

Simulation der Tropfenverdampfung unter Nutzung des Euler-Lagrange-Modells aus FLUENT

Simulation of droplet vaporization using the Euler-Lagrange-Model of FLUENT

Monika Kutz

Kurzfassung

Die numerische Simulation stellt ein geeignetes Mittel dar, die komplexen Vorgänge bei der Brandunterdrückung durch Wassernebel detailliert zu untersuchen. Das dazu verwendete Modell wird vorgestellt und die für die Verdampfung modellierten Gesetze für den Austausch von Impuls-, Masse und Energie zwischen Gas und Wassernebel für Tropfengrößen im Bereich von 10 -100 µm Durchmesser analysiert. Anhand von Simulationen in einem einfachen Modellgebiet und für eine stationäre Heißgasströmung wird das unterschiedliche Ausbreitungs- und Verdampfungsverhalten kleiner und großer Tropfen aufgezeigt und Schlussfolgerungen für die Simulation komplexerer Modelle gezogen.

Abstract

The numerical simulation is a suitable tool to investigate the complex processes of fire extinguishing with fine water mist. The used FLUENT model is presented. Based on the basic laws of momentum, mass and heat exchange implemented in FLUENT for the modelling of vaporization are analyzed in consideration of different droplet sizes in the range of 10 -100 µm. In numerical simulations for a simplified geometry and a stationary heat flow the behaviour of evaporating droplets of different size is shown. Conclusions for the simulation of more complex models are drawn.

Einleitung

Im Rahmen der Drittmittelforschung wird am IdF LSA die Beurteilung der Wirksamkeit von Wassernebel zur Deflagrationsunterdrückung unter Nutzung des CFD-Programms FLUENT vorgenommen. Die hohe Ausbreitungsgeschwindigkeit dieser Vorgänge erfordert die Brandunterdrückung in kürzester Zeit. Speziell für Fahrzeuginnenräume wird eine Deflagrationsunterdrückung innerhalb von ca. 250 ms gefordert, was die Verwendung feinstverteilter Wassernebels aufgrund seines hohen Löschpotenzials besonders interessant macht. Zur Analyse der Wirkmechanismen der Beeinflussung derartig schneller Prozesse mittels feinstverteiltem Wassernebel stellt die numerische Simulation ein geeignetes Mittel dar.

Unter Anwendung des Dispersed Phase Modells (DPM) aus FLUENT können die Modellgleichungen und Randbedingungen zur Abbildung der komplexen physikalischen Prozesse bei der Wechselwirkung zwischen Gas und Wassernebel formuliert und numerisch gelöst werden. Die Lösung des komplexen Systems gekoppelter Differentialgleichungen ist mit einem sehr hohen numerischen Berechnungsaufwand verbunden, der an Rechnerkapazität und Berechnungszeit teilweise extreme Forderungen stellt. Im Prozess der Entwicklung und rechen-technischen Realisierung des Berechnungsmodells wurden die Simulationen in unterschiedlichen Modellierungsstufen mit reduzierter Komplexität oder auch spezifischen Vereinfachungen vorgenommen. Diese Vorgehensweise ist Bestandteil der notwendigen Validierung wichtiger Teilmodelle wie des Verdampfungsmodells oder des Reaktionsmodells.

Modellbeschreibung

Die Wassernebel ausbreitung in einem Raum lässt sich durch ein Euler-Lagrange-Modell beschreiben. Dabei wird die Fluidströmung im Raum als kontinuierliche Phase (Gasphase) angesehen, mit der der Wassernebel als disperse Phase in Wechselwirkung tritt. Für das komplexe Modell der Deflagrationsunterdrückung durch Wassernebel sind in die Modellierung der Gasphase Modelle für Turbulenz, chemische Reaktion und Strahlung einzubeziehen. In der dispersen Phase werden die mechanischen Bewegungsgleichungen der Wassertropfen gelöst, wobei zur Beschreibung der Turbulenz der Tropfen ein stochastisches Modell angewandt wird. Die Wechselwirkung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase wird mittels Austausch- und Quelltermen hergestellt.

Es ergibt sich ein Gleichungssystem aus den Bilanzgleichungen für die Gasphase in der allgemeinen Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) + S_\Phi \quad (1)$$

mit $\Phi = u_i, Y_j, T, k, \omega$ und den Austauschkoefizienten Γ_Φ und Quelltermen S_Φ .

