CFX Berlin

CFX Berlin Software GmbH
Simulationskompetenz aus Berlin

CFX Berlin Software GmbH

Simulationskompetenz aus Berlin

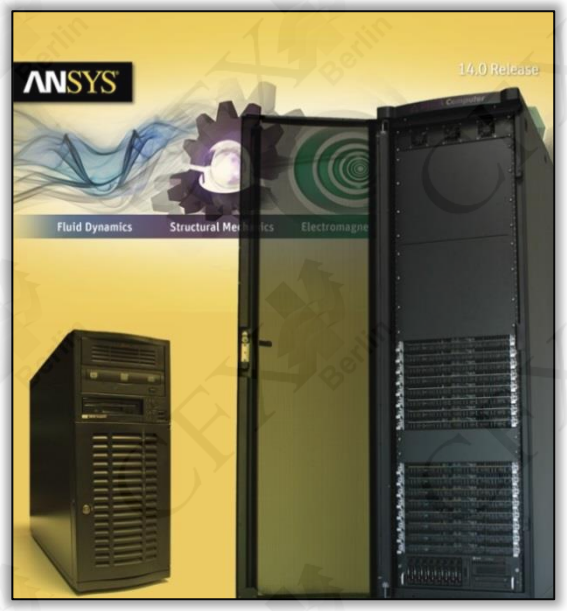
- CFX Berlin bietet seit 1997 als Partner von ANSYS, Inc. und CADFEM Lösungen und Simulationssoftware für:
  - Strömungsmechanik & Thermodynamik
  - Elektromagnetik
  - Strukturmechanik

- CFX Berlin-Geschäftsfelder:
  - ANSYS-Simulationssoftware
  - Berechnung & Optimierung
  - Beratung & Schulung
  - Forschung & Entwicklung

CFX Berlin Software GmbH

Überblick I

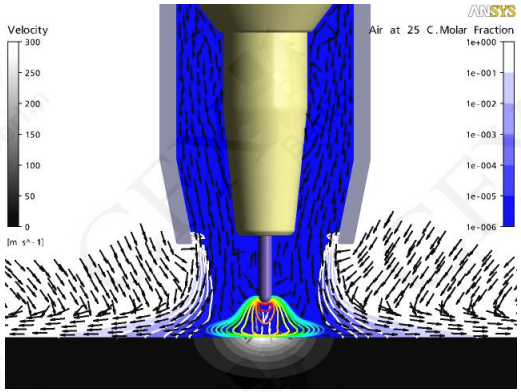
- Wie bieten Ihnen schlüsselfertige Simulationslösungen, bestehend aus:
  - ANSYS-Softwarelizenzen,
  - optimal abgestimmter Hardware,
  - individuellem Einarbeitungskonzept,
  - persönlichem Ansprechpartner für Support & Anwendungsberatung.



- Wir unterstützen Sie schon vorher mit:
  - Prozess- & Bedarfsanalyse, Lastenhefterstellung,
  - Entwicklung von optimalen Lösungen für Ihr Unternehmen,
  - Vorbereitung, Begleitung & Auswertung von Testinstallationen,
  - Erarbeitung individuell abgestimmter Schulungsmaßnahmen.

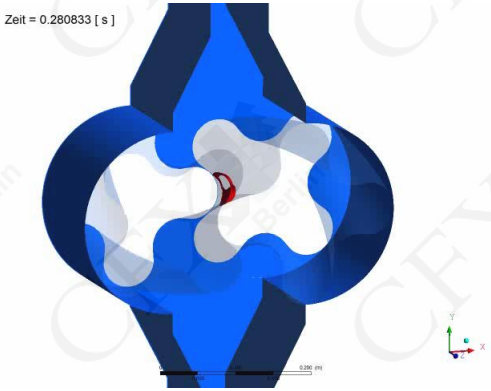
CFX Berlin Software GmbH
Überblick II

- Wir unterstützen auch im Rahmen von Dienstleistungen:
  - Simulation & Validierung mit Qualitätsgarantie
  - Auslegung & Optimierung von strömungstechnischen Maschinen und Anlagen
  - Modell- & Softwareentwicklung



Beispiel Schweißprozesssimulation: Schutzgasströmung mit Lichtbogen

- Wir machen Forschung & Entwicklung
  - öffentlich geförderte F&E-Projekte
  - industriegeförderte Auftragsforschung
  - interne Projekte

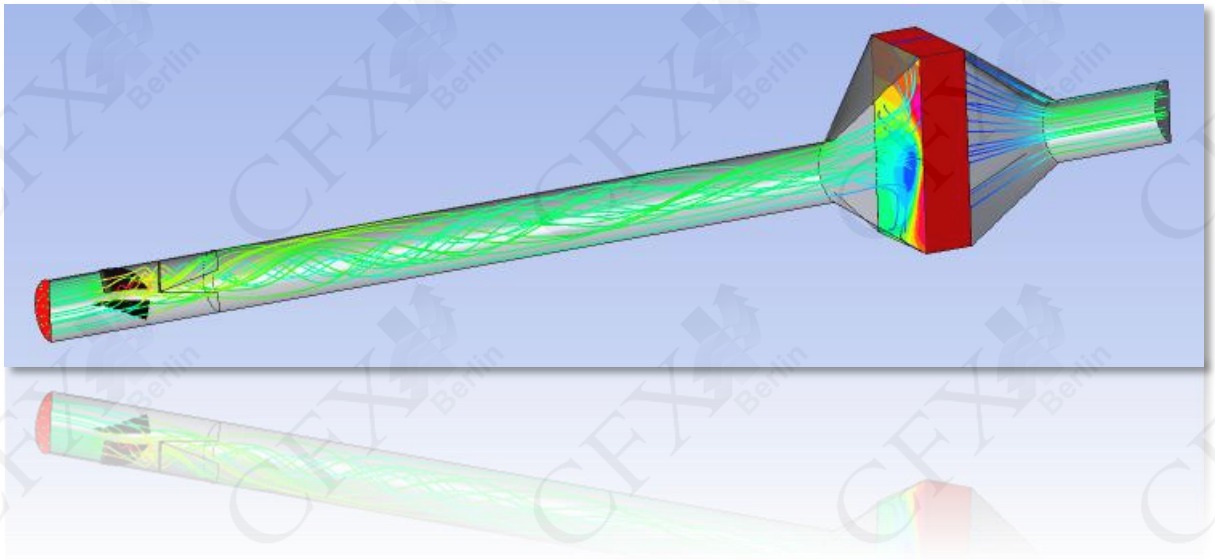


Beispiel Drehkolbenpumpe: Darstellung von Kavitation im Spalt

MAHLE TAKATA FES EagleBurgmann Siempelkamp LZH FIMA infineon truma

Herausforderung:

Numerische Berechnung der Fluiddynamik, Thermodynamik und Reaktionskinetik einer Abgasreinigungsanlage



Aufgabenstellung

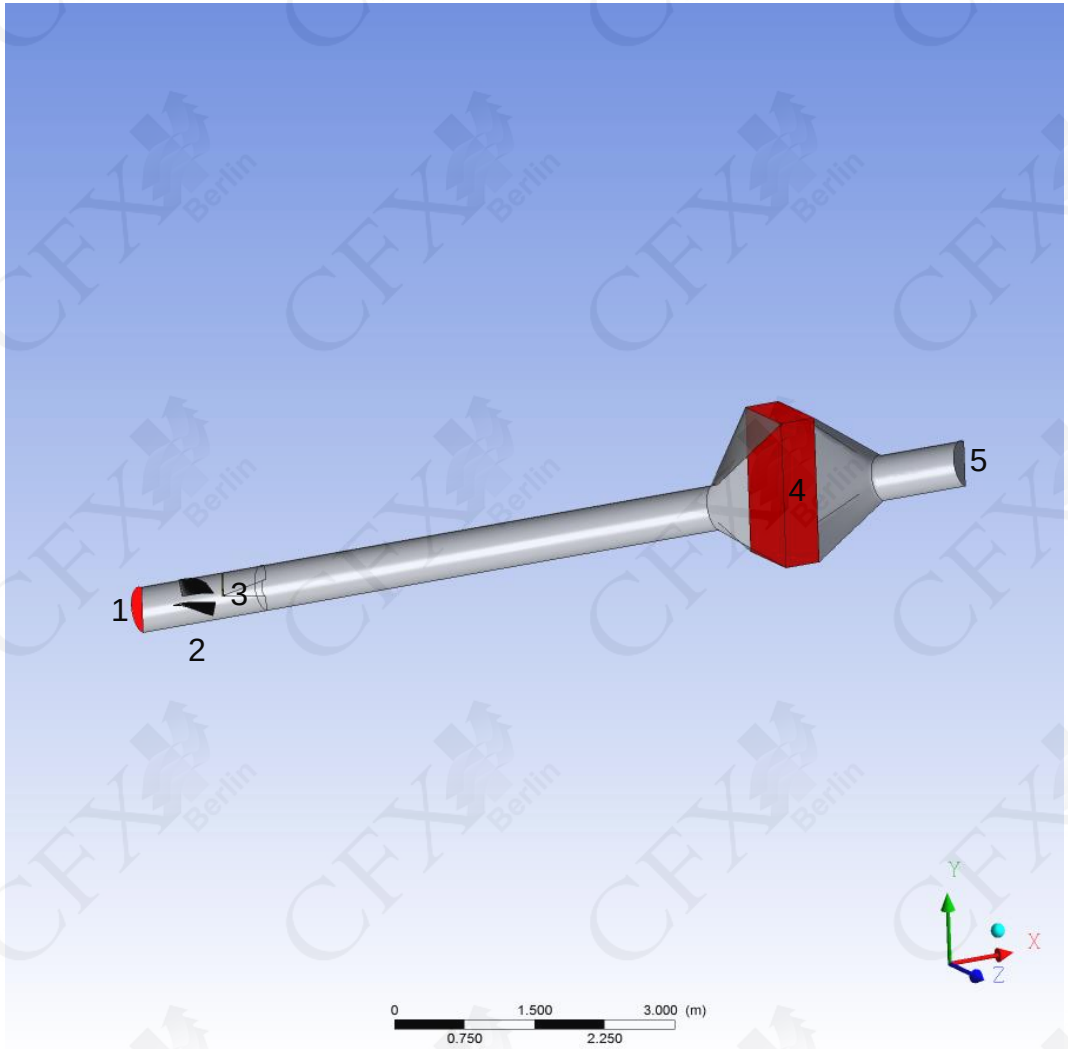
CFD-Simulation einer Abgasreinigungsanlage

CFX Berlin

- Diese Präsentation beschreibt die numerische Berechnung der Strömungs-, Temperatur- und Reduktionsmittelverhältnisse in einer Abgasreinigungsanlage.
- Ein heißes, NO_x-beladenes Abgas soll mit Hilfe einer SCR-Armatur gereinigt werden.
  - Dafür werden so genannte SCR-Katalysatoren verwendet, in denen die NO_x-Produkte mit Ammoniak reagieren.
  - Das Ammoniak kann entweder gasförmig oder in Form einer flüssigen Harnstofflösung durch eine Düse in die Abgasströmung eingeführt werden.
  - Die Gleichmäßigkeit der Ammoniakverteilung am Eintritt des Katalysators ist für die Qualität der Abgasreinigung entscheidend. Dieses Ziel wird durch den Einbau von statischen Mischelementen erreicht.
- Die Ziele dieser Arbeit sind:
  - Modellaufbau und Simulation der Heißgas-Strömung sowie der Bahnen der Harnstofflösungspartikel mit gegenseitiger Wechselwirkung
  - Untersuchung
    - der Partikelverdampfung
    - von verschiedenen Mischelementen
    - der Ammoniakverteilung am Eintritt des Katalysators

