

Die möglichst akkurate Vorhersage des Strömungsverhaltens von Fluiden ist nach wie vor eine der größten Herausforderungen der Ingenieurwissenschaften. Hier setzt die Arbeitsgruppe von Andreas Kempf an.

Vorhersage der Turbulenz in Reaktoren und Motoren

High-Performance Computing in der Strömungssimulation

Von Andreas M. Kempf, Fabian Proch, Andreas Rittler,

Martin Rieth & Thuong M. Nguyen

Das Turbulenzproblem

Die Strömung von Fluiden, also von Gasen oder Flüssigkeiten, stellt für Ingenieure noch immer eines der schwierigsten Berechnungsprobleme dar. Die Navier-Stokes-Gleichungen, welche die Strömung typischer Fluide vollständig als Kontinuum beschreiben, sind zwar schon seit langem bekannt, als gekoppelte partielle Differentialgleichungen in drei Raum- und einer Zeitdimension weisen sie aber sehr interessante Eigenschaften auf. Die Lösung im Inneren eines Rechengebietes hängt zwar nur vom Zustand auf dessen Rändern ab (man spricht von den

Randbedingungen des Randwertproblems), es wird aber schnell klar, dass die Geometrie der Ränder und der Zustand darauf nicht leicht zu beschreiben sind – man denke hier nur an die vielen Schaufeln einer Turbine, die den bewegten Rand eines durchströmten Gebietes darstellen.

Erschwerend kommt hinzu, dass die Gleichungen im Inneren des Rechengebietes zur Anfachung von Störungen neigen, aus denen schnell ein System scheinbar zufälliger, ineinander eingebetteter Wirbel unterschiedlicher Größe entsteht. Man spricht dann von Turbulenz oder einer turbulenten Strömung – die

Pluralform der „Turbulenzen“ bleibt Laien vorbehalten. Turbulenz entsteht in Zonen starker Scherung, also in Schichten zwischen zwei Strömen, die aneinander oder an einer Wand abgleiten. Damit erklärt sich auch, warum in der Luftfahrt Turbulenz meist nur in Bodennähe beobachtet wird und in großen Höhen nur dann, wenn starke Windscherung auftritt, die dort Turbulenz produziert. Die in den großen Wirbeln gespeicherte kinetische Energie wird dann auf kleinere Wirbel übertragen, bis sich eine immer gleiche Verteilung der Energie über die Wirbelgrößen hinweg einstellt – die sogenannte Energiekaskade. Dabei erleben die



Andreas M. Kempf Foto: Vladimir Unkovic

großen Wirbel aufgrund ihrer Trägheit nur sehr wenig Reibung aus der Zähigkeit (Viskosität) des Fluides, wohingegen die kleinen Wirbel geringer Trägheit schnell ausgebremst werden, die kinetische Energie dieser Wirbel wird dann in Wärme umgewandelt, man spricht dabei von Dissipation. Die Größe der kleinsten noch auftretenden Wirbel hängt dann von der Scherrate der Strömung und der Viskosität des Fluides ab. Eine genaue Simulation einer turbulenten Strömung erfordert dann, das gesamte Strömungsgebiet mit Rechenpunkten zu füllen, auf denen die Navier-Stokes Gleichungen gelöst werden, wobei der Abstand der Punkte kleiner sein muss als die kleinsten Wirbel, um diese noch abbilden zu können. Leider würde eine solche „Direkte Numerische Simulation“ (DNS) für fast alle Ingenieursanwendungen zu viele Rechenpunkte und damit auch Rechenleistung erfordern, um praktikabel zu sein.

Die Bildung, Entwicklung und Dissipation turbulenter Wirbel wird als deterministischer Prozess angesehen und ist durch die Navier-Stokes-Gleichungen genau beschrieben, allerdings reagiert der Prozess sehr empfindlich auf kleinste Störungen und Rechenungenauigkeiten, so dass sich einzelne Wirbel bei Wiederholung eines Experiments schon nach kurzer Zeit anders verhalten mögen als zuvor. Diese enorme Sensitivität turbulenter Strömungen auf kleinste Störungen und deren Verstärkung lässt sich leicht an Wettervorhersagen erkennen, die ja kaum mehr als drei Tage zuverlässig vorhersagen können. Statistisch betrachtet sind aber turbulente Strömungen berechenbar, werden also zumindest in Ingenieursanwendungen zu reproduzierbaren Ergebnissen führen. Als Beispiel sei aufgeführt, dass die Anordnung der vielen kleinen turbulenten Wirbel um ein Flugzeug jetzt und einen Augenblick später sicher verschieden ist, die Strömung aber im Wesentlichen gleich bleibt, das Flugzeug fliegt so wie zuvor. Turbu-

lenz lässt sich also fast immer als ein stochastischer (zufälliger) und ergodischer Prozess ansehen, der zu einem konstanten Mittelwert der Strömungsgeschwindigkeit und des Druckes führt – und somit zu einer konstanten Leistung einer Anlage oder eines Luftfahrzeugs.

Für den Mittelwert, aber auch für die Größe der Schwankungen, lassen sich Gleichungen herleiten, die den Navier-Stokes Gleichungen ähneln, allerdings einen „ungeschlossenen Term“ aufweisen, der sich aus dem Gleichungssystem heraus zunächst nicht bestimmen lässt. Ursache für die somit ungeschlossenen Gleichungen ist der unwiederbringliche Informationsverlust, welcher bei der Vereinfachung eines fluktuierenden Strömungsfeldes auf dessen Mittelwerte entsteht. Für die ungeschlossenen Terme lassen sich jedoch Modellannahmen treffen, mit denen eine Lösung der Gleichungen möglich wird. Solche mathematisch formulierten Modellannahmen fasst man allgemein unter der Bezeichnung „Turbulenzmodell“ zusammen.