Für die Bewegungsgleichungen der Tropfen gilt

$$\frac{d\bar{u}^{p_i}}{dt} = F_D(\bar{\mathbf{u}} - \bar{\mathbf{u}}^{p_i}) + \bar{\mathbf{g}} \quad (2)$$

mit

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{c_D \text{Re}_d}{24} \quad (3)$$

als Widerstandskraft und c_D als Widerstandskoeffizient für sphärische Tropfen. Die Energieänderung am Tropfen i wird durch die Gleichung

$$m^{p_i} c_p^{p_i} \frac{dT^{p_i}}{dt} = h A^{p_i} (T_\infty - T^{p_i}) + \frac{dm^{p_i}}{dt} h_{fg} + \varepsilon_p A^{p_i} \sigma (\Theta_R^4 - (T^{p_i})^4) \quad (4)$$

beschrieben mit

m^{p_i}	-	Masse des Partikels
$c_p^{p_i}$	-	Wärmekapazität des Partikels
T^{p_i}	-	Temperatur des Partikels
T_∞	-	Temperatur der kontinuierlichen Phase
h	-	Wärmeübergangskoeffizient
h_{fg}	-	Latente Wärmeenergie des Tropfens
Θ_R	-	Strahlungstemperatur
ε_p	-	Partikelemissionsfaktor
A^{p_i}	-	Oberfläche des Tropfens
σ	-	Stefan-Boltzmann Konstante

Der erste Term auf der rechten Seite der Gl. (4) beschreibt den Einfluss des konvektiven Wärmeübergangs. Nach Ranz und Marshall wird der funktionelle Zusammenhang zwischen dem Wärmeübergangskoeffizienten h und Tropfendurchmesser d_p durch die Nusseltzahl

$$Nu = \frac{hd_p}{k_\infty} = 2.0 + 0.6(Re_d)^{1/2} Pr^{1/3} \quad (5)$$

mit der relativen Reynoldszahl Re_d aus Partikeldurchmesser d_p und Relativgeschwindigkeit sowie der Prandtlzahl der kontinuierlichen Phase genutzt.

Der zweite Term auf der rechten Seite von (4) stellt den Einfluss der Verdampfungsrate dar, d. h. des Massetransportes vom verdampfenden Anteil des Partikels zur kontinuierlichen Gasphase.

Die molare Massestromdichte N_j für die verdampfende Komponente j lässt sich nach

$$N_j = k_c(C_{j,s} - C_{j,\infty}) \quad (6)$$

bestimmen mit k_c als Masseübergangskoeffizient sowie $C_{j,s}$ und $C_{j,\infty}$ als Konzentrationen der Dampfkomponeute j an der Partikeloberfläche sowie in der Gasphase.

Für die Dampfkonzentration an der Tropfenoberfläche wird vorausgesetzt, dass der Partialdruck des Dampfes gleich dem Sättigungsdampfdruck p_{sat} bei vorhandener Tropfentemperatur ist, so dass sich die Dampfkonzentration an der Tropfenoberfläche aus

$$C_{j,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{RT_p} \quad (7)$$

mit R als universelle Gaskonstante ergibt.

Die Verwendung einer Korrelation für die Sherwoodzahl

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_{j,m}} = 2.0 + 0.6(Re_d)^{1/2} Sc^{1/3} \quad (8)$$

mit $D_{j,m}$ als Diffusionskoeffizienten der Komponente j in der Gasphase, der relativen Reynoldszahl und der Schmidtzahl ermöglicht die Bestimmung des bisher unbekanntem Masseübergangskoeffizienten. Der dritte Term in Gleichung (4) beschreibt die Energieänderung infolge der Strahlung der Partikel. Es wird das P1-Strahlungsmodell aus Fluent genutzt, bei dem Strahlungstemperatur Θ_R und

Strahlungsdichte G durch den Zusammenhang $\Theta = \left(\frac{G}{4\sigma}\right)^{1/4}$ verknüpft werden und

für die Strahlungsdichte G eine Transportgleichung gelöst wird.

Simulationsrechnungen im vereinfachten Modellgebiet

Das System der Modellgleichungen bildet die Grundlage für die Simulationsrechnungen. Ziel der Berechnungen ist es, die Unterschiede im Ausbreitungs- und Verdampfungsverhalten bei verschiedenen Tropfengrößen herauszuarbeiten sowie eine Validierung des Verdampfungsmodells für ein vereinfachtes Modellgebiet vorzunehmen. Als Schwerpunkt rückt damit das Strömungs- und Verdampfungsverhalten dieser Wassernebel in den Mittelpunkt. Als Vereinfachung des Modells wurde für die Gasphase eine stationäre nicht reagierende Mehrkomponenten-Gasströmung vorausgesetzt und für die disperse Phase verschiedene monodisperse Tropfensprays. Das verwendete vereinfachte Modellgebiet weist die Form eines Zylinder mit dem Durchmesser von 1.3 m und der Höhe von 2 m auf, in den am Rand bei $z=0$ ein Gasmassstrom von 5 kg/s mit einer Temperatur von 700 K in Richtung der positiven z -Achse einströmt (vgl. Bild 1). Am gegenüberliegenden

Rand $z=2\text{m}$ erfolgt die ungehinderte Ausströmung. Die übrigen Ränder werden als adiabate Wand betrachtet. Die im Bild 1 dargestellten Partikel sind die nach 50 ms erzielten Partikelverteilungen und dienen nur zur Veranschaulichung der Randbedingungen.

