NUMERISCHE UNTERSUCHUNG DER SPRAYDISPERSION EINES LUFTGESTÜTZTEN KRAFTSTOFFZERSTÄUBERS IN FLUGTRIEBWERKEN

N. Bürkle, S. Holz, E. Bärow, R. Koch, H.-J. Bauer Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe, Deutschland

Zusammenfassung

Die Entstehung von Schadstoffen in Flugtriebwerken wird maßgeblich von den Charakteristiken des Kraftstoffsprays in der Brennkammer beeinflusst. Um Zeit und Kosten in der Brennkammerentwicklung einzusparen, ist die frühzeitige Kenntnis über das Emissionsverhalten der Brennkammer unabdinglich. Hierzu muss das Zerstäubungsverhalten der Kraftstoffdüse verstanden sein, da der Kraftstoffzerfall die Charakteristik des Sprays und somit das Brennverhalten entscheidend beeinflusst. Bei der Euler-Lagrange Methode handelt es sich um ein etabliertes Verfahren zur Vorhersage der Sprayausbreitung und -dispersion. Da hierbei die initiale Kraftstoffzerstäubung nicht direkt berechnet wird, werden adäquate Anfangsbedingungen zur Simulation der flüssigen Phase benötigt, um die Spraydispersion und damit Schadstoffemissionen zuverlässig vorhersagen zu können.

Im Rahmen dieser Studie werden die Sensitivitäten der Spraydispersion auf unterschiedliche Tropfenstartbedingungen numerisch untersucht. Die Simulationen der dreidimensionalen Zerstäubergeometrie werden mittels der Euler-Lagrange Methode durchgeführt. Eine Erweiterung des Primärzerfallsmodell PAMELA [1–3] wird zur Generierung von Tropfenstartbedingungen verwendet. Numerische Spraycharakteristiken werden mit experimentellen Daten [4] verglichen.

Ein starker Einfluss der initialen Tropfengeschwindigkeiten, der Rezirkulationszone, des präzedierenden Wirbelkerns und der Turbulenzmodellierung wird identifiziert. Tropfenstartbedingungen, welche eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefern, werden ermittelt. Diese Studie demonstriert, dass der dargestellte Ansatz geeignet ist, um die Spraydispersion in Brennkammern abzubilden.

Keywords

Tropfenstartbedingungen; Euler-Lagrange; Primärzerfallsmodellierung

NOMENK	LATUR		h_{a}	Zerstäuberkantendicke	m
Symbol	mbol Bedeutung Einheit		$L_{\rm film}$	Lauflänge des Filmlegers	m
Griechische Symbole			m	Lagemaß der	
μ_{ζ}	Mittelwert von ζ	$[\zeta]$		Rosin-Rammler-Verteilung	m
ν	Kinematische Viskosität	m²/s	\mathcal{N}	Normalverteilung	-
ρ	Dichte	kg/m ³	q	Streuungsparameter der Rosin-Rammler-Verteilung	_
σ_η	Standardabweichung von η	$[\eta]$	r	Abstand zur Rotationsachse	m
σ	Oberflächenspannung	N/m	D_{32}	Sauterdurchmesser	m
Lateinisc	he Symbole		U	Uniformverteilung	_
A	Projizierte Tropfenfläche	m^2	$oldsymbol{u}_{ m D}$	Tropfengeschwindigkeit	m/s
$c_{\rm d}$	Widerstandsbeiwert	-	u_i	Geschwindigkeitskomponenten	m/s
D	Tropfendurchmesser	m	$\overline{\mathcal{U}}_{i}$	Mittlere Geschwindigkeits-	
f_0	Anzahldichteverteilung	1/m	ωı	komponenten	m/s
F_0	Summenverteilung	_	$x_{ m D}$	Tropfenposition	m

m

z Abstand zur Zerstäuberkante

Indizes

D	nopien
global	Globale Koordinate
korr	Korreliert

Tranfan

- lokal Lokale Koordinate
- *φ* In Umfangsrichtung
- r In Radialrichtung
- r In Radialrichtung
- z In Axialrichtung

Abkürzungen

LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
OS	Optimales Setup
PAMELA	Primary atomization model for prefilming airblast injectors
PDA	Phasen-Doppler-Anemometrie
PVC	Präzedierender Wirbelkern
RZ	Rezirkulationszone
SMD	Sauterdurchmesser

1. EINLEITUNG

Um die von Flugtriebwerken verursachte Umweltbelastung zu reduzieren und den sich verschärfenden Grenzwerten zu entsprechen, ist es wichtig sowohl die Effizienz der Triebwerke zu erhöhen, als auch deren Emissionen zu reduzieren. In diesem Zusammenhang ist die Entwicklung der Brennkammer von besonderer Bedeutung. Der Prozess der Kraftstoffzerstäubung beeinflusst lokale Luft-Kraftstoff-Verhältnisse und damit die Entstehung von Emissionen. Folglich gilt es, die Sprayentstehung genauer zu verstehen, um Schadstoffe wie NO_x und Ruß zu reduzieren [5]. Jedoch ist die Vorhersage des Zerstäubungsprozesses basierend auf den Grundgesetzen der Strömungsmechanik bislang noch nicht Industriestandard [6, 7].

Die Analyse des Primärzerfalls erfordert detaillierte experimentelle Untersuchungen vieler Betriebspunkte. Phasen-Doppler-Anemometrie (PDA) stellt eine Möglichkeit dar, Durchmesser und Geschwindigkeiten der Tropfen an mehreren Positionen zu erfassen [8]. Dies ist jedoch auf kleinere Tropfen beschränkt, da PDA größere und damit nicht-sphärische Tropfen nicht erfassen kann [9]. Aus diesem Grund ist die Schattenbildmethode¹ ein geeigneteres Verfahren zur Ermittlung von Tropfencharakteristiken in der Nähe der Zerstäuberkante, da nicht-sphärische Tropfen und Ligamente erfasst werden können [8]. Jedoch ist PDA eine der meistverwendeten Methoden zur Analyse von Spraycharakteristiken in filmlegenden luftgestützen Zerstäubern [10, 11].

Aufgrund der vorherrschenden thermodynamischen Bedingungen und der optischen Zugänglichkeit des dichten Sprays sind Experimente in Brennkammern aufwändig durchzuführen [7].

Gegenwärtig sind qualitativ hochwertige numerische Simulationen des Primärzerfallsprozesses möglich. Hierbei wird entweder eine gitterbasierte Methode wie der Volume-of-Fluid- (VoF) oder der Level-Set-Ansatz (LS) verwendet, aber auch gitterfreie Verfahren wie die Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Methode (SPH) wurden bereits in diesem Kontext eingesetzt [6, 12–16]. Die Simulation von realistischen Brennkammerbedingungen mit einer ausreichenden Anzahl von Zerfallsereignissen würde heutige Rechenressourcen weit überschreiten [6].

Aufgrund dieser Restriktionen werden im industriellen Kontext Euler-Lagrange Simulationen zur Vorhersage der Sprayausbreitung und -dispersion genutzt. Hierbei kommt eine Euler'sche Betrachtungsweise der Gasphase und eine Lagrange'sche zur Berücksichtigung der dispersen Phase zum Einsatz. Der Primärzerfall selbst wird nicht abgebildet. Des Weiteren werden wohldefinierte Tropfenstartbedingungen benötigt, um realistische Spraycharakteristiken zu reproduzieren. Die Anfangsbedingungen der flüssigen Phase und somit Tropfenstartbedingungen weisen einen großen Einfluss auf das sich entwickelnde Spray auf. Im Fall einer nichtreagierenden kalten Strömung [17], sowie einer reagierenden heißen Strömung [18] müssen daher unpräzise Tropfenstartbedingungen vermieden werden. Realistische Anfangsbedingungen können von phänomenologischen Primärzerfallsmodellen bereitgestellt werden. Dieser Ansatz ist nützlich, wenn der Fokus auf der Reproduktion der hauptsächlichen Spraycharakteristik liegt, nicht auf der Untersuchung des Zerstäubungsprozesses selbst [1]. Diese Modelle basieren auf analytischen Korrelationen oder experimentellen Messungen, um Tropfengrößenverteilungen mithilfe der Strömungsinformation der Gasphase vorherzusagen. Viele derartige Modelle wurden entwickelt [1, 19, 20]. Da bei der Zerstäubung chaotische Prozesse miteinander interagieren, sollte eine Modellierung der Tropfenstartbedingungen dieses Verhalten reproduzieren können.

