Schlussbericht

55119

Einsatz der rechnergestützten Simulation für die turbulente Verbrennung in der industriellen Produkteentwicklung (CRFD)

Autor und Koautoren	Yuri M. Wright, Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos
beauftragte Institution	ETH Zürich – Institut für Energietechnik – Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme (LAV)
Adresse	Clausiusstrasse 33, CLT F4, ETH Zentrum CH-8092, Zürich
Telefon, Email, Internetadresse	+41 (1) 6324616, wright@lav.mavt.ethz.ch, http://www.lav.ethz.ch
BEW Referenz-Nummer	55119
Dauer des Projekts (von – bis)	1. Oktober 1995 – 31. Dezember 1998

ZUSAMMENFASSUNG

Ein neues Verbrennungsmodell, welches auf dem Conditional Moment Closure (CMC) Ansatz basiert, wurde mit der kommerziellen 3D-Strömungssimulations-Software STAR-CD© verknüpft. CMC gehört – wie die bekannten Flamelet models – zur Klasse der sogenannten ‚presumed PDF approaches', welche in der Lage sind, die Chemie-Turbulenz-Interaktion zu modellieren und darüber hinaus die Verwendung von detaillierten chemischen Reaktionsmechanismen ermöglichen. CMC verwendet überdies eine mathematisch sehr solide abgestützte Formulierung.

Um das Potential des implementierten Modells auszuloten, sind für einen experimentell gut dokumentierten, generischen Versuchsträger bei verschiedenen Anfangsbedingungen Simulationen von N-Heptan Sprays durchgeführt worden. Die simulierten Zündverzüge für verschiede Temperaturen, mit und ohne Turbulenz, liegen sehr nahe bei den Messungen. Die erwarteten Unterschiede in den räumlichen Verteilungen von Temperatur und Spezies bei unterschiedlichen Anfangsbedingungen lassen sich plausibel erklären. Diese wichtigen und notwendigen Voruntersuchungen haben ergeben, dass sich der gewählte Ansatz zur Simulation von dieselmotorischen Sprays prinzipiell sehr gut eignet; verschiedene noch verbleibende Modellunsicherheiten im CMC Code konnten identifiziert werden.

Basierend auf diesen ermutigenden Ergebnissen und den in den Voruntersuchung gewonnenen Erkenntnissen wurde im Rahmen einer fruchtbaren Zusammenarbeit mit Wärtsilä Ltd. Schweiz ein KTI-Projekt initiiert. Gegenstand der weiterführenden Arbeiten ist die Verbesserung der Voraussagefähigkeit des Verbrennungsmodells bei der Simulation unter grossdieselmotorischen Bedingungen. Dabei steht insbesondere auch die Optimierung der Einsatzfähigkeit der Software im Motoren-Entwicklungsprozesses im Vordergrund.

BFE OFEN UFE SFOE

Einleitung/Motivation

Aktuell kommerziell erhältliche Software zur dreidimensionalen Simulation von reaktiven Strömungen (CRFD), weist zahlreiche Unzulänglichkeiten auf, vor allem was die Voraussage der Wärmefreisetzung bei der Simulation von verbrennenden Sprays bei motorischen Bedingungen betrifft.

Im Speziellen ist die Beschreibung der chemischen Prozesse bei den zur Zeit verfügbaren Codes nicht befriedigend. Aus diesem Grund wird am Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme der ETH Zürich (LAV) ein Verbrennungsmodell mit dem kommerziellen Code STAR-CD [1] verknüpft. Dadurch entsteht eine Symbiose zwischen einer ausgereiften, in Bezug auf Netzstruktur sehr flexiblen und bereits parallelisierten Software zur Lösung des Strömungsfeldes und einem neuartigen Verbrennungsmodellierungs-Ansatz, mit dem Ziel, wesentliche bessere Voraussagen für die Wärmefreisetzung bei der motorischen Verbrennung machen zu können.

Verbrennungsmodell

Bei der Simulation von reaktiven Strömungen muss – nebst den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls- und Energie – für jede Spezie eine Erhaltungsgleichung gelöst werden. Die Spezies nehmen an den bei der Verbrennung zahlreichen ablaufenden Reaktionen teil und werden hierbei gebildet oder aufgebraucht, was sich in den Erhaltungsgleichungen der Spezies in einem chemischen Quellterm äussert.

Turbulente Strömungen, wie sie in Motoren auftreten, weisen kleinste Wirbel auf, und können mit den derzeitig verfügbaren Computern nicht modellfrei simuliert werden. Bei der motorischen Simulation sind deshalb sogenannte Reynolds-Mittelungs-Ansätze (RANS) gebräuchlich, welche die fluktuierenden Grössen in einen Mittelwert und eine Fluktuation aufteilen. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden anschliessend für diese Mittelwerte gelöst. Diese Methodik, d.h. Mittelwerte ebenfalls bei der Lösung der Spezies-Erhaltungsgleichungen zu verwenden, versagt bei den chemischen Quelltermen aufgrund der starken nichtlinearen Abhängigkeit der Reaktionsraten von der Temperatur und den Spezieskonzentrationen. Dies hat zur Folge, dass dieser Ansatz nur eingesetzt werden könnte, wenn zahlreiche Terme höherer Ordnung ebenfalls berücksichtigt würden; diese bedürften aber wiederum einer Modellierung – mathematisch gesprochen entsteht ein sogenanntes ‚closure problem'. Deshalb werden diverse Wege beschritten, den chemischen Quellterm alternativ zu modellieren, bzw. die Spezieskonzentrationen bei der turbulenten Verbrennung zu bestimmen.