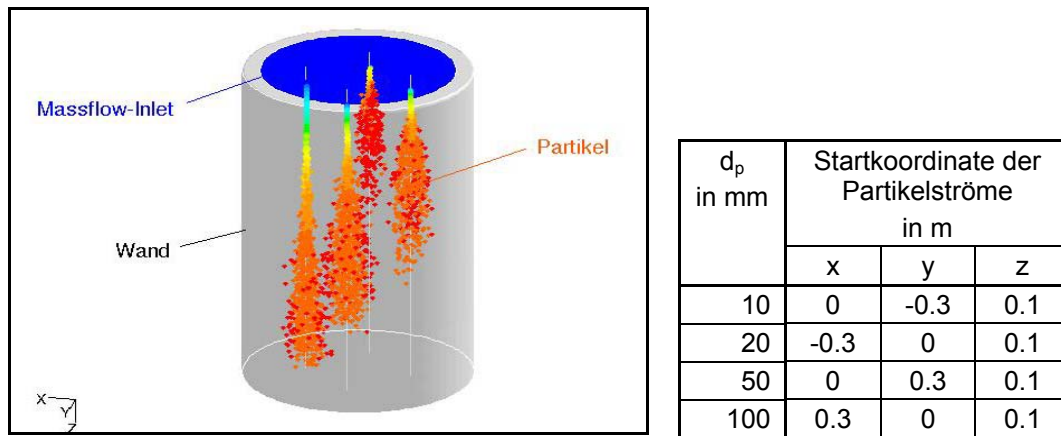


Bild 1: Vereinfachtes Modellgebiet (mit Partikelverteilung nach 50 ms)

Entsprechend der Abmessungen, Stoffwerte und Randbedingungen stellt sich eine turbulente Strömung ein, deren Wechselwirkung mit Tropfen verschiedener Größe in Simulationsrechnungen untersucht werden soll. Dazu werden 4 Partikelströme voneinander verschiedenen Tropfendurchmessers von 10, 20, 50 und 100 μm mit einem Massestrom von jeweils 0,05 kg/s, der Temperatur von 280 K und einer Geschwindigkeit von 100 m/s instationär in das Gebiet in Richtung positiver z-Achse eingebracht. Die Berechnungen wurden mit einer äquidistanten Vernetzung des Gebietes in 219 000 Volumenelemente und unter Variation der numerischen Parameter wie der Zeitschrittweite für die Partikeleindüsung und der Anzahl der Iterationen für den Partikelzeitschritt durchgeführt.

Die Ergebnisse der Fluentberechnungen sind in den nachfolgenden Bildern anhand der Temperatur-, Konzentrations- und Geschwindigkeitsverteilungen infolge einer Partikeleinströmdauer von 50 ms dargestellt. Die Grafiken wurden für 2 Schnittebenen erstellt, die durch die gedachten Bahnen der 4 verschiedenen monodispersen Partikelströme verlaufen, und veranschaulichen die Beeinflussung der Gasphase infolge des Impuls-, Masse- und Energieaustauschs unter Beachtung der Größe der Wassertropfen. Die Temperaturverteilung in Bild 2 zeigt, dass die größte Abkühlung bei einem Tropfenstrom mit den kleinsten Partikeln von 10 μm Durchmesser erzielt wird und die Abkühlung mit zunehmendem Durchmesser geringer wird. Diese resultierende Temperaturverteilung, hervorgerufen durch die Energieänderung am Tropfen, setzt sich gemäß (Gl. 4) aus Anteilen der Strahlung, des konvektiven Wärmeüberganges und des Stoffüberganges am Tropfen zusammen.

