

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

Habilitationsschrift

Dr.–Ing. Thomas Frank

eingereicht bei der

Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik

Technische Universität Chemnitz

Oktober 2001

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner 8-jährigen Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter und Leiter der Forschungsgruppe „Numerische Methoden für Mehrphasenströmungen“ an der Professur Technische Thermodynamik der Fakultät Maschinenbau und Verfahrenstechnik der Technischen Universität Chemnitz. Zugleich basiert diese Arbeit in wesentlichen Teilen auf Forschungsarbeiten, die von mir im Zeitraum von 1996 bis 2001 als Teilprojektleiter im DFG-Sonderforschungsbereich 393¹ mit Unterstützung meiner Mitarbeiter durchgeführt worden sind.

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. H. Herwig, der mir an der Professur Technische Thermodynamik die Möglichkeit und alle nötigen Freiheiten gegeben hat, meinen Forschungsaktivitäten nachzugehen, mich aktiv an der interdisziplinären Arbeit des DFG-Sonderforschungsbereiches 393 zu beteiligen und eine international anerkannte Forschungsgruppe aufzubauen. Des Weiteren bedanke ich mich bei Prof. Dr. B. Platzer für sein Interesse an dieser Arbeit und die wohlwollende und ermunternde Begleitung während des gesamten Entstehungsprozesses.

In einem Zeitalter, in dem die Wissenschaft nicht mehr von dem Wirken einiger weniger Universalgelehrter geprägt ist, wäre diese Arbeit selbstverständlich nicht realisierbar gewesen ohne eine große Anzahl von Personen, die mit hohem persönlichen Einsatz von Zeit, Wissen, Tatkraft und Ideen an der Durchführung mitgewirkt haben. Insbesondere bedanke ich mich bei den Mitarbeitern meiner Forschungsgruppe Dipl.-Ing. Ingvelde Schulze (geb. Bräuer), Dr. E. Wassen, Dr. Q. Yu, Dr. K. Bernert, Dr. H. Schneider und Dipl.-Ing. K. Pachler für Ihre langjährige konstruktive Mitarbeit an dem parallelisierten Berechnungsverfahren und CFD-Programmsystem MISTRAL/PartFlow-3D, für die unzähligen problemspezifischen Diskussionen und die Unterstützung, die wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders hervorzuheben ist auch das freundschaftliche und kollegiale Arbeitsverhältnis innerhalb der Forschungsgruppe und im DFG-Sonderforschungsbereich, dessen Sprecher Prof. Dr. A. Meyer ebenfalls mein besonderer Dank für die langjährige Unterstützung und Zusammenarbeit gilt.

An dieser Stelle möchte ich mich auch nochmals bei Prof. Dr. M. Perić vom Institut für Schiffbau der Universität Hamburg bedanken, der uns im Jahre 1994 die Ur-Version seines dreidimensionalen Strömungslösers FAN-3D überließ und in der Folgezeit für Fragen, Diskussionen und fachliche Konsultationen stets zur Verfügung stand.

Ferner möchte ich allen Mitarbeitern der SIVUS Gesellschaft für Verfahrens-, Umwelt- und Sensortechnik gGmbH, An-Institut der TU Chemnitz, allen früheren Mitarbeitern der Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen und allen Mitgliedern und Mitarbeitern des DFG-Sonderforschungsbereiches 393 für Ihre langjährige Unterstützung und die zahlreichen fachlichen Diskussionen danken. Insbesondere bedanke ich mich bei dem Geschäftsführer der SIVUS gGmbH Dipl.-Phys. G. Trommer, dessen tatkräftige Unterstützung bei der Durchführung von

¹DFG-Sonderforschungsbereich 393 „Numerische Simulation auf Massiv Parallelen Rechnern“, Teilprojekt D2: „Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation 3-dimensionaler, stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen“

EU-Forschungsprojekten die Ausstattung der Forschungsgruppe mit modernster Rechentechnik ermöglicht hat.

Die finanziellen Mittel zur Durchführung dieser Arbeit bzw. für die notwendige moderne wissenschaftlich-technische Ausstattung der Forschungsgruppe wurden teilweise vom Sächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK) des Freistaates Sachsen, der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und der Europäischen Union (EU) bereitgestellt, wofür ich mich ebenfalls bedanke.

Mein ganz besonderer Dank gilt schließlich meinen Eltern, die mein mathematisch-technisches Interesse von früh an befördert haben und meine berufliche Laufbahn ermöglicht haben. Mein größter Dank gebührt meiner Frau Kerstin, meinen Geschwistern sowie unseren Verwandten und Freunden, die durch Ihre Geduld, Ermutigung und Ansporn wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
Inhaltsverzeichnis	iii
Tabellenverzeichnis	ix
Abbildungsverzeichnis	xi
Symbolverzeichnis	xvii
Lateinische Symbole	xvii
Griechische Symbole	xx
Indizes und andere Formelzeichen	xxi
Abkürzungen	xxii
Zusammenfassung	1
1 Klassifizierung und Charakterisierung von Mehrphasenströmungen	5
1.1 Phänomenologische Klassifizierung von Mehrphasenströmungen	5
1.2 Allgemein charakterisierende Zustandsgrößen	8
1.3 Partikelrelaxationszeit und Stokes-Zahl	9
1.4 Verdünnte versus dichte Fluid-Partikel-Strömung	10
1.5 Phasenwechselwirkung zwischen fluider und disperser Phase	11
2 Berechnung von Fluidströmungen	13
2.1 Physikalische Modellierung der Fluidströmung	14
2.1.1 Die Grundgleichungen der Fluidodynamik	14
2.1.2 DNS — Direkte Numerische Simulation	15
2.2 RANS — die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen	16
2.2.1 Die Herleitung mittels Reynolds-Aufspaltung	16
2.2.2 Modellierung der Turbulenz	18
2.2.3 Das Standard- k - ε -Modell	19
2.2.4 RSM — Reynolds-Spannungs-Turbulenzmodelle	20
2.3 LES — Large-Eddy-Simulation	21
2.4 Formulierung der Randbedingungen	22
3 Grundlegende Modelle zur numerischen Simulation disperser Mehrphasenströmungen	25
3.1 Das Euler-Euler- oder Zwei-Fluid-Modell	25
3.2 Das Euler-Lagrange-Modell	28
3.3 LES von Mehrphasenströmungen	31

