Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik

Kurzfassung der Habilitationsschrift

Dr.–Ing. Thomas Frank

Chemnitz, 15. Oktober 2001

Viele der in Natur und Technik ablaufenden Strömungsvorgänge sind durch die Koexistenz zweier oder mehrerer Phasen gekennzeichnet. Diese sogenannten Zwei– oder Mehrphasensysteme zeichnen sich durch ein hohes Maß an Komplexität aus. Das Erkennen von Gesetzmäßigkeiten in diesen komplexen Systemen ist eine Grundvoraussetzung für ein umfassendes Verständnis von Prozeßabläufen in solchen Systemen und ermöglicht erst ihre gezielte Beeinflussung, die Optimierung von Prozeßabläufen oder die Entwicklung neuer innovativer Produkte.

Verbesserte numerische Verfahren für die Strömungsberechnung von Ein– und Mehrphasenströmungen sowie die rasante Entwicklung auf dem Gebiet der Rechentechnik mit dem damit verbundenen schnellen Anstieg an verfügbarer Rechenleistung haben dazu geführt, daß die numerische Strömungsmechanik (CFD) zu einem weithin anerkannten Forschungs– und Entwicklungswerkzeug nicht nur in der Wissenschaft, sondern auch in der industriellen Anwendung geworden ist. Dabei wird die Qualität der von der numerischen Simulation bereitgestellten Strömungsergebnisse und damit die Leistungsfähigkeit von CFD maßgeblich durch die Art und Weise der mathematisch–physikalischen Modellierung beeinflußt. Die in das Berechnungsverfahren eingehenden mathematischen Teilmodelle entscheiden über den damit erreichbaren Grad der detaillierten Berücksichtigung von für den Strömungsverlauf relevanten physikalischen Phänomenen und Wechselwirkungen. In einem ständigen Wechselspiel aus experimentellen Untersuchungen an physikalischen Detailphänomenen, deren mathematisch–physikalischer Modellierung und der Validierung numerischer Berechnungsergebnisse anhand speziell durchgeführter Strömungsexperimente werden diese Modellvorstellungen ständig weiterentwickelt und hinsichtlich ihrer qualitativen und quantitativen Vorhersagegenauigkeit und Zuverlässigkeit verbessert.

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung und Anwendung eines auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen einsatzfähigen numerischen Berechnungsverfahrens für dreidimensionale, disperse, turbulente Fluid–Partikel–Strömungen auf dem Gebiet der Strömungs– und Verfahrenstechnik. Dazu wurde das Euler–Lagrange–Verfahren verwendet, bei dem es sich um das wohl am weitesten verbreitete numerische Verfahren zur Berechnung turbulenter Mehrphasenströmungen handelt. Es basiert auf der Berechnung der kontinuierlichen Phase auf der Grundlage der zeitlich gemittelten Navier–Stokes–Gleichungen (RANS–Gleichungen) unter Hinzunahme geeigneter Turbulenzmodelle zur Schließung des Gleichungssystems. In der vorliegenden Arbeit wurde hierfür das Standard–k–ε–Turbulenzmodell verwendet. Das numerische Berechnungsverfahren für die Fluidströmung basiert auf einer Diskretisierung der Transport– und Erhaltungsgleichungen nach der Finite–Volumen–Methode für randangepaßte, nichtorthogonale, blockstrukturierte numerische Gitternetze unter Verwendung einer nicht–versetzten Anordnung aller Variablenwerte in den Zellmittelpunkten der Kontrollvolumina ('colocated grids'). Zur Lösung der resultierenden linearen Gleichungssysteme für die einzelnen Variablen wurde die SIP–Methode verwendet, und die Lösung des Gesamtsystems unter Berücksichtigung der Druck–Geschwindigkeits–Kopplung erfolgte mit Hilfe eines modifizierten SIMPLE–Verfahrens. Zur Konvergenzbeschleunigung auf großen Gitternetzen wurden Mehrgitterverfahren angewendet.

