



# **Numerische Simulation von Feuerungsprozessen in der thermischen Verfahren- technik**

Materials Valley Workshop, Hanau

Dr.-Ing. Jörg Leicher

## Das GWI ist als anwendungstechnologisches und praxisnahes Brancheninstitut etabliert – **Gas** und **Wärme** ist unser Fach

- Geschäftsform:  
Gemeinnütziger Verein
- Gründungsdatum:  
1937 vom deutschen Gasfach
- 62 Mitgliedsunternehmen:  
Gasversorger, Gerätehersteller,  
Verbände, Stadtwerke
- 63 Mitarbeiter, davon ca. 10  
Studenten



Gas- und Wärme-Institut Essen e.V. | Hafenstraße 101 | 45356 Essen

◀ 75 Jahre GWI ▶  
20. Mai 2012

„Computational Fluid Dynamics or CFD is the analysis of systems involving fluid flow, heat transfer and associated phenomena such as chemical reactions by means of computer-based simulation.“

H. Versteeg und W. Malalasekera: „An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method“, Prentice Hall, 2007



Mein erster Rechner:  
Commodore C64, 1982

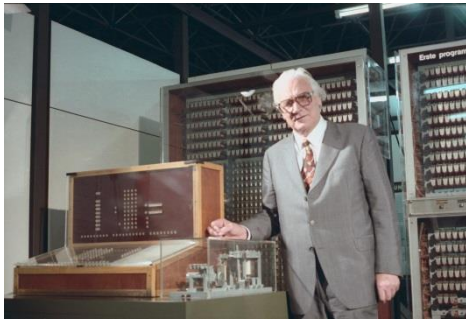
Dieser „Rechner“ (iPhone, 2012)  
ist etwa 15.000 Mal schneller!



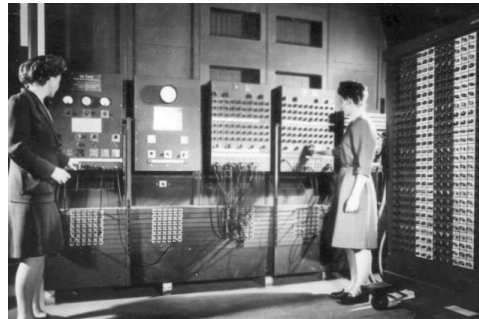
- Zuse Z3, D (1941): ca. 2 FLOPS
- ENIAC, USA (1946): ca. 500 FLOPS
- Titan, USA (Nov. 2012): 17,52 PetaFLOPS
- Tianhe-2, China (Jun. 2013): 33,86 PetaFLOPS

FLOPS: Floating Point Operations Per Second  
1 PetaFLOPS =  $10^{15}$  FLOPS

- Intel i7, QuadCore, 3,4 GHz (2013): 92,3 GigaFLOPS



Zuse Z3 (1941)



ENIAC (1946)



Tianhe-2 (2013)



Claude Louis Marie Henri Navier  
(1785 – 1836)  
französischer Ingenieur und Physiker



Sir George Gabriel Stokes  
(1819 – 1903)  
Irish-britischer Physiker,  
Mathematiker, Politiker und Theologe

- CFD: **C**omputational **F**luid **D**ynamics (Numerische Strömungssimulation)
- Grundlage: Navier-Stokes-Gleichungen (bekannt seit dem 19. Jhdt.)
- Erhaltungsgleichungen für eine (turbulente) Strömung:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \cdot \phi}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderungsrate}} + \underbrace{\frac{\partial \rho \cdot u_j \cdot \phi}{\partial x_j}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left( \Gamma_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Quellterme}} \quad \phi : u_j, h, Y_i, \dots$$

- Im Allgemeinen nicht analytisch lösbar
- Näherungsweise Beschreibung von Strömungen mit Hilfe der CFD möglich
- Für industrielle Anwendung Vereinfachungen mit Hilfe von Modellen notwendig
- Für die Verfahrenstechnik typisch: stationäre RANS-Verfahren



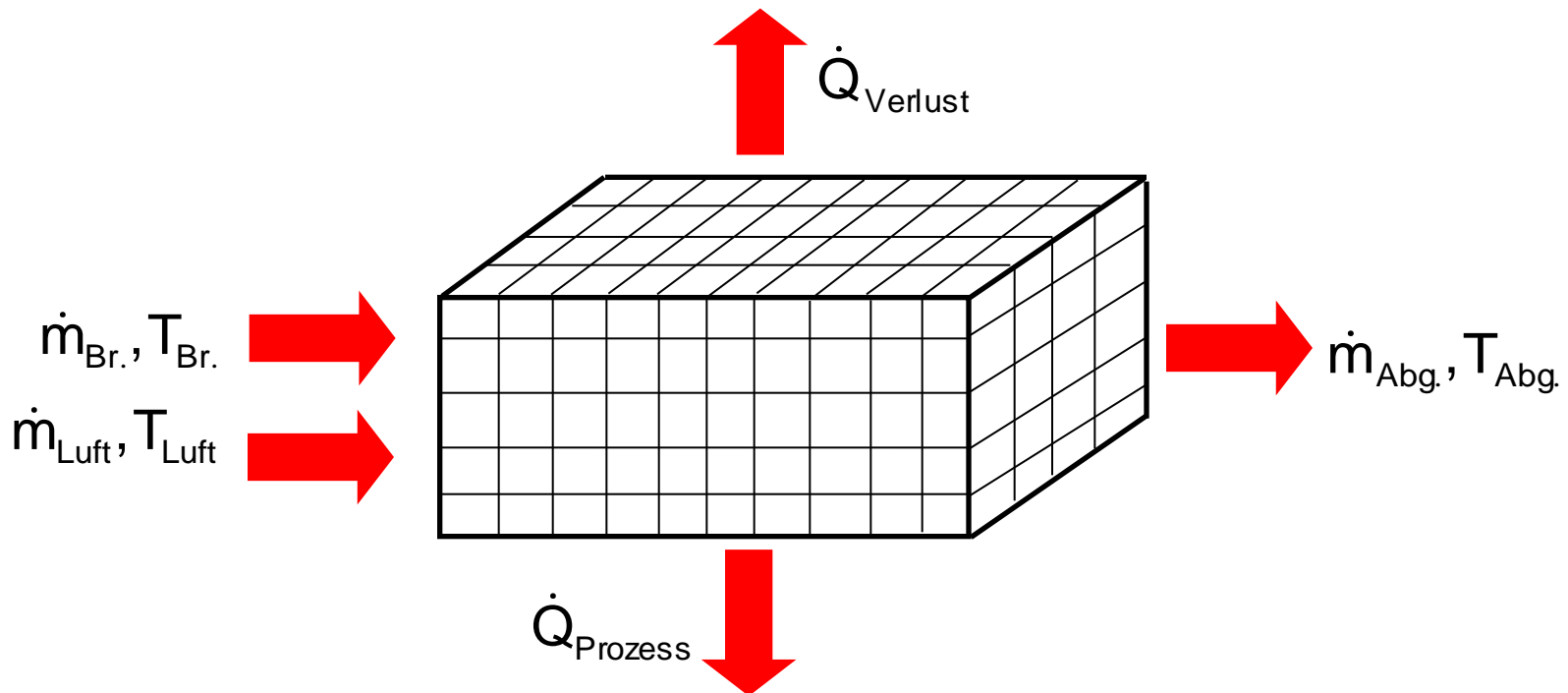
- RANS: **R**eynolds-**A**veraged **N**avier-**S**tokes
- Der Einfluss der turbulenten Fluktuationen auf die Gesamtströmung wird mit sogenannten Turbulenzmodellen abgeschätzt.
- Für die meisten ingenieurstechnischen Fragestellungen hinreichend aussagekräftig
- Große, komplexe Geometrien und Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen können mit vertretbarem Aufwand dargestellt werden.
- Standard für CFD-Simulationen in der thermischen Verfahrenstechnik



Bilanzen für einen Industrieofen:

$$\text{Masse: } \dot{m}_{\text{Br.}} + \dot{m}_{\text{Luft}} + \dot{m}_{\text{Abg.}} = 0$$