Ein vergleichsweise neues Modell ist das auf Conditional Moment Closure (CMC) beruhende Modell. CMC ist aufgrund seiner rigoros hergeleiteten Gleichungen mathematisch solide abgestützt und in der Lage, der Problematik der Turbulenz-Chemie-Interaktion zu begegnen. Eine detaillierte Übersicht der CMC-Methodik kann in [2, 3] aufgefunden werden.

CONDITIONAL MOMENT CLOSURE COMBUSTION CODE

Der Übersichtlichkeit halber wird zuerst eine schematische Darstellung der Verknüpfung des CMC solvers mit dem STAR-CD Code dargestellt.

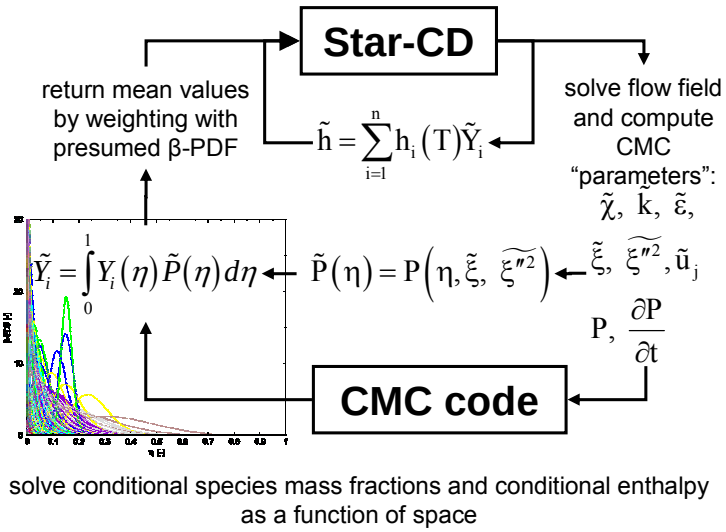


ABBILDUNG 1 – SCHEMATISCHE DARSTELLUNG DER KOPPLUNG STAR-CD / CMC

In Abbildung 1 wird die Funktionsweise des gekoppelten STAR-CD/CMC Ansatzes ersichtlich: Die im Strömungsfeld berechneten Turbulenzkenngrössen beeinflussen als Parameter die im CMC Code berechneten chemischen Prozesse, deren Resultate wiederum an STAR-CD zurückgegeben werden und dort Einfluss auf das Strömungsfeld nehmen. In den nachfolgenden Abschnitten werden die Formulierung sowie einige Details zur Implementierung beleuchtet.

Formulierung

Bei den sogenannten ‚presumed Probability Density Function (PDF) combustion models' für Diffusionsflammen sind die Spezies-Konzentrationen alle Funktionen eines sogenannten ‚conserved scalars', des Mischungsbruches; dieser beschreibt den Zustand der Mischung des Brennstoffes mit der Luft. Dies hat zur Folge, dass mit STAR-CD anstelle der Erhaltungsgleichungen aller Spezies nur zwei Erhaltungsgleichungen gelöst werden müssen: Eine für den Mischungsbruch und eine für dessen Varianz, die folgende Form annehmen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\xi} - \left(\bar{\rho}D_{\tilde{\xi}} + \frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{\xi},t}}\right)\frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j}\right] = \dot{S} \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{\xi''^2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\bar{\rho}\tilde{u}_j\widetilde{\xi''^2} - \left(\bar{\rho}D_{\widetilde{\xi''^2}} + \frac{\mu_t}{Sc_{\widetilde{\xi''^2},t}}\right)\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_j}\right] = \frac{2\mu_t}{Sc_{\widetilde{\xi''^2},t}}\left(\frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j}\right)^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi} \tag{1.2}$$

Die beiden Parameter (Mischungsbruch und Varianz) definieren die Form der ‚presumed PDF', die benötigt wird, um die im CMC Code berechneten Werte an den STAR-CD Code zurückzugeben. Die Erhaltungsgleichungen von Mischungsbruch und Varianz

weisen keinen chemischen Quellterm auf, und die bei den Spezies-Erhaltungsgleichungen auftretenden, oben beschriebenen Probleme, sind nicht von Belang. Nichtsdestotrotz weist die Erhaltungsgleichung des Mischungsbruchs einen Quellterm auf, welcher durch die Interaktion mit der flüssigen Phase Rechnung zustande kommt. Die in (1.2) dargestellte und vorerst verwendete Formulierung der Erhaltungsgleichung für die Varianz des Mischungsbruches weist keinen solchen Quellterm auf. Es existieren verschiedene Ansätze [4, 5, 6, 7] in dieser Gleichung ebenfalls die Interaktion mit der flüssigen Phase zu berücksichtigen; Untersuchungen diesbezüglich sind Gegenstand der weiterführenden Arbeiten.

Die skalare Dissipationsrate χ in (1.2) wird folgendermassen modelliert

$$\tilde{\chi} = C_D \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{\xi''^2} \tag{1.3}$$

wobei für c_χ=2.0 eingesetzt wird. μ_t and $Sc_{i,t}$ bezeichnen die turbulente Viskosität und turbulente Schmidt Zahl der Spezies (0.9).