3.4	DNS von Mehrphasenströmungen	31
3.4.1	DNS und Lagrange-Modell	32
3.4.2	DNS und Lagrange-Modell mit Partikel-Partikel-Kollisionen	32
3.4.3	DNS und Lagrange-Modell, Partikel mit räumlicher Ausdehnung	33
3.4.4	MAC-, VOF-, CIP- und Front-Tracking-Verfahren	33
3.5	DEM — Discrete-Element-Methode	36
3.6	DSMC — Direct Simulation Monte Carlo Methode	38
4	Das Euler-Lagrange-Verfahren	41
4.1	Die Berechnung der Fluidströmung	41
4.1.1	Die verallgemeinerte Form der Transportgleichung	41
4.1.2	Das numerische Gitternetz und korrespondierende Datenstrukturen – Das Multiblock-Verfahren	43
4.1.3	Das Finite-Volumen-Verfahren zur Lösung der Fluidbewegungsgleichungen	46
4.1.4	Konvergenzbeschleunigung durch Mehrgitter-Verfahren	50
4.2	Die Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung (BBO)	54
4.3	Die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen für das Einzelpartikel bei höheren Reynoldszahlen	57
4.3.1	Kräftebilanz und Bewegungsgleichung für die translatorische Partikelbe- wegung	57
4.3.2	Gleichung für die Partikel-Rotationsbewegung	66
4.4	Bestimmung der Beiwerte der Kräfte und Momente für eine kugelförmige Ein- zelpartikel	67
4.4.1	Der Widerstandsbeiwert C_W	67
4.4.2	Der Beiwert der Magnus-Kraft C_M	71
4.4.3	Der Beiwert der Saffman-Kraft C_S	72
4.4.4	Der Rotationsbeiwert C_ω	76
4.5	Eine Anmerkung zu nicht kugelförmigen Partikeln	77
4.6	Der Einfluß der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung	81
4.7	Phasenwechselwirkung – Der Einfluß der Partikel auf die Fluidströmung	84
4.7.1	Das Particle-Source-In-Cell Modell	85
4.7.2	Der Einfluß der Partikelbewegung auf die Fluidturbulenz	86
4.8	Das numerische Lösungsverfahren für die Bewegungsgleichungen der dispersen Phase	88
4.9	Der Partikel-Wand-Stoß	93
4.9.1	Stoß einer kugelförmigen Partikel mit einer ideal glatten Wand	95
4.9.2	Experimentelle Bestimmung von Stoßverlustbeiwert k_W und Gleitreibungs- zahl f_W	97
4.9.3	Partikel-Wand-Stoßmodelle	101
4.9.3.1	Empirische Partikel-Wand-Stoßmodelle	101
4.9.3.2	Modelle zur Berücksichtigung einer irregulären Partikelform	102
4.9.3.3	Wandrauhigkeits- oder "Virtuelle-Wand"-Modelle nach Mat- sumoto und Tsuji	103
4.9.3.4	Vereinfachtes "Virtuelle-Wand"-Modell nach Sommerfeld	104
4.9.3.5	Modifiziertes "Virtuelle-Wand"-Modell nach Frank	104
4.10	Bestimmung der Partikelerosion	107
4.11	Partikel-Partikel-Wechselwirkung	108
4.11.1	Grundlegende Betrachtungen	108

4.11.2	Modelle zur numerischen Simulation disperser Mehrphasenströmungen mit Partikel–Partikel–Kollisionen	109
4.11.2.1	Direkte numerische Simulation der Partikel–Partikel–Wechselwirkung	109
4.11.2.2	Direct Simulation Monte Carlo Verfahren (DSMC)	110
4.11.2.3	Kollisionsmodelle für stationäre Fluid–Partikel–Strömungen	111
4.11.3	Das iterative Monte–Carlo–Verfahren (IMCV)	112
4.11.3.1	Berechnung der Kollision zweier kugelförmiger Partikeln	112
4.11.3.2	Stoßbeziehungen für den Haftstoß zweier Partikeln	115
4.11.3.3	Stoßbeziehungen für den Gleitstoß zweier Partikeln	116
4.11.3.4	Stoßfrequenz und Stoßwahrscheinlichkeit	117
4.11.3.5	Eigenschaften und Position des virtuellen Stoßpartners	118
4.11.3.6	Der modifizierte Lagrange–Algorithmus	121
4.12	Das Lagrange’sche Partikel–Tracking–Verfahren	124
4.12.1	Gitternetzdarstellung für das Lagrange’sche Berechnungsverfahren	124
4.12.2	Lokalisierung der Partikelstartbedingungen auf dem numerischen Gitternetz	126
4.12.3	Datenstrukturen des Lagrange–Solvers	129
4.12.4	Partikel–Tracking und Berechnung der Partikelquellterme	130
4.12.5	Interpolation der Fluid– und Partikelfeldgrößen am Partikelort	132
4.13	Validierung des numerischen Berechnungsverfahrens	133
5	Parallelisierung des Euler–Lagrange–Verfahrens	137
5.1	Motivation und Notwendigkeit zur Parallelisierung von Lösungsverfahren	137
5.2	Parallele Hardware–Architekturen und Parallelisierungs–Paradigma	140
5.3	Parallelisierung des Euler–Lagrange–Verfahrens	148
5.3.1	Parallele Berechnung der Gasströmung — das Gebietszerlegungsverfahren (Domain Decomposition)	149
5.3.2	Parallele Berechnung der Partikelbewegung	153
5.3.2.1	Stand der Forschung auf dem Gebiet der parallelen Euler–Lagrange–Verfahren	154
5.3.2.2	Das Quasi–Serielle Parallelisierungsverfahren	158
5.3.2.3	Statische Domain Decomposition (SDD) für die Lagrange’sche Partikelberechnung	159
5.3.2.4	Ursachen für ungenügende Lastbalancierung des SDD–Verfahrens	162
5.3.2.5	Dynamische Domain Decomposition (DDD) für die Lagrange’sche Partikelberechnung	163
5.3.2.6	Variation des Datenaustauschs im DDD–Verfahren	169
5.4	Untersuchungen zur Effizienz der parallelen Lösungsverfahren	171
5.4.1	Auswahl und Charakterisierung der untersuchten Testfälle	171
5.4.2	MIMD–Parallelrechnersysteme und Software–Umgebungen	175
5.4.3	Untersuchungen zur Effizienz des Gebietszerlegungsverfahrens für den Navier–Stokes–Löser	178
5.4.4	Ergebnisse der Testfallrechnungen für die parallele Partikelberechnung mittels SDD– und DDD–Verfahren	180
5.4.4.1	Überlagerung von Prozessen mit MPICH und LAM–MPI auf Cluster–Architekturen	180
5.4.4.2	Analyse des Kommunikationsumfangs für das SDD– und DDD–Verfahren	181