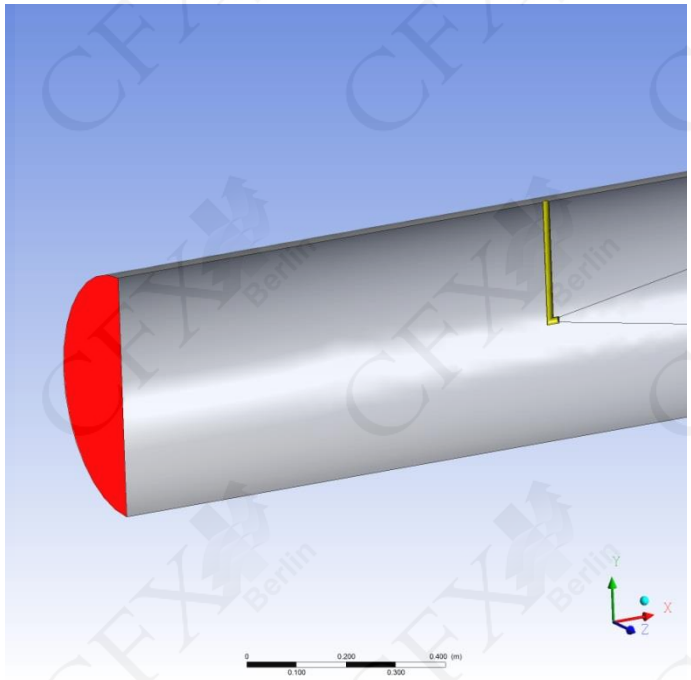
Berechnungsmodelle
Geometrie

- Beschreibung der Anlage (Strömungsvolumen):
  1. Einlass
     - Heißgas
     - NO_x-beladen
  2. Mischelement
  3. Einspritzdüse für die Harnstofflösung
  4. Katalysator
  5. Auslass
     - Heißgas
     - gereinigt

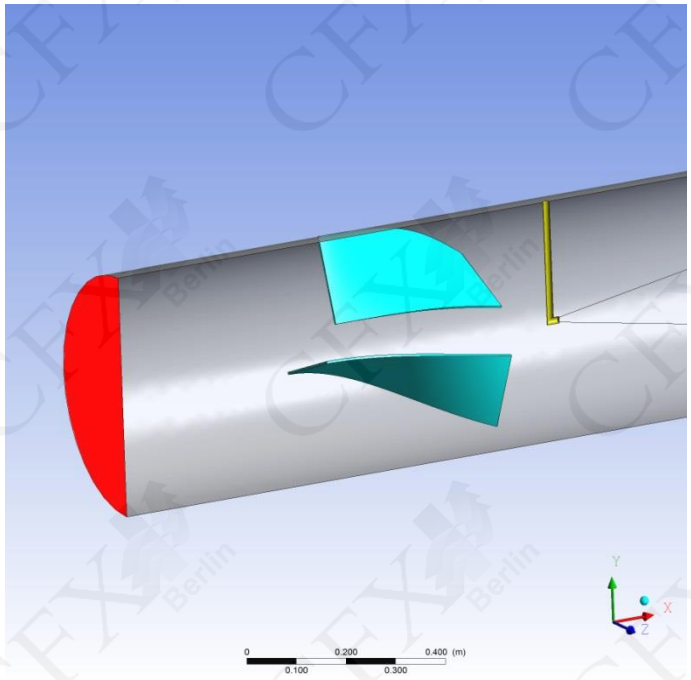


Berechnungsmodelle
Geometrie

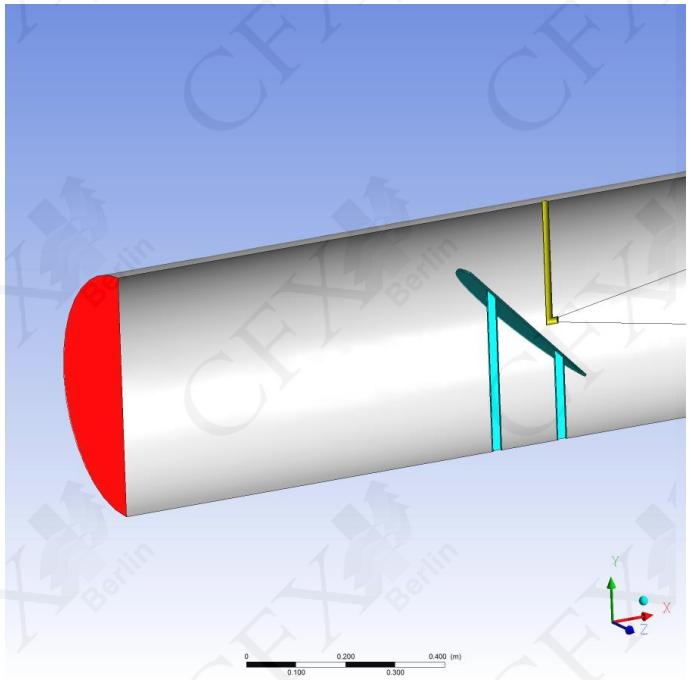
- Drei verschiedene Konfigurationen werden für das Mischelement untersucht:



Ohne Mischelement



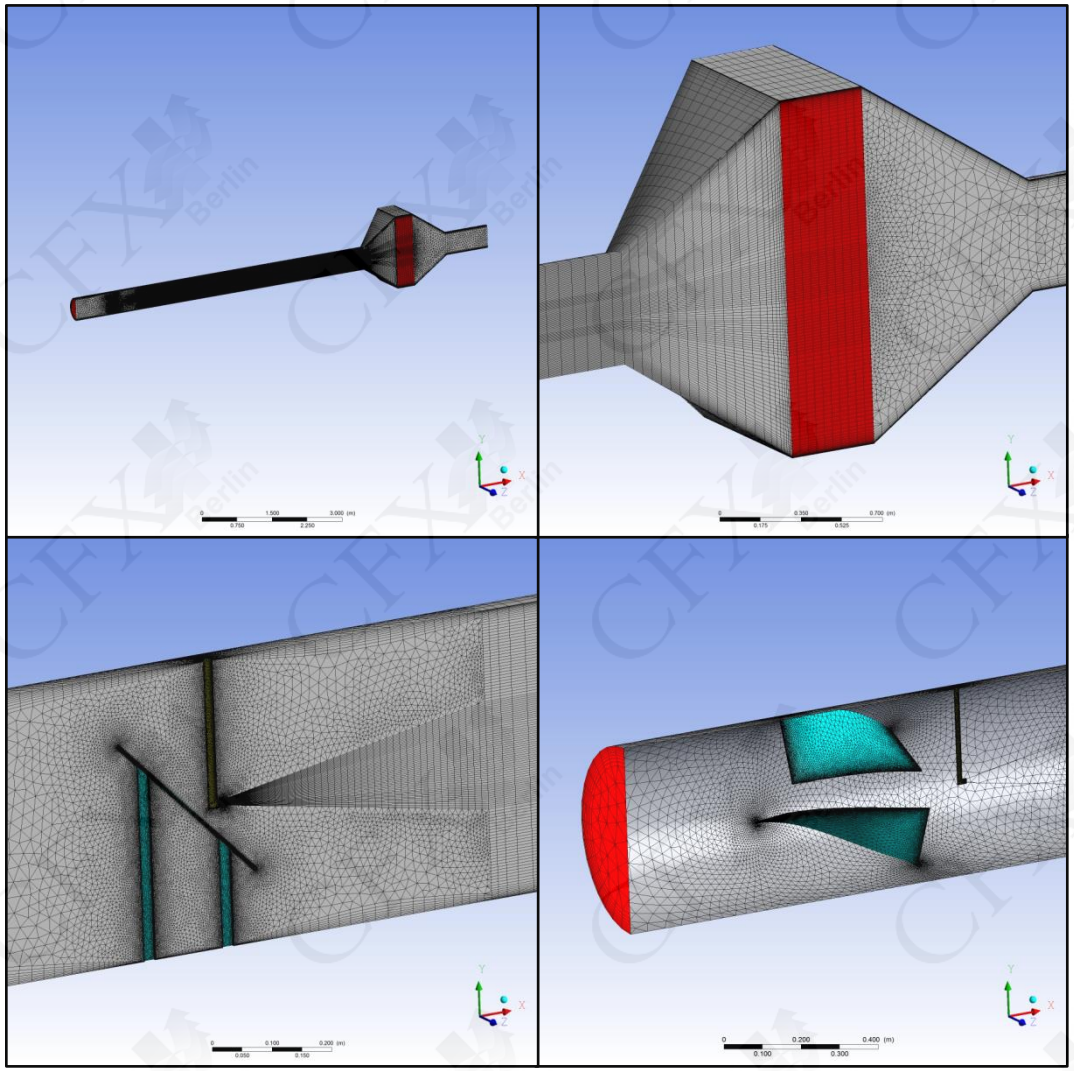
Drallbleche



Wirbelplatte

Berechnungsmodelle
Rechengitter

- Hybride Vernetzung mit ANSYS Meshing
  - Kombination verschiedener Vernetzungsmethoden (Tetra/Prism, Hexa) mit 1:1 Netzschnittstellen zwischen den verschiedenen Methoden
  - Prismenelemente zur Grenzschichtauflösung
  - Insgesamt 14 Mio. Tetraeder, Prismen und Hexaeder (entspricht ca. 4.5 Mio. Knoten)