Klassischerweise wird Turbulenz mit den Reynolds-gemittelten Gleichungen gelöst – also nach Zeitmittelung der Gleichung, die dann auf eine stationäre Lösung führen muss. Diese Lösung ist wegen der zeitlichen Mittelung normalerweise auch sehr glatt, so dass die Lösung mit wenigen Punkten im Raum gefunden werden kann, der Rechenaufwand wird also stark reduziert. Die Dynamik von Strömungsfeldern mit zeitabhängigen Prozessen wie Schallausbreitung, Wirbelablösung oder bewegten Rändern lässt sich so jedoch kaum abbilden. Auch umfassen die ungeschlossenen Terme in diesem Fall sämtliche turbulenten Wirbel aller Größen und Stärken, deren genaue Modellierung kaum möglich ist. Dennoch stellen diese sogenannten Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)-Methoden nach wie vor den Stand der Technik dar.

Eine modernere Alternative ist die sogenannte Grobstruktursimula-

tion oder Large-Eddy Simulation (LES).

LES – flexibler Kompromiss aus Genauigkeit und Rechenzeit

Bei der LES wird statt einer Zeitmittelung eine räumliche Filterung der Lösungen und Gleichungen durchgeführt, die Gleichung beschreibt also nur noch die groben Strukturen der Strömung, eine Lösung lässt sich daher mit geringerer räumlicher Auflösung finden. Die wesentliche Dynamik der Strömung bleibt aber erhalten. Auch umfassen die ungeschlossenen Terme nur noch die vielen kleinen Wirbel, die sich wegen ihrer Ähnlichkeit sehr leicht statistisch beschreiben und genau modellieren lassen. Die räumliche Filterung entfernt dabei Strukturen, die kleiner sind als die Filterweite. Durch Einstellung der Filterweite lässt sich steuern, wie stark gefiltert werden soll – oder wie groß die kleinsten verbleibenden Wirbel sein sollen. Somit lässt sich einstellen, wie weit die Punkte des Rechengitters voneinander entfernt und somit wie rechenaufwendig eine Simulation ist – allerdings ist ein Mindestrechenaufwand erforderlich, der deutlich über dem der RANS-Methoden liegt. Natürlich gilt auch hier, dass mit mehr Rechenpunkten eine höhere Genauigkeit erzielt wird, so dass die LES die Möglichkeit bietet, die Zahl der Rechenpunkte als jeweils besten Kompromiss aus Rechenzeitbedarf und Genauigkeitsanforderung zu wählen. Besonders attraktiv an diesem Konzept ist, dass sich die Rechengenauigkeit bei mehr Rechenleistung automatisch erhöht, die Methode eignet sich daher hervorragend für das Hochleistungsrechnen und verbessert sich gemäß des Mooreschen Gesetzes. Die Entwicklung, Verbesserung und Anwendung der LES-Methode für chemisch reagierende Strömungen stellt seit über 15 Jahren den Forschungsschwerpunkt von Professor Kempf dar.

Turbulenz in reagierender Strömung

Chemische Reaktoren, Brennkammern in Gasturbinen, Brennräume in Kolbenmotoren und ähnliche Systeme nutzen chemische Reaktionen, die entweder zur Produktion von Stoffen oder zur Wärmefreisetzung und anschließenden Verrichtung von Arbeit dienen. Normalerweise sind solche Systeme mindestens so groß, dass sich eine turbulente Strömung einstellt. Die turbulenten Wirbel fördern die Mischung der Reaktanten oder des Brennstoffs mit der Luft, so dass sich eine schnellere Umsetzung ergibt. Als Resultat lässt sich ein Reaktor oder ein Motor dank turbulenter Strömung noch relativ klein bauen. Da die Vermischungsrate der Reaktanten aber durch die turbulenten Wirbel bestimmt wird, ist auch die chemische Reaktionsrate und die Leistung einer Maschine durch die Turbulenz bestimmt, welche schwierig zu berechnen ist – insbesondere durch die Interaktion von der Turbulenz mit komplizierten chemischen Reaktionen. Bei letzteren ist wiederum zu beachten, dass die Raten der chemischen Umsetzung von vielen Parametern abhängen und nur vollständig berechnet werden können, wenn sämtliche Teilreaktionen bekannt sind. So werden zum Beispiel über dreihundert Einzelreaktionen und deren Reaktionsraten benötigt, um die Verbrennung von Methan (Erdgas) in Luft zu beschreiben. Es ist daher erforderlich, auch die chemischen Reaktionen vereinfacht zu beschreiben, um realistische turbulente Flammen selbst auf Höchstleistungsrechnern simulieren zu können. Solche Methoden, welche die chemische Umsetzung in einer Flamme mathematisch vereinfacht beschreiben, werden als Verbrennungsmodell bezeichnet. Solche Modelle werden von der Gruppe um Andreas Kempf entwickelt, getestet und in Programme implementiert – zum Beispiel in die Eigenentwicklung „PsiPhi“.

