

# Simulation von Mehrphasenströmungen auf Parallelrechnern und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik

K. Pachler, K. Bernert, Th. Frank, H. Schneider

Technische Universität Chemnitz  
Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik  
Forschungsgruppe Mehrphasenströmung  
Reichenhainer Straße 70, 09107 Chemnitz, Deutschland  
Email: klpa@imech.tu-chemnitz.de

## 1 Motivation

Die numerische Simulation im Bereich der Anlagentechnik und im Motorenbau erlaubt kürzere Entwicklungszeiten bei gleichzeitiger Kostenreduktion. Die ständige Verbesserung der Modellierung von komplexen physikalischen Prozessen, wie der Strömungsturbulenz oder der Partikel-Partikelwechselwirkung, erlaubt die Darstellung von realen technischen Anwendungen, wie Gasfeststoffströmungen in Zyklonen oder die Kraftstoffeinspritzung mit anschließender Verdampfung, Zündung und Verbrennung in Motoren[1].

Die hohen Genauigkeitsanforderungen verlangen eine entsprechende Netzdicke, was einen großen Rechenaufwand bedeutet. Eine effiziente Lösung der Strömungsgleichungen ist sowohl auf Vektorals auch auf Parallelrechner möglich. Die Diskretisierung der dispersen Phase erfolgt nach dem Lagrangian Ansatz, der jedoch auf Vektorrechnern zu erheblichen Leistungseinbrüchen führt. Daher wird die Euler-Lagrange Simulation von Mehrphasenströmungen auf Skalarworkstations oder auf *MIMD* Parallelrechnern ausgeführt, wobei für die Eulerphase eine Gebietszerlegung und für die Partikelphase eine dynamische Partikel-Prozessorzuordnung implementiert wurde. Moderne Gleichungslöser (Mehrgitterverfahren) ermöglichen eine weitere Beschleunigung der Berechnung. Im folgenden wird die Anwendung der Mehrgittertechnik auf eine *Finiten Volumen* Diskretisierung des *SIMPLE* Algorithmus beschrie-

ben und zusammen mit einem Beispiel diskutiert.

## 2 Mathematisches Modell

Zur Beschreibung einer turbulenten, isothermen Luftströmung niedriger Machzahl werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und skalare Transportgrößen verwendet. Außerdem wird vom Newtonschen Spannungsansatz und dem Standard  $k - \epsilon$  Modell ausgegangen. Die partiellen Differentialgleichungen können in folgende allgemeine Form gebracht werden,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_F \Phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_F u_j \Phi) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = S + S^P$$

wobei  $\Phi$  für die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten  $u_i$   $i = 1 \dots 3$ , für die turbulente kinetische Energie  $k$ , für die Energiedissipation  $\epsilon$  und für die Skalare  $c_i$  steht.

Tabelle 1 zeigt die Variablen und Quellterme für die unterschiedlichen Gleichungen.  $\Gamma$  ist der Transportkoeffizient (Schmidt Zahl),  $S$  der Quellterm der Strömungsvariablen und  $S^P$  der Quellterm infolge der Wechselwirkung mit der Partikelphase,  $\mu$  ist die laminare  $\mu_t$  die turbulente Viskosität,  $\rho_F$  ist die Fluidichte und  $f_1$ ,  $f_2$  und  $f_3$  sind die kartesischen Komponenten der äußeren Kräfte (z.B. Gravitation) pro Masseneinheit.

Gleichung	$\Phi$	$\Gamma$	$S$	$S^P$
Kontinuität	1	0	0	$\sum \frac{\partial m_k^P}{\partial t}$
Impuls	$u_i$	$\mu_{eff}$	$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_F f_i$	$\sum \frac{\partial (m_k^P u_k^P)}{\partial t}$
turb. kin. Energie	$k$	$\frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$P_k - \rho_F \varepsilon$	0
Dissipation	$\varepsilon$	$\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$	$\frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon_1} P_k - c_{\varepsilon_2} \rho_F \varepsilon)$	0
Skalar	$c_i$	$\frac{\mu_t}{\sigma_k}$	0	$\sum \frac{\partial m_k^P}{\partial t}$
$P_k = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right); \mu_{eff} = \mu + \mu_t, \mu_t = \rho_F c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$				
$c_\mu = 0.09, c_{\varepsilon_1} = 1.44, c_{\varepsilon_2} = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3$				

Tabelle 1: Diffusionskoeffizienten und Produktions/Quellterme der Strömungsgleichungen

Die disperse Phase wird durch diskrete Partikeltrajektorien dargestellt, wobei jedes Rechenpartikel Stellvertreter für eine dem vorgegebenen Massenstrom entsprechende Anzahl von realen Partikeln mit den selben physikalischen Eigenschaften ist. Die Erhaltungsgleichungen für Impuls und Masse sind in [2] angeführt. Die daraus resultierenden gewöhnlichen Differentialgleichungen werden durch ein Runge-Kutta Verfahren 4.Ordnung mit automatischer Schrittweitensteuerung gelöst.

