

Töter, Svenja

Subsystem-Iteration für ein Diffusions-Reaktions-System

Dieser Artikel handelt von der numerischen Lösung eines nichtlinearen gekoppelten Differentialgleichungssystems, welches die Kohleverbrennung in einem Wirbelschichtreaktor beschreibt. Naturwissenschaftlich-technische Prozesse werden häufig als hierarchische Kopplung von Systemen durchaus unterschiedlicher Struktur beschrieben (siehe Abbildung 1). Diese Systeme können ihrerseits aus Subsystemen zusammengesetzt sein. Auch numerische Gründe sprechen dafür, diese Strukturhierarchie für den Lösungsprozess zu übernehmen.

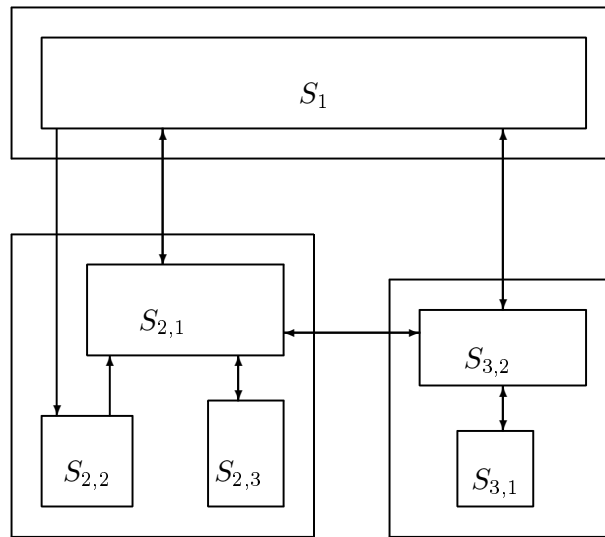


Abbildung 1: Kopplung von Systemen

Als Beispiel wird die Kohleverbrennung in einem druckaufgeladenen Wirbelschichtreaktor in stationärem Zustand betrachtet, siehe Abbildung 2.

In dem grauunterlegten Bereich findet sowohl die Verbrennung als auch die Energieübertragung an den Wärmeaustauschern statt. Diese Prozesse sind Gegenstand der im folgenden beschriebenen Rechnung. Artlich ([1]) hatte mittels Bilanzen für die Temperaturverteilung und die Konzentrationen von Kohlenstoff und Sauerstoff ein zweidimensionales Modell aufgestellt. Dieses Modell wurde hier auf drei Dimensionen übertragen und wie folgt erweitert: Kohlenstoff und Sauerstoff werden in je zwei Phasen (naß/trocken bzw. Suspensions-/Blasenphase) aufgespalten, woraus sich eine Substrukturhierarchie ergibt.

Jedes der Subsysteme kann unter Konstanthaltung der anderen Species separat mit einem für seine Struktur passenden Lösungsverfahren gelöst werden. Das Subsystem für den Sauerstoff reduziert sich bei Vernachlässigung der Diffusion auf eine Schar gewöhnlicher Differentialgleichungen längs der Stromlinien. Beide Phasen sind über einen Austauschterm gekoppelt, bilden also ein System, welches auf einem definierten Gitter stückweise analytisch gelöst werden kann. Die Phasen des Subsystems Kohlenstoff werden durch lineare partielle Diffusions-Reaktions-Gleichungen mit Neumann-Randbedingungen beschrieben. Da nach