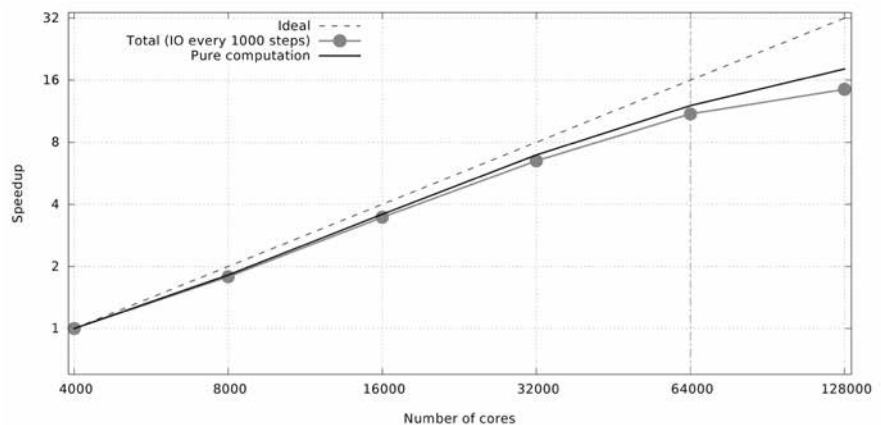
Das Simulationsprogramm PsiPhi

Die Entwicklung des Programms PsiPhi¹⁻³ wurde vor fast zehn Jahren von Andreas Kempf am Imperial College London gestartet, damals noch als kleines Projekt um mehr über Strömungssimulation zu lernen und diese den Doktorand*innen besser zu vermitteln. Daher wurde immer Wert auf eine sehr einfache, kompakte und klare Struktur gelegt; Einfachheit und Verständlichkeit wurde dabei immer als wichtiger angesehen als Recheneffizienz, Mächtigkeit oder Flexibilität. Ebenfalls stand immer die leichte Erweiterbarkeit und Programmierbarkeit im Vordergrund, da die Mitarbeiter*innen der Arbeitsgruppe ja nicht nur bestehende Modelle anwenden, sondern vielmehr neue Methoden und Modelle entwickeln und testen sollen. Dieses Konzept hat sich bis heute bewährt und mit wenigen Entwicklern zu einem enorm leistungsfähigen Programm geführt, das chemisch reagierende Strömungen und Flammen, partikelförmige Brennstoffe, bewegte Geometrien wie Kolben in Motoren, und Wärmeaustausch durch Strahlung genau und effizient simulieren kann – und zwar für laminare und turbu-

lente Strömungen, von fast ruhenden Fluiden bis in den Überschallbereich.

Mittlerweile hat sich das Programm auf verschiedensten Rechnern vom PC bis zum Höchstleistungsrechner bewährt – von einem Prozessorkern bis zu über 128.000 Prozessorkernen auf dem Höchstleistungsrechner JUQUEEN in Jülich (BlueGene/Q). Auch wurden schon Simulationen mit 1,7 Milliarden Rechenpunkten auf SuperMUC in München durchgeführt, für eine turbulente Kohlestaubflamme mit Kohlevergasung, Koksabbrand und Wärmeübergang durch Strahlung.

Die Nutzung von vielen Tausend Prozessoren erfordert ein klares Konzept zur Parallelisierung und erhebliche Optimierung, um zu verhindern, dass sich die Prozessoren nur gegenseitig stören oder aufeinander warten – ähnlich einer aufgeblähten Verwaltung. Die eingesetzte Parallelisierung basiert auf einer Gebietszerlegung, das heißt das gesamte Rechengebiet wird in Blöcke mit der gleichen Zahl von Rechenpunkten zerlegt. Diese Blöcke müssen an ihren Rändern Informationen mit den Nachbarn austauschen, was über das Versenden von „Nachrichten“ geschieht, gemäß dem MPI-Standard (Message Passing Inter-



(1) Test der parallelen Skalierbarkeit des PsiPhi-Programms auf dem Höchstleistungsrechner JUQUEEN in Jülich auf bis zu 128.000 Prozessorkernen. Die gestrichelte Linie gibt die ideale Skalierbarkeit an, die gepunktete Linie die vom Programm mit Schreiben von Ausgabedateien erreichte Skalierbarkeit und die einfache Linie die vom Programm erreichte Skalierbarkeit ohne das Schreiben von Ausgabedateien.

Quelle: Fabian Proch

face). Das andauernde Versenden und Empfangen solcher Nachrichten erfordert aber viel Zeit, weshalb die Nachrichten schon versandt werden, bevor die Information zur Weiterverarbeitung benötigt werden. Trifft die Nachricht dann ein wird sie abgelegt und erst bei Bedarf verarbeitet.

Die hohe Zahl der auszutauschenden Nachrichten ergibt sich bei PsiPhi aus der Möglichkeit, das Fluid nicht nur als kompressibel sondern auch als inkompressibel zu behandeln, was bei niedrigen Geschwindigkeiten einen enormen Effizienzgewinn bedeutet. Leider erfordert die inkompressible Behandlung aber die Lösung eines großen algebraischen Gleichungssystems über alle Blöcke des Rechengebiets hinweg, so dass nach jeder Iteration Nachrichten zwischen den Blöcken versendet werden müssen. Der Aufwand für den Versand dieser Nachrichten ist so hoch, dass typische massiv parallele Programme für Strömungsprobleme auf inkompressible Lösungen verzichten, bei PsiPhi ist aber noch eine effiziente Implementierung gelungen.

Im Bereich des Höchstleistungsrechnens auf vielen tausend Prozessoren ist es wichtig, die wertvollen Prozessoren auch effizient zu nutzen, also die Wartezeiten und den Aufwand für das Versenden, Warten und Empfangen von Nachrichten gering zu halten. Tatsächlich gibt es Programme, die mit zu vielen Prozessoren langsamer laufen als mit wenigen. Bei PsiPhi ist aber eine hohe „parallele Effizienz“ gelungen, das heißt eine Verdoppelung der Prozessorzahl führt auch bei sehr vielen Prozessoren noch fast zu einer Halbierung der Rechenzeit. Diese gute parallele Effizienz oder „Skalierbarkeit“ unseres Inhouse-Programms PsiPhi ist im Scaling Plot (Abb. 1) dargestellt.

In unserer Forschung ist PsiPhi ein Werkzeug, um neue Modelle und Verfahren zu entwickeln und zu testen, und um komplizierte

Strömungsfelder zu untersuchen. Im Folgenden werden Beispiele aus drei interessanten und komplexen Themenfeldern dargestellt.

