

基于宏观粒子方法直接数值模拟的气固系统大规模并行计算

熊勤钢 葛蔚*
中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 北京, 100190

摘要 气固系统由于其时空多尺度结构和非线性非平衡特性特征, 其机理还远未认识清楚。本文从直接数值模拟的角度论述了宏观粒子方法在气固系统机理探索中的应用。首先论述了宏观粒子方法的发展过程及其初期应用, 随后介绍此方法的大规模并行计算的算法框架和性能, 最后回顾了利用此方法的大规模并行模拟上千个固体颗粒的结果及所得到的重要结论。在本文的结尾, 对宏观粒子方法对气固系统的未来工作做了一点展望。

关键词: 气固系统; 直接数值模拟; 大规模并行计算; 宏观粒子方法

Massive Parallel Simulation of Gas-solid Suspension with Macro-scale Particle Method

Qingang Xiong, Wei Ge*
State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract: Due to the nonlinear and nonequilibrium characteristics and the temporal-spatial multiscale structures, the mechanism behind gas-solid systems are far from fully understood. In this article, the application of macro-scale particle methods (MaPM) to the exploration of mechanism of the gas-solid systems is reviewed from the aspect of direct numerical simulation. We first introduce the development of macro-scale particle methods (MaPM) and their earlier applications, then, the massive parallel computation algorithm and framework of these methods are discussed, finally, our work on application of these methods to the simulation up to thousands of suspended particles by the massive parallel computation are reviewed. At the end of this paper, development is discussed for future researches.

Keywords: Gas-solid system; Direct numerical simulation; Massive parallel computation; Macro-scale particle method

1. 简介

气固两相流体系统在工业工程中的应用十分广泛, 但因为此类系统往往包含丰富的多尺度非均匀结构并表现出显著的非线性非平衡特性^[1], 人们对其机理还缺乏认识, 所以对其设计和放大大多依靠经验和中试, 而这样又非常的耗时和代价昂贵。模拟既可以作为设计的一种工具而加快设计的进程, 又能对一些基本假设(如颗粒动理论中的麦克斯韦速度分布等)进行验证, 还能对更深层次的机理进行探索, 故而数值模拟一直是气固两相流体研究中的重要领域的热门领域。传统的数值模拟方法主要有双流体模型^[2](Two-fluid model, TFM)和离散颗粒模型^[3](Discrete particle model, DPM)两种。双流体模型将流体和固体都作为连续体来处理, 以高于颗粒直径几个量级的网格为单元, 其显著的优点是计算量小, 而且拥有约半个世纪的发展历史, 相对成熟, 但是其所倚靠的基本理论大都是一些经验或半经验公式(如Wen&Yu^[4]公式和颗粒动理论^[5]等), 因而会造成计算上的极大误差。离散颗粒模型能够反映系统的不均匀结构及其动态变化, 但其计算量大致正比于跟踪的颗粒数, 难以用于大规模工业应用, 而且其中的固体颗粒和流体

作用的耦合尺度极不相称, 同样会造成计算上的较大误差, 所以其花费额外的计算量并没有起到真正作用。

针对以上TFM和DPM中出现的问题, 近年来, 基于单个颗粒尺度以下的直接数值模拟(Direct Numerical Simulation, DNS)以其能从根本上揭示多尺度结构形成的机理和有可能为TFM和DPM提供更可靠的本构关联式而受到日益广泛的关注。用传统基于网格的有限差分方法或有限元方法等直接数值求解Navier-Stokes方程, 是人们最容易想到也是最容易接受的方法。然而, 这对含有大量运动边界(即流体和固体颗粒相界面)的气固流动是相当困难的。若采用结构化网格, 则同一微元中存在物性迥然相异的固体和流体, 造成计算方法和精度上的困难。若采用非结构化网格, 可使颗粒与网格的边界重合, 但这却又使得网格要随着颗粒的运动而频繁地重新生成, 会极大的增加计算量, 同时也影响计算精度。而传统的粒子方法(如Molecular Dynamics^[6], MD等)虽然边界适应性强而且求解简单但计算量过大。格子波尔兹曼方法^[7](Lattice Boltzmann, LB)虽然计算量较小且实现容易, 但由于其自身的原因而暂时无法运用于具有大密度比的气固系统。因此, 如果采用粒子化的方法去求解