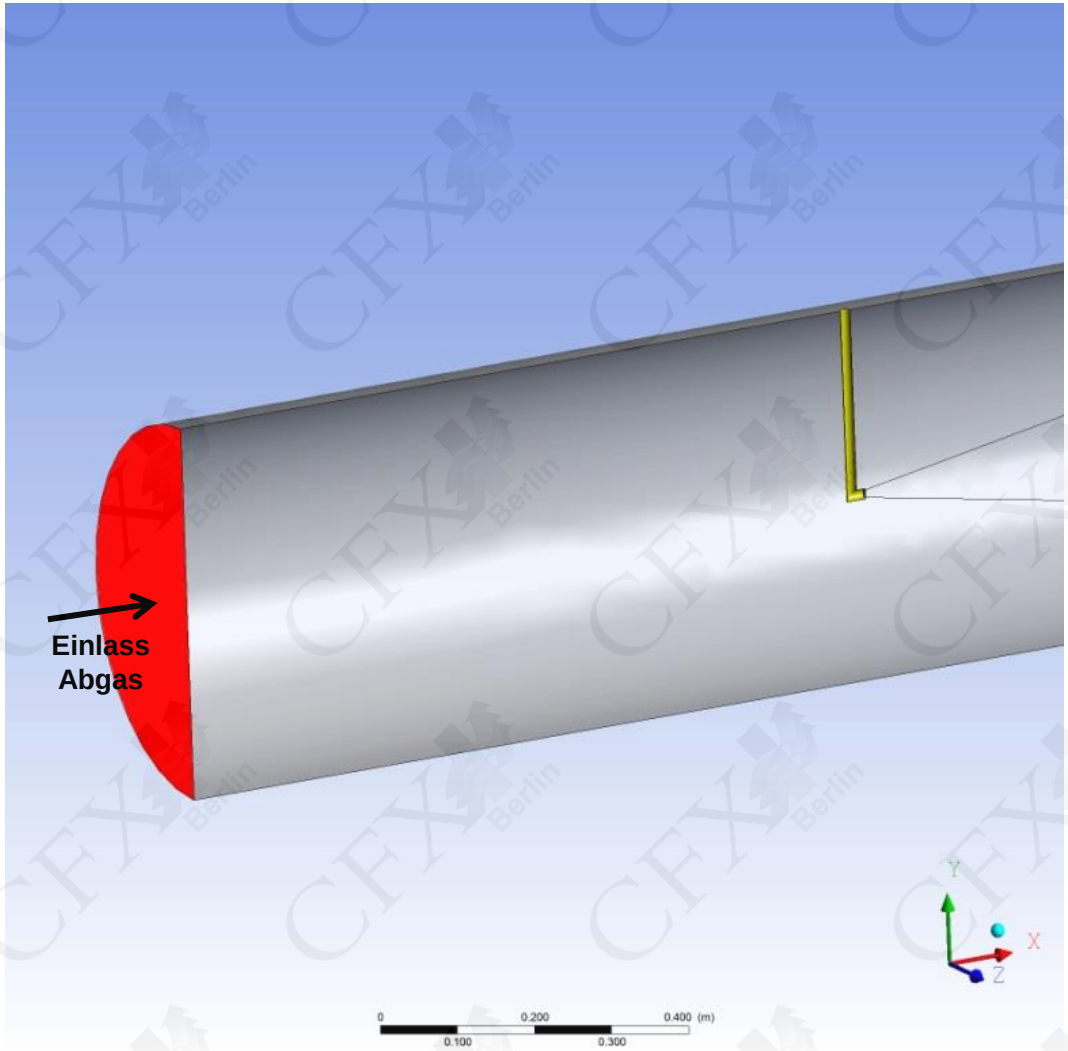


Berechnungsmodelle
Randbedingungen

- Einlass (Abgas)
  - Geschwindigkeit: 20 m/s (entspricht einem Massestrom von 1.1 kg/s)
  - Temperatur: 350°C
  - Zusammensetzung (Massenfraktion):

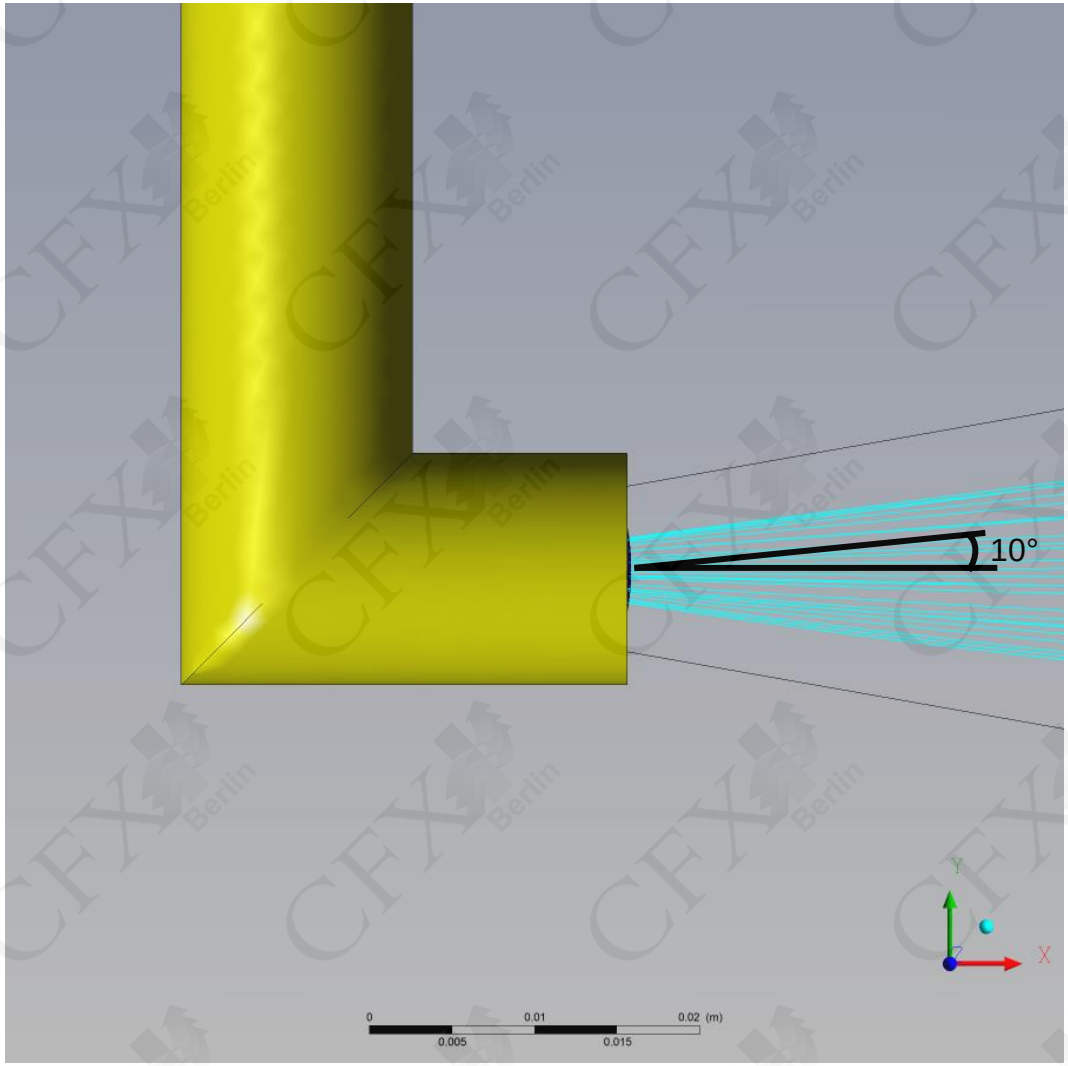
H_2O	6%
O_2	13%
CO_2	11%
N_2	70%
NO_x	<0.1%

- Wände
  - Reibungsbehaftet
  - Hydraulisch glatt
  - Adiabat



Berechnungsmodelle
Randbedingungen

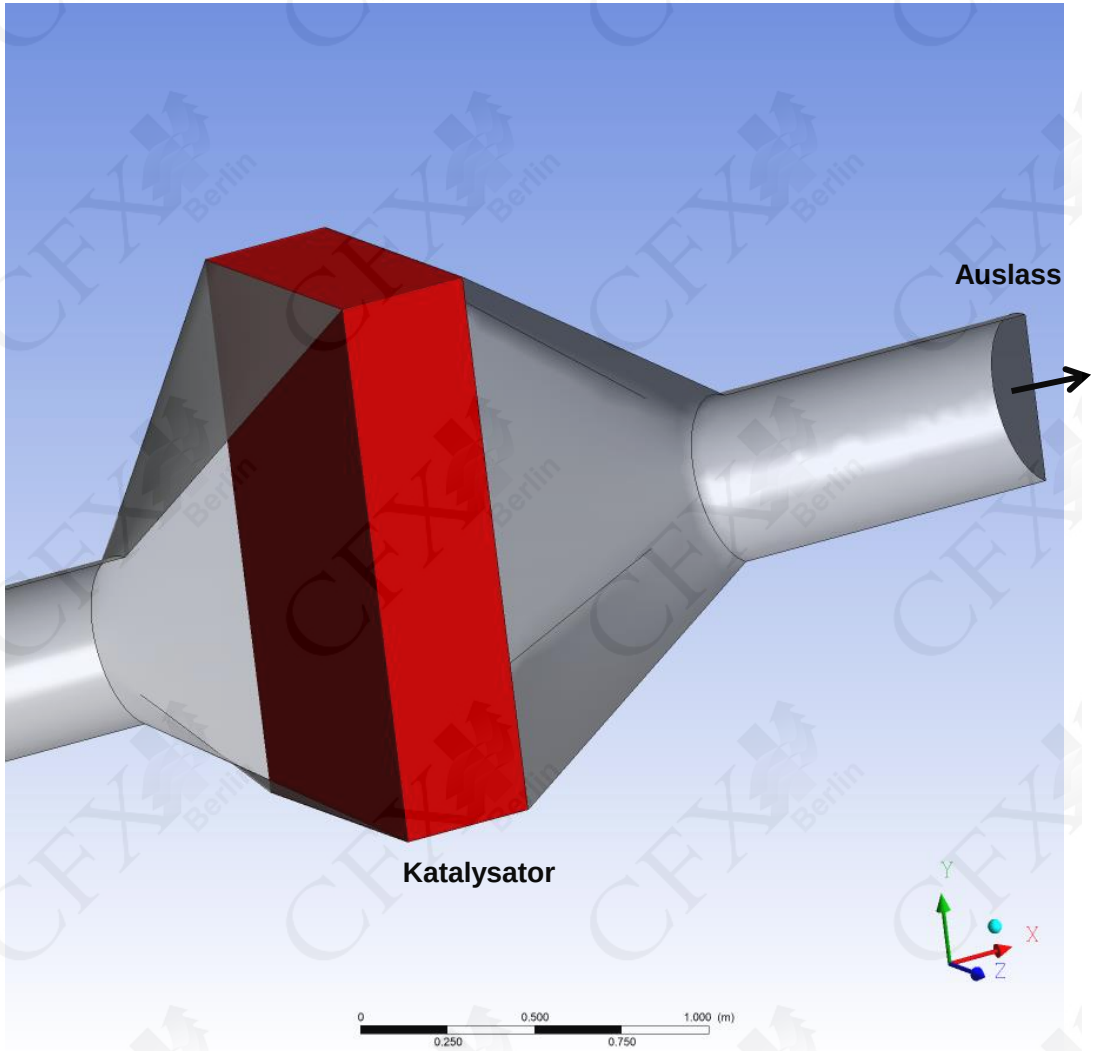
- Einlass (Düse)
  - Luft
    - Geschwindigkeit: 50 m/s
    - Temperatur: 50°C
  - Harnstofflösungspartikel:
    - Wasseranteil: 60m%
    - Harnstoffanteil: 40m%
    - Durchmesser: 50 µm
    - Temperatur: 50°C
    - Geschwindigkeit: 50 m/s
    - Vollkegelwinkel: 20°
    - Massenstrom: 0.004 kg/s