Üblicherweise wird nur die Statistik der Tropfengrößen berücksichtigt, die multivariate Statistik der Anfangsgeschwindigkeiten, -positionen und deren Korrelationen werden vernachlässigt [18,21,22]. Folglich werden die Tropfen häufig an mehreren diskreten Injektionspunkten mit konstanter Geschwindigkeit relativ zur Zerstäuberkante injiziert. In anderen Fällen wird eine Modellierung einer strikt deterministischen Abhängigkeit zwischen Größe und Geschwindigkeit durch entweder Korrelationen [17] oder Vorstudien mit dem selben numerischen Modell [9] vorgenommen. Da die Tropfen unterschiedliche Dynamik in Abhängigkeit ihrer Größe und des umgebenden Strömungsfeldes erfahren, ist eine Berücksichtigung der Wechselbeziehungen der verschiedenen physikali-

¹Shadowgraphy

schen Tropfeneigenschaften eigentlich obligatorisch. Trotzdem besteht der meistangewandte Ansatz aus einer unabhängigen Modellierung der Tropfenstartbedingungen, meistens unter Vernachlässigung der Stochastik der Tropfenkinematik. Untersuchungen mit univariater Modellierung sind, soweit den Autoren bekannt, begrenzt auf die Studien von Senoner et al. [23] und Hoffmann et al. [2]. Ein Modell welches die multivariaten Abhängigkeiten vollständig erfasst existiert noch nicht.

Im Rahmen dieser Arbeit wird eine numerische Untersuchung der Sensitivität der Spravdispersion auf unterschiedliche Tropfenstartbedingungen eines realistischen dreidimensionalen Kraftstoffzerstäubers präsentiert. Dabei wird ein ausgewählter Betriebspunkt der nicht reagierenden Strömung untersucht. Die Anfangsbedingungen der flüssigen Phase werden variiert, um eine bestmögliche Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen zu erhalten. Die Simulationen werden mit einem Euler-Lagrange-Ansatz durchgeführt. Die Gasphase wird durch die Finite-Volumen-Methode berechnet. Sowohl URANSals auch LES-Turbulenzmodellierung kommen zum Einsatz. Dadurch kann der Einfluss transienter Strömungsphänomene der Drallströmung auf die Spraydispersion untersucht werden. Diskrete Tropfenstartbedingungen werden durch Anwendung des erweiterten Primärzerfallsmodells PAMELA (Primary Atomization Model for prEfilming airbLAst injectors) erhalten. Dieses Modell wurde ursprünglich für planare filmlegende Zerstäuber entwickelt und kalibriert, um Tropfengrößenverteilungen zu bestimmen [1]. Holz et al. [24] demonstrierten die Übertragbarkeit des Modells auf dreidimensionale Zerstäuber ohne weitere Kalibrierung. Des Weiteren wurde das Modell durch eine Modellierung der Statistiken von Tropfenstartposition und -geschwindigkeit erweitert [2]. Dies wird durch Aufprägung benutzerdefinierter Normalverteilungen für die Tropfenstartpositionen und -geschwindigkeiten erreicht. Im Rahmen dieser Studie wird das von Hoffmann et al. [2] erweiterte PAMELA-Modell verwendet, um die Tropfenstartbedingungen zu setzen. Die von dem Modell benötigten Parameter werden hinsichtlich der Übereinstimmung mit Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen des Experiments [3, 4] optimiert.

Diese Arbeit gliedert sich wie folgt: Zunächst wird das numerische Modell der Simulationen beschrieben. Anschließend wird die Validität der Vorhersage der reinen Gasphase diskutiert. Es folgt eine Untersuchung der Sensitivität der Spraydispersion auf unterschiedliche Anfangsbedingungen der flüssigen Phase. Abschließend wird auf dieser Grundlage ein Satz von Tropfenstartparametern zusammengestellt, welcher die bestmögliche Übereinstimmung mit dem Experiment aufweist.

2. METHODIK

Im Rahmen dieser Studie wird der in [25, 26] vorgestellte Strömungslöser verwendet. Die Tur-



BILD 1. Untersuchte Zerstäuberdüse [4,31].

bulenz wird durch einen URANS-Ansatz mit dem k- ε -realizable-Modell [27] und einem LES-Ansatz mit dem Vreman-Modell [28] abgebildet. Eine Zwei-Wege-Kopplung zwischen gasförmiger und flüssiger Phase wird eingesetzt. Die untersuchte Geometrie und das verwendete Primärzerfallsmodell werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

2.1. Numerisches Modell

Die untersuchte Düsengeometrie ist in Bild 1 dargestellt. Diese Düse wurde bereits in [3,4] untersucht. Es handelt sich um ein Swirl-Cup-Design [29]. Sie besteht aus Primär- (I) und Sekundärdrallerzeuger, sowie einem Filmleger (III), der Zerstäuberkante (IV) und der Kraftstoffzufuhr (V). Der Kraftstoff wird der Düse von unten zugeführt und durch Bohrungen auf den Filmleger aufgebracht, wo der Kraftstoff von der Luftströmung stromab getrieben wird. Die Flüssigkeit wird an der Zerstäuberkante durch die Interaktion mit der Luft zerstäubt. In dieser Arbeit wird der Prozess des Kraftstoffzerfalls nicht direkt berechnet. Stattdessen werden die Produkte des Primärzerfalls durch das erweiterte PAMELA-Modell bestimmt. Die Kraftstofftropfen werden als Pakete monodisperser Tropfen, sogenannte Parcels [30], in der Nähe der Hinterkante initijert.

Die Abmessungen des numerischen Rechengebiets können Bild 2 entnommen werden. Die Lage der Kraftstoffdüse im Rechengebiet befindet sich zwischen Einlassstutzen und Plenum. Das gesamte Rechengebiet ist zylindrisch. Der Koordinatenursprung liegt auf der Mittelachse auf Höhe des Düsenaustritts. Experimentelle Daten der Gasströmung sind an diskreten Ebenen stromab des Düsenaustritts vorhanden.

Am Einlass wird ein Geschwindigkeitsprofil vorgegeben, welches einem Gasmassenstrom von 18,3 g/s trockener Luft entspricht. Der Turbulenzgrad am Einlass beträgt 10%. Die flüssige Phase wird



BILD 2. Seitenansicht des Rechengebiets [3].

TAB 1. Zellkantenlängen der verwendeten Netze in mm.

Zelldichte	5 Mio. Zellen	10 Mio. Zellen
ZD1	1,0-2,5	0,5-1,5
ZD2	2,5-8,0	1,5-5,0
ZD3	8,0-25,0	5,0-20,0

mit einem Massenstrom von 0,7 g/s initialisiert. Am Auslass wird der Geschwindigkeitsgradient in Normalenrichtung zu Null gesetzt. Haftbedingungen gelten für alle Wände des Rechengebiets. Die Strömung wird isotherm modelliert. Die Temperatur der Luft beträgt 300 K.

Zwei numerische Modelle werden eingesetzt. Im Fall der Sensitivitätsstudie enthält das Netz 5 Millionen Zellen. Das Modell, welches für die Untersuchung der optimalen Tropfenstartbedingungen herangezogen wird, enthält 10 Millionen Zellen. In beiden Fällen ist das Rechengebiet unstrukturiert vernetzt und in Bereiche unterschiedlicher Zelldichten unterteilt. Die höchste Zelldichte liegt innerhalb und stromab der Zerstäuberdüse vor. Zu den Rändern des Gebiets nimmt die Zelldichte ab. Zellgrößen in Abhängigkeit der vorherrschenden Zelldichten für beide Gitter sind in Tab. 1 aufgelistet. Deren Lage ist in Bild 2 dargestellt.

Zur Abbildung der Dynamik der dispersen Phase dient ein Euler-Lagrange'scher Particle-Source-in-Cell-Ansatz (PSIC). Hierbei wird nur die Beschleunigung des Tropfens aufgrund des Luftwiderstands berücksichtigt [32]. Dann ergeben sich die Tropfenbewegungsgleichungen zu:

(1)
$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2} \rho_{\mathrm{g}} c_{\mathrm{d}} A \|\boldsymbol{u}_{\mathrm{g}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}\| (\boldsymbol{u}_{\mathrm{g}} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}})$$

(2)
$$\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{D}} = \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} \mathrm{d}t$$

mit der Dichte des Gases $\rho_{\rm g}$, dem Widerstandsbeiwert $c_{\rm d}$ und der projizierten Fläche des Tropfens *A*. Der Widerstandsbeiwert wird mit der Korrelation von Schiller und Naumann [33] und der TropfenReynoldszahl Re_D berechnet:

(3)
$$c_{\rm d} = \frac{24}{Re_{\rm D}} \left(1 + 0.15 \ Re_{\rm D}^{0.687}\right)$$
,
(4) $Re_{\rm D} = \frac{\|\boldsymbol{u}_{\rm g} - \boldsymbol{u}_{\rm D}\| D}{\nu_{\rm g}}$.

