

Teilprojekt

D2

Effiziente parallele Algorithmen für die numerische
Simulation stark phasengekoppelter, disperser
Mehrphasenströmungen

2.1 Teilprojekt D2

Effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen

2.1.1 Antragsteller

Dr.-Ing. Thomas Frank *

29.01.1963

bis 2002:

Professur Technische Thermodynamik
Forschungsgruppe Mehrphasenströmungen

Prof. Dr. Günter Wozniak

28.06.1958

Professur Strömungsmechanik

Fakultät für Maschinenbau und Verfahrenstechnik

Technische Universität Chemnitz

09107 Chemnitz

Tel.: (0371) 531-4643

Fax: (0371) 531-4644

Email: DrTh.Frank@arcor.de

(0371) 531-1707

(0371) 531-1847

guenter.wozniak@mbv.tu-chemnitz.de

* Die Stelle von Herrn Dr. Th. Frank als wissenschaftlicher Assistent an der TU Chemnitz war befristet bis zum 30.09.2003, wobei er mit 1.1.2003 in die Industrie wechselte.

2.1.2 Projektbearbeiter

Die Bearbeitung wurde von DI Klaus Pachler im Rahmen der im vorangegangenen Antrag definierten Ziele weitergeführt, wobei sich der zu betrachtende Zeitraum von 2002 bis Mitte 2003 erstreckt.

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Parallelisierung der Lagrange Methode für instationäre Vorgänge mit starker Phasenkopplung wurde im Zeitraum 1999 bis 2001 erarbeitet. Dabei wurde gezeigt, dass sowohl der Navier–Stokes Löser die erforderliche Genauigkeit erreicht, als auch dass der Partikellöser instationär verwendbar ist [8]. Daraus ergab sich die Anforderung den aktuellen Algorithmus auch für andere Anwendungen, wie beispielsweise für die Tropfenströmung mit Stoff- und Wärmeübergang oder die “Large Eddy Methode“, zu verwenden. Ein neues numerisches Verfahren muss vor allem anhand realer Berechnungsbeispiele seine theoretischen Vorteile unter Beweis stellen. Gerade die Parallelisierung von Strömungslösern liefert bei ingenieurtechnischen Anwendungen nicht immer die erwarteten Effizienzsteigerungen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Die Vorgehensweise im Berichtszeitraum teilt sich in die Weiterentwicklung des Lagrange Löser infolge eines Verdunstungsmodells für innermotorische Verbrennungsvorgänge und die Anwendung bei einer Kohlestaubbeindüsung und bei einer LES–Simulation eines

Gaszyklons, siehe Pachler [8].

Hier soll die algorithmische Implementierung eines Verdunstungsmodells exemplarisch anhand eines Einkomponentenmodells (Uniform-Temperatur-Modell) gezeigt werden, wobei die Parallelisierung mit Hilfe von MPI berücksichtigt wird. Es wird auf die Ansätze von Dukowicz [9] und Ranz und Marshall [10] zurückgegriffen. In diesem Modell wird die Lewis-Zahl¹ für die Grenzschicht gleich eins gesetzt (wie beim d^2 -Gesetz), was die Berechnung einer Diffusionszahl in diesem Modell überflüssig macht. Diese Annahme ist eine starke Vereinfachung, weil sich im allgemeinen die Lewis-Zahl über die Tropfenlebensdauer und radial innerhalb des Tropfens von 50 bis etwa 1 verändert. In der Grenzschicht der Gasphase schwankt die Lewis-Zahl bezogen auf die Referenzwerte zeitlich von 3 bis 1, siehe Kneer [11].

Der Wärmeübergang eines Tropfens bei Zwangskonvektion wird durch folgende semiempirische Korrelation von Ranz und Marshall [10] beschrieben:

$$Nu = 2 + 0,6 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.1)$$

Gleichung (2.1) beschreibt einen stationären Wärmeübergang², der auf einer globalen Betrachtung des Partikelschwarms beruht. Die Berechnung behandelt jedoch diskrete Tropfen innerhalb eines numerischen Gitters, was zu numerischen Problemen bei stark transienten Verdunstungsprozessen führen kann. Außerdem wird ein für den Zeitschritt eingefrorenes Strömungsfeld angenommen, um eine explizite Kopplung Strömung / Tropfen zu ermöglichen. Die daraus resultierenden Zeitschrittweiten werden jedoch aus Effizienzgründen nicht immer berücksichtigt.