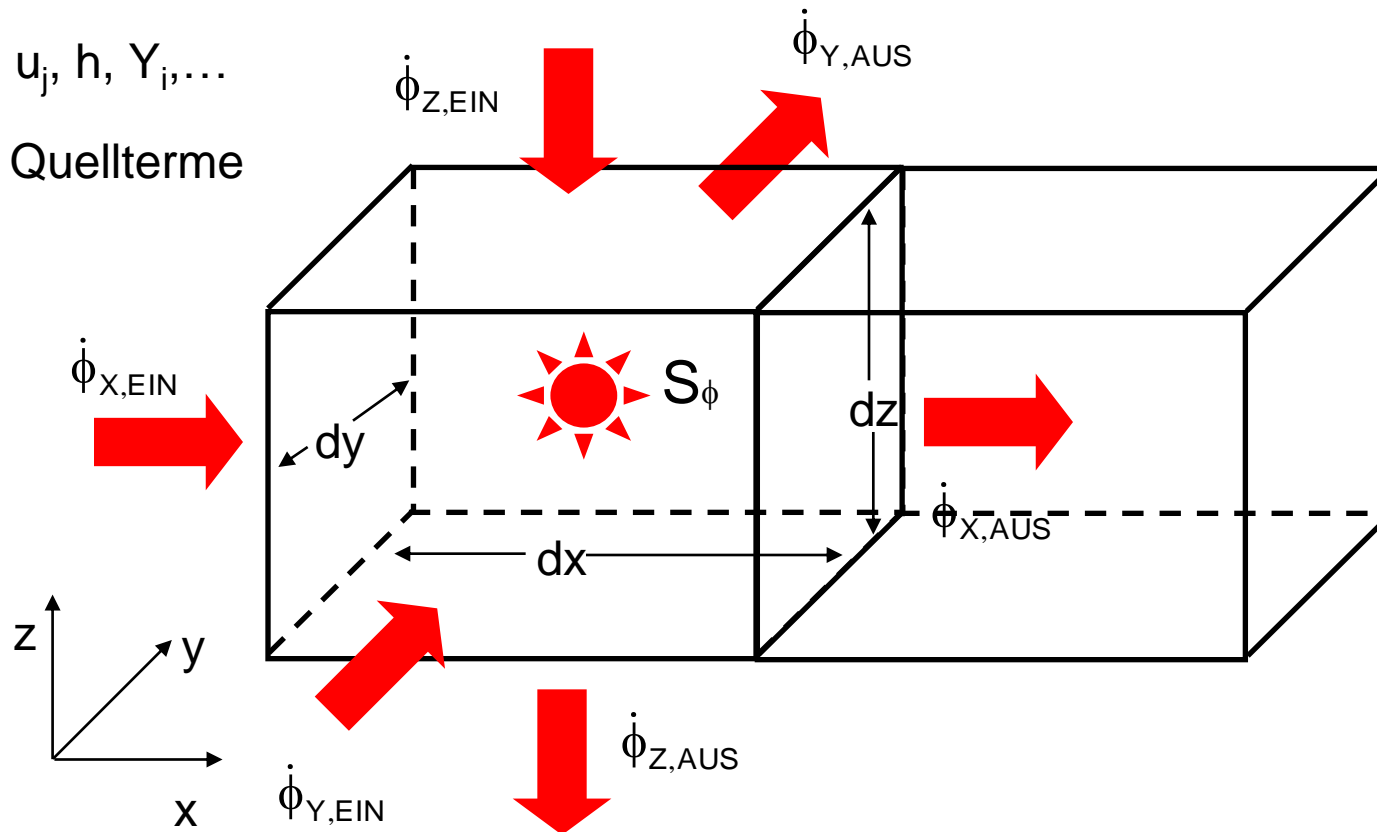
$$\text{Energie: } \dot{Q}_{\text{Br.}} + \dot{Q}_{\text{Luft}} + \dot{Q}_{\text{Prozess}} + \dot{Q}_{\text{Verlust}} + \dot{Q}_{\text{Abg.}} = 0$$



$$\phi_{\text{Zelle}} = \sum \dot{\phi}_{\text{EIN}} + \sum \dot{\phi}_{\text{AUS}} + \sum S_{\phi}$$

$\phi : u_j, h, Y_i, \dots$

$S_{\phi}$ : Quellterme



- Das Rechengebiet wird in viele kleine Zellen unterteilt (Diskretisierung).  
=> numerisches Gitter
- RANS-Gleichungen werden überführt in Integralgleichungen (Gauß'scher Integralsatz).
- Für jede Zelle werden Bilanzen aller Transportgrößen (Masse, Impuls, Energie, Spezieskonzentrationen, ...) aufgestellt.
- Das sich ergebende Gleichungssystem wird mit iterativen Lösungsverfahren gelöst, bis eine konvergente Lösung erreicht wurde.

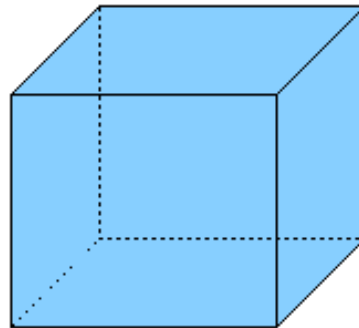
- Für die numerische Simulation ist eine Diskretisierung des Rechengebiets notwendig.
- Das Gebiet wird in eine Vielzahl kleiner Kontrollvolumina (Zellen) unterteilt.
- Diese Gittergenerierung ist der aufwändigste Schritt beim Aufsetzen einer CFD-Simulation und erfordert gute Kenntnisse der Geometrie und der zu simulierenden Prozesse.
- Die Qualität des Gitters hat entscheidenden Einfluss auf Rechenzeit und die Qualität der Simulationsergebnisse.
- Leitsätze:

**„So viele Zellen wie nötig... aber so wenig Zellen wie möglich!“**

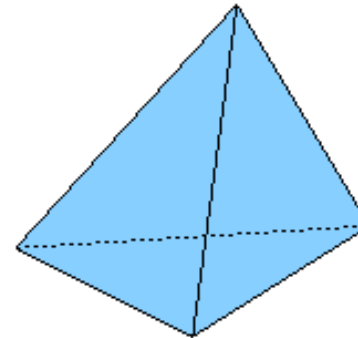
und

**„Zellen dort, wo sie gebraucht werden!“**

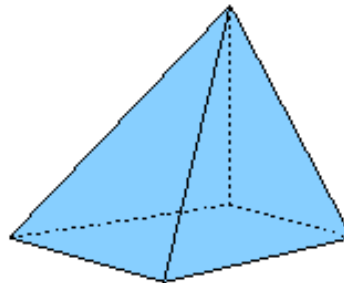
Hexaeder



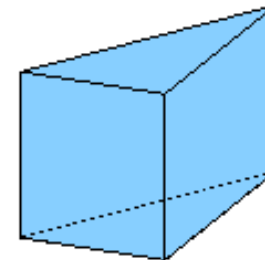
Tetraeder



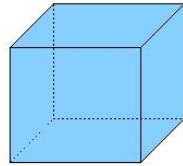
Pyramiden



Prismen

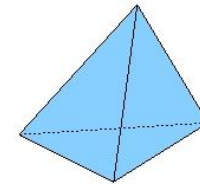


- Verschiedene Zellformen haben unterschiedliche Vor- und Nachteile:



„Hex“

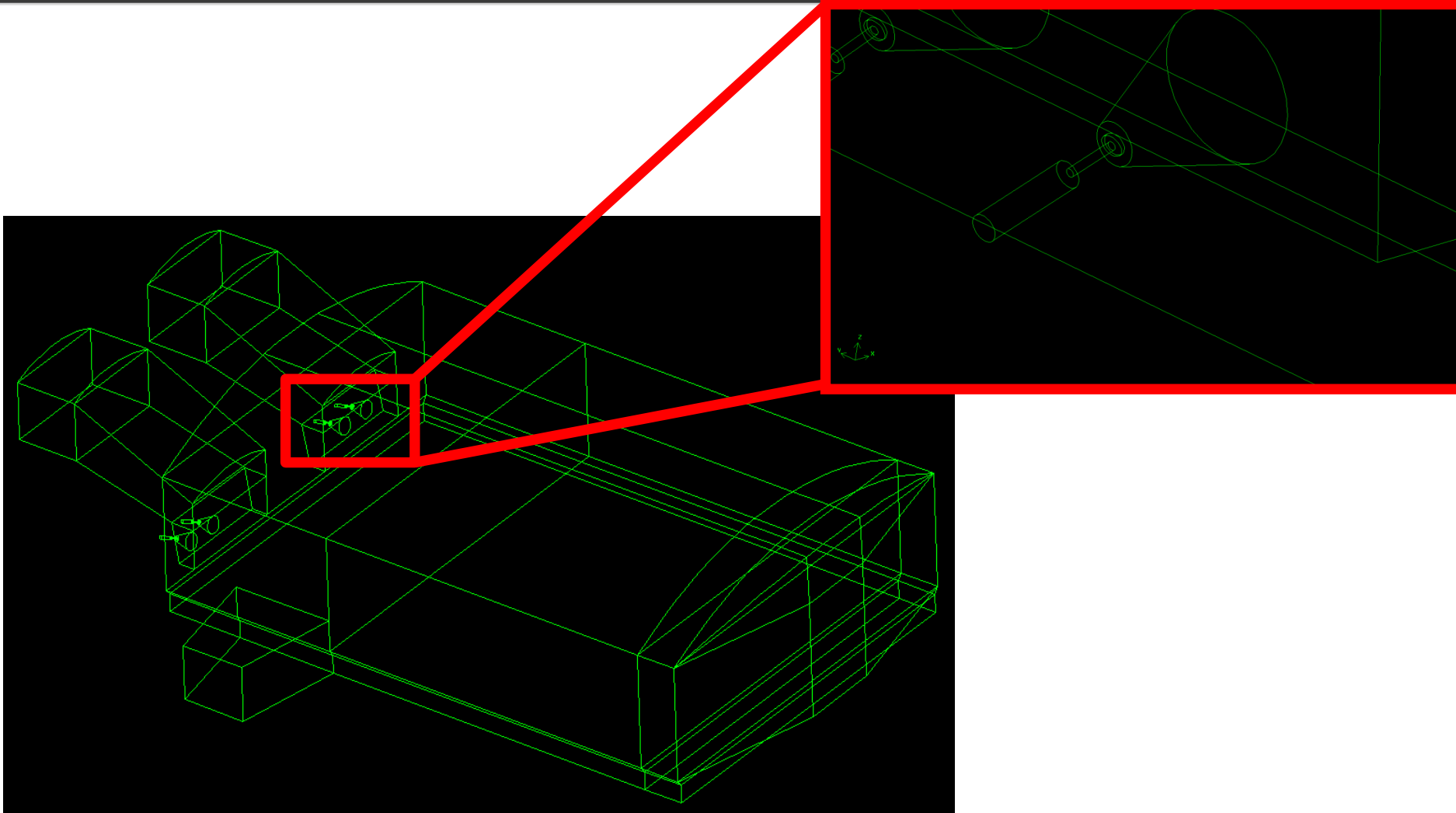
- + numerisch meist weniger fehlerbehaftet
- + effizient (weniger Zellen pro Volumen)
- nur bedingt automatisiert erzeugbar
- weniger flexibel bei komplexen Geometrien (z.B. Rundungen)



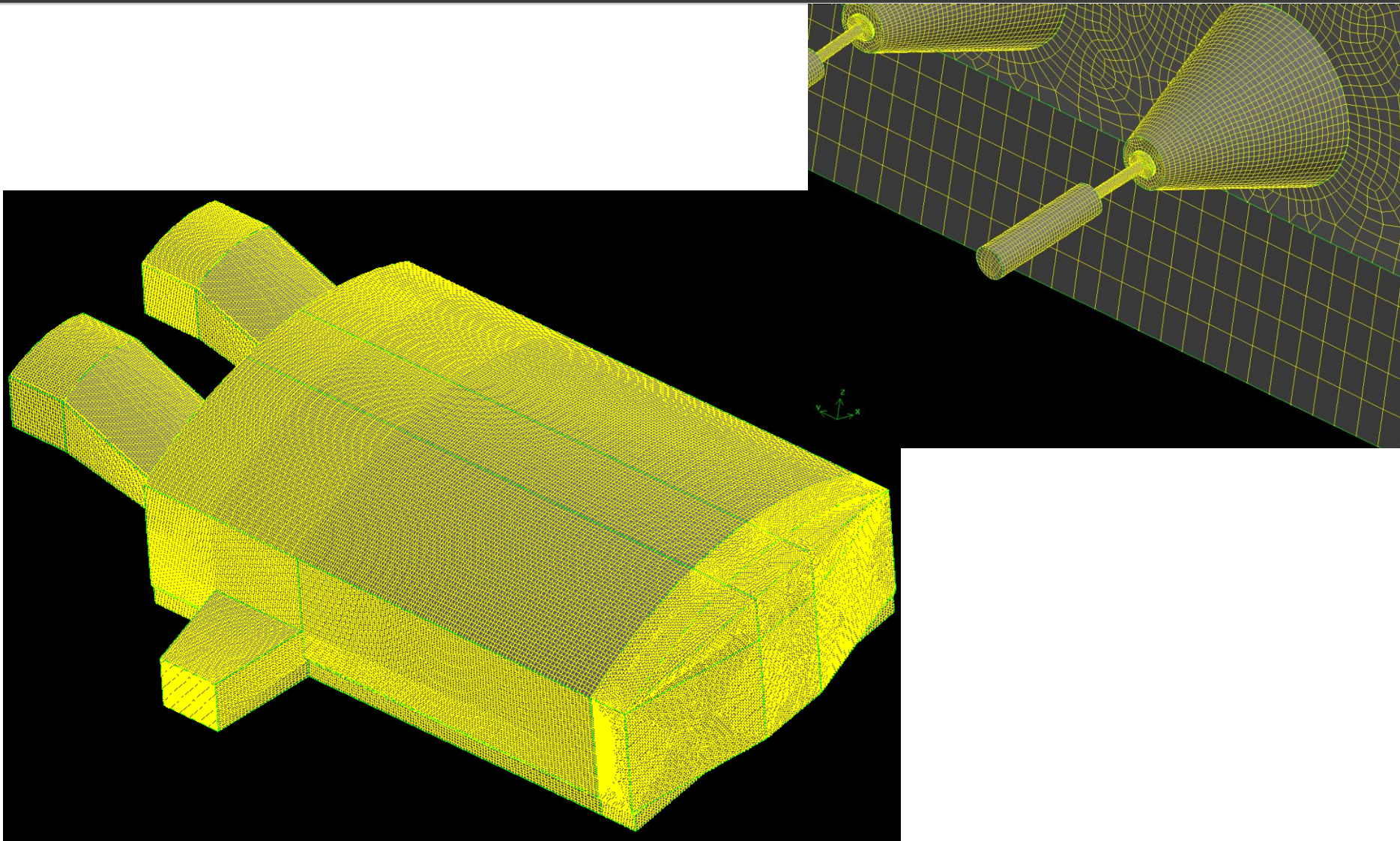
„Tet“

- + gut automatisierbar
- + gut geeignet für komplexe Geometrien
- meist größerer numerischer Fehler
- numerisch ineffizienter (mehr Zellen pro Volumen)

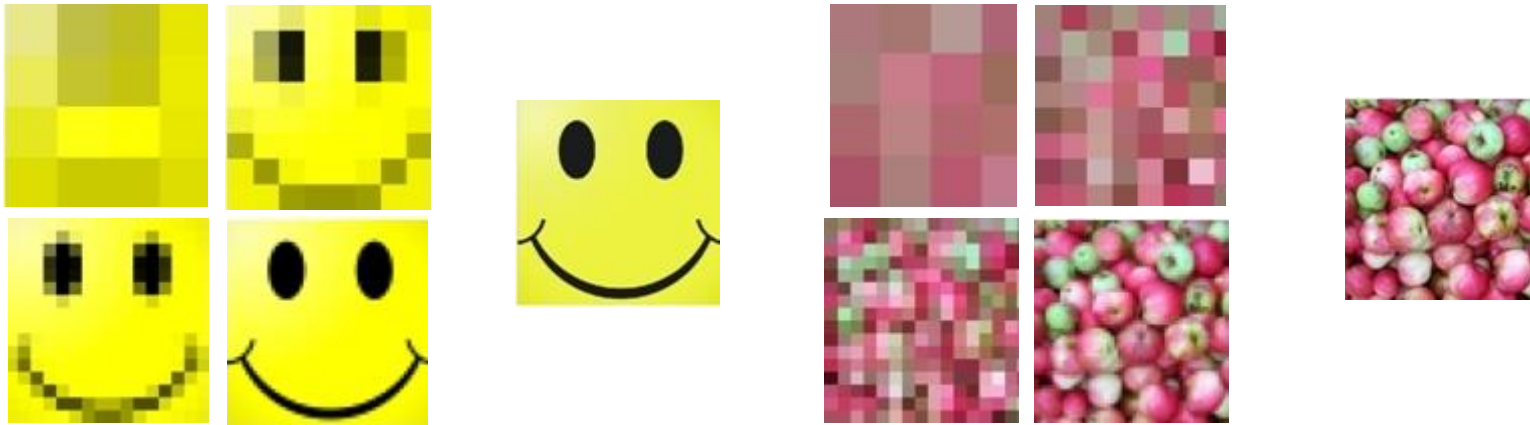
- Teilgitter lassen sich blockweise erzeugen und verknüpfen.