2.2. Primärzerfallsmodell

Das Primärzerfallsmodell PAMELA wurde ursprünglich entwickelt, um Tropfengrößenverteilungen gemäß der Zerstäubergeometrie und den Eigenschaften der Gasströmung zu bestimmen [1]. Hierbei wird die instantane Strömungsinformation über eine Referenzebene im Inneren des Zerstäubers berücksichtigt. Das Modell wurde mit Schattenbilddaten kalibriert [34–36]. Anschließend erweiterten es Hoffmann et al. [2] um die Möglichkeit der Vorgabe von normalverteilten Tropfenstartpositionen und -geschwindigkeiten. Das Funktionsprinzip des PAMELA-Modells (blau) und dessen Erweiterung (gelb) ist in Bild 3 dargestellt.

Im ursprünglichen Modell werden Materialeigenschaften beider Phasen, wie die Dichte, Viskosität und Oberflächenspannung berücksichtigt. Die Gasgeschwindigkeit wird in der Referenzebene erfasst und auch geometrische Parameter wie die Hinterkantendicke h_a und die Sehnenlänge des Filmlegers $L_{\rm film}$ werden als Eingangsparameter herangezogen. Diese werden mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion² (PDF) des Durchmessers korreliert. Anschließend kann aus dieser Verteilung die zugehörige Summenverteilung³ (CDF) berechnet werden. Zur Beschreibung von Anzahldichteverteilungen von Tropfendurchmessern wird die Rosin-Rammler-Verteilung verwendet:

(5)
$$f_0(D) = q m^{-q} D^{q-1} \exp\left[-\left(\frac{D}{m}\right)^q\right]$$

mit dem Lagemaß m und dem Streuungsparameter q. Durch Integration wird die zugehörige Summenverteilung berechnet:

(6)
$$F_0(D) = \int_{-\infty}^D f_0(\tilde{D}) \,\mathrm{d}\tilde{D} = 1 - \exp\left[-\left(\frac{D}{m}\right)^q\right]$$
.

Um diskrete Werte für die Tropfenstartbedingungen zu erhalten, wird das Verfahren des *Inverse Transform Sampling* angewandt. Dabei werden Realisierungen x einer uniform verteilten Zufallsvariable $X \sim \mathcal{U}(0,1)$ generiert. Diese Realisierungen dienen als Eingabe der inversen Summenverteilung. Im Falle der Durchmesserverteilung ergibt sich $F_0^{-1} : x \mapsto D$ und folglich diskrete Realisierungen des Durchmessers, welche der PDF in Gl. (5) folgen.

Die Erweiterung des PAMELA-Modells besteht aus normalverteilten PDFs $\mathcal{N}(\mu,\sigma)$ für die radialen

²Probability Density Function

³Cumulative Distribution Function



BILD 3. Funktionsprinzip des erweiterten PAMELA-Modells nach [2].

und axialen Injektionspositionen und die radialen und axialen Injektionsgeschwindigkeiten der Tropfen, welche durch die Indizes r, z, u_r und u_z beschrieben werden. Es ergeben sich durch die Normalverteilungen 8 Parameter (μ_r , μ_z , σ_r , σ_z , μ_{u_r} , μ_{u_z} , σ_{u_r} und σ_{u_z}), welche eine Benutzereingabe erfordern. Durch erneute Anwendung der Inversionsmethode auf die Summenverteilungen der jeweiligen Normalverteilungen lassen sich diskrete Tropfenstartpositionen und -geschwindigkeiten generieren. Bei der beschriebenen Modellierung der Tropfenstartbedingungen handelt es sich um eine univariate Modellierung, da die Wechselbeziehungen zwischen den physikalischen Größen nicht berücksichtigt werden. Tropfenanzahlen für die Parcel werden in Abhängigkeit des jeweiligen repräsentierten Durchmessers und des Kraftstoffmassenstroms festgelegt. Mögliche Tropfendurchmesser liegen zwischen 1–600 µm. Die auf diese Weise ermittelten Injektionspositionen und -geschwindigkeiten werden den Tropfen relativ zu der jeweiligen Zellfläche auf der Hinterkante aufgeprägt. Dieses Injektionsprinzip ist in Bild 4 dargestellt. Da das erweiterte PAMELA-Modell ursprünglich für einen ebenen Filmleger entwickelt wurde [2], sind die Umfangskomponenten der Startpositionen und -geschwindigkeiten nicht berücksichtigt. Da der in dieser Studie verwendete Filmleger rotationssymmetrisch ist und die Tropfen relativ zu den jeweiligen Zellflächen auf der Hinterkante injiziert werden, ist eine Modellierung der Umfangspositionen nicht notwendig. Allerdings ergibt sich eine Beeinflussung der Spraydispersion durch die fehlende Modellierung der initialen Tropfenumfangsgeschwindigkeit.

3. ERGEBNISSE DER GASPHASENSIMULATION

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der reinen Gasphasensimulation diskutiert. Die Wahl der numerischen Modells wird motiviert. Es werden 30 ms physikalischer Zeit berechnet. Die Zeitschrittweite be-



BILD 4. Schnitt- (links) und Frontalansicht (rechts) der Tropfeninjektion nach [3].

trägt 1 µs. Die letzten 10 ms werden für die zeitliche Mittelung verwendet.

3.1. Geschwindigkeitsprofile

Die zeitlich gemittelten Axial- (links) und Umfangsgeschwindigkeitsprofile (rechts) am Austrittsquerschnitt der Zerstäuberdüse (oben) und 10 mm stromab (unten) sind in Bild 5 dargestellt. Sowohl Ergebnisse mit URANS- als auch mit LES-Ansatz werden mit LDA-Messwerten verglichen. Diese Messungen sind für einzelne Punkte verfügbar. Die Simulationen unterscheiden sich hinsichtlich der Turbulenzmodellierung und der verwendeten Gitterauflösung. Bereiche, welche den Primär- (PLS) oder Sekundärluftstrahl (SLS) charakterisieren, werden entsprechend gekennzeichnet.

Es liegt eine akzeptable Übereinstimmung zwischen numerischen und experimentellen Daten vor. Die Lage des Axialgeschwindigkeitsmaximums wird von beiden Simulationen korrekt abgebildet. Maximalwerte von 48 m/s werden erreicht. Mängel in der Vorhersage der Axialgeschwindigkeit sind im Sekundärluftstrahl zu finden. Diese werden durch die dortige grobe räumliche Auflösung verursacht. Nur leichte Verbesserungen werden bei verfeinertem Netz und Grobstruktursimulation beobachtet. Im Fall der LES sind am Düsenaustritt negative Axialgeschwindigkeiten an der Mittelachse für $r \leq 2 \text{ mm zu}$



BILD 5. Gemittelte Axial- (links) und Umfangsgeschwindigkeiten (rechts) am Düsenaustritt (oben) und 10 mm stromab (unten).

beobachten. Infolgedessen ist die zentrale Rezirkulationszone näher am Düsenaustritt und von größerer Intensität als im Fall der URANS. Das Maximum der Umfangsgeschwindigkeit (vgl. Bild 5, oben rechts) wird in beiden Simulationen unterschätzt, wenn auch die Lage richtig wiedergegeben wird. Das Plateau im Inneren des Primärluftstrahls wird von dem URANS-Modell nicht reproduziert. Im Fall der LES ist eine leichte Vertiefung sichtbar.

Weiter stromab in der Auswerteebene bei z = 10 mm geben beide numerischen Modelle den qualitativen Axialgeschwindigkeitsverlauf wieder (vgl. Bild 5, unten links). Für die LES wird eine Rezirkulationszone erhalten, welche näher an die Zerstäuberhinterkante rückt. Infolgedessen ist die Rückströmung in dieser Auswerteebene stärker und die Übereinstimmung mit dem Experiment größer. Außerhalb von $r = 20 \,\mathrm{mm}$ zeigt sich eine Eckenrezirkulation in den experimentellen Daten, welche jedoch von keinem numerischen Modell abgebildet wird. Es lässt sich festhalten, dass die wesentlichen Charakteristiken der Gasströmung in beiden Fällen wiedergegeben werden. Auch die berechneten Umfangsgeschwindigkeiten in der Auswerteebene bei z = 10 mm zeigen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Das bei z = 2 mm erwartete Plateau ist in den numerischen Daten sichtbar, jedoch auf niedrigerem Niveau.



BILD 6. Visualisierung des PVC mittels Druckisokontur (links) und Geschwindigkeitsfluktuationen (rechts) [3].

3.2. Präzedierender Wirbelkern

Der präzedierende Wirbelkern (PVC⁴) ist ein transientes Strömungsphänomen welches bei Drallströmungen auftritt [7, 37]. Der PVC übt großen Einfluss auf die Spraydispersion aus [9]. Daher ist es wichtig, diesen numerisch aufzulösen. Im Rahmen der vorliegenden Studie wird der PVC nur im Fall der LES beobachtet. Seine Frequenz beträgt 1200 Hz. In Bild 6 ist der PVC mittels Druckisokontur (links) und Fluktuationen der Axialgeschwindigkeit (rechts) visualisiert.