2.4.13.1 Erhaltungsgleichung für Enthalpie und Masse eines Tropfens

Die Verdunstungsmodellierung wird anhand der Filmtheorie, siehe Baehr [12], unter der Annahme einseitiger Diffusion durchgeführt. Die Tropfenenergiegleichung für das Uniform-Temperatur-Modell lautet:

$$\frac{d}{dt}(m_d \bar{h}_d) = h_{v,s} \frac{dm_d}{dt} + Q \quad (2.2)$$

Gleichung (2.2) beschreibt die Änderung der mittleren Tropfenenthalpie infolge der zugeführten Energie Q und der Verdunstung, siehe erster Term auf der rechten Seite.

Die latente Wärme h_L lässt sich als Enthalpiedifferenz zwischen der dampfförmigen und der flüssigen Phase an der Grenzfläche (Tropfenoberfläche) darstellen ($h_L = h_{v,s} - h_{d,s}$). Wenn man die Dampfenenthalpie $h_{v,s}$ in Gleichung (2.2) einsetzt, die linke Seite von Gleichung (2.2) nach der Kettenregel differenziert und die Annahmen des Uniform-Temperatur-Modells, nämlich $\bar{h}_d \simeq h_{d,s}$, $T_d \simeq T_{d,s}$ und $c_{p,d} = \text{const}$ für den ganzen Tropfen, verwendet, erhält man mit $\bar{h}_d \simeq c_{p,d} T_d$:

$$(m_d c_{p,d}) \frac{dT_d}{dt} = h_L \frac{dm_d}{dt} + Q \quad (2.3)$$

¹ $Le = \frac{\lambda}{\rho c_p \Gamma}$, quantifiziert das Verhältnis der thermischen zur stofflichen Diffusion.

² Die Nusselt-Zahl kann auch über das Verhältnis einer für den Wärmeübergang charakteristischen Länge L zur thermischen Grenzschichtdicke ausgedrückt werden. $Nu = L/\delta_T$

Gleichung (2.3) verbindet die Energieerhaltung mit der Verdunstung. Die zugeführte Wärme Q wird mit der Korrelation von Ranz und Marshall [10] und der Nusselt-Zahl nach Gleichung (2.1) berechnet:

$$Q = \pi d_d \lambda_{v,ref} (T_{inf} - T_S) Nu \quad (2.4)$$

Die Bestimmung der Nusselt-Zahl in Gleichung (2.4) erfordert Referenzwerte nach Sparrow [13] für die spezifische Wärme oder die thermische Leitfähigkeit.

Der Stoffübergang dm_d/dt von Gleichung (2.3) wird nach Dukowicz [9] folgendermaßen umgeformt:

$$\frac{dm_d}{dt} = Q \frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S} \quad \text{wobei auch} \quad \frac{dm_d}{dt} = 4\pi \rho_d r_d^2 \frac{dr_d}{dt} \quad \text{gilt} \quad (2.5)$$

$\dot{m}_{v,s}$ ist der lokale Stofffluss, q_S ist der lokale Wärmestrom an der Phasengrenzfläche und A ist die Tropfenoberfläche. Mit $Q = -q_S A$ und $\dot{m}_d = -\dot{m}_{v,s} A$ lässt sich Gleichung (2.3) umformen:

$$(m_d \bar{c}_{p,d}) \frac{dT_d}{dt} = Q \left(1 + h_L \frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S}\right) \quad (2.6)$$

Der Dampfmassenstrom $\dot{m}_{v,s}$ bzw. der Wärmestrom q_S an der Tropfenoberfläche lässt sich nach der Stofferhaltung bzw. dem Fickschen Gesetz über Gradientenansätze approximieren:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{i,s} &= (\rho_i \vec{v} - \rho \Gamma \nabla y_i)_S \quad \text{mit} \quad \dot{m}_{A,s} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \vec{v} \simeq 0 \\ \dot{m}_{v,s} &= -(\rho \Gamma)_S \frac{\nabla_S y_v}{1 - y_{v,s}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$q_S = -\lambda_S \nabla_S T \quad (2.8)$$

Gleichungen (2.7) und (2.8) enthalten nur noch den unbekanntem Temperaturgradienten $\nabla_S T$, der mit Hilfe der Filmerhaltungsgleichungen berechnet wird.