- Simulationsergebnisse können erheblich von der Gitterqualität abhängen.
- Grundsätzlich gilt: „je feiner das Netz, desto besser“
- Aber: Rechenzeit proportional zur Zellzahl ( $t \sim N^2$ ) !!!
- Sinnvoller Kompromiss zwischen Detailgrad und Rechenzeit nötig.



Quelle: <http://www.electronics-cooling.com/2010/06/the-art-of-modelling-using-cfd-part-v-grid/>

„ All models are wrong...  
...but some models are useful.“

*George Edward Pelham Box, britischer Statistiker*



- CFD gehört zu den hardware-hungrigsten Anwendungen im Bereich der Simulationstechnik.
- Ursachen: vor allem Turbulenz, aber auch Verbrennung und Strahlung
- Die Simulation einer turbulenten Strömung ohne Modellierung ist prinzipiell möglich ( $\Rightarrow$  DNS), erfordert aber ein Gitter, das

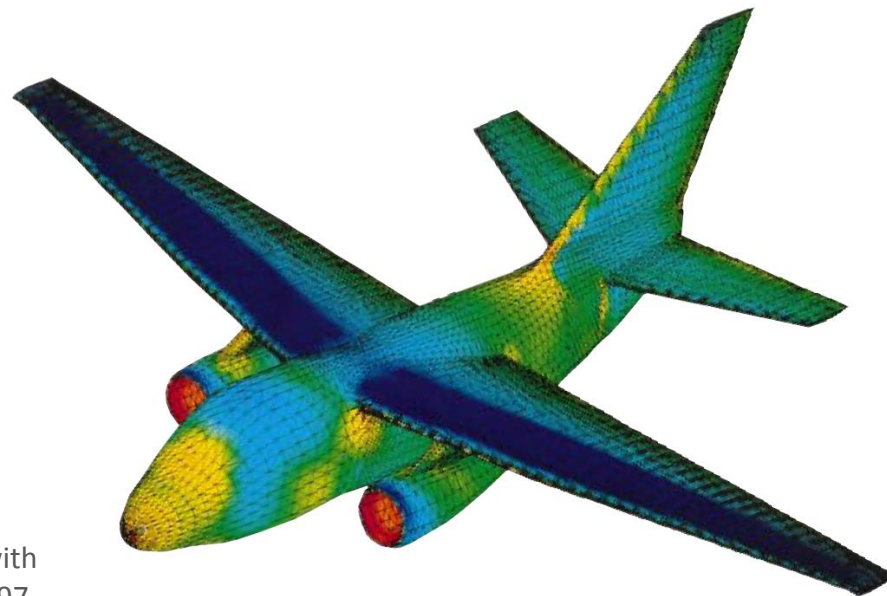
fein genug ist, um die kleinsten Wirbel abbilden zu können

**aber**

groß genug ist, um die umschließende Geometrie darstellen zu können.

- Dies ist für technisch relevante Anwendungen nicht machbar!
- Daher Modelle notwendig, um den Zeit- und Hardware-Aufwand zu begrenzen

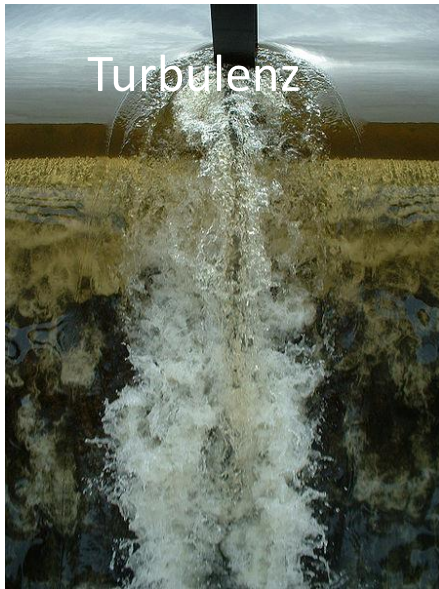
- Typische Reynolds-Zahl für ein umströmtes Flugzeug:  $10^8$
- Benötigte Zellzahl für Direkte Numerische Simulation:  $N \sim \text{Re}^{9/4} = 10^{16}$
- Benötigte Rechenzeit auf einem TeraFLOPS-Computer mit  $10^{12}$  Operationen/s, um 1 sec Flugzeit zu simulieren: mehrere 1000 Jahre !



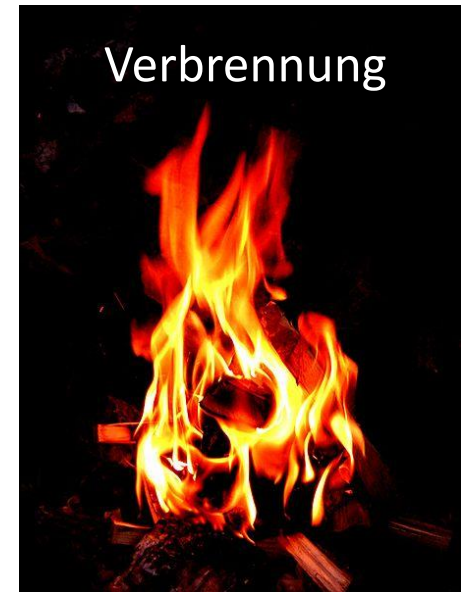
Quelle: P. Moin, J. Kim, „Tackling Turbulence with Supercomputers“, Scientific American, Jan. 1997

- Modelle treffen vereinfachende Annahmen, um komplexe Prozesse mit reduziertem Aufwand beschreiben zu können.
- Durch die vereinfachenden Annahmen sind Modelle in ihrer Anwendbarkeit beschränkt.
- Sie stellen immer einen Kompromiss zwischen Detailgrad und numerischem Aufwand dar und müssen je nach Aufgabenstellung (und verfügbarer Rechenzeit, Hardware und Software-Lizenzen) ausgewählt werden.
- Für praktisch alle technischen Fragestellungen sind modell-basierte, „vereinfachte“ Simulationen hinreichend aussagekräftig...
- ... wenn man die richtigen Modelle auswählt!