Berechnungsmodelle
Randbedingungen

- Katalysator
  - Druckverlust:
    ca. 1 mbar

- Auslass:
  - Absoluter statischer Druck:
    1 bar



Berechnungsmodelle
Stoffeigenschaften

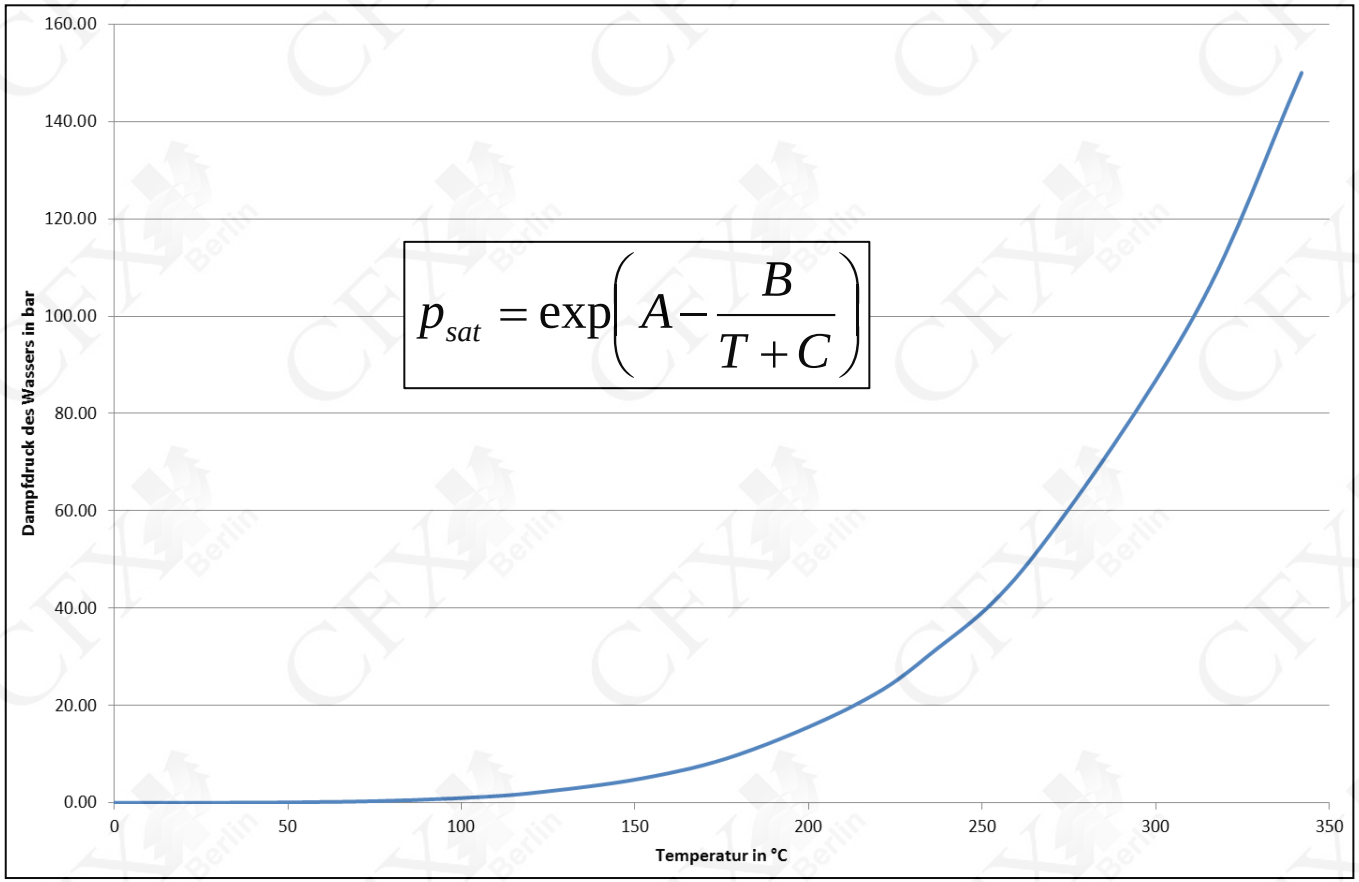
- Stoffeigenschaften des Abgases
  - Heißgaszusammensetzung (Massenprozent):
    - H_2O: 6%
    - O_2: 13%
    - CO_2: 11%
    - N_2: 70%
  - Sauerstoff (O_2)
    - Dichte: Idealgas-Gesetz
    - Dynamische Viskosität: Nach Sutherland
    - spez. Wärmekapazität: NASA-Polynom
    - Wärmeleitfähigkeit: Temperaturabhängig
  - Wasserdampf (H_2O)
    - Dichte: Idealgas-Gesetz
    - Dynamische Viskosität: Nach Sutherland
    - spez. Wärmekapazität: NASA-Polynom
    - Wärmeleitfähigkeit: Temperaturabhängig
  - Stickstoff (N_2)
    - Dichte : Idealgas-Gesetz
    - Dynamische Viskosität : Nach Sutherland
    - spez. Wärmekapazität: NASA-Polynom
    - Wärmeleitfähigkeit: Temperaturabhängig
  - Kohlenstoffdioxid (CO_2)
    - Dichte: Idealgas-Gesetz
    - Dynamische Viskosität: Nach Sutherland
    - spez. Wärmekapazität: NASA-Polynom
    - Wärmeleitfähigkeit: Temperaturabhängig

Berechnungsmodelle
Stoffeigenschaften

- Stoffeigenschaften der Partikel
  - Partikelzusammensetzung (Massenprozent):
    - H_2O: 60 %
    - Harnstoff: 40 %
  - Flüssiges Wasser: H_2O
    - Dichte: 998.2 kg/m^3
    - spez. Wärmekapazität: 4182.0 J/kg/K
    - Dampfdruck Antoine-Gleichung
  - Fester Harnstoff: $CO(NH_2)_2$
    - Dichte: 1335 kg/m^3
    - spez. Wärmekapazität: 1548.6 J/kg/K
    - Entgasungsrate (Arrhenius): $k = A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$

Berechnungsmodelle
Phasenübergang

- Modellierung des Phasenübergangs
  - Verdampfung des flüssigen Wassers zu Wasserdampf
  - Der Dampfdruck des Wassers ist abhängig von der Temperatur (Antoine-Gleichung):



$$p_{sat} = \exp\left(A - \frac{B}{T + C}\right)$$

Berechnungsmodelle
Phasenübergang

- Modellierung der Reaktionen:
  - Harnstoff-Thermolyse: $CO(NH_2)_2 \rightarrow NH_3 + HCNO$
    Reaktionsraten nach Arrhenius
  - Hydrolyse: $HCNO + H_2O \rightarrow NH_3 + CO_2$
    Reaktionsraten nach Arrhenius

Berechnung
Lösungsverfahren

- Beschreibung reibungsbehafteter Strömungen von Gasen und Fluiden durch Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen), Massenfraktionen und Enthalpie
  - Masse

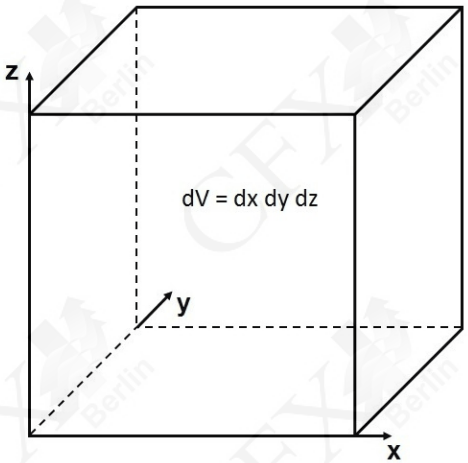
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\, u_j) = 0$$

  - Impuls

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\, u_j\, u_i) = -\frac{\partial\, p}{\partial\, x_i} + \frac{\partial}{\partial\, x_j}\left(\mu_{eff}\left(\frac{\partial\, u_i}{\partial\, x_j} + \frac{\partial\, u_j}{\partial\, x_i}\right)\right) + S_{M,i}$$

  - Enthalpie

$$\frac{\partial(\rho \cdot h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\, u_j\, h_{tot}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\lambda\frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i \tau_{ij}) + u_i S_{M,i} + S_E$$



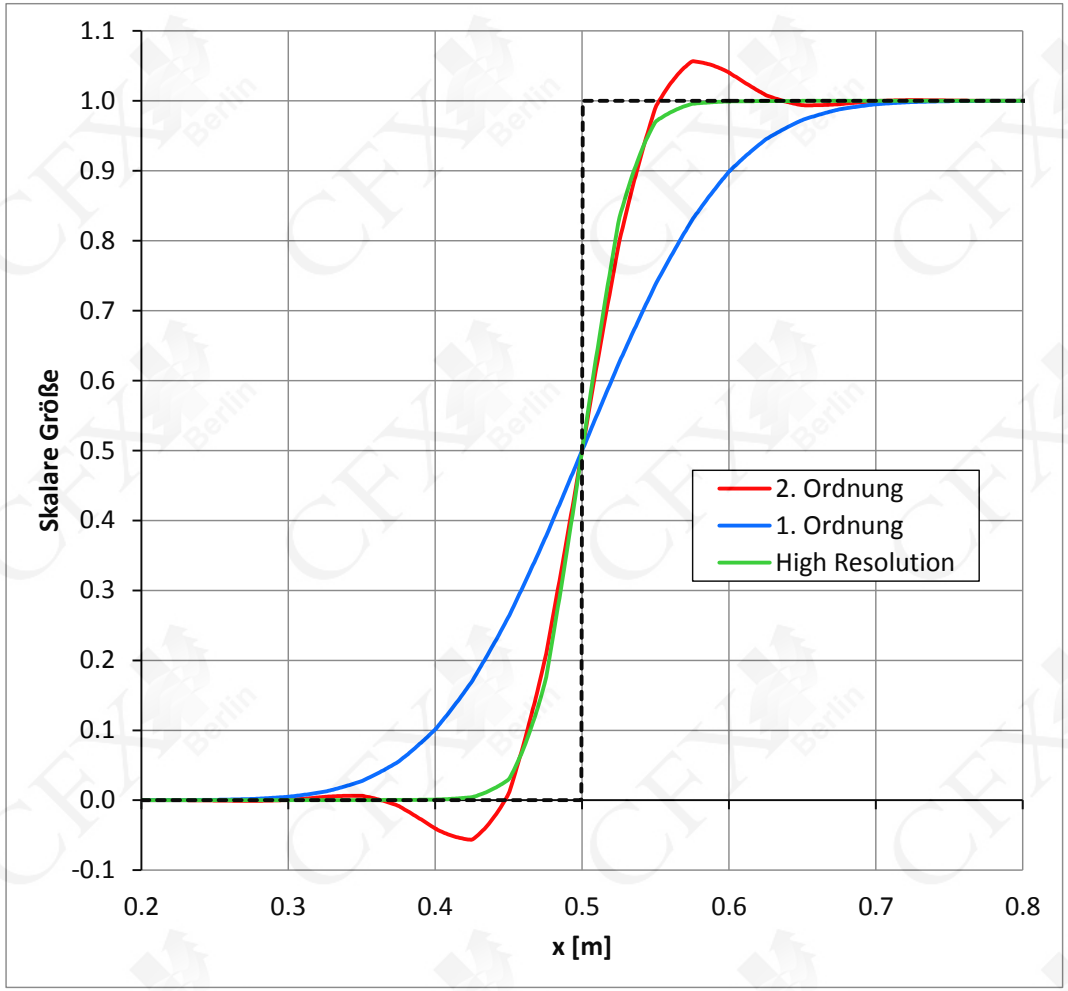
Berechnung
Lösungsverfahren

- Methode
  - Finite Volumen
- Diskretisierung
  - Genaues und robustes Diskretisierungsschema
  - Abbruchfehler 2.Ordnung
- Lösungsverfahren
  - Gekoppelter Löser
  - Algebraisches Mehrgitterverfahren

2 Partitionen

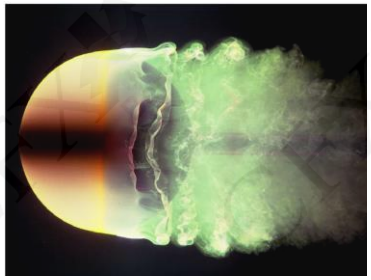
4 Partitionen

16 Partitionen

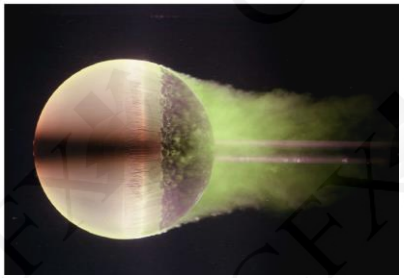


Berechnung
Turbulenzmodell

- Turbulente Strömung
  - Irreguläre, transiente, vielskalige dreidimensionale Fluidbewegung
  - Dissipativ und diffusiv
- Turbulenzmodellierung
  - Statistisches Turbulenzmodell in stationärer Simulation (RANS)
- SST-Turbulenzmodell
  - Gültig in der freien Strömung bis in die laminare Unterschicht an der Wand
  - Annahme einer isotropen Turbulenz



laminar boundary layer ($Re = 2 \cdot 10^4$)