Ausgehend von den Erhaltungsgleichungen der Spezies und Enthalpie

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla Y_i - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \dot{\omega}_i \tag{1.4}$$

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla h = \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_P} \nabla h \right) - \sum_{i=1}^{n} h_i \nabla \cdot \left[\left(\frac{\lambda}{c_P} - \rho D_i \right) \nabla Y_i \right] + q_R \tag{1.5}$$

folgen wir dem ‚decomposition approach' von Bilger in [2]:

$$Y\left(\underline{x}, t, \eta\right) = Q\left(\xi\left(\underline{x}, t\right), \underline{x}, t\right) + y'\left(\underline{x}, t\right) \tag{1.6}$$

wobei der Ausdruck

$$Q = \left\langle Y\left(\underline{x}, t, \eta\right) \middle| \eta = \xi \right\rangle \tag{1.7}$$

ein sogenanntes ‚conditional average' darstellt, also einen Erwartungswert, unter der Bedingung, dass die rechtsseitige Gleichheit erfüllt ist. Nachfolgend wird die folgende Kurzschreibweise für die ‚conditional averages' von Spezies und Temperatur verwendet:

$$Q_\alpha = \left\langle Y_\alpha \middle| \eta = \xi \right\rangle \tag{1.8}$$

$$Q_T = \left\langle T \middle| \eta = \xi \right\rangle \tag{1.9}$$

Unter der Annahme des ‚high Reynolds number limits' und den daraus resultierenden Vereinfachungen [3] führt dies zu den folgenden CMC Gleichungen für Spezies und Enthalpie (letztere in ‚Temperatur-Schreibweise'):

$$\frac{\partial Q_\alpha}{\partial t} + \left\langle u_j \middle| \eta \right\rangle \frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_j} = \left\langle N \middle| \eta \right\rangle \frac{\partial^2 Q_\alpha}{\partial \eta^2} + \left\langle w_\alpha \middle| \eta \right\rangle - \frac{1}{\overline{\rho}\tilde{P}(\eta)} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left\langle u_j'' y_\alpha'' \middle| \eta \right\rangle \overline{\rho} \tilde{P}(\eta) \right] \tag{1.10}$$

$$\frac{\partial Q_T}{\partial t}+\langle u_j|\eta\rangle\frac{\partial Q_T}{\partial x_j}=\langle N|\eta\rangle\frac{\partial^2 Q_T}{\partial \eta^2}+\langle N|\eta\rangle\left[\frac{1}{\langle c_P|\eta\rangle}\left(\frac{\partial\langle c_P|\eta\rangle}{\partial\eta}+\sum_{\alpha=1}^{N}c_{P,\alpha}\frac{\partial Q_\alpha}{\partial\eta}\right)\right]\frac{\partial Q_\alpha}{\partial\eta}$$
$$+\frac{\langle w_H|\eta\rangle}{\langle\rho|\eta\rangle\langle c_P|\eta\rangle}+\frac{1}{\langle c_P|\eta\rangle}\left\langle\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial t}\middle|\eta\right\rangle-\frac{\langle\dot{h}_{drop}|\eta\rangle}{\langle\rho|\eta\rangle\langle c_P|\eta\rangle}-\frac{1}{\bar{\rho}\tilde{P}(\eta)}\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\langle u_j''T''|\eta\rangle\,\bar{\rho}\tilde{P}(\eta)\right] \tag{1.11}$$

Die darin enthaltenen Werte der ‚conditional properties',

$$\begin{aligned}\langle c_P|\eta\rangle&=\sum_{\alpha=1}^{N}c_{P,\alpha}Q_\alpha\\ \langle\rho|\eta\rangle&=\frac{PMW_\eta}{RQ_T}\\ \left\langle\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial t}\middle|\eta\right\rangle&=\frac{1}{\langle\rho|\eta\rangle}\frac{\partial P}{\partial t}\end{aligned} \tag{1.12}$$

sowie

$$\begin{aligned}\langle u_j''y_\alpha''|\eta\rangle&=-D_t\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x_j}\\ \langle u_j''T''|\eta\rangle&=-D_t\frac{\partial Q_T}{\partial x_j}\\ \langle u_j|\eta\rangle&=\tilde{u}_j-\frac{D_t}{\widetilde{\xi''^2}}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_j}\left(\eta-\tilde{\xi}\right)\end{aligned} \tag{1.13}$$

und die CMC Quellterme

$$\begin{aligned}\langle w_\alpha|\eta\rangle&=\dot{\omega}_\alpha\left(Q_\alpha,Q_T,P\right)\\ \langle w_H|\eta\rangle&=-\sum_{\alpha=1}^{N}h_\alpha\langle w_\alpha|\eta\rangle\end{aligned} \tag{1.14}$$

werden nach [8] modelliert. Die chemischen Reaktionsraten

$$\dot{\omega}_\alpha\left(Q_\alpha,Q_T,P\right) \tag{1.15}$$

werden mittels eines reduzierten Mechanismus von Bikas [9], der auf dem Mechanism von Hewson [10] basiert berechnet; die chemische ‚closure' ist erster Ordnung. Der Mechanismus weist insgesamt 59 Spezies auf, davon sind 31 ‚non steady-state'.