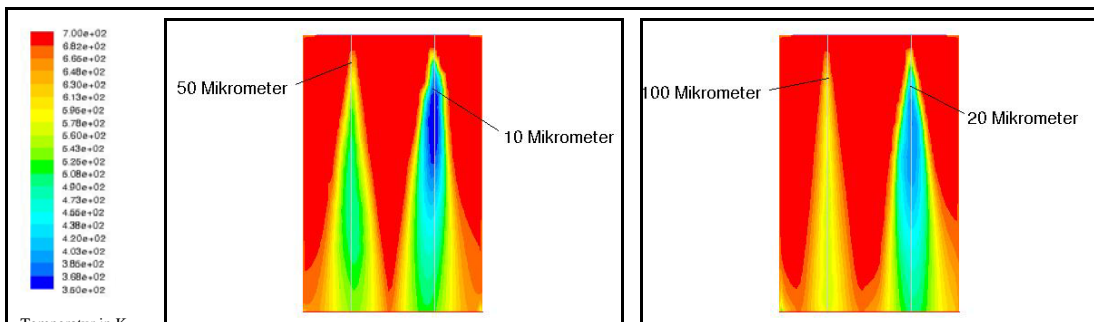


Bild 2: Temperaturverteilung in der Gasphase für die Schnittebenen bei $x=0$ (links) und bei $y=0$ (rechts) infolge einer instationären Tropfeneinströmung über 50 ms

Obwohl sich in der Temperaturbeeinflussung der Gasphase der Einfluss des Wärmeübergangs durch die Abhängigkeit des Wärmeübergangs-koeffizienten h vom Partikeldurchmesser und der relativen Reynoldszahl (Gl. 5) widerspiegelt (vgl. Bild 4), stellt dies nur einen geringen Anteil dar.

In den grafischen Verteilungen der Wasserdampfkonzentration in Bild 3, die analog zu den Temperaturverteilungen bei den kleinsten Tropfen die größten Wasserdampfanteile aufweisen, wird deutlich, dass der Verdampfungsterm den wesentlichen Anteil an der Energieänderung hat.

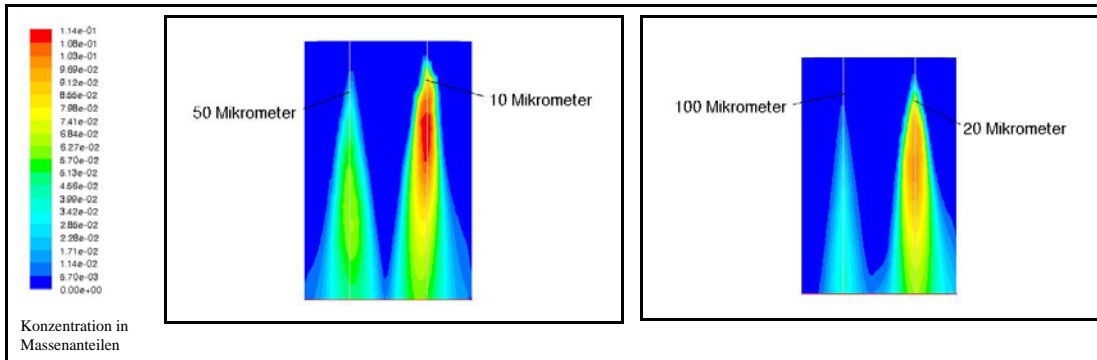


Bild 3: Konzentrationsverteilung von Wasserdampf in der Gasphase für die Schnittebenen bei $x=0$ (links) und bei $y=0$ (rechts) infolge einer instationären Tropfeneinströmung über 50 ms

Einflussgrößen für den Stoffübergang (Gl. 6) sind der Masseübergangskoeffizient k_c , der analoge Abhängigkeiten von Tropfendurchmesser und relativer Reynoldszahl wie der Wärmeübergangskoeffizient h aufweist, und der Gradient der Dampfkonzentration am Partikel. Letzterer stellt die Triebkraft für die Verdampfung dar. Da für die Dampfkonzentration an der Partikeloberfläche, der Sättigungsdampfdruck bei Partikeltemperatur gesetzt wird, die Partikeltemperatur sich aber in sehr kleinen Intervallen ändert, muss die Temperaturabhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes möglichst genau beschrieben werden. Dazu wird die Abhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes von der Temperatur durch ein Polynom vorgegeben, konstante oder stückweise lineare Funktionen sind unzureichend.