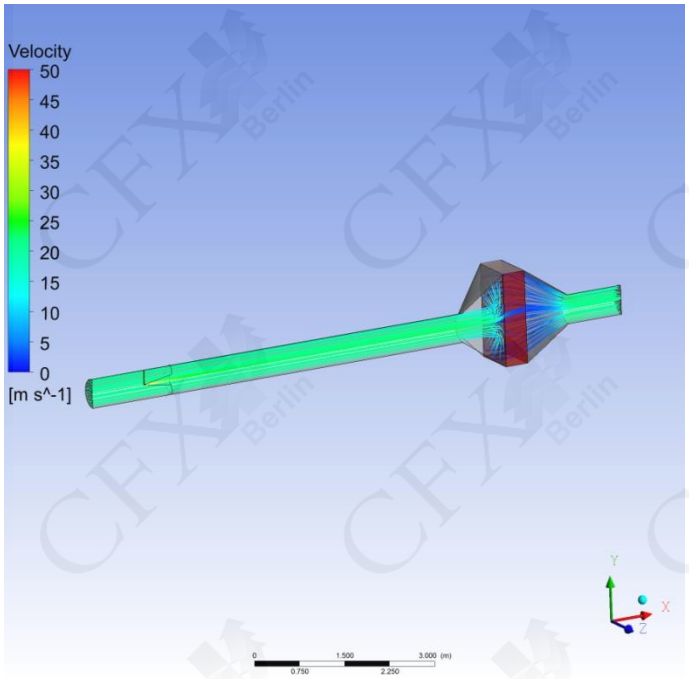
turbulent boundary layer ($Re = 5 \cdot 10^5$)

Berechnung
Lösungskontrolle

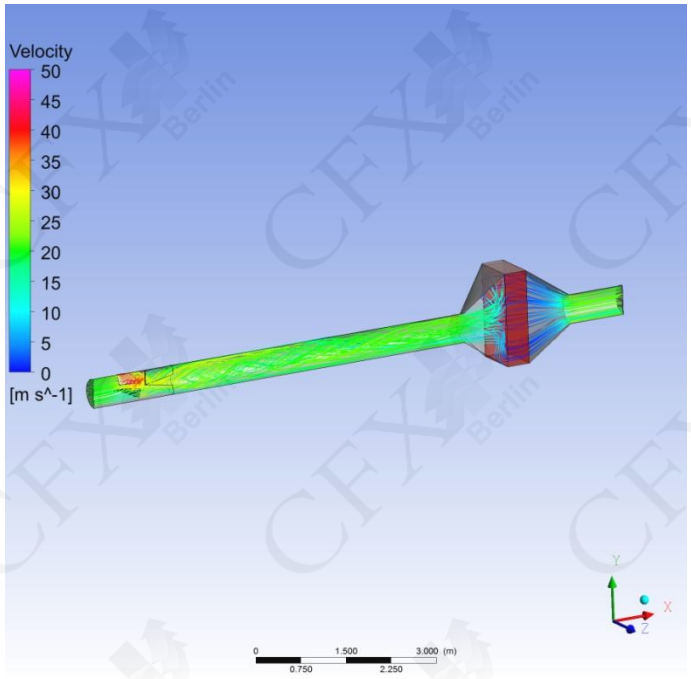
- Berechnungsverlauf
  - Die ersten 250 Iterationen wird ohne Partikel gerechnet, so dass sich das Strömungsfeld vor der ersten Eindüsung von Partikeln zunächst ausbilden kann.
  - Ab der 250. Iteration werden Partikel zugeführt und die Partikelbahnen und die Partikelverdampfung werden für jede Iteration aktualisiert.
  - Erreichtes Konvergenzkriterium
    - Lokal skalierte Residuen < 10^{-5}
    - Bilanzverletzung < 1%
  - Berechnungsaufwand
    - Berechnungsdauer: ca. 1 Tag
    - Arbeitsspeicherbedarf (Doppelte Genauigkeit): 20 GByte
  - Eingesetzte Hardware
    - 2 x Quad-Core Intel Xeon E5-2643 v2
    - 16-fach parallelisiert

Ergebnis
Strömungsfeld

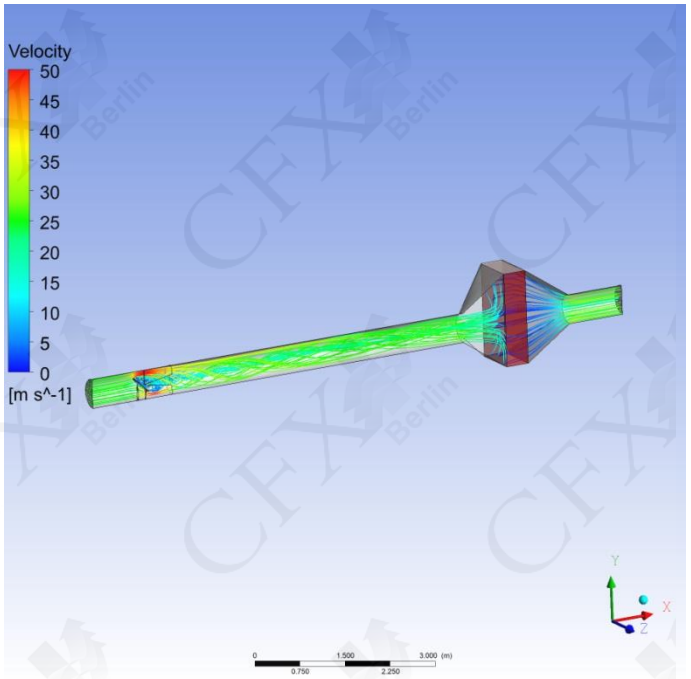
- Gasströmung
  - Stromlinien mit der Geschwindigkeit eingefärbt
  - Ohne Mischer: drallfreie Strömung
  - Mit Drallplatte oder Wirbelplatte: Erzeugung einer Drallströmung



Ohne Mischelement



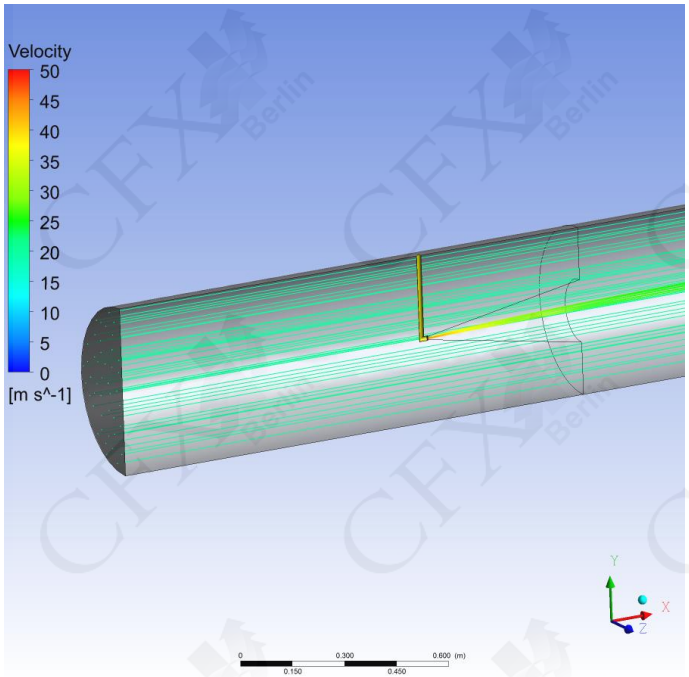
Drallbleche



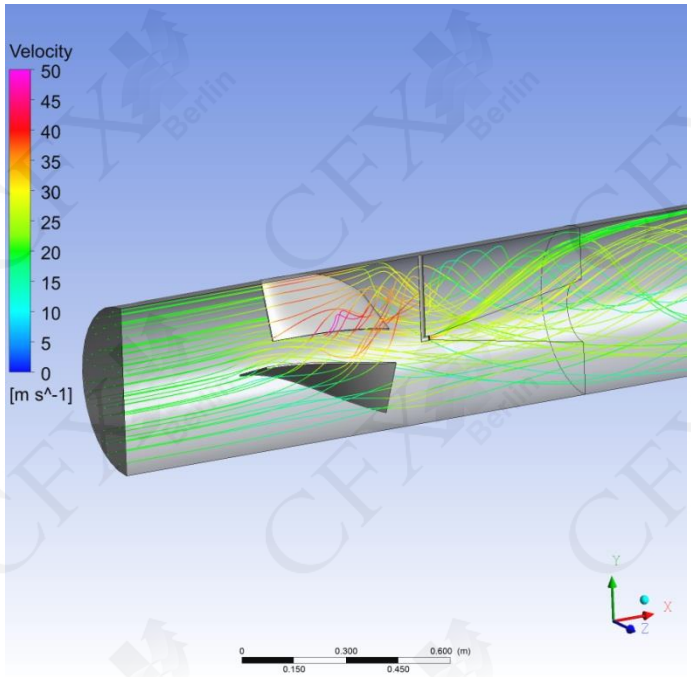
Wirbelplatte

Ergebnis
Strömungsfeld

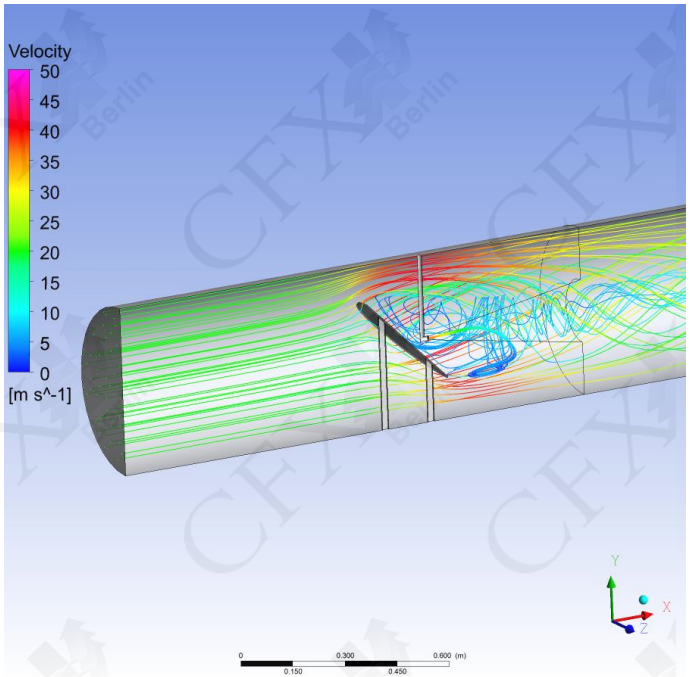
- Gasströmung
  - Stromlinien mit der Geschwindigkeit eingefärbt
  - Ohne Mischer: drallfreie Strömung
  - Mit Drallplatte oder Wirbelplatte: Erzeugung einer Drallströmung