Die turbulente Diffusivität kann aus den Strömungsfeldgrössen berechnet werden als:

$$D_t=\frac{\mu_t}{Sc_t} \tag{1.16}$$

Eine überaus wichtige Grösse ist die skalare Dissipationsrate. Sie wird in CMC derzeit mittels dem sogenannten Amplitude Mapping Closure (AMC) modelliert:

$$\begin{aligned} \langle N|\eta\rangle &= N_0 G(\eta) \\ G(\eta) &= \exp\left(-2\left[erf^{-1}(2\eta-1)\right]^2\right) \\ N_0 &= \frac{\tilde{\chi}}{2\int_0^1 G(\eta)\tilde{P}(\eta)\,d\eta} \end{aligned} \tag{1.17}$$

wobei $\tilde{\chi}$ die favre-gemittelte skalare Dissipationsrate (1.3) aus dem Strömungsfeld bezeichnet.

Eine Untersuchung des Einflusses weiterer möglicher Modellierungsvarianten der skalaren Dissipationsrate [7, 11], ist vorgesehen.

Der zeitliche Druckgradient and die mittlere Tropfenverdampfungsenthalpie sind aus dem Strömungsfeld verfügbar in jedem Zeitschritt. Die Modellierung der ‚droplet evaporation conditional enthalpy' in ‚conserved scalar space' steht derzeit noch aus. Ausgehend von den einleitend erwähnten Interaktionstermen der flüssigen Phase in den Erhaltungsgleichungen des Mischungsbruches und der Varianz [4, 5, 6, 7] sind Untersuchungen zu verschiedenen Modellierungs-Ansätzen vorgesehen.

Die zeitliche Integration des Differentialgleichungssystems, welches nach der Diskretisierung der Gleichungen vorliegt, erfolgt mittels des Pakets VODPK [12, 13, 14], welches sich speziell für steife Systeme eignet.

Implementierung

STAR-CD ermöglicht es, in einer sogenannten ‚user subroutine' (posdat.f) die für den CMC Code benötigten Grössen aus dem gesamten Strömungsfeld zu berechnen. In posdat.f werden anschliessend die CMC Code subroutinen aufgerufen, welche die ‚unconditional species mass fractions' berechnen. Die ‚mean species mass fractions', welche STAR-CD benötigt, um damit weiterzurechnen, werden durch Integration über die eingangs erwähnte ‚presumed PDF' ermittelt:

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 Y_i(\eta)\tilde{P}(\eta)\,d\eta \tag{1.18}$$

Zur Anwendung gelangt eine ‚beta function', die folgendermassen definiert ist:

$$\tilde{P}(\eta) = \frac{\eta^{r-1}(1-\eta)^{s-1}}{I_b} \tag{1.19}$$

wobei

$$I_b = \int_0^1 \eta^{r-1}(1-\eta)^{s-1}\,d\eta = \frac{\Gamma(r)\Gamma(s)}{\Gamma(r+s)} \tag{1.20}$$

und $\Gamma(x)$ die Gamma Funktion bezeichnet. Die Parameter s und r

$$r = \tilde{\xi}\left(\frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\widetilde{\xi''^2}} - 1\right), \qquad s = (1-\tilde{\xi})\left(\frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\widetilde{\xi''^2}} - 1\right) \tag{1.21}$$

sind Funktionen des Mischungsbruches und der Varianz. Da diese Funktionen des Strömungsfeldes sind, ist die PDF sowohl eine starke Funktion des physikalischen Raums, als auch eine Funktion des ‚conserved scalar space'.

Die Rückgabe der ‚mean species mass fractions' an STAR-CD erfolgt in scalfn.f, damit müssen keine Transportgleichungen für die Spezies gelöst werden, der Transfer von posdat.f nach scalfn.f erfolgt via ‚COMMON BLOCK'.

STAR-CD löst die Enthalpie-Erhaltungsgleichung für die Totale Enthalpie und verwendet Polynom-fits für die c_p der Spezies. Die Temperatur wird anschliessend iterativ bestimmt aus:

$$\tilde{h} = \sum_{i=1}^{n} h_i(T)\tilde{Y}_i \tag{1.22}$$

Ist die Temperatur bekannt, kann mit den bekannten Molekulargewichten aller Spezies die Dichte mittels der idealen Gasgleichung berechnet werden.

Spraymodell

Obwohl nicht Gegenstand der Verbrennungsmodellierung, hat die Zwei-Phasen-Strömung als vorgelagerter Prozess einen wesentlichen Einfluss auf den Ablauf der Wärmefreisetzung. Zu den Merkmalen der höchst komplexen Vorgänge bei Sprays gehören der Aufbruch der flüssigen Phase in Tropfen, der sogenannte ‚secondary break-up' der bei der ‚Atomisierung' generierten Tropfen durch Interaktion mit der Gasphase, Kollision der Tropfen untereinander sowie Impuls-, Energie- und Massentransfer zwischen den beiden Phasen.

STAR-CD verwendet den in der Simulation von Sprays üblichen Langrange-Euler-Ansatz zur Beschreibung der Zwei-Phasen-Strömung [15]: Aufgrund der hohen Anzahl von Tropfen kann eine stochastische Beschreibung der sogenannten ‚droplet parcels', welche eine Vielzahl von Tropfen mit gleichen Eigenschaften repräsentieren, in einer Langrange-Formulierung eingesetzt werden. Dabei werden die oben beschriebenen Vorgänge, die auf parcel-Ebene vor sich gehen und mittels Simulation nicht aufgelöst werden können, mittels probabilistischer Verfahren berechnet. Der Interaktion mit Gasphase wird durch Quellterme in den Erhaltungsgleichungen der Gasphase Rechnung getragen.