Die Modellierung von Dukowicz besteht im Wesentlichen aus der Formulierung von Analogien zwischen Stoff- und Wärmefluss im Bereich des den Tropfen umhüllenden Dampffilms zur Bestimmung des Ausdrucks $\dot{m}_{v,s}/q_S$ in Gleichung (2.6). Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Spezieskonzentration i (Luft und Dampf) und Energie im Film nach Dukowicz [9] sind:

$$\nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.9)$$

$$(\rho \vec{v}) \nabla Y_i = \nabla(\rho \Gamma \nabla Y_i) \quad (2.10)$$

$$(\rho \vec{v}) \nabla h = \nabla \frac{\lambda}{c_p} \nabla h + \nabla(\rho \Gamma - \frac{\lambda}{c_p}) \sum_i h_i \nabla Y_i \quad (2.11)$$

Wenn man die Gleichungen (2.9), (2.9) und (2.11) umformt und $Le=1$ annimmt, erhält man eine Beziehung zwischen Spezies- und Enthalpiegradienten. Damit lässt sich nun

der gesuchte Temperaturgradient $\nabla_S T$ ausdrücken, was folgende Beziehung für den Ausdruck $\dot{m}_{v,s}/q_S$ aus Gleichung (2.5) ergibt:

$$\frac{\dot{m}_{v,s}}{q_S} = - \frac{B_Y}{h_{inf} - h_S - (h_{v,s} - h_{A,s})(Y_{v,inf} - Y_{v,s})} \quad \text{mit } B_Y = \frac{Y_{v,s} - Y_{v,inf}}{1 - Y_{v,s}} \quad (2.12)$$

Im Programm ermöglicht Gleichung (2.12) die Bestimmung der Durchmesser- bzw. Temperaturänderung, was numerisch mit einem Runge-Kutta-Algorithmus vierter Ordnung durchgeführt wird. B_Y wird als Massenübergangszahl bezeichnet und auch zur Modifikation des Wärmestroms, Gleichung (2.4), infolge Verdunstung verwendet. Bei Erreichen der Siedetemperatur des Tropfens geht die gesamte zugeführte Energie in den Verdunstungsprozess über, wobei der rechte Klammerausdruck in Gleichung (2.6) Null wird. Für den Fall $Y_{v,inf} = 0$ und einer beliebigen Le-Zahl erhält man für die Massenübergangszahl:

$$B_Y = \left(\frac{\lambda}{\rho \Gamma c_p} \right)_S \frac{h_{A,inf} - h_{A,s}}{h_L} \quad (2.13)$$

2.4.13.2 Erhaltungsgleichung für den Speziestransport

Verdunstungsprozesse führen zu einem Phasenübergang, wobei die vorher flüssigen Tropfenanteile als Dampf im Trägerfluid eine eigene Spezies darstellen. Es gibt also neben der ursprünglichen Spezies Luft, die wiederum im Wesentlichen aus rund 78% Stickstoff, 21% Sauerstoff und dem Rest aus Edelgasen besteht, eine zweite Spezies Dampf, die in der Form eines Massenbruchs quantifiziert wird:

$$\bar{Y} = \frac{\delta m_p}{\bar{\rho} V} \quad (2.14)$$

$\bar{\rho}$ ist die Mischdichte bezogen auf ein Kontrollvolumen, die über eine modifizierte Gaskonstante berechnet wird, δm_p ist die Dampfmasse, die aus der Verdunstung der Tropfenphase entstanden ist und Y ist der Massenbruch Dampfmasse bezogen auf die Gesamtmasse des Kontrollvolumens. Um die räumliche und zeitliche Ausbreitung der Dampfphase darzustellen, verwendet man eine Bilanzgleichung für Y in differentieller Form. Es gelten die gleichen Regeln bezüglich Mittelung infolge der Turbulenzmodellierung, wie beispielsweise für die Enthalpiegleichung oder die Turbulenzgleichungen (RANS-Ansatz). \bar{Y} ist der Mittelwert des Massenbruchs, siehe Gleichung (2.14), α_F ist die Volumenfraktion der Fluidphase und σ_f ist die turbulente Schmidt-Zahl für die Speziesgleichungen:

$$\frac{\partial (\alpha_F \bar{\rho} \bar{Y})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_F \bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_F \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_j} \right] + \bar{Q}_p V (1 + \bar{Y}) \quad (2.15)$$

