

Zeitschrift: Energieia : Newsletter des Bundesamtes für Energie

Herausgeber: Bundesamt für Energie

Band: - (2009)

Heft: 4

Artikel: 17 Jahre Arbeit und 16 Tage Rechenzeit um eine turbulente Flamme zu simulieren

Autor: [s.n.]

DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-640247>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

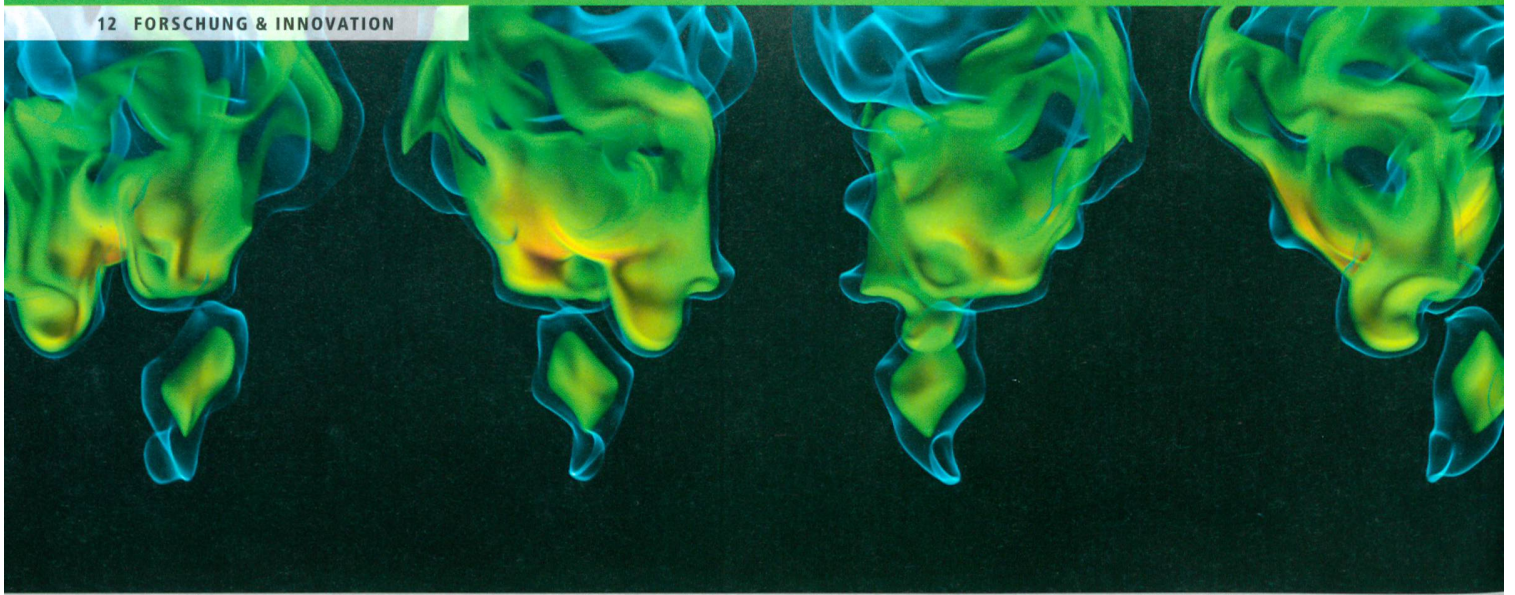
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 30.03.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>



17 Jahre Arbeit und 16 Tage Rechenzeit um eine turbulente Flamme zu simulieren

INTERNET

Energieforschung des Bundesamtes für Energie (BFE):
www.energieforschung.ch

Forschungsprogramm Verbrennung des Bundesamtes für Energie (BFE):
www.bfe.admin.ch/forschung/verbrennung

Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme an der ETH Zürich:
www.lav.ethz.ch

Energy Science Center, ETH Zürich:
www.esc.ethz.ch

Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory:
www.mcs.anl.gov

Bild: Volumendarstellung aus vier verschiedenen Perspektiven der Hydroperoxid-Konzentration (H_2O_2), ein chemischer Indikator für die Selbstzündung.

