78 млн. узлов)

МРІ на ТВЗ (12.6 млн. узлов)



Тестирование

- AMD EPYC 7542 32-cores, 8×DDR4-3200 205 ГБ/с
- Intel Xeon Gold 5218, 16С, 6×DDR4-2666 128 ГБ/с

NLH: производительность



- Дальнейшая задача перенос на GPU
 - о скорость вычислений определяется скоростью чтения данных из RAM
 - о основной «потребитель» RAM матрица (25-30% для основных переменных с блоком 5×5)
- Тестирование на Rotor67 (относительно MP, без NLH, сетка 3.78 млн. узлов., 2 интерфейса)
 - 25 шагов по неявной схеме
 - \circ 14 GB RAM, ~26 секунд



Тестирование – на AMD EPYC 7542 32-cores CPU 8xDDR4-3200 205 ГБ/с



23 сентября 2024 г., г. Москва

NLH: производительность

- Улучшения по производительности
 - о матрица: блок 10×10=100 → 5×5=25+1=26
 - о специальные кернелы
 - для матрично-векторного произведения (SpMV)
 - для предобуславливателя (SpMV и обращение блока)



14

12

10

10



Потребление оперативной памяти

NOISEtte^{1,2} для турбомашин сентябрь 2024

- Модели, методы, схемы и алгоритмы, реализованные в программном комплексе NOISEtte, ориентированные
 - о на RANS и вихреразрешающее моделирование
 - о задач внутренней и внешней аэродинамики и аэроакустики
 - о на различных системах (от персоналки до суперкомпьютера, CPU, GPU)
 - о на неструктурированных смешанных сетках
- RANS, LES и гибридные RANS-LES подходы
 - в том числе, с учетом ламинарно-турбулентного перехода (дифференциальные и алгебраические (GPU) модели на основе SST)
- Интегрирование по времени
 - о неявный метод BDF1 и BDF2 (солвер BiCGSTAB)
 - о с предобуславливателями³ GPU
 - FAS-MG ускоритель⁴ GPU

- Параллельный алгоритм многоуровневое MPI+OpenMP+OpenCL распараллеливание
 - задействование до ~10⁵ СРU ядер, до ~100 GPU без ощутимой потери эффективности
 - о все «продуктовые» методы и модели на GPU

¹Abalakin, I. V., Bakhvalov, P. A. ., Bobkov, V. G., Duben, A. P., Gorobets, A. V., Kozubskaya, T. K., Rodionov, P. V., & Zhdanova, N. S. . (2024). NOISEtte CFD&CAA Supercomputer Code for Research and Applications. Supercomputing Frontiers and Innovations, 11(2), 78–101.

²Andrey Gorobets, Pavel Bakhvalov (2022). Heterogeneous CPU+GPU parallelization for high-accuracy scale-resolving simulations of compressible turbulent flows on hybrid supercomputers Computer Physics, Vol 271, 108231

³Магомедов А. Р., Горобец А. В. Гетерогенная реализация предобуславливателей на основе метода Гаусса–Зейделя для разреженной блочной матрицы. Труды «Прикладная математика и информатика» 2023. 72. 38–45.

⁴A. V. Gorobets. An Approach to the Implementation of the Multigrid Method with Full Approximation for CFD Problems // Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2023, Vol. 63, No. 11, pp. 2150–2161.





• Технологии для турбомашин:

o MP

 \bigcirc

NLH





- Разработана технология NLH для нестационарного моделирования турбулентных течений в газотурбинных двигателях
 - о реализовано на CPU (MPI+OpenMP параллельность)
 - о проведена оптимизация

В процессе

• Тестирование NLH на реальных задачах

Планы на ближайшее будущее

- Перенос функциональности NLH на GPU
- Мультигрид для NLH
- NLH: «псевдо ранг 2» (overclocking в Numeca Fine/Turbo)

• Работа выполнена в рамках проекта **РНФ № 21-71-10100**

- Расчеты проводились на оборудовании:
 - о ЦКП ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

