

Neue Trends in der Verbrennungssimulation

U. Schmidt, I. Cremer, G. Schroth, Darmstadt

1. Einführung

Als vor 20 Jahren die ersten kommerziellen CFD-Programme auf den Markt kamen, gehörten Feuerraumsimulationen bereits zu den Zielanwendungen. Berechnungsprojekte waren damals limitiert durch geringe Rechnerkapazitäten. Daher konnten meist nur relativ ressourcenschonende Reaktionsmodelle, wie z.B. das Eddy Dissipation Model, benutzt werden.

Dank der kontinuierlichen Weiterentwicklung der CFD-Software und leistungsstarker Rechner zu wirtschaftlich vertretbaren Preisen, gibt es bei der Verbrennungssimulation heute neue Schwerpunkte im Bereich der Modellierung von Nichtgleichgewichtsschemie und Mehrphasenströmungen. Dadurch werden neue Anwendungen, wie beispielsweise detaillierte Schadstoffstudien in technischen Flammen und Konzeptoptimierungen von direkteinspritzenden Dieselmotoren, für die numerische Strömungssimulation erschlossen.

2. Mathematische Modellierung

Die numerische Strömungssimulation, oder engl. Computational Fluid Dynamics (CFD), beruht auf der Lösung der Erhaltungs- bzw. Transportgleichungen für die Masse, den Impuls, die Energie und die verschiedenen Speziesmassenbrüche. Bei turbulenten Strömungen werden neben diesen Gleichungen, in der Regel in Reynolds-gemittelter Form, zusätzlich Transportgleichungen zur Modellierung der Turbulenz gelöst. Eine direkte Auflösung der kleinsten turbulenten Längenskalen ist auch mit den heutigen Computersystemen nicht praktikabel. Die meisten kommerziellen CFD-Programme benutzen Finite Volumen Verfahren zur Lösung der genannten Gleichungen.

Die Reynolds-gemittelte Erhaltungsgleichung für den k-ten Speziesmassenbruch \bar{Y}_k lässt sich in differentieller Form wie folgt formulieren:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{Y}_k) \right\} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u''_i Y''_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_k \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \bar{R}_k \quad (1)$$

Die Verbrennungsmodellierung in der Gasphase setzt nun an bei der Beschreibung des Quellterms \bar{R}_k .

Abhängig von der Geschwindigkeit der zu beschreibenden Reaktionen und dem Mischungszustand zwischen Brennstoff und Oxidationsmittel werden unterschiedliche Modellansätze benutzt.

Tabelle 1: Gasphasenverbrennungsmodelle in in FLUENT [1]

	Vorgemischte Flammen	Diffusionsflammen	Partiell vorgemischte Flammen
Gleichgewichts- chemie	Zimont Modell (Reaktionsfortschritts- variable)	Mischungsbruch- modell	Zimont-/ Mischungsbruch Ansatz
	Eddy Dissipation Modell (Magnussen and Hjertager)		
Detaillierte Chemie		Flamelet Modell	
	Finite Rate Modell		
	Eddy-Dissipation-Concept Modell PDF Transport Modell		

Die ersten Verbrennungsmodelle basierten auf der Annahme des chemischen Gleichgewichts. Modelle, die detaillierte Reaktionskinetik berücksichtigen, erfordern einen deutlich höheren Rechenaufwand.

Tabelle 1 fasst beispielhaft die im kommerziellen CFD-Programm FLUENT implementierten Verbrennungsmodelle für die Gasphase zusammen.

3. Verbrennungsmodelle für kinetisch dominierte Prozesse

Im Zuge kontinuierlich wachsender Rechnerleistung ist in den letzten Jahren das Interesse an Modellen für die Berücksichtigung detaillierter Reaktionskinetik gewachsen.

Kinetisch dominierte Prozesse in laminaren Flammen können mit dem Finite Rate Modell erfasst werden. Ähnlich wie die übrigen Modelle für Nicht-Gleichgewichtschemie benötigt das Modell einen Reaktionsmechanismus mit Arrheniusfaktoren zur Beschreibung der zu berücksichtigenden Reaktionen.

Bei turbulenten Flammen stehen demgegenüber drei verschiedene Modelle für die Verbrennungssimulation unter Berücksichtigung detaillierter Reaktionskinetik zur Auswahl:

Flamelet Modell

Eine Methode, um bei akzeptablem Rechenaufwand das turbulente Strömungsfeld mit detaillierter Reaktionskinetik zu kombinieren, stellt das sog. Flamelet-Modell dar. Es beruht auf der Annahme, dass sich die turbulente Diffusionsflamme auf einer Mikroskala aus vielen einzelnen laminaren Gegenstromdiffusionsflammen, sog. Flamelets, zusammensetzt. Die Recheneffizienz beruht genauso wie beim Mischungsbruchmodell auf der Entkopplung von Reaktions- und Strömungsberechnung. Das Modell ist geeignet für die Abbildung moderater Nicht-Gleichgewichtseffekte, welche auf aerodynamische Streckung, wie z.B. bei der NO_x-Bildung, zurückgehen.