### 3 Diskretisierung

Die Diskretisierung erfolgt auf einem blockstrukturiertem, oberflächenangepasstem Netz, das aus Hexaedern besteht. Die Blöcke haben eine reguläre ijk-Struktur, was für die Lösung Vorteile bringt, jedoch auch im seriellen Fall eine spezielle Behandlung der Blockgrenzen erfordert. Eine indirekten Addressierung ist daher nicht erforderlich.

Beim Mehrgitterverfahren wird pro Gitterlevel die Netzteilung für alle 3 Hauptrichtungen durchgehend über alle Blöcke verdoppelt. Ausgangsnetz ist das Netz mit der höchsten Auflösung. Bei technisch realen Anwendungen sind 3 Gitterlevel oft schon das Maximum, weil das größte Gitter von der realen Geometrie und das feinste von der Speicherkapazität der Rechner bestimmt wird.

Die Parallelisierung erfolgt über eine Gebietszer-

legung, welche die aus dem Preprocessing entstandene Blockstruktur auf die einzelnen Knoten verteilt. Ziel ist eine optimale Lastverteilung d.h. gleichmäßige Verteilung der Zellen auf die Prozessoren bei gleichzeitiger Minimierung der Koppelflächen zwischen den Rechnerknoten.

Die Erhaltungsgleichungen sind nach der Finiten Volumen Methode diskretisiert. Alle Lösungsvariablen werden im Zellmittelpunkt berechnet. Um Druckoszillationen zu vermeiden, wird die Massenstrominterpolation von Rhie und Chow [3] verwendet. Die diffusiven Terme werden nach dem Zentraldifferenzschema, die konvektiven nach einem Blending zwischen Zentraldifferenzen- und Upwindschema berechnet. Die zeitliche Änderung wird mit einem impliziten Euler Schema diskretisiert.

## 4 Lösungsmethode

### 4.1 Die SIMPLE Methode

Ausgangspunkt der Untersuchungen ist der *SIMPLE* Algorithmus nach Caretto et al.[4], wobei die Impulsgleichungen, die Druckkorrektur, die Turbulenzgleichungen und Skalggleichungen nacheinander gelöst werden. Diese Reihenfolge wird bis zum Erreichen eines Konvergenzkriteriums wiederholt und entspricht einem iterativem Verfahren. Zur Lösung des linearen Gleichungssystems der jeweiligen Transportgleichung wird das *SIP* Verfahren [5] verwendet. Es ist numerisch effizient für alle Gleichungen bis auf die Druckkorrekturgleichung mit 2-5 Iterationen zu arbeiten. Der Druck benötigt allerdings ein Vielfaches an *SIP* Iteration. Hier bewirkt das Mehrgitterverfahren eine wesentliche Beschleunigung.

### 4.2 Die Multi-Grid Methode

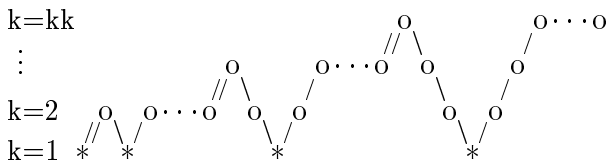
Nähere Information zum Multi-Grid (MG) Algorithmus können in [6], [7], [8] gefunden werden. Ein 2-Gitter Algorithmus besteht aus den folgenden Schritten:

1.  $\nu_1$  Glättungsiterationen auf dem feinen Netz (*Vorglättung*)
2. *Restriktion* auf das gröbere Gitter
3. Lösung auf dem gröberen Gitter
4. *Prolongation* der Ergebnisse auf das feinere Netz und Korrektur der letzten Feingitterapproximation
5.  $\nu_2$  Glättungsiterationen auf dem feinen Netz (*Nachglättung*)

Der Vorteil von 2 Netzen zeigt sich wie folgt: Hochfrequente Anteile des Lösungsfehlers werden auf dem feinen Netz schnell gedämpft ( $\nu_1$  und  $\nu_2$  sind 1 bis 3). Niederfrequente Anteile werden auf dem groben Netz ohne Genauigkeitsverlust, aber mit weniger Rechenoperationen gedämpft. Schritt 1 bis 5 werden mehrmals durchlaufen.