Nach einleitenden Betrachtungen zur Klassifizierung disperser Mehrphasenströmungen, der Definition allgemein charakterisierender Zustandsgrößen und einer Betrachtung der grundlegenden numerischen Berechnungsverfahren für Ein– und Mehrphasenströmungen befaßt sich ein wesentlicher Teil dieser Arbeit mit der Modellierung unterschiedlicher physikalischer Phänomene in Fluid–Partikel–Strömungen unter dem Paradigma der Lagrange'schen Betrachtungsweise der Partikelbewegung. Die disperse Phase wird als ein Kollektiv von Einzelpartikeln betrachtet. Aus der Berechnung einer Vielzahl von Partikeltrajektorien im Fluidströmungsfeld werden durch eine geeignete Ensemblemittelung Kenngrößen zur Beschreibung charakteristischer Eigenschaften der dispersen Phase abgeleitet. Für die betrachtete Klasse von dispersen Fluid–Partikel–Strömungen, bei denen die disperse Phase aus starren, kugelförmigen Partikeln besteht und in denen die Partikeldichte um ein Vielfaches größer ist als die Fluiddichte ($\rho_P \gg \rho_F$), werden die wesentlichen Aspekte für deren Modellierung und Berechnung aufgezeigt. Die näher ausgeführten Modelle liefern eine quantitative Beschreibung der auf ein kugelförmiges Einzelpartikel im Strömungsfeld wirkenden Kräfte und Momente und führen zur Formulierung der Partikelbewegungsgleichungen, die eine numerische Berechnung der Partikelbewegung ermöglichen. Zusätzliche Teilmodelle dienen der Charakterisierung der Partikel–Wand–Wechselwirkung mit glatten und rauhen Wänden, der Berücksichtigung von Partikel–Partikel–Stoßvorgängen in dispersen Mehrphasenströmungen mit höherer Konzentration der dispersen Phase, der Wechselwirkung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase aufgrund von Impuls–, Masse– und Wärmeübertragung sowie der Wechselwirkung zwischen Fluidturbulenz und Partikelbewegung. Für die Modelle wird im einzelnen zunächst der Stand des Wissens zusammengefaßt. Des weiteren werden Eigenentwicklungen und spezielle Eigenschaften der Implementierung in dem vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten Euler–Lagrange–Verfahren MISTRAL/PartFlow–3D im jeweiligen Zusammenhang diskutiert.

Wie die Komplexität der möglichen Wechselwirkungen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase in dispersen Mehrphasenströmungen zeigt, gehört deren Berechnung mit dem Euler–Lagrange–Verfahren neben der Large–Eddy–Simulation (LES) und der Direkten Numerischen Simulation (DNS) turbulenter Fluidströmungen mit zu den rechenintensivsten Aufgabenstellungen der modernen numerischen Strömungsmechanik. Vergleicht man die Berechnung einer Einphasenströmung auf der Grundlage der RANS–Gleichungen und einem Standard–k–ε–Turbulenzmodell mit einer auf der gleichen Grundlage basierenden numerischen Simulation einer dispersen Fluid–Partikel–Strömung mit Zwei–Wege– oder sogar Vier–Wege–Kopplung zwischen disperser und kontinuierlicher Phase, so steigt der Speicher– und Rechenzeitbedarf gegenüber der Einphasenströmung mit gleicher geometrischer Komplexität des Strömungsgebietes um annähernd das 70- bis 150fache an. Nimmt die