3.3. Abschließende Bemerkungen zu den Ergebnissen der Gasphasensimulation

Die zeitlich gemittelten Geschwindigkeitsprofile der Gasströmung sind in akzeptabler Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die wesentlichen Charakteristiken der Drallströmung werden wiedergegeben. Beide numerischen Modelle sind zur Anwendung in der Sensitivitätsstudie geeignet. Der PVC wird lediglich mit dem LES-Ansatz abgebildet. Die Axialgeschwindigkeiten an der Position der Referenzebene im Primärluftstrahl (vgl. Bild 4) sind in guter Übereinstimmung mit dem Experiment. Folglich sind die Eingangsdaten des PAMELA-Modells von ausreichender Qualität und eine negative Beeinflussung der Tropfengrößenverteilung ist nicht zu erwarten. Im Fall des gröberen Netzes sind Abweichungen vorhanden, welche die Spraydispersion beeinflussen könnten. Es ist jedoch auch ersichtlich, dass im Vergleich zum Modell mit feinerem Netz und LES-Ansatz ein noch feineres Netz nötig wäre, um die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erhöhen und verbliebene Abweichungen am Düsenaustritt zu minimieren.

Nach Pope [38] erfordert die Anwendung einer LES die Auflösung von 80 % der turbulenten kinetischen Energie und somit turbulenter Größenskalen. Der Euler-Lagrange-Ansatz ist jedoch nicht konvergent [39]. Zusätzliche Fehler in der Tropfenverfolgung werden bei gleichbleibendem Tropfendurchmesser und gleichzeitiger Reduzierung der Zellgröße ein-

⁴Precessing Vortex Core

gebracht. Um bei diesem Ansatz größtmögliche Genauigkeit zu gewährleisten, muss der Tropfendurchmesser D viel kleiner sein als die Zellgröße Δx . Überschreitet das Verhältnis von Tropfendurchmesser zu Zellgröße $D/\Delta x$ den üblicherweise verwendeten Grenzwert von 0,1, verschlechtert sich die Approximation der Luftwiderstandskraft auf die Tropfen. Es ergibt sich nach Evrard et al. [39] für die Verfolgung des größten Tropfens von 600 µm mit einem akzeptablen Fehler eine Zellgröße von mindestens 6 mm.

Um diesen Zielkonflikt zu lösen, wird ein numerisches Modell mit URANS-Ansatz und dem gröberen Netz mit 5 Millionen Zellen für die Sensitivitätsstudie verwendet. Auf diese Weise wird die Spraydispersion, welche im Rahmen der Sensitivitätsstudie untersucht wird, hauptsächlich von den Tropfenstartbedingungen beeinflusst, da der PVC nicht und die Turbulenz nur grob aufgelöst wird. Der Einfluss der Tropfenstartbedingungen kann somit leichter herausgearbeitet werden. Eine solche Separation der Phänomene wurde bereits von Keller et al. [9] vorgeschlagen und durchgeführt. Des Weiteren wird der URANS-Ansatz trotz zunehmendem Interesse an Grobstruktursimulationen aufgrund seiner höheren Recheneffizienz häufig verwendet.

4. SENSITIVITÄTEN DES SPRAYS

In diesem Abschnitt wird die Spraydispersion, welche aus Simulationen mit variierenden Tropfenstartparametern resultiert, diskutiert. Auf diese Weise soll die Sensitivität der Spraydispersion auf die Tropfenstartbedingungen ermittelt werden. Anschließend wird im nachfolgenden Abschnitt ein optimales Setup generiert, welches größtmögliche Übereinstimmung mit dem Experiment aufweist. Die Sensitivitätsstudie dient hierbei zunächst nicht dazu, gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten zu erzielen. Der letzte Zeitschritt der Simulation der reinen Gasphase dient als Anfangsbedingung der Gasströmung mit kombinierter Spraysimulation. Die Injektion startet zum ersten Zeitschritt. Die simulierte physikalische Zeit beträgt 30 ms.

Um die Vergleiche zu erleichtern, wird ein Referenzsetup S0 definiert (vgl. Tab. 2). Dieses enthält Tropfenstartbedingungen wie sie in deterministischen Tropfeninjektionsmodellen zur Anwendung kommen. Die ausgewählten Parameterwerte in Tab. 2 setzen sich wie folgt zusammen: In Fällen, in welchen eine Varianz der Tropfenstartbedingungen unerwünscht ist, wird die Standardabweichung σ_n der Variable η auf 0,001 gesetzt. Die Normalverteilung nähert sich damit einer Delta-Funktion um den Mittelwert an. Auf diese Weise können auch deterministische Injektionsbedingungen annähernd reproduziert werden. In den meisten Fällen wird die Axialgeschwindigkeit mit der Korrelation von Gepperth [2] instantan zu ukorr berechnet. Die hierfür notwendige Eingabeinformation wird der Referenzebene innerhalb der Zerstäuberdüse entnommen. Für die untersuchten Strömungsbedingungen ergibt sich eine axiale Startgeschwindigkeit der Tropfen von etwa 10 m/s. Die Injektionsposition der Referenzsimulation befindet sich exakt an der Hinterkante bei r = 7.5 mm. Unterschiede in den Injektionsparametern zur Referenzsimulation sind in Tab. 2 grau hinterlegt. Die mittlere axiale Injektionsposition der Simulation S1 von 3 mm stromab der Hinterkante repräsentiert die mittlere Ligamentlänge eines vergleichbaren Injektors [24]. Der Mittelwert für die radiale Einspritzposition bei z = 3 mm wurde den SPH-Daten von Dauch et al. [40] zu μ_r = 8,6 mm entnommen. Werte für die Radialgeschwindigkeit (μ_{μ_r} = 6,7 m/s und σ_{u_r} = 4,4 m/s) und für die Standardabweichung der Axialgeschwindigkeit ($\sigma_{u_z} = 11, 1 \text{ m/s}$) werden ebenfalls aus den SPH-Daten abgeleitet. Da sich die Standardabweichung der axialen Einspritzposition in der Größenordnung einer Ligamentlänge befinden sollte, wurde diese zu σ_z = 5 mm gesetzt.

4.1. Referenzsimulation

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Referenzsimulation diskutiert. Die Parameterwerte dieser Simulation repräsentieren deterministische Tropfenstartbedingungen. Diese Simulation wird anschließend mit den weiteren Simulationen der Sensitivitätsstudie verglichen. Auf diese Weise wird der Einfluss variierter Tropfenstartbedingungen auf die resultierende Spraydispersion identifiziert.

In Bild 7 sind die berechnete Volumendichteverteilung des Tropfendurchmessers und zwei experimentelle Verteilungen dargestellt. Da die PDA-Messungen als Vergleichsdaten für die vorliegende Studie dienen, werden im Folgenden die existierenden Unterschiede erläutert. Die Verteilung der mit PDA und Simulation ermittelten Tropfendurchmesser ist durch eine Erfassung aller Messpunkte innerhalb eines Volumens mit den Grenzen $r \leq 35\,\text{mm}$ und 10 mm < z < 40 mm entstanden. Die vorliegenden Unterschiede resultieren aus der Kalibrierung des PAMELA-Modells mit Schattenbilddaten eines generischen Filmlegers. Es ist allgemein bekannt, dass die PDA nur sphärische Tropfen erfassen kann [34]. In der Nähe der Zerstäuberkante besteht die flüssige Phase jedoch hauptsächlich aus größeren deformierten Tropfen und Ligamenten. Die Schattenbildmethode ist hingegen besser geeignet, um nicht-sphärische Tropfen zu detektieren [8]. Daher sind zusätzlich Schattenbilddaten von Gepperth et al. [31] in Bild 7 dargestellt. Diese resultieren aus der gleichen Geometrie allerdings bei einem unterschiedlichen Betriebspunkt. Da sich die Tropfengrößenverteilungen eines luftgestützten Zerstäubers innerhalb eines konventionellen Betriebsbereich nur marginal verändern [41], sind die Datensätze gut vergleichbar. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung der Schattenbilddaten und der numerisch berechneten Tropfengrößenverteilung. Folglich produziert das Primärzerfallsmodell eine adäguate Tropfendurchmesserverteilung.

Parameter	μ_r	σ_r	μ_z	σ_z	μ_{u_r}	σ_{u_r}	μ_{u_z}	σ_{u_z}
Einheit	mm	mm	mm	mm	m/s	m/s	m/s	m/s
S0	7,5	0,001	0	0,001	0	0,001	$u_{\rm korr}$	0,001
S1	8,6	0,001	3	0,001	0	0,001	$u_{\rm korr}$	0,001
S2	6,4	0,001	3	0,001	0	0,001	$u_{\rm korr}$	0,001
S3	7,5	0,001	0	5	0	0,001	$u_{\rm korr}$	0,001
S4	7,5	0,001	0	0,001	0	0,001	0,0	0,001
S5	7,5	0,001	0	0,001	0	4,4	$u_{\rm korr}$	0,001
OS	7,5	0,001	3	5	6,7	4,4	5	5,55





BILD 7. Volumen-PDFs des Tropfendurchmessers.