Stark veränderliche Größen, die sowohl Impuls- als auch Wärme- und Stoffübergang beeinflussen (siehe Definitionsgleichungen), sind die relative Reynoldszahl sowie der Partikeldurchmesser. Zur Veranschaulichung sind in Bild 4 der Wärmeübergangskoeffizient sowie in Bild 5 die relative Reynoldszahl als Funktion der Relativgeschwindigkeit unterschiedlich großer Tropfen in Luft und bei Raumtemperatur aufgezeichnet. Wie sich bereits aus den Definitionsgleichungen für die Übergangskoeffizienten h und k_c erkennen lässt, reduzieren sich bei Verschwinden der Relativgeschwindigkeit (Tracer) der Wärmeübergangskoeffizient

auf den Faktor $\frac{2k_\infty}{d_p}$ und Stoffübergangskoeffizient auf $\frac{2D_{j,m}}{d_p}$. Impulsaustausch

findet aufgrund $F_D=0$ nicht statt. Da der Tropfendurchmesser für die Übergangskoeffizienten als reziproker Wert eingeht, liefern besonders kleine Tropfen hohe Verdampfungsanteile, auch wenn sie nach Absinken der Relativgeschwindigkeit keine Eigengeschwindigkeit mehr aufweisen.

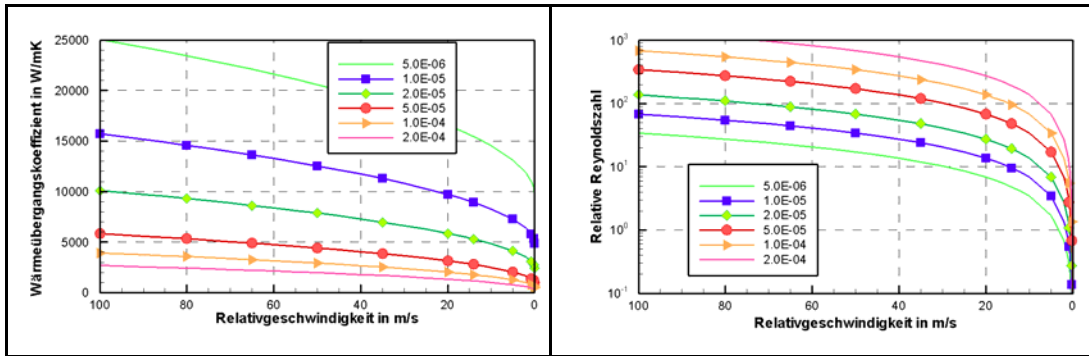


Bild 4: Wärmeübergangskoeffizient h als Funktion der Relativgeschwindigkeit für Tropfen in Luft bei 15°C

Bild 5: Relative Reynoldszahl Re_d als Funktion der Relativgeschwindigkeit für Tropfen in Luft bei 15°C

Zur Analyse der Relativgeschwindigkeit im Simulationsbeispiel sei zunächst die berechnete Geschwindigkeitsverteilung in der Gasphase betrachtet. Die Geschwindigkeiten in Bild 6 zeigen die größten Beeinflussungen der Gasphase bei den kleinsten Tropfendurchmessern. Gegenüber der Strömungsgeschwindigkeit von ca. 10 m/s bei der stationären unbeeinflussten Strömung wird durch die Partikeleinströmung eine Beschleunigung des Gases am Einbringungsort der Tropfen hervorgerufen. Mit wachsendem Tropfendurchmesser wird diese Beeinflussung geringer und die Gasphase weniger beschleunigt. Ursache dafür liegt im Impulsaustausch zwischen Gas und Partikel, für den die Widerstandskraft F_D (Gl. 4) maßgebend ist. Diese fällt mit abnehmender Relativgeschwindigkeit, aber wächst mit kleiner werdendem Partikeldurchmesser. Dieses gegensätzliche Verhalten begründet den sehr geringen Unterschied in der Geschwindigkeitsverteilung bei 10 und 20 μm Tropfen in Bild 5.

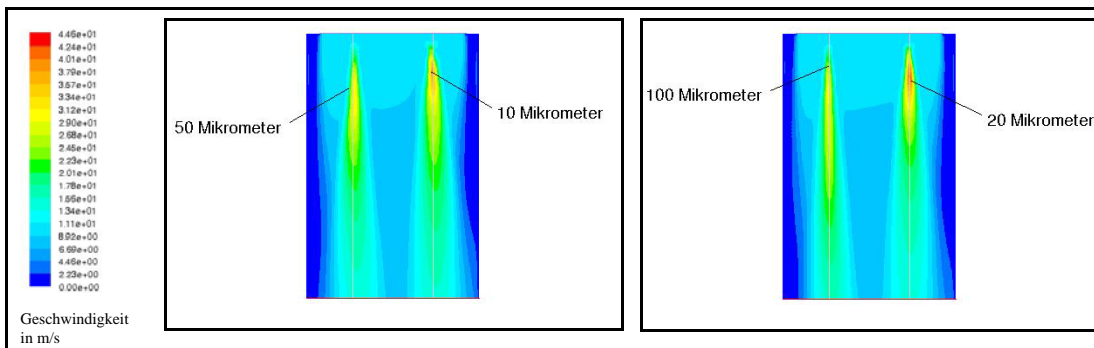


Bild 6: Geschwindigkeitsverteilung in der Gasphase für die Schnittebenen bei $x=0$ (links) und bei $y=0$ (rechts) infolge einer instationären Tropfeneinströmung über 50 ms

