

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN	2. Berichtsart Schlussbericht
3a. Titel des Berichts <i>Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Selbstzündung technischer Brennstoffsprays unter Berücksichtigung thermoakustischer Effekte</i>	
3b. Titel der Publikation	
4a. Autoren des Berichts (Name, Vorname(n)) Prof. Dr.-Ing. Hans Rath, ZARM, Universität Bremen Dipl.-Ing. Christian Eigenbrod, ZARM, Universität Bremen	5. Abschlussdatum des Vorhabens April 2007
	6. Veröffentlichungsdatum
4b. Autoren der Publikation (Name, Vorname(n))	7. Form der Publikation
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Zentrum für angewandte Raumfahrttechnologie und Mikrogravitation, ZARM Universität Bremen Prof. Dr.-Ing. Hans Rath Universität Bremen Bibliothekstraße 28359 Bremen	9. Ber.Nr. Durchführende Institution
	10. Förderkennzeichen 50 WM 0444
	11a. Seitenzahl Bericht 36
	11b. Seitenzahl Publikation
13. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) 53107 Bonn Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, DLR	12. Literaturangaben 0
	14. Tabellen 0
	15. Abbildungen 24
16. Zusätzliche Angaben	
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)	
18. Kurzfassung Das Projekt untersucht experimentell die Wirkung akustischer Felder auf das Selbstzündverhalten einzelner n-Heptan Tropfen. Hierzu wurde eine Apparatur entwickelt und gebaut, die Untersuchungen der Selbstzündung in heißer Hochdruckumgebung bei zusätzlicher Wirkung akustischer Felder im Frequenzbereich $1 < f < 50$ Hz erlaubt. Die niedrigen Frequenzen wurden gewählt, um Ähnlichkeit zu technischen Prozessen herzustellen. In technischen Prozessen liegen die hochfrequenten Verbrennungsinstabilitäten in der Dimension von [kHz]. Die Zündverzugszeit technischer Tropfen liegt in der Dimension [ms]. Simulationen zur Zündung der homogenen Gasphase haben gezeigt, dass die Wirkung akustischer Felder dann am größten ist, wenn die Frequenz umgekehrt proportional zur ungestörten Zündverzugszeit ist, wenn die ungestörte Zündverzugszeit also genau eine akustische Periode erfährt. Dabei spielt die Phasenlage ebenfalls eine Rolle. Da die hier untersuchten Tropfen von der Dimension [mm] sind und ihre Zündverzugszeit von der Dimension [s] ist, entspricht die wirkungsvollste Frequenz der Dimension [Hz]. Derartige Frequenzen lassen sich mit realistisch hohen Schalldrücken nur in einem hydraulischen Ersatzsystem bestehend aus einem zylindrischen Brennraum mit bewegten Kolben erzeugen. Das Ergebnis zeigt, dass die Wirkung der Akustik eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielt und diese nicht nur bei den hochfrequenten Instabilitäten, sondern überraschenderweise auch bei den niedrigfrequenten Instabilitäten berücksichtigt werden müssen. Außerdem wurde ein Konzept für die numerische Simulation der Spray-Selbstzündung entwickelt und bis zum Schritt der Anpassung der Tropfengröße auf technische Dimensionen entwickelt und validiert.	
19. Schlagwörter LFD, HFD, Tropfenzündung, Sprayzündung	
20. Verlag	21. Preis

Inhalt

1 Einleitung.....	3
2 Entwicklung der experimentellen Apparatur	7
3 Ergebnisse.....	12
3.1 Experimentergebnisse.....	12
3.2 Analytisches Modell der Tropfen- und Sprayzündung im akustischen Feld	20
3.3 Konzept zur numerischen Simulation der Tropfenzündung bei variierenden Randbedingungen (SPRAYLET-Code)	24
3.4 Entwicklung der Schnittstellen zwischen CFD- und SPRAYLET-Code	31
3.5 CFD Modellierung der Einspritzkonfiguration der HWK-Experimente	33
3.6 Simulation der Sprayzündung und Vergleich mit HWK-Experimenten	33

1 Einleitung

Der Selbstzündprozess von Tropfen und Sprays in heißer Hochdruckumgebung kann durch Diskontinuitäten in der Druck- und Temperaturumgebung essentiell beeinflusst werden. Von großer technischer Bedeutung, sind **akustische Felder** in denen Temperatur und Druck sich periodisch ändern. Angeregt durch die Verbrennung können Eigenfrequenzen des Verbrennungsraumes und angrenzender Volumina in Resonanz geraten. Dabei stellt die Flamme gleichzeitig die Störungsquelle-, wie auch deren Verstärker dar. Üblicherweise ist die Periodendauer dabei lang, in Zeitskalen oberhalb der Zündverzugszeit, bis hinunter zu Dauern, die in der gleichen Größenordnung wie die Zündverzugszeit liegen. Dieses Phänomen wird bei der Gasturbinen-Verbrennung als Low- und High Frequency Dynamics (LFD und HFD) bezeichnet und ist mit einem großen Gefahren- und Zerstörungspotenzial verbunden. Diese thermoakustischen Prozesse werden in vielen Programmen und Projekten untersucht. Zumindest in Deutschland stellen sie derzeit wohl das Hauptarbeitsgebiet der Verbrennungsforschung und angrenzender Bereiche dar. Dabei ist der Mechanismus der LFD [100 Hz] grundsätzlich verstanden. Er lässt sich durch die geometrischen Dimensionen der betroffenen Anlagen, sowie durch die Flammenleistungen und Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten, also die Zeit bestimmenden Größen, herleiten.

Dabei führt eine zunächst zufällige, lokale Störung zu einer Änderung der lokalen Wärmefreisetzung und damit zu einer lokalen Druckänderung. Diese Druckänderung breitet sich mit Schallgeschwindigkeit durch die Brennkammer aus und wirkt auf den Brenner zurück. Im Brenner ist die Wirkung auf den Luftmassenstrom und den Brennstoffmassenstrom aufgrund unterschiedlicher Druckverluste der Eindüsen verschieden und es kommt zu einer Änderung des Brennstoff-/ Luftverhältnisses. Dies wiederum bewirkt eine Änderung der Wärmefreisetzung und damit der thermischen Expansion, also wiederum eine Druckänderung. Entsprechend der möglichen akustischen Moden einer Brennkammer, der Leistung der Störung und der Empfindlichkeit des Systems kann es zu einem resonanten Einschwingen dieser Störung kommen. Das System ist dabei umso empfindlicher, je näher das Brennstoff-/ Luftverhältnis an der mageren Zündgrenze liegt.

Die akustische Grundmode entspricht einer longitudinalen Schwingung mit Ausbreitung der Druckwellen in vorzugsweise axialer Richtung. Derartige

Schwingungen werden von Can-type-Brennkammern unterstützt, bei denen die einzelnen Brenner eigene Brennkammern besitzen und so zwischen den Brennern eine relativ starke akustische Bedämpfung realisiert ist. Demgegenüber ist es leicht nachvollziehbar, dass eine abweichende momentane z.B. zunehmende thermische Expansion vor einem Brenner einer Ringbrennkammer ohne Trennung zwischen den Brennern zu einem umgekehrten Effekt bei den Nachbarbrennern führen kann. Dieser Anfangszustand befördert die Ausbildung einer Schwingungsmode in Umfangsrichtung, bei der die Brenner zu einer phasenversetzten Einkoppelung in die Störung angeregt werden.

In jedem Fall verschiebt eine akustische Schwingung die Flammenlage periodisch innerhalb des Mischungsfeldes des Vormischbrenners. Die Bewegung der Flamme auf den Brenner zu verschiebt die Flamme in die Zone geringeren Vormischgrades, die Bewegung vom Brenner weg verschiebt die Flamme in einen Bereich der homogeneren Vormischung. Neben einem damit verbundenen selbstverstärkenden Effekt der Störung aufgrund unterschiedlicher Flammentemperaturen schon bei unverändertem overall-Mischungsverhältnis aber variierender lokaler Mischungsbrüche bedeutet eine axiale Verschiebung der Flamme im Mischungsfeld auch eine Änderung der Zündverzugszeiten. In den Vorläuferprojekten DROP-COS und DROP-COS B wurde nachgewiesen, dass für dispergierte Flüssigbrennstoffsysteme gilt, dass die Zündverzugszeit homogener vorverdampfter Mischungen länger ist, als die heterogener Systeme gleichen overall-Mischungsverhältnisses. D.h. ein Tropfen zündet in heißer Luft früher als das entsprechende einphasige homogene Vorgemisch. Insofern existiert eine Tendenz der Flamme, sich stromauf in das Gebiet geringeren Vormischgrades zu verlagern. Dieser Effekt wird verstärkt durch die Tatsache, dass ebenfalls die laminare Flammenausbreitungsgeschwindigkeit im heterogenen System höher ist, als im homogenen System gleichen overall-Mischungsverhältnisses. In einem Brenner-Brennkammersystem wird dieser Effekt dadurch ausgeglichen, dass die Strömungsgeschwindigkeiten stromauf, in Richtung Brenner, ebenfalls zunehmen und einem Flammenrückschlag damit aerodynamische Grenzen gesetzt sind. Jedenfalls wird hierdurch die diesem Projekt zugrunde liegende Hypothese gestützt, dass es nicht nur eine Wechselwirkung zwischen lokalem Mischungsbruch und laminarer Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gibt, sondern dass auch die

Wirkung veränderlichen lokalen Mischungsbruches auf die Zündverzugszeit Berücksichtigung finden muss.

Gegenüber den, die LFD antreibenden Mechanismen wenig verstanden sind bisher die Mechanismen der HFD [kHz], deren Auftreten mit steigenden Verdichtungsverhältnissen wahrscheinlicher zu werden scheint und die weit gefährlicher sind, da sie praktisch ohne Vorwarnung mit hohen Leistungen einsetzen. Mit den Zeitskalen der mageren Verbrennung und den damit verbundenen niedrigen laminaren Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten und der trägen Reaktion der Verbrennung lassen sie sich bisher nicht in Einklang bringen.

Grundlegende Untersuchungen zum Einfluss von Schallfeldern hoher Leistung auf den Selbstzündprozess von Tropfen und Sprays sind den Antragstellern nicht bekannt. Theoretische Überlegungen des Partners F. Fachini (INPE, Brasilien) und eigene numerische Simulationen an homogenen Vorgemischen haben gezeigt, dass speziell der Übergang von den Vorreaktionen der kalten Verbrennung zur heißen Zündung durch zusätzliche Schalleistungen begünstigt werden kann (Abb. 1).