Komplexität und der Detailreichtum der strömungsmechanischen Aufgabenstellung zu, so sind bei dem derzeitigen Stand der Technik Vereinfachungen bei den eingesetzten Modellen in aller Regel unausweichlich. Der für die Simulation disperser Mehrphasenströmungen in technischen und industriellen Prozessen resultierende Ressourcenbedarf zeigt die klare Notwendigkeit für die Nutzung der leistungsfähigsten Supercomputer für diese Aufgabenstellungen auf, bei denen es sich ausschließlich um proprietäre Parallelrechner, massiv parallele Clustercomputer/Constellations und parallele Vektorrechner handelt. Neben der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computerhardware ist jedoch auch die Entwicklung hocheffizienter paralleler Berechnungsverfahren dringend erforderlich, die in der Lage sind, das Potential dieser modernen Supercomputer auch tatsächlich für die numerische Simulation komplexer disperser Mehrphasenströmungen zu nutzen.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit lag daher in der Entwicklung, Untersuchung und vergleichenden Bewertung von Parallelisierungsverfahren für das Euler–Lagrange–Verfahren zur Berechnung von dispersen Mehrphasenströmungen. Dabei handelt es sich um ein Forschungsgebiet, das sich noch am Anfang seiner Entwicklung befindet. Zuvor von anderen Autoren entwickelte Parallelisierungsmethoden für das Lagrange'sche Berechnungsverfahren basieren im wesentlichen auf Shared–Memory–Ansätzen, Quasi–Seriellen Verfahren oder statischer Gebietszerlegung (SDD) und sind somit in ihrer Einsetzbarkeit und Skalierbarkeit auf Rechnerarchitekturen mit relativ geringer Parallelität und auf weitgehend homogene Mehrphasenströmungen mit geringer Komplexität der Phasenwechselwirkungen beschränkt.

In dem vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten parallelen Euler–Lagrange–Verfahren MISTRAL/PartFlow–3D wird für die Parallelisierung des Finite–Volumen–Verfahrens zur Berechnung der Fluidströmung das etablierte Verfahren der Gebietszerlegung im Raum angewendet. Dabei wird das numerische Gitternetz in hinsichtlich der Anzahl der Kontrollvolumen möglichst gleich große Partitionen aufgeteilt und jedem Prozessor der Parallelrechnerpartition wird ein Teilgebiet zur Strömungsberechnung statisch, d. h. für den gesamten Verlauf des Berechnungsprozesses, zugeordnet. Da der auf jeden Prozessorknoten entfallende Berechnungsaufwand für die Lösung des gekoppelten Systems von Transport– und Erhaltungsgleichungen direkt proportional zur Anzahl der Kontrollvolumen ist, kann eine optimale Aufteilung des Gitternetzes in einem für jede Rechnung einmalig auszuführenden Preprozessor–Schritt ausgeführt werden. Die Verwendung einer geeigneten Datenstruktur für die Geometrie– und Strömungsdaten erlaubt im Multiblock–Verfahren die Anordnung von mehr als einem Gitterblock pro Prozessor und führt so zu einer verbesserten Lastverteilung und einer erhöhten Flexibilität des Verfahrens.

Für die parallele Simulation der Partikelbewegung auf der Basis der Lagrange'schen Partikeltrajektorienberechnung wurden vom Autor zwei Parallelisierungsverfahren entwickelt. Das auf einer statischen Gebietszerlegung basierende SDD–Verfahren realisiert eine abschnittsweise Zerlegung und Berechnung einer Partikeltrajektorie, wobei die Berechnung eines Partikeltrajektoriensegmentes jeweils auf dem Prozessor erfolgen muß, dem der Gitterblock mit den zur Berechnung benötigten Geometrie– und Fluidströmungsdaten auf grund der für den Navier–Stokes–Löser realisierten Gebietszerlegung statisch zugeordnet ist. Aus der a priori nicht bekannten Konzentrationsverteilung der dispersen Phase im Strömungsgebiet ergeben sich bei diesem Vorgehen über die Prozessoren des Parallelrechnersystems sehr ungleich verteilte Rechenlasten, die für viele Anwendungsfälle zu einer geringen parallelen Effizienz dieses Verfahrens führen.