Im Rahmen von extensiven, systematischen Simulationen von Diesel Sprays mit STAR-CD und der Validierung mit vorhandenen experimentellen Daten am LAV [16] hat sich herausgestellt, dass sich bei sorgfältiger Abstimmung der Netzauflösung sowie der Spraymodell-Parameter mit STAR-CD sehr gute Resultate erzielen lassen. Die bei den Untersuchungen gefundenen Erkenntnisse in Bezug auf räumliche Netzauflösungen erscheinen bei grossen Dieselmotoren vorderhand nicht realisierbar. Aufgrund der Möglichkeit, mit STAR-CD parallelisiert zu rechnen und mit lokalen Netzverfeinerungen arbeiten zu können, sollten die gewonnenen Erkenntnisse und Erfahrungen gleichwohl wirksam genutzt werden können.

Untersuchungen an einem generischen Versuchsträger

Beim verwendeten Versuchsträger handelt es sich um eine optisch zugängliche Konstantvolumengeometrie, die auf hohe Temperaturen vorgeheizt und mit Drücken, welche dieselmotorischen Bedingungen nahekommen, beaufschlagt werden kann. Es handelt sich um ein offenes System, die Geschwindigkeit der Hintergrund-Spülluft ist 0.1 m/s. Die experimentellen Daten und der Versuchsaufbau sind in [17] dokumentiert; Abbildung 2 zeigt schematisch den Aufbau des Versuchsträgers.

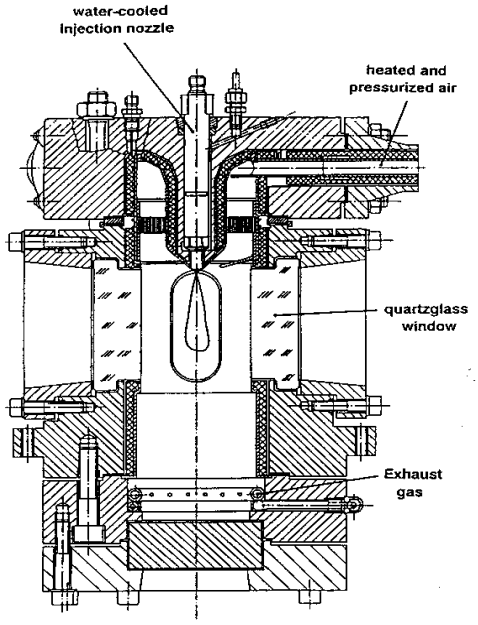


ABBILDUNG 2 – EXPERIMENTELLER VERSUCHSAUFBAU

In einem ersten Schritt wird der Standardfall der N-Heptan-Sprayinjektion mittels gekoppeltem STAR-CD/CMC-Code simuliert.

VERWENDETES NETZ

Es wird ein Netz verwendet mit polarer Struktur, das in azimutaler Richtung nur eine Zelle besitzt (quasi-Zweidimensional). In der axialen und radialen Richtung wurden verschiedene Auflösungen getestet und eine Sensitivitätsanalyse der Spraypenetration durchgeführt.

SIMULATIONS-MODELLPARAMETER

Als Turbulenzmodell gelangt das in [15] dokumentierte k-ε RNG Modell zum Einsatz mit Standardmodellkonstanten. Zur Beschreibung der Atomisierung und des ‚secondary break-up' der flüssigen Phase wird das Reitz-Diwakar Modell eingesetzt, ebenfalls mit ‚default' Modellkonstanten. Die thermo-physikalischen Eigenschaften der Tropfen (Dichte, Viskosität, Oberflächenspannung, Verdampfungsenthalpie, Dampfdruck, spez. Enthalpie) werden in einer ‚user subroutine' in Funktion der Temperatur berechnet [18]. Ausführungen zu den Modellen zu Energie-, Masse- und Impuls-Transfer sowie Tropfen-Kollision und –Sieden sind ebenfalls in [15] vorzufinden.

SIMULATIONS-ANFANGS- UND RANDBEDINGUNGEN

N-Heptan wird bei 300 K als Spray in die optisch zugängliche Kammer mit Luft bei 50 bar und 823 K eingespritzt. Die Einspritzrate wird durch das in Abbildung 3 dargestellte Rechteckprofil approximiert, die total eingespritzte Masse ist 6 mg. Die Einspritzdauer beträgt 1.4 ms, der Düsendurchmesser ist 0.2 mm und das Verhältnis von Durchmesser zu Bohrungslänge ist 4. Die berechneten Einspritzgeschwindigkeiten sind ca. 200 m/s. Als Winkel für das Spraymodell wurden 10 Grad verwendet, die ‚parcel injection rate' beträgt 2.0E+07 parcels pro Sekunde; die Integrationsschrittweite ist 1.0E-06 s.