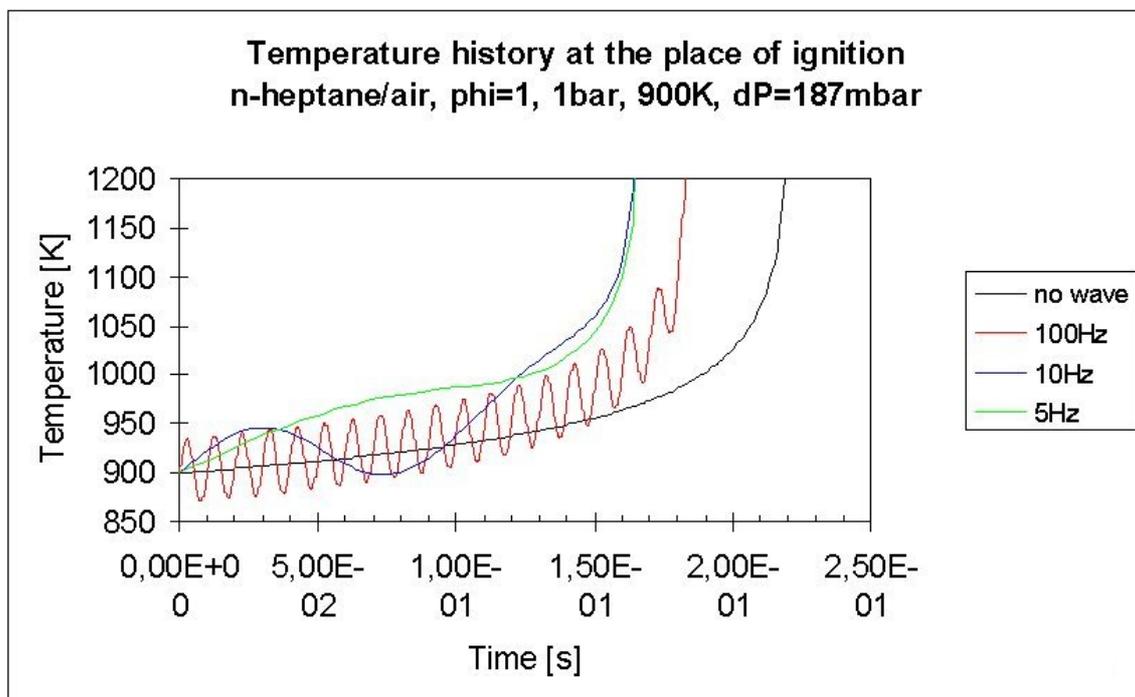


Abb. 1: Simulation der Zündung eines homogenen stöchiometrischen n-Heptan / Luft Gemisches bei einem Schalldruck von 187 mbar. (12-Schritt-Mechanismus)

Es zeigt sich, dass der Einfluss am größten ist, wenn die Frequenz gerade dem Kehrwert der ungestörten Zündverzugszeit entspricht, wenn also das Gemisch (der Tropfen) genau eine Periode während seiner Zündverzugszeit durchläuft. Bei höheren Frequenzen wird ein Teil der Wirkung dadurch kompensiert, dass die zusätzlich eingebrachte Energie durch die nachfolgende Dekompression dem System wieder entzogen wird.

Aus grundlegendem Interesse, und weil die Zündverzugszeiten technischer Sprays durchaus im Bereich der HFD liegen [ms] wurde die, im Vorläuferprojektes DROP-COS entwickelte, Apparatur zur Bestimmung der Zündverzugszeiten einzelner Brennstofftropfen derart modifiziert, dass die Untersuchung des Einflusses von Schallwellen auf die Zündverzugszeit möglich wurden.

Da die Tropfenanfangsdurchmesser aus experimentellen Gründen in der Dimension [1 mm] liegen und die Zündverzugszeiten entsprechend lang sind, ist die Darstellung eines echten Stehwellenfeldes mit einer Frequenz entsprechend der Zündverzugszeit nicht möglich (Wellenlänge [100 m]). Aus diesem Grunde wurde ein "hydraulisches" Ersatzsystem entwickelt, welches die Wirkung eines entsprechend niederfrequenten Schallfeldes auf den Tropfen simuliert. Hierbei wird die eigentliche beheizte zylindrische Brennkammer, die sich innerhalb eines Druckbehälters befindet, durch zwei Kolben abgeschlossen. Über Stößelstangen und schrittmotorgetriebene Exzenter werden diese Kolben oszillierend angetrieben. Unter der gegebenen Voraussetzung, dass der Tropfen klein im Verhältnis zur Wellenlänge ist, und damit die Kompression und Dekompression als gleichmäßig von allen Seiten erfährt, kann das System bei gegenläufiger Bewegung der Kolben die Situation eines Tropfens im Druckbauch (Geschwindigkeitsknoten) und bei paralleler Bewegung der Kolben die Situation im Druckknoten (Geschwindigkeitsbauch) darstellen. Die Überlagerung beider Bewegungen (gegenläufig mit Phasenversatz) erlaubt die Simulation jeder Position des Tropfens relativ zur stehenden Schallwelle, ohne den suspendierten Tropfen bewegen zu müssen. Ein ähnliches Prinzip wird zur Kalibrierung von Mikrofonen zur Messung von Detonationswellen angewendet, bei denen realistische Schalldrücke anders nicht erzeugt werden können (außer durch Detonationen selbst). Die Abb. 2 zeigt den Apparat für den Einsatz unter

Mikrogravitationsbedingungen und die Abb. 3 zeigt die Experimentzelle mit den zunächst entwickelten Kolben.

Mit Hilfe des Schrittmotorantriebes und der verstellbaren Exzenter lassen sich Hübe entsprechend Schalldrücken bis zu 20% des Umgebungsdruckes bei Frequenzen bis 50Hz und bei beliebigen Phasenwinkeln einstellen.



Abb. 2: Druckbehälter mit Brennkammer oben und Tropfenerzeugung und Lift unten



Abb. 3: Brennkammer und Kolben ohne Isolierung

2 Entwicklung der experimentellen Apparatur

Besondere Schwierigkeiten bereitete die Realisierung des Brennkammersystems mit verschiebbaren Kolbenabschlüssen. Aufgrund der hohen Wandtemperaturen (< 850 K) ist eine Abdichtung mittels Kolbenringen und Ölfilm, analog zu einem Hubkolbenmotor oder Kompressor nicht möglich. Zwar erbrachte das in der Einleitung beschriebene und in Abb. 3 gezeigte Dichtprinzip mit keramisch beschichteten Kolben im kalten Zustand die beste Abdichtung und die geringsten blow-by Verluste (Abb. 4), jedoch neigte das System im heißen Zustand zum Klemmen mit Delaminierung der

keramischen Beschichtung. Dies ist auf eine thermische Formänderung des Heizzylinders zurückzuführen, die darin begründet ist, dass nur die in Abb. 3 gezeigten zylindrischen Enden der Heizzelle beheizt werden, während der achteckige Zentralteil unbeheizt bleibt. Dieser ist aber zur Aufnahme der Flansche für die Beobachtungsfenster unabdingbar.

Deshalb wurde ein anderes, in Abb. 5 gezeigtes Dichtprinzip entwickelt. Hierbei wurden die Kolben als Membranbälge aus einer hochwarmfesten Nickel-Legierung ausgeführt. Das feste Ende des Membranbalgs wurde mit einem O-Ring aus Silber und einem Überwurfflansch gegen den Zylinder abgedichtet. Hierdurch wurde zunächst sichergestellt, dass blow-by Verluste am beweglichen Ende nicht zu einer allmählichen Verschiebung des Mitteldruckes führen können. Das bewegliche Ende des Kolbens wurde mit einer Nut und einem O-Ring aus einer Goldlegierung versehen. In umfangreichen Versuchen wurde Gold als nicht nur thermisch und stabil und korrosionsbeständig sondern auch als guter Reibpartner für die Nickellegierung ermittelt. Damit wird ein Klemmen des Kolbens verhindert und auch der Verschleiß von Kolben und Zylinder hält sich in engen, tolerierbaren Grenzen.

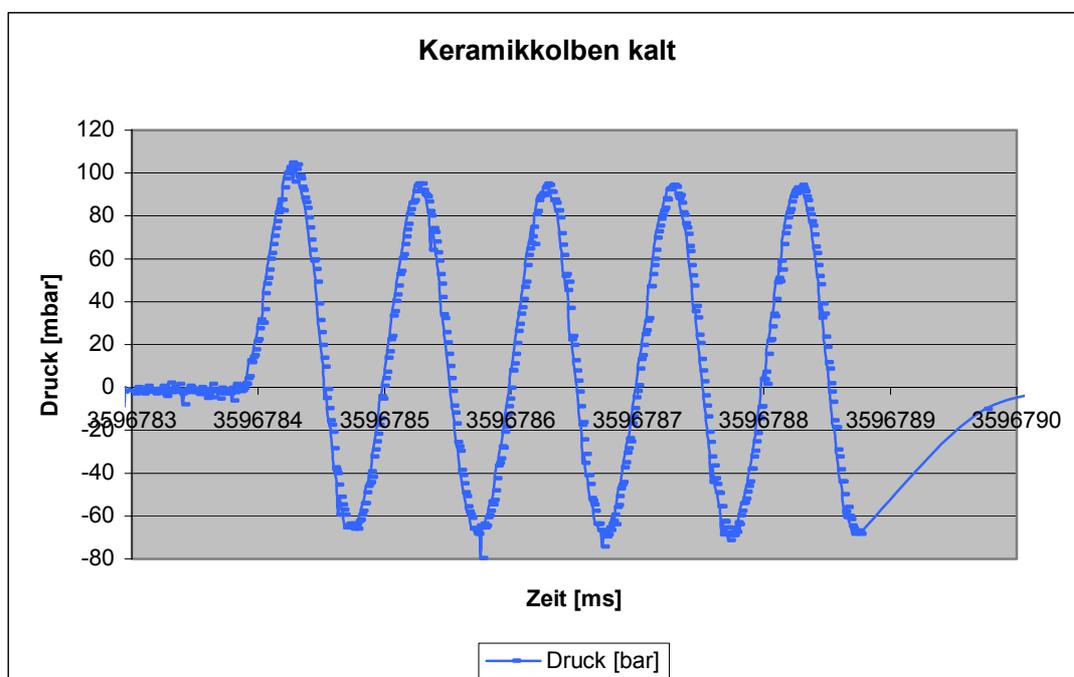


Abb. 4: Druckänderung bei Verwendung des Kolbens mit keramischer Beschichtung (Mitteldruck = Normaldruck)

Mittels dieses Dichtprinzips konnten die in Abb. 6 gezeigten Druckwerte relativ zum normalen Mitteldruck erreicht werden.

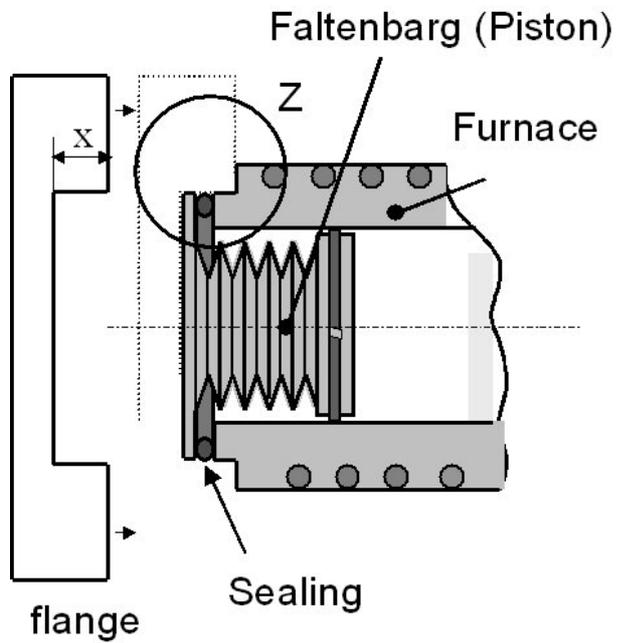


Abb. 5: Membranbalg-Kolben mit Silberdichtung am festen Ende und O-Ring Dichtung aus Gold am beweglichen Ende