Im Gegensatz dazu wird bei dem vom Autor neu entwickelten DDD–Verfahren (**D**ynamic **D**omain **D**ecomposition) die Zuordnung der Gitterblock– und Strömungsfeldinformationen zu den Rechenprozessen auf dynamische Weise vorgenommen. Die dynamische Verteilung von Gitternetzpartitionen erfolgt zur Laufzeit des Verfahrens durch sogenannte Service–Prozesse. Mit dem DDD–Verfahren kann somit ein Trajektoriensegment auf einem bestimmten Gitterblock der Strömungsgeometrie durch einen beliebigen Rechenprozeß des MIMD–Parallelrechnersystems berechnet werden. Ist die Rechenlast für einen Gitterblock sehr hoch, so können mehrere Rechenprozesse zur gleichen Zeit diese Rechenlast bearbeiten. Im Extremfall können alle Prozessoren des Systems auf dem gleichen Gitterblock an der Berechnung der Partikelbewegung teilnehmen. Diese dynamische Lastverteilung des DDD–Verfahrens führt in vielen Fällen zu einer deutlichen Reduzierung der Gesamtausführungszeiten einer Mehrphasenströmungsberechnung mit dem Euler–Lagrange–Verfahren. Die Gesamtzahl der für diese Parallelisierungsmethode benötigten Prozesse ist jedoch größer als im SDD–Verfahren. Zudem ist eine Erhöhung des Kommunikationsaufkommens gegenüber dem SDD–Verfahren unvermeidbar.

Zur Untersuchung der Leistungsfähigkeit der beiden Parallelisierungsverfahren wurden in dieser Arbeit Gas–Feststoff–Strömungen in zwei verschiedenen dreidimensionalen Testgeometrien betrachtet. Um die Performance der parallelen Algorithmen für unterschiedliche strömungsmechanische Anwendungsfälle zu untersuchen, wurden die Testfälle so gewählt, daß es sich bei dem ersten Testfall um eine Fluid–Partikel–Strömung mit weitgehend homogener Partikelkonzentrationsverteilung handelt, während bei dem zweiten Testfall Partikelseparation und Strähnenbildung zu beobachten sind. Für die vergleichende Untersuchung der Parallelisierungsverfahren wurden sowohl hierarchische Gitternetze mit verschiedener Gitternetzauflösung als auch verschiedene Parallelrechnerarchitekturen eingesetzt. Im Ergebnis der durchgeführten numerischen Untersuchungen konnten die folgenden Eigenschaften der beiden entwickelten Parallelisierungsmethoden für das Euler–Lagrange–Verfahren gezeigt werden:

1. Die Ergebnisse unterstreichen die Bedeutung der Lastbalancierung zwischen den Prozessoren einer Parallelrechnerpartition für eine gute parallele Performance des Gesamtverfahrens. Sowohl das Gebietszerlegungsverfahren für die

Berechnung der Fluidströmung als auch das SDD–Verfahren für die Lagrange'sche Partikeltrajektorienberechnung sind stark von der Art der Gitterpartitionierung abhängig. Die Effizienz des SDD–Verfahrens ist zudem stark von den Strömungsverhältnissen, insbesondere von der Konzentrationsverteilung der dispersen Phase innerhalb der Strömungsgeometrie, beeinflußt.

2. Die Vorteile des DDD–Verfahrens gegenüber dem SDD–Verfahren bestehen insbesondere in:

   (a) Reduzierung der Gesamtberechnungszeit für eine Vielzahl von Anwendungsfällen;

   (b) Unabhängigkeit der parallelen Performance des Parallelisierungsverfahrens vom Charakter der zu berechnenden Fluid–Partikel–Strömung;

   (c) Realisierung einer dynamischen Lastverteilung unter den Prozessoren einer MIMD–Parallelrechnerpartition zur Laufzeit des numerischen Berechnungsverfahrens; Wirksamkeit dieser dynamischen Lastverteilung auch auf heterogenen Parallelrechnersystemen und Kommunikationsnetzwerken;

   (d) Unabhängigkeit der parallelen Effizienz des Verfahrens von der konkreten Art und Weise der Aufteilung des numerischen Gitternetzes auf die Prozessoren des Parallelrechnersystems.