\bar{Q}_p ist der Stoffübergang von der Partikel- in die Fluid-Phase. Der vorletzte Term in Gleichung (2.15) ist der Quellen-Senkenterm der Speziestransportgleichung, während der letzte Term die Änderung der Gesamtfluidmasse (Luft plus Dampf) berücksichtigt und zum Polkoeffizienten addiert wird. Die Überprüfung der korrekten Bilanzierung lässt sich leicht über einen Vergleich zwischen dem Massenstrom aus der Tropfenphase und der im Fluid vorhandenen Dampfmasse durchführen. In der Regel sind die verdunsteten Massen recht klein gegenüber der Gesamtgasmasse, was jedoch Fehler, vor allem in Hinblick auf die Simulation von Zünd- und Verbrennungsvorgängen, keineswegs vernachlässigbar macht.

2.4 Ergebnisse

Zur Validierung des Verdunstungsmodells wurde eine Dieseleinspritzung in einer Messkammer nachgerechnet. Der Vergleich wurde anhand der Ergebnisse von zwei kommerziellen CFD-Lösern bzw. von Messungen durchgeführt. Abb. 2.1 zeigt das Berechnungsgitter und den flüssigen Dieselstrahl.

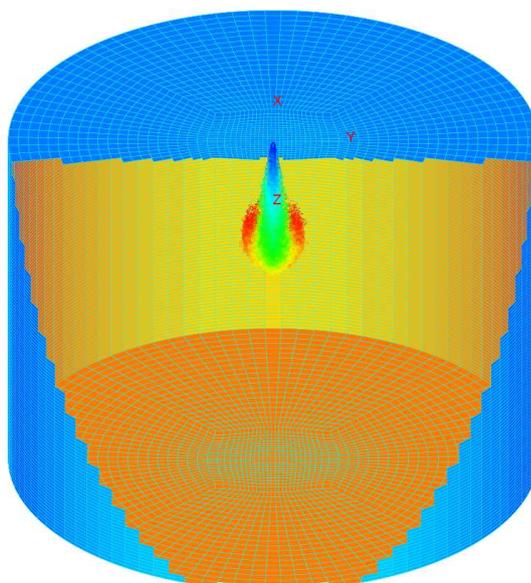


Abbildung 2.1: Berechnungsgitter mit Strahlstartposition

Klingsporn [14] hat in seiner Arbeit Berechnungen mit Fluent durchgeführt, die er mit Messungen von Reuter [15], Koß [16] und Breuer [17] verglichen hat. In dieser Arbeit werden Eindringtiefen mit obigen Messungen und Verdunstungsraten mit der Simulation von Klingsporn [14] verglichen. Abb. 2.2 vergleicht berechnete Strahleindringtiefen von FIRE und Mistral-3D mit Messdaten. Die Berechnung hinkt in der Zeit von 0,1 bis 0,5 ms der Messung nach, was durch mögliche Unterschiede der Rand- und Anfangsbedingungen zu erklären wäre. Die Startphase der Einspritzung (bis etwa 0,1 ms) wird gut wiedergegeben, während der Mittelteil (von 0,1 bis 0,5 ms) eine zu kurze Eindringtiefe aufweist. Der Endteil (von 0,5 bis 1,0 ms) zeigt wegen der Parallelität zwischen den Verläufen von Rechnung und Messung eine gute Übereinstimmung. Die Unterschiede zwischen FIRE und Mistral-3D sind auf unterschiedliche Gasgeschwindigkeiten und Totalviskositäten zurückzuführen. Abb. 2.3 vergleicht Verdunstungsraten zwischen Fluent [14], FIRE und Mistral-3D, wobei Fluent und Mistral-3D einen höheren Stoffübergang als FIRE aufweisen. Als Referenz wird die akkumulierte Einspritzmenge dargestellt. FIRE und Mistral-3D verwenden das gleiche Verdunstungsmodell, was hier gut zum Ausdruck kommt, wobei, wie schon erwähnt wurde, FIRE die Gasphase realistischer abbildet. Die Verteilung der totalen Viskosität erreicht die größten Werte in der Grenzschicht zwischen Tropfen- und Gasphase wegen der großen Geschwindigkeitsgradienten. Im Nahbereich des Spritzlochs bzw. des Einlasses bildet sich eine rotationssymmetrische Zone erhöhter turbulenter Viskosität, die dem Gebiet des größten integralen Längen- bzw. Zeitmaßstabs entspricht.