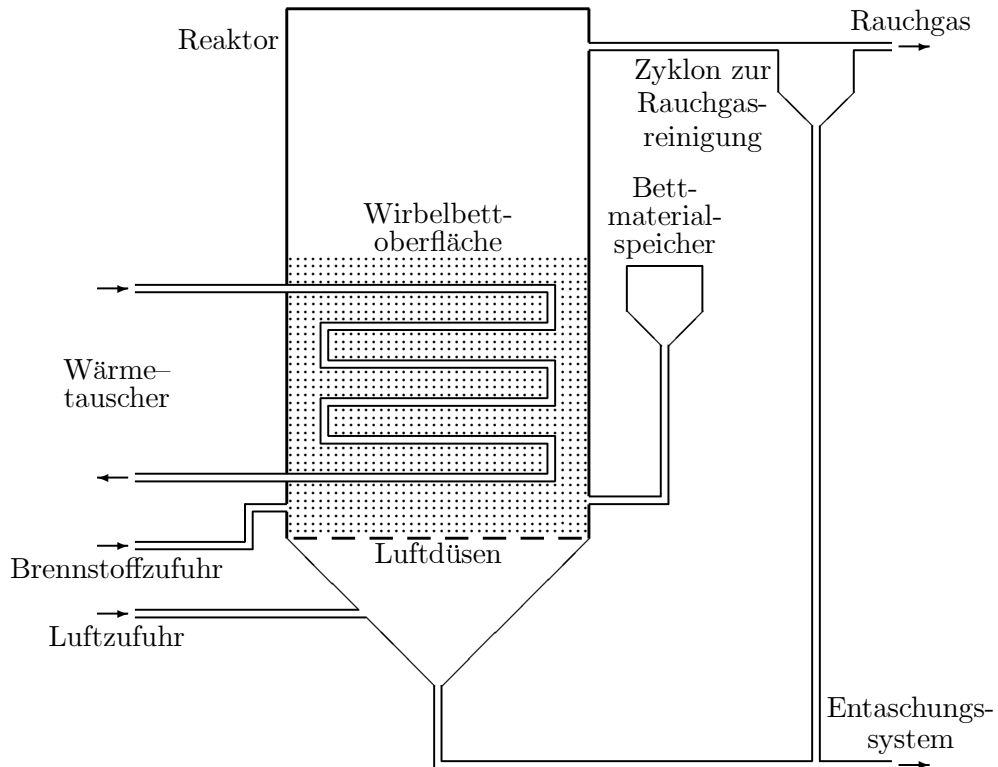


Abbildung 2: Schematische Darstellung eines Reaktors mit Druckwirbelschichtfeuerung.

Diskretisierung mit einem Finite-Volumen-Verfahren symmetrische lineare Gleichungssysteme entstehen, wird das CG-Verfahren¹ eingesetzt. Bei dem Subsystem Temperatur handelt es sich um eine nichtlineare Konvektions-Diffusions-Reaktions-Gleichung mit linear inhomogenen Randbedingungen, welche ebenfalls mit einem Finite-Volumen-Verfahren diskretisiert wird. Für das entstehende nichtlineare Gleichungssystem wird eine Newton-Iteration verwendet, wobei die auftretenden nichtsymmetrischen linearen Gleichungssysteme mit dem BiCG-Verfahren gelöst werden.

In ([2],[5]) wird eine Block-Newton-Variante zur Lösung vorgestellt, welche die Kopplung der Subsysteme über das Schurkomplement unter einbeziehen der Sublöser realisiert. Dies hat sich hier als sehr langsam erwiesen. Daher wurde ein nichtlineares Gleichungssystem definiert, welches mit einer Newton-Iteration² gelöst wird:

$$F(C, O, T) := \begin{cases} M(O, T) \cdot C - b(T) & = 0 \\ O - A(C, O, T) & = 0 \\ T - \Phi(C, O, T) & = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Die Funktion F mit den Argumenten C für Kohlenstoff, O für Sauerstoff und T für Temperatur wird definiert aus drei Funktionen für die drei globalen Unbekannten. Die Matrix M

¹Zu den wichtigen Lösern für große lineare Gleichungssysteme nebst ihren üblichen Abkürzungen und Referenzen auf die Original-Literatur siehe z.B.([4])

²Für ein einfacheres Problem haben Kerkhoven und Saad ([3]) die Newton-Iteration mit dem GMRES gelöst und konnten für ihr Problem zeigen, daß der zu (1) analoge Operator kompakt ist. Für komplexere Systeme, wie dies hier vorgestellte Problem, ist diese mathematische Analyse kaum möglich, insbesondere solange man sich die Löser für die Subprozesse offen läßt.