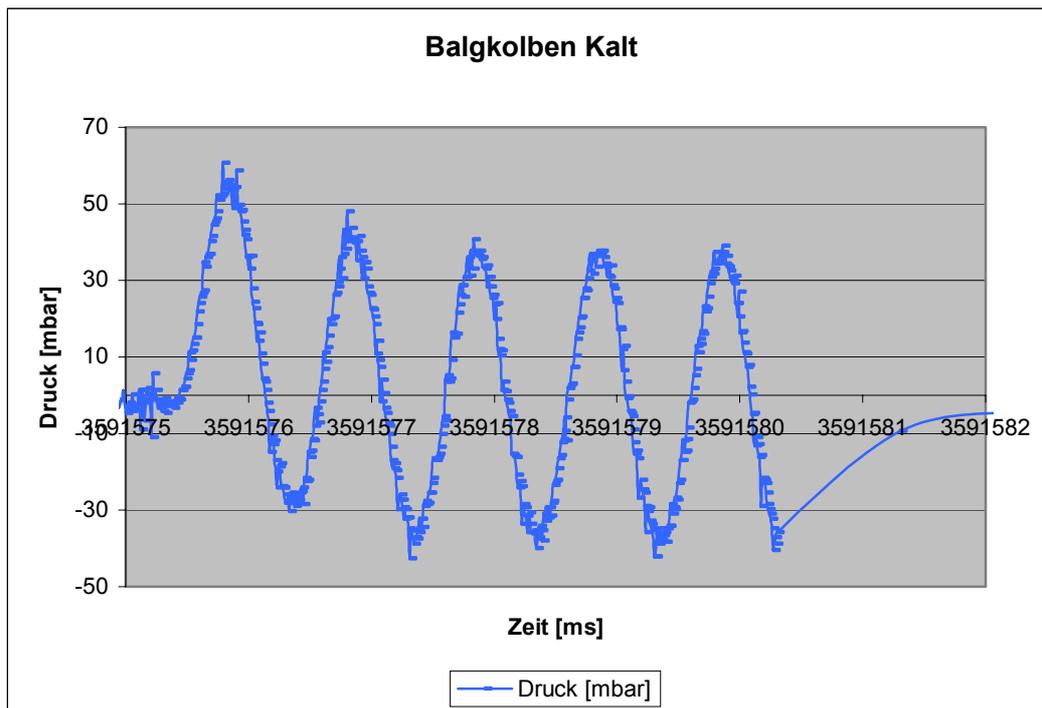


Abb. 6: Druckänderung bei Verwendung des Membrankolbens mit O-Ring Dichtung aus Gold (Mitteldruck = Normaldruck)

Zum Gesamtergebnis der Dichtheit trägt auch die Abdichtung des Suspender-Lifts bei. Hier besteht die Schwierigkeit darin, dass der Tropfen möglichst schnell in die Heizzelle eingefahren werden muss und bei Erreichen der Endlage der Suspender-Lift die Heizzelle nach außen dicht abschließen muss. Die Forderung nach einem möglichst schnellen Einfahren (ideale, aber nicht realisierbare Anfangsbedingung für die Messung des Zündverzuges wäre ein rechteckiges Verschieben des Tropfens vom kalten in den heißen Bereich der Apparatur) bedingt möglichst steile Beschleunigungs- und Abbremsrampen der Liftbewegung mit einer möglichst hohen Geschwindigkeit zwischen Beschleunigung und Abbremsung. Die Grenzen setzen hier Beschleunigungen, die zum Abreißen des Tropfens vom Suspender führen. Dabei ist das Erreichen der Endposition in der Heizzelle die kritischere Beschleunigung, da der Tropfen auf seinem Weg bereits erwärmt wurde und seine, die Haltekraft bestimmende Oberflächenspannung bereits abgenommen hat.

Im Moment des Erreichens der Endposition fährt aber zusätzlich ein am Suspender befestigter konischer Teller gegen einen in Abb. 3 nicht dargestellten Faltenbalg und dichtet die Heizzelle nach unten ab. Dieses Anschlagen darf nicht zu einer

Überschreitung der Haltefähigkeit des Tropfens am Suspender führen. Realisiert wurde dies durch eine Programmierung des Schrittmotor getriebenen Lifts, die die Bewegung im der Position des ersten Berührens des Faltenbalges stoppt und anschließend den Balg durch zwei weitere Einzelschritte komprimiert und die Abdichtung herstellt. Als Dichtmaterial auf dem konischen Teller kommt eine dünne Graphitbeschichtung zum Einsatz. Erst jetzt kann die Kolbenbewegung aktiviert werden.

3 Ergebnisse

3.1 Experimentergebnisse

Mittels der beschriebenen Versuchsanordnung, wurden umfangreiche Versuchsreihen mit dem Brennstoff n-Heptan zunächst unter 1g- Bedingungen durchgeführt. Die Ergebnisse werden im weiteren dargestellt.

Da der erwartete Effekt der akustischen Störung auf die Gesamtzündverzugszeit vergleichsweise klein ist, musste zunächst numerisch die Sensitivität der Tropfenzündung auf verschiedene Randbedingungen untersucht werden. Diese Untersuchungen sollten klären, ob die Apparatur und deren Messkette in der Lage ist, den gesuchten Effekt aufzulösen, oder ob der Effekt kleiner ist, als die Ungenauigkeiten bei der Einstellung der Randbedingungen.

a) Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Tropfengröße und der Umgebungstemperatur

Da der Anfangstropfendurchmesser nur mit einer Genauigkeit von $\pm 2,5$ Prozent bestimmt werden kann, ist die Prüfung der Sensitivität der Zündverzugszeit wichtig. Die Schwierigkeit bei der Bestimmung des Anfangsdurchmessers liegt in der komplizierten Geometrie des Tropfens begründet. Der Tropfen wird an einem horizontal liegenden Suspender befestigt. Dabei hat der Tropfen durch sein Benetzungsverhalten das Bestreben, sich längs des Suspenders auszubreiten. Dieses kapillare Fließen des Tropfen wird dadurch begrenzt, dass der Suspender am Ende eine Verdickung (Perle) aufweist. Aufgrund der Oberflächenspannung kann diese Perle die Tropfenoberfläche nicht durchdringen und der Tropfen verbleibt am Ende des Suspenders. Dennoch verformt die Kapillarkraft den Tropfen zunächst zu einem Ellipsoiden, dessen beiden Halbachsen während der Herstellung des Tropfens vermessen werden müssen. Aufgrund der Verdunstung des Tropfens schon während des Erzeugungsvorganges ändern sich die Längen der Halbachsen und müssen

online vermessen werden. Das Experiment wird bei Erreichen des korrekten äquivalenten Tropfendurchmessers gestartet.

Zusätzlich zur Verzerrung der idealen Kugel zu einem Ellipsoiden kommt noch der Gravitationseffekt,- der Ellipsoid hängt nach unten und ist nicht achsensymmetrisch. der obere Teil ist flacher gekrümmt, die obere Hälfte der Halbachse ist kürzer, der untere Teil des Tropfens nähert sich der Kugelform an, der untere Teil der Halbachse ist länger.

Dieses Problem, welches sich genauso bei Versuchen unter Mikrogravitationsbedingungen stellt (Tropfenerzeugung während der Hängephase der Fallkapsel) wurde zunächst dadurch angegangen, dass eine BV-Software entwickelt wurde, die die beiden Halbachsen während der Betankung vermisst, und die daraus errechneten äquivalenten Tropfendurchmesser kontinuierlich anzeigt.

Die Abb. 7 zeigt die Ergebnisse numerischer Simulationen zum Einfluss kleiner Variationen des Tropfendurchmessers und der Umgebungstemperatur bei einem Absolutdruck von 3 bar.

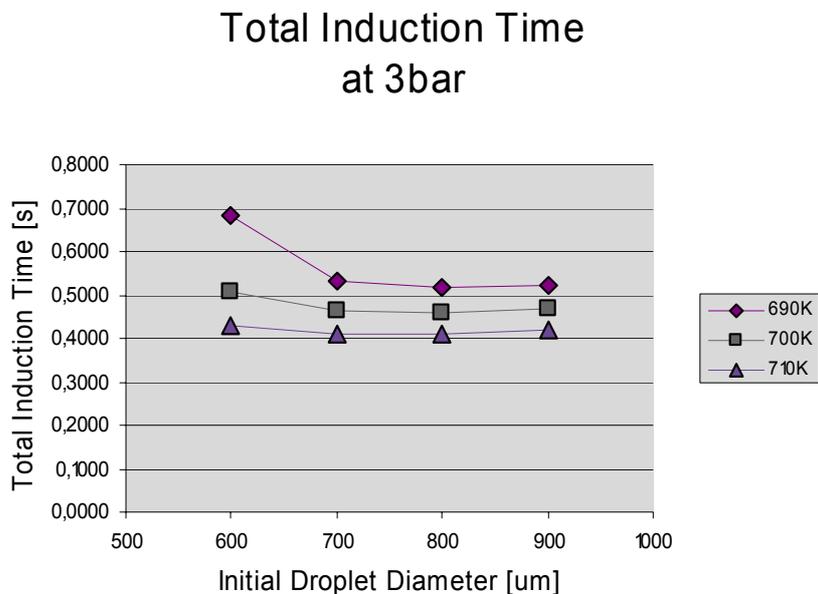


Abb. 7: Abhängigkeit der Gesamtzündverzugszeit eines n-Heptantropfens vom Anfangstropfendurchmesser und der Umgebungstemperatur bei 3 bar (62-Schritt-Kinetik)

Der angestrebte Tropfendurchmesser ist bei allen Versuchen 700 μm , die angestrebte Temperatur 700 K. Man sieht, dass die Abhängigkeit von Variationen der Umgebungstemperatur größer ist, als von Variationen des Anfangsdurchmessers. Dies gilt aber nicht für Tropfen kleiner als 700 μm . Insofern wurde darauf geachtet, den Toleranzbereich nur in den positiven Bereich zu verschieben, also Versuche nur mit Tropfen von mindestens 700 μm Durchmesser durchzuführen bzw. in die statistische Auswertung aufzunehmen.

Die Abb. 8 zeigt das Gleiche für 4 bar Umgebungsdruck. Auch hier zeigt der Verlauf der Kurven eine geringe Abhängigkeit von kleinen Varianzen des Durchmessers und eine größere Abhängigkeit von Varianzen der Umgebungstemperatur. Umgekehrt zu den Bedingungen bei 3 bar sollte der Tropfen eher kleiner als 700 μm als größer eingestellt werden.

Die Genauigkeit der Temperaturregelung liegt bei $\pm 1\text{K}$ und ist damit ausreichend genau.

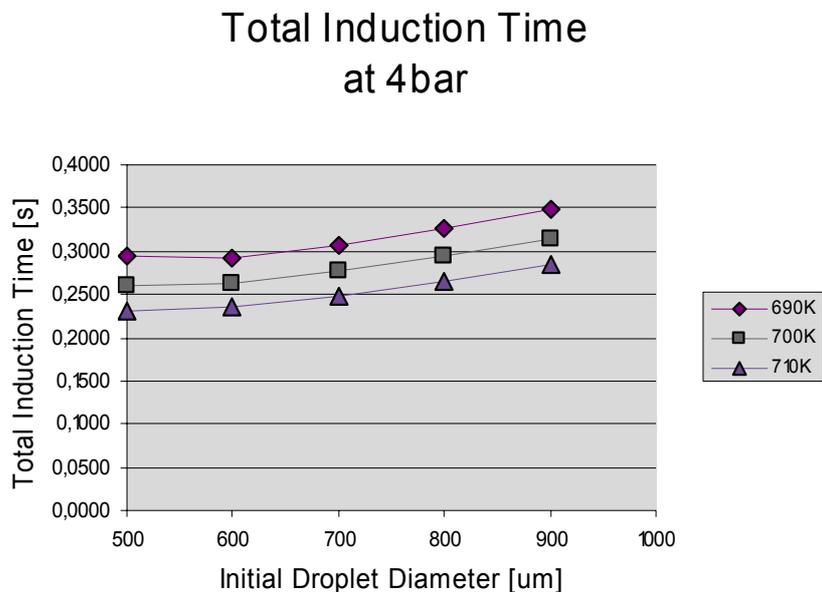


Abb. 8: Abhängigkeit der Gesamtzündverzugszeit eines n-Heptantropfens vom Anfangstropfendurchmesser und der Umgebungstemperatur bei 4 bar (62-Schritt-Kinetik)

b) Zusätzlich wurde die Abhängigkeit der Gesamtzündverzugszeit von kleinen Varianzen des Umgebungsdrucks simuliert.