Ohne Mischelement



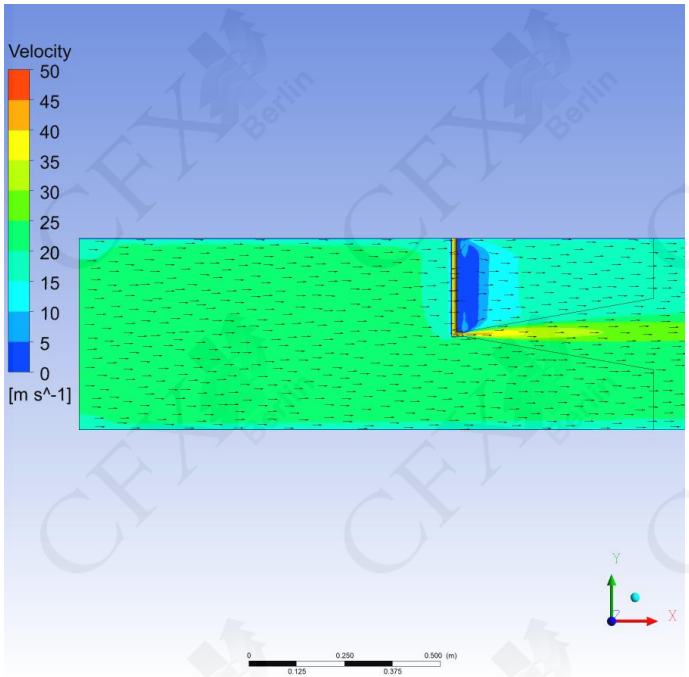
Drallbleche



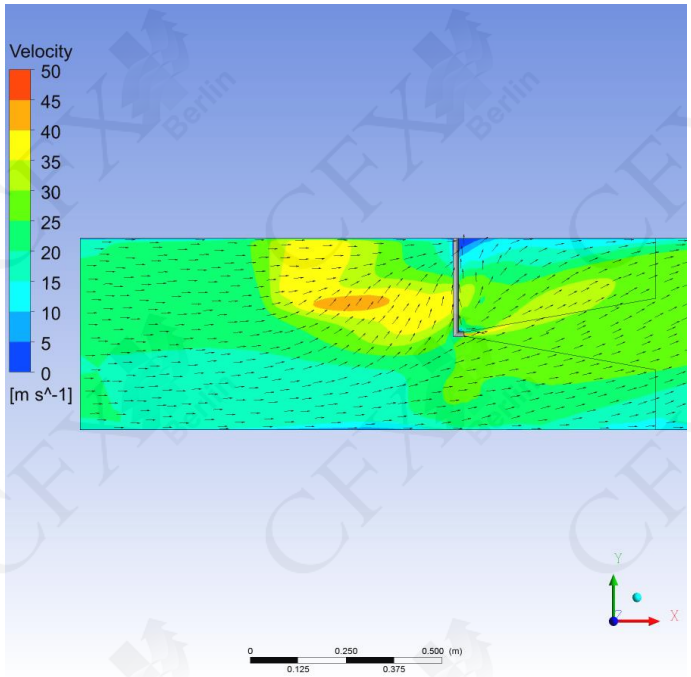
Wirbelplatte

Ergebnis
Strömungsfeld

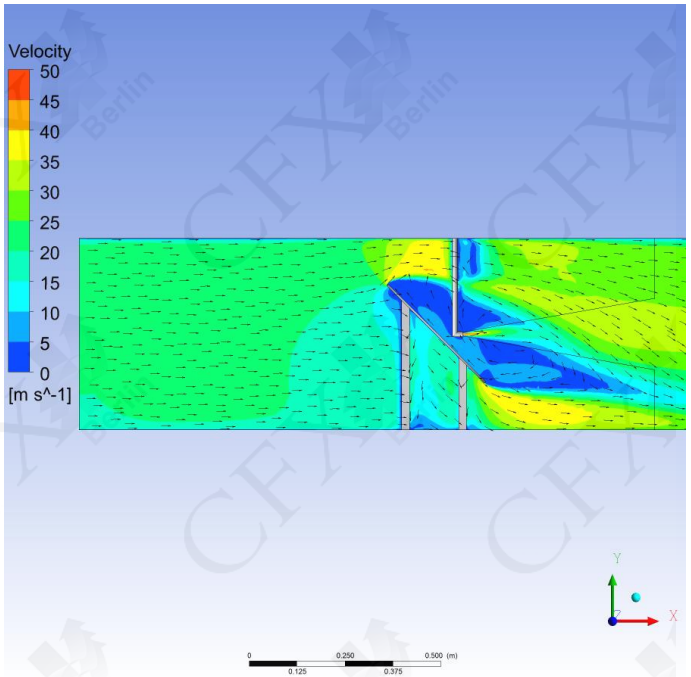
- Gasströmung
  - Geschwindigkeitsverteilung und Vektoren im Mittelschnitt
  - Ohne Mischer: drallfreie Strömung
  - Mit Drallplatte oder Wirbelplatte: Erzeugung einer Drallströmung



Ohne Mischelement



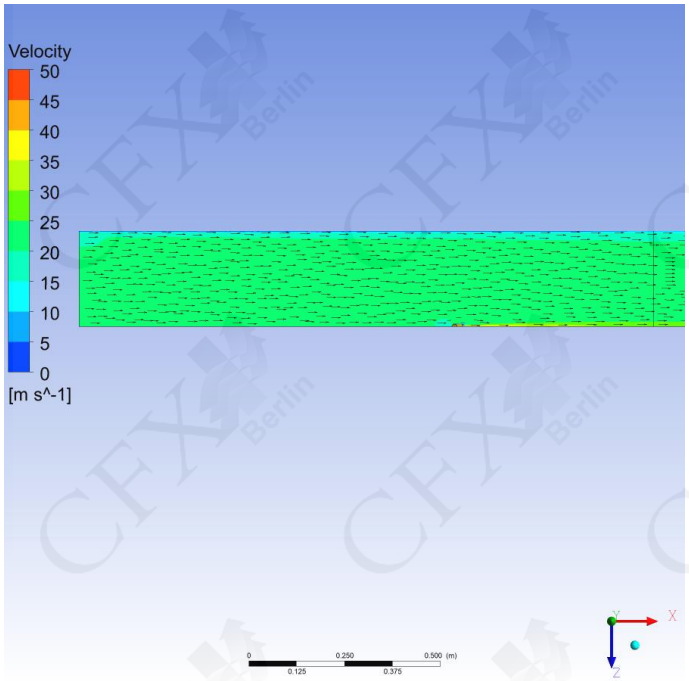
Drallbleche



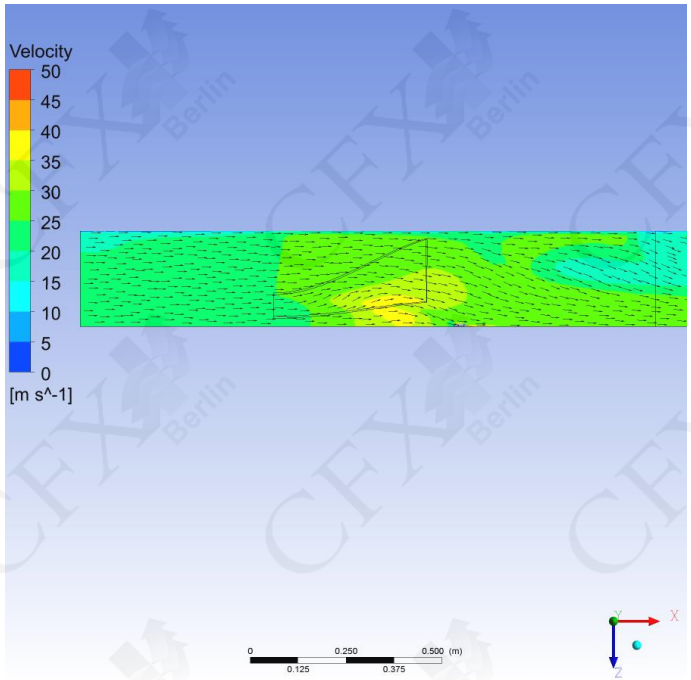
Wirbelplatte

Ergebnis
Strömungsfeld

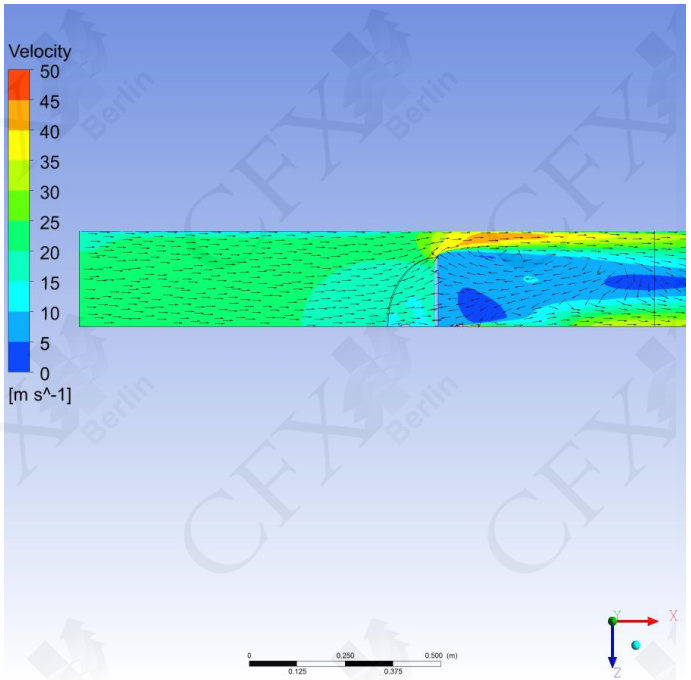
- Gasströmung
  - Geschwindigkeitsverteilung und Vektoren im Mittelschnitt
  - Ohne Mischer: drallfreie Strömung
  - Mit Drallplatte oder Wirbelplatte: Erzeugung einer Drallströmung



Ohne Mischelement



Drallbleche

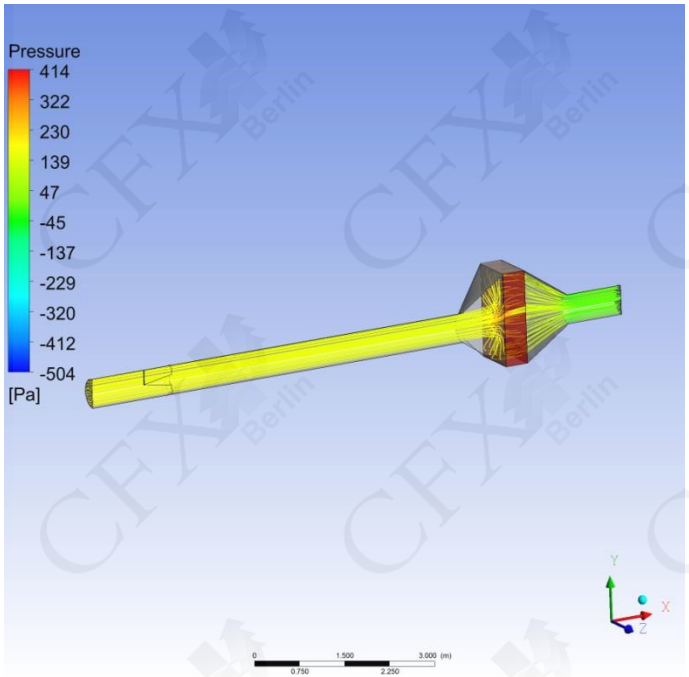


Wirbelplatte

Ergebnis
Strömungsfeld

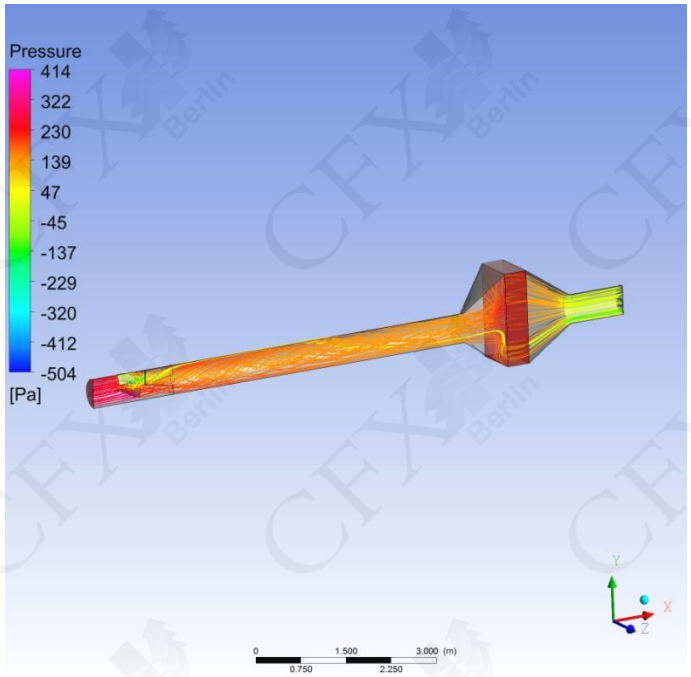
- Gasströmung
  - Stromlinien mit dem Druck eingefärbt
  - Druckverlust zwischen Ein- und Auslass:

174.68 Pa



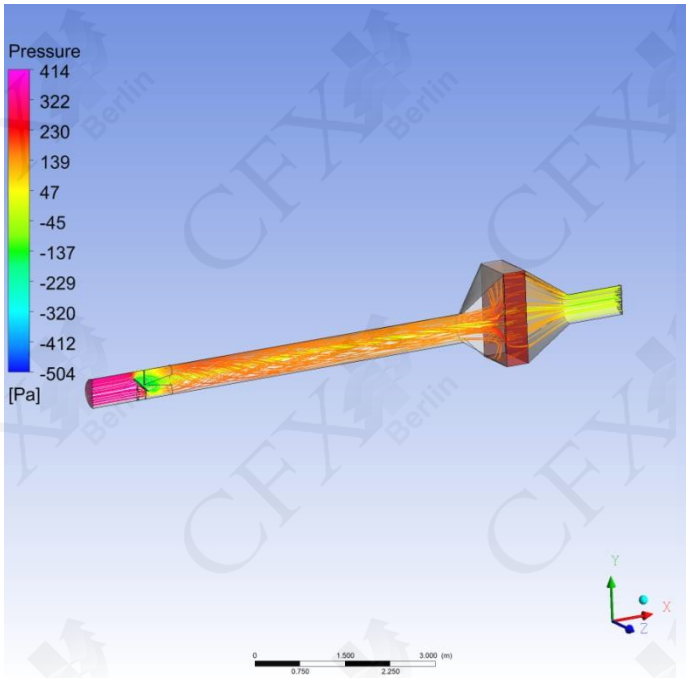
Ohne Mischelement

269.61 Pa



Drallbleche

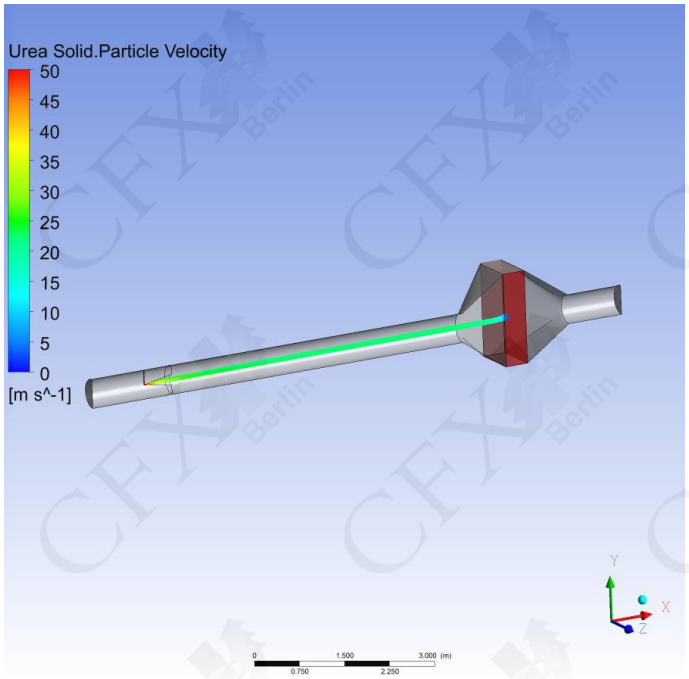
331.14 Pa



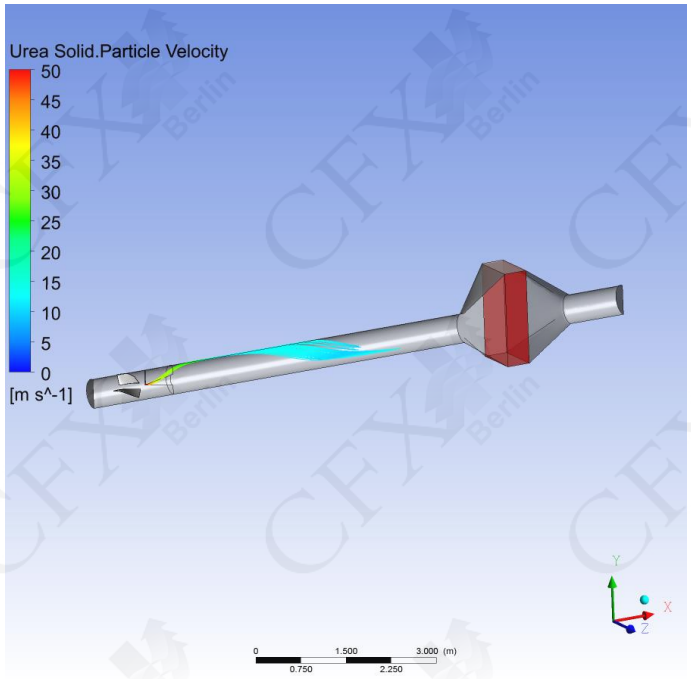
Wirbelplatte

Ergebnis
Partikelbahnen

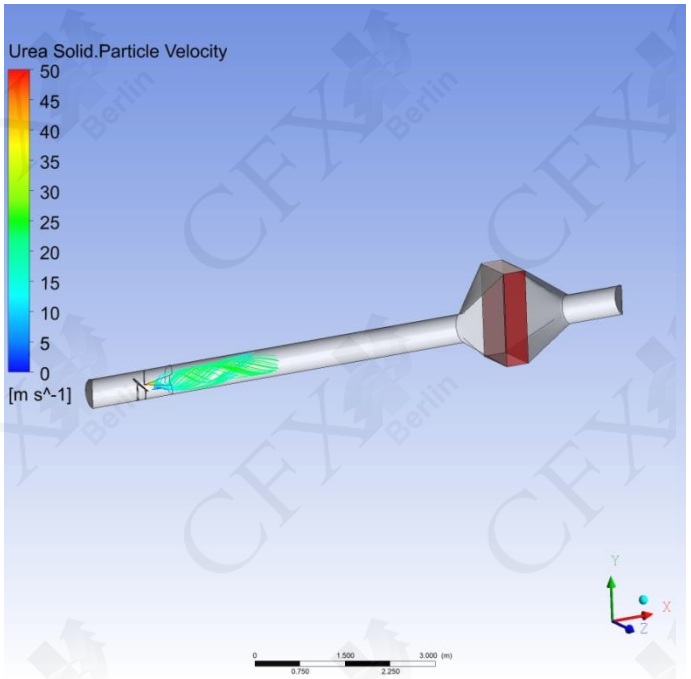
- Partikelbahnen gefärbt mit der Partikelgeschwindigkeit
  - Ohne Mischer erreichen die Partikel die Eintrittsfläche des Katalysators.
  - Mit Mischer sind alle Partikel vor der Eintrittsfläche des Katalysators vollständig verdampft und entgast.
  - Die Strecke zwischen Düse und Katalysator könnte verkürzt werden.



Ohne Mischelement



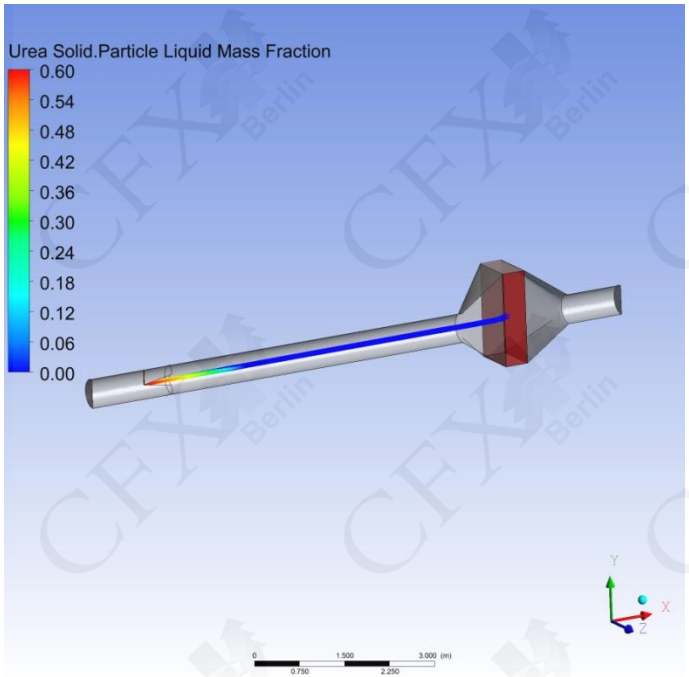
Drallbleche



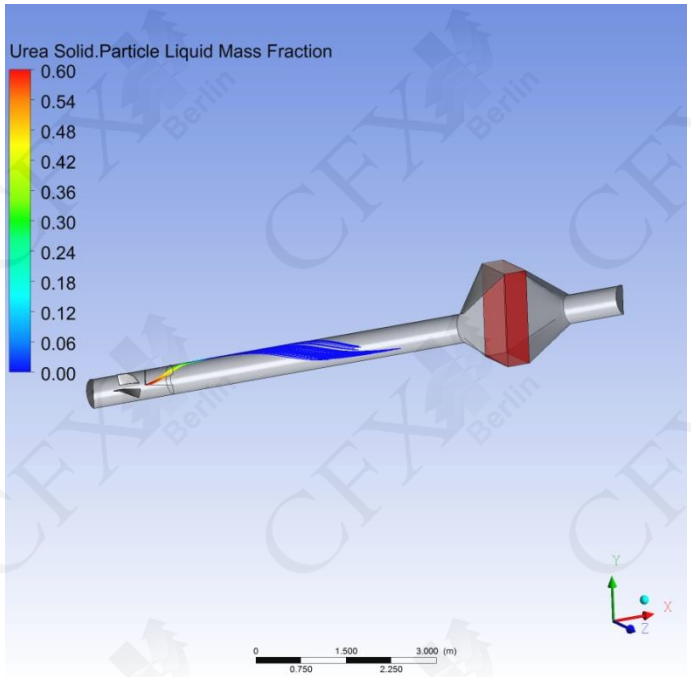
Wirbelplatte

Ergebnis
Partikelbahnen

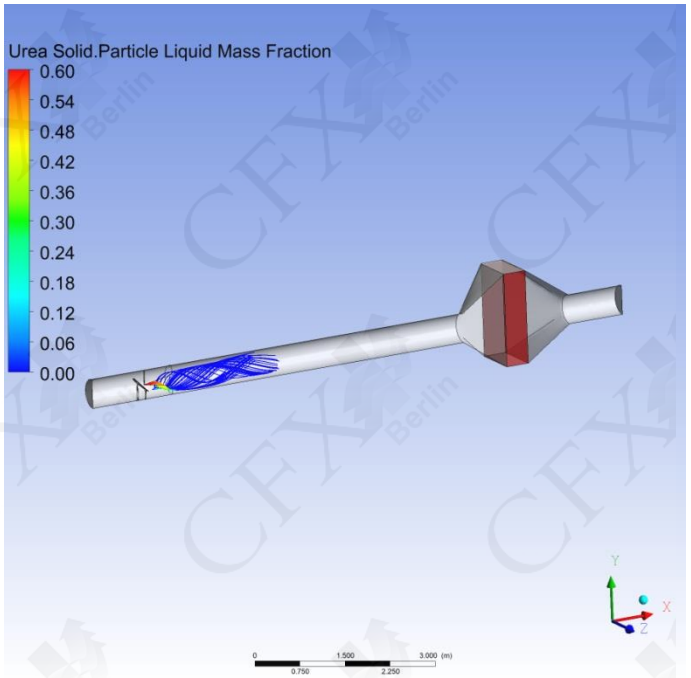
- Partikelbahnen gefärbt mit der Wassermassenfraktion
  - Nach einer kurzen Strecke ist der Wasseranteil der Partikel vollständig verdampft.



