

Dissertation ETH number : 18233

Invariant Manifolds and Lattice Boltzmann Method for Combustion

A dissertation submitted to

ETH Zurich

for the degree of

Doctor of Sciences (Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

Eliodoro Chiavazzo

Dipl.-Ing. University of Naples, Federico II

born 25th May 1978

citizen of Italy

accepted on the recommendation of

Prof. Dr.-Ing. Konstantinos B. Boulouchos, examiner

Dr. Iliya V. Karlin, co-examiner

Prof. Dr. Hans J. Herrmann, co-examiner

Zurich, 2009

Sommario

Negli ultimi decenni, è diventato di estrema importanza poter calcolare con affidabilità il processo di formazione degli inquinanti prodotti dalla combustione, a causa delle normative sempre più stringenti in materia. D'altra parte, oggi, le simulazioni numeriche rappresentano uno strumento indispensabile sia per investigazioni meramente scientifiche che per la pratica tecnica. Calcoli al computer che usino dati sperimentali risultano essere difatti un mezzo potente, di basso costo ed affidabile per studiare i processi di combustione.

Sfortunatamente, nella maggioranza dei casi, i calcoli di emissione di specie inquinanti in atmosfera richiedono uno studio dettagliato dei meccanismi di reazione chimica, che possono includere centinaia di specie. In tal caso, infatti, l'uso di schemi di reazione semplificati è del tutto inadeguato. Dato che ogni componente coinvolto comporta la risoluzione di un'equazione di trasporto aggiuntiva, ne consegue un costo della simulazione tremendamente alto, sia in termini di tempo di calcolo che di spazio di memoria.

Per questa ragione, nella letteratura scientifica si possono trovare diverse tecniche per la semplificazione di modelli dettagliati di combustione. A tal riguardo, le tecniche più note e datate sono certamente l'ipotesi di *stato stazionario* e l'approssimazione dell'*equilibrio parziale*. Tali metodologie, sebbene caratterizzate dal pregio della semplicità, presentano lo svantaggio di un'implementazione non ancora automatica. Di recente, pertanto, sono stati introdotti i metodi di *Intrinsic low Dimensional Manifolds* (ILDM) e *Computational Singular Perturbation* (CSP), al fine di automatizzare la procedura di riduzione dei modelli ed ottenere schemi semplificati più accurati, al costo però di un'implementazione molto articolata.

In questa tesi, il *Metodo delle Griglie Invarianti* (MIG) è elaborato per applicazioni nell'ambito della combustione: ne risulta un algoritmo automatico basato su due punti chiave. Il primo consiste nella rapida costruzione di una sommaria descrizione ridotta del meccanismo chimico. A tal fine, la procedura MIG può essere inizializzata ricorrendo al cosiddetto *manifold*

di quasi equilibrio (QEM), approfonditamente discusso nel corso di questo lavoro. In particolare, in questa tesi introduciamo la versione discreta del QEM fornendone altresì l'algoritmo di costruzione. Tale procedura è convalidata nel caso di meccanismi per l'ossidazione dell'idrogeno, nonché per generare un'approssimazione delle popolazioni di equilibrio nel caso del metodo entropico di lattice Boltzmann.

Il secondo punto chiave della costruzione di un meccanismo ridotto è ugualmente automatico, e consiste nell'affinare l'approssimazione iniziale (e.g. QEM) per iterazioni successive. Qui, vogliamo dimostrare che un modello ridotto accurato può essere ottenuto come punto di convergenza di uno dei seguenti processi: iterazioni di Newton per risolvere la *condizione di invarianza* trattata come un'equazione, oppure il rilassamento della cosiddetta *equazione di film*. Schemi numerici espliciti per l'implementazione di tali tecniche sono riportati e convalidati. Tuttavia, introduciamo anche una realizzazione implicita caratterizzata da una migliore stabilità, nonché dal pregio di illustrare più chiaramente il principio di funzionamento della equazione di film.

Risulta che la costruzione di QEM ed il conseguente affinamento offrono una procedura automatica molto semplice da implementare. Inoltre, sulla base di studi di confronto condotti su modelli semplici, possiamo concludere che le prestazioni del metodo delle griglie invarianti sono perfettamente in linea con quelli ottenuti dal CSP. Tutto ciò ad ulteriore conferma del perfetto accordo ottenuto confrontando le soluzioni dettagliate e ridotte, nel caso di meccanismi per la combustione dell'idrogeno.