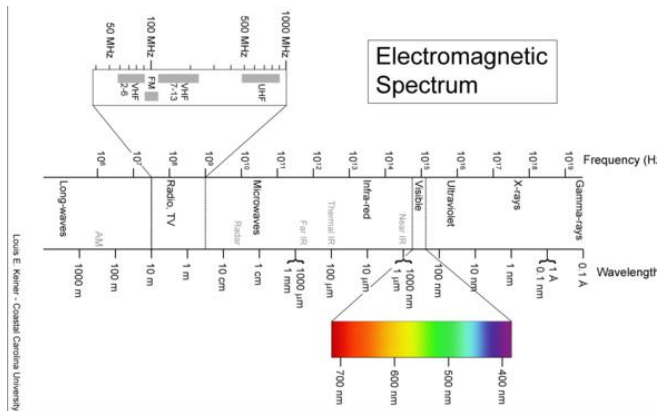
Turbulenz



Verbrennung



CFD

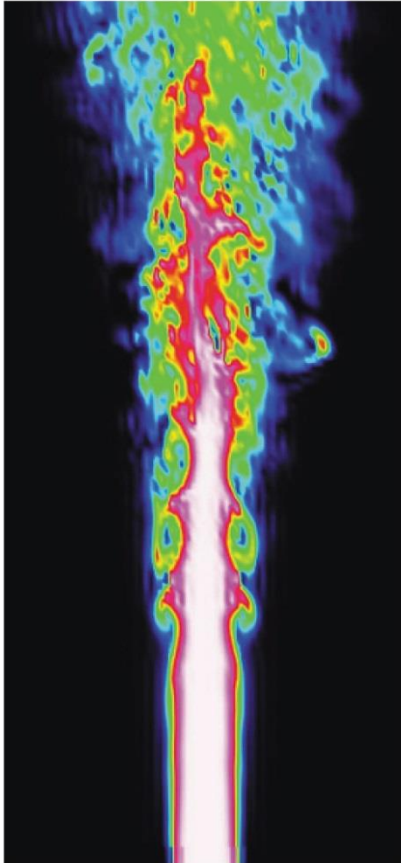


Strahlung & Wärmeübertragung

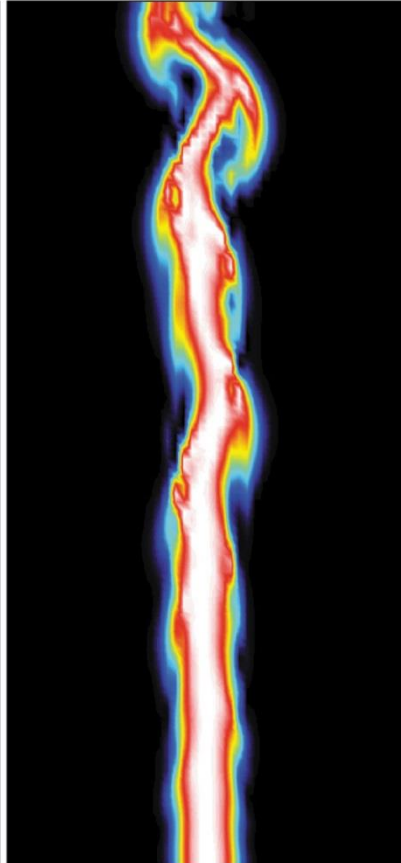


Mehrphaseneffekte

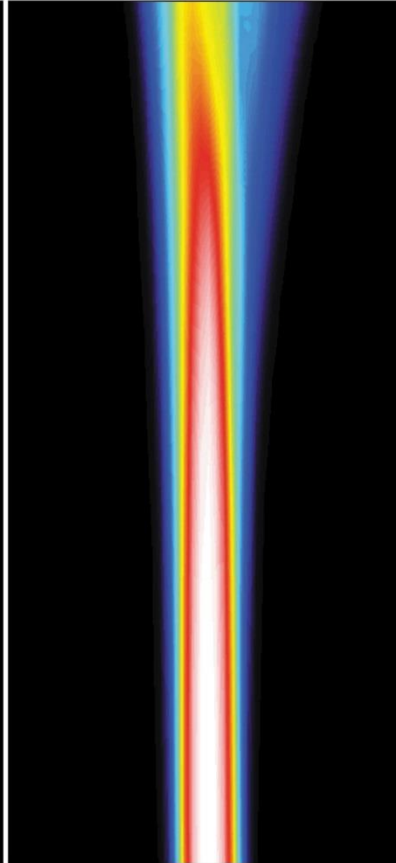




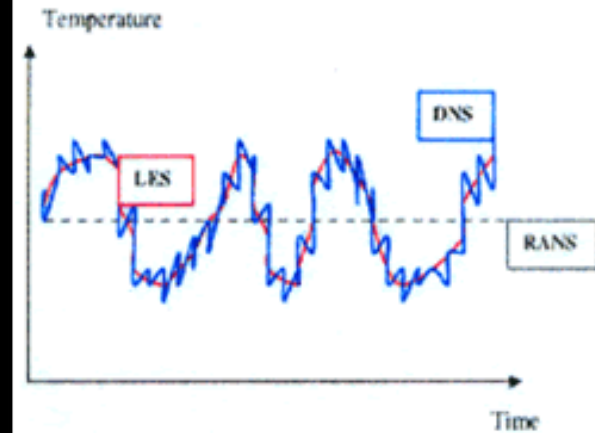
Direct Numerical Simulation (DNS) – all scales of fluid's motion are fully resolved



Large Eddy Simulation (LES) – large scales of fluids's motion are resolved, while small scales are modeled



Reynolds Average Simulation (RAS) – all flow scales of fluid's motion are averaged in time

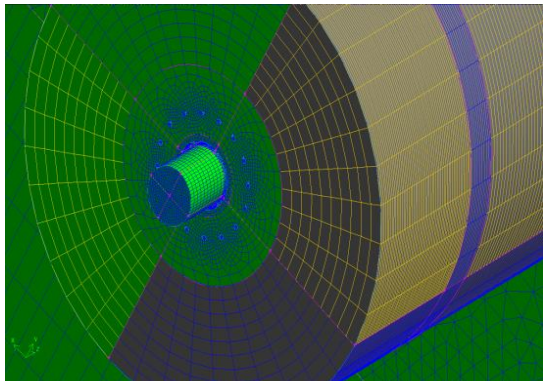


Quelle: Brunel University, UK

Quelle: University of Buffalo, USA

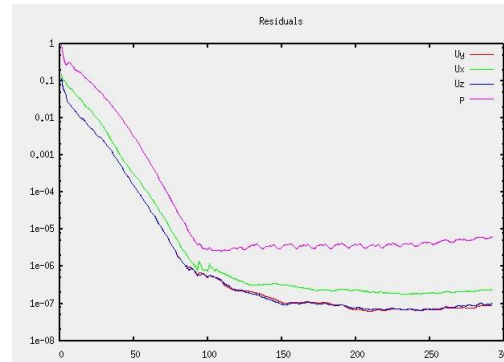
## Pre-Processing:

- Problemdefinition
- Geometrie
- Gittergenerierung
- Modellauswahl
- Randbedingungen



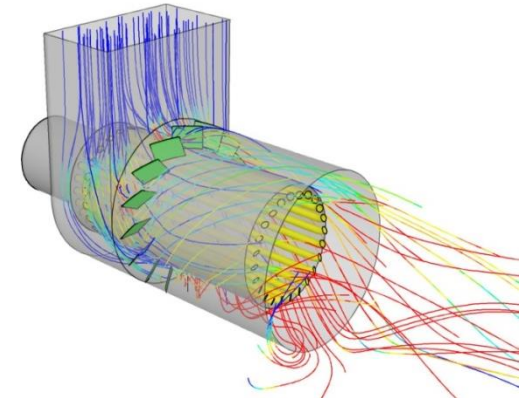
## Simulation:

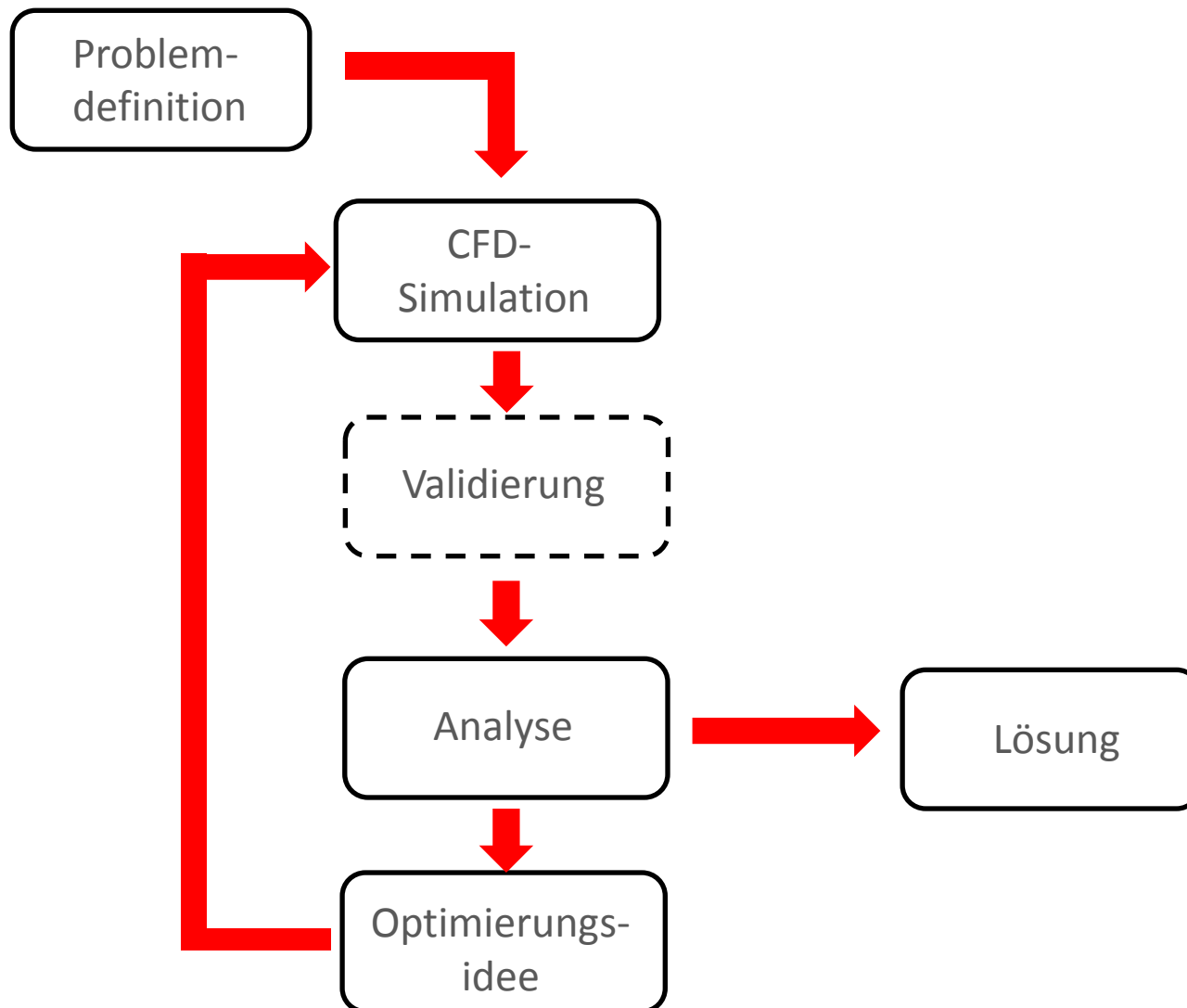
- Konvergenz
- Bilanzen
- Erwartungen



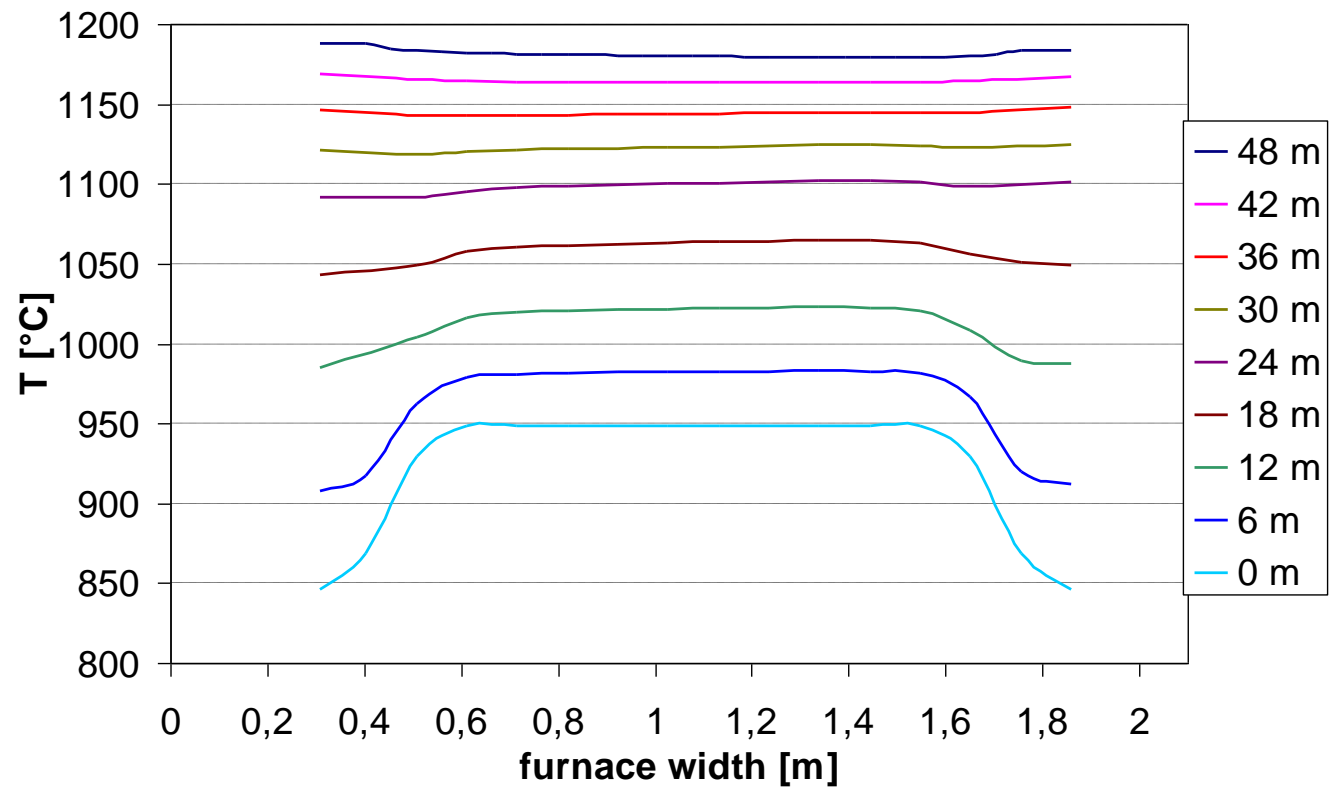
## Post-Processing:

- Auswertung
- Visualisierung
- Analyse
- Optimierung

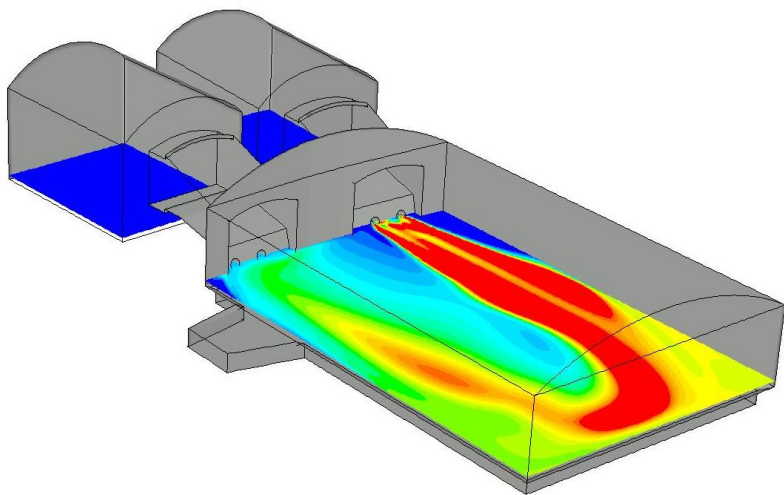




- Ein wesentlicher Vorteil von CFD-Methoden ist die enorme Datendichte, die durch die hohe räumliche (und evtl. auch zeitliche) Auflösung möglich ist.
- Grundsätzlich kann alles dargestellt werden, was im Rahmen der Simulation berechnet wurde... ohne Einschränkungen durch die Messtechnik.
- Es gibt vielfältige Darstellungsformen, mit denen Prozesse im Rechengebiet sehr anschaulich visualisiert werden können.
- Dabei darf aber trotz aller „bunten Bilder“ nicht vergessen werden: die CFD-Simulation stellt einen idealisierten Prozess dar, basierend auf Angaben zur Geometrie, den Randbedingungen, dem Gitter und den ausgewählten Modellen.
- Ein Abgleich mit Messwerten ist immer ratsam.

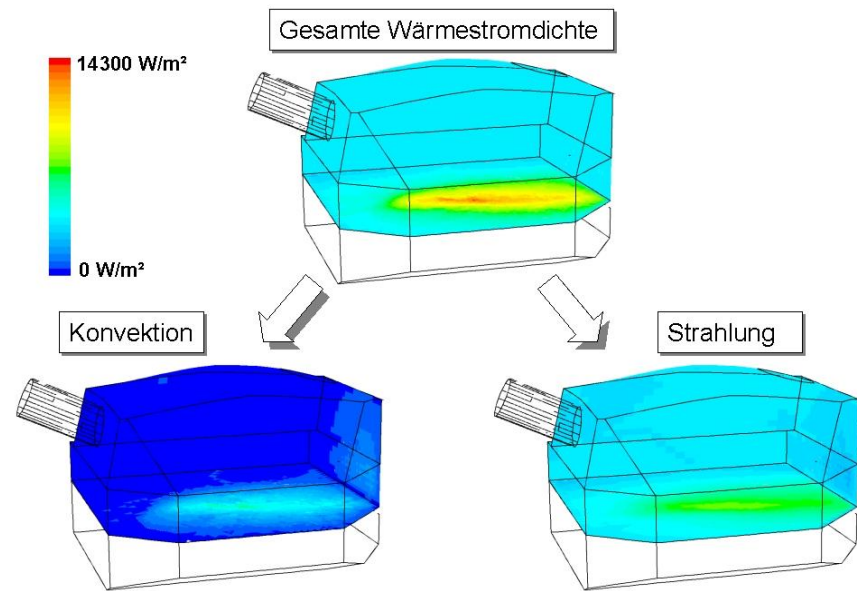
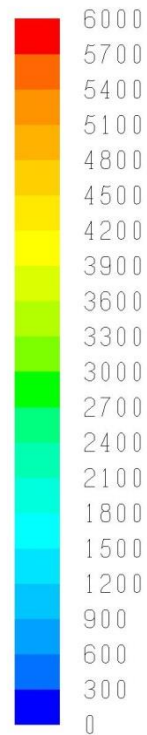