Eddy Dissipation Concept Modell

Dem Eddy Dissipation Concept (EDC) Modell liegt die Annahme zugrunde, dass ein Teil des Fluids in einer Zelle gut gemischt und hauptverantwortlich für die chemische Reaktion ist. Diese gut gemischten Anteile in einer Zelle, die sogenannten „feinen Skalen“, werden im Modell als idealer Rührkessel betrachtet, so dass sich die Erhaltungsgleichungen vereinfachen. In den vereinfachten Spezieserhaltungsgleichungen werden die Quellterme aus einem Reaktionsmechanismus in Arrhenius-Form berechnet. Das Gleichungssystem zur Beschreibung der feinen Skalen wird instationär mit Hilfe des ISAT Algorithmus [2] gelöst.

Da bei detaillierten Reaktionsmechanismen, die typischerweise einige Dutzend Spezies und einige Hundert Reaktionen beinhalten, eine vollständige Berechnung der Kinetik vor der Strömungssimulation nicht praktikabel ist, wird beim ISAT Algorithmus eine Referenztable parallel zur Strömungsberechnung sukzessive mit Reaktionsdaten gefüllt (In-situ Adaptive Tabulation). Wenn in einer Zelle bei gegebener Spezieszusammensetzung, Temperatur und Druck, im folgenden Zusammensetzungsvektor ϕ^0 genannt, nach einem Zeitschritt dt der Vektor ϕ^1 bestimmt werden soll, prüft der Löser, ob es in der ISAT Tabelle innerhalb einer Fehlertoleranz einen Eintrag für ϕ^0 gibt. Wenn das der Fall ist, wird Zusammensetzungsvektor ϕ^1 durch Interpolation aus der Tabelle bestimmt. Wenn es keinen Eintrag innerhalb der Fehlertoleranz gibt, wird der neue Zustand durch direkte Integration berechnet und die Tabelle wird um einen Zustand ergänzt.

Im EDC Modell werden anschließend aus den ermittelten Speziesfeldern für die feinen Skalen, ihrer Lebensdauer und ihrem Anteil pro Zelle die Quellterme für die Reynolds-gemittelten Spezieserhaltungsgleichungen berechnet.

Mit diesem Ansatz ist es möglich, auch sehr langsame Reaktionen in turbulenten Strömungen, wie z.B. den CO Ausbrand in „quenched flames“ und die NO_x Reduktion in SNCR Systemen, zu berechnen.

PDF Transport Modell

Im Vergleich zu alternativen Verfahren, wie dem Konzept der „Presumed PDFs“, stellt die Lösung von PDF-Transportgleichungen den allgemeinsten Weg zur Bestimmung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen P dar. Aus den Navier-Stokes Gleichungen lassen sich Transportgleichungen für die zeitliche und räumliche Entwicklung der PDFs ableiten.

Die PDF Transportgleichung, die in FLUENT gelöst wird, lautet:

$$\frac{\partial \bar{\rho} P}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{V}_i P}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \overline{u_i'' | \psi} P \right) + \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left(\bar{\rho} \overline{\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i} \right) | \psi} P \right) + \frac{\partial}{\partial \psi_k} (\bar{\rho} S_k P) \quad (2)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion kann als Wahrscheinlichkeit dafür interpretiert werden, dass ein Fluidelement eine bestimmte Zusammensetzung, eine bestimmte Temperatur und

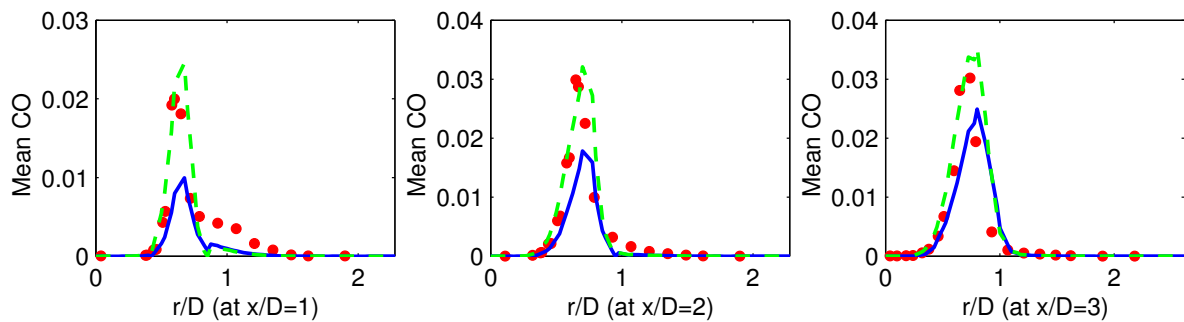


Bild 1: CO Massenbrüche über dem normierten Radius (• Messwerte, — Modified Curl und - - - IEM)

einen bestimmten Druck besitzt. Bei dieser Form von PDF, einer sogenannten Zusammensetzungs-PDF, wird zusätzlich ein Standardturbulenzmodell benötigt.

