

Neue Wege bei der Simulation komplexer Strömungen

Wenn es darum geht, die Strömung von Stoffgemischen zu simulieren, kommen klassische CFD-Methoden (*Computational Fluid Dynamics*) an ihre Grenzen. Sulzer verfolgt seit einigen Jahren in enger Zusammenarbeit mit einem externen Forschungspartner (FlowKit SA) einen grundlegend neuen Ansatz: die Lattice-Boltzmann-Methode. Diese Methode wird bei Sulzer für die Simulation spezifischer Produkte eingesetzt und ermöglicht die Entwicklung technisch überlegener Lösungen sowohl im Pumpenbereich als auch für Trenn- und Mischtechnologie.

Die Open-Source-Software Palabos ist aus einer Zusammenarbeit von Industrie und Hochschule entstanden und bietet Grundbausteine für eine grosse Bandbreite an Strömungssimulationen mittels der Lattice-Boltzmann-Methode. Ein Vorteil von Palabos ist, dass das Rechengitter im Gegensatz zu den traditionellen CFD-Methoden automatisch generiert wird und somit auch sehr komplexe Geometrien nicht auf Kosten der Genauigkeit vereinfacht werden müssen (weitere Informationen: www.palabos.org). Zu den Vorzügen der Lattice-Boltzmann-Methode gehört, dass der Algorithmus sehr einfach parallelisiert (d. h. auf mehrere simultan laufende Teilberechnungen aufgeteilt) werden kann und eine nahezu perfekte Skalierbarkeit aufweist. Ein weiterer Vorteil ist die relativ einfache Implementierung von Modellen für komplexe physikalische Phänomene, was vor allem für Simulationen mit mehrphasigen Fluiden von Interesse ist. Die resultierenden feineren Gitter als bei traditionellen CFD-Methoden führen zusammen mit der restriktiven Zeitschrittgrösse allerdings zu einem erhöhten Bedarf an Hardwareressourcen für die Simulationen. Sulzer verfügt mit dem von Pumps Equipment und Chemtech gemeinsam genutzten Hochleistungsrechner über die geforderte Infrastruktur. Im Folgenden werden drei Fallstudien beschrieben, die den erfolgreichen Einsatz der Lattice-Boltzmann-Methode bei Sulzer zeigen.

Pumpensimulationen mit Palabos

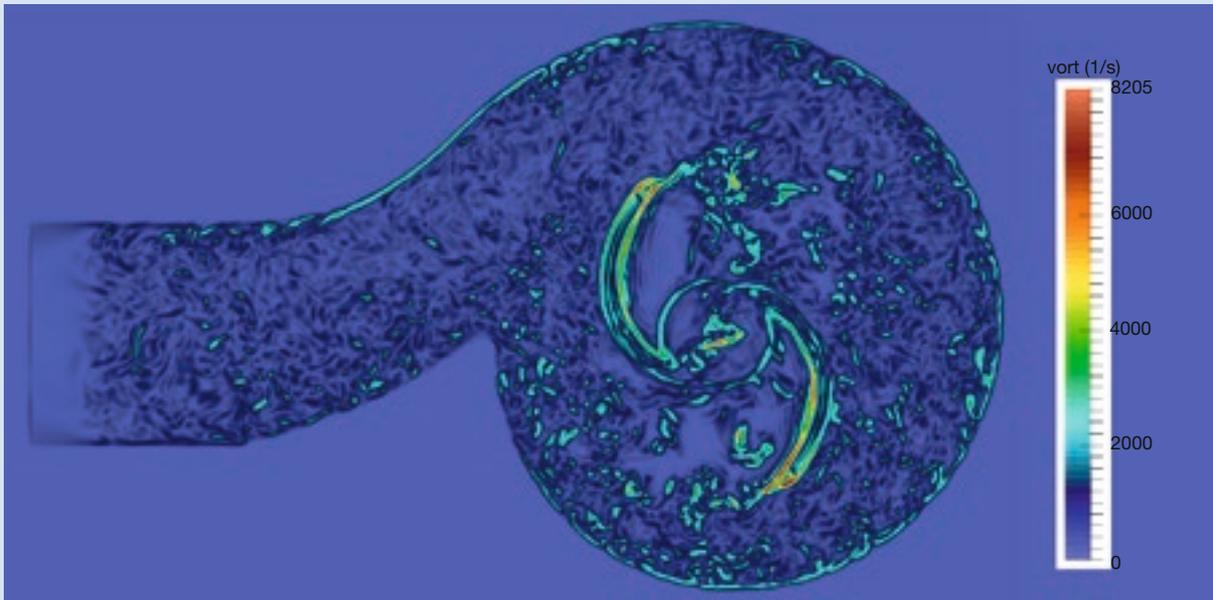
In einem ersten Schritt evaluierte Sulzer die Software Palabos (siehe Infobox) für Pumpensimulationen mit dem Ziel, die Pumpenkennlinien bei einphasiger Strömung korrekt vorauszusagen. Die Programmierer von