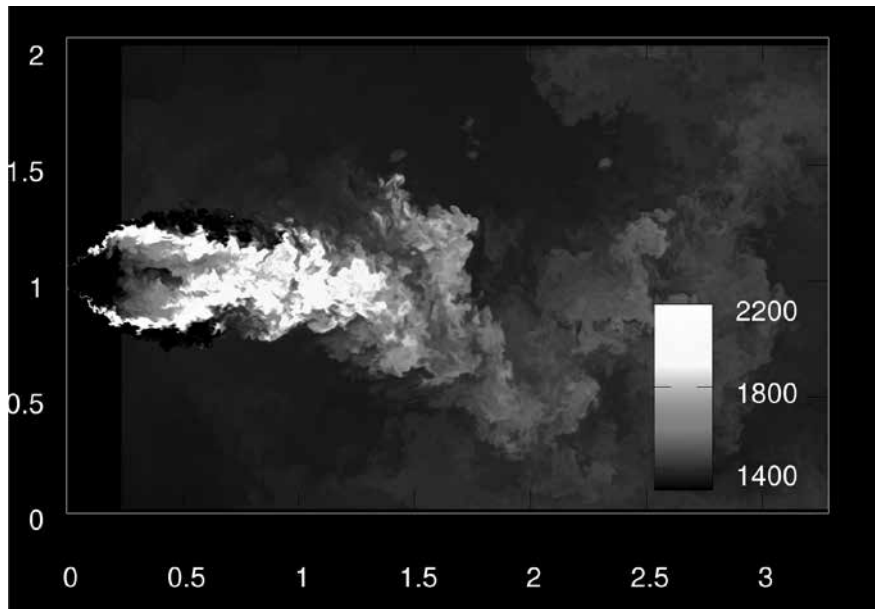
Simulation von Kohlestaubfeuerung

Kohlestaubfeuerung in Kraftwerken gehört nach wie vor und in absehbarer Zukunft zu den Hauptlieferanten elektrischer Energie, was mit geringen relativen Kosten und der hohen Verfügbarkeit von Kohle zusammenhängt. Allerdings führt die Verbrennung von Kohle zu einem hohen Ausstoß von Kohlenstoffdioxid verglichen mit etwa Erdgas, da Kohle wesentlich aus Kohlenstoff besteht. Um möglichst wenig Kohlendioxid und Schadstoffe auszustößen, müssen Kohlekessel möglichst effizient ausgelegt und der Verbrennungsprozess möglichst gut verstanden werden. Darüber hinaus wird an modernen Verfahren geforscht um den Ausstoß zu reduzieren, etwa an der Verbrennung mit reinem Sauerstoff und Speicherung des Kohlendioxids aus dem Abgas oder der Nutzung von Biomasse. Simulationen von Kohlestaubfeuerung können wichtige Informationen zur Erforschung und Verbesserung von Prozessen der Feuerung von Kohle liefern, die ansonsten wegen der rauen Verbrennungsumgebung und Größe der Anlagen experimentell nicht zugänglich sind. Mit der Verbesserung der Methoden zur Simulation von Kohlestaubfeuerung befasst sich der Lehrstuhl für Fluidodynamik.

Die Simulation von Kohlestaubfeuerung ist ein sehr komplexes Problem. Zum einen muss, wie bei reinen Gasflammen auch, die Interaktion von Turbulenz und chemischer Reaktion abgebildet beziehungsweise modelliert werden. Zum anderen müssen die Prozesse, die die Kohlepartikel durchlaufen, in der Simulation enthalten sein. Dies beinhaltet die Bewegung der Kohlepartikel in der turbulenten Strömung und den Impulsaustausch zwischen Gas und Partikeln, den konvektiven

Wärmeaustausch zwischen Kohlepartikeln und Gas sowie den Wärmeaustausch über thermische Strahlung sowie die Ausgasung und den Koksausbrand der Kohlepartikel. All diese Prozesse werden in PsiPhi^{4,5}, simuliert, wobei die Kohlepartikel in der Simulation als Punktmassen angenommen werden. Zusätzlich werden bei Simulationen größerer Brennkammern Partikel zu „Paketen“ zusammengefasst, da die Simulation von typischerweise mehreren Milliarden Kohlepartikeln zu aufwendig wäre.

Das Hauptaugenmerk liegt am Lehrstuhl für Fluidodynamik an der Verbesserung der Modelle zur Beschreibung der turbulenten Verbrennung der Gase in einer Kohlestaubfeuerung. Das Modell, das dafür am Lehrstuhl für Fluidodynamik entwickelt wird, beruht auf der Annahme, dass sich die turbulente Flamme als Zusammensetzung vieler einzelner kleiner laminarer, also nicht von Turbulenz gekrümmter und gefalteter Flammen, darstellen lässt. Dies ermöglicht es, die möglichen chemischen Zustände vor der Grobstruktursimulation mittels eindimensionaler Flammensimulationen zu bestimmen und in einer Datenbank abzulegen. Diese Datenbank kann dann auf effiziente Weise während der Grobstruktursimulation abgerufen und der Gaszustand mittels weniger in der Grobstruktursimulation gelösten Parameter bestimmt werden. Das in Abbildung (2) gezeigte Temperaturfeld ist ein Beispiel einer aus der Datenbank ausgelesenen Größe. Die in der Grobstruktursimulation gelösten Parameter beschreiben etwa, aus welchen Bestandteilen sich das Gas ursprünglich, also vor der Reaktion zusammensetzt. Dabei spielt bei der Kohlestaubfeuerung die Tatsache eine besondere Rolle, dass unterschiedliche Gase aus den Kohlepartikeln austreten, je nachdem in welcher Phase der Verbrennung sich das Kohlepartikel befindet. Dabei können im Wesentlichen zwei Phasen unterschieden werden. Zu



(2) Temperaturverteilung in einem Ausschnitt der Grobstruktursimulation einer Kohlebrennkammer semi-industriellen Maßstabs. Das gesamte Simulationsgebiet umfasst 1,7 Milliarden Rechenpunkte und die Simulation wurde auf 16384 Prozesskernen auf dem Höchstleistungsrechner SuperMUC am Leibniz-Rechenzentrum in München durchgeführt. Die Kosten der Simulation belaufen sich auf etwa 3 Millionen Rechenstunden. Achsenbeschriftungen sind in Metern und die Temperatur in Kelvin angegeben.

Quelle: Martin Rieth

Anfang, wenn das Kohlepartikel in den Brennraum eintritt und sich schnell erhitzt, brechen die schwachen Verbindungen in der chemischen Struktur der Kohle, und leichtere Kohlenwasserstoffe sowie schwerere Moleküle wie gasförmiger Teer werden ausgegast. Die Zusammensetzung der Gase ist abhängig davon, wie schnell das Kohlepartikel und bei welcher Temperatur aufgeheizt wird. Nachdem dieser Prozess abgeschlossen ist, liegt das Kohlepartikel als poröse Struktur vor, der noch brennbare Anteil besteht hauptsächlich aus Kohlenstoff. Dieser Kohlenstoff brennt an der Oberfläche der porösen Struktur partiell ab, wenn sich das Kohlepartikel in einem heißen Gemisch aus Abgas und noch verfügbarem Sauerstoff befindet. Die Gase aus diesen beiden Phasen, im ersten Fall ein Gemisch aus unterschiedlichsten Kohlenwasserstoffen und im zweiten Fall im Wesentlichen Kohlenmonoxid, werden in der Gasphase verbrannt und der chemische Zustand des Gases ist dann davon abhängig,

aus welcher Phase der Kohleverbrennung das Gas stammt.