Navier-Stokes方程, 也许能够有效结合上述两类方法的长处却规避它们的缺点。

宏观拟颗粒模型(Macro-scale Pseudo-Particle Modeling, MaPPM)就是在这样的背景下提出的^[8]。与光滑粒子流体动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)^[9]类似。MaPPM将流体离散成遵循流体力学基本方程的相互作用的微元(粒子), 而将方程中涉及的不同算子, 如梯度、散度和Laplace算子, 表达为邻近粒子间方向导数可叠加的加权平均形式。这样, 就避免了传统DNS中网格的使用, 实现了从偏微分方程到常微分方程的转化, 使得求解过程就跟其它粒子方法一样的简单。而另一方面, 该方法由于基于流体力学基本方程, 相比较于传统的粒子方法计算的尺度上升了几个量级, 计算量明显下降。因此, 对于实际气固两相系统的模拟, MaPPM应该是非常理想的选择。运用MaPPM已经^[8,10]模拟了封闭腔体内流化床的膨胀和节涌(图1)等过程, 得到了移动颗粒周围的详尽流场信息, 清晰地观察到了颗粒后的尾涡和颗粒成串等有意义的现象。尽管限于当时计算机硬件水平, 研究的系统最多只包含几十个固体颗粒, 但是已经足以展示MaPPM从微观尺度探索颗粒流体系统中不均匀