Die Änderung der physikalischen Größen der dispersen Phase wie Geschwindigkeit, Temperatur, Masse und Durchmesser der Tropfen sind in Bild 7 in XY-Plots entlang der z-Koordinate durch die Startkoordinaten der Partikelströme (gedachte Partikelbahnen) gezeigt. Neben den erwarteten deutlichen Abhängigkeiten der Temperatur-, Geschwindigkeits- und Masseänderung der Tropfen von der Tropfengröße sind große Schwankungen der Tropfengeschwindigkeiten bei den kleinen 10 und 20 μm Tropfen zu beobachten. Diese sind auf das verwendete stochastische Modell für die Partikelturbulenz zurückzuführen. Weiterhin ist erkennbar, dass die Lebensdauer der 10 μm Tropfen nur etwa 37 ms beträgt und auch die etwas größeren Tropfen von 20 μm nach etwa 45-50 ms verdampft sind. Nur geringe Masseänderungen sind bei den größeren Tropfen zu erkennen. Die Verlangsamung der Tropfengeschwindigkeit zeigt zu Beginn der Einströmung bis ca. 30 ms eine deutliche Tropfengrößenabhängigkeit. Die Strömungsgeschwindigkeit des Tropfens sinkt in diesem Bereich bei kleinerem Tropfendurchmesser schneller. Erst

danach ist für alle Tropfengrößen eine annähernd gleiche Strömungsgeschwindigkeit zu verzeichnen.

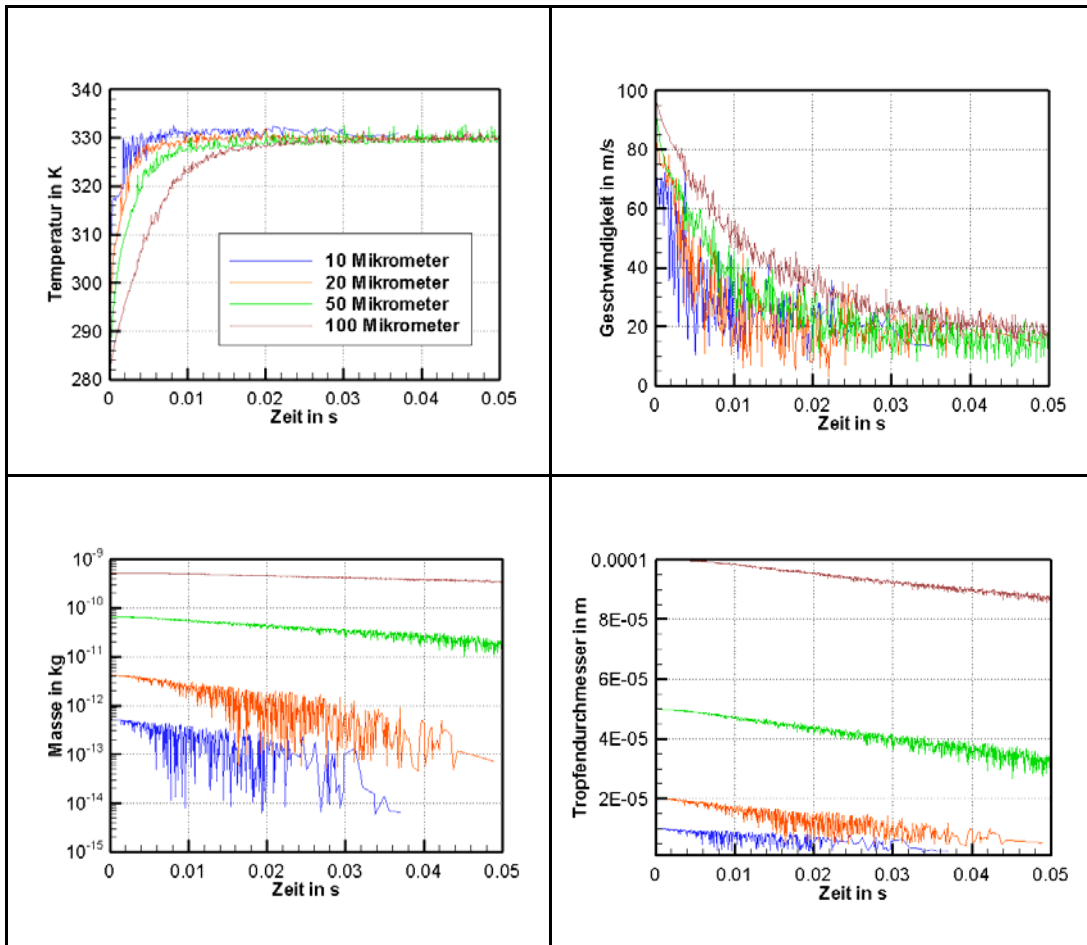


Bild 7: Temperatur-, Geschwindigkeits- und Masseänderung der Partikel als Funktion ihrer Aufenthaltsdauer

