

Abschlussbericht

zum DAAD-Forschungsvorhaben "Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen für komplexe Strömungsaufgaben bei Raumluftrömungen (Large Eddy Simulation - LES)"

J. A. Denev , Th. Frank

Dieser Bericht umfasst die durchgeführten Forschungsarbeiten von Dr.-Ing. Jordan Denev an der TU Chemnitz, Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen (Numerikgruppe). Er umfasst den vom DAAD finanzierten Zeitintervall vom 15.08.2002 bis 14.10.2002.

Betreuung: Dr.-Ing. habil Thomas Frank

Inhalt des Berichtes:

| | |
|--|---|
| 1. Software-Implementierung von LES-Gleichungen und der notwendigen Randbedingungen. | 2 |
| 2. Zusammenarbeit mit der Numerikgruppe. | 2 |
| 3. Hochleistungsrechnungen - Computersimulation einer Kanalströmung mit Partikelbewegung. | 3 |
| 4. Hochleistungsrechnungen - Computersimulation der Drallströmung in einem Standardzyklon. | 4 |
| 5. Graphische Darstellung der Ergebnisse und Vorbereitung von Veröffentlichungen. | 5 |
| 6. Perspektiven der Weiterarbeit und der Fortführung der Kooperation mit deutschen Kollegen. | 5 |
| 7. Literatur | 6 |

1. Software-Implementierung von LES - Gleichungen und der notwendigen Randbedingungen.

Die Methode der Grobstruktursimulation (LES - Large Eddy Simulation) wurde in das von der Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen im Laufe der Jahre vollständig parallelisierte Berechnungsprogramm MISTRAL/PartFlow-3D (Frank 2002) implementiert.

Es wurden folgende Routinen entwickelt:

- Routine "CALLES" für die Berechnung des anisotropen Anteils des turbulenten Feinstrukturspannungstensors. Dabei wurde der Gleichungssatz von Smagorinsky benutzt (siehe Anhang A des Forschungsvorhabens). In derselben Routine wurden auch die Van-Driest-Dämpfungsfunktionen implementiert, um die physikalischen Effekte in der Nähe fester Wände besser erfassen zu können.
- Routine "F3D_PERIODICBC" zur Realisierung von periodischen Randbedingungen. Diese Routine ist momentan stark problemabhängig und müsste für jede neue Strömungsanwendung weiterentwickelt werden.
- Wandmodell nach Werner und Wengle (1993). Diese Wandfunktionen haben den Vorteil, dass bei ihnen die momentane Wandschubspannung aus dem momentanen Geschwindigkeitsfeld berechnet wird und so keine rechenzeitaufwendige Zeitmittelung erforderlich ist. Dieses Wandmodell wurde zu den schon existierenden Modellen in der Routine "F3D_WALBC" hinzugefügt.
- Berechnung der normalen Entfernung eines inneren Feldpunktes zu festen Wänden, die zu den obengenannten Van-Driest-Dämpfungsfunktionen benötigt wird, wurde in der Routine "F3D_GEO" entwickelt.
- Gelegentliche kleinere Modifikationen wurden an verschiedenen Stellen von etwa insgesamt 10 anderen Programm-Routinen durchgeführt. Verschiedene Programmentwicklungen wurden auch für die zeitliche Mittelung der instationären Strömungsfelder und die Vorbereitung der berechneten Variablen für die Ausgabe in den entsprechenden Ausgabedateien unternommen.

2. Zusammenarbeit mit der Numerikgruppe.

Da alle Programmimplementierungen selbstverständlich genaue Kenntnisse der äußerst komplizierten Programmstruktur von MISTRAL/PartFlow-3D verlangten, und nicht viel Zeit zur Einarbeitung in diese Software zur Verfügung stand, wurden die Programmentwicklungen in enger Zusammenarbeit mit Dr. -Ing. habil. Thomas Frank und Dipl.-Ing. Klaus Pachler durchgeführt.

Für die gesamte Betreuung durch Dr.-Ing. habil Thomas Frank und die ständige Hilfe und Unterstützung während der gesamten Forschungsarbeiten, möchte ich mich hiermit recht herzlich bedanken. Darunter wollte ich besonders folgende Fakten erwähnen:

- Organisation von Zutrittsrechten am Rechenzentrum an der Technischen Universität Chemnitz und an dem dort installierten Parallelrechner "Chemnitzer Linux-Cluster (CLIC)" mit über 500 Prozessoren;

- Bereitstellung und Hilfe bei der Durchführung von Parallelrechnungen auf eigenen Rechnern am lokalen parallelen Computer-Cluster mit 12 Prozessoren der Numerikgruppe;
- Bereitstellung von umfangreichem Festplattenspeicherplatz und Sicherung der Ergebnisse;
- Unterstützung bei der Gitternetzgenerierung für die Strömungsberechnungen.