Den Molekülen auf der Spur mit Lattice-Boltzmann

Klassische CFD-Codes (*Computational Fluid Dynamics*) basieren auf den Navier-Stokes-Gleichungen und beschreiben die Strömung anhand makroskopischer Grössen wie zum Beispiel der Geschwindigkeit oder der Dichte der Fluide. Die Lattice-Boltzmann-Methode hingegen ist eine mikroskopische Simulationsmethode, bei welcher die Strömung durch Transport und Wechselwirkung einzelner Moleküle beschrieben wird. Dabei werden nicht die Moleküle selbst, sondern ihre Wahrscheinlichkeitsdichte f betrachtet. Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit einer bestimmten Teilchengeschwindigkeit ξ an einer gegebenen Stelle zu einem spezifischen Zeitpunkt vorzufinden. Die zeitliche und räumliche Entwicklung von f wird durch die Boltzmann-Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = C(f)$$

Dabei muss der Kollisionsoperator $C(f)$ in der Strömungssimulation modelliert werden. Die makroskopischen Strömungsgrössen erhält man als statistische Momente von f .¹

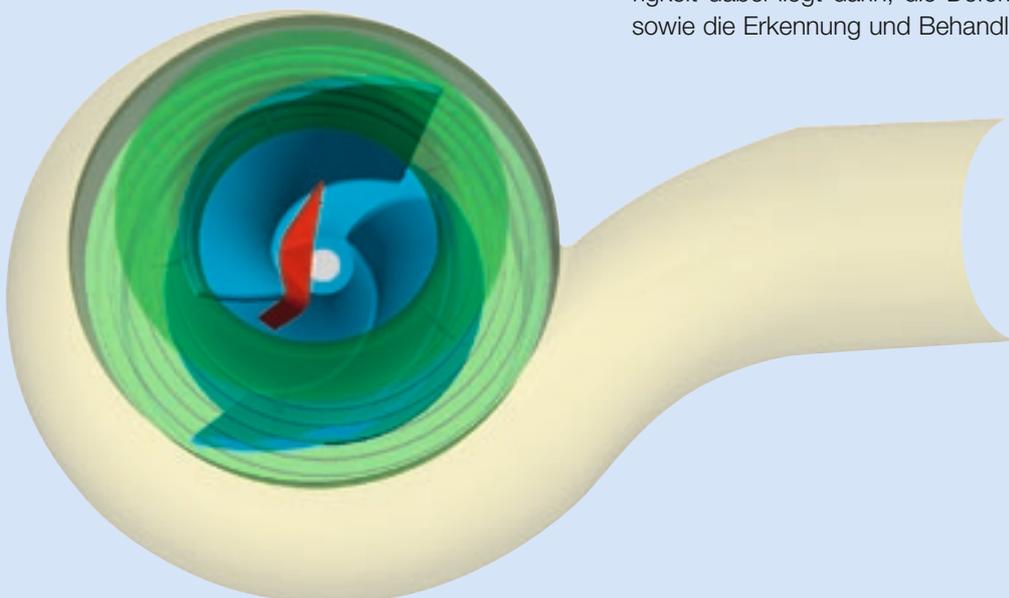


1 Wirbelstrukturen in einer Pumpe können mit der Software Palabos und dem LES-Turbulenzmodell sehr genau simuliert werden.