Infine, il meccanismo ridotto è impiegato con successo in codici fluidodinamici, basati sul metodo di lattice Boltzmann, per simulare fiamme laminari mono- e bidimensionali attraverso miscele omogenee. Il metodo di lattice Boltzmann (LB) costituisce un approccio nuovo nell'ambito delle simulazioni di fluidodinamica numerica. Studi recenti hanno dimostrato che esso è perfettamente competitivo se confrontato a metodi più tradizionali anche nel caso di flussi compressibili e turbolenti (sia in termini di accuratezza che efficienza di calcolo). D'altro canto, sebbene ciò renda LB una valida alternativa per la simulazione di flussi reattivi, le applicazioni in questo campo sono ancora limitate dal grande numero di variabili da risolvere e dalla rigidità delle equazioni. In tal senso, tale ultimo studio vuole rappresentare un passo avanti per il metodo di lattice Boltzmann ed è pertanto fra i principali contributi di questa tesi.

Abstract

In the past decades, due to the emergence of stricter environmental regulations, the ability of predicting pollutant formation during combustion processes became of paramount importance. On the other hand, nowadays, numerical simulations of reactive flows represent an indispensable tool in several fields for scientists and designers. Indeed, associated with available experimental data, a numerical simulation proves to be a reliable, cheap and powerful way to study combustion.

Unfortunately, in order to describe pollutant emission, a detailed reaction mechanism with hundreds chemical species has to be considered, whereas a simpler few-step reaction often reveals unsuitable. The prediction of each species involves the solution of one additional transport equation increasing dramatically the computational cost (in terms of calculation time and memory space).

Therefore, several techniques for reducing complex reaction mechanisms have been proposed in the numerical combustion community. The oldest and most known techniques in this respect are certainly the *quasi steady state assumption* and the *partial equilibrium approximation* which present, on one hand the valuable aspect of simplicity, but on the other the drawback to be still hand-powered analytical procedures. Hence, more recently the methods of *Intrinsic Low Dimensional Manifolds* (ILDM) and *Computational Singular Perturbations* (CSP) were introduced in order to automate the process of reduction and provide more accurate simplified mechanisms, yet at the cost of a significant more complicated implementation.

In the present thesis, the *Method of Invariant Grids* (MIG) is elaborated for combustion applications with the aim of automating the model reduction procedure, and its realization follows two key steps. First of all, an initial rough reduced description of the complex chemical mechanism is constructed with no special effort. In this respect, the notion of *quasi equilibrium manifold* (QEM) for initializing the MIG procedure is investigated in great detail. More specifically, here the concept of discrete analog

of QEM is introduced, and a fully automated constructive algorithm is worked out. Validations in the case of hydrogen oxidation mechanisms, and for computing approximate equilibrium populations for the entropic lattice Boltzmann method are presented.

The second key step, for constructing a reduced description of a complex reaction mechanism, is also automated and can be achieved by refinements of the initial approximation. In this work, we demonstrate that the accurate reduced model is obtained as the stable fixed point of one of the following processes: Newton-like iterations for solving the *invariance condition* regarded as an equations, or relaxation due to a *film equation* of dynamics. Explicit numerical schemes for those techniques are discussed and tested. However, an implicit realization, with augmented stability properties, is here introduced, too.

As a matter of fact, constructing a QEM and refining it by means of relaxation methods proves to be an automated procedure with an embarrassingly simple implementation. Furthermore, comparative studies conducted on a simple benchmark model prove that the suggested methodology delivers consistent results with CSP, and it exhibits similar convergence properties. This is in accordance with the excellent agreement between detailed and reduced solutions, in the case of a realistic mechanism for hydrogen combustion.

Lately, the reduced model of the hydrogen mechanism is successfully employed in a lattice Boltzmann code for simulating a 1D propagating flame and 2D laminar counter-flow flames throughout a homogeneous mixture. The lattice Boltzmann (LB) method is a relatively novel approach to numerical flow simulations, and recent studies have proved that it is highly competitive to traditional methods when simulating compressible and turbulent flows (in terms of accuracy and efficiency). Although this makes LB a good candidate for computing reactive flows, applications in this field are still limited by the stiffness of the governing equations and the large amount of fields to solve. In this sense, the latter study intends to be a step ahead for the LB method and a major contribution of this thesis.