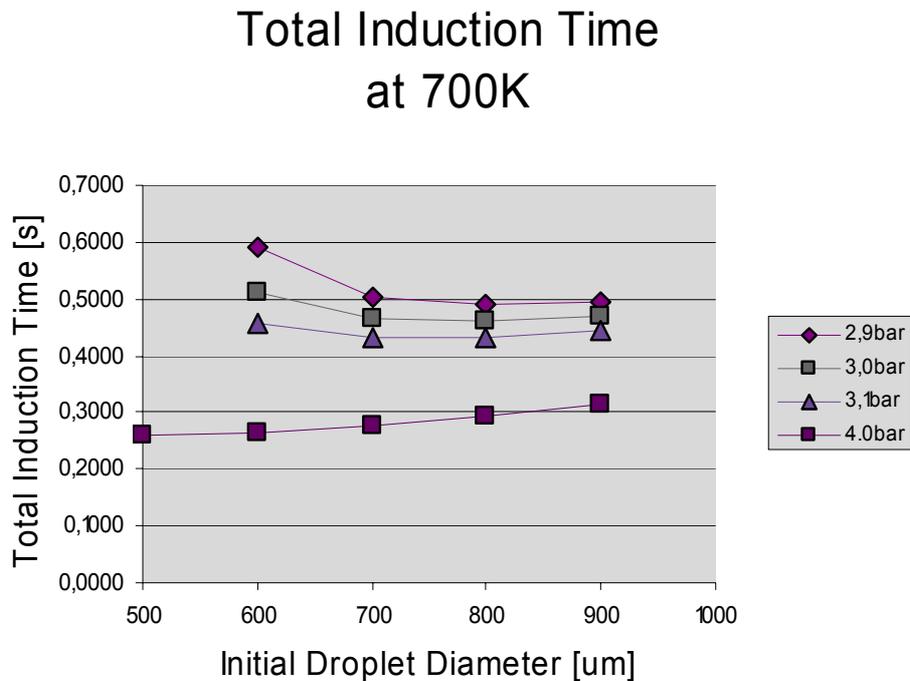


Abb. 9: Abhängigkeit der Gesamtzündverzugszeit eines n-Heptantropfens vom Anfangstropfendurchmesser und Varianzen des Druckes um 3 bar (4 bar zum Vergleich des Abstandes; 62-Schritt-Kinetik)

Es zeigt sich, dass die Abhängigkeit von Druckvarianzen von 0,1 bar etwas kleiner ist als die von Temperaturvarianzen von 10 K. Das verwendete Druckmesssystem ist ausreichend genau.

c) Ein weiteres Problem stellt die große Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Tropfenanfangstemperatur dar.

Total Induction Time vs. Initial Droplet Temperature

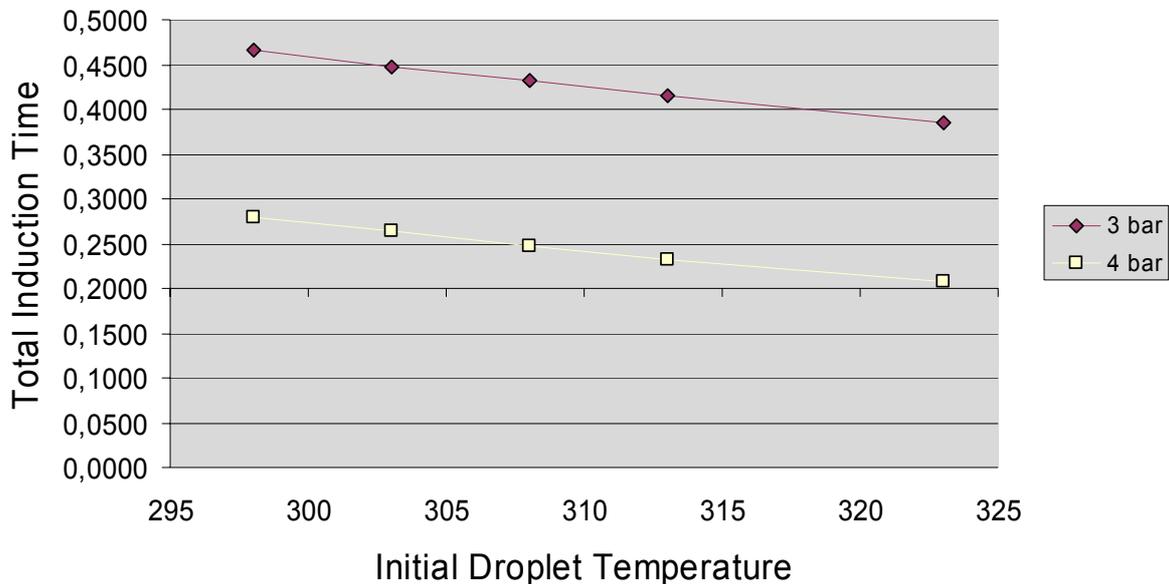


Abb. 10: Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Tropfenanfangstemperatur (62-Schritt-Kinetik)

Diese Empfindlichkeit ist nicht überraschend, macht doch der physikalische Zündverzug, also die Aufheizung des Tropfens bis zur Siedetemperatur einen großen zeitlichen Anteil an der Gesamtzündverzugszeit aus. Dieser Anteil kann direkt über die Tropfenanfangstemperatur beeinflusst werden.

Mit der derzeitigen Apparatur kann diese Temperatur aber lediglich gemessen, nicht aber kontrolliert werden. Bei einer Neukonstruktion der diagnostizierbaren Messapparatur wird deshalb darauf geachtet werden, die Wärmeverluste aus der Heizzelle nach unten, in den kalten Tropfenerzeugungsraum, kontrollierbar zu gestalten. Im Fall einer Thermostatisierbarkeit gewinnt man einen weiteren Freiheitsgrad zur Untersuchung der Tropfenzündung hinzu.

Derzeit werden Versuche dann durchgeführt, wenn die Messapparatur einen stationären Temperaturzustand angenommen hat. Dabei liegen die Tropfentemperaturen bei relativ hohen ca. 35°C.

Bei den Bedingungen: Tropfendurchmesser $700\mu\text{m}$, Umgebungstemperatur 700K , dem Brennstoff n-Heptan und Umgebungsdrücken von 3bar, 4bar und 5bar wurden zunächst unter 1g-Bedingungen Tropfenzündversuche durchgeführt. Bei diesen Bedingungen wurde sowohl die ungestörte Zündverzugszeit gemessen, als auch die Zündverzugszeiten, die sich einstellen, wenn zunächst mit einem Kompressionshub begonnen wird bzw. wenn mit einem Dekompressionshub begonnen wird.

Der zeitliche Ablauf der Versuche zur akustisch gestörten Tropfenzündung wird in Abb. 11 dargestellt.

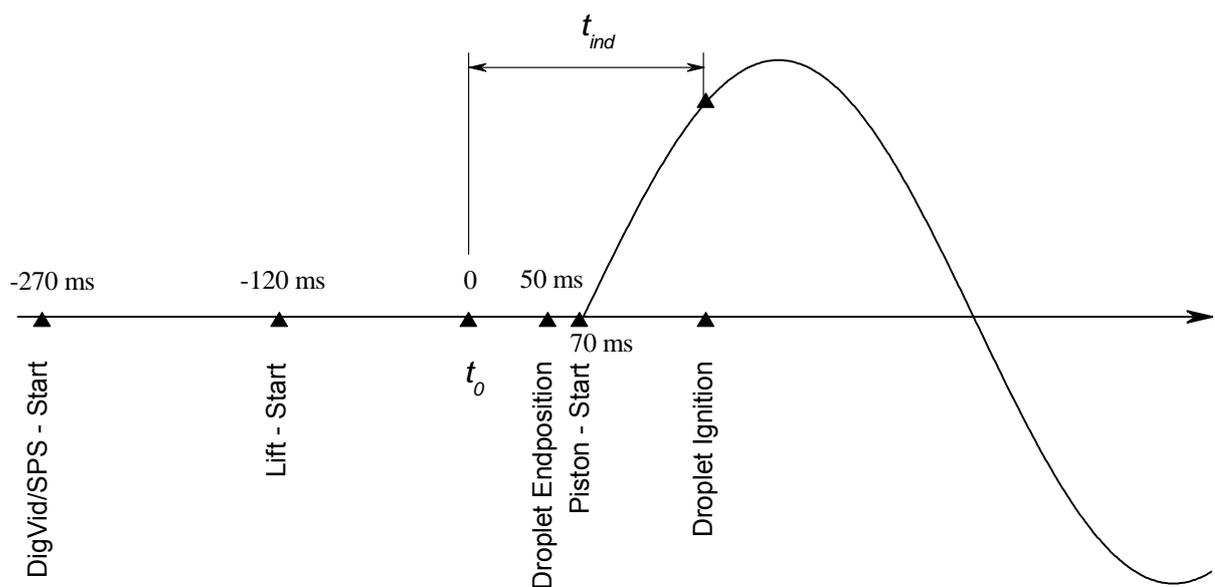


Abb. 11: Zeitschema der Versuche zur akustisch gestörten Tropfenzündung

Der suspendierte Tropfen wird mittels Schrittmotorlift in die heiße, isolierte Messzelle eingefahren. Die Zündverzugszeit beginnt dort, wo die Umgebungstemperatur den steilsten Anstieg zeigt. Dieser Ort liegt noch nicht in der Heizzelle sondern unterhalb des eigentlichen Ofens innerhalb der thermischen Isolierung. Erst nachdem der

Tropfen die Endposition erreicht hat, kann mit der Kompression (Abbildung) oder Dekompression begonnen werden. Dies liegt darin begründet, dass die Messzelle eine Öffnung in Richtung Suspenderingang aufweist. Erst wenn diese Öffnung durch den Dichtteller am Suspendering druckdicht verschlossen ist, kann eine Druckänderung innerhalb des Ofens realisiert werden. Die akustische Frequenz wurde bei den Versuchen zunächst so gewählt, dass das Druckmaximum (bzw. Minimum) zeitlich dort zu liegen kommt, wo im ungestörten Fall die Zündung erfolgt. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die Wirkung der Druckänderung dort zum Tragen kommt, wo der größte Effekt erwartet wird- während der chemischen Zündverzugszeit. Deshalb wurden die Versuche bei 3bar mit einer Frequenz von 1Hz gefahren, während bei 4 und 5bar eine Frequenz von 2Hz angelegt wurde.

Die Abb. 12 zeigt die Versuchsergebnisse für den akustisch ungestörten Fall (schwarz), für den akustisch gestörten Fall mit einem Kompressionshub beginnend (rot) und mit einem Dekompressionshub beginnend (blau). Verglichen werden die Ergebnisse mit numerischen Daten einer „open vessel“ Simulation ($\lambda \rightarrow \infty$) bei gleichen, ungestörten, Bedingungen (grüner Kreis) und den Experimentdaten von Tanabe zur ungestörten Zündung, die in einer vollständig anderen Apparatur gemessen wurden (Raute). Im Ergebnis zeigt sich bei 700K eine signifikante Wirkung der simulierten Schallwelle eines Schalldrucks die mit einer Temperaturerhöhung bzw. -Reduzierung von 8K verbunden ist.

