

Dr. Th. Frank<sup>1</sup>, Dr. K. Bernert, Dipl.–Ing. K. Pachler, Dr. H. Schneider  
FG Mehrphasenströmungen, Professur Techn. Thermodynamik, TU Chemnitz

## **MISTRAL/PartFlow–3D – ein vollständig parallelisiertes Berechnungsverfahren für disperse Fluid–Partikel–Strömungen**

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. Beschränkt man sich in der Betrachtung auf disperse Fluid–Partikel–Strömungen und wählt das Euler–Lagrange–Verfahren zu deren Modellierung und numerischer Berechnung, so werden zur Lösung realer Aufgabenstellungen z.B. aus dem Gebiet der Energie– und Verfahrenstechnik nicht selten extrem hohe Rechenleistungen benötigt, wie sie heutzutage nur von massiv parallelen Hochleistungsrechnern bereitgestellt werden können. Dies trifft insbesondere dann zu, wenn Strömungen mit höheren Konzentrationen der dispersen Phase berechnet werden sollen. Der erhöhte Phasenanteil der dispersen Phase führt in diesem Fall zu starken Wechselwirkungen zwischen Fluid– und Partikelphase (Masse–, Impuls– und Wärmeübertragung), zu einer wechselseitigen Beeinflussung von Partikelbewegung und Fluidturbulenz sowie zu verstärkter Partikel–Wand– und Partikel–Partikel–Wechselwirkung. Man spricht in diesem Fall auch von Vier–Wege–Kopplung.

Ein weiterer Faktor, der zu einem hohen zu bewältigenden numerischen Rechenaufwand führt, ist die statistische Zuverlässigkeit der numerischen Ergebnisse für die mittleren Partikelzustandsgrößen. Komplexe dreidimensionale Strömungsgeometrien erfordern nicht selten eine Vernetzung mit komplexen numerischen Gitternetzen mit einigen 100 000 oder sogar Millionen von Gitterzellen. Um die statistische Zuverlässigkeit der aus einem räumlichen Mittelungsprozess über eine Gitterzelle des numerischen Gitternetzes abgeleiteten mittleren Partikelzustandsgrößen gewährleisten zu können, ist die Berechnung von einigen 100 000 Partikeltrajektorien erforderlich. Für instationäre Fluid–Partikel–Strömungen können sogar 2–3 Millionen simultan zu berechnender Partikeln im Strömungsgebiet notwendig sein, um zuverlässige Simulationsergebnisse zu erzielen.

Das in der Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen der TUC entwickelte Euler–Lagrange–Verfahren MISTRAL/PartFlow–3D basiert auf einer Finite–Volumen–Diskretisierung der Transport– und Erhaltungsgleichungen für die kontinuierliche Phase auf randangepaßten, nicht–orthogonalen, blockstrukturierten Gitternetzen. Die Lösung des Gesamtsystems unter Berücksichtigung der Druck–Geschwindigkeits–Kopplung erfolgt dann mit Hilfe eines modifizierten SIMPLE–Verfahrens. Zur Konvergenzbeschleunigung auf großen Gitternetzen wurden Mehrgittertechniken implementiert.

Zur Berechnung der Partikelbewegung wird das Lagrange–Verfahren verwendet. Für die betrachtete Klasse von dispersen Fluid–Partikel–Strömungen führt die Modellierung der auf eine kugelförmige Einzelpartikel im Strömungsfeld wirkenden Kräfte und Momente zur Formulierung der Partikelbewegungsgleichungen, die eine numerische Berechnung der Partikelbewegung ermöglichen. Zusätzliche Modelle dienen der Charakterisierung der Partikel–Wand–Wechselwirkung mit glatten und rauen Wänden, der Berücksichtigung von Partikel–Partikel–

---

<sup>1</sup>Email: frank@imech.tu–chemnitz.de, WWW: <http://www.imech.tu–chemnitz.de>

Stoßvorgängen in dispersen Mehrphasenströmungen mit höherer Konzentration der dispersen Phase und der Beschreibung der Wechselwirkung zwischen kontinuierlicher Phase und Partikelbewegung.

Die Praxis zeigt, 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 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.

Im vorgestellten Euler-Lagrange-Verfahren MISTRAL/PartFlow-3D wird die notwendige Berechnungsleistung durch eine konsequente Parallelisierung des Gesamtverfahrens ermöglicht. Für den Navier-Stokes-Solver erfolgt die Parallelisierung durch Anwendung von Gebietszerlegungsverfahren auf das blockstrukturierte Gitternetz. Ein auf die Bedürfnisse der Parallelisierung abgestimmtes Preprozessing und Multiblock-Techniken führen zu ausreichender Lastbalancierung des Lösungsverfahrens. Für den Lagrange'schen Partikellöser (stationäres Partikeltracing oder instationäre, simultane Partikelverfolgung) werden zwei Parallelisierungsverfahren vorgestellt. Die Statische Domain Decomposition (SDD) ermöglicht zunächst die Übertragung der für den Navier-Stokes-Solver angewendeten Parallelisierungskonzepte, führt jedoch in bestimmten Strömungssituationen (z. B. für Fluid-Partikel-Strömungen mit größeren Konzentrationsunterschieden der dispersen Phase im Strömungsraum) zu einer stark ungenügenden Lastbalancierung des parallelen Lösungsverfahrens und somit zu nur geringer paralleler Effizienz. Das von den Autoren entwickelte Parallelisierungsverfahren der Dynamischen Domain Decomposition (DDD) führt auch in diesen Situationen zu einer deutlich verbesserten Lastverteilung und ermöglicht die Ausnutzung der parallelen Rechenleistung unabhängig von der konkreten Strömungsaufgabe.

Abschließend werden einige Anwendungen des entwickelten Lösungsverfahrens auf Problemstellungen der Energie- und Verfahrenstechnik gezeigt. So wurde das Lösungsverfahren zur Berechnung der Partikelbewegung und -abscheidung in Zyklonen unterschiedlicher Bauart eingesetzt. Eine weitere Anwendung besteht in der Untersuchung der Kohlestaubzuführung eines mit aufgemahlener Steinkohle betriebenen Großkraftwerkskessels. Zur Bestimmung der Partikelmassenstromaufteilung auf die Kohlestaubbrenner des Brennraumes wurde die Kohlestaubströmung in dem Rohrleitungssystem und den Strömungsteilern (Bifurcatoren) für verschiedene Betriebsbedingungen numerisch berechnet. Als Beispiel für eine instationäre Fluid-Partikel-Strömung dient der CFD-Benchmark der DFG einer partikelbeladenen Von-Karman'schen Wirbelstraße hinter einem angeströmten Kreiszyylinder.

- [1] Frank Th. : "Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik", zur Eröffnung des Habilitationsverfahrens an der Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik der TU Chemnitz eingereichte Habilitationsschrift, 17 Tabellen, 126 Abbildungen, 322 Seiten, Oktober 2001.