Der MG-Algorithmus ist eine Verallgemeinerung der 2-Gitter Methode: Die Grobgitterlösung wird rekursiv ersetzt durch ein oder zwei Stufen des 2-Gitter Algorithmus. Dies ergibt den V- und W-Zyklus, die auf einer Serie von Netzen arbeiten, die mit  $\omega_k$ ,  $k = 1, \dots, k_k$  bezeichnet werden.

Der *Full Multi-Grid* (FMG) Algorithmus startet auf dem größten Gitter  $\omega_1$  mit einer ausreichend hohen Anzahl von Iterationen. Dann errechnet eine FMG-Prolongation von höherer Ordnung eine Anfangslösung für die 2-Gitter Methode auf  $\omega_2$ . Nach  $\gamma$  Iterationen wird die Lösung zum nächst feineren Gitter prolongiert und so weiter bis zum feinsten Gitter  $\omega_{k_k}$ . Im Idealfall kann ein MG-Zyklus auf jedem Gitterlevel für die Lösung des Problems reichen. Abbildung 1 zeigt wie das MG-Verfahren arbeitet:



Symbole: \* exakte Lösung, o Vor- oder Nachglättung,  
 \ Restriktion, / Prolongation,  
 // FMG-Prolongation

Abbildung 1: FMG-Methode (V-Zyklus, 4 Gitter)

Zur Lösung der Strömungsgleichungen wird die FMG-Methode auf das nichtlineare System als Ganzes angewendet. Ein modifizierter *SIMPLE* Algorithmus dient als Glätter und Grobgitterlöser. Ein besseres Lösungsverfahren für die

Druckkorrekturgleichung bewirkt eine deutliche Erhöhung der Effizienz des *SIMPLE* Verfahrens.

### 4.3 Die verbesserte SIMPLE Methode

Der Einfluß der Druckiterationen wurde untersucht, um den original *SIMPLE* zu verbessern. Tabelle 2 zeigt die Ergebnisse von Berechnungen eines geraden Kanals mit  $32 \times 32 \times 128$  Elementen und einer Reynolds Zahl  $Re = 67000$ . Mit zuneh-

innere Iterationen für Druck	äußere Iterationen	T_gesamt in s	T_p in %
15	3024	17494	28
50	1503	12905	51
100	902	11174	66
200	517	10356	79
300	362	10083	85
400	273	9936	88
500	225	10679	90

Tabelle 2: Konvergenz des original *SIMPLE* Algorithmus abhängig von der Anzahl der Druckiterationen

mender Anzahl der Druckiterationen verringert sich die Anzahl der äußeren Iterationen (höhere Konvergenzgeschwindigkeit). Der Zeitaufwand zur Lösung der Druckgleichung  $T_p$  zeigt ein hohes Einsparungspotential auf. Deshalb wurde ein internes Mehrgitterverfahren für die Druckgleichung implementiert. Der *SIP* Löser arbeitet als Glätter und das Grobgitterproblem wird von einem CG Löser mit einer unvollständigen Cholesky Zerlegung als Vorkonditionierer berechnet.

Abbildung 2 zeigt die Konvergenz für den geraden Kanal mit  $64 \times 64 \times 256$  Elementen. *SIP* zeigt die originale *SIMPLE* Methode mit einer optimierten Anzahl von Druckiterationen. Die beiden anderen Kurven zeigen die verbesserte *SIMPLE* Methode mit dem internen Mehrgitterverfahren für den Druck ohne CG (MGP) und mit CG (MGP/CG) auf dem größten Gitter.

Im Parallelbetrieb verringert sich der Zeitanteil für die Datenaustauschoperationen unter Verwendung des CG-Lösers am größten Gitter auf 7.5%. Die Zeit für die Druckberechnung, verglichen mit der Gesamtzeit, verringert sich von 86% (SIP) über 37% (MGP) nach 26% (MGP/CG), während sich die Zeit  $T_{gesamt}$  von 100% über 7.2% nach 6.3% reduziert.

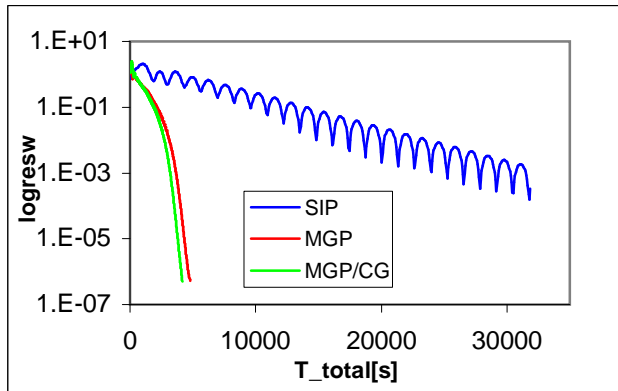


Abbildung 2: Konvergenz für den 1-Gitter *SIMPLE* Algorithmus mit unterschiedlichen Drucklösern

## 5 Numerisches Experiment

Das Laborexperiment zur Partikelwechselwirkung von [9] wird mit unterschiedlichen Partikelmassenströmen nachgerechnet. Abbildung 3 zeigt die mittleren Partikelgeschwindigkeiten, die mit den maximalen Werten nahe an der Grenzgeschwindigkeit liegen. Wandstoß und Partikel-Wechselwirkung führen zu einer Agglomeration im Bereich der Rohrverengung und reduzieren gleichzeitig die Fallgeschwindigkeit. Weitere Vergleiche mit Messungen sind in Arbeit.