Wenn auch eine optimale Übereinstimmung mit den PDA-Daten wünschenswert ist, liegt der Hauptfokus dieser Arbeit auf der statistischen Modellierung der Tropfenstartbedingungen. Des Weiteren wird die Sensitivität der Spraydispersion auf die gewählten Tropfenstartbedingungen herausgearbeitet und ein optimales Setup an Tropfenstartparametern wird bestimmt. Um größere Vergleichbarkeit zwischen Numerik und PDA herzustellen, werden die Simulationsdaten gefiltert. Die numerisch berechneten Tropfendurchmesser werden lokal durch den jeweiligen korrespondierenden maximalen Tropfendurchmesser der PDA-Daten begrenzt. Auf diese Weise werden Vergleiche nur auf Basis gleicher Tropfendurchmesserbereiche vorgenommen. Zudem ist eine Verbesserung der Übereinstimmung weiter stromab erwartbar da dort die Validierungsrate der PDA-Methode höher ist. Dies wird unter anderem durch den Sekundärzerfall und damit besser geeignete Tropfengrößen verursacht. Daher fokussiert sich der Vergleich auf die Auswerteebenen stromab von $z = 25 \,\mathrm{mm}$, da diese in größerer Entfernung zur Zerstäuberkante liegen und die PDA-Daten dort aussagekräftiger sind. Da der Sekundärzerfall in den numerischen Daten nicht berücksichtigt ist, ist jedoch weiterhin eine Abweichung zu erwarten.

In Bild 8 sind Momentaufnahmen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der flüssigen Phase stromab der Zerstäuberkante abgebildet. Die Darstellung enthält Daten zum Zeitpunkt von 30 ms nach Beginn der Injektion. Da in den Simulationen weder Sekundärzerfall noch Verdunstung berücksichtigt werden, wird der betrachtete Bereich auf 50 mm stromab der Zerstäuberkante eingeschränkt. Die Gesamtheit der Parcel ist unterteilt in mehrere Tropfengrößenklassen, um die räumliche Verteilung in Abhängigkeit der Tropfengröße darzustellen. Auf diese Weise kann der Einfluss der Tropfenstartbedingungen auf die unterschiedlichen Tropfengrößenklassen besser untersucht werden.

Alle Tropfen werden exakt an der Hinterkante injiziert (r = 7,5 mm, z = 0 mm). Ausgehend vom Injektionsort breitet sich die Mehrheit der Tropfen in einem engen Band von Trajektorien bis z = 20 mm aus, wo die Dispersion verstärkt einsetzt. Die Verteilung der kleinsten Tropfen (oben rechts) liefert zusätzliche Einblicke. Hier wird offensichtlich, dass der Großteil aller Tropfen aus kleineren und mittleren Tropfen besteht. Die kleinsten Tropfen folgen, bedingt durch ihre kleine Stokes-Zahl [33], der Gasströmung um die linsenförmige Rezirkulationszone (RZ) herum. Deren Lage ist durch eine gestrichelte Linie dargestellt. Mittlere Tropfen (unten links) beschleunigen in der Nähe der Zerstäuberkante in radialer Richtung und folgen einer Trajektorie, welche initial mit dem Geschwindigkeitsvektor der Gasströmung zusammenfällt. Verglichen mit den häufigeren Trajektorien kleinerer Tropfen erreichen mittlere Tropfen höhere Radialpositionen. Die Trägheit der größten Tropfen (unten rechts) lässt sie den beobachteten Teil des Rechengebiets in einer nahezu horizontalen Trajektorie durchgueren. Dies wird durch den Mittelwert der Axialgeschwindigkeit μ_{u_z} , welcher mit der Korrelation von Gepperth zu u_{korr} [2] bestimmt wird, und der höheren Stokes-Zahl dieser Tropfen verursacht. Große Tropfen sind unempfindlich gegenüber Fluktuationen der Gasströmung, reagieren jedoch sensitiv auf die Tropfenstartbedingungen.



BILD 8. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Flüssigkeitsvolumens, unterteilt in Tropfengrößenklassen (S0).

4.2. Einfluss der Injektionsposition

Um den Einfluss der Injektionsposition zu untersuchen, werden die Simulationen S0, S1, S2 und S3 mit den PDA-Daten anhand des Sauterdurchmessers (SMD⁵, D₃₂) verglichen. Sensitivitäten werden durch Änderungen im radialen Verlauf des SMD ermittelt. Die numerischen Spraydaten werden durch eine zeitliche Mittelung im Bereich von 10-30 ms physikalischer Zeit erhalten. Hierbei wurde das Abtastintervall auf 1 ms gesetzt um Doppelzählungen von Tropfen zu vermeiden. Der größte mittels PDA erfasste lokale Tropfendurchmesser dient als Filtergrenzwert für die numerischen Daten. In diesem Abschnitt bleiben die Injektionsgeschwindigkeiten in allen vier Fällen unverändert bei μ_{u_x} = u_{korr} . Im Fall der Simulation S0 werden die Tropfen an der Hinterkante injiziert, im Fall von S1 3 mm stromab und 1,1 mm radial nach außen versetzt. Die Tropfen der Simulation S2 werden ebenfalls 3 mm stromab aber 1.1 mm radial nach innen versetzt injiziert. Bei der Simulation S3 wird eine Standardabweichung der axialen Injektionsposition aufgeprägt. Sie folgt dementsprechend der Normalverteilung $\mathcal{N}(0 \text{ mm}, 5 \text{ mm})$.

Die experimentellen Daten zeigen eine Zunahme des SMD über den Radius (vgl. Bild 9). Dieser Trend ist unabhängig vom Axialabstand z zur Zerstäuberkante festellbar, wenn auch die SMDs in der hinteren Auswerteebene bei z = 40 mm bedingt durch den Sekundärzerfall niedriger sind. Im Fall der Referenzsimulation S0 ist das dominante Phänomen das eines konzentrierten Strahls größerer Tropfen, welcher sich horizontal durch die Auswerteebenen bewegt (vgl. Bild 8). Dieser Strahl äußert sich im SMD-Verlauf als ein Maximum in den Auswerteebenen. Bei z =25 mm liegt dieser bei einem radialen Abstand von 12-25 mm. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der SMD-Verlauf entscheidend von der Verteilung der größeren Tropfen beeinflusst wird. Diese Tropfen werden aufgrund ihrer höheren Trägheit kaum von der Luftströmung dispergiert. Infolgedessen existiert dieses Maximum nahezu unverändert ebenfalls in der hinteren Auswerteebene. Da größere Tropfen zudem nur innerhalb des Strahls auftreten, wird bei großen und kleinen Radien der SMD im Vergleich zum Experiment unterschätzt. Die Ursache dieses Phänomens ist der axialen Tropfenstartgeschwindigkeit zuzuschreiben. Entsprechend tritt es ebenfalls in den Simulationen S1 bis S3 auf. Da im Fall der Simulation S1 die Tropfen stromab entlang des lokalen Geschwindigkeitsvektors der Gasphase injiziert werden und sich folglich in ähnlichen Strömungsregimen aufhalten, ergeben sich kaum sichtbare Unterschiede im SMD-Verlauf. Im Rahmen der Simulation S2 werden die Tropfen nach innen versetzt injiziert. Entsprechend tritt das Maximum bei kleineren Radien auf. Bedingt durch die oben beschriebene Filterung und die in den experimentellen Daten geringere Anzahl großer Tropfen bei kleinen Radien ist das Niveau des Maximums zudem reduziert. Der Strahl von größeren Tropfen verläuft jedoch weiterhin auch in der hinteren Auswerteebene bei kleineren Radien. In dieser Ebene ist eine leicht höhere Streuung sichtbar, was auf die starken Gradienten stromab der Zerstäuberkante und innerhalb des Primärluftstrahls ($r \leq 7,5$ mm) zurückzuführen ist. Im Fall der Simulation S3 wird eine Normalverteilung für die axiale Injektionsposition aufgeprägt. Als Konsequenz verbreitert sich das SMD-Maximum und verlagert sich auf die Innenseite. Aufgrund der starken Gradienten an der Zerstäuberkante resultiert die Varianz der axialen Startposition in einer Injektion der Tropfen in unterschiedliche Strömungsregime, was wiederum zu einer stark inhomogenen Beschleunigung der Tropfen führt. Dieser Trend setzt sich in der hinteren Auswerteebene fort. Im Vergleich zu den anderen SMD-Verläufen ist für S3 die Spitze des Verlaufs abgeflacht. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der konzentrierte Strahl großer Tropfen stärker gestreut wird. Zudem ist an dieser Position eine Häufung kleinerer Tropfen vorzufinden (vgl. Bild 8).