beinhaltet den konstanten Anteil des diskretisierten Diffusionstermes sowie den von Sauerstoff und Temperatur abhängigen Anteil des Reaktionstermes. Die Vorschrift b in Abhängigkeit von der Temperatur bedeutet, daß zunächst die Gleichung für den nassen Kohlenstoff gelöst wird und diese Lösung dann als Quelle in die Gleichung für den trockenen Kohlenstoff eingeht, d.h. hier wird im Prinzip das Residuum für die trockene Kohlenstoffgleichung betrachtet. In den Gleichungen für den Sauerstoff sowie für die Temperatur werden jeweils die Differenz des Sauerstoffs bzw. der Temperatur zu dem neu berechneten Wert, der aus dem jeweiligen Lösungsprozeß (A bzw. Φ) hervorgeht, betrachtet. Zur Lösung des Systems (1) wurde eine Newton-Iteration verwendet, innerhalb derer die auftretenden unsymmetrischen linearen Gleichungssysteme unter Verwendung eines iterativen Löser, z.B. BiCGStab, GPBiCG ([6]) oder GMRES gelöst werden. In diesen Verfahren zur Lösung der linearen Gleichungssysteme treten nur Produkte der Matrix mit Vektoren auf aber weder die Matrix noch ihre Transponierte, wodurch die Speicherung der Matrix vermieden werden kann. Diese Produkte der Jacobi-Matrix lassen sich als Richtungsableitung interpretieren:

$$J(v^n) \cdot \omega = \frac{F(v^n + h \cdot \omega) - F(v^n)}{h} \quad (2)$$

Selbst bei sehr starker Dämpfung traten Konvergenzprobleme auf, die sich auf die starke Temperaturabhängigkeit der Reaktionsrate zurückführen ließen und durch eine Homotopie beginnend von einer konstanten Reaktionsrate bewältigt wurden. Es reichte aus, diese Einbettung für eine Rechnung auf einem groben Gitter durchzuführen, die dann die Startwerte auf feineren Gittern lieferte.

Die Modularisierung mit Sub-Lösern hat den Vorteil, daß die Größe des zu lösenden Gesamtsystems reduziert wird. Die lokalen Unbekannten — hier der nasse Kohlenstoff und der Sauerstoff in der Blasenphase — werden nämlich in der äusseren Iteration nicht benötigt. Diese Reduktion auf 60% (von 5 auf 3 Werte pro Knoten), würde beim Ankoppeln komplizierterer Subsysteme (möglicherweise mit vielen Sub-Sub-Problemen) noch erheblicher werden.

Liegt einem Subprozeß ein iteratives Verfahren zugrunde - wie hier bei der Temperaturgleichung das Newton-Verfahren -, so liegt die Vermutung nahe, daß durch Verminderung der Anzahl an Iterationsschritten das Lösen des Gesamtsystems beschleunigt werden könnte. Dies konnte für das hier behandelte Problem nicht bestätigt werden. Vielmehr mußte die Subiteration hierbei sehr weit konvergieren, damit das Gesamtsystem konvergiert.

Da der größte Zeitaufwand in der Lösung der linearen Systeme liegt, wurde eine Zeitvergleich verschiedener Verfahren durchgeführt, siehe Abbildung 3.

Es zeigt sich, daß bei einer geeigneten Wahl der Dimension (m) des Krylov-Unterraums das GMRES(m)-Verfahren am effizientesten ist. Das optimale m wächst mit der Größe des Gitters und ist relativ groß zu wählen. Bei ungünstig gewähltem m nimmt der Zeitbedarf jedoch erheblich zu und kann sogar um ein Vielfaches schlechter liegen als der BiCGStab oder der GPBiCG. Diese beiden zeigen kaum einen Unterschied im Zeitbedarf. Läßt sich die Krylov-Dimension für den GMRES gut bestimmen, so ist der GMRES zu bevorzugen, da dieser den geringeren Zeitbedarf hat und darüber hinaus einen stabileren Konvergenzverlauf zeigt.