Den wenigsten ist bewusst, dass sich hinter einer simplen, einige Zentimeter hohen Flamme physikalisch-chemische Phänomene von erstaunlicher Komplexität verbergen. Nach 17 Jahren wissenschaftlicher Forschungsarbeit und fast 16 Tagen Rechenzeit auf einem der leistungsstärksten Rechner der Welt besteht für die Arbeitsgruppe von Professor Konstantinos Boulouchos an der ETH Zürich die Chance, Verbrennungsvorgänge in bisher ungeahnten Details zu untersuchen. Ein wichtiger Schritt, um künftig effizientere Verbrennungsanlagen für die Energieversorgung zu entwerfen.

Ende 2008 ist es einer Gruppe von Forschern des Laboratoriums für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme der ETH Zürich gelungen, die Selbstzündungsvorgänge einer turbulenten Wasserstofflamme, ohne Modellannahmen, also «direkt» numerisch zu simulieren. Die Simulation gibt das Verhalten einer Flamme von rund 50 Millimetern Höhe über einen Zeitraum von 11,5 Millisekunden exakt wieder. Für die Simulation waren 32 768 Prozessoren auf einem der grössten Supercomputer der Welt beinahe 16 Tage beschäftigt. Dies entspricht einer Rechenzeit von rund 1436 Jahren auf einem handelsüblichen Computer. Dabei entstanden 100 Terabyte Daten, eine Datenmenge, die einem CD-Stapel von etwa 170 Metern Höhe entspricht. Diese eingesetzten Ressourcen veranschaulichen auf eindrückliche Weise die Anstrengungen, welche auf dem Gebiet der Verbrennungsforschung getätigt werden und widerspiegeln die Bedeutung der Verbrennung in der Weltenergieversorgung.

Die Selbstzündung eines Kraftstoffes in einer turbulenten Strömung spielt eine zentrale Rolle in vielen Verbrennungsprozessen. Um die Potenziale zukünftiger Verbrennungstechnologien verstehen und beurteilen zu können, ist es von entscheidender Bedeutung, das Grundlagenwissen im Bereich der Selbstzündung zu erweitern. Insbesondere die komplexen Interaktionen von chemischen Reaktionen und der Turbulenz gilt

es zu verstehen. Allerdings sind solche Interaktionen äusserst schwer vorhersagbar.

Numerische Simulation: eine verlässliche Alternative

Im Bestreben, eine bestimmte Naturerscheinung zu begreifen, stützen sich Wissenschaftler im Allgemeinen auf Laborexperimente. Im Falle der Verbrennung erweisen sich derartige Versuche jedoch als sehr kompliziert und eingeschränkt, da eine grosse Anzahl von Variablen gemessen werden müssen: Konzentration und Geschwindigkeit der Reaktanten (Ausgangsstoffe), Druck, Temperatur oder die zahlreichen Reaktionsprodukte. Und dies mit einer hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung im Mikrometer- beziehungsweise Nanosekundenbereich. Die rasche Entwicklung von leistungsfähigen Supercomputern und effizienten Algorithmen in den letzten Jahrzehnten erlaubt Wissenschaftlern heute, komplexe Systeme zu analysieren, die bis vor kurzem auf Grund des enormen Rechenaufwands schlichtweg nicht durchführbar waren.

«Wir führen so genannte direkte numerische Simulationen durch», erläutert Professor Konstantinos Boulouchos, Leiter des Laboratoriums für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme (LAV) an der ETH Zürich. «Es handelt sich um ein Verfahren, das ein Herangehen an die Turbulenz ermöglicht, bei dem sämtliche potenziell vorhandenen Strukturen des Reaktionsab-

laufs explizit berechnet werden, das heisst ohne Einsatz von vereinfachenden Modellen.» Angesichts des besonders hohen Rechenaufwands war dieser Ansatz bisher auf kleine Systeme beschränkt, an denen lediglich ein akademisches Interesse bestand. «Im Gegensatz zu anderen Verfahren, bei denen ein Teil der Vorgänge durch vereinfachende Modelle beschrieben werden, ist die direkte numerische Simulation, kurz DNS, ein direkt auf die physikalisch-chemischen Zusammenhänge basierendes Verfahren», sagt Konstantinos. Die DNS liefere eine eindrucksvolle Menge an Daten, die sich auf experimentellem Weg zum Teil gar nicht erheben lassen würden.