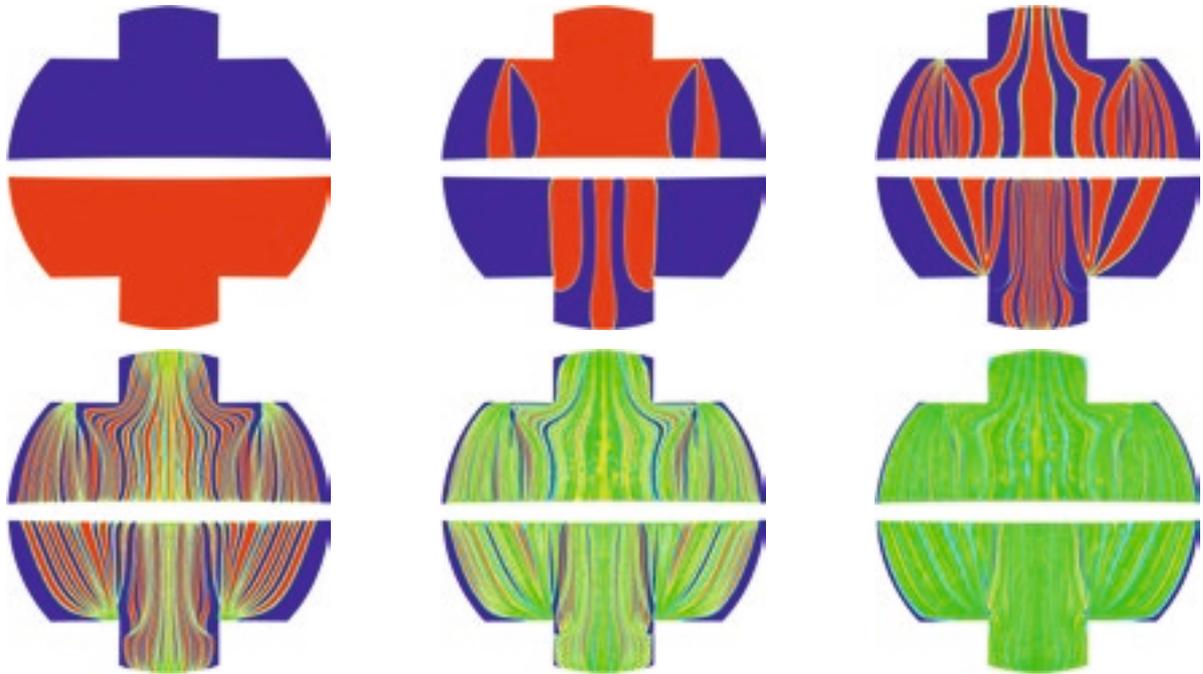
FlowKit erstellten ein Codeframework (Programmiergerüst), um Pumpengeometrien und Betriebsdaten bequem über eine Schnittstelle (in der Computersprache XML) einzulesen. Da Pumpensimulationen mit der Lattice-Boltzmann-Methode Neuland sind, wurde viel Zeit in die Kalibrierung investiert, um möglichst präzise Resultate zu erhalten. Herausfordernd war insbesondere die Wahl der Randbedingungen am Austritt des Rechengebiets, weil sich bei gewissen Einstellungen numerische Druckwellenreflexionen ergaben. Bild 1 zeigt eindrücklich, wie fein die Turbulenzstrukturen in der Pumpe mit dem LES-Turbulenzmodell (*Large Eddy Simulation*) aufgelöst werden konnten.