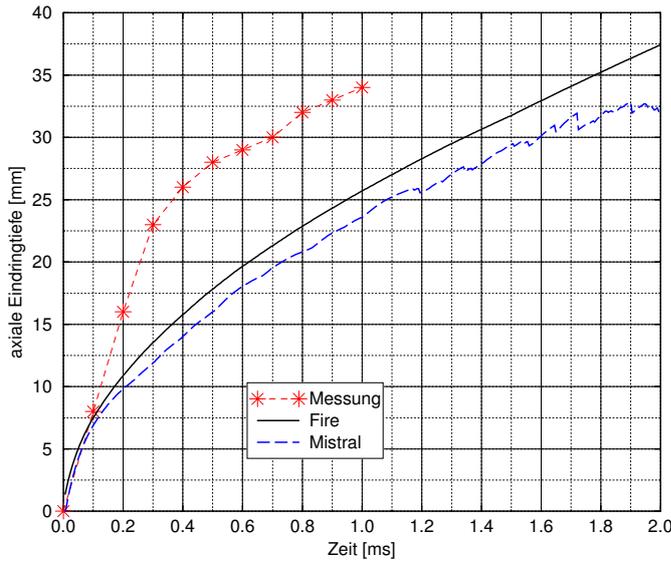


Abbildung 2.2: Vergleich der Strahleindringtiefen

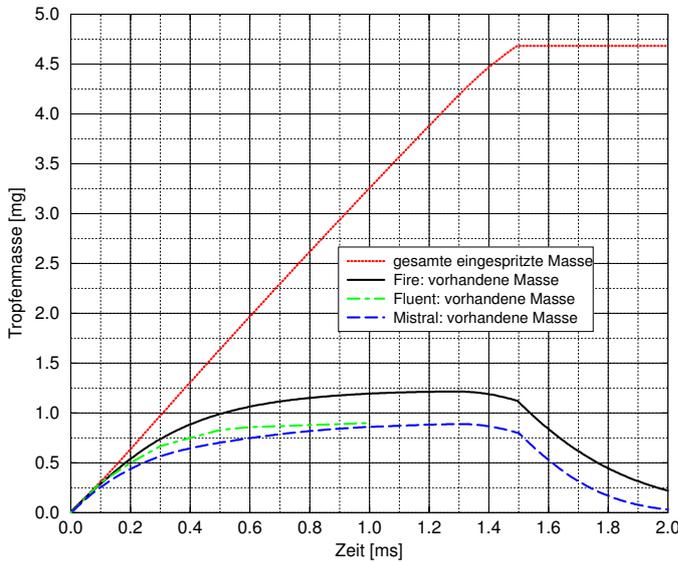


Abbildung 2.3: Vergleich der Verdunstungsraten

Mistral-3D zeigt sowohl in der Gas- als auch in der Tropfenphase ein ähnliches Verhalten wie FIRE, wobei sich Unterschiede einerseits durch die unterschiedliche Behandlung der Gasdichte, andererseits durch Unterschiede infolge der Turbulenzproduktionsrate ergeben. Die maximale Gasgeschwindigkeit von rund 50 m/s liegt deutlich unter dem Wert von FIRE mit knapp 80 m/s, was Unterschiede im Tropfentransport verursacht. Das Druckfeld beider Codes zeigt große Übereinstimmung. In Abb. 2.4 werden die Gastemperatur, die etwas über den Werten von FIRE liegt, sowie der Kraftstoffmassenbruch von der Dampfphase dargestellt.

Die Partikelphase wird nach einem Mittelungsprozess wie ein Kontinuum dargestellt, wobei auch Schwankungsgrößen, wie die w -Geschwindigkeit in Abb. 2.6 angezeigt werden. In Abb. 2.5 erkennt man aus der räumlichen Tropfengrößenverteilung, dass die größten Tropfen an der Strahlspitze zu finden sind, was typisch für eine vorgegebene Starttropfengrößenverteilung ist. Bei Verwendung eines Aufbruchmodells würde man