► 结构机理的优越性。

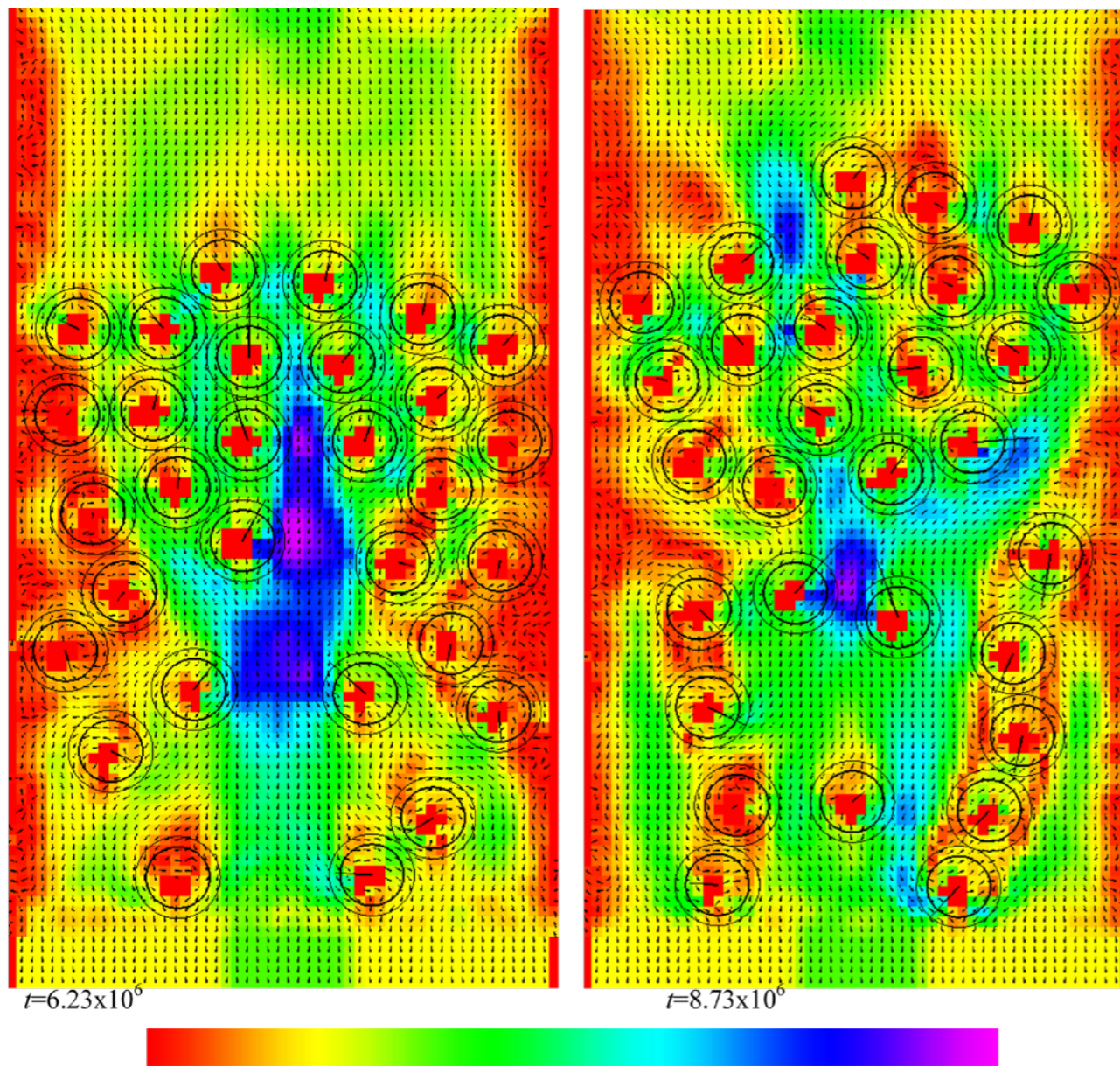


图1 封闭腔体内多个颗粒被流化的MaPPM模拟

2. 并行算法

进一步模拟更大的系统，首先面临的就巨大的计算量，对于同样的系统，MaPM就处理的

流体最小单元数量而言，要高出双流体等连续模型好几个量级。所幸MaPM的算法是内在并行的，即粒子间的作用是局部和可叠加的，适合于区域分解(Spatial

Decomposition, SD) 的大规模并行处理(Massive Parallel Processing, MPP)。基于Message-Passing Interface (MPI)并行环境和shift消息传递模式，唐德翔

等^[11]和王小伟^[12]等成功设计了按照空间分解的气固系统MaPM模拟并行算法。现简单介绍如下：并行计算时各个处理器的计算区域如图2所示。

内层的区域是处理器的实际计算区域，外层的区域包括了所有从邻近处理器传递过来的边界粒子。同样的，固体颗粒的也对应有自己的内外层区域。计算流

程如图3所示。首先是计算任务的分解，即将粒子按空间中的位置分配给各个处理器。为了保证各处理器间的计算负载平衡，划分区域时，应使每个处理器的粒子数目大致相同。计算（包括作用力计算和速度、位移更新）总是分成两个部分：拟颗粒（冻结粒子）部分和固体颗粒部分。另外，由于固体颗粒与拟颗粒之间的作用是通过拟颗粒和冻结粒子之间的作用来计算的，因此计算中还需要把冻结粒子受到的作用

表1 运算时间随处理数量的变化^[11]

处理器数(个)	64	256	512	1024
平均粒子数/处理器数	85937.5	21484.4	10742.2	5371.1
计算时间(s)	0.934	0.209	0.112	0.055
运算总时间(s)	1.299	0.283	0.16	0.09