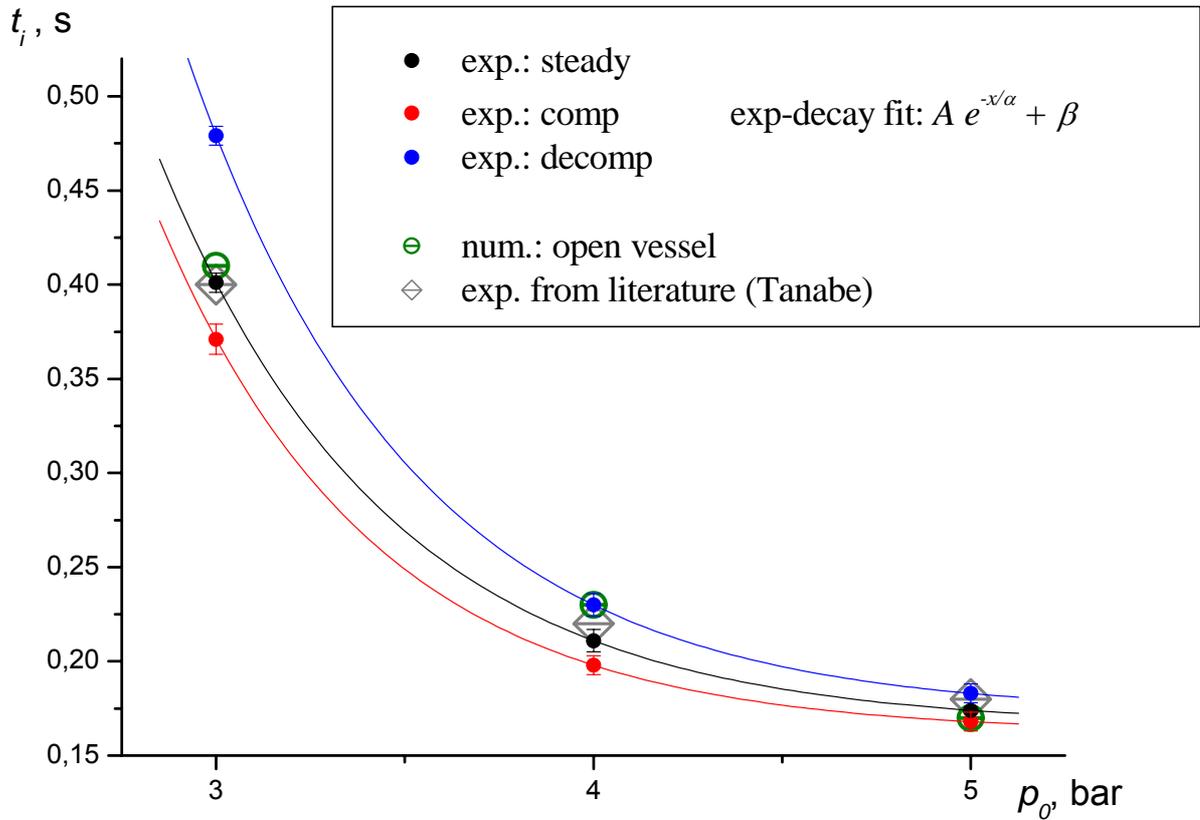


Abb. 12: Wirkung einer akustischen Stehwelle auf die Zündverzugszeit von n-Heptantropfen. 1g- Experimente bei 700K, $D_0=700\mu\text{m}$, $\Delta T_{\text{akustisch}}=8\text{K}$. Vergleich mit Simulation (62-Schritt-Kinetik) ungestörter Bedingungen und Versuchen von Tanabe zur ungestörten Tropfenzündung

Die eingezeichneten Fehlerindikatoren zeigen die statistische Streubreite aus jeweils 10 Versuchen. Die oben beschriebenen Empfindlichkeiten gegenüber der Genauigkeit der eingestellten Umgebungsbedingungen empfehlen eine verbesserte Kontrolle speziell hin zu höheren Drücken und Temperaturen.

Damit ist die Arbeitshypothese, dass akustische, kurzzeitige Temperatur- und Druckschwankungen einen Einfluss auf die Zündverzugszeit haben können, bestätigt.

3.2 Analytisches Modell der Tropfen- und Sprayzündung im akustischen Feld

Der folgende Ausdruck stellt ein vereinfachtes mathematisches Modell für eine Sprayselbstzündung dar:

$$\int_{t_0}^{t_0+\tau} k(t) dt = C_{ig} \quad (1)$$

t_0 =: Beginn des Zündprozesses

τ =: Zündverzugszeit

$k(t)$ =: Reaktionsrate (Fortschrittsvariable)

C_{ig} =: Chemische Zustandskonstante zum Zeitpunkt der Tropfenzündung

Dabei werden physikalische Prozesse und gekoppelt und weitgehend parallel ablaufende chemische Prozesse nicht getrennt betrachtet.

Im Allgemeinen hängt die Reaktionsrate k von der Temperatur $T(t)$ ab.

$$k(t) = k(T(t)) \quad (2)$$

Bei konstanter Temperatur $T(t) = T^*$ und $k(t) = k^*$ erhält man:

$$C_{ig} = k^* \tau^* \quad (3)$$

Bei einer ausreichend kleinen Druckoszillation infolge der akustischen Welle kann die Temperatur beschrieben werden als:

$$T(t) = T^* + T'(t) \quad T' \ll T^* \quad (4)$$

$$p'(t) \sim \sin(\omega t) \quad T'(t) = \Delta T \cdot \sin(\omega t) \quad (5)$$

Nimmt man eine globale Arrhenius-Kinetik für den Selbstzündprozess an,

$$\tau = A e^{E/T} \quad (6)$$

kann die Reaktionsrate $k(t)$ ausgedrückt werden als:

$$k(t) = k^* + \alpha \cdot T'(t) \quad (7)$$

Die Konstante α kann durch experimentelle Messergebnisse der Zündverzugszeit für verschiedene Temperaturen T^* and $T^*+\Delta T$ ausgedrückt werden. Damit wird:

$$\alpha = -k^* \Delta T^* \frac{\Delta \tau^*}{\tau^* + \Delta \tau^*} \quad (8)$$

Der Ausdruck (1) nimmt dann die Form:

$$\int_{t_0}^{t_0+\tau} (k^* + \alpha \cdot \Delta T \cdot \sin(\omega t)) dt = k^* \tau^* \quad \text{oder} \quad f(t_0, \tau) = 0 \quad (9)$$

an.

In Abb. 13 werden die Experimentergebnisse mit numerischen Simulationen verglichen. Die Zündverzugszeit wurde aus (9) gewonnen, wobei die Konstante α (Gl. 7) aus Ergebnissen numerischer Simulationen einer Tropfenzündung unter konstanten Umgebungsbedingungen ("open vessel") berechnet wurde.

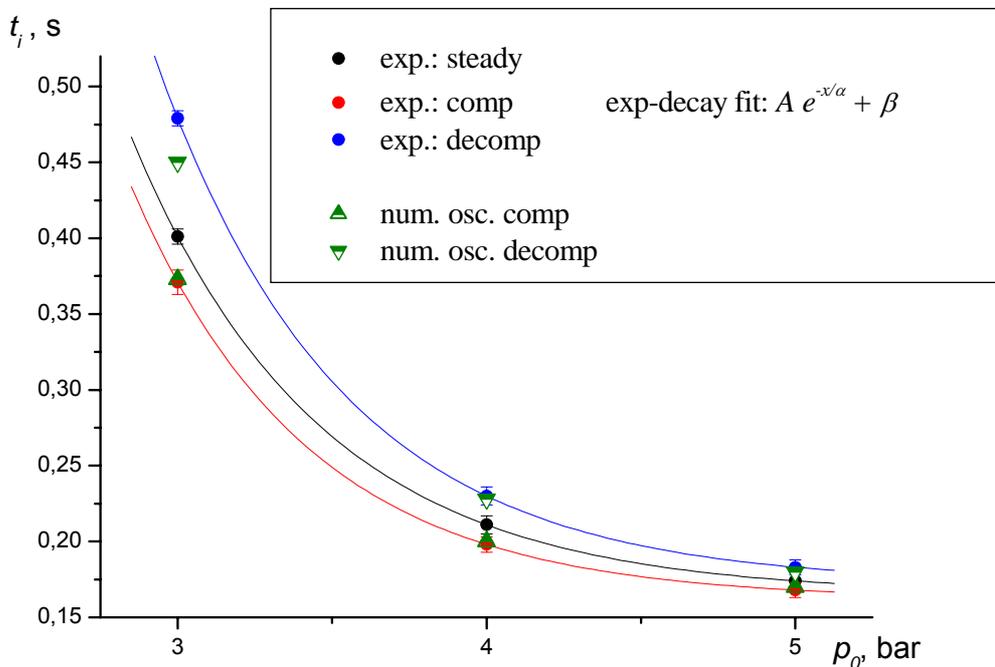


Abb. 13: Vergleich der Experimentergebnisse mit numerischen Simulationen

Die Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Experimentergebnissen.

Ersetzt man $\tau \rightarrow t - t_0$ in (9) erhält man die Gleichung:

$$f(t, t_0) = 0 \quad (10)$$

Da die Prozesse unterschiedlich ablaufen, je nachdem, welche Phasenlage der Startzeitpunkt relativ zu einer kontinuierlichen Druckschwingung hat, wird der Startzeitpunkt t_0 als Funktion der Zeit definiert.

$$t_0 = \tilde{t}_0(t). \quad (11)$$

Im Falle kleiner Druckoszillationen hat die Wärmefreisetzung im Spray die Form:

$$q(t) = q^* + q'(t) \quad (12)$$

worin $q'(t)$ berechnet werden kann aus:

$$q'(t) \sim \frac{\tilde{t}_0(t + dt) - \tilde{t}_0(t)}{dt} - 1 \quad (13)$$

Zur Untersuchung thermo-akustischer Instabilitäten dieses Modells wird das Rayleigh-Kriterium in der Form:

$$R(\omega) = \int_0^{2\pi/\omega} p'(t) \cdot q'(t) dt \quad (14)$$

herangezogen. Positive Werte von $R(\omega)$ stellen Bedingungen dar, bei denen die Wärmefreisetzung dem akustischen Feld Energie zuführt, also die akustische Störung resonant verstärkt wird. Umgekehrt bedämpfen negative Werte von $R(\omega)$ die Störung durch Energieentzug. Die größte Wahrscheinlichkeit für eine instabile Verbrennung wird dort angenommen, wo $R(\omega)$ ein Maximum erreicht.

Für einige typische Bedingungen von $\tau^*, T^*, \Delta T$ sind die Ergebnisse einer numerischen Berechnung in Abb. 14 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die wahrscheinlichste Resonanzfrequenz bei

$$f_R = \frac{\omega_R}{2\pi} \approx 0.37 \cdot \frac{1}{\tau^*}$$

liegt.