«DIE DIREKTE NUMERISCHE SIMULATION LIEFERT EINE EINDRUCKSVOLLE MENGE AN DATEN, DIE SICH AUF EXPERIMENTELLEM WEG ZUM TEIL GAR NICHT ERHEBEN LASSEN.»

PROFESSOR KONSTANTINOS BOULOCHOS, LEITER DES LABORATORIUMS FÜR AEROTHERMOCHEMIE UND VERBRENNUNGSSYSTEME AN DER ETH ZÜRICH.

Bei der Rechenleistung hinkt die Schweiz nach

«Leicht war das nicht, wir haben lange gebraucht, bis wir so weit gekommen sind», sagt der in Zürich ansässige Forscher. «Unsere ersten Simulationen haben wir vor 17 Jahren mit Unterstützung des Bundesamts für Energie begonnen. Mit der damals zur Verfügung stehenden Hardware liessen sich keine grossen Berechnungen durchführen, nur eine kleine laminare Flamme. Schritt für Schritt sind wir dann zu komplexeren Systemen vorgedrungen und haben versucht, im kleinstmöglichen Massstab zu begreifen, was da eigentlich abläuft.» Mit Erfolg, denn bei der Ende 2008 durchgeführten Simulation der Selbstzündung in einer turbulenten Wasserstoffflamme handelt es sich um eine der grössten jemals durchgeführten direkten numerischen Simulationen. «Um das zu schaffen, haben wir ein numerisches Schema entwickelt, das die Erhaltungsgleichungen effizient und genau integriert.» Der hochskalierbare reaktive DNS-Code wurde entwickelt von Stefan Kerkemeier, Doktorand, und Dr. Christos Frouzakis, Leiter der Arbeitsgruppe Direkte numerische Simulation am LAV, in Zusammenarbeit mit Professor Ananias Tomboulides von der Universität Westmakedonien in Griechenland. Der Code basiert auf dem Strömungslöser NEK5000, entwickelt von Dr. Paul Fischer und seiner Gruppe am Argonne National Laboratory (ANL) in den USA. Die Rechenleistung war ein weiterer massgeblicher Faktor für den Erfolg dieser Simulation. Die Berechnungen erfolgten am ANL. Laut der Top 500 Ranglisten von November 2008 verfügt das ANL über den fünfthöchsten Supercomputer der Welt, einen IBM Blue Gene/P mit 163 840 Prozessoren. Dies gehe weit über die Möglichkeiten hinaus, die das Schweizer Zentrum für wissenschaftliches Rechnen (CSCS) in Manno, im Kanton Tessin, aufweise, sagt Frouzakis. «Bei den Supercom-

putern hinkt die Schweiz im Vergleich zu den grossen Zentren weit hinterher.»

Abschluss der Datenauswertung Anfang 2010

Die Simulation durchführen ist eine Sache, die 100 Terabyte Daten auswerten, eine ganz andere. Der Doktorand Stefan Kerkemeier hat bis zum Ende seiner Doktorarbeit im Frühling 2010 Zeit, um diese umfangreiche Aufgabe zu bewältigen. «Es ist nicht leicht, aus einer derart riesigen Datenmenge Schlüsse zu ziehen. Man muss intelligente Verfahren entwickeln, um schliesslich verständliche Visualisierungen zu erzeugen und

Korrelationen zwischen den verschiedenen Variablen herzustellen», erläutert der Kerkemeier. «Wir erhoffen uns in dieser Sache völlig neuartige Erkenntnisse, insbesondere hinsichtlich der Wechselwirkung verschiedener Komponenten während der Selbstzündung.» Allein zur Auswertung der gesammelten Daten haben die Forscher bei der ETH Zürich ein leistungsfähiges Datenauswertungssystem beantragt. Zuvor müssen sie allerdings warten, bis die numerischen Daten erfolgreich von Argonne nach Zürich übertragen worden sind, was zum Zeitpunkt des Gesprächs von Anfang Mai noch nicht abgeschlossen war. «Die Übertragung durch das Netz dauert einige Monate», sagt Kerkemeier.