Temperaturverteilung in einer Bramme in einem Rollenherdofen

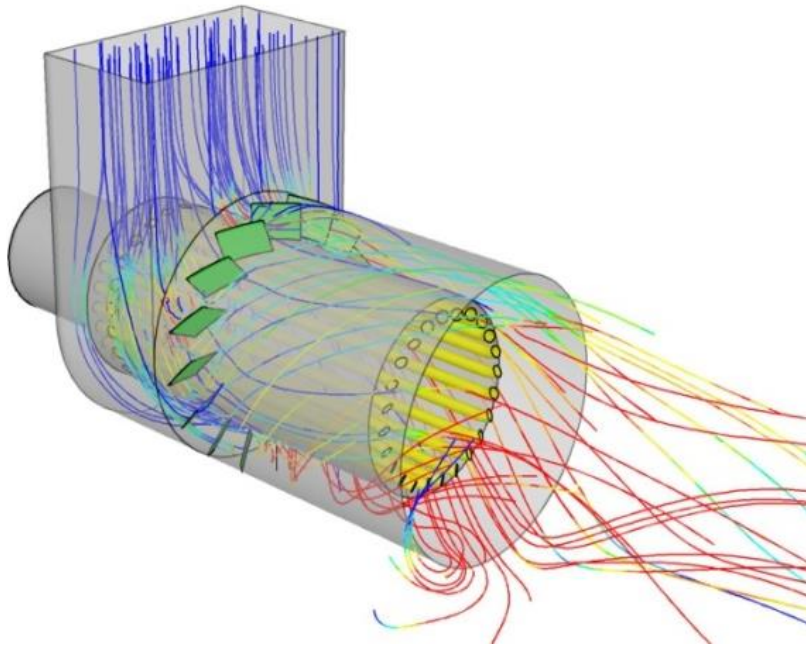


CO-Verteilung in einer Glasschmelzwanne

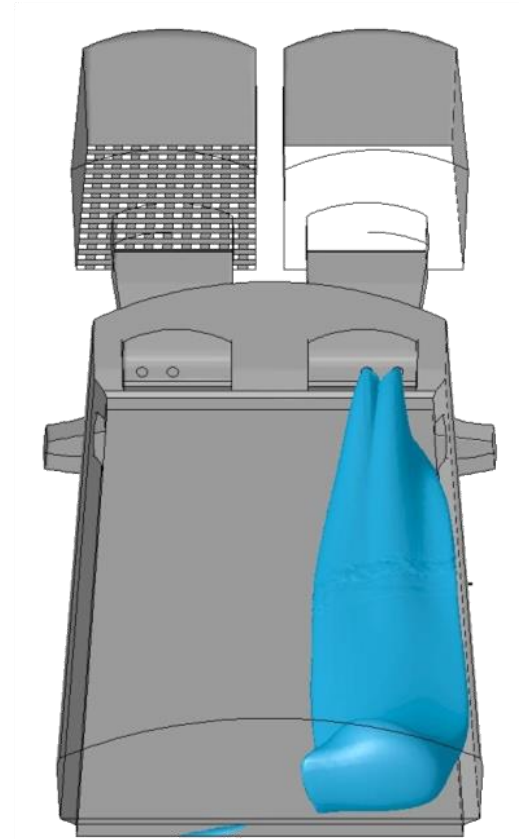
CO in [ppm]



Wärmestromdichtenverteilung  
In einem Wannenschmelzofen für  
Aluminium

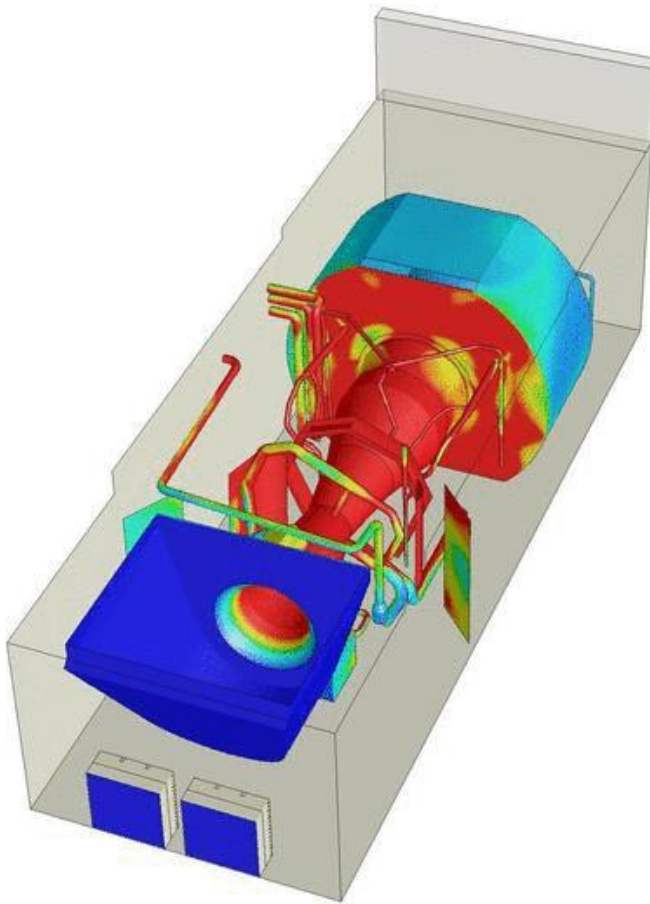


Stromlinien in einem Brenner



Iso-Flächen in einer  
Glasschmelzwanne





Temperaturverteilung in der  
Schallhaube einer Gasturbine

## Simulation:

- + industrielle Geometrien können dargestellt werden
- + keine Einschränkung durch messtechnische Erfordernisse
- + vielfältige Darstellungsmöglichkeiten durch hohe räumliche Auflösung
- + kein Eingriff in laufende Prozesse
- modellbehafte
- Validierung mit Messdaten ratsam