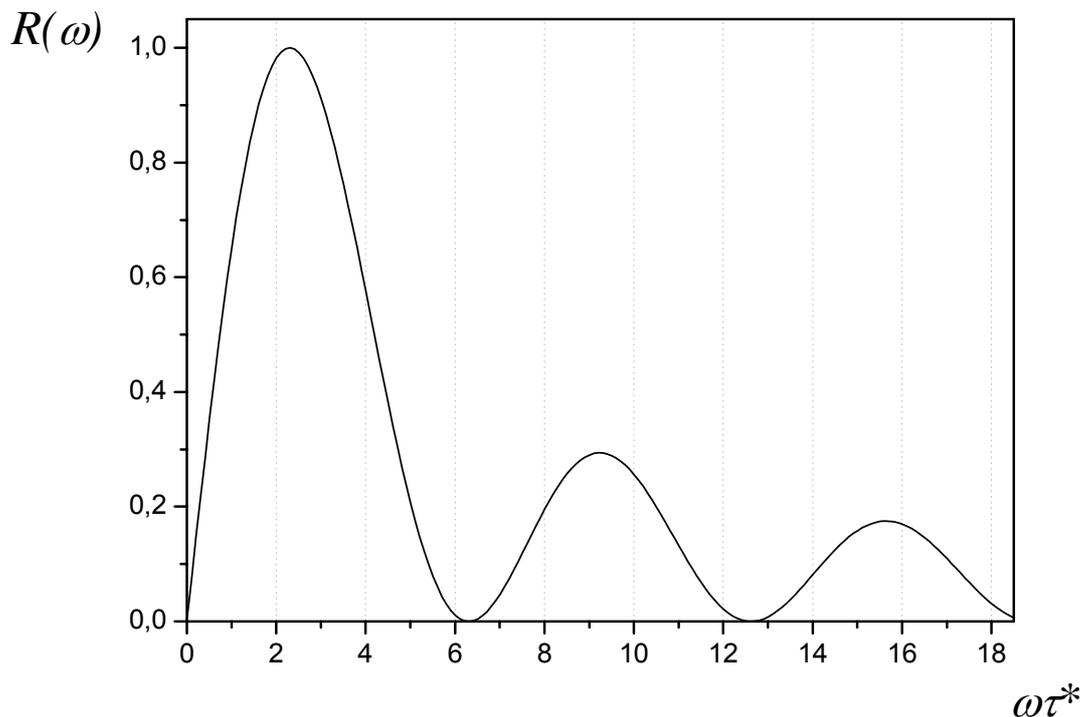


Abb. 14: Numerische Berechnung der Resonanzfrequenzen nach Rayleigh-Kriterium

Reale Gasturbinen sind durch Zündverzugszeiten im Bereich weniger Millisekunden charakterisiert ($\tau^* \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}$). Damit ergeben die ersten Maxima in Abb. 14 Resonanzfrequenzen von $f_{R1} \approx 190 \text{ Hz}$, $f_{R2} \approx 740 \text{ Hz}$, $f_{R3} \approx 1.25 \text{ kHz}$, ..., $f_{R10} \approx 4.8 \text{ kHz}$ ($R(f_{R10}) \approx 0.05$). Dies zeigt, dass eine akustische Anregung mit dem Zündprozess in einem weiten Frequenzbereich interagiert. Die Ergebnisse der Untersuchungen belegen, dass Verbrennungsinstabilitäten durch thermoakustische Effekte auf die Zündung angetrieben werden können. Da die Zündung im Bereich der Mischzone

eines Brenners stattfindet, also je nach Zündverzugszeit ein Gemisch mit lokal anderen Mischungsverhältnissen gezündet wird, kann die Wirkung auf die nachfolgende Verbrennung signifikant sein. Die akustisch gestörte Zündung muss also zusätzlich zu strömungs- und mischungsinduzierten Verbrennungsinstabilitäten als potenzielle Quelle von LFD und HFD in Betracht gezogen werden. Die Wirkung der akustisch gestörten Zündung auf die resonante Selbstverstärkung von HFD erfordert weitere detaillierte Untersuchungen.

3.3 Konzept zur numerischen Simulation der Tropfenzündung bei variierenden Randbedingungen (SPRAYLET-Code)

Die Simulation einer Einzeltropfenzündung im akustischen Feld, wie auch die Simulation der Zündung von Sprays erfordert die Entwicklung eines numerischen Codes, der Veränderungen der Randbedingungen während der Rechnung erlaubt.

Im Fall der akustischen Störung besteht diese variierende Randbedingung in einer oszillierenden Druckänderung, verbunden mit einer Temperaturänderung entsprechend adiabater Zustandsänderung. Im Fall der Sprayzündung ändern sich die Randbedingungen Temperatur und Mischungsbruch entsprechend des Einflusses verdampfender Nachbartropfen.

Im Rahmen des Projektes wurde ein Konzept erstellt, wie die im Vorläuferprojekt DROP-COS entwickelten Open Vessel- und Closed Vessel- Codes zum Spraylet Code erweitert werden können. Der Open Vessel Code simuliert die Bedingungen eines selbstzündenden Einzeltropfens in einer quasi-unendlichen Umgebung. Dies entspricht den Bedingungen der Einzeltropfenzündung ohne Einfluss akustischer Störungen. Mittels dieses Codes wurden die Tropfenzündversuche des Vorläuferprojektes DROP-COS erfolgreich simuliert. Da ein Einzeltropfen nur während seiner Lebensdauer zünden kann, da nach vollständiger Verdampfung aufgrund der Brennstoffdissipation in den quasi-unendlichen Raum keine Zündbedingungen mehr erreicht werden können, mithin also die homogene Zündung

nicht erfolgen und auch nicht simuliert werden kann, wurde der Closed Vessel Code entwickelt. Hier verhindert eine virtuelle adiabate Vesselwand die Dissipation der verdampften Brennstoffs. Das Verhältnis von Tropfenanfangedurchmesser und Vesseldurchmesser repräsentiert das overall Mischungsverhältnis. D.h. würde ein Tropfen vollständig verdampfen und stünde ausreichend Zeit zur homogenen Vormischung zur Verfügung würde sich im Vessel ein Brennstoff/ Luftverhältnis ergeben, dass proportional zum Durchmesser Verhältnis ist. Mittels dieses Codes wurde es auch möglich, die Selbstzündung von kleinen Tropfen technischer Dimensionen zu simulieren, die einzeln in einer quasi-unendlichen Umgebung nur unter extremen Temperaturbedingungen während ihrer Lebensdauer zünden würden. Man kann den Closed Vessel bereits als ein einfaches Spraymodell betrachten, bei dem die Vesselwand die Dissipation verhindert, in etwa so, wie es verdampfende Nachbartropfen im doppelten Wandabstand tun würden. Es handelt sich also um das Modell eines äquidistanten monodispersen Sprays mit der Einschränkung, dass es sich um ein 1-D Modell handelt, also die Nachbartropfen nicht auf diskreten Positionen sitzen sondern als Kugelschalen angenommen werden. Die Bedingungen auf dem Rand des Vessels werden beim Closed Vessel Code ausschließlich durch die Prozesse innerhalb des Vessels bestimmt.

Bei dem Spraylet Code soll die Variation der Randbedingungen durch vorab durchgeführte CFD-Spraysimulationen definiert werden. Dabei werden in einer CFD-Simulation der Strahlzerfall, die Tropfenverdampfung und die Tropfenflugbahnen in drei Dimensionen instationär berechnet. Diese führen zu einem zeitlich und örtlich veränderlichen Konzentrations- und Temperaturfeld. Extrahiert werden aus der CFD-Rechnung die Tropfentrajektorien sowie die Temperaturen und Mischungsbrüche längs der Trajektorien.

Die Spraylet-Kalkulationen werden in einem separaten Modul durchgeführt, welches ausschließlich die Einzeltropfen-Trajektorie behandelt. Jedes Spraylet wird unabhängig von den anderen berechnet. Die Anzahl der parallel berechenbaren Spraylets hängt lediglich von der verfügbaren Rechnerleistung ab.

Das vom Spraylet Modul benutzte Modell basiert auf einer Kombination des Open Vessel Tropfenzündmodells mit konstantem Druck, welches durch Vergleich mit dutzenden Fallturmabwürfen und hunderten Bodenexperimenten validiert wurde, und dem Closed Vessel Tropfenzündmodell mit Druckvariation und geeigneten Randbedingungen. Aufgrund der Tatsache, dass die Einzeltropfen Teil eines Sprayensembles sind, wurde der Open Vessel Code um die Randbedingungen zur Umgebung erweitert und eine Druckvariation wurde eingeführt. Diese entstammen den CFD-Simulationen und sind abhängig vom Anwendungsfall je nachdem es sich z.B. um Gasturbinen oder Verbrennungsmotoren handelt. Das Modell ist vollständig instationär. Ein Tropfen befindet sich im Zentrum einer sphärischen Domäne, die einen virtuellen Vessel darstellt. Dieser befindet sich in einer Umgebung, deren Bedingungen vom Zeitpunkt und der Position auf der Tropfentrajektorie abhängen. Die Modelldomäne ist in drei Unterbereiche geteilt: die Flüssigphase, die Spraylet-Gasphase und die Umgebung, die sogenannte CFD-Gasphase (Abb. 15 und Abb. 16).

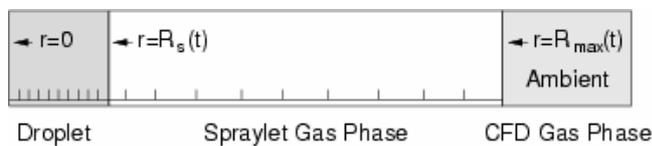


Abb. 15: 1D Spraylet Rechenraum

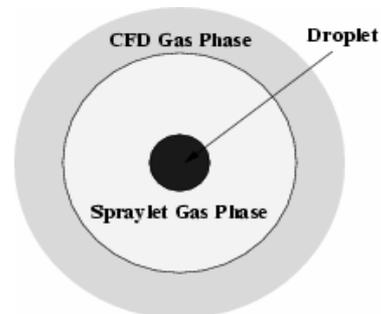


Abb. 16: Tropfen, Spraylet Gasphase, CFD Gasphase

Im Gegensatz zum Open Vessel, bei dem die Umgebung lediglich eine Randbedingung darstellt, hat die Umgebung beim Spraylet weitreichenden Einfluss, wie später gezeigt wird.

Nach vollständiger Verdampfung des Tropfens verbleibt nur noch die Gasphase. In der Flüssigphase und der Spraylet-Gasphase gilt Massen-, Energie- und Spezieserhaltung. Impulserhaltung wird in beiden Bereichen vernachlässigt. Durch

die Verdampfung entsteht eine radialsymmetrische Konvektion, der Stefan-Flow. Strahlung, Viskosität und Gravitationskräfte sind vernachlässigbar.

Flüssigphase

In der Flüssigphase finden keine chemischen Reaktionen statt. Sie besteht ausschließlich aus Brennstoffkomponenten. Die Diffusion von Gas in die Flüssigphase wird vernachlässigt. Für die Berechnung von Konzentrationsänderungen durch Diffusion entsprechend dem Fick'schen Gesetz wird eine Kombination der Methoden von Vignes und Tyn, Calus angewendet. Die Filippov Gleichung wird zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit bei mehrkomponentigen Brennstoffen angewandt, in anderen Fällen die Methode von Latini. Die Berechnung der Wärmekapazität und der absoluten Enthalpie erfolgt nach der Rowlinson-Methode. Die Peng-Robinson Gleichung wird zur Bestimmung des Kompressionsfaktors Z der Flüssigphase verwendet. Das Gitter ist äquidistant und es werden symmetrische Randbedingungen im Zentrum und an der Phasengrenze, der Tropfenoberfläche angesetzt.

Spraylet-Gasphase

Im Gegensatz zu den Berechnungen der CFD- und der Flüssigphase muss die Spraylet-Gasphase chemische Reaktionen berücksichtigen. Hier können unterschiedlichste Reaktionsmechanismen eingesetzt werden. Diese können detailliert oder reduziert sein und ein- oder mehrkomponentige Brennstoffe behandeln. Die Berechnung der Diffusion verwendet die Methode von Oran und Boris, die Diffusionskoeffizienten werden mit der Gebrauchsgleichung von Chapman und Enskog berechnet. Die Wärmeleitfähigkeit der Mischung erfolgt nach der Methode von Coffee und Heimel und der Wärmestrom berechnet sich zu $q_T = -\lambda_m \partial T / \partial r$. Die kubische Zustandsgleichung von Peng-Robinson wird angewendet. Das Gitter ist unstrukturiert mit einer anfänglich höheren Auflösung an der Tropfenoberfläche. Es werden Phasengrenzbedingungen am inneren Rand und Umgebungsbedingungen am äußeren angenommen.

Phasengrenze

Die Berechnungen der Temperatur der Tropfenoberfläche und die Spezieskonzentration an der Phasengrenze gehen vom Fluchtigkeitsgleichgewicht aus. Gleiches gilt für die Berechnung der Oberflächenspannung an der flüssig-gas Grenzfläche. Zusätzlich wird der Massen- und Stoffstrom durch die flüssig-gas Grenzfläche berechnet.