5.4.4.3	Vergleich der Lastverteilung für das SDD- und DDD-Verfahren	186
5.4.4.4	Einfluß der Variation des Datenaustauschs im DDD-Verfahren	187
5.4.4.5	Einfluß lokal gepufferter Informationen über das Strömungsfeld auf die Effizienz des DDD-Verfahrens	188
5.4.4.6	Vergleich der Parallelisierungsverfahren für die Testfallrechnungen auf dem CLIC	189
5.4.4.7	Vergleich der Ergebnisse zwischen Cray-T3E und CLIC	193
5.4.4.8	Abhängigkeit der Effizienz der Parallelisierungsalgorithmen von der Auflösung der numerischen Gitternetze	195
5.4.4.9	Skalierung der Parallelisierungsverfahren hinsichtlich der Anzahl zu berechnender Partikeltrajektorien	198
5.4.5	Zusammenfassung der Ergebnisse zu den Parallelisierungsverfahren	199
6	Anwendungen des parallelen Euler-Lagrange-Verfahrens auf Gas-Feststoff-Strömungen in der Verfahrenstechnik	203
6.1	Berechnung der Gas-Partikel-Strömung in geometrisch ähnlichen Standardzyklonen	204
6.1.1	Motivation und wissenschaftlicher Kenntnisstand	204
6.1.2	Berechnung der Gas-Partikel-Strömung im Standardzyklon mit MISTRAL/ PartFlow-3D	208
6.1.3	Ergebnisse der Strömungsberechnungen	208
6.1.4	Partikelbewegung im Standardzyklon nach König [241]	213
6.1.5	Numerisches Abscheidekriterium und Partikeltrenngrad	217
6.2	Numerische Berechnung der Partikelabscheidung in symmetrischen Doppelzyklonen unterschiedlicher Bauart	222
6.2.1	Strömungsgeometrie und allgemeine Funktionsweise	222
6.2.2	Wahl der Betriebsparameter	223
6.2.3	Gitternetze und numerisches Lösungsverfahren	224
6.2.4	Berechnung des Strömungsfeldes der Gasphase im symmetrischen Doppelzyklon	224
6.2.5	Bewegung der Partikelphase und Partikeltrajektorien	227
6.2.6	Numerisches Abscheidekriterium und Partikeltrenngrad	233
6.2.7	Partikelkonzentrationsverteilung und Partikelerosion	235
6.3	Untersuchungen zur Partikelmassenstromaufteilung einer Kohlestaubströmung in Strömungsteilern (Bifurcatoren) von Kohlekraftwerken	237
6.3.1	Einleitung und Motivation	237
6.3.2	Strömungsgeometrien und numerische Gitternetze	238
6.3.3	Einige Ergebnisse der Strömungs- und Partikelsimulationen	240
6.3.4	Untersuchungen zur statistischen Zuverlässigkeit der Berechnungsergebnisse	245
6.3.5	Untersuchungen zur Effizienz der Parallelisierungsverfahren am Beispiel der Kohlestaubströmung in Strömungsteilern	246
7	Schlußfolgerungen und Ausblick	251
A	Experimentelle Bestimmung von Stoßverlust- und Gleitreibungszahlen	259
A.1	Stoßverlust- und Gleitreibungszahlen nach Salman [388]	259
A.2	Experimentelle Bestimmung der Stoßverlust- und Gleitreibungsbeiwerte nach Tabakoff	261

A.2.1	k_W - und f_W -Werte nach Hussein und Tabakoff [209]	264
A.2.2	k_W - und f_W -Werte nach Grant und Tabakoff [179]	264
A.2.3	k_W - und f_W -Werte nach Beacher, Tabakoff und Hamed [16]	265
A.2.4	k_W - und f_W -Werte nach Tabakoff [465]	265
A.2.5	k_W - und f_W -Werte nach Tabakoff und Hamed [466]	266
A.2.6	k_W - und f_W -Werte nach Tabakoff und Malak [467]	266
A.2.7	k_W - und f_W -Werte nach Tabakoff und Hamed [469]	266
A.2.8	Zusammenfassung der Arbeiten von Tabakoff et al.	270
A.3	Stoßverlust- und Gleitreibungszahlen nach Sommerfeld et al. [442, 443]	270
B	Modelle zur Bestimmung der Partikelerosion	273
B.1	Erosionsmodell nach Grant & Tabakoff [179] und Elfeki [109]	273
B.2	Erosionsmodell nach Tabakoff & Hamed [469]	274
B.3	Erosionsmodell nach Menguturk et al. [300]	274
B.4	Partikelerosion von Kohlepartikel auf Stahl nach Schade & Frank et al. [398, 156]	275
	Literaturverzeichnis	279
	Lebenslauf	321

Zusammenfassung

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 Entwicklungs-Werkzeug 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.

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Entwicklung und Anwendung numerischer Berechnungsverfahren für disperse 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 unter Hinzunahme geeigneter Turbulenzmodelle zur Schließung des Gleichungssystems. Die disperse Phase wird als ein Kollektiv von Einzelpartikeln betrachtet. Aus der Berechnung einer Vielzahl von Partikeltrajektorien im Fluidströmungsfeld werden durch eine geeignete Ensemblemittelung sowohl Kenngrößen zur Beschreibung charakteristischer Eigenschaften der dispersen Phase als auch Phasenwechselwirkungsterme für die Impuls-, Masse- und Wärmeübertragung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase abgeleitet.

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 näher ausgeführten Modelle liefern eine Beschreibung der auf eine

kugelförmige Einzelpartikel im Strömungsfeld wirkenden Kräfte und Momente, der Partikel-Wand-Wechselwirkung und der Partikelerosion. Weitere Teilmodelle dienen der Berücksichtigung von Partikel-Partikel-Stoßvorgängen und 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.

Die Berechnung disperser Mehrphasenströmungen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren gehört neben der Large-Eddy-Simulation (LES) und der Direkten Numerischen Simulation (DNS) turbulenter Fluidströmungen mit zu den rechenintensivsten Aufgabenstellungen der 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 150-fache 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 aufgezeigte Ressourcenbedarf für derartige Simulationen disperser Mehrphasenströmungen 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 dieser 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 dieser Arbeit wird nun eine vom Autor entwickelte, neuartige Parallelisierungsmethode vorgestellt, die eine dynamische Lastverteilung für das Lagrange-Verfahren ermöglicht (DDD – Dynamic Domain Decomposition) und mit deren Hilfe eine deutliche Reduzierung der Gesamtausführungszeiten einer Mehrphasenströmungsberechnung mit dem Euler-Lagrange-Verfahren möglich ist. Der Hauptvorteil dieses Parallelisierungsverfahrens besteht in der Unabhängigkeit der parallelen Performance des Parallelisierungsverfahrens vom Charakter der zu berechnenden Fluid-Partikel-Strömung. Die verschiedenen Parallelisierungsverfahren wurden im Folgenden an zwei Testfällen auf mehreren Parallelrechnerarchitekturen vergleichend untersucht. Im Ergebnis steht mit dem vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten vollständig parallelisierten Euler-Lagrange-Verfahren MISTRAL/PartFlow-3D ein numerisches Berechnungsverfahren zur Verfügung, mit dem disperse Mehrphasenströmungen mit höheren Konzentrationen der dispersen Phase und daraus resultierenden starken Phasenwechselwirkungen (Vier-Wege-Kopplung) effektiv untersucht werden können.