Anhand der berechneten Gas- und Partikelgeschwindigkeit ist es möglich, Änderung der Relativgeschwindigkeit in Abhängigkeit von den sich ändernden physikalischen Größen im Berechnungsgebiet und ihren Einfluss auf die Übergangsprozesse zu analysieren. In Bild 8 ist die Relativgeschwindigkeit durch Gegenüberstellung der Gas- und Partikelgeschwindigkeit als Funktion des zurückgelegten Weges für die 4 unterschiedlichen Tropfengrößen grafisch dargestellt. Es zeigt sich, dass die kleinsten Tropfen gleich zu Beginn einen starken Geschwindigkeitsabfall erfahren, die Gasgeschwindigkeit ansteigt und daraus resultierend die Relativgeschwindigkeit in kurzer Zeit auf Null absinkt. Damit bewegt sich das Partikel nur noch passiv mit der Gasphase und der Wärmeübergangskoeffizient ist nur noch von der Wärmeleitfähigkeit der Gasphase und der Tropfengröße abhängig. Der Wärme- und Stoffübergang setzt sich fort, denn nach einer zurückgelegten Strecke von ca. 1,2 m sind die 10 μm Partikel verdampft. Ohne Relativgeschwindigkeit kommt auch der Impulsaustausch zum Erliegen und die Geschwindigkeit der Gasphase sinkt. Auf den Ausgangswert ab. Bei größeren Partikeln fällt die Relativgeschwindigkeit von größerem Anfangswert und über eine größere Zeit und damit größere Strecke. Die Gasgeschwindigkeit wird demzufolge weniger stark beeinflusst. Die Reichweite der Partikel wird mit wachsendem Durchmesser größer.

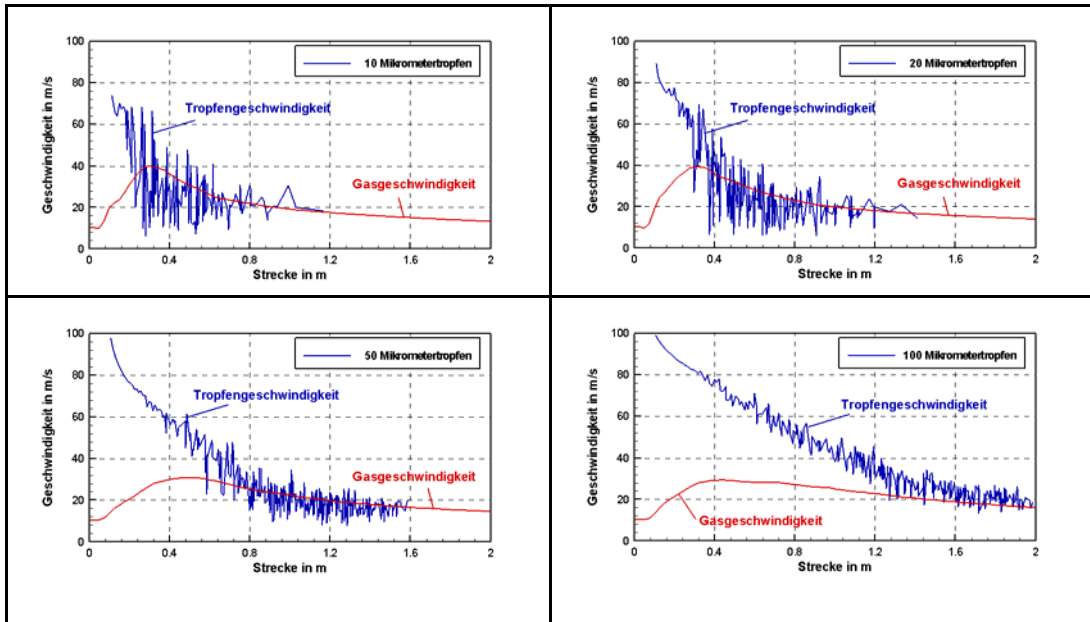


Bild 8: Vergleich der Geschwindigkeit von Tropfen- und Gasgeschwindigkeit für 10, 20, 50 und 100 µm Tropfen