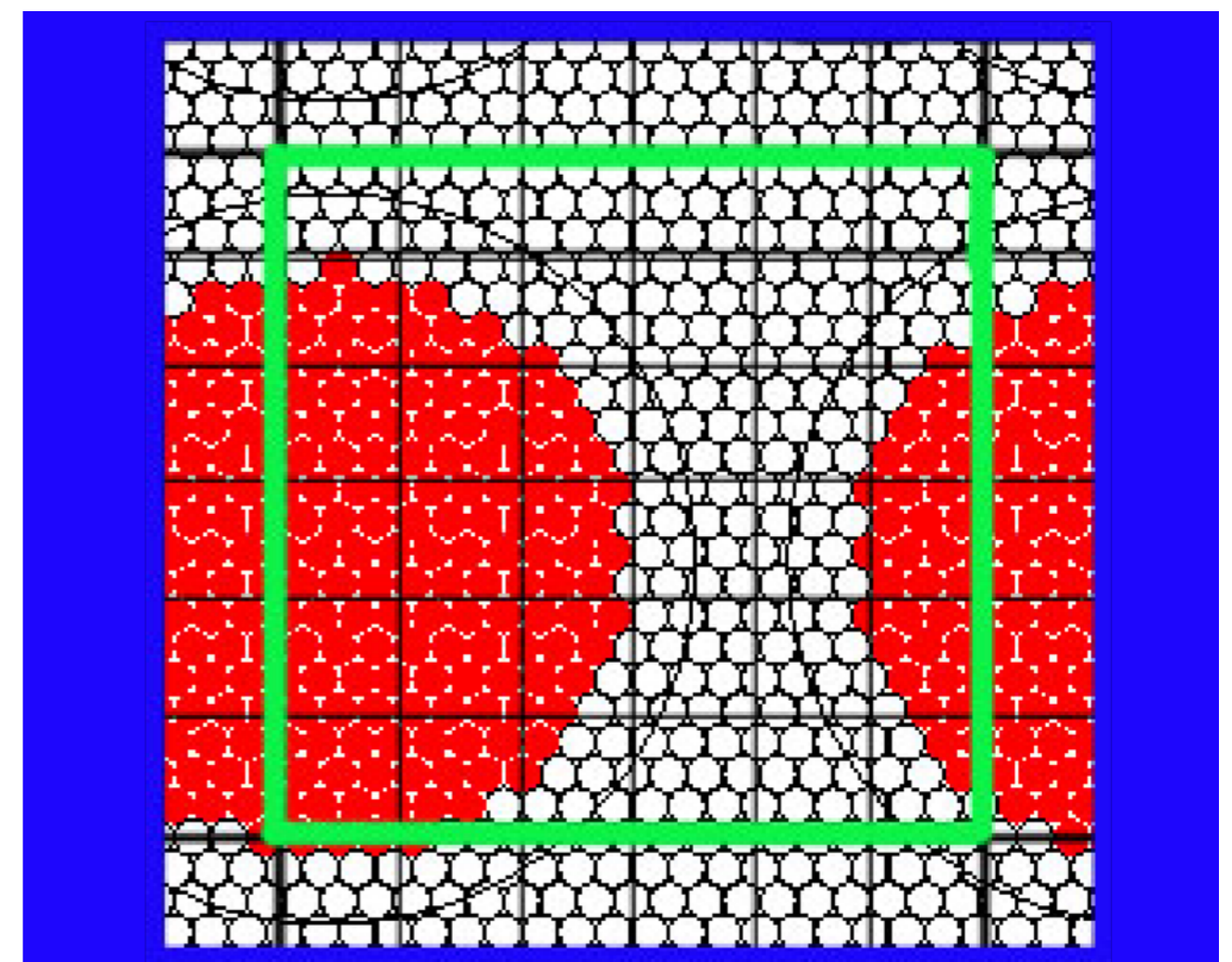
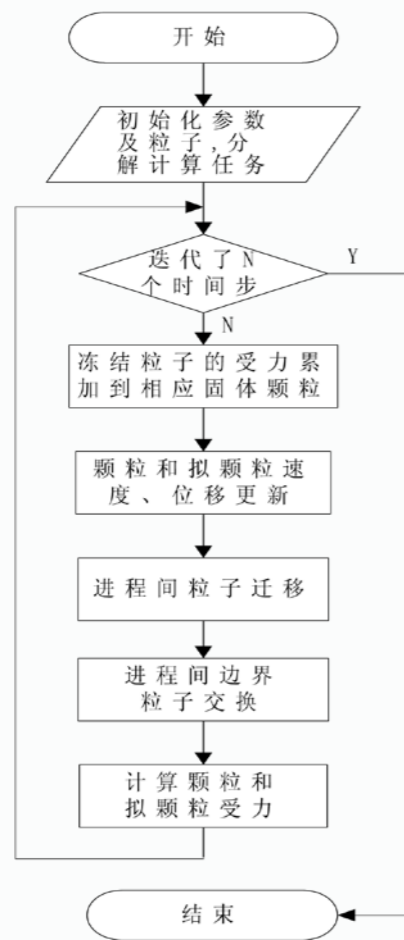