Die Methoden, die am Lehrstuhl für Fluidodynamik für die Simulation von Kohlestaubfeuerung entwickelt werden, können in Zukunft auf der einen Seite dazu dienen den Prozess und die zugrundeliegende Physik besser zu verstehen. Auf der anderen Seite können die Methoden in Zukunft von Ingenieur*innen und Wissenschaftler*innen benutzt werden, um möglichst effiziente und saubere Kohlekraftwerke zu entwickeln. Außerdem werden die Grundlagen gelegt, um Simulationen der Feuerung von Biomasse durchzuführen, und so weiter zu einer günstigen CO_2 -Bilanz beizutragen.

Simulation von Kolbenmotoren

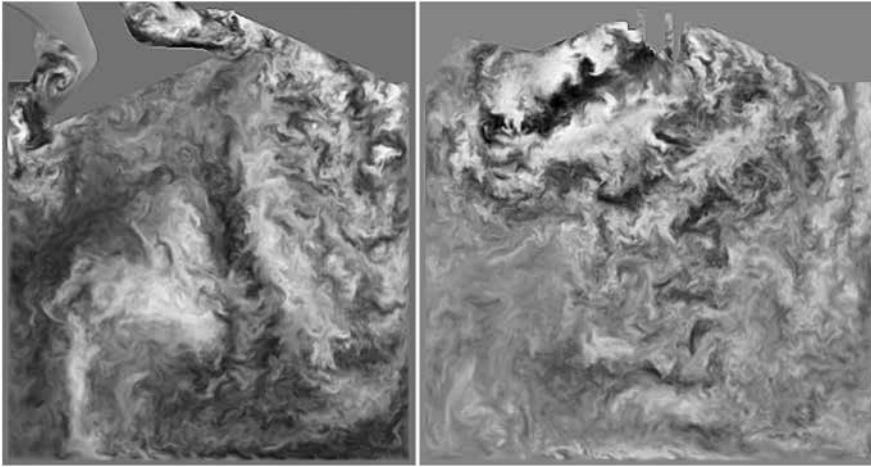
Motorsimulation ist ein großes Thema im Bereich der numerischen Strömungssimulation (CFD). Nicht nur aufgrund der komplizierten Motorgeometrie, sondern auch aufgrund der Dynamik von Fluiden im Motor und dem Verbrennungsver-

fahren, ist die numerische Modellierung von Verbrennungsmotoren kompliziert und herausfordernd. Der Rechenaufwand ist zudem sehr hoch, da für Statistiken und gemittelte Werte mehrere Motorzyklen simuliert werden müssen.

Durch die komplizierte Motorgeometrie ist die Generierung der Rechengitter äußerst zeitaufwendig und trotzdem oft nur ein Kompromiss in Bezug auf die Qualität. Die Generierung dieser Gitter allerdings ist nicht nur zeitaufwändig, sondern zudem beschwerlich, da Ingenieure ein paar Wochen bis Monaten nur mit der Netzgenerierung beschäftigt sind. Durch die häufige Nutzung einer dynamischen Anpassung des Netzes oder anderer Methoden zu der Behandlung von beweglichen Netzen wird die Komplexität von Motorsimulationen noch zusätzlich erhöht.

Wichtig ist, dass die Turbulenz während des Prozesses vom Einlass über die Kompression bis zur Verbrennung erzeugt wird. Bei der Entwicklung der Turbulenz im Motorzylinder spielt die Interaktion zwischen den beweglichen Kolben, Ventilen und der Trägheitskraft der Fluiden eine bedeutende Rolle. Zur Auflösung dieser Turbulenz im Motorzylinder sind akkurate numerische Verfahren auf feinen Gittern notwendig. Nicht zuletzt, da die Aufrechterhaltung der turbulenten kinetischen Energie eine wichtige Rolle für die Ausbreitung der Flammen im Brennraum spielt. Wie die Abbildungen (3) und (4) der Simulationen mit dem In-house Code PsiPhi zeigen, werden feine turbulente Strukturen in der bildnormalen Geschwindigkeitskomponente der Strömung im Zylinder und die Ausbreitung der Flamme in der Brennkammer aus der Simulation erhalten.

Zur Durchführung von Motorsimulationen wurden Methoden in PsiPhi implementiert, welche die gefilterten Navier-Stokes-Gleichungen kompressibler Gase zusammen mit bewegten Wänden und nicht reflektierenden Randbedin-



(3) Die unmittelbare normale Geschwindigkeit der Strömung im Motorzylinder von Motorsimulation mit 8192 CPUs am Jülicher Supercomputer JUQUEEN.

Quelle: Nguyen Thuong

gungen lösen können. Die Verbrennungsmodellierung wird durch ein Flame-Surface-Density Model realisiert, in dem den Wrinkling-Faktor der turbulenten Flame von einem algebraischen Modell berechnet wird. Anstatt auf unstrukturierte Methoden zurückzugreifen, benutzt PsiPhi für die Simulation von Kolbenmotoren äquidistante kartesische Gitter, die aus STL-Daten der Geometrie innerhalb von kurzer Zeit automatisch generiert werden. Zur Behandlung von beweglichen Wänden verwendet PsiPhi einen partikelbasierten Ansatz in Kombination mit einer Immersed Boundary Methode (IBM). Die Bewegung dynamischer Ränder, wie zum Beispiel der Einlass- und Auslassventile oder des Kolbens im Rechengebiet, wird hierbei durch Lagrangepartikel beschrieben. Die Partikelpositionen bestimmen dabei die Grenzen für die IBM, welche die Veränderung des Rechengebietes zur Laufzeit berücksichtigt. Bei dieser Vorgehensweise wird die komplizierte adaptive Netzerzeugung vermieden, wobei die Effizienz der Simulation deutlich verbessert wird. Eine Besonderheit liegt dabei in dem gewählten Ansatz, bei dem sich die Parallelisierung des Partikeltransports als trivial und äußerst günstig erwiesen hat. Die Gebietszerlegung zur Parallelisierung ist dabei unab-

hängig von der gewählten Motorgeometrie. Bei der Anwendung in massiv-parallelen Simulationen ist dies sehr praktisch und effizient, da das Load Balancing im Laufe der Simulation nicht negativ beeinflusst wird.