Die mittleren Einspritzpositionen haben lediglich einen geringen Einfluss auf die Spraydispersion. Im

⁵Sauter Mean Diameter



BILD 9. Räumliche SMD-Verteilungen im Falle variierender Injektionspositionen (S0, S1, S2, S3).

Gegensatz hierzu bewirkt die Varianz einer Injektionsposition eine signifikante Änderung in der hinteren Auswerteebene bei z = 40 mm, nicht jedoch weiter stromauf. Zudem ist die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten bei allen gezeigten Konfigurationen gering, was sowohl in der vorderen (z = 25 mm), als auch in der hinteren Auswerteebene (z = 40 mm) zutreffend ist. Hierbei sei angemerkt, dass die PDA-Daten in der Nähe zur Zerstäuberkante weniger aussagekräftig sind. Die Tropfenstartbedingungen der Simulationen S0 bis S3 sind somit zur Reproduktion des experimentellen Sprays ungeeignet.

4.3. Einfluss der Injektionsgeschwindigkeit

Die Trägheit größerer Tropfen lässt sie weniger stark auf die sich verändernde Geschwindigkeit der Gasphase entlang ihrer Trajektorie reagieren. Daher ist eine starke Beeinflussbarkeit der Spraydispersion durch die initialen Tropfengeschwindigkeiten zu erwarten. Zur Untersuchung dieses Einflusses dienen die Simulationen S0, S4 und S5. Bei der Simulation S4 werden ruhende Tropfen injiziert. Alle mittleren Geschwindigkeitsparameter werden zu null und die Standardabweichungen sehr niedrig gesetzt. Simulation S5 enthält Tropfen mit einer Varianz der initialen Radialgeschwindigkeit.

Im Fall der Injektion in Ruhe (S4) ist analog zur Referenzsimulation S0 eine Konzentration großer Tropfen sichtbar (vgl. Bild 10). Die Position dieses Maximums in der vorderen Auswerteebene bei z = 25 mm ist jedoch zu größeren Radien verschoben. Das Maximum ist verglichen mit S0 geringfügig aufgeweitet. Aufgrund der geringeren Tropfengeschwindigkeiten verbleiben die größeren Tropfen längere Zeit im Nahbereich des Zerstäubers und beschleunigen vermehrt in radiale Richtung. Zudem kommt instationären Phänomenen wie Turbulenz aufgrund der längeren Aufenthaltszeit eine größere Bedeutung bei. Infolgedessen ist der SMD-Verlauf weniger stark akzentuiert und gleichförmiger. Im Gegensatz zu S0 tendieren größte Tropfen zur Außenseite des Strahls, weshalb das Maximum nach innen hin abfällt. Weiter stromab (z = 40 mm) befindet sich das SMD-Maximum außerhalb des beobachteten Bereichs. Demzufolge erscheint die Ubereinstimmung in dieser Auswerteebene zufriedenstellend. Jedoch berücksichtigt das numerische Modell keinen Sekundärzerfall. Entsprechend müssten die numerischen SMDs die experimentellen überschätzen. Demzufolge ist bei einer Berücksichtigung des Sekundärzerfalls eine Verschlechterung der Übereinstimmung dieser Simulation mit den experimentellen Daten zu erwarten. Des Weiteren ist für eine Verbesserung in der vorderen Auswerteebene das Setzen einer mittleren Injektionsgeschwindigkeit nicht ausreichend. Insgesamt wird die Sensitivität der größeren Tropfen auf die Anfangsgeschwindigkeiten deutlich.

Bei der Simulation S5 wird eine Standardabweichung von 4,4 m/s auf die radiale Injektionsgeschwindigkeit aufgeprägt. Dies resultiert in einer starken Streuung der größeren Tropfen bereits in der vorderen Auswerteebene. Infolgedessen ist der Schwerpunkt der SMD-Verteilung breiter. Der leichte Abfall des SMDs ab $r \ge 15$ mm wird durch eine Anhäufung kleinerer Tropfen an dieser Stelle verursacht. Aufgrund der normalverteilten Radialgeschwindigkeit um den Mittelwert $\mu_{u_r} = 0$ ist es zu dem möglich, dass vereinzelt größeren Tropfen eine negative Radialgeschwindigkeit aufgeprägt wird. Daher verschiebt sich der Anstieg des SMD bereits auf $r \ge 8$ mm.

Die SMD-Verläufe der Simulationen S4 und S5 zeigen die starke Beeinflussbarkeit der Spraydispersion durch die Wahl der Parameter der Injektionsgeschwindigkeiten. Die Simulation S5 zeigt keine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Injektionsparameter der Simulation S4 führen hingegen zu einer guten Übereinstimmung in der hinteren Auswerteebene. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass eine deterministische Modellierung ausreichend ist, um die Hauptcharakteristiken des Sprays fernab der Zerstäuberdüse nachzubilden. Liegt der Fokus jedoch auf der Spraydispersion in der näheren Umgebung der Zerstäuberkante, sind fortschrittlichere Tropfenstartbedingungen notwendig als im Fall der Simulation S4.

5. OPTIMALES SETUP

Die in der Sensitivitätsstudie gewonnenen Erkenntnisse dienen der Erstellung des in diesem Abschnitt präsentierten optimalen Setup (OS). Hiermit wird das experimentelle Spray bestmöglich reproduziert. Es wird zusätzlich zu dem bereits in der Sensitivitätsstudie verwendeten numerischen Modell weiterhin ein numerisches Modell mit 10 Millionen Zellen und LES-Ansatz verwendet. Im Folgenden werden sowohl der statistische Ansatz der Modellierung der Tropfenstartbedingungen, als auch die numerischen Modelle miteinander verglichen. Für das optimale Setup werden die bereits in



BILD 10. Räumliche SMD-Verteilungen im Falle variierender Injektionsgeschwindigkeiten (S0, S4, S5).

Tab. 2 dargestellten Parameterwerte verwendet. Die Parameter der axialen Injektionsposition werden zu μ_z = 3 mm und σ_z = 5 mm gesetzt. Hiermit soll ein heterogeneres Spray aufgrund der Injektion in unterschiedliche Strömungsregime eingestellt werden. Die mittleren Injektionsgeschwindigkeiten (μ_{u_z} = 5 m/s und $\mu_{u_r} = 6.7 \text{ m/s}$) reflektieren zum einen die initiale Geschwindigkeit der Tropfen aufgrund der Filmströmung und der Beschleunigung beim Primärzerfall. Des Weiteren wird der mittlere initiale Geschwindigkeitsvektor an der Gasströmung in der Nähe zur Zerstäuberkante ausgerichtet. Zusätzlich verursachen Standardabweichungen der Geschwindigkeiten in der Größenordnung der Mittelwerte dort eine starke Dispersion größerer Tropfen. Folglich zielen die Parameterwerte auf eine Anpassung des Verhaltens großer Tropfen ab, da kleine Tropfen weniger sensitiv auf die Tropfenstartbedingungen reagieren. Denn kleine Tropfen werden stark durch die Gasströmung beeinflusst. Aus diesem Grund wird auch der Einfluss der Modellierung der Gasströmung durch die beiden numerischen Modelle untersucht. Dementsprechend wird das optimale Setup sowohl mit dem numerischen Modell mit URANS-Ansatz (OSU) aus der Sensitivitätsstudie als auch mit feinerem Netz und LES-Ansatz (OSL) simuliert. Die zeitlichen Mittelungen von OSU und OSL beginnen nach 10 ms. Die Mittelung wird auf eine Dauer von 11,5 ms beziehungsweise 15 ms reduziert.

In Bild 11 sind die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Tropfen für verschiedene Größenklassen für den Fall der OSU-Simulation dargestellt. Im Vergleich mit den Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Referenzsimulation S0 (vgl. Bild 8), ergibt sich deutlich mehr Dispersion, insbesondere in den beiden größeren Tropfenklassen (unten). Die Tropfen dieser Klassen folgen Trajektorien, welche bedingt durch das reduzierte Verhältnis von μ_{u_z}/μ_{u_r} weiter nach außen gerichtet sind. Die kleinste Tropfen-



BILD 11. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Flüssigkeitsvolumens, unterteilt in Tropfengrößenklassen (OSU).

größenklasse (oben rechts) hingegen zeigt große Übereinstimmung mit der Referenzsimulation. Dies ist auf die gleiche numerische Beschreibung der Gasphase zurückzuführen. Jedoch befinden sich hier vermehrt kleinste Tropfen in der Nähe der Mittelachse des Zerstäubers.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Simulation OSL (vgl. Bild 12) verhalten sich ähnlich zu OSU. Größere Unterschiede sind einzig für die kleinste Tropfenklasse ($D \in [1 \ 10] \mu m$) festzustellen. Diese werden am stärksten durch die Gasphase beeinflusst. Insbesondere instationären Strömungsphänomenen kommt bei der Bewegung dieser Tropfen eine besondere Wichtigkeit zu. Dies äußert sich in einer inhomogeneren Verteilung. Zudem ist eine große kohärente Struktur sichtbar, welche Tropfentrajektorien vom Außenbereich in die Nähe der Mittelachse ermöglicht. Wie bereits von Keller et al. [9] beobachtet, wird hier der Einfluss größerer Wirbel, der Rezirkulationszone und des PVC sichtbar.