图2 处理器计算区域^[12]

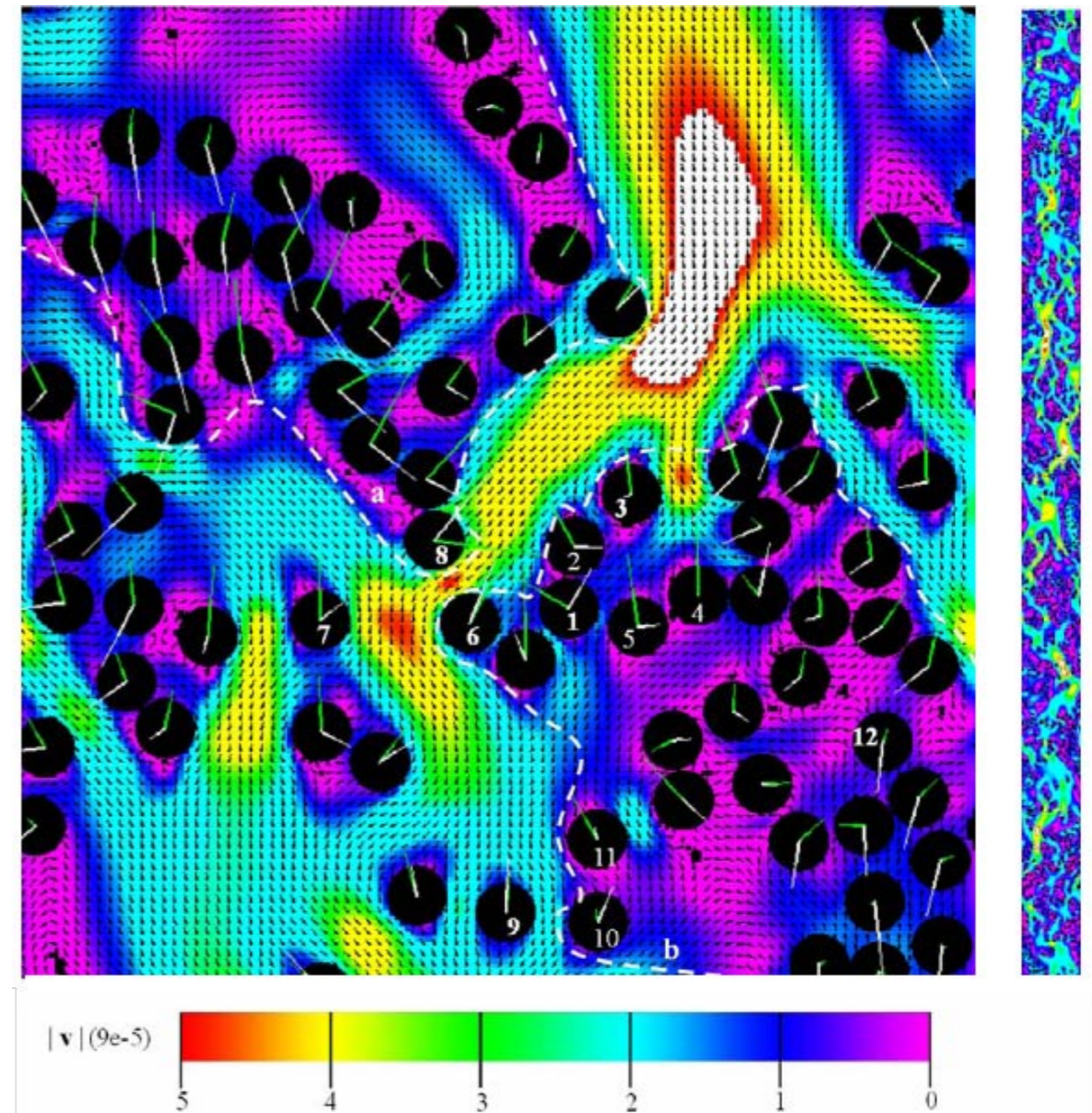
图3 并行计算流程图^[12]