Die Konvergenz des Verfahrens ohne Präkonditionierung zeigte sich als sehr langsam. Dies ist auf die unterschiedlichen Größenordnungen der Unbekannten zurückzuführen. Daher wurde eine einfache Präkonditionierung durch Skalierungsfaktoren (für T und O) systematisch untersucht. Das Optimum lag in einem Plateau; eine gute Wahl ist hier die Skalierung mit der Größenordnung der Mittelwerte (bei O mit 10^{-2} und bei T mit 10^3).

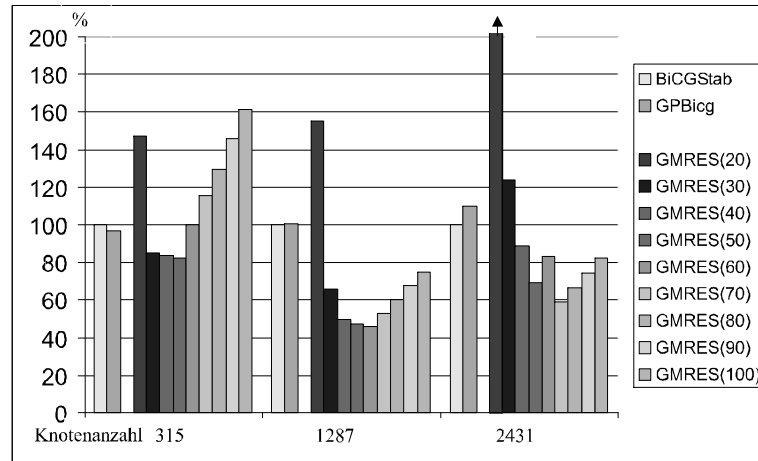


Abbildung 3: Zeitvergleich linearer Löser

Dieses Lösungsverfahren mit Substrukturstrategie hat neben den schon angesprochenen Aspekten den Vorteil, daß bei Erweiterung des Modells durch neue Spezies, z.B. die bei der Verbrennung entstehenden Flüchtigen (z.B. Stickoxide) keine fundamentalen Änderungen nötig sind. Es können weitere Subsysteme beliebiger Art an das bestehende System leicht angekoppelt werden.

Danksagung: Die Autorin dankt Wolfgang Zeuge, Hans-Jürgen Seifert (beide von der Universität der Bundeswehr Hamburg) sowie Wolfgang Mackens (von der TU Hamburg-Harburg) für die Unterstützung bei der Durchführung dieser Arbeit.

Referenzen:

- 1 Artlich, S.: Zweidimensionale Simulation der Kohleverbrennung in Druckwirbelschichtfeuerungen, Dissertation, Technische Universität Hamburg-Harburg. 1996.
- 2 Artlich, S. Mackens, W.: Newton-Coupling of Fixed point Iterations, in Hackbusch, W., Wittum, G. (eds.): Numerical Treatment of coupled Systems. Proc. of the 11th GAMM-Seminar Kiel (Germany), January 20-22, 1995. Notes on Numerical Fluid Mechanics Vol. 51. Vieweg-Verlag, Braunschweig, Wiesbaden, Germany, pp 1-10, 1995.
- 3 Kerkhoven, T., Saad, Y. : On acceleration methods for coupled nonlinear elliptic systems, Numer. Math. 60, pp 525-548, 1992.
- 4 Meister, A.: Numerik linearer Gleichungssysteme, Vieweg-Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1999.
- 5 Menck, J.: An approximate Newton-like Coupling of subsystems, TU Hamburg-Harburg, Report 21, November 1998.
- 6 Zhang, S.: GPBi-CG: Generalized product-type methos based on Bi-CG for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput. Vol. 18, No.2, pp. 537-531, 1997.

Adresse: Svenja Töter Universität der Bundeswehr Hamburg, Fachbereich Maschinenbau, D-22043 Hamburg