Der Einfluss dieser Phänomene auf Tropfen des Durchmessers 10–125µm ist von geringerer Ausprägung. Ein kleiner Teil dieser Tropfen wird jedoch ebenfalls durch die kohärente Struktur beein-



BILD 12. Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Flüssigkeitsvolumens, unterteilt in Tropfengrößenklassen (OSL).

flusst. Im Vergleich zur gleichen Größenklasse der Simulationen S0 und auch OSU ist die Dispersion deutlich erhöht und Haupttrajektorien sind weniger stark ausgeprägt. Die größten Tropfen (unten rechts) zeigen das gleiche Verhalten wie im Fall der OSU, da hier die meisten Tropfen einer ähnlichen Trajektorie folgen. In dieser Betrachtung wird deutlich, wie zum einen die Gasphase die Dispersion und Verteilung der kleinen Tropfen erhöht. Zum anderen verteilen sich die größeren Tropfen durch die aufgeprägten Startbedingungen großflächiger.

In Bild 13 sind die SMD-Verläufe der Referenzsimulation sowie der beiden Simulationen mit dem optimalen Setup dargestellt. Die drei Auswerteebenen bei den Axialkoordinaten von 25, 35 und 40 mm zeigen die Entwicklung der Spraydispersion mit größer werdendem Abstand zur Zerstäuberdüse. Die Parameter der Referenzsimulation repräsentieren einen deterministischen Modellierungsansatz. Ein Vergleich mit dem optimalen Setup bietet die Möglichkeit der Bewertung des fortgeschritteneren Ansatzes des erweiterten PAMELA-Modells. Es sind Unterschiede aufgrund der geänderten Startbedingungen der Tropfen zu erwarten. Auch Verbesserungen, welche durch die numerische Beschreibung der Gasphase verursacht werden, sind in den numerischen Daten vorzufinden. Der Vergleich von S0, OSU und OSL lässt folglich auch Rückschlüsse auf die Ursache der Verbesserungen zu. Ferner ist zu bewerten, ob sich die Erkenntnisse, welche im Rahmen der Sensitivitätsstudie mit einem einfacheren numerischen Setup gewonnen wurden, auf das verbesserte LES-Setup übertragen lassen.

Eine starke Streuung der Tropfen ist in den Daten von OSU und OSL sichtbar. Durch die erhöhte Dispersion sind die Kurvenverläufe glatter und Maxima weniger stark ausgeprägt. Bei beiden Simulationen besteht weiterhin ein bimodaler SMD-Verlauf in den Auswerteebenen zwischen 25-35 mm axialem Abstand zur Zerstäuberkante. Diese Bimodalität ist im Fall der OSL deutlich schwächer ausgeprägt und wird stromab geglättet, was in einer verbesserten Übereinstimmung mit dem Experiment resultiert. Infolgedessen verbleibt bei z = 40 mm lediglich ein Versatz von $15-20 \,\mu$ m, welcher auf die Vernachlässigung des Sekundärzerfalls zurückzuführen ist.

Im Vergleich zur Referenzsimulation zeigt das entwickelte optimale Setup deutliche Verbesserungen sowohl in der Nähe zur Zerstäuberkante als auch stromab. Insbesondere bei z = 25 mm ist die Übereinstimmung jedoch noch nicht zufriedenstellend. Darüber hinaus wurde im Fall der OSL der SMD an der Mittelachse ($r \leq 5 \text{ mm}$) angehoben, was mit keiner vorausgegangenen Konfiguration erreicht wurde. Dies ist auf die Abbildung instationärer Phänomene, wie aufgelöster Turbulenz und dem PVC zurückzuführen. Insbesondere der PVC ist als Einflussfaktor auf die Spraydispersion bekannt [9]. Folglich scheint der PVC notwendig, um leicht größere Tropfen in die Rezirkulationszone zu befördern, da dies nicht durch eine Anpassung der Tropfenstartbedingungen erreicht werden konnte.

Veränderungen, welche einzig der geänderten numerischen Beschreibung der Gasphase zuzuordnen sind, werden durch die Abweichungen zwischen OSU und OSL sichtbar. Jedoch sind Unterschiede zwischen OSU und OSL einerseits und der Referenzsimulation andererseits von größerer Signifikanz. Folglich sind viele der Verbesserungen auf die optimierte Modellierung der Tropfenstartbedingungen zurückzuführen. Es ist ersichtlich, dass die Ähnlichkeit von OSU und OSL in der Nähe zur Zerstäuberkante zunimmt und sich folglich die Auswirkungen des numerischen Modells stromab akkumulieren. Jedoch ist selbst bei z = 40 mm die Übereinstimmung zwischen OSU und OSL weiterhin gut. Hieraus wird die starke Sensitivität der Spraydispersion auf die Tropfenstartbedingungen deutlich. Zudem bestätigt sich damit die Übertragbarkeit der Ergebnisse aus der Sensitivitätsstudie auf das verbesserte numerische Modell des optimalen Setups.

In Bild 14 sind die volumengewichteten Axialgeschwindigkeiten der Tropfen für die drei Konfigurationen dargestellt. Bereits die Ergebnisse der Referenzsimulation S0 sind von akzeptabler Über-



BILD 13. Räumliche SMD-Verteilungen im Fall der Referenzkonfiguration S0 und der optimalen Setups OSU und OSL.



BILD 14. Volumengewichtete Axialgeschwindigkeiten im Fall von S0, OSU und OSL.

einstimmung mit den experimentellen Daten. Defizite sind in der vorderen Auswerteebene für Radien $r \ge 25$ mm festzustellen. Dies ist dem schmalen Spraywinkel zuzuschreiben. Im Fall von OSU und OSL ergibt sich in der vorderen Auswerteebene eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Da auch weiter stromab die Ähnlichkeit beider Simulationen mit optimalem Setup groß ist, sind diese Verbesserungen hauptsächlich auf die Modellierung der Tropfenstartbedingungen zurückzuführen. Die numerische Beschreibung der Gasphase weist insgesamt einen geringfügigeren Einfluss auf die volumengewichteten Axialgeschwindigkeiten auf.

6. ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Studie wurde die mittels Euler-Lagrange-Verfahren berechnete Spraydispersion eines filmlegenden luftgestützten Zerstäubers untersucht. Eine Erweiterung des Primärzerfallsmodells PAMELA [1] wurde verwendet, um Tropfenstartbedingungen festzulegen. Experimentelle Vergleichsdaten [4] dienten zur Bewertung der Validität der Vorhersage von gasförmiger und flüssiger Phase. Zunächst wurden im Rahmen einer Sensitiviätsstudie wesentliche Einflüsse auf die Spraydispersion ermittelt. Ausgehend von diesen Erkenntnissen wurde anschließend ein Satz an Parametern, welche das optimale Setup kennzeichnen, erstellt. Dieses Setup bietet eine bestmögliche Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Die Studie demonstriert die herausragende Wichtigkeit der Modellierung der Tropfenstartbedingungen zur Reproduktion des Sprays eines realistischen Kraftstoffzerstäubers. Vereinfachte Injektionsbedingungen, wie sie in der Referenzkonfiguration Anwendung fanden, erwiesen sich als nicht ausreichend. Die fortschrittlicheren Anfangsbedingungen des optimalen Setups führten zu deutlichen Verbesserungen. Somit konnten Eigenschaften des experimentellen Sprays reproduziert werden. Abweichungen liegen hauptsächlich in der Nähe zur Zerstäuberkante vor.

Diese Studie zeigt, dass die Kombination aus Primärzerfallsmodell und univariat modellierter Injektionspositionen und -geschwindigkeiten eine praktikable Lösung der Injektionsproblematik in Euler-Lagrange-Simulationen darstellt. Eine multivariate Modellierung der Wechselbeziehungen der Tropfenstartbedingungen bietet weiteres Optimierungspotential.

DANKSAGUNG

Die numerischen Berechnungen dieser Studie wurden auf dem Hochleistungsrechencluster bwUni-Cluster durchgeführt. Das Cluster wird vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert. Die Autoren honorieren die Unterstützung des Landes Baden-Württemberg über bwHPC.