Die große Stärke dieses Ansatzes ist, dass der stark nicht lineare Reaktionsquellterm in der Speziestransportgleichung in geschlossener Form vorliegt und dass keine Modellierung der turbulenten Spezies- und Temperaturschwankungen erforderlich ist. Hingegen sind die Terme für Konvektion durch Turbulenz und molekulare Mischung (die beiden ersten Terme auf der rechten Seite von Gl. (2)) nicht geschlossen und müssen modelliert werden.

Der turbulente Konvektionsterm wird ähnlich wie bei anderen Modellen mit Hilfe der Gradienten-Diffusions-Annahme gebildet. Zur Beschreibung der molekularen Mischung von Spezies und Wärme stehen das Modified Curl Modell [3] und das IEM Modell [4] zur Verfügung.

Für die numerische Lösung der Transportgleichungen nähert man die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch eine große Anzahl diskreter Einzelwerte an, sogenannte stochastische Partikel, die einzelne Zustände der reagierenden Strömung darstellen. Die Lösung der PDF-Transportgleichungen erfolgt dann mittels eines Monte-Carlo-Verfahrens.

Anwendungsbeispiel: Flamme D

Eine Validierungsrechnung für das PDF Transportmodell wurde für die gut vermessene Flamme D durchgeführt. Es handelt sich hierbei um eine partiell vorgemischte Flamme, die jedoch aufgrund von Geschwindigkeits- und Konzentrationsunterschieden den Charakter einer Diffusionsflamme besitzt.

Im achsensymmetrischen Simulationsmodell aus 2352 Zellen wurde das Standard $k-\epsilon$ -Turbulenzmodell und der Skeletal Reaktionsmechanismus [5] verwendet. Bild 1 zeigt Plots berechneter und gemessener Kohlenmonoxidmassenbrüche über dem normierten Radius für drei verschiedene axiale Querschnitte.

4. Modelle zur Beschreibung Motorischer Verbrennung

Für einen kompletten Motorzyklus lauten die Teilprozesse und erforderlichen Modelle zu deren Beschreibung wie folgt:

- Einspritzen von Brennstoff - Spraymodell
- Kompression - Beschreibung von Netzbewegung und -verformung
- Zündung - Zündmodell
- Expansion - Verbrennungsmodell

Bis vor wenigen Jahren fehlten in fast allen kommerziellen CFD-Programmen Modelle für die Beschreibung der ersten drei Teilprozesse. In FLUENT sind heute sowohl ein Spraymodell als auch ein Modell zur Beschreibung von Netzbewegung und –verformung verfügbar.

Das Spraymodell umfasst Modelle zur Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen Tropfen, sogenannte Sekundärmodelle, sowie eine Bibliothek von Standarddüsen. Die Sekundärmodelle beinhalten Module für die Beschreibung des Aufbrechens, der Koaleszenz und der Kollision von Tropfen. Ferner existiert eine Option für sich dynamisch ändernde Widerstandsbeiwerte.

Bewegungen von abstrahierten Kolben (strukturierte Netze) können schon seit einigen Jahren mit dem Konzept des dynamischen Schichtenauf- und Schichtenabbaus abgebildet werden. In FLUENT gibt es zusätzlich zum dynamischen Schichtenauf- und -abbau, dem sogenannten dynamic layering, und der Gitterglättung, dem sogenannten smoothing, einen Algorithmus, der es erlaubt, durch Wiedervernetzung beliebige Geometrieänderungen in unstrukturierten Netzen zu beschreiben, das sogenannte local remeshing. Layering, Glättung und Neuvernetzung können zusammen verwendet werden.

Typischerweise werden die drei Algorithmen kombiniert, so dass kleine Gitterbewegung durch Knotenverschiebung abgebildet werden. Erst beim Überschreiten von bestimmten Grenzwerten (Zellgröße und -verzerrung) werden Zellschichten gelöscht oder hinzugefügt bzw. Zellbereiche neu vernetzt.