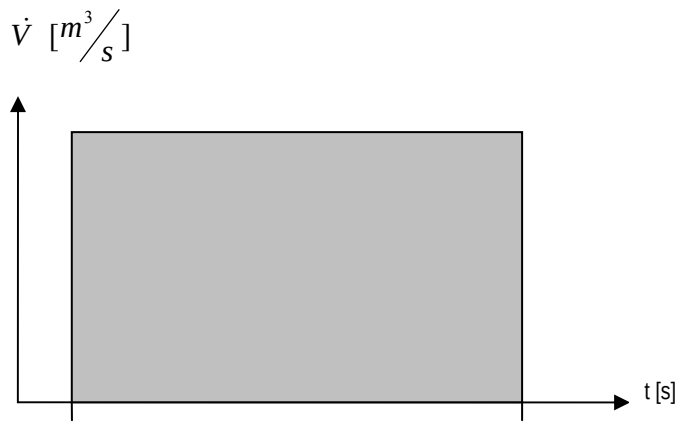


ABBILDUNG 3 – APPROXIMIERTES EINSPRITZPROFIL

Als numerische Randbedingungen sind an der ‚inflow boundary' konstante Geschwindigkeit und ‚species mass fractions' vorgegeben. An der ‚outflow boundary' werden ‚zero gradients' für ‚species mass fractions' und die Turbulenzkenngrössen vorgeschrieben sowie der Druck vorgeben. In der azimutalen Richtung werden ‚cyclic boundaries' verwendet.

SENSITIVITÄTSANALYSE DES NETZES

Die experimentellen Daten für die Spraypenetration sind für 800 K bei einem Druck von 50 bar, alle übrigen Daten wie oben beschrieben. Bei diesen Bedingungen ist der in [17] dokumentierte Zündverzug von N-Heptan ca. 1.6 ms, sodass nicht-reaktive Sprays simuliert werden können, um eine Sensitivität der Penetration auf die Netzauflösung zu untersuchen. Es sind drei Netze zum Einsatz gelangt: Axial 60 Zellen (90 mm Ausdehnung), in radialer Richtung weist das niedrig aufgelöste Netz 40 Zellen auf (auf 40 mm) auf. Die Auflösung des inneren Spraybereichs ist für das mittlere Netz um einen Faktor 1.5, für das hoch aufgelöste Netz um einen Faktor 2 erhöht worden.

In Abbildung 4 ist die Gegenüberstellung der berechneten Penetrationen mit den experimentellen Daten aus [17] dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, wie für Euler-Langrange-Formulierungen typisch, eine leichte Abhängigkeit von der Netzauflösung.

Die Übereinstimmung der Simulation ist insbesondere für das mittel aufgelöste Netz sehr zufriedenstellend. Die leichte Überschätzung der Penetration ganz zu Beginn der Einspritzung könnte von der Simplifizierung des Einspritzprofils herrühren. Auf der Basis

dieser, auch in parallelen Untersuchungen [16] bestätigten guten Übereinstimmung mit experimentellen Daten wurde auf eine weitergehende Validierung verzichtet.

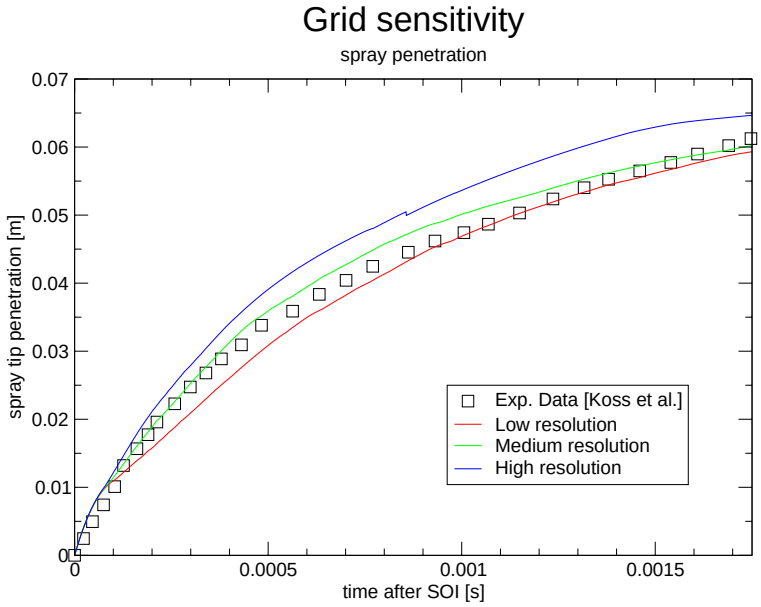


ABBILDUNG 4 – NETZ-SENSITIVITÄTS-ANALYSE: SPRAY-PENETRATION

ZÜNDVERZÜGE

Der Standardfall mit 823 K Lufttemperatur wurde mit einer ruhenden und einer turbulenten Hintergrundströmung simuliert. Im Experiment wird die Turbulenz erzeugt, indem eine gelochte Platte schnell in axialer Richtung durch den Brennraum bewegt wird. Bevor die Einspritzung erfolgt, wird anschliessend zugewartet, bis die mittlere axiale Geschwindigkeit abgeklungen ist und nur noch die Fluktuationen vorhanden sind.

Die simulierten und gemessenen Zündverzüge sind in Tabelle 1 dargestellt. Bei der Simulation ist der Zündverzug den zeitlichen Druckgradienten, welche in STAR-CD berechnet werden, entnommen worden. Der Trend zu einer Verkürzung des Zündverzuges bei turbulenter Hintergrundströmung wird durch die Simulation korrekt erfasst. Absolut wird für den nichtturbulenten Fall der Zündverzug hervorragend wiedergegeben, im turbulenten Fall wird der Zündverzug leicht überschätzt und liegt ganz knapp ausserhalb des oberen Endes der experimentellen Daten.