## 6 Zusammenfassung

Dieser Beitrag zeigt die Vorteile einer Multi-Grid Methode gegenüber dem original *SIMPLE* mit *SIP* Löser. Dies gilt sowohl für den seriellen als auch parallelen Fall. Des weiteren wird der Lagrange Löser beschrieben und in einem Experiment für Partikel-Partikel Wechselwirkung vorgestellt. Die hohe Recheneffizienz beider Phasen ermöglicht die Implementierung weiterer Modelle im Bereich Wärme- und Stoffübergang.

## Literatur

- [1] **Pachler K., Prischmann D., Zima P.:** Der Einsatz der 3-Dimensionalen Strömungs- und Verbrennungsrechnung bei der Entwicklung der ECOTEC-Dieselmotoren von OPEL, 9. Internationaler VDI Kongress, Berechnung und Simulation im Fahrzeugbau, Würzburg, Deutschland, September 24./25., 1998
- [2] **Crowe C.T., Sommerfeld M., Tsuji Y.:** Multiphase Flows with Droplets and Particles, CRC Press, 1998.

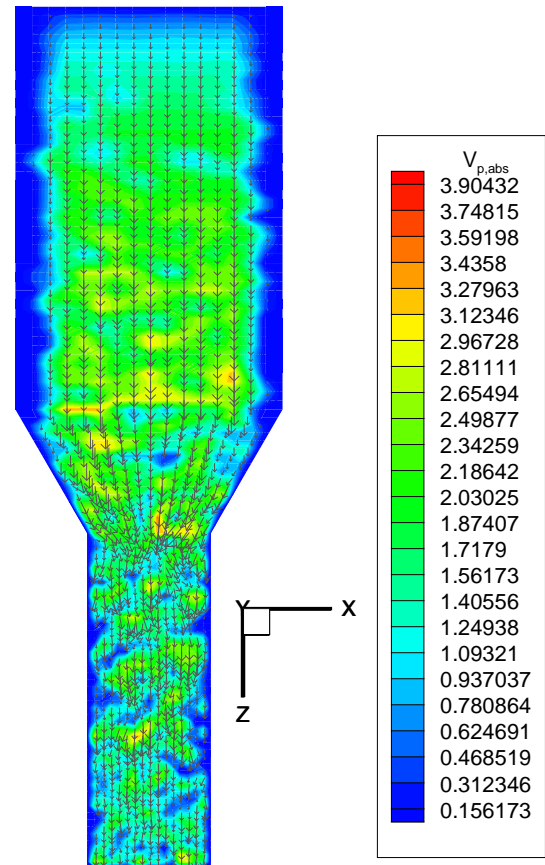


Abbildung 3: Zellgemittelte Partikelgeschwindigkeit in einem konvergenten Kanal

- [3] **Rhie, C. M., Chow, W. L.:** Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, *AIAA J.* Vol. 21, 1525-1532, (1983)
- [4] **Caretto, L.S., Gosman, A.,D., Patankar, S.V., Spalding, D.B.:** Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation, *Proc. Third Int. Conf. Numer. Methodes Fluid dun., Paris* (1972)
- [5] **Stone, H.L:** Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, 5, 530-558, (1968)
- [6] **Bernert, K.:**  $\tau$ -Extrapolation – Theoretical Foundation, Numerical Experiment and Application to Navier-Stokes Equations, *SIAM J. Sci. Comput.* Vol. 18, No. 2 (1997)
- [7] **Brandt, A., Dinar, N.:** Multigrid solutions to elliptic flow problems, in: *Numerical methods for partial differential equations* (ed. by S. v. Parter), Academic Press, New York London Toronto Sydney San Francisco, 1979, S. 53-147
- [8] **Hackbusch, W.:** Multigrid methods and applications, Springer-Verlag, Berlin 1985
- [9] **Fohanno, S., Oesterle, B.:** Analysis of the Effect of Collisions on the Gravitational Motion of Large Particles in a Vertical Duct, *Int.J. of Multi Phase Flows*, pp. 267-292, Vol26(2) 2000