Die Wirkung auf die Temperaturverteilung im Berechnungsgebiet zeigt Bild 9 in einer Gegenüberstellung der Temperatur von Gasphase und der Partikeltemperatur. Im Bereich nennenswerter relativer Reynoldszahlen sind starke Abkühlungen zu verzeichnen, bei kleinen Tropfendurchmessern die stärksten. Mit Absinken der Relativgeschwindigkeit auf Werte von Null, bleibt die erzielte Gastemperatur solange nahezu erhalten (quasistationärer Zustand), bis die Partikel endgültig verdampft sind und als Folge die Gasgeschwindigkeit wieder ansteigt.

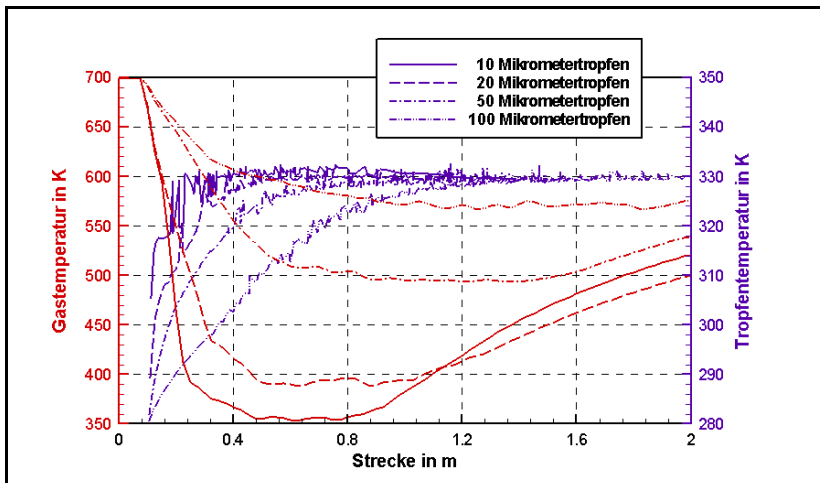


Bild 9: Gegenüberstellung der Temperatur von Gasphase und Tropfen bei den verschiedenen Tropfengrößen

Die bisher gezeigten Berechnungen wurden mit unterschiedlichen Partikelzeitschrittweiten und unterschiedlicher Anzahl von Iterationsschleifen durchgeführt. Bei der Verwendung von 20 bis 100 µm Partikeln wurden mit Partikelzeitschrittweiten von $1.0 \cdot 10^{-4}$ s und 500 Iterationen sowie Zeitschrittweiten von $1.0 \cdot 10^{-5}$ s bei 100 und 300 Iterationen größtenteils gleiche Ergebnisse erzielt. Berechnungen mit Partikeln von 10 µm zeigten bei den aufwändigsten Parametern, der Zeitschrittweite von $1.0 \cdot 10^{-5}$ s und 300 Iterationen deutliche Abweichungen. Diese Abweichungen sowie die stark schwankenden Berechnungswerte sowie die aufgezeigten großen Auswirkungen auf die Quellterme bei kleinen Partikeldurchmessern zeigen das Erfordernis einer möglichst genauen Lösung der Modellgleichungen. Das Geschwindigkeitsfeld ist dabei

Schlussfolgerungen

Die Impuls-, Masse- und Energie-Austauschterme des DPM-Modells aus FLUENT sind geeignet, die Verdampfung von Wasserdampf zu modellieren. Bekannte Phänomene werden qualitativ übereinstimmend wiedergespiegelt. Im Simulationsbeispiel einer stationären Heißgasströmung zeigte sich, dass kleine Partikel größere Masse- und Energieübergänge bei gleichen Massstromraten ermöglichen. Dagegen wirkt der Nachteil einer nur geringen Reichweite kleiner Tropfen sowie eines höheren Berechnungsaufwandes für die Erzielung einer konvergenten Lösung bei kleinen Partikeln.

Die Modellerweiterung von der stationären auf die instationäre und reagierende Gasströmung, die für die numerische Untersuchung der Deflagration zwingend erforderlich sind, bedeuten gegenüber dem Berechnungsaufwand für die stationäre Lösung zusätzlichen Aufwand, da die konvergente Lösung für jeden Zeitschritt gefordert ist. Für die Erweiterung auf den realen Anwendungsfall ist eine Verwendung von nur kleinen Tropfen kaum geeignet, da ihre Reichweite nur begrenzt ist. Der Nachteil der geringen Reichweite kleiner Tropfen kann durch Verwendung eines polydispersen Wasserdampfes vermieden werden.