3. Das auf der Basis von MPI und explizitem Message Passing entwickelte Berechnungsverfahren ist nahezu ohne Anpassungen auf unterschiedlichsten Parallelrechnerarchitekturen lauffähig. Das Verfahren weist dadurch eine sehr hohe Portabilität und Flexibilität in der Nutzung von Rechenressourcen auf, die insbesondere von Parallelisierungsverfahren, die auf der Anwendung von parallelisierenden Compilern oder Shared–Memory–Ansätzen basieren, prinzipbedingt nicht erreicht wird.

4. Die parallele Performance der Parallelisierungsverfahren ist stark von den Charakteristika des Kommunikationsnetzwerkes des Parallelrechnersystems abhängig. Für das Erzielen einer guten parallelen Performance für das phasengekoppelte Euler–Lagrange–Verfahren auf massiv parallelen Rechnern mit $N_P \geq 64$ Prozessoren sind Kommunikationsnetzwerke mit kurzen Latenzzeiten und hoher Kommunikationsbandbreite eine unverzichtbare Voraussetzung.

Im Anschluß an die Darstellung und Diskussion der verschiedenen Parallelisierungsverfahren wird die Anwendung des vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten parallelen Euler–Lagrange–Verfahrens MISTRAL/PartFlow–3D auf drei konkrete disperse Gas–Feststoff–Strömungen in der Energie– und Verfahrenstechnik gezeigt. Das Verfahren wird zur Untersuchung der Wirbel–Senken–Strömung und der Partikelabscheidung in Standardzyklonen und symmetrischen Doppelzyklonen unterschiedlicher Bauart eingesetzt. Eine weitere Anwendung zeigt die Berechnung einer Gas–Kohlestaub–Strömung in Rohrleitungssystemen und Strömungsteilern der Kraftwerksindustrie. Die numerischen Berechnungen erlauben eine detaillierte Analyse der Fluidströmung und des Bewegungsverhaltens der Partikelphase in derart komplexen Strömungsgeometrien verfahrenstechnischer Apparate und Anlagen. Die numerische Simulation ermöglicht zudem Rückschlüsse auf das Betriebsverhalten der untersuchten Apparate und auf eventuell notwendige Veränderungen in deren konstruktiver Gestaltung zur Verbesserung der verfahrenstechnischen Prozesse. Anhand der gezeigten Anwendungsfälle werden weitere Aspekte der numerischen Simulation disperser Mehrphasenströmungen auf HPC–Rechnerarchitekturen diskutiert.

Die Arbeit faßt langjährige Forschungs– und Entwicklungsarbeiten des Autors und seiner Forschungsgruppe an der TU Chemnitz zusammen. Mit dem vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten, vollständig parallelisierten Euler–Lagrange–Verfahren MISTRAL/PartFlow–3D mit dynamischer Lastbalancierung steht ein numerisches Berechnungsverfahren zur Verfügung, mit dem dreidimensionale, disperse Mehrphasenströmungen mit höheren Konzentrationen der dispersen Phase und daraus resultierenden starken Phasenwechselwirkungen (Vier–Wege–Kopplung) auch für komplexere Strömungsgeometrien und Anwendungen effektiv untersucht werden können. Als ein hinsichtlich der Programmierschnittstellen offenes Verfahren gestattet es die nahezu uneingeschränkte Erweiterung der physikalischen Modelle und damit die Anpassung des numerischen Verfahrens an bisher noch nicht berücksichtigte strömungsmechanische Anwendungsfälle. Das Berechnungsverfahren stellt darüber hinaus die Grundlage für das von Pachler & Frank entwickelte instationäre Euler–Lagrange–Verfahren (simultaneous particle tracking) für zeitabhängige Fluid–Partikel–Strömungen dar.