Für die vielen sachlichen Diskussionen und ständige Hilfsbereitschaft möchte ich auch dem Doktoranden Herrn Dipl.-Ing. Klaus Pachler herzlich danken. Alle Ergebnisse des geplanten Forschungsvorhabens wurden nur im Rahmen einer engen Zusammenarbeit in der Numerikgruppe ermöglicht.

3. Hochleistungsrechnungen - Computersimulation Kanalströmung mit Partikelbewegung.

Die turbulente Kanalströmung mit einer Reynoldszahl von $Re=4100$ wurde gemäß den oben beschriebenen Programmentwicklungen numerisch berechnet. Einige wichtige Parameter dieser Rechnung sind die Folgenden:

- Blockstrukturiertes numerisches Gitter mit 12 Blöcke und 375 000 Kontrollvolumen;
- Parallelrechnung mit 12 Prozessoren des Chemnitzer Linux-Clusters (CLIC; Pentium III, 800 MHz) mit 132 Stunden Gesamtrechnzeit;
- 90 000 Zeitschritte zur Mittelung der zeitabhängigen (turbulenten) Strömungswerte.

Wichtige physikalische Merkmale, wie die Sekundärströmungen im Querschnitt des Kanals, die mit konventionellen Turbulenzmodelle nicht erfasst werden können, wurden mit den LES-Modellansätzen erfolgreich modelliert. Ein Geschwindigkeitsbild (Vektorenverteilung) in einem Querschnitt des Kanals ist im Bild 1. dargestellt. Die berechneten Partikelbahnen in der turbulenten Kanalströmung sind in Bild 2 dargestellt.