Im Anschluß an die Darstellung und Diskussion der verschiedenen Parallelisierungsverfahren werden Berechnungsergebnisse für strömungsmechanische Anwendungen aus der Verfahrenstechnik vorgestellt. So wurde mit Hilfe des vorgestellten Euler–Lagrange–Verfahrens die Wirbel–Senken–Strömung und die Partikelabscheidung in Standardzyklonen und symmetrischen Doppelzyklonen berechnet. Eine weitere Anwendung zeigt die Berechnung einer Gas–Kohlestaub–Strömung in Rohrleitungssystemen und Strömungsteilern der Kraftwerksindustrie. Anhand dieser 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 „Numerische Methoden für Mehrphasenströmungen“ an der TU Chemnitz zusammen. Trotz des Umfangs der Arbeit konnten aus Platzgründen nicht alle Teilgebiete dieser Arbeit in gleicher Ausführlichkeit behandelt werden. Dort wo eine gestraffte oder nur andeutungsweise Darstellung erforderlich wurde, wird der Leser auf weiterführende Publikationen verwiesen, auf die in der Arbeit Bezug genommen wird.

Kapitel 7

Schlußfolgerungen und Ausblick

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung eines numerischen Verfahrens zur Berechnung dreidimensionaler, disperser, turbulenter Fluid-Partikel-Strömungen in geometrisch komplexen Strömungsgebieten auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen. Dabei gehört die Berechnung disperser Mehrphasenströmungen 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. 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 derartigen Supercomputern handelt es sich heutzutage jedoch ausschließlich um proprietäre Parallelrechner einiger weniger Hardwarehersteller, massiv parallele Clustercomputer/Constellations und parallele Vektorrechner. Neben der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computerhardware ist somit auch die Entwicklung hocheffizienter paralleler Berechnungsverfahren dringend erforderlich, die in der Lage sind, das Potential dieser modernen Supercomputer auch tatsächlich für die numerische Simulation disperser Mehrphasenströmungen mit komplexen Phasenwechselwirkungen effektiv zu nutzen.

Das in der vorliegenden Arbeit vorgestellte parallele Euler-Lagrange-Verfahren basiert für die numerische Berechnung der Fluidströmung auf einer Diskretisierung der RANS-Gleichungen und der Gleichungen des Standard- k - ε -Turbulenzmodells 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 Mehrgittertechniken implementiert. So erfolgt zum einen die Beschleunigung der äußeren SIMPLE-Iterationen durch die Anwendung eines äußeren Mehrgitterverfahrens auf das gesamte Gleichungssystem. Zum anderen kann die Konvergenz der inneren Iterationen für die Druckkorrekturgleichung durch ein inneres Mehrgitterverfahren für den Druck unterstützt werden, deren Lösung im ursprünglichen SIMPLE-Verfahren den Hauptanteil des Berechnungsaufwandes erfordert.

Zur Berechnung der Partikelbewegung wurde in dieser Arbeit das Lagrange-Verfahren verwendet. 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 Fluidichte ($\rho_P \gg \rho_F$), werden die wesentlichen Aspekte für deren Modellierung und Berechnung aufgezeigt. Die näher ausgeführten Modelle liefern

eine quantitative Beschreibung der auf eine kugelförmige Einzelpartikel im Strömungsfeld wirkenden Kräfte und Momente und führen zur Formulierung der Partikelbewegungsgleichungen, die eine numerische Berechnung der Partikelbewegung ermöglichen. Zusätzliche Modelle 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 und der Beschreibung der Wechselwirkung zwischen kontinuierlicher Phase und Partikelbewegung.

Die hierbei zu berücksichtigende Grundproblematik numerischer Berechnungen von dispersen Mehrphasenströmungen besteht darin, daß ein qualitativ und quantitativ mit der realen Strömung übereinstimmendes Simulationsergebnis nur dann erzielt werden kann, wenn eine möglichst genaue mathematische Modellierung von allen physikalischen Teilprozessen und Effekten vorgenommen wird, die das Verhalten der Fluid–Partikel–Strömung beeinflussen. Auf Grund der Vielzahl der möglichen Einflußfaktoren und Wechselwirkungen ist dies weitaus komplizierter als für reine Fluidströmungen. Trotz der enormen Anstrengungen, die auf diesem Gebiet in den letzten Jahren und Jahrzehnten von den weltweit führenden Wissenschaftlergruppen unternommen wurden, existieren nach wie vor Defizite in der mathematisch–physikalischen Modellierung bestimmter Teilphänomene, die die Genauigkeit numerischer Simulationsergebnisse negativ beeinflussen bzw. die Anwendbarkeit der numerischen Verfahren einschränken.

- Die Kraftwirkungen und Momente auf starre, kugelförmige Partikeln in freier Anströmung werden durch die dargestellten Modelle über einen weiten Reynoldszahlbereich auch quantitativ gut erfaßt. Betrachtet man jedoch den Bereich turbulenter Anströmung oder die in turbulenten Strömungen in Wandnähe auftretenden hochfrequent instationären Kraftwirkungen, so entziehen sich diese einer mathematischen Beschreibung weitgehend. Darüber hinaus sind die Strömungskräfte auf real geformte, nicht kugelförmige Partikel sowie Kraftwirkungen auf Partikel in Partikelschwärmen praktisch unerforscht.
- Betrachtet man die Anwendung des Euler–Lagrange–Verfahrens auf Fluid–Tropfen–Strömungen, so sind weitere physikalische Effekte in die Modellierung einzubeziehen, die in der Darstellung in dieser Arbeit unberücksichtigt blieben. Dies sind insbesondere die Deformierbarkeit der Tropfen und die durch die damit verbundene Änderung der Partikelform verursachten Veränderungen in den aerodynamischen Kraftwirkungen. Für Tropfen ab einer bestimmten Größe ist auch die Rezirkulation des Fluids im Tropfen nicht mehr zu vernachlässigen. Tropfenzerteilung und –koagulation beim Tropfen–Wand–Stoß und bei der Tropfen–Tropfen–Kollision führen dazu, daß die Beschreibung dieser Wechselwirkungsphänomene nur noch in statistischer Weise möglich ist. Beim Tropfen–Wand–Stoß spielt zusätzlich die Bildung eines Wandfilms eine Rolle.
- Die durch Partikeldegradation und –agglomeration bei Partikel–Wand– und Partikel–Partikel–Stößen hervorgerufene Veränderung der Partikelgrößenverteilung kann auch für bestimmte Fluid–Feststoff–Strömungen von Bedeutung sein (z.B. in Prallmühlen oder bei Partikelseparations– und –abscheidungsprozessen). Diese Veränderungen in der Partikelgrößenverteilung werden von den bisher entwickelten Modellen nicht erfaßt.
- Disperse Mehrphasenströmungen in der Energie– und Verfahrenstechnik sind häufig durch thermische oder chemische Prozesse gekennzeichnet, die den Strömungsverhältnissen überlagert sind (z.B. Verdampfungs– und Kondensationsprozesse, Pyrolyse und Abbrand fester Brennstoffpartikel, etc.). Zu deren Beschreibung sind zusätzliche mathematische Modelle notwendig, die zudem stark von den jeweiligen Stoffeigenschaften der dispersen Phase abhängig sind und aufwendige experimentelle Untersuchungen erfordern. Die durch diese

Prozesse hervorgerufene Veränderung der Partikelgrößenverteilung ist ebenfalls zu berücksichtigen.