Ohne Mischelement



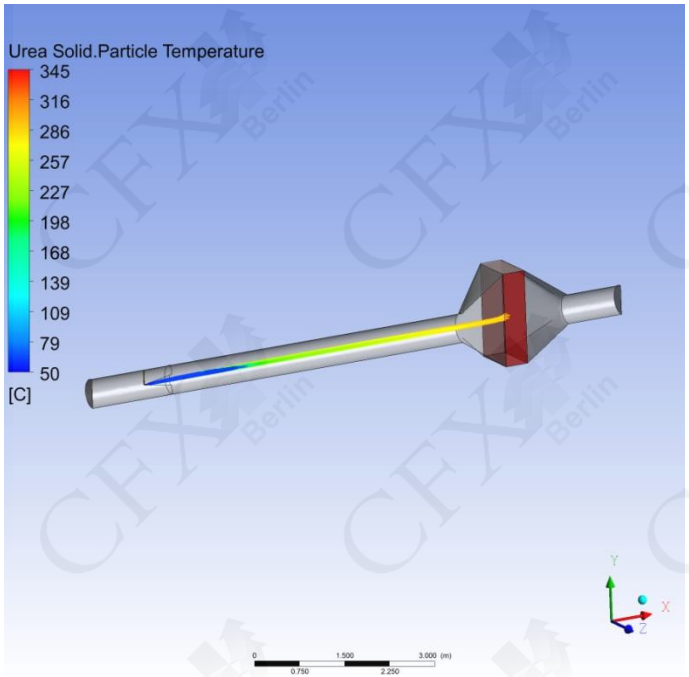
Drallbleche



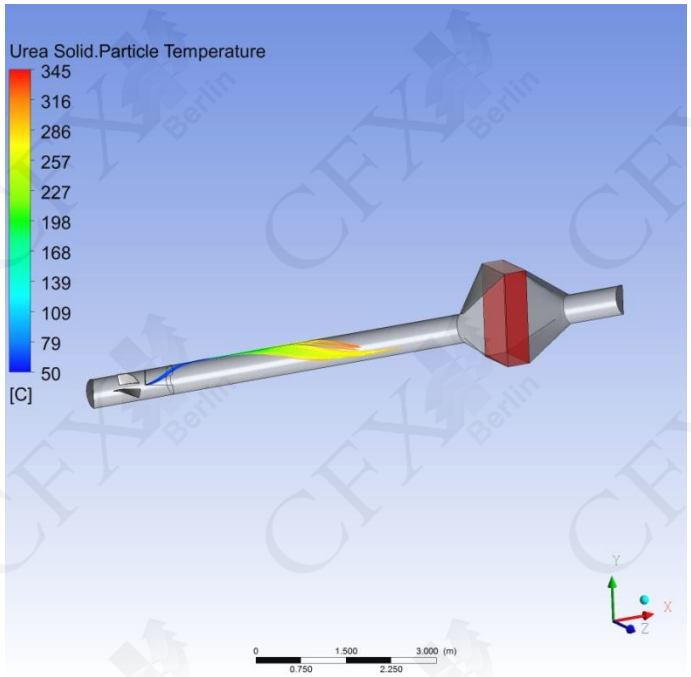
Wirbelplatte

Ergebnis
Partikelbahnen

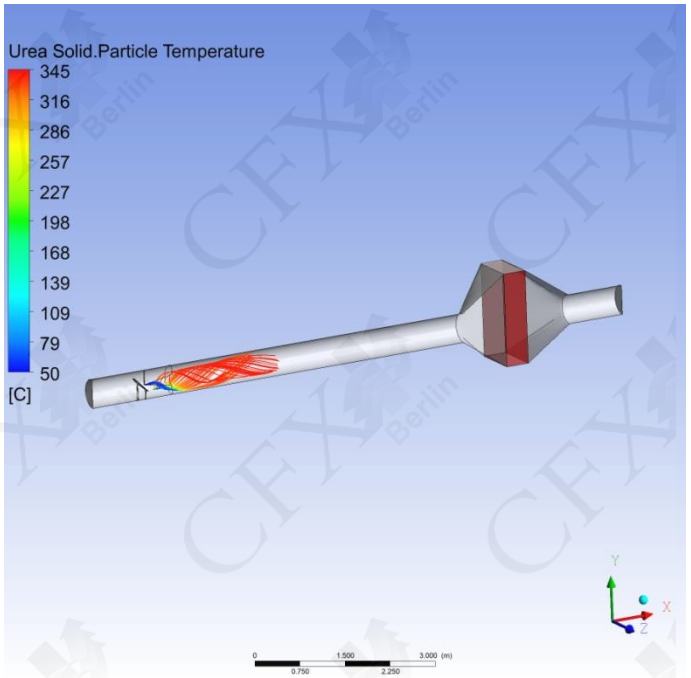
- Partikelbahnen gefärbt mit der Partikeltemperatur
  - Der Wasseranteil der Partikel verdampft schnell, und die Partikeltemperatur erhöht sich bis 345°C im Abgasstrang.



Ohne Mischelement



Drallbleche

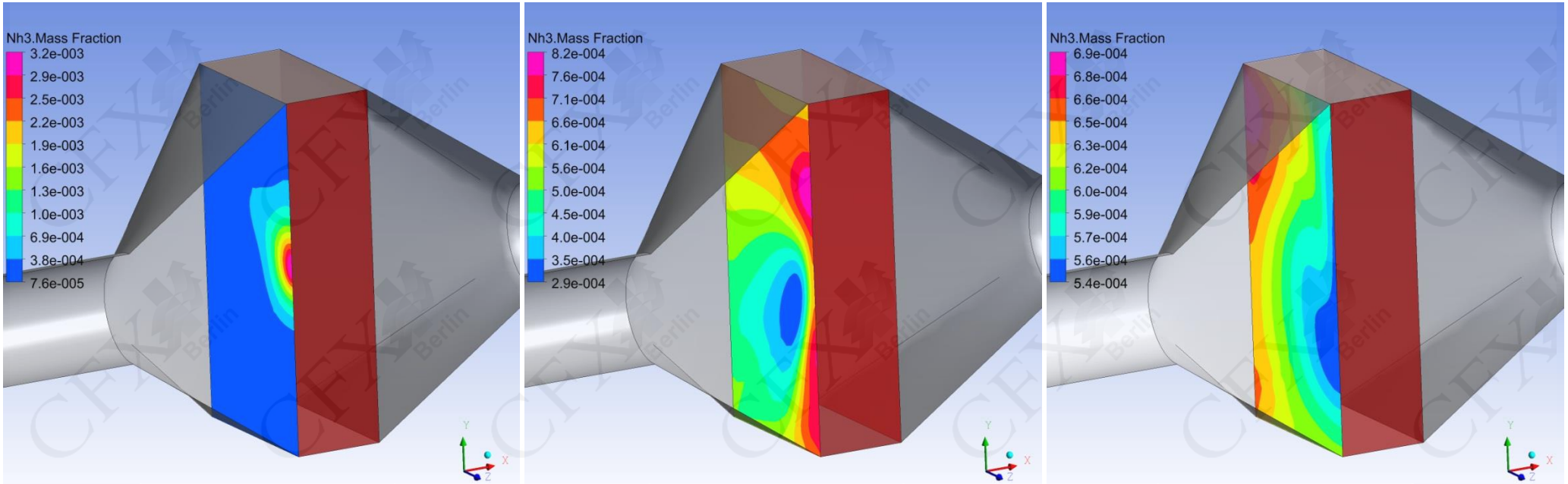


Wirbelplatte

Ergebnis
Massenfraktionsverteilungen

- Ammoniakverteilung an der Eintrittsfläche des Katalysators
  - Die Variante mit Wirbelplatte zeigt die beste Ergebnisse:
    - Höchster Mittelwert
    - Niedrigste Standardabweichung

Ohne Mischelement | **Drallbleche** | **Wirbelplatte**

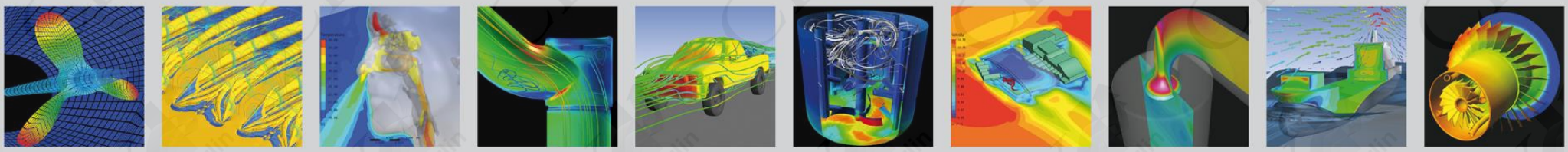


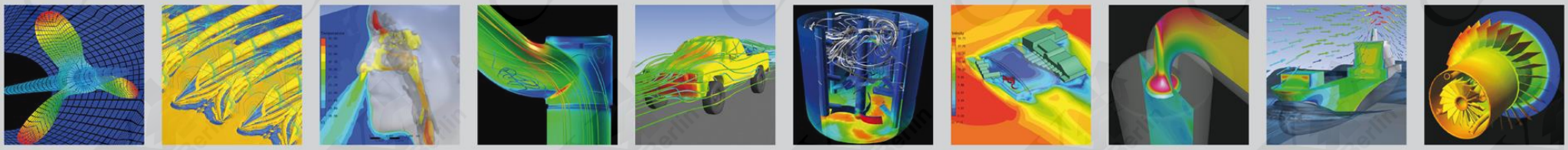
$5.15 \cdot 10^{-4}$	Mittelwert	$6.00 \cdot 10^{-4}$	Mittelwert	$6.00 \cdot 10^{-4}$
$6.23 \cdot 10^{-4}$	Standard-abweichung	$1.36 \cdot 10^{-4}$	Standard-abweichung	$0.38 \cdot 10^{-4}$

Zusammenfassung und Ausblick

- Verschiedene Aufbauvarianten einer Abgasanlage wurden mittels numerischer Berechnungen verglichen.
- Der Einbau von statischen Mischelementen ermöglicht eine schnellere Verdampfung und Entgasung der Harnstofflösungspartikeln. Außerdem sind die NH_3-Massenfraktionsverteilungen am Eintritt des Katalysators gleichmäßiger.
- Die SCR-Reaktion im Katalysator wurde hier nicht berücksichtigt. Eine entsprechende Erweiterung des Modells ist jedoch möglich.

CFX Berlin Software GmbH



ist kompetenter Partner für:

- ANSYS Simulationssoftware
- Berechnung & Optimierung
- Beratung & Schulung
- Forschung & Entwicklung