

14 Symulacja 0D

14.1 Wstęp

W celu wykrycia błędów, złych ustawień lub ostatecznego potwierdzenia wyników otrzymanych w symulacjach 3D, które przedstawiono w rozdziałach [12] i [13], postanowiono wykonać uproszczoną symulację zero wymiarową. Zdecydowano się na darmowy program Cantera, który po odpowiednich modyfikacjach wykorzystywany jest także do weryfikacji i analizy wyników otrzymywanych w maszynach pojedynczego sprężu [21].

Cantera umożliwia modelowanie spalania stukowego wykorzystując tylko reakcje chemiczne, bez konieczności wykorzystywania dodatkowych modeli spalania stukowego. Mechanizm reakcji GRI-3.0, który został wykorzystany w symulacji 0D, zawiera szczegółowe reakcje chemiczne także dla etanu, które walidowano mierząc m.in. czas opóźnienia zapłonu w *shock tubes* [16].

W symulacji 0D nie będzie uwzględniona komora wstępna, kanały łączące komorę wstępną z komorą główną, kształt tłoka, a obliczenia będą bazować tylko na objętości komory spalania w danym czasie. Model zerowymiarowy nie uwzględnia też turbulencji, przejmowania ciepła przez ścianki i wielu innych czynników, ale ma dać poglądowy wynik, by ocenić poprawność symulacji 3D i danych doświadczalnych. Kod programu napisano używając MATLABa, bazując na dokumentacji Cantery [5].