	Simulation [ms]	Experiment [ms]		
		Min.	Mittel	Max.
Nichtturbulent	1.35	1.2348	1.355	1.5044
Turbulent	1.28	1.1212	1.1905	1.2771

TABELLE 1 – VERGLEICH ZÜNDVERZÜGE TURBULENT/NICHTTURBULENT

RÄUMLICHE VERTEILUNGEN

In den folgenden beiden Abschnitten sind die Verteilungen des Mischungsbruches, der Temperatur und – repräsentativ für ein Radikal – die ‚OH mass fraction' dargestellt, jeweils 1.25 ms und 1.5 ms nach Einspritzbeginn. Beim Vergleich fällt auf, dass der turbulente Fall einen wesentlich kürzeren, breiteren Spray zur Folge hat.

Der Übersichtlichkeit halber wurden die Tropfen nur den Verteilungen des Mischungsbruches überlagert.

Nichtturbulenter Fall

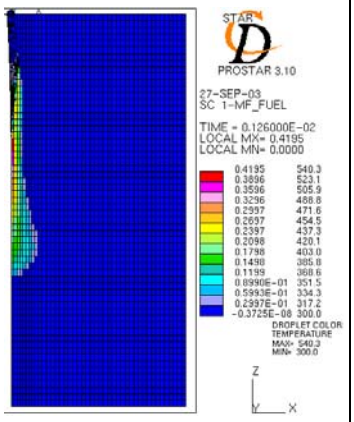
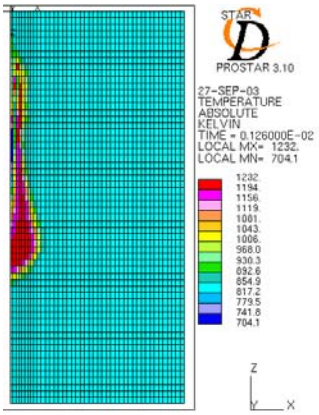
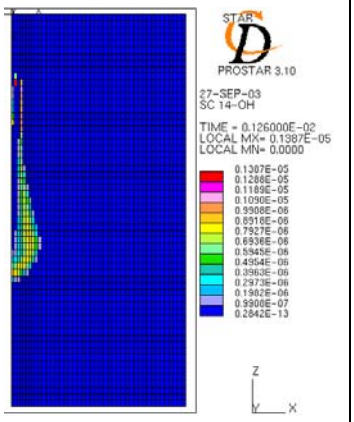
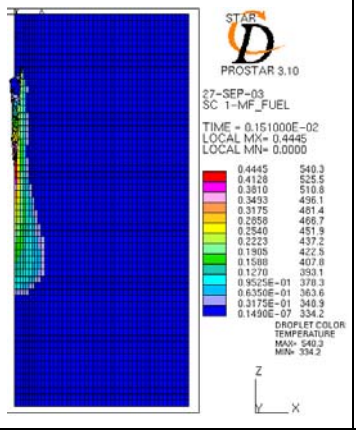
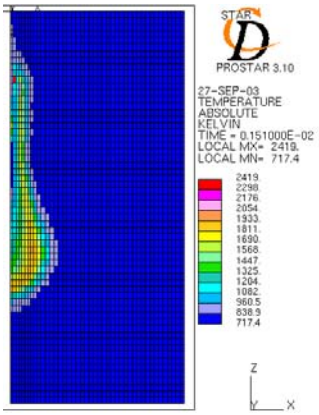
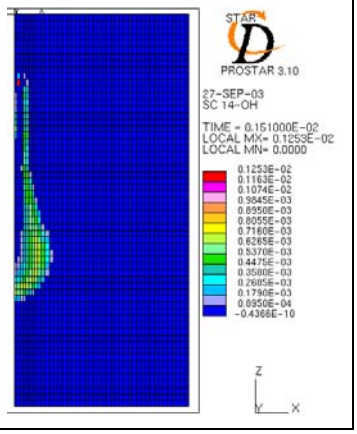
Time after SOI [ms]	Mixture Fraction [-]	Temperature [K]	OH mass fraction [-]
1.25			
1.50			