Und wozu werden diese 100 Terabyte numerischer Daten nützlich sein, wenn sie erst einmal ausgewertet sind? «Weltweit sind nur einige wenige Forschungsgruppen in der Lage, Simulationen dieser Grössenordnung durchzuführen», erläutert Frouzakis. «Allerdings sind wir noch weit davon entfernt, das Verhalten einer ganzen Gasturbine im Detail simulieren zu können. Und wir möchten eigentlich nicht noch einmal 20 Jahre brauchen, um das zu schaffen. Dank der Ergebnisse verfügen wir nun über mehr Daten, als wir mit Experimenten je hätten sammeln können», sagte der Forscher. Diese Daten erlaubten nun, die Modelle, die heutzutage in der Industrie eingesetzt würden, zu überprüfen und zu verbessern, um grosse Verbrennungsanlagen zu simulieren. Professor Boulouchos möchte jedoch vor allem aufzeigen, wie wichtig und nützlich es sein kann, die Forschungsfinanzierung langfristig auszurichten: «Die entsprechende Vision der Programmleitung Verbrennung des Bundesamts für Energie in den 90er-Jahren erwies sich dabei als Schlüsselement, damit wir den heutigen Stand erreichen konnten», unterstreicht Boulouchos.

Verbrennungsforschung im BFE

Die Verbrennung ist nach wie vor der wichtigste Energieumwandlungsprozess für den Antrieb von Fahrzeugen und die Erzeugung von Strom und Wärme. Sowohl in der Schweiz (75 Prozent) wie auch weltweit (85 Prozent) wird weitaus der grösste Anteil am Gesamtenergieverbrauch durch die Verbrennung von fossilen Energieträgern wie Erdöl, Erdgas oder Kohle sowie von erneuerbaren Energieträgern wie Holz, Ethanol, Biogas oder Biodiesel abgedeckt.

Die Verbrennung von fossilen Energieträgern hat jedoch Nachteile: Wertvolle und endliche Rohstoffe werden verzehrt und CO₂-Emissionen entstehen. Hinzu kommen für Mensch und Natur schädliche Stoffe wie Feinstaub, NO_x oder CO. Die Verbesserung der Effizienz und die Reduktion der Schadstoffemissionen von Verbrennungssystemen haben deshalb hohe Priorität. Wichtig ist auch die zunehmende Nutzung von Biomasse für die Energieerzeugung.

International anerkannt

Die Schweizer Verbrennungsforschung ist international anerkannt und hat eine langjährige Tradition. Entwicklungszentren weltweit tätiger Unternehmen sind in der Schweiz domiziliert aber auch Motorenhersteller und zahlreiche Zulieferer der Verbrennungsindustrie tragen zu einem Umsatz von rund 2 Mrd. Franken bei. Der Bund setzt für die Verbrennungsforschung jährlich 11 Mio. Franken ein. Schwerpunkte der Verbrennungsforschung sind:

- **Verbesserte Forschungsmethoden und -instrumente:** Die Instrumente der Forschung wie physikalische Grundlagen, numerische Simulation, Messmethoden und Versuchsträger sind weiter zu entwickeln und an die neuen Anforderungen wie beispielsweise Biomasseverbrennung anzupassen.
- **Erhöhung des Systemwirkungsgrads:** Zur Reduktion des Brennstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen ist der Wirkungsgrad unter Einbezug des Gesamtsystems und der unterschiedlichen Lastzustände weiter zu erhöhen.
- **Reduktion der Schadstoffemissionen:** Die künftigen Emissionsvorschriften wie Euro 6 oder USA 2010/14 erfordern eine weitere Reduktion der Emissionen von Stickoxid, Kohlenwasserstoff, Kohlenmonoxid sowie von Russ und Feinstaub.
- **Nutzung verschiedener Energieträger:** Einerseits sind die Verbrennungssysteme für die Nutzung von biogenen Brennstoffen zu verbessern und andererseits ist die Zusammensetzung der Brennstoffe zur Reduktion der Schadstoffemissionen und zur Erhöhung des Wirkungsgrades anzupassen.

(bum)