CFD Gasphase

Die CFD-Gasphase ist abstrakt. Die skalaren Werte, die diese Gasphase repräsentieren sind großskalige Informationen über die Nachbarschaft des Spraylets. Sie entstammen der CFD-Simulation und werden entlang der Tropfentrajektorie des aktuell berechneten Spraylets entnommen. Sie stellen die momentanen Umgebungsbedingungen dar. Aus der CFD-Simulation kommen Informationen über Temperatur, Druck, Dichte der Mischung und die Brennstoffkonzentration, die sich aus dem CFD-Verdampfungsmodell ergibt. Die Daten werden aus den Tabelleneinträgen entnommen und über eine lineare Approximation zeitlich interpoliert.

Koppelung zwischen beiden Gasphasen

Die Variablen aus der CFD Umgebung werden verschieden behandelt. Der Druckwert wird für die Spraylet-Gasphase übernommen, da es sich bei genügendem Abstand zur Schallgeschwindigkeit um eine globale Variable handelt. Hierfür stellt also der CFD –Code den „Experten“ dar.

Da der CFD-Code chemische Reaktionen ignoriert, können Temperatur und Dichte in der Nachbarschaft des Tropfens nicht korrekt berechnet werden. Deshalb ist der Spraylet-Code der „Experte“ für lokale Berechnungen der Temperatur und Dichte. Da die Temperaturänderung durch exotherme Reaktionen nur lokal in der direkten Tropfenumgebung entsteht, und der Spray als verdünnt betrachtet werden kann, wird keine thermische Rückwirkung der Spraylet-Gasphase auf die globale Umgebung bis zur Zündung angenommen.

Zuletzt muss die Brennstoffkonzentration behandelt werden. Während die CFD-Gasphase eine integrale Brennstoffkonzentration liefert (keine Reaktionen), ist die Spraylet-Gasphase durch die verschiedenen, dem Reaktionsfortschritt entsprechenden Spezies beschrieben. Das muss nun in Brennstoffkonzentration transformiert werden indem jede Spezies in ihren Brennstoff- und ihren Luftanteil zerlegt wird und dies anschließend in jedem Gitterpunkt gewichtet aufsummiert werden. Ausgehend von der Annahme, dass CFD-Code und Spraylet Rechnung an der Tropfenposition die gleiche Situation, aber auf verschiedenen Längenskalen, wiedergeben müssen, müssen beide Rechnungen zur Wahrung der Konformität gekoppelt werden. Zur Realisierung werden zunächst beide Datensätze auf die gleiche Längenskala normiert. Hierzu muss der CFD-Code einerseits seine Daten des groben Gitters auf die Position des Spraylets interpolieren und auf der anderen Seite muss die durch Anwendung der Trapezoidal-Regel gemittelte Brennstoffkonzentration der Spraylet-Gasphase ermittelt und mit der CFD-Gasphase verglichen werden. Bevor ein Zeitschritt erfolgen kann, muss diese mittlere Brennstoffkonzentration ermittelt werden, und die Größe der Spraylet-Gasphase muss zur Erzielung von Gleichheit der Konzentrationen wie folgt angepasst werden:

Wenn die mittlere Brennstoffkonzentration der Spraylet-Gasphase niedriger als der CFD-Wert ist (Abb. 17), wird angenommen, dass die Werte der äußeren Bereiche der Spraylet-Gasphase überholt sind und werden entsprechend gelöscht (Abb. 18). Das wird in dem Maße durchgeführt bis die mittlere Brennstoffkonzentration der Spraylet-Gasphase und der Wert der CFD-Gasphase identisch sind.

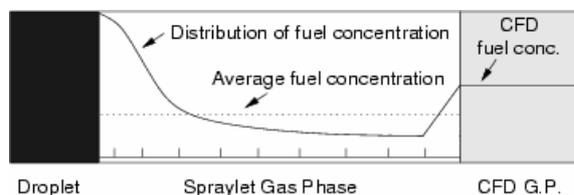


Abb. 17: Mittlere Brennstoffkonzentration der Spraylet Gasphase ist niedriger als der CFD-Wert (Tropfen bewegt sich in eine fettere Zone)

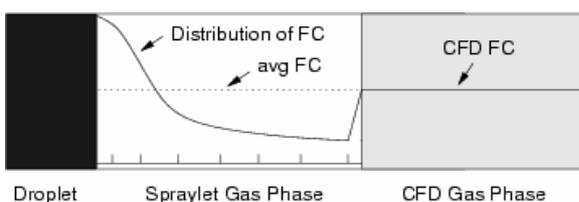


Abb. 18: Spraylet- und CFD-Gasphase matchen

Im umgekehrten Fall einer höheren Konzentration der Spraylet-Gasphase als in der CFD Umgebung (Abb. 19) wird die Spraylet-Gasphase bis zur Wertegleichheit ausgedehnt (Abb. 20). Die Speziesfraktionen werden in der hinzugefügten Region konstant gehalten.

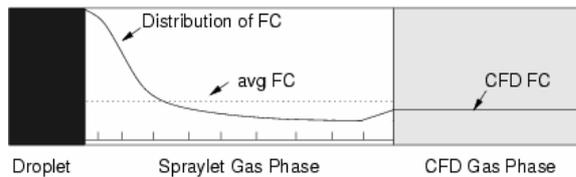
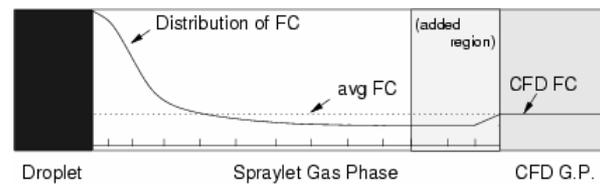


Abb. 19: Mittlere Brennstoffkonzentration der Spraylet Gasphase ist höher als der CFD-Wert (Tropfen bewegt sich in eine magere Zone)

Abb. 20: Angepasste Spraylet Gasphase



Weil mit fortschreitender Zeit Gitterpunkte entfernt und hinzugefügt werden, muss das Gitter unstrukturiert sein, um Informationsverluste durch häufige Interpolation zu vermeiden. Diese wäre notwendig wollte man ein feste Gitterstruktur oder Metrik beibehalten.

Ein Spezielles Problem tritt auf, wenn die CFD-Brennstoffkonzentration niedriger als die minimale Konzentration in der Spraylet-Gasphase ist (Abb. 21). In diesem Fall wird das Spraylet durch eine 0-Konzentration solange verdünnt, bis beide Werte wieder gleich sind (Abb. 22).

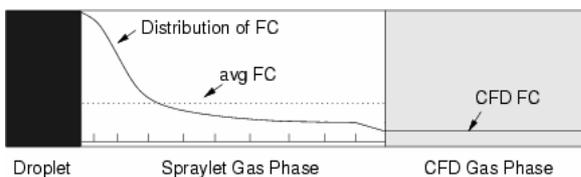
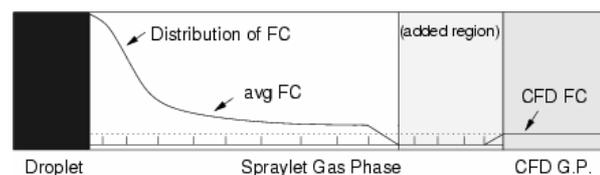


Abb. 21: Brennstoffkonzentration der CFD-Gasphase ist niedriger als die minimale Konzentration der Spraylet Gasphase

Abb. 22: Angleichen der mittleren Brennstoffkonzentration durch Hinzufügen einer brennstofffreien Region



3.4 Entwicklung der Schnittstellen zwischen CFD- und SPRAYLET-Code

Mit den Arbeiten zur Schnittstelle zwischen CFD-Code und Closed-Vessel Simulation wurde planmäßig begonnen. Ein erster, vielversprechender Approach wurde auf der Basis des FLUENT-Codes entwickelt. Dieser Ansatz ist verallgemeinerbar und somit auch für andere CFD-Umgebungen geeignet.

Die Closed-Vessel Simulation rechnet instationär mit zeitlich variablen Randbedingungen. Die dafür nötigen Eingangsdaten basieren auf den Temperatur-, Druck- und Konzentrationswerten der Gasphase aus der CFD Rechnung. Die Gasphase enthält dabei eine in Form von diskreten Tröpfchen verteilte flüssige Phase. Um die für die Closed-Vessel Simulation nötigen Daten für die Randbedingungen entlang von Trajektorien (Tröpfchenflugbahnen) zu generieren mußten die Trajektoriendaten mit den Gasphasendaten kombiniert werden. Dabei bestand das Problem darin, daß die Trajektorien örtlich hoch aufgelöst zur Verfügung stehen, während die Gasphasengitterpunkte zugunsten der Rechenbarkeit relativ grob aufgelöst sind. Bei der Berechnung von diskreten Funktionen für Temperatur, Druck und Konzentrationen entlang der Trajektorien treten daher Sprünge auf. Immer wenn eine hochaufgelöste Trajektorie die Grenze zwischen zwei numerischen Gasphasengitterzellen überschreitet ändert sich der zugehörige Wert sprunghaft. Aus diesem Grund mußte ein Interpolationsverfahren zwischengeschaltet werden.

Das Interpolationsverfahren mußte für dreidimensionale Daten in irregulärer Anordnung anwendbar sein. Das generellste Verfahren, was dies leistet ist das Inverse Distance Weighting (IDW). Bei dieser Methode wird der zu interpolierende Punkt (genauer der Wert an diesem Punkt) gebildet, indem zunächst eine feste Zahl n nächster Nachbarn gesucht wird, an denen Werte vorliegen. Aus diesen Werten wird dann ein gewichtetes Mittel berechnet. Die IDW-Verfahren sind vielfältig. Anstatt eine feste Zahl n von Nachbarwerten zur Berechnung heran zu ziehen, kann auch eine feste Umgebung mit einer variablen Nachbarpunktzahl verwendet werden. Letzteres

findet seine Anwendung bei stark anisotropen Gittern. Außerdem spielt natürlich die Wichtungsfunktion eine entscheidende Rolle. Die Wichtungsfunktion fällt monoton mit dem Abstand. In der Regel verwendet man eine inverse Potenz (etwa $W(d)=1/d^p$), wobei der p -Exponent ein weiterer Parameter zur Anpassung ist. $p=2$ führt meist zu guten Resultaten. Für $p=1$ sind die Interpolationsfunktionen in der Nachbarschaft der Datenpunkte nicht differenzierbar. Mit höheren p -Exponenten gewinnen weiter entfernte Nachbarn relativ an Gewicht, d.h. die Interpolation wird ausgeglichener, aber es können dadurch auch lokale Strukturen im Skalarfeld verloren gehen.

Interpolationsverfahren sind immer mit einem systematischen Fehler behaftet (spatial bias). Bei ungleichmäßig verteilten Datenpunkten vergrößert sich dieser Fehler im IDW, weil eng benachbarte Punkte eine zu große Gewichtung erhalten. Daher wurde eine Anisotropiekorrektur durchgeführt. Diese Korrektur reduziert die Gewichtung von eng benachbarten Punkten, da diese ja im Prinzip redundante Informationen beinhalten. Der Korrekturfaktor wird aus den Winkeln aller Datenpunktpaare im Interpolationspunkt berechnet.