- Eine Schlüsselrolle in der numerischen Simulation turbulenter Fluid-Partikel-Strömungen kommt der Modellierung der Wechselwirkung zwischen Fluidturbulenz und Partikelbewegung zu. Die heute weitverbreitet verwendeten Beziehungen für die Partikelwechselwirkungsterme in den Transportgleichungen der Turbulenzmodelle sind nur bedingt geeignet, die komplexen Phänomene quantitativ richtig zu beschreiben, die zu einer Anfachung bzw. Dämpfung der Fluidturbulenz auf Grund der Partikelbewegung führen können. Insbesondere der Einfluß der Massenbeladung wird von den derzeit existierenden Modellen nur ungenügend berücksichtigt.
- Die Durchführung einer Strömungssimulation mit dem Euler-Lagrange-Verfahren unter Berücksichtigung der sogenannten Vier-Wege-Kopplung, d. h. unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Phasenwechselwirkung auf Grund von Masse-, Impuls- und Wärmeübertragung, der turbulenten Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikelphase und der Partikel-Partikel-Wechselwirkung, ist trotz der Entwicklungen der letzten Jahre in mehrfacher Hinsicht als eine große Herausforderung zu betrachten. Die Verschmelzung des iterativen Particle-Source-in-Cell-Verfahrens mit dem ebenfalls iterativen Monte-Carlo-Verfahren (IMCV) für von Partikel-Partikel-Kollisionen dominierte Fluid-Partikel-Strömungen führt rasch zu einem extrem ansteigenden Ressourcenbedarf und extrem langen Rechenzeiten. Die Anwendung stochastischer Modellierungsansätze führt zudem dazu, daß die Entwicklung der Residuen nicht als Konvergenzkriterium für das Erreichen eines konvergenten Strömungszustandes der Fluid-Partikel-Strömung herangezogen werden kann. Vielmehr müssen einzelne Kenngrößen der Fluidströmung in Gebieten mit hoher Partikelbeladung über die Kopplungsiterationen hinweg in ihrer Entwicklung verfolgt werden, um eine Aussage über die Konvergenz des numerischen Verfahrens treffen zu können. Eine Unterrelaxation der Partikelwechselwirkungsterme ist in aller Regel für eine Konvergenz des numerischen Verfahrens unvermeidbar und trägt zu einer weiteren Steigerung des notwendigen Berechnungsumfangs bei. Es ist als offene Frage zu bewerten, ob die Berechnung einer stationären, hochbeladenen Fluid-Partikel-Strömung mit Vier-Wege-Kopplung mit einem instationären Euler-Lagrange-Verfahren nach der Methode der simultanen Partikelverfolgung u. U. nicht effizienter auszuführen ist, indem man die Lösung des phasengekoppelten Strömungsproblems in der Zeit bis in den stationären Beharrungszustand fortsetzt.

Die vorangegangenen Punkte zeigen, daß die mathematisch-physikalische Modellierung für Fluid-Partikel-Strömungen beim heutigen Stand der Computertechnologie nicht losgelöst von der Entwicklung des numerischen Verfahrens vorgenommen werden kann. Vereinfachende Annahmen in der Modellierung sind häufig notwendig, um die Berechenbarkeit des Strömungsproblems auf den derzeit leistungsfähigsten Supercomputern zu gewährleisten. Darüber hinaus ist die Entwicklung leistungsfähiger, paralleler numerischer Verfahren von entscheidender Bedeutung um die potenzielle Leistungsfähigkeit moderner, massiv paralleler Rechnerarchitekturen (wie z. B. der amerikanischen ASCI-Computersysteme und des japanischen Earth Simulator) effektiv zu nutzen und so die Entwicklung und den Einsatz detaillierter mathematisch-physikalischer Modellvorstellungen durch die Bereitstellung der Speicherressourcen und der Berechnungsleistung erst zu ermöglichen.

Ein Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit lag daher in der Entwicklung, Untersuchung und vergleichenden Bewertung von effektiven Parallelisierungsmethoden für das Euler-Lagrange-Verfahren. Für die Parallelisierung des Finite-Volumen-Verfahrens zur Berechnung der Fluid-

strömung wurde 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 Partikeltrajektoriensegments jeweils auf dem Prozessor erfolgen muß, dem der Gitterblock mit den zur Berechnung benötigten Geometrie- und Fluidströmungsdaten statisch zugeordnet ist. Aus der a priori nicht bekannten Konzentrationsverteilung der dispersen Phase im Strömungsgebiet ergeben sich bei diesem Vorgehen Lastverteilungsprobleme, die für viele Anwendungsfälle zu einer geringen parallelen Effizienz dieses Verfahrens führen.

Im Gegensatz dazu wird bei dem vom Autor neu entwickelten DDD-Verfahren die Zuordnung der Gitterblock-Informationen zu Prozessen auf dynamische Weise vorgenommen. Die dynamische Verteilung von Gitternetzpartitionen erfolgt durch sogenannte Service-Prozesse, so daß die Gesamtzahl der Prozesse im DDD-Verfahren größer als im SDD-Verfahren ist. Zudem ist eine Erhöhung des Kommunikationsaufkommens gegenüber dem SDD-Verfahren unvermeidbar. Mit dem DDD-Verfahren kann 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 Partikelberechnungen ausführen. Diese dynamische Lastverteilung des DDD-Verfahrens führt in vielen Fällen zu einer deutlichen Reduzierung der Gesamtausführungszeiten einer Mehrphasenströmungsberechnung mit dem Euler-Lagrange-Verfahren.

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 handelte, während bei dem zweiten Testfall Partikelseparation und Strahlenbildung zu beobachten sind. Für die vergleichende Untersuchung der Parallelisierungsverfahren wurden sowohl hierarchische Gitternetze mit verschiedener Gitternetzauflösung als auch verschiedene Parallelrechnerarchitekturen eingesetzt. Die Schlußfolgerungen aus dem Vergleich der Parallelisierungseigenschaften beider Verfahren lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. 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.

2. Die Ergebnisse unterstreichen die Bedeutung der Lastbalancierung zwischen den Prozessoren einer Parallelrechnerpartition für eine gute parallele Performance des Gesamtalgorithmus. 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.
3. Neben der Umsetzung der Statischen Gebietszerlegung (SDD) für das Lagrange-Verfahren wird eine neuartige Parallelisierungsmethode vorgestellt und untersucht, die eine dynamische Lastverteilung für das Lagrange-Verfahren ermöglicht (DDD). Die Vorteile des DDD-Verfahrens gegenüber dem SDD-Verfahren sind:
 - (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.
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.

Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit haben die grundsätzlichen Vorteile des DDD-Verfahrens und die Möglichkeiten zur Berechnung disperser Mehrphasenströmungen auf massiv parallelen Rechnerarchitekturen aufgezeigt. Trotz des erreichten Entwicklungsstandes der Parallelisierungsmethoden für das Euler-Lagrange-Verfahren sind weitere Forschungsanstrengungen notwendig, um eine weitere Effizienzsteigerung des parallelen Berechnungsverfahrens auf modernen Hochleistungsrechnerarchitekturen mit einer großen Anzahl von Prozessoren ($N_P \geq 128$) zu erzielen und so das Potential für die Berechnung technisch relevanter, stark phasengekoppelter Fluid-Partikel-Strömungen zu erschließen. Besonders zu berücksichtigende Aspekte sind hierbei:

1. Von besonderer Bedeutung ist die Parallelisierung noch bestehender serieller algorithmischer Bestandteile des Berechnungsverfahrens. Dies betrifft insbesondere die initiale Partikellokalisierung auf Gitternetzen mit hoher räumlicher Gitternetzauflösung, die für große Partikelzahlen und für die Simulation instationärer Fluid-Partikel-Strömungen einen wesentlichen Teil der Gesamtrechnungszeit ausmacht.

2. Eine vergleichbare Bedeutung kommt der Parallelisierung der Daten-Ein-/Ausgabe zu, die für große Problemstellungen einen nicht mehr zu vernachlässigenden Teil der Nutzungsdauer eines MIMD-Rechnersystems einnimmt. Die Parallelisierung dieses Teils des numerischen Verfahrens ist sehr stark von der verfügbaren Hardware abhängig, wengleich mit der Verfügbarkeit von standardisierten Routinen für parallele Daten-Ein-/Ausgabe im MPI-2-Standard [317] eine gewisse Unabhängigkeit in der Verfahrensentwicklung und -implementierung gegeben ist (jedoch bisher ohne Garantie für eine zufriedenstellende Performance).
3. Für das vorliegende Berechnungsverfahren erfolgen sowohl die Pre- und Postprozessing-Zwischenschritte zur Konvertierung der Datenformate und zur Erstellung der Block-Prozessor-Zuordnung als auch die eigentliche Gittergenerierung und die graphische Auswertung der Simulationsergebnisse in serieller Form. Damit ist die derzeit behandelbare Problemgröße auf die Größe des Hauptspeichers der größten verfügbaren seriellen Rechnerarchitektur beschränkt. Bezieht man Shared-Memory-Rechnerarchitekturen wie z.B. die SGI Origin 2000/3000 in diese Betrachtung mit ein, so sind die daraus resultierenden Einschränkungen zunächst moderat. Mit zunehmender Größe der strömungsmechanischen Aufgabenstellung wird jedoch auch die Prozessorleistung in der seriellen Vor- und Nachverarbeitung der Gitter- und Strömungsdaten zu einem begrenzenden Faktor, so daß perspektivisch die Parallelisierung dieser Verfahrensschritte erforderlich wird. Dies trifft in gleicher Weise auf die hierbei eingesetzten kommerziellen Programmpakete zu.
4. Für die in den letzten Jahren verstärkt entwickelte Parallelrechnerklasse der Constellation-Cluster (Cluster von hochintegrierten SMP-Knoten) mit lokalem Shared Memory ist u.U. eine veränderte Herangehensweise an eine effiziente Parallelisierung erforderlich. Neben der auf MPI und Message Passing basierenden grobgranularen Parallelisierung für eine Verteilung der Aufgabenstellung über die SMP-Knoten des Systems wird eine zusätzliche Parallelisierung auf Thread- bzw. Schleifenebene erforderlich, um die Leistungsfähigkeit der SMP-Knoten optimal ausnutzen zu können. Hier sind erste Versuche mit gemischter OpenMP- und MPI-Parallelisierung bereits unternommen worden. Es ist jedoch auch nicht zu unterschätzen, daß die Komplexität und Fehleranfälligkeit der resultierenden Verfahren hiermit deutlich zunehmen wird.
5. Auch die Nutzung von sogenannten Computational Grids erfordert eine geänderte Herangehensweise an das Problem einer optimalen Gebietszerlegung. Einer Minimierung des Datenaustauschs auf den externen Kommunikationsverbindungen zwischen den einzelnen Parallelrechnersystemen kommt hierbei besondere Bedeutung zu. Latenz und Bandbreite der Kommunikationsverbindungen sowie die Rechengeschwindigkeit der Prozessoren der möglicherweise heterogenen Rechnerarchitekturen sind in einer derartigen zweistufigen Gebietszerlegungsmethode zu berücksichtigen.

Im letzten Kapitel der Arbeit wird die Anwendung des parallelen Euler-Lagrange-Verfahrens MISTRAL/PartFlow-3D auf drei konkrete disperse Gas-Feststoff-Strömungen in der Energie- und Verfahrenstechnik gezeigt. Das Verfahren wurde zur Untersuchung der Partikelabscheidung in Zyklonen unterschiedlicher Bauart und zur Untersuchung des pneumatischen Transports und der Partikelmassenstromaufteilung von Kohlepartikeln in Rohrleitungssystemen und Strömungsteilern der Kraftwerksindustrie eingesetzt. Die numerischen Berechnungen erlauben eine detaillierte Analyse des Bewegungsverhaltens der Partikelphase in derart komplexen Strömungsgeometrien und somit Rückschlüsse auf das Betriebsverhalten der untersuchten Apparate und auf eventuell notwendige Veränderungen in deren konstruktiver Gestaltung.

Mit dem vom Autor und seiner Forschungsgruppe entwickelten, vollständig parallelisierten Euler–Lagrange–Verfahren MISTRAL/PartFlow–3D mit dynamischer Lastbalancierung steht somit 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.

Literaturverzeichnis

- [1] Abramowitz M., Stegun I. : Handbook of Mathematical Funktionen (Übersetzung ins Russische), Nauka-Verlag, Hauptredaktion für phys.-math. Literatur, Moskau (1979).
- [2] Alajbegović A., Assad A., Bonetto F., Lahey Jr. R.T. : "Phase distribution and turbulence structure for solid/fluid up flow in a pipe", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 20, No. 3, pp. 453–479 (1994).
- [3] Alexander R. McK. : "Fundamentals of cyclone design and operation", Proc. Australas. Inst. Min. Metall. (New Series), pp. 152–153, 203 (1949).
- [4] Ålund A., Lötstedt P., Sillén M. : "Parallel single grid and multigrid solution of industrial compressible flow problems", Computers & Fluids, Vol. 26, No. 7, pp. 775–791 (1997).
- [5] Amsden A.A., O'Rourke P.J., Butler T.D. : "KIVA-II : A computer program for chemically reactive flows with sprays", LA-11560-MS, Los Alamos (1989).
- [6] Asmolov E.S., McLaughlin J.B. : "The inertial lift on an oscillating sphere in a linear shear flow", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 25, No. 4, pp. 739–751 (1999).
- [7] Avva R.K., Kline S.K., Ferziger J.H. : "Computation of the turbulent flow over a backward-facing step using the zonal modeling approach", Research Report TF-33, Department of Mechanical Engineering, Stanford, June 1988.
<http://www-fpc.stanford.edu/Publications/TF.html>
- [8] D'Azevedo J.L.T., Pereira J.C.F. : "Prediction of gas-particle turbulent free or confined jet flows", Particle and Particle Systems Characterization, Vol. 7, pp. 171–180 (1990).
- [9] D'Azevedo E.F., Romine C.H. : "DOLIB : Distributed Object Library", Technical Report, ORNL/TM-12744, Oak Ridge National Laboratory (1994).
- [10] D'Azevedo E.F., Romine C.H. : "A new shared-memory programming paradigm for molecular dynamics simulations on the INTEL Paragon", Technical Report, ORNL/TM-12890, Oak Ridge National Laboratory (1995).
- [11] D'Azevedo E.F., Romine C.H., Walker D.W. : "Shared memory emulation enables billion atom molecular dynamics", SIAM News, Vol. 28, No. 5, pp. 1–9 (May/June 1995).
<http://www.csm.ornl.gov/~walker>
- [12] Bachmann Ch., Schulz U. : "Experimentelle Ermittlung der Abscheideleistung von Hochleistungsentstaubern für feste Partikeln aus Gasen — Effektivität und Wirtschaftlichkeit", Diplomarbeit, Fachhochschule Flensburg (1996).