Die Leistungsfähigkeit dieser in PsiPhi implementierten Methode, ist anhand von Simulationen aktueller Motorgeometrien, wie zum Beispiel dem Motor an der Universität Duisburg-Essen⁶ oder dem an der Technische Universität Darmstadt, erwiesen. Die Skalierbarkeit⁷ wurde durch Rechnungen auf hunderten bis mehreren tausend CPUs auf dem Rechencluster Cray-XT6m an der Universität Duisburg-Essen und auf dem Jülicher Supercomputer JUQUEEN (Blue Gene/Q) bewiesen. Bei der Validierung der Methode mit und ohne Verbrennung zeigte sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Ausbreitung der Flamme in der Brennkammer sowie der Zylinderdruck und das Geschwindigkeitsfeld wurden in der Simulation gut wiedergegeben.

Simulation der Nanopartikelsynthese

Die chemischen, physikalischen und morphologischen Eigenschaften nanoskaliger Partikel unterscheiden

sich teilweise stark von denen ihrer korrespondierenden Festkörper oder größerer Partikel. Zur Kontrolle der Eigenschaften werden daher Partikel mit einer engen Größenverteilung benötigt – diese Nanopartikel werden üblicherweise synthetisch hergestellt. Ein effektives Verfahren zur Herstellung der Partikel ist die Gasphasensynthese. Dabei wird ein Trägerstoff, der sogenannte Präkursor, in flüssiger oder gasförmiger Form in eine heiße Umgebung eingebracht, durch chemische Reaktionen aufgespalten und die Ausgangsmoleküle der Nanopartikel freigesetzt. Darauf folgend entstehen erste Monomer-Partikel durch Nukleation von Molekülen aus der Gasphase. Anschließend erfolgt die Partikeldynamik durch Prozesse wie Konvektion, Diffusion, Thermophorese, Koagulation, Sinterung oder Oberflächenwachstum, die als aerosoldynamische Prozesse zusammengefasst werden. Der dominierende Prozess bei der Partikelsynthese aus der Gasphase ist die Koagulation. Der thermochemische Zustand der Gasphase ist neben der Partikelverweilzeit ein elementarer Prozessparameter zum Einstellen gewünschter Partikeleigenschaften. Neben Experimenten werden Simulationen von Synthesereaktoren genutzt um Strömungs- und Temperaturfelder sowie Gaszusammensetzung zu analysieren und vorherzusagen. Außerdem können durch numerische Methoden experimentell schwer zugängliche Bereiche untersucht werden. Des Weiteren können mit validierten Modellen Parameterstudien durchgeführt werden.

Neben den oben beschriebenen Standardgleichungen für Dichte, Impuls, Spezies und Energie werden weitere Erhaltungsgleichungen benötigt, die die Evolution der Nanopartikel beschreiben. Die aerosoldynamischen Prozesse werden in einer Populations-Bilanz-Gleichung (PBE: „population balance equation“ oder GDE: General Dynamics Equation) zusammengefasst und beschrieben. Die GDE ist eine Inte-

gro-Differentialgleichung und wird in diskrete oder kontinuierliche Form unterteilt. Die GDE beschreibt die Entwicklung einer Partikeleigenschaft, zum Beispiel der Partikelanzahlkonzentration n für Partikel innerhalb eines bestimmten Größenbereichs – zum Beispiel repräsentiert durch das Volumen der Nanopartikel v und $v + dv$. Um die räumliche (r) und zeitliche (t) Entwicklung einer Partikelgrößenverteilung innerhalb eines Größenspektrums zu beschreiben müssen k GDE gelöst werden: $n_k(r,v,t)$. Hierbei ist die Anzahl der zu lösenden Gleichungen k und die zu berücksichtigenden aerosoldynamischen Prozesse stark vom betrachteten System abhängig. Bei der Synthese von Nanopartikeln aus der Gasphase müssen üblicherweise Partikel kleiner als eins bis hin zu mehreren hundert Nanometern berücksichtigt werden. Allerdings ist die Anzahl der lösbaren Gleichungen durch die numerischen Ressourcen beschränkt. Daher werden diskrete Partikelgrößen in Sektionen zusammengefasst und eine reduzierte Anzahl von GDE für Sektionen anstatt von diskreten Größen gelöst. Eine weitere Vereinfachung ist das Einführen von integralen Größen der GDE, den Momenten der Verteilungsfunktion. Dabei werden Erhaltungsgleichungen beziehungsweise

Transportgleichungen für eine stark reduzierte Anzahl an Gleichungen gelöst und anschließend die Größenverteilung aus den Stützgrößen rekonstruiert.