Interaktion mit Festkörpern

Clogging bedeutet die Verstopfung einer Pumpe durch Festkörper wie z. B. Tücher. Analysen der Strömungsverhältnisse mit CFD in der Nähe der Schaufeln können nur bedingt zur Abschätzung des Cloggingverhaltens verwendet werden. Andere Möglichkeiten wie das Simulieren eines Skalars oder eines zweiphasigen Gemisches mit einer extrem hochviskosen Komponente sind auch nur bedingt brauchbar, weil die Interaktion von Festkörpern mit dem Pumpenlaufrad physikalisch nicht korrekt modelliert wird. Darum hat Sulzer die Lattice-Boltzmann-Methode eingesetzt, um eine Abwasserpumpe mit einem Stück Tuch mittels gekoppelter Fluidstruktur-Interaktionen zu simulieren. Die Schwierigkeit dabei liegt darin, die Deformation des Tuches sowie die Erkennung und Behandlung der Kollisionen



2 Die Simulation zeigt die Interaktion zwischen einem Tuch (rot) und dem Laufrad (blau) einer Abwasserpumpe.



3 Die vorhergesagte Mischqualität des MIXPAC™-T-Mischers ist dargestellt mittels Konzentrationsverteilung an mehreren Querschnitten entlang des Mischers (Eintrittsverteilung gefolgt von Verteilungen nach 2, 4, 6, 8 und 10 Mischerelementen). Die Farben Rot und Blau kennzeichnen die zwei Komponenten, und grüne Bereiche beschreiben Regionen, welche durch die molekulare Diffusion vermischt wurden.

mit den Pumpenoberflächen korrekt zu simulieren. Die Elastizität des Tuches sowie die Reibung an den Oberflächen müssen zudem gemäss realistischen Bedingungen kalibriert werden. Bild 2 zeigt ein Simulationsbeispiel.

Mischverhalten hochviskoser Fluide

Während die Vorhersage von laminaren Strömungen mit klassischen CFD-Methoden sehr zuverlässig ist, so birgt die Beschreibung des Mischverhaltens hochviskoser Fluidkomponenten mit diesen Verfahren gewisse Risiken.

Die steilen Konzentrationsgradienten werden in der Simulation neben der natürlichen molekularen Diffusion auch durch numerische Diffusion verringert, bedingt durch das zu grobe Rechengitter. Daher bieten passive Partikel eine sinnvolle Alternative zur Beschreibung des Mischprozesses, da Partikeltrajektorien nicht an das numerische Gitter gebunden sind. Die nahezu lineare Skalierbarkeit von Palabos erlaubt es, eine sehr hohe Anzahl solcher Partikel effizient zu rechnen, was zu sehr detaillierten Resultaten innerhalb des gesamten laminaren Mischers führt². Sulzer optimierte diesen allgemeinen Ansatz weiter für die Vorhersage von statischen laminaren Mischern mit gleichen Fluideigenschaften. Mit dieser Methode können die mit steigen-

der Mischer-Elementzahl dünner werdenden Komponentenschichten detailliert beschrieben werden (Bild 3).

Ausblick

Die untersuchten Fallstudien haben gezeigt, dass das Open-Source-Lattice-Boltzmann-Paket Palabos eine vielversprechende Option für die Analyse komplexer physikalischer Strömungsphänomene darstellt. Der Einsatz von spezialisierten Open-Source Simulationswerkzeugen und die Zusammenarbeit mit externen Forschungspartnern bietet zudem wesentlich bessere Möglichkeiten, in den Entwicklungsprozess dieser Werkzeuge einzugreifen und spezialisierte Vorhersageanwendungen zu attraktiven Kosten zu erhalten.

**Kontakt: Stefan Berten, Mathias Hack,
Laurent Chatagny
sulzertechnicalreview@sulzer.com**

Literatur

- 1 S. Scheiderer. Effiziente parallele Lattice-Boltzmann-Simulation für turbulente Strömungen. Diplomarbeit Nr. 2464, Universität Stuttgart, 2006.
- 2 J. Lätt et al. Hybrid Lattice Boltzmann Method for the Simulation of Blending Process in Static Mixers, Int. J. Mod. Phys. C24, 1240009 (2013).