- [128] Fohanno S., Oesterlé B. : "Investigation of the fluctuating motion of large particles in a vertical collisional gas–solid flow", Proc. of the 3rd ASME/JSME Joint Fluids Eng. Conf., FEDSM'99, July 18.–23., 1999, San Francisco, California, USA, FEDSM99–7887, pp. 1–7.
- [129] Fohanno S., Oesterlé B. : "Analysis of the effect of collisions on the gravitational motion of large particles in a vertical duct", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 26, No. 2, pp. 267–292 (2000).
- [130] Foster I.T., Walker D.W. : "Paradigms and strategies for scientific computing on distributed memory concurrent computers", Proceedings of the High Performance Computing Conference, La Jolla, California, USA, April 11.–15., 1994.
- [131] Founti M.A., Klipfel A. : "Numerical simulation of particle–to–particle collisions in nearly dense liquid–solid flows", ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'96, July 7.–11. 1996, San Diego, CA, USA, pp. 89–96.
- [132] Founti M.A., Klipfel A. : "Particle–induced erosion wear in axi–symmetric furnace configurations", ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'98, June 21.–25., 1998, Washington, DC, USA, FED–Vol. 245, FEDSM98–5230, pp. 1–8.
- [133] Frank B., Schulz W., Tietz W., Warmuth E. : Wissensspeicher Mathematik, Verlag Volk und Wissen, Berlin (1996).
- [134] Frank Th. : <http://www.imech.tu-chemnitz.de> – Homepage von Thomas Frank, TU Chemnitz, Fakultät Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen, Forschung & Publikationen.
- [135] Frank Th. : "Numerische Berechnung der feststoffbeladenen Gasströmung im horizontalen Kanal unter Berücksichtigung von Wandrauigkeiten", Dissertation, TU Bergakademie Freiberg (1992).
- [136] Frank Th., Schade K.–P., Petrak D. : "Modellbildung und Computersimulation mehrdimensionaler Gas–Feststoff–Strömungen unterschiedlicher Konzentration", Jahrestreffen des GVC–Fachausschusses Mehrphasenströmungen, 21.–22. Februar 1991, Bremen, pp. 1–34. Veröffentlicht in Chemie–Ingenieur–Technik, Vol. 63, Nr. 12, pp. 1266–1267 (1991).
- [137] Frank Th., Schade K.–P., Petrak D. : "Numerical simulation and experimental investigation of a gas–solid two–phase flow in a horizontal channel", International Conference on Multiphase Flows, September 24–27, 1991, Tsukuba, Japan. Veröffentlicht in Int. J. Multiphase Flow, Vol. 19, No. 1, pp. 187–198 (1993).
- [138] Frank Th., Schulze I. : "Ein numerisches Verfahren zur Berechnung disperser Mehrphasenströmungen auf parallelen Hochleistungsrechnern", Interne Arbeitssitzung des GVC–Fachausschusses Mehrphasenströmungen, 17./18. Februar 1994, Würzburg.
- [139] Frank Th., Schulze I. : "Numerical simulation of gas–droplet flow around a nozzle in a cylindrical chamber using Lagrangian model based on a multigrid Navier–Stokes solver", ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'94, June 19.–23., 1994, Lake Tahoe, Nevada, USA, FED–Vol. 185, pp. 93–107.

- [140] Frank Th. : "Comparison of three parallelization methods for calculation of disperse multiphase flows using the Lagrangian approach", Proceedings 3rd Int. Conference "Parallel CFD '96", Implementations and Results Using Parallel Computers, Capri, Italy, May 20–23, 1996.
- [141] Frank Th., Wassen E. : "Parallel solution algorithms for Lagrangian simulation of disperse multiphase flows", Proc. 2nd Int. Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'96, July 7.–11. 1996, San Diego, CA, USA, Vol. 1 (FED–Vol. 236), pp. 11–20.
- [142] Frank Th., Wassen E., Q. Yu : "A 3–dimensional Lagrangian solver for disperse multiphase flows on arbitrary, geometrically complex flow domains using block–structured numerical grids", 7th Int. Symposium on Gas-Particle Flows, ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Vancouver, BC, Canada, June 22–26, 1997, CD–ROM Proceedings, FEDSM97–3590.
- [143] Frank Th., Wassen E. : "Parallel efficiency of PVM– and MPI–implementations of two algorithms for the Lagrangian prediction of disperse multiphase flows", JSME Centennial Grand Congress 1997, ISAC '97 Conference on Advanced Computing on Multiphase Flow, Tokyo, Japan, July 18–19, 1997.
- [144] Frank Th., Wassen E. : Abschlußbericht zum DFG–Forschungsvorhaben : "Parallele Algorithmen für die numerische Simulation von Mehrphasenströmungen in komplexen 3–dimensionalen Geometrien", DFG–Forschungsvorhaben im Normalverfahren, Projektnr.: Fr 1069/3–1, TU Chemnitz–Zwickau, FG Mehrphasenströmungen, Chemnitz, 1. Juni 1997.
- [145] Frank Th., Wassen E., Yu Q. : "Ein blockstrukturiertes Verfahren zur Berechnung disperser Gas–Feststoff–Strömungen in komplexen 3–dimensionalen Geometrien", VDI–Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, GVC–Jahrestagung 1997, Prozeß– und Umwelttechnik, Dresden, 24.–26. September 1997.
In : Chemie–Ingenieur–Technik, Vol. 69, Nr. 9/97, pp. 1270–1271.
- [146] Frank Th., Wassen E., Yu Q. : "Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation 3–dimensionaler, stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen", Zwischenbericht zum DFG–Sonderforschungsbereich 393, Teilprojekt D2, 1996–1998, pp. 227–250, TU Chemnitz, Fakultät MB/VT, Prof. Techn. Thermodynamik, FG Mehrphasenströmungen, Chemnitz, Juni 1998.
- [147] Frank Th., Wassen E., Yu Q.: "Lagrangian prediction of disperse gas–particle flow in cyclon separators", Third Int. Conf. on Multiphase Flow, ICMF'98, Lyon, France, June 8.–12., 1998, Paper No. 217, pp. 1–8.
- [148] Frank Th., Wassen E., Yu Q. : "Numerische Untersuchung der Strähnenbildung und Erosion in 3–dimensionalen Gas–Feststoff–Strömungen", 49. Berg– und Hüttenmännischer Tag, TU Bergakademie Freiberg, Germany, 18./19. Juni 1998, In: Freiburger Forschungshefte.
- [149] Frank Th., Schneider J., Yu Q., Wassen E. : "Experimental and numerical investigation of particle separation in a symmetrical double cyclone separator", Proc. of the 3rd ASME/JSME Joint Fluids Eng. Conf., FEDSM'99, July 18.–23., 1999, San Francisco, California, USA, Paper No. FEDSM99–7865, pp. 1–10.