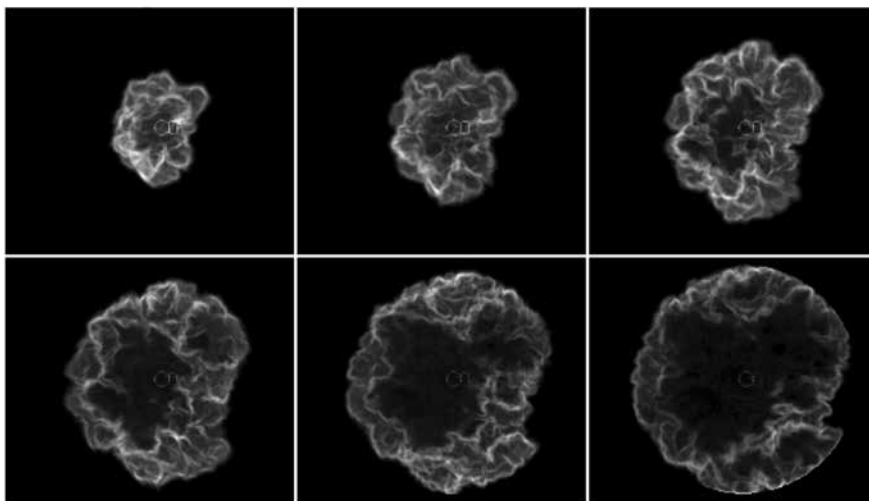
In dem LES und DNS inhouse code PsiPhi wurden ein sektionales und eine modifizierte Version des Kruis Models implementiert und erfolgreich zur Beschreibung der SiO_2 -Synthese eingesetzt. In dem untersuchten Synthesereaktor wurde flüssiges Hexamethyldisiloxan (HMDSO) zusammen mit Ethanol durch einen Sauerstoff Dispersionsstrom in die Brennkammer eingebracht. Dabei wurde die Energie einer vorgemischten Methan-Sauerstoff Pilotflamme zur Verdampfung des Sprays sowie zur Zündung und Stabilisierung der Sprayflamme genutzt. In der Simulation wurde für die Spray-, Gas- und Partikel-Phase ein Lagrange-Euler-Euler-Ansatz gewählt^{8,9}. Für die Beschreibung der Partikelsynthese wurden neben konvektivem Transport die Nukleation, Koagulation und die Sinterung berücksichtigt. Das eingesetzte modifizierte Kruis-Model berücksichtigte dabei (lokal) die Interaktion von Partikeln gleicher Größe.

Es konnte gezeigt werden, dass abhängig von der Position in der Brennkammer sowohl größere Aggregate mit kleinen Primärparti-

keln, als auch größere gesinterte Primärpartikel zu finden sind. Ein weiteres Ergebnis der Studie war die Erkenntnis, dass die Fluktuationen des Strömungsfeldes und der daraus variierenden Temperatur und Gaszusammensetzung, zu einer breiten Größenverteilung der Partikel führen kann. Eine weitere Studie soll den Einfluss der Turbulenz und gleichzeitig den Einfluss der Polydispersität, das heißt durch Berücksichtigung der Interaktion von Partikeln unterschiedlicher Größe, in Abbildung (5) exemplarisch dargestellt durch drei Anzahlkonzentrationen (a–c) und den resultierenden volumengewichteten Durchmesser (d), untersuchen.

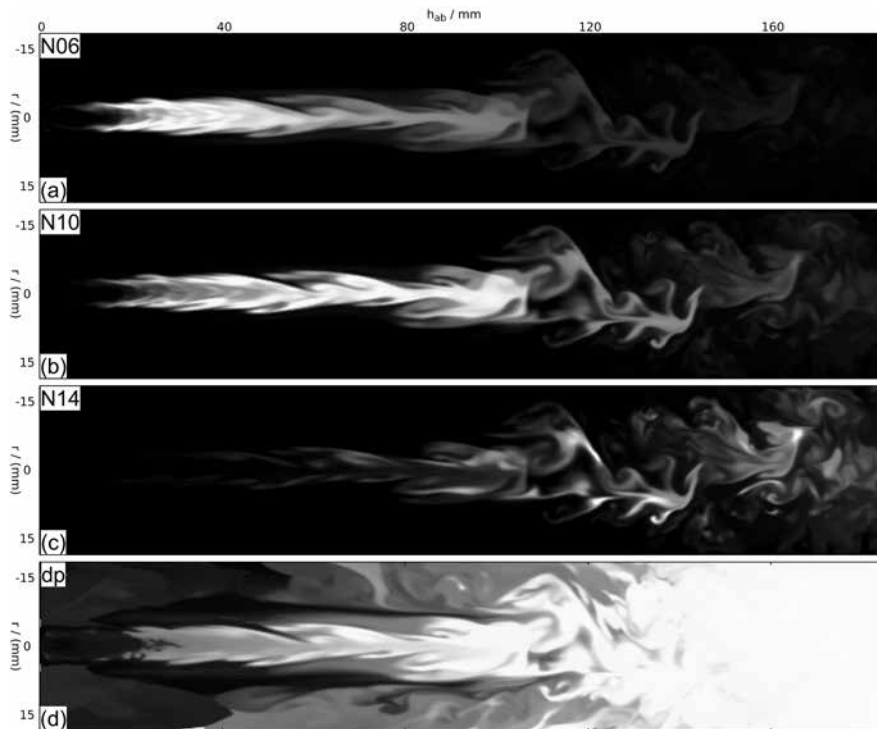
Summary

The accurate prediction of fluid flows is still one of the most challenging engineering problems. This is due to the turbulent nature of fluid flows that can only be resolved by numerical simulations for small and simplified problem sizes, even with the massive computational resources that are available today. When chemical reactions and combustion processes are involved, the computational costs become even larger due to the stiff and non-linear interaction between turbulence and chemistry. Therefore, reduction techniques have been developed in the past, namely the Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS) and the large-eddy simulation technique (LES). The latter has the potential to describe the turbulent combustion process more precisely, but still requires models for the unresolved turbulent scales. These models are developed in the group of Prof. Kempf at the University of Duisburg-Essen, where a broad range of applications is covered. Examples are the combustion of coal, the synthesis of nano-particles in flames, and the combustion processes in internal combustion engines. To perform the



(4) Die Ausbreitung der Flamme in der Brennkammer von Motorsimulation mit 240 CPUs auf dem Rechencluster Cray-XT6m an der Universität Duisburg-Essen.

Quelle: Nguyen Thuong



(5) Momentaufnahmen der Ergebnisse aus dem sektionalen Modell auf einer 2D-Schnittenebene. (a)–(c) zeigen die Evolution der Partikelanzahlkonzentrationen für Partikel mit volumengemittelten Durchmessern von (a) 4 nm, (b) 25 nm und (c) 100 nm. Abbildung (d) zeigt den resultierenden volumengemittelten Partikeldurchmesser.

Quelle: Andreas Rittler

required simulations on the largest supercomputers in the world, the group has developed its own inhouse code that is suitable for massively parallel simulations.