## Messung:

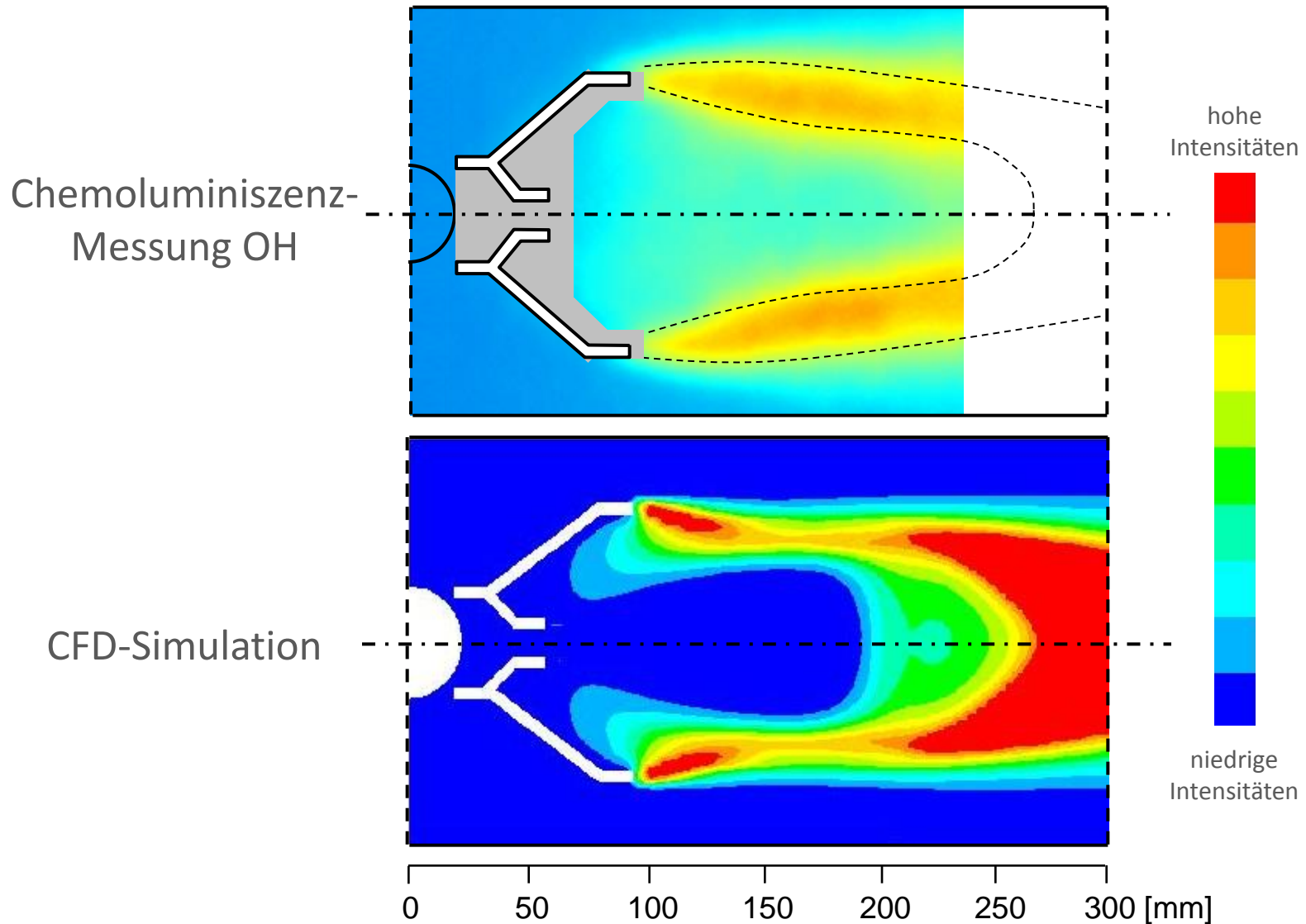
- + Aufnahme „realer“ Messwerte und Prozesse
- + Verwendung optimierter Laboröfen möglich
- + keine Modelleinschränkung
- aufwändige Durchführung
- oft geringe räumliche Auflösung
- Anwendbarkeit in „realen“ Industrieöfen eingeschränkt

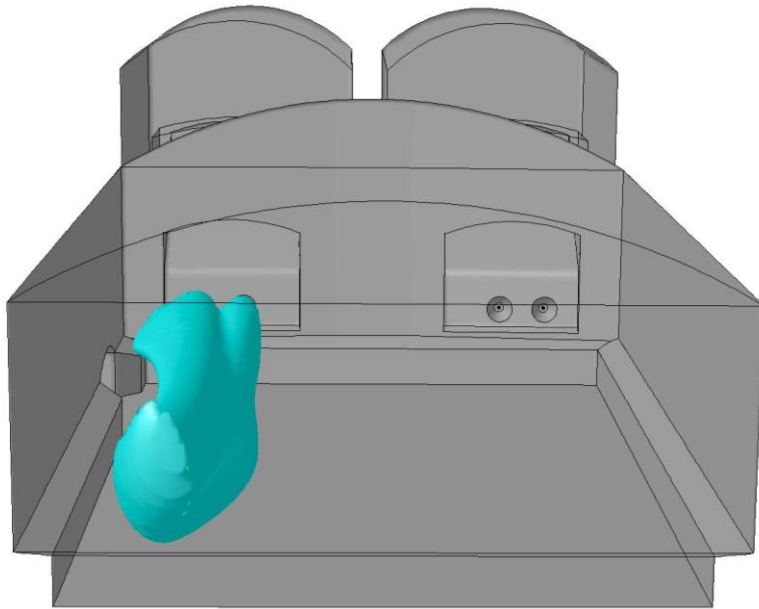
„In theory, there is no difference between  
theory and practice.

But in practice, there is.“

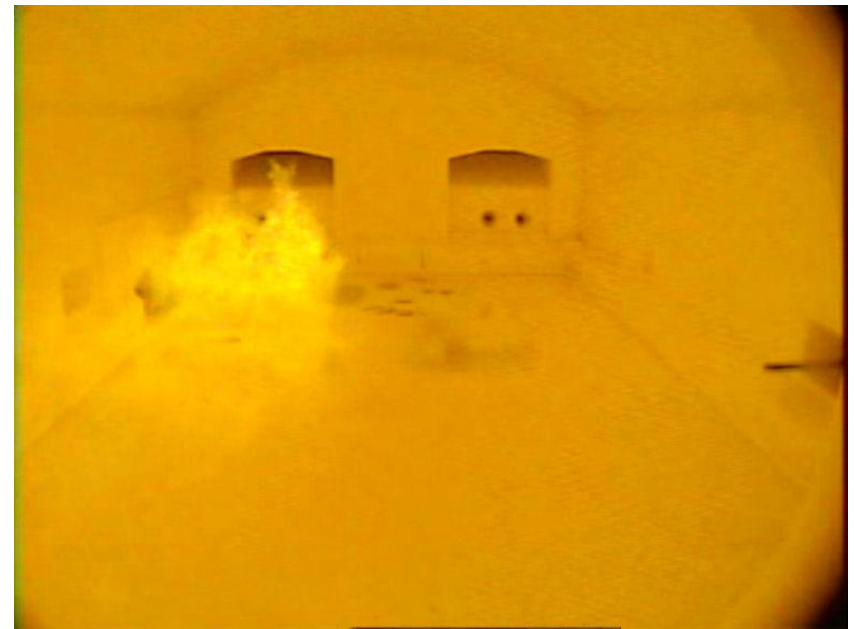
*Anonymous computer scientist*



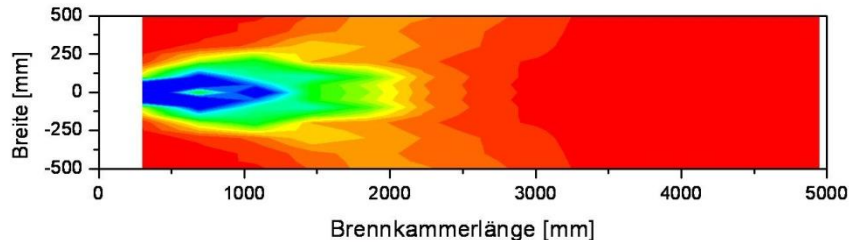




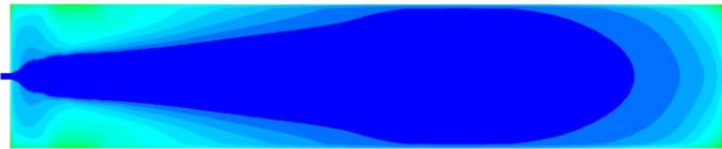
CO-Isofläche



Flammenbild aus einer Glasschmelzwanne



Messung am GWI-Versuchsofen



PDF-Gleichgewichtsmodell

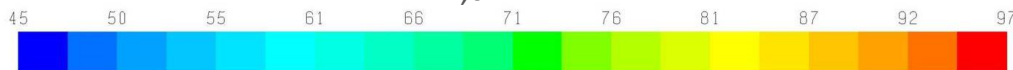


EDM mit stark reduziertem Mechanismus,  
6 Spezies, 2 Reaktionen



EDC mit reduziertem Mechanismus,  
17 Spezies, 50 Reaktionen

CO<sub>2,tr</sub> [Vol.-%]



- Die numerische Strömungssimulation (CFD) hat sich in vielen Industriebranchen als ein weiteres Werkzeug zur Auslegung und Optimierung von Maschinen, Anlagen und Prozessen etabliert.
- Vielfältige Darstellungsmöglichkeiten und eine große Datendichte erlauben neuartige Einblicke in Physik und Chemie technischer Geräte und Anlagen.
- Eine Simulation stellt ein idealisiertes Abbild der Realität dar und ist in hohem Maße von der Qualität der Randbedingungen abhängig.
- Eine Validierung mit Messdaten ist immer ratsam.
- Sinnvoll angewendet, kann CFD sehr viel mehr bieten als bloß „bunte Bilder“.



„The purpose of computing is **insight**,  
not numbers.“

*C. Hastings, 1955*





# Herzlichen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Dr.-Ing. Jörg Leicher  
Gas- und Wärme-Institut Essen e.V.  
Hafenstraße 101  
45356 Essen  
Tel.: +49 (0) 201 3618 – 278  
[leicher@gwi-essen.de](mailto:leicher@gwi-essen.de)