Da die Sprayzündsimulation auf magere, vorverdampfte und vorgemischte Verbrennungssysteme anwendbar sein soll, wurde der Spraylet Code dahingehend modifiziert, daß er Zündverzugszeiten berechnen kann, die über die Tropfenlebensdauer hinaus gehen. Dies mußte auch in der CFD-Simulation berücksichtigt werden. Die Tropfentrajektorien sind in ihrer Länge natürlicherweise durch die Verdampfungszeit der Tropfen begrenzt. Da der Spraylet Code aber über die Verdampfungszeit eines Tropfens hinaus rechnet, werden auch über die Verdampfungszeit hinaus Randbedingungen, also Trajektorien, benötigt. Die Trajektorien müssen also verlängert werden. Dies Problem konnte nur dadurch gelöst werden, daß die Tropfenlebensdauer verlängert wurde, weil die Trajektorienberechnung im Lagrange Kontext stattfindet. Die Lösung wurde dadurch erreicht, dass das Verdampfungsmodell modifiziert wurde. Das Standardmodell folgt dem d^2 -Gesetz. Nach der Aufheizung auf Siedetemperatur wird die zeitliche Änderung der Tropfenoberfläche als konstant angenommen. Da die Tropfenoberfläche mit d^2 skaliert gilt $d/dt (d^2) = -k$, mit k als Verdampfungskoeffizient.

Entsprechend folgt $d(t) = -(k t)^{0,5} + d_0$ mit d_0 als Anfangsdurchmesser. Dieses Modell wurde dahingehend modifiziert, dass die Tropfen nicht mehr bis auf Null verdampfen, sondern eine minimale, nichtverdampfende Restgröße haben. Mit diesem inerten Tropfenkern können Trajektorien beliebig verlängert werden. Der nichtverdampfende Kern ist sehr klein gegen die Anfangstropfengröße, damit er in der Massenbilanz vernachlässigt werden kann.

Zur Durchführung oben beschriebenen Rechnungen benötigt man Zugriff auf die internen numerischen Lösungsdatensätze der jeweiligen CFD Simulation. Unter FLUENT konnten die notwendigen Datensätze extrahiert werden. Die AVL Fire Umgebung läßt einen Zugriff auf die internen Daten nur begrenzt zu. Es wurden aber Gespräche mit dem Projektpartner AVL-List GmbH (ESA-MAP CPS-Projekt) geführt. Hierbei wurde in Aussicht gestellt, daß der FIRE-Code bis Mitte 2006 die benötigten Ausgabedaten zur Verfügung stellen kann.

3.5 CFD Modellierung der Einspritzkonfiguration der HWK-Experimente

Die Modellierung der HWK-Einspritzkonfiguration in beiden CFD-Umgebungen (FLUENT und AVL-FIRE) ist abgeschlossen.

3.6 Simulation der Sprayzündung und Vergleich mit HWK-Experimenten

Die Arbeiten können erst nach Erreichen des Zieles aus 1.5 beginnen. Allerdings wurden als Vorbereitung die einzelnen Softwarekomponenten entwickelt und getestet. Dazu gehören zunächst die unter 1.6 beschriebenen Bearbeitungsschritte und die Implementierung eines Dummy-Spraylet Moduls als Ersatz für die echten Spraylet Rechnungen.

Das Dummy Spraylet Modul benutzt ein sehr einfaches Zündkriterium, basierend auf der Überschreitung einer Grenztemperatur, um Zündverzugszeiten zu berechnen. Dabei sind die Eingangs- und Ausgangsdaten identisch mit denen des echten Spraylet-Codes, sodaß ein Austausch leicht möglich ist. Testweise wurden Rechnungen mit jeweils 1000 Trajektorien durchgeführt und die Zündorte ermittelt. Die Resultate lassen sich z.B. als 3D Plot darstellen (Abb. 23), oder auch als Wahrscheinlichkeitsdichte entlang der drei Raumrichtungen (Abb. 24).

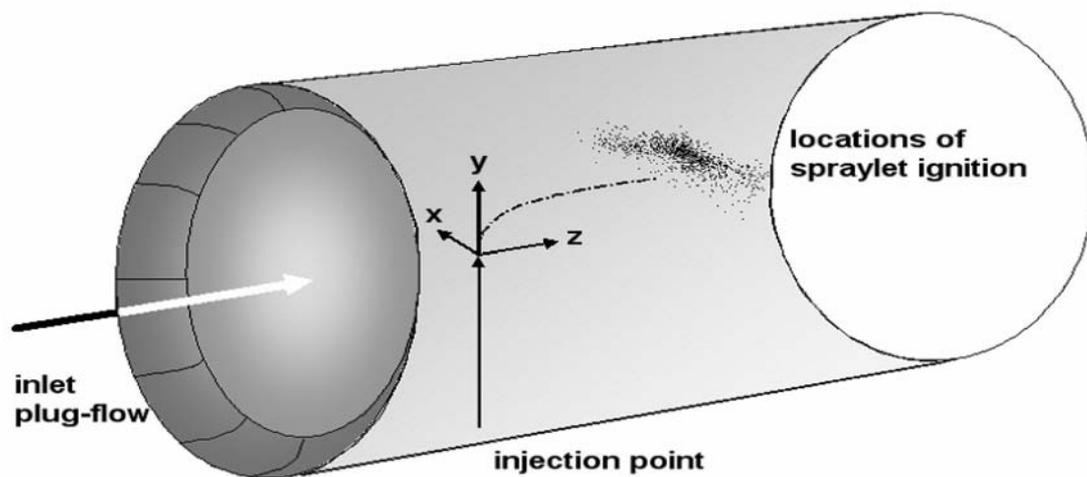
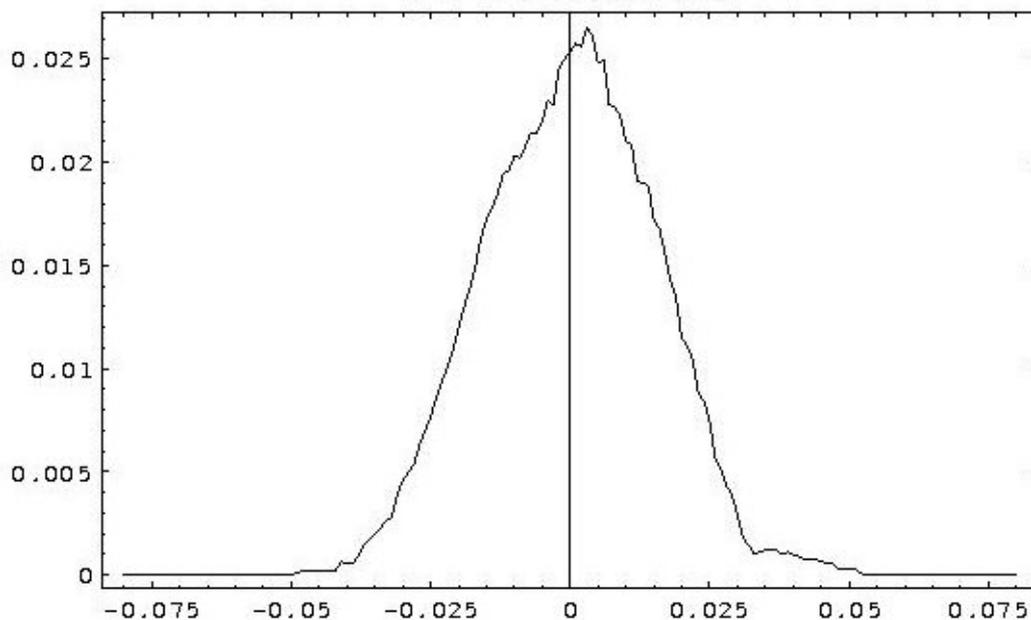
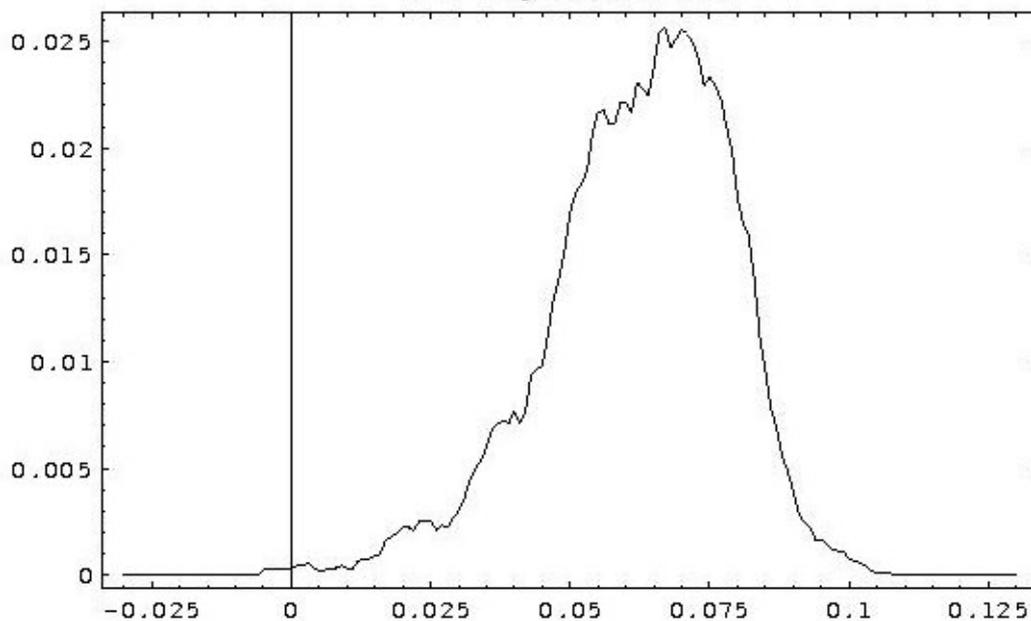


Abb. 23: 1000 Zündorte innerhalb einer simulierten HWK Experimentumgebung

PDF in x-Coordinate



PDF in y-Coordinate



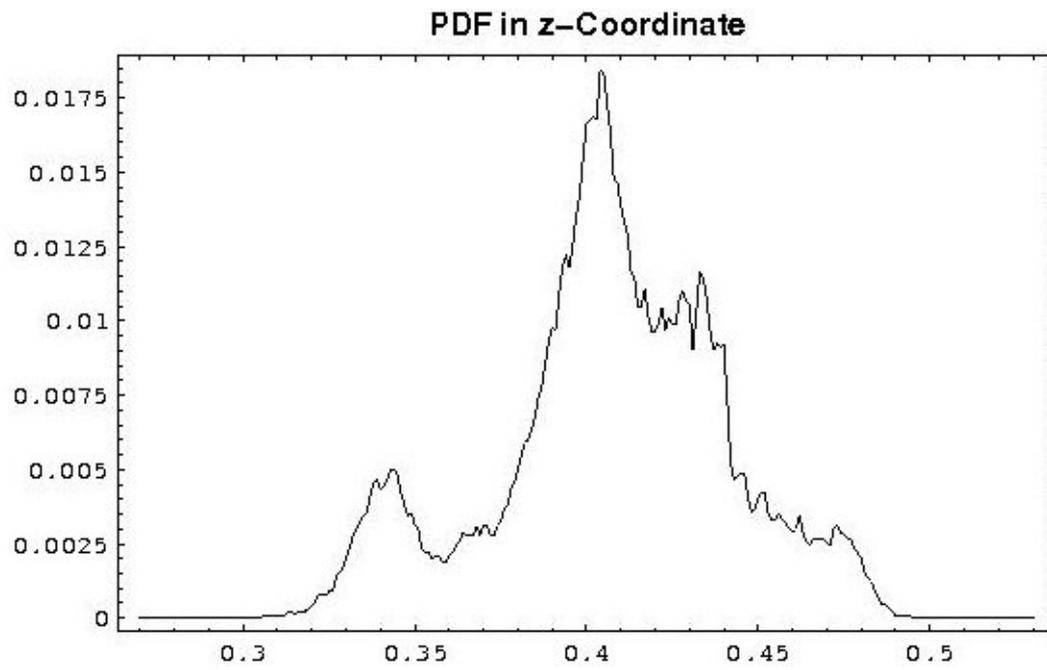


Abb. 24: Dichte der Zündwahrscheinlichkeit, jeweils über 2 Raumrichtungen integriert