ABBILDUNG 5 – RÄUMLICHE VERTEILUNGEN, NICHTTURBULENTER FALL

Turbulenter Fall

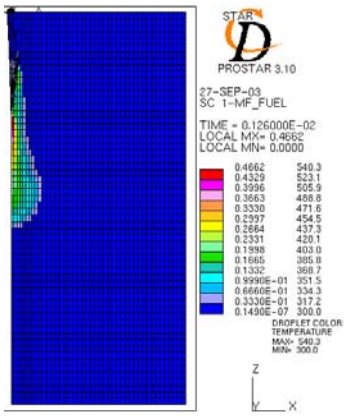
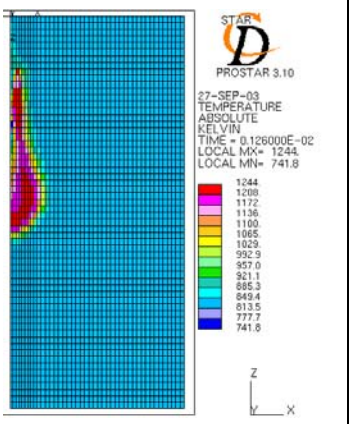
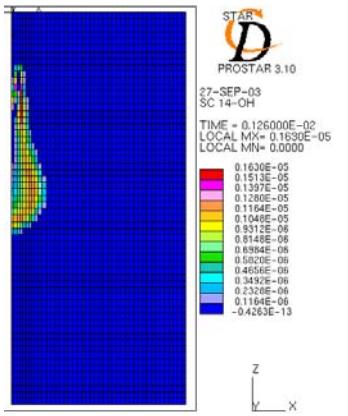
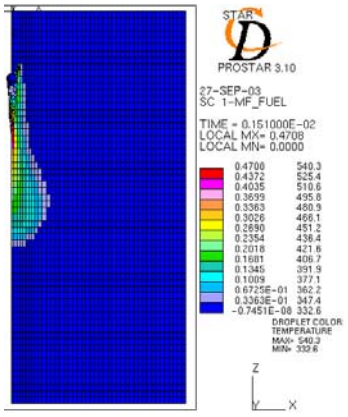
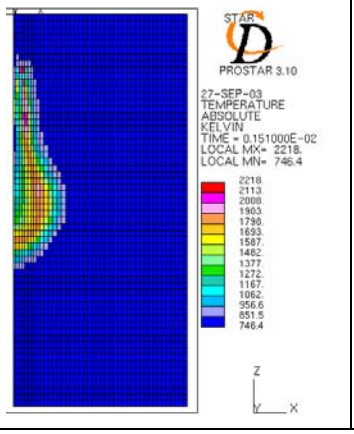
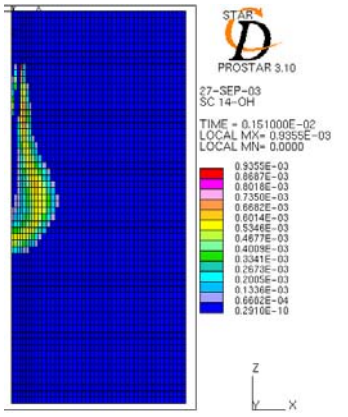
Time after SOI [ms]	Mixture Fraction [-]	Temperature [K]	OH mass fraction [-]
1.25			
1.50			

ABBILDUNG 6– RÄUMLICHE VERTEILUNGEN, TUBULENTER FALL

References

[1] Computational Dynamics, STAR-CD Thermofluid analysis software
[2] Bilger, R. W., Physics of Fluids, 1993, „Conditional moment closure for turbulent reacting flows"
[3] Klimenko, A.Y. and Bilger, R.W., Progress in Energy and Combustion Science 25, 1999: „Conditional moment closure for turbulent combustion"
[4] Hollmann, C. and Gutheil, E., Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, 1997, pp. 1731-1738
[5] Reveillon, J. and Vervish, L., Combustion and Flame 121: 75-90, 2000, „Spray Vaporization in Nonpremixed Turbulent Combustion Modeling: A Single Droplet Model"
[6] Miller, R. S. and Bellan, J., Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion, 1998, pp. 1065-1072
[7] Colin, O. and Benkenida, A., Combustion and Flame 134: 207-227, 2003, „A new scalar fluctuation model to predict mixing in evaporating two-phase flows"
[8] Mastorakos, E. M., 2001: „ Autoignition of Hydrogen in a duct"
[9] Bikas, G., PhD Thesis, University of Aachen, 2001: „Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon ignition"
[10] Hewson, J. C., PhD Thesis, University of San Diego, 1997: „Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames"
[11] Girimaji, S. S., Phys. Fluids A 4, 2529, 2002
[12] Brown, P. N., Byrne, G. D., and Hindmarsh, A. C., „VODE, A Variable-Coefficient ODE Solver", SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10 (1989), pp., 1038-1051. Also LLNL report UCRL-98412, June 1988.
[13] Brown, P. N. and Hindmarsh, A. C., „Reduced Storage Matrix Methods in Stiff ODE Systems", J. Appl. Math. & Comp., 31 (1989), pp.40-91. Also LLNL report UCRL-95088, Rev. 1, June 1987.
[14] Byrne, G. D., „Pragmatic Experiments with Krylov Methods in the Stiff ODE Setting", Computational Ordinary Differential Equations, J. Cash and I. Gladwell, eds., Oxford Univ. Press, Oxford, 1992,pp. 323-356.
[15] STAR-CD Methodology Guide version 3.15A, 2002
[16] Barroso, G., Schneider, B. and Boulouchos, K., SAE Paper 2003-01-3230
[17] Koss, H. J., Brüggemann, D., Wiartalla, A., Bäcker, H., Breuer, A., Final Report of JOULE Project on Integrated Diesel European Action (IDEA), 1992: „Investigations of the Influence of Turbulence and Type of Fuel on the Evaporation and Mixture Formation in Fuel Sprays"
[18] STAR-CD communications: Source 1: NSRDS - AICHE: Data Compilation Tables of Properties of Pure Compounds, Design Institute for Physical Property Data, American Institute of Chemical Engineers, 345 East 47th Street, New York, New York 10017, National Standard Reference Data System: American Institute of Chemical Engineers, T.E. Daubert - R.P. Danner, Department of Chemical Engineering, The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802; Source 2: National Bureau of Standards; Source 3: API (American Petroleum Institute)