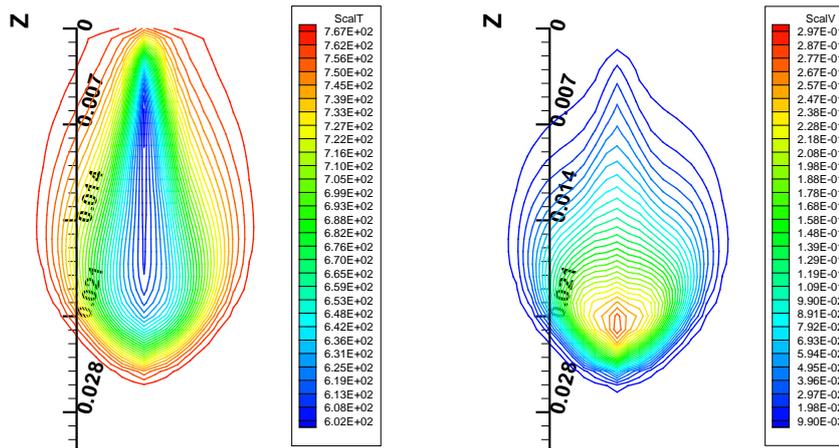


Abbildung 2.4: links mittlere Gastemperatur, rechts Kraftstoffmassenbruch bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

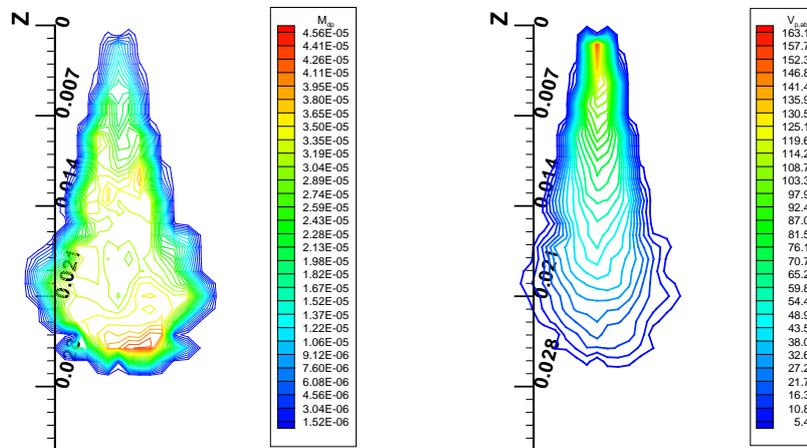


Abbildung 2.5: links mittlerer Tropfendurchmesser d_{10} , rechts mittlere Tropfengeschwindigkeit bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

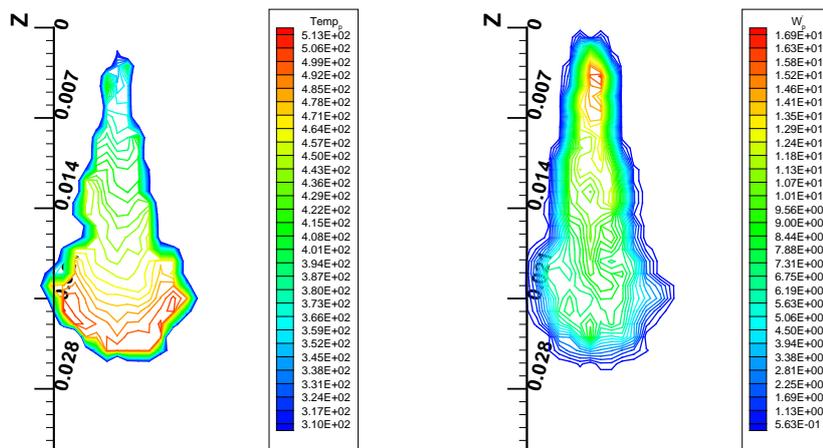


Abbildung 2.6: links mittlerer Tropfentemperatur, rechts mittlere Tropfenschwunggeschwindigkeit in z-Richtung bei 1 ms nach SOI, zur Orientierung vertikaler Maßstab in Meter, Berechnung mit MISTRAL-3D

keine so ausgeprägte Sortierung bezüglich der Lage anhand der Tropfengrößen feststellen können.