- [150] Frank Th., Schneider J., Bernert K. : "Numerische Untersuchung der Gas-Partikel-Strömung in symmetrischen Doppelzyklonabscheidern", VDI-Gesellschaft Energietechnik und VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, VDI-Forum "Zyklonabscheider in der Energie- und Verfahrenstechnik", 27./28. Oktober 1999, Leverkusen, Germany.
In : VDI Berichte 1511, VDI Verlag GmbH, Düsseldorf, 1999, pp. 197-214.
- [151] Frank Th. : "Application of Eulerian-Lagrangian prediction of gas-particle flows to cyclone separators", VKI, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series Programme 1999-2000, "Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flow", Brussels, Belgium, 03.-07. April 2000, pp. 1-52.
- [152] Frank, Th., Bernert, K., Scheider, H., Pachler, K. : "Efficient parallelization of Eulerian-Lagrangian approach for disperse multiphase flow calculation on MIMD computer architectures", IEEE International Conference on Cluster Computing — CLUSTER 2000, November 28.-December 2., 2000, Chemnitz, Germany, pp. 387-388.
- [153] Frank Th., Bernert K., Pachler K., Schneider H. : "Efficient Parallel Simulation of Disperse Gas-Particle Flows on Cluster Computers", ParCFD'2001 — International Parallel CFD Conference, Egmond aan Zee, The Netherlands, May 21-23, 2001, pp. 1-4.
To be published in : Parallel Computational Fluid Dynamics - Recent Developments and Advances, Edited by : P. Wilders, A. Ecer, J. Periaux, N. Satofuka, Elsevier Science B.V., Amsterdam, NL (2001).
- [154] Frank Th., Bernert K., Pachler K., Schneider H. : "Aspects of efficient parallelization of disperse gas-particle flow prediction using Eulerian-Lagrangian approach", ICMF'2001 — 4th International Conference on Multiphase Flow, New Orleans, Louisiana, USA, May 28-June 1, 2001, Paper No. 311, pp. 1-13.
- [155] Frank Th., Bernert K., Pachler K. : "Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation 3-dimensionaler, stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen", Zwischenbericht zum DFG-Sonderforschungsbereich 393, Teilprojekt D2, 1999-2001, TU Chemnitz, Fakultät MB/VT, Prof. Techn. Thermodynamik, FG Mehrphasenströmungen, Chemnitz, Juni 2001, pp. 261-284.
- [156] Frank Th., Schneider H., Schade K.-P. : "Measurement and Control Techniques for Improving Combustion Efficiency and Reducing Emissions from Coal Fired Plant", Teilprojekt : "Parallel Numerical Simulation of Pulverized Fuel (PF) Flow in the PF Pipe and Control System for Use on Large Utility Coal Fired Boilers" 1.-5. Zwischenbericht zum EU-Forschungsprojekt Contract-No. ECSC-7220-PR/050, European Coal and Steel Commission (ECSC), November 1999 – August 2001.
- [157] Fukagata K., Zahrai S., Bark F.H. : "Large Eddy Simulation of particle motion in a turbulent channel flow", ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'97, June 22.-26., 1997, Vancouver, BC, Canada, FEDSM97-3591, pp. 1-6.
- [158] Fukagata K., Zahrai S., Bark F.H. : "Force balance in a turbulent particulate channel flow", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 24, No. 6, pp. 867-887 (1998).
- [159] Furlani T.R., Lordi J.A. : "Comparison of parallel algorithms for the Direct Simulation Monte Carlo Method : Application to exhaust plume flowfields", American Institute of Aeronautics and Astronautics, pp. 227-244 (1989).

- [568] Yamamoto, Y., Tanaka, T., Tsuji, Y. : "LES of gas-particle turbulent channel (the effect of inter-particle collisions on structure of particle distribution)", Third Int. Conf. on Multiphase Flow, ICMF'98, Lyon, France, June 8.-12., 1998, pp. 1-7.
- [569] Yamane K., Sato T., Tanaka T., Tsuji Y. : "Computer simulation of tablet motion in coating drum", *Pharmaceutical Research*, Vol. 12, No. 9, pp. 1264-1268 (1995).
- [570] Yokomine T., Shimizu A., Kurakake H., Akiba M., Kunugi T. : "Numerical simulation of erosion of gas-solid suspension flow in a pipe with a twisted-tape insert", ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM'97, June 22.-26., 1997, Vancouver, BC, Canada, FEDSM97-3638, pp. 1-8.
- [571] Yonemura S., Tanaka T., Tsuji Y. : "Cluster formation in gas-solid flow predicted by the DSMC method", ASME FED-Vol. 166, Gas-Solid Flows, Book No. H00806, pp. 303-309 (1993)
- [572] Universitätsrechenzentrum (URZ) und Zentrum für Hochleistungsrechnen (ZHR) der TU Dresden, Germany, Homepage und Informationen zur Cray-T3E.
<http://www.tu-dresden.de/urz/Dienste/dienste.html>
http://www.tu-dresden.de/zhr/zhr_home.html
- [573] Živković G., Sommerfeld M. : "Simulation of pneumatic transport in horizontal channels", ICHMT 2nd International Forum on Expert Systems and Computer Simulation in Energy Engineering, University of Erlangen, Germany, March 17-20, 1992, pp. 14.2.1-14.2.6.
- [574] Živković G., Sommerfeld M. : "Numerical calculations of gas-particle flows including particle-particle and particle-wall collisions", Proc. 6th Workshop on Two-phase Flow Predictions, Erlangen, 30.3.-2.4. 1992, pp. 182-193.
- [575] Zhuang Y., Wilson J.D., Lozowski E.P. : "A trajectory-simulation model for heavy particle motion in turbulent flow", *Transactions of ASME, Journal of Fluids Engineering*, Vol. 111, pp. 492-494 (1989).
- [576] Zhou Y., Wexler A.S., Wang L.-P. : "On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II : Finite inertia case", *Physics of Fluids*, Vol. 10, No. 5, pp. 1206-1216 (1998).