Anwendungsbeispiel:

CAT Dieselmotor

Eine Testrechnung wurde mit dem CAT Dieselmotor durchgeführt, für den Messwerte zur Verfügung stehen [6]. Dieser Motor hat eine Bohrung von 137,2 mm und einen Hub von 165,1 mm, ein Verdichtungsverhältnis von 15:1, eine Drehzahl von 1668 RPM und ein Drallverhältnis von 0,978

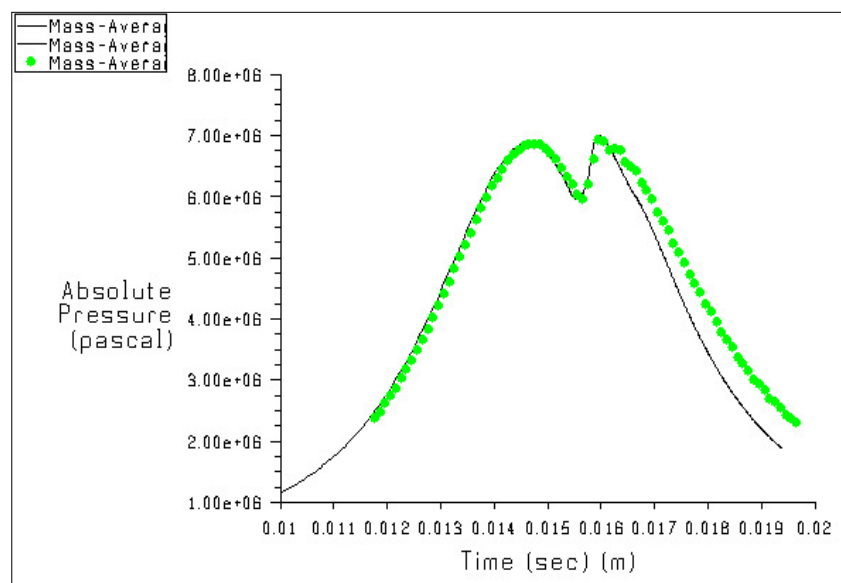


Bild 2: Plot des Absolutdrucks über der Zeit (• Messwerte, — mit FLUENT berechnet)

beim Schließen des Einlassventils. Das Modell umfasste am oberen Totpunkt 3000 Zellen und am unteren Totpunkt 25000 Zellen. Von den schon diskutierten Modellen wurden das Layering und das Spraymodell mit der Wave Option verwendet. Ferner wurde über die Programmierschnittstelle in FLUENT das Zündverzugsmodell von Hardenburg and Hase [7] implementiert. Bild 2 stellt einen Vergleich des gemessenen und berechneten Druckverlaufs über einen kompletten Motorzyklus dar.

5. Zusammenfassung

Die Betrachtung der in einem kommerziellen CFD-Programm verfügbaren Verbrennungsmodelle hat gezeigt, dass ein Trend hin zu komplexeren Modellen mit Berücksichtigung detaillierter Reaktionskinetik festzustellen ist. In diesem Zusammenhang ist die Implementierung des PDF Transport Modells hervorzuheben, das derzeit einen der allgemeingültigsten Lösungsansätze für die Turbulenz-Chemie-Schließungsproblematik darstellt. Die neue Klasse komplexer Modelle erlaubt es heute, Schadstoffbildung und -reduktion in Feuerungsanlagen zu berechnen.

Durch die Weiterentwicklung der CFD-Programme im Bereich von Mehrphasenmodellierung und Netzbewegung ist die motorische Verbrennung heute ein neues Anwendungsfeld für die Verbrennungssimulation.

6. Referenzen

- [1] FLUENT 6.1 User's Guide Volume 2, Fluent In., February 2003.
- [2] S. B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in-situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modeling*, 1:41-63, 1997.
- [3] J. Janicka, W. Kolbe, and W. Kollmann. Closure of the transport equation for the pdf of turbulent scalar fields. *Journal Non-Equilibrium Thermodynamics*, 4:47, 1978.
- [4] C. Dopazo and E. E. O'Brien. Functional formulation of nonisothermal turbulent reactive flows. *Phys. Fluids*, 17:1968, 1975.
- [5] T. Peeters. Numerical Modeling of Turbulence Natural-Gas Diffusion Flames. PhD thesis, Delft Technical University, Delft, The Netherlands, 1995.
- [6] K. V. Tanin et al, The Influence of Boost Pressure on Emissions and Fuel Consumptions of a Heavy-Duty Single-Cylinder D.I. Diesel Engine, SAE Technical Papers Series, 1999-01-0840.
- [7] H. O. Hardenberg, F. W. Hase, An Empirical Formula for Computing the Pressure Rise Delay of a Fuel from its Cetane Number and from the relevant Parameters of Direct-Injection Diesel Engines, SAE Technical Papers Series, 790493.