力累加到相应的固体颗粒。跟串行计算相比，这里最主要的区别就是每一步更新粒子位置后，需要向邻居处理器节点发送（或接收）迁出（或进入）当地节点的粒子，并且在每次计算受力之前还要向邻居节点拷贝边界信息。运用该算法，唐德翔等^[11]模拟了包含上千个固体颗粒的气固悬浮系统。为了充分研究MaPM的并行性能，模拟分别用了一系列不同数量的CPU，最多时候达到了1024个处理器，此时区域分解的粒度

已经很细，但从表1可以看出，其效率仍近乎随处理器数目线性增长，表现出优异的并行效率和良好的可扩展性。由于MaPM中，组成固体颗粒的拟颗粒没有相互作用，而且处在固体颗粒内部的粒子因为超过了作用域范围也不与流体粒子作用，因此固体颗粒的分布不均会造成处理器负载不均衡。所以，王小伟等^[12]还针对这个现象发展了动态负载均衡算法，进一步将并行效率提高了8%。

3. 模拟结果和讨论

基于以上开发的高效并行算法，麻景森^[13]等用改进后的宏观粒子方法对达到统计规模的气固悬浮系统（包含1024个固体颗粒）进行模拟。基于小于固体颗粒直径一个量级以下的分辨率精细刻画系统中的多尺度现象（图4），并且对该系统中存在的多尺度非均匀结构进行测量与分析。另外，还对连续介质方法和多尺度模型所普遍关心的诸如颗粒速

图4 气固悬浮系统流场图^[13]。

右：全局流场；左：全局图中方框内部分的放大图。白色和绿色箭头代表颗粒的速度和曳力。黑色箭头代表当地流场的方向，颜色对应流速，其中白色大于红色对应的速度。虚线a和b表示团聚物和稀相的界面。颗粒上的数字代表不同颗粒。 $|v|$ 表示当地流场速度的模

度、曳力分布等一些最基本性质和底层规律进行了统计分析（图5），对模型的假设或理论基础进行探讨，从中充分展示宏观粒子方法作为颗粒流体系统多尺度研究基础工具的重要性和前景。


同时，麻景森等^[14]应用改进的宏观粒子模型模拟了包含389个固体颗粒的气固悬浮体系，着重复现气固系统从均匀悬浮失稳形成团聚的整个动力学过程（图3）。并且通过对一系列直观物理图像的分

析以及在此基础上的统计，分别从定性和定量角度揭示固体团聚过程的微观机理。从中将能看到宏观粒子模拟与传统CFD方法和当前实验手段相比，对于气固系统多尺度行为的研究由宏（介）观转向微观、