Der maximale Impulseintrag vom Einspritzstrahl in die Gasphase kann nahe dem Spritzloch angenommen werden. Mit zunehmender Gasphasendichte werden die Tropfen stärker abgebremst. Kleine Tropfen geben schneller als große Tropfen den Eigenimpuls an die Gasphase ab. Am Ende der Einspritzung und im vorderen Bereich des Strahls werden die Tropfen hauptsächlich von der vorher beschleunigten Gasphase transportiert, während sich stromaufwärts die Tropfenphase deutlich schneller als das Gas bewegt. Ohne Phasenwechselwirkung wird die Eindringtiefe kürzer, die Verdunstungsrate wegen der fehlenden Kühlung der Gasphase jedoch deutlich größer.

Die Simulation wurde mit einem einheitlichen Euler-Zeitschritt von $\Delta t = 5.E-6$ durchgeführt. Der Lagrange-Löser benötigte durchschnittlich 10 bis 20 Subzeitschritte für die Integration der Tropfen. Die Anzahl der Subzeitschritte wird wesentlich von der Stärke der Phasenwechselwirkung und der Stokes-Zahl bestimmt. Die maximale Anzahl der Rechenpartikel betrug etwa 15 000. Die Berechnung mit Mistral-3D wurde auf dem CLIC unter 8, 16 und 32 Prozessoren durchgeführt. Bei gleichbleibender Gesamtzahl eingespritzter Tropfen wurden Effizienzen von 50, 30 und 12 % für den Partikellöser erreicht. Der Grund für den starken Abfall der parallelen Leistung bei 32 Prozessoren liegt in der geringen Gesamtlast, was wiederum zu großen Lastunterschieden zwischen den einzelnen Prozessoren führt. Außerdem musste für diesen Testfall aus technischen Gründen auf das langsamere Fast-Ethernet Netzwerk ausgewichen werden. Trotzdem erkennt man, dass durch das Verdunstungsmodell mehr Rechenleistung am Einzelknoten notwendig ist, was die Effizienz bis zu einer gewissen netzwerkabhängigen Anzahl von Prozessoren verbessert.

Literaturverzeichnis

- [1] Th.Frank, K.Bernert, K.Pachler, H.Schneider:
Efficient Parallel Simulation of Disperse Gas-Particle Flows on Cluster Computers, INTERNATIONAL PARALLEL CFD 2001 Conference, Egmond aan Zee, The Netherlands, May 21-23, 2001, pp. 1-8. To be published in : Parallel Computational Fluid Dynamics - Recent Developments and Advances, Edited by : P. Wilders, A. Ecer, J. Periaux, N. Satofuka, Elsevier Science B.V., ISBN: 0-444-50672-1, Amsterdam, NL, 2002
- [2] Th.Frank, K.Bernert, K.Pachler, H.Schneider:
MISTRAL/PartFlow-3D ein vollständig parallelisiertes Berechnungsverfahren für disperse Fluid-Partikel-Strömungen, GVC-Fachauschussitzung Mehrphasenströmungen, Kurzfassungen der Vorträge, No. 2.09, pp. 1-2, Magdeburg, 5.-7. März 2002
- [3] K.Pachler, Th.Frank, K.Bernert:
Simulation of Unsteady Gas-Particle Flows including Two- and Four-Way-Coupling on a MIMD Computer Architectur, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.-12. April 2002, pp. 418-423. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002
- [4] H.Schneider, Th.Frank, K.Pachler, K.Bernert:
A Numerical Study of the Gas-Particle Flow in Pipework and Flow Splitting Devices of Coal-Fired Power Plant, 10th Workshop on TWO-PHASE FLOW PREDICTIONS,

- Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), 9.–12. April 2002, pp. 227–236. ed. by M. Sommerfeld, ISBN: 3-86010-641-4, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale), April 2002
- [5] Th.Frank, J.A.Denev, K.Pachler:
Large Eddy Simulation (LES) der Gas-Feststoff-Strömung in einem Standardzyklon, Arbeitssitzung des GVC-Fachausschusses Mehrphasenströmungen, Kurzfassungen der Vorträge, No. , pp. 1–2, Baden-Baden, 5.–7. März 2003
- [6] K.Bernert, Th.Frank, H.Schneider, K.Pachler:
Numerical Simulation of Disperse Multiphase Flows With an Application in Power Engineering, INTERNATIONAL JOURNAL of NUMERICAL METHODS in FLUIDS, John Wiley & Sons, Ltd. Vol. 41, Issue 12, pp. 1253–1271, ISSN: 1097-0363, DOI: 10.1002/fld.423, April 2003
- [7] J.A.Denev, Th.Frank, K.Pachler:
Large Eddy Simulation (LES) of Turbulent Square Channel Flow using a PC-Cluster Architecture, 4. INTERNATIONAL CONFERENCE on LARGE-SCALE SCIENTIFIC COMPUTATIONS, Sozopol, Bulgaria, June 4.–8. 2003
- [8] K.Pachler:
Parallele Berechnung 3-dimensionaler, instationärer Gas-Partikel-Strömungen unter Berücksichtigung von Kollisionen und Aggregatzustandsänderungen der dispersen Phase, Dissertation, TU-Chemnitz, eingereicht September 2003, Verteidigung Juli 2004
- [9] J.K. Dukowicz: Quasi-Steady Droplet Phase Change in the Presence of Convection, Los Alamos Informal Report, LA-7997-MS
- [10] W.E. Ranz, W.R.Marshall: Evaporation From Drops, Part I, Part II, Chemical Engineering Progress, Vol. 48, No. 3–4, S. 141–146, 173–180, 1952
- [11] R.Kneer: Grundlegende Untersuchungen zur Sprühstrahlausbreitung in hochbelasteten Brennräumen: Tropfenverdunstung und Sprühstrahlcharakterisierung, PhD Thesis, Karlsruhe, 1993
- [12] H.D. Baehr: Thermodynamik, 6. Auflage, Springer-Verlag, 1988
- [13] Sparrow, E.M., Gregg, J.L.: The variable fluid property problem in free convection, Transactions of the ASME, Vol 80, S. 879–886, 1958
- [14] Klingsporn, M.: Modellierung der Mehrkomponenten-Verdunstung bei der dieselmotorischen Einspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1995
- [15] Reuter, U.: Kammerversuche zur dieselmotorischen Einspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1989
- [16] Koß, H.J.: Spektroskopische Untersuchungen zur Kraftstoff einspritzung, PhD Thesis, RWTH Aachen, 1993
- [17] Breuer, A.: Experimentelle Untersuchungen der Einspritzstrahldynamik mit Hilfe der Phasen-Doppler-Anemometrie, PhD Thesis, RWTH Aachen, in Vorbereitung
-

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die im Projekt D2 erbrachten Ergebnisse, vollständige Parallelisierung des NS- als auch des Lagrange-Lösers, haben die praktische Durchführbarkeit der Implementation eines Strömungslösers für massiv parallele Rechencluster umfassend dargestellt. Es wurden mit dem Programmpaket MISTRAL/PartFlow-3D sowohl Grundlagenexperimente, als auch reale Anwendungen aus der Kraftwerkstechnik erfolgreich simuliert. Schnittstellen für kommerzielle Netzgeneratoren und Postprozessoren machten Berechnungen von komplexen Geometrien möglich und stellten die Robustheit dieses Programmpaketes unter Beweis. Somit wurde gezeigt, dass die Lagrange Methode zur Simulation von Partikelströmungen auch im Wechselspiel mit einem Navier-Stokes-Löser effizient parallelisierbar ist ohne Einschränkungen bei den zu modellierenden physikalischen Subprozessen machen zu müssen [8].

Die Weiterentwicklung der LES-Methode mit dem instationären Lagrange-Löser, wie sie auf der Gasseite schon begonnen wurde [7], wäre eine sehr interessante Aufgabenstellung. Dazu sind Modellierungsarbeiten bezüglich der Turbulenzwechselwirkung für die Partikelphase notwendig (Subgrid scale models). Außerdem muss die Zweiwegkoppelung disperse-kontinuierliche Phase bezüglich der direkt bzw. modellmäßig aufgelösten Energiespektren untersucht werden. Der vorhandene inkompressible Löser könnte um einen kompressiblen Ansatz erweitert werden, was bei großen Dichte- oder Temperaturgradienten unerlässlich ist. Damit könnte erstmals eine Tropfenschwarmverdunstung mit Hilfe der LES-Methode auf einem Parallelcluster untersucht werden. Es wäre möglich den Einfluss der Turbulenz einschließlich den Stoff- und Wärmeübergang besser als mit dem aktuell verwendeten $k-\varepsilon$ -Modell zu simulieren. Aktuell laufen Programme zur Erforschung der Verbrennung im Bereich von Gasturbinen mit Hilfe der LES, die jedoch keine Parallelisierung vorweisen können. Eine Zusammenarbeit wäre von beiderseitigem Nutzen.