Anmerkungen/Literatur

- 1) A. M. Kempf, B. Geurts, and J. C. Oefelein (2011): Error Analysis of Large-Eddy Simulation of the Turbulent Non-premixed Sydney Bluff-Body Flame, *Combustion and Flame* 158, 2408–2419.
- 2) F. Proch, A. M. Kempf (2014): Numerical analysis of the Cambridge stratified flame series using artificial thickened flame LES with tabulated premixed flame chemistry, *Combustion and Flame*, 161, 2627–2646.
- 3) F. Proch, A. M. Kempf (2015): Modeling heat loss effects in the large eddy simulation of a model gas turbine combustor with premixed flamelet generated manifolds, *Proceedings of the Combustion Institute*, 35, 3337–3345.

- 4) M. Rieth, F. Proch, M. Rabaçal, B. M. Franchetti, F. Cavallo Marincola, A. M. Kempf (2016): Flamelet LES of a semi-industrial pulverized coal furnace, *Combustion and Flame*, 173, 39–56.
- 5) M. Rieth, F. Proch, A. G. Clements, M. Rabaçal, A. M. Kempf, Highly resolved flamelet LES of a semi-industrial scale coal furnace, *Proceedings of the Combustion Institute* (in press).
- 6) T. M. Nguyen, P. Janas, T. Lucchini, G. D'Errico, S. Kaiser, A. M. Kempf (2014): LES of Flow Processes in an SI Engine Using Two Approaches: OpenFoam and PsiPhi, *SAE Technical Paper*, 2014-01-1121.
- 7) T. M. Nguyen, F. Proch, I. Wlokas, A. M. Kempf (2016): Large Eddy Simulation of an Internal Combustion Engine Using an Efficient Immersed Boundary Technique, *Flow, Turbulence and Combustion*, 97, 191–230.
- 8) A. Rittler, F. Proch, A. M. Kempf (2015): LES of the Sydney piloted spray flame series with the PFGM/ATF approach and different sub-filter models, *Combustion and Flame* 162, 1575–1598.
- 9) A. Rittler, L. Deng, I. Wlokas, A. M. Kempf, Large eddy simulations of nanoparticle synthesis from flame spray pyrolysis, *Proceedings of the Combustion Institute* (in press)

Die Autoren

Andreas Kempf stammt aus Würzburg und studierte allgemeinen Maschinenbau an der TU-Darmstadt, wo er nach einem Auslandsaufenthalt auch als Wissenschaftlicher Mitarbeiter arbeitete und 2003 im Gebiet der Grobstruktursimulation (LES) turbulenter Flammen promovierte. Im Jahr 2004 erhielt er einen Ruf als Assistenz-Professor an das Imperial College London, wo er neue Simulationsmodelle, Methoden und Programme für die Simulation turbulenter, reagierender Mehrphasenströmungen entwickelte. Im Jahr 2011 folgte Andreas Kempf einem Ruf an die Universität Duisburg-Essen, wo er den Lehrstuhl Fluidodynamik leitet und dem Center for Computational Sciences and Simulation (CCSS) vorsteht. Im Jahr 2016 wurde schließlich der von ihm und Prof. Schröder federführend beantragte Hochleistungsrechner MagnitUDE in Duisburg in Betrieb genommen.

Fabian Proch stammt aus Leichlingen und hat Maschinenbau an der Universität Duisburg-Essen studiert. Seit November 2011 ist er am Lehrstuhl für Fluidmechanik als wissenschaftlicher Mitarbeiter beschäftigt und untersucht die Modellierung von partiell- und vollständig vorgemischten Flammen. Dazu verwendet er hochaufgelöste LES und direkte numerische Simulation (DNS), welche er auf massiv parallelen Hochleistungsrechner durchführt.

Andreas Rittler stammt aus Heidelberg und hat nach seiner Berufsausbildung zum Technischen Zeichner von 2006 bis 2011 Maschinenbau an der Hochschule Mannheim studiert. Seit November 2011 ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidodynamik und beschäftigt sich mit der Modellierung und numerischen Untersuchung von reaktiven Mehrphasenströmungen. Der Schwerpunkt seiner Forschung ist die LES der Nanopartikelsynthese aus Sprayflammen.

Martin Rieth stammt aus München und hat an der Universität Duisburg-Essen Wirtschaftsingenieurwesen und Maschinenbau studiert. Seit dem Abschluss des Studiums mit einem Projekt an der University of California, Berkeley, ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Fluidodynamik und beschäftigt sich mit der Modellierung und Simulation von turbulenten Strömungen. Seine Forschungsschwerpunkte liegen auf der LES von Kohlestaubfeuerung sowie der stochastischen Modellierung der Chemie-Turbulenz Interaktion für die Grobstruktursimulation.

Thuong Nguyen hat von 2000 bis 2005 seinen Bachelor in der Informationstechnik für Bauingenieurwissenschaften an der Hanoi University of Civil Engineering Vietnam gemacht. Nach Tätigkeiten im Bauingenieurwesen und in der Entwicklung für Finanzinformationssysteme folgte von 2009 bis 2011 ein Masterstudium an der Ruhr Universität Bochum. Seit November 2011 promoviert er am Lehrstuhl für Fluidynamik an der Universität Duisburg-Essen. Seine Forschung konzentriert sich auf die numerische Simulationen von Verbrennungsmotoren mittels LES.



Fabian Proch. Foto: Vladimír Unkovic

DuEPublico

Duisburg-Essen Publications online

UNIVERSITÄT
DUISBURG
ESSEN

Offen im Denken

ub

universitäts
bibliothek

Dieser Text wird über DuEPublico, dem Dokumenten- und Publikationsserver der Universität Duisburg-Essen, zur Verfügung gestellt. Die hier veröffentlichte Version der E-Publikation kann von einer eventuell ebenfalls veröffentlichten Verlagsversion abweichen.

DOI: 10.17185/duepublico/70374

URN: urn:nbn:de:hbz:464-20190813-110927-8

Erschienen in: UNIKATE 50 (2017), S. 38-47

Alle Rechte vorbehalten.