Kontaktadresse:

niklas.buerkle@kit.edu

Literatur

- [1] G. Chaussonnet, O. Vermorel, E. Riber, and B. Cuenot. A new phenomenological model to predict drop size distribution in large-eddy simulations of airblast atomizers. *International Journal of Multiphase Flow*, 80:29–42, 2016. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.10.014.
- [2] S. Hoffmann, S. Holz, R. Koch, and H.-J. Bauer. Euler-lagrangian simulation of the fuel spray of a planar prefilming airblast atomizer. *CEAS Aeronautical Journal*, 12:245–259, 2021. DOI: 10.1007/s13272-021-00493-y.
- [3] N. Bürkle, S. Holz, E. Bärow, R. Koch, and H.-J. Bauer. Effect of droplet starting conditions on the spray dispersion resulting from a swirl cup injector. In ASME Turbo Expo 2021: Turbomachinery Technical Conference and Exposition, Virtual, Online, June 7-11, 2021.
- [4] E. Bärow, S. Gepperth, R. Koch, and H.-J. Bauer. Effect of the precessing vortex core on primary atomization. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 229(6):909–929, 2015. DOI: 10.1515/zpch-2014-0619.
- [5] K. Kuo. Fundamentals of turbulent and multiphase combustion. Wiley, Hoboken, N.J, 2012. ISBN: 9781118107683.
- [6] R. Koch, S. Braun, L. Wieth, G. Chaussonnet, T. Dauch, and H.-J. Bauer. Prediction of primary atomization using smoothed particle hydrodynamics. *European Journal* of Mechanics - B/Fluids, 61:271–278, 2017. DOI: 10.1016/j.euromechflu.2016.10.007.
- S. Menon and R. Ranjan. Spray combustion in swirling flow. In Fernando F. Grinstein, editor, *Coarse Grained Simulation and Turbulent Mixing*, pages 351– 392. Cambridge University Press, 2016. DOI: 10.1017/cbo9781316480243.014.
- [8] C. Tropea. Optical particle characterization in flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 43(1):399–426, 2011. DOI: 10.1146/annurev-fluid-122109-160721.
- [9] J. Keller, M. Gebretsadik, P. Habisreuther, F. Turrini, N. Zarzalis, and D. Trimis. Numerical and experimental investigation on droplet dynamics and dispersion of a jet engine injector. *International Journal of Multiphase Flow*, 75:144–162, 2015. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.05.004.

- [10] R. Hadef and B. Lenze. Effects of coand counter-swirl on the droplet characteristics in a spray flame. Chemical Enand Processing: gineering Process In-47(12):2209 tensification, 2217, 2008. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cep.2007.11.017.
- [11] L. Opfer, I. V. Roisman, and C. Tropea. Primary atomization in an airblast gas turbine atomizer. In *Flow and Combustion in Advanced Gas Turbine Combustors*, pages 3–27. Springer Netherlands, 2012. DOI: 10.1007/978-94-007-5320-4_1.
- [12] S. Popinet. Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 190(2):572–600, 2003. DOI: 10.1016/s0021-9991(03)00298-5.
- [13] S. Popinet. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal* of Computational Physics, 228(16):5838–5866, 2009. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.04.042.
- [14] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510–524, 2007. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001.
- [15] M. Herrmann. On Simulating Primary Atomization Using the Refined Level Set Grid Method. *Atomization and Sprays*, 21(4):283–301, 2011. DOI: 10.1615/atomizspr.2011002760.
- [16] K. Warncke, S. Gepperth, B. Sauer, A. Sadiki, J. Janicka, R. Koch, and H.-J. Bauer. Experimental and numerical investigation of the primary breakup of an airblasted liquid sheet. *International Journal* of Multiphase Flow, 91:208–224, 2017. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.12.010.
- [17] S. V. Apte, K. Mahesh, and P. Moin. Largeeddy simulation of evaporating spray in a coaxial combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2):2247–2256, 2009. DOI: 10.1016/j.proci.2008.05.059.
- [18] W. P. Jones, A. J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combustion and Flame*, 161(1):222–239, 2014. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.07.016.
- [19] M. Gorokhovski. The stochastic lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays. *Atomization and Sprays*, 11(5):15, 2001. DOI: 10.1615/atomizspr.v11.i5.20.
- [20] T. Inamura, M. Shirota, M. Tsushima, M. Kato, S. Hamajima, and A. Sato. Spray characteristics of prefilming type of airblast atomizer. In

ICLASS 2012, 12th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Heidelberg, Germany, September 2-6, 2012.

- [21] E. Riber, V. Moureau, M. García, T. Poinsot, and O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics*, 228(2):539–564, 2009. DOI: 10.1016/j.jcp.2008.10.001.
- [22] F. Jaegle, J.-M. Senoner, M. García, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, and T. Poinsot. Eulerian and lagrangian spray simulations of an aeronautical multipoint injector. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2):2099–2107, 2011. DOI: 10.1016/j.proci.2010.07.027.
- [23] J.-M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, and T. Poinsot. Eulerian and lagrangian large-eddy simulations of an evaporating two-phase flow. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7):458–468, 2009. DOI: 10.1016/j.crme.2009.06.002.
- [24] S. Holz, G. Chaussonnet, S. Gepperth, R. Koch, and H.-J. Bauer. Comparison of the primary atomization model pamela with drop size distributions of an industrial prefilming airblast nozzle. In *ILASS-Europe 2016, 27th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Brighton, UK, September 4-7,* 2016.
- [25] M. S. Anand, R. Eggels, M. Staufer, M. Zedda, and J. Zhu. An advanced unstructured-grid finitevolume design system for gas turbine combustion analysis. In ASME 2013 Gas Turbine India Conference, Bangalore, India, December 5-6, 2013. DOI: 10.1115/gtindia2013-3537.
- [26] R. Eggels. The application of combustion LES within industry. In *Direct and Large-Eddy Simulation X*, volume 24, pages 3–13. 2017. DOI: 10.1007/978-3-319-63212-4_1.
- [27] T.-H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. A new k-epsilon eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids*, 24(3):227–238, 1995. DOI: 10.1016/0045-7930(94)00032-t.
- [28] A. W. Vreman. An eddy-viscosity subgridscale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Phy*sics of *Fluids*, 16(10):3670–3681, 2004. DOI: 10.1063/1.1785131.
- [29] H. Mongia, M. Al-Roub, A. Danis, D. Elliott-Lewis, A. Johnson, S. Vise, S.-M. Jeng, V. McDonell, and G. Samuelsen. Swirl cup Modeling Part 1. In 37th AIAA/ASME/SAE/See Joint Propulsion Conference and Exhibit, Salt Lake City, Utah, July 8-11, 2001. DOI: 10.2514/6.2001-3576.

- [30] V. Sankaran and S. Menon. LES of spray combustion in swirling flows. *Journal of Turbulence*, 3, 2002. DOI: 10.1088/1468-5248/3/1/011.
- [31] S. Gepperth, E. Bärow, R. Koch, and H.-J. Bauer. Primary atomization of prefilming airblast nozzles: Experimental studies using advanced image processing techniques. In ILASS-Europe 2014, 26th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Bremen, Germany, September 8-10, 2014.
- [32] V. Armenio and V. Fiorotto. The importance of the forces acting on particles in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 13(8):2437–2440, 2001. DOI: 10.1063/1.1385390.
- [33] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. von Halle-Wittenberg, and T. Yutaka. *Multiphase Flows with Droplets and Particles, Second Edition.* Taylor & Francis Inc, 2011. ISBN: 1439840504.
- [34] S. Gepperth, D. Guildenbecher, R. Koch, and H.-J. Bauer. Pre-filming primary atomization: Experiments and modeling. In *ILASS-Europe 2010*, 23rd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Brno, Czech Republic, September 6-9, 2010.
- [35] S. Gepperth, A. Müller, R. Koch, and H.-J. Bauer. Ligament and droplet characteristics in prefilming airblast atomization. In *ICLASS 2012, 12th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Heidelberg, Germany, September 2-6*, pages 2–6, 2012.
- [36] S. Gepperth, R. Koch, and H.-J. Bauer. Analysis and comparison of primary droplet characteristics in the near field of a prefilming airblast atomizer. In ASME Turbo Expo 2013: Turbine Technical Conference and Exposition, San Antonio, Texas, June 3-7, 2013. DOI: 10.1115/GT2013-94033.
- [37] N. Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2):93–161, 2006. DOI: 10.1016/j.pecs.2005.10.002.
- [38] S. B. Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6:35–35, 2004. DOI: 10.1088/1367-2630/6/1/035.
- [39] F. Evrard, F. Denner, and B. van Wachem. Quantifying the errors of the particlesource-in-cell euler-lagrange method. *International Journal of Multiphase Flow*, 2021. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103535.
- [40] T. Dauch, S. Braun, L. Wieth, G. Chaussonnet, M. Keller, R. Koch, and H.-J. Bauer. Computation of liquid fuel atomization and mixing by

means of the sph method: Application to a jet engine fuel nozzle. In *ASME Turbo Expo 2016: Turbomachinery Technical Conference and Exposition, Seoul, South Korea, June 13-17*, 2016. DOI: 10.1115/GT2016-56023.

[41] A. H. Lefebvre and V. G. McDonell. *Atomization and Sprays, Second Edition*. Taylor & Francis Inc, 2017. ISBN: 1498736254.