► 由时均转向动态、由整体平均转向局部瞬时所具有的优势。

综合以上论述, 大规模并行计算体系下气固系统的宏观粒子

模拟具有广阔的发展前景, 对验证连续体模拟方法的经验假设和改进起到举足轻重的作用。在不久的将来, 得益于计算机硬件技

术的飞速发展, 该方法极有可能为上一层次的模拟方法提供真实可靠的关联式, 有力促进对气固复杂系统的研究。 

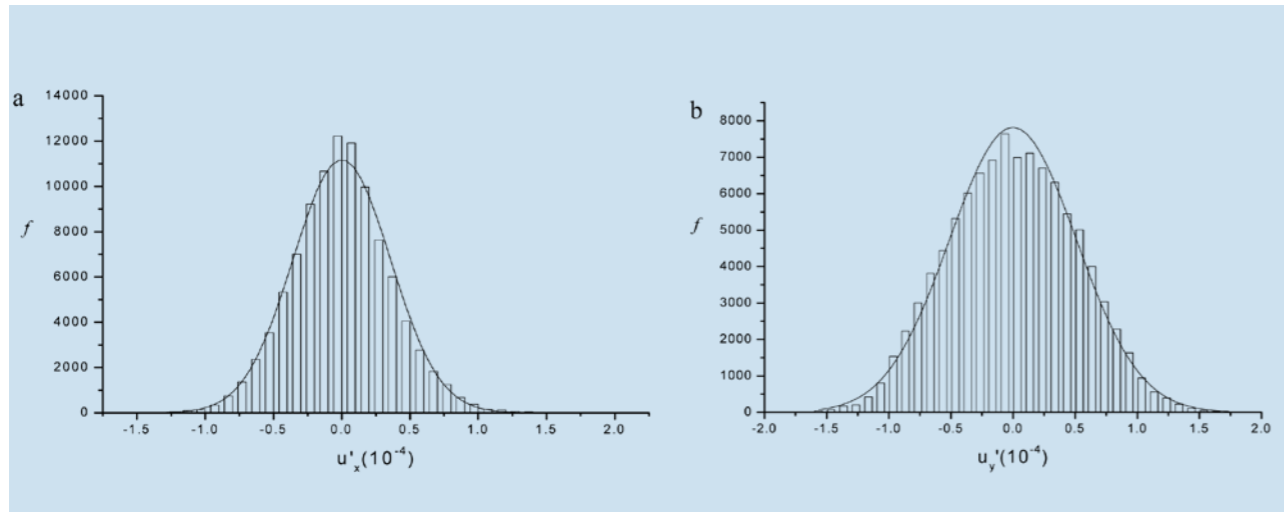


图5 脉动速度的径向 (a) 与轴向 (b) 分量的统计分布

致谢:

本工作受国家自然科学基金委、科技部和中科院多年资助, 同时本工作的大量计算在中科院超级计算中心完成, 在此一并深表感谢。

参考文献:

- [1] Li J, Kwak M. Particle-fluid two-phase flow: the energy-minimization multi-scale method. Beijing, P. R. China: Metallurgical Industry Press 1994.
- [2] Anderson TB, Jackson R. A fluid mechanical description of fluidized beds: equations of motion. Industrial & Engineering Chemistry Fundamental. 1967;6:527.
- [3] Xu M, Ge W, Li J. A discrete particle model

- for particle-fluid flow with considerations of sub-grid structures. Chemical Engineering Science. 2007;62(8):2302-8.
- [4] Wen CY, Yu YH. Mechanics of fluidization. Chemical Engineering Progress Symposium Series. 1966;62:100.
- [5] Gidaspow D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory description: Academic

Press. 1994.

[6] Alder BJ, Wainwright TE. Phase Transition for a Hard Sphere System. The Journal of Chemical Physics. 1957;27(5):1208-9.

[7] Chen S, Doolen GD. Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annual Review of Fluid Mechanics. 1998;30:329-64.

[8] Ge W, Li J. Macro-scale pseudo-particle modeling for particle-fluid systems. Chinese Science Bulletin. 2001 09;46(18):1503-7.

[9] Monaghan JJ. Smoothed particle hydrodynamics. Annual Reviews in Astronomy and Astrophysics. 1992;30:543-74.

[10] Ge W, Li J. Simulation of particle-fluid systems with macro-scale pseudo-particle modeling. Powder Technology. 2003;137(1-2):99-108.

[11] Tang DX, Ge W, Wang XW, Ma JS, Guo L, Li JH. Parallelizing of macro-scale pseudo-particle modeling for particle-fluid systems. Science in China Series B-Chemistry. 2004 Oct;47(5):434-42.

[12] Wang X, Guo L, Ge W, Tang D, Ma J, Yang Z, et al. Parallel implementation of macro-scale pseudo-particle simulation for particle-fluid systems. Computers & Chemical Engineering. 2005;29(7):1543-53.

[13] Ma J, Ge W, Wang X, Wang J, Li J. High-resolution simulation of gas-solid suspension using macro-scale particle methods. Chemical Engineering Science. 2006;61:7096-106.

[14] Ma J, Ge W, Xiong Q, Wang J, Li J. Direct Numerical Simulation of Particle Clustering in Gas-Solid Flow with a Macro-Scale Particle Method(accepted). Chemical Engineering Science. 2008.

来稿时间: 2008年10月28日

作者信息



熊勤钢

中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 博士, 主要研究方向为气/固两相流的直接数值模拟及其应用。



葛蔚

中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 研究员、博士生导师, 主要研究方向为多相流动的多尺度方法及其介观和微观模拟, 并致力于高性能计算在该领域的应用。