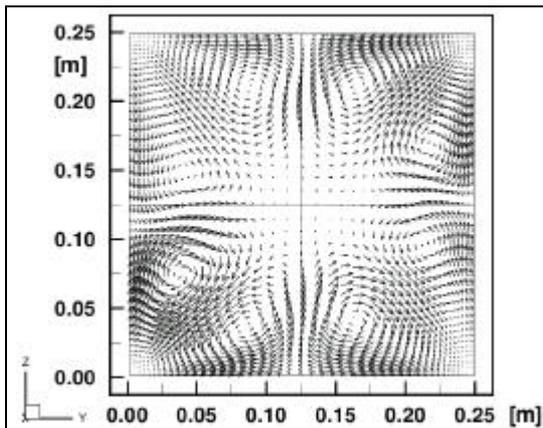


Bild 1. Sekundärwirbel im Querschnitt des berechneten Kanals

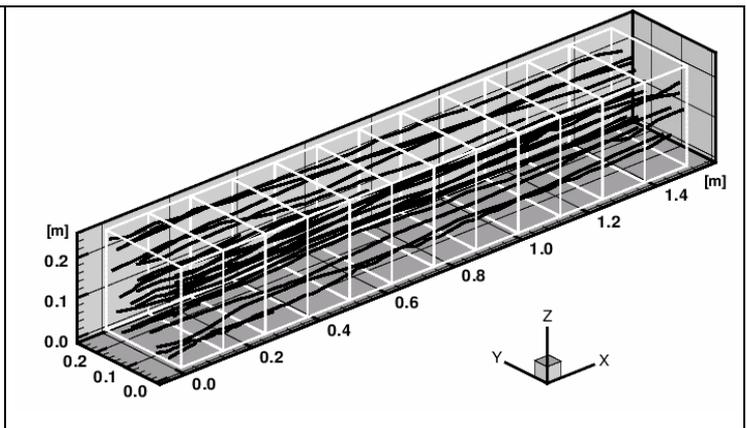


Bild 2. Partikelbahnen der Turbulenten Kanalströmung in den 12 Gitterblöcken

4. Hochleistungsrechnungen - Computersimulation der Drallströmung in einem Zyklon.

Drallströmungen in Zyklonen stellen eine besondere Herausforderung an die Turbulenz-Modellierung, da deren Eigenschaften oft auch qualitativ nicht von konventionellen Turbulenzmodellen richtig erfasst werden können, wie z.B. die Verteilung der Umfangskomponente der Gasgeschwindigkeiten. Dies ist in erster Linie auf die starke Stromlinienkrümmung und den anisotropen Charakter der turbulenten Wirbel-Senken-Strömung in Zyklonen zurückzuführen, der von den Zweigleichungs-Turbulenzmodellen modellbedingt nicht wiedergespiegelt werden kann. Erst mit Turbulenzmodellen höherer Ordnung gelingt eine numerische Berechnung der Zyklonströmung, die einen zufriedenstellenden Vergleich mit Messergebnissen erlaubt.

Die Rechnungen wurden mit einem feinen Gitternetz durchgeführt, das mehr als 1,5 Millionen Kontrollvolumen (in 94 Gitterblöcken) aufwies (Bild 3). Die Parallelrechnungen wurden auf 48 Prozessoren gestartet und die Rechenzeit betrug 256 Stunden für eine LES-Simulation. Zur Gewinnung des zeitlich gemittelten Strömungsfeldes wurde eine Mittelung der Geschwindigkeitsfelder über insgesamt 30.000 Zeitschritte vorgenommen und die Ergebnisse dieses Mittelungsprozesses wurden anschließend mit den Messergebnissen von Gorton-Hülgerth (1999) verglichen. Dabei konnte für die Verteilungen der drei Geschwindigkeitskomponenten der Gasphase über einen radialen Schnitt der Zyklongeometrie eine überwiegend gute Übereinstimmung mit den Messwerten festgestellt werden (Bild 4). Der Vergleich mit den Ergebnissen einer Strömungsfeldberechnung mit einem Standard $k-\epsilon$ Turbulenzmodell zeigt die mit der LES erzielbare deutliche Verbesserung des berechneten Strömungsfeldes im Standardzyklon.

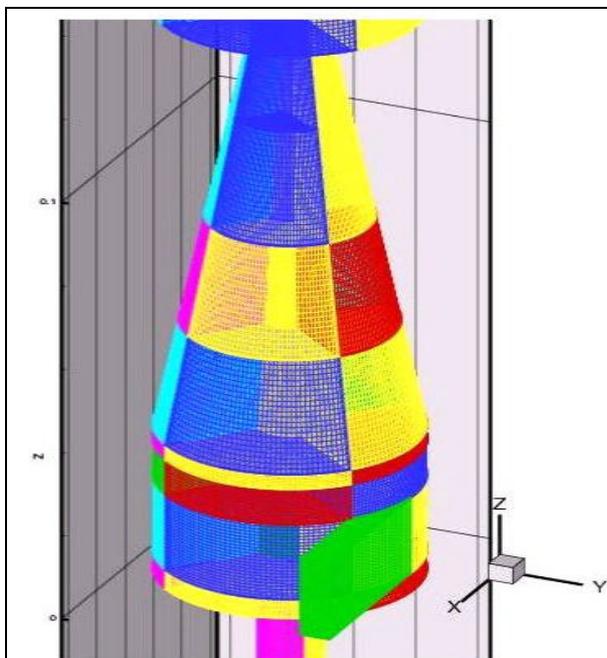


Bild 3. Gitternetz vom Zyklon mit 1,5 Millionen Kontrollvolumen – 94 Blöcke berechnet auf 48 Prozessoren

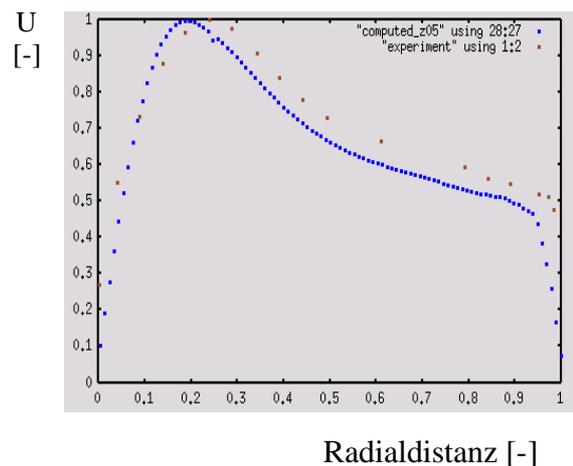


Bild 4. Vergleich der mit LES berechneten Werte mit Experimenten von Gorton-Hülgerth (1999) für die Umfangsgeschwindigkeit „U“ entlang dem Radius unmittelbar unter dem Tauchrohr

5. Graphische Darstellung der Ergebnisse und Vorbereitung von Veröffentlichungen.

Zur graphischen Auswertung der großen Datenmengen der Ergebnissen (numerische Werte von 20 berechneten Variablen in über 1.5 Millionen Kontrollvolumen !) wurde die in der Numerikgruppe lizenzierte kommerzielle Software Tecplot 9.0 benutzt (Bilder 1, 2 und 3).

Als Folge der Zusammenarbeit entstehen zunächst 2 gemeinsame Veröffentlichungen, nämlich:

- 1) J.A. Denev, Th. Frank and K. Pachler, 2003, "Large Eddy Simulation of Turbulent Square Channel Flow using a PC-cluster architecture", *4th International Conference on "Large-Scale Scientific Computations"*, June 4-8, Sozopol, Bulgaria, 2003.
- 2) Th. Frank, Jordan A. Denev und K. Pachler, 2003, "Large Eddy Simulation (LES) der Gas-Feststoff-Strömung in einem Standardzyklon", *Sitzung der GVC-Fachausschüsse "Agglomerations- und Schüttguttechnik" und "Mehrphasenströmungen"*, 5.-7. März 2003, Baden-Baden, Germany.

Beide Veröffentlichungen sind z.Z. noch in der Bearbeitungsphase und werden erst für die entsprechenden Terminen der beiden Veranstaltungen fertiggestellt.

6. Perspektiven der Weiterarbeit und der Fortführung der Kooperation mit deutschen Kollegen.

Das im Rahmen der DAAD-finanzierte Forschungsprojekt erlaubte die Entwicklung eines grundsätzlichen Simulationsverfahrens (LES), dass für die numerische Untersuchung turbulenter Strömungen dienen kann. Doch durch die Bemühungen von Dr.-Ing. habil. Th. Frank und die großzügige Unterstützung des DFG-Sonderforschungsbereiches 393 an der TU Chemnitz konnte eine Verlängerung meines Aufenthaltes um 2 weitere Monate stattfinden. Dadurch wurden verschiedene Parametervariationen an der Kanalströmung durchgeführt (Geschwindigkeit im Kanal, Werte von Modellkonstanten von LES, Einfluss unterschiedlicher Zeit- und Raumdiskretisierungsschemata auf die physikalischen Werte der Kanalströmung). Das entwickelte numerische Verfahren wurde in dieser Zeit ebenso dazu verwendet, eine völlig neue turbulente Raumluftrömung nach den detaillierten LDA-Messungen von Herwig et al. (2003) zu berechnen. Eine weitere Veröffentlichung ist auch hier geplant.

Langfristig werden die im Rahmen dieses Forschungsprojektes gewonnenen Erfahrungen einen neuen Forschungsbereich bezüglich Turbulenzmodellierung von Raumluftrömungen mit LES auch an der TU Sofia erlauben.

Das durch den DAAD finanzierte Forschungsprojekt hat zu einer wesentlichen Weiterentwicklung in meiner beruflichen Qualifikation im Bereich von Turbulenzmodellierung, Mehrphasenströmungen mit Partikelberechnung, Parallelisierung und Blockstrukturierung von Strömungssimulationssoftware beigetragen. Dafür möchte ich an dieser Stelle auch den Mitarbeitern des DAAD recht herzlich danken.

7. Literatur

- Frank, Th. 2002.** "Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik", *Habilitationsschrift, Veröffentlicht im Shaker Verlag, Aachen, Reihe Strömungstechnik, 17 Tabellen, 126 Abbildungen, 356 Seiten, September 2002.*
- Gorton-Hülgerth, A., 1999 :** "Messung und Berechnung der Geschwindigkeitsfelder und Partikelbahn im Gaszyklon", *VDI--Fortschritt--Bericht, Reihe 7, Nr. 357*
- Herwig, H., H. Mozikat and T. Gürtler, 2003,** "An experimental data basis for the evaluation of CFD-codes in a complex interior flow", *to be published in International Journal for Numerical Methods in Fluids.*
- Werner, H. and H. Wengle, 1993,** "Large eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel, *8th Symp. on Turb. Shear Flows, Schumann et al. (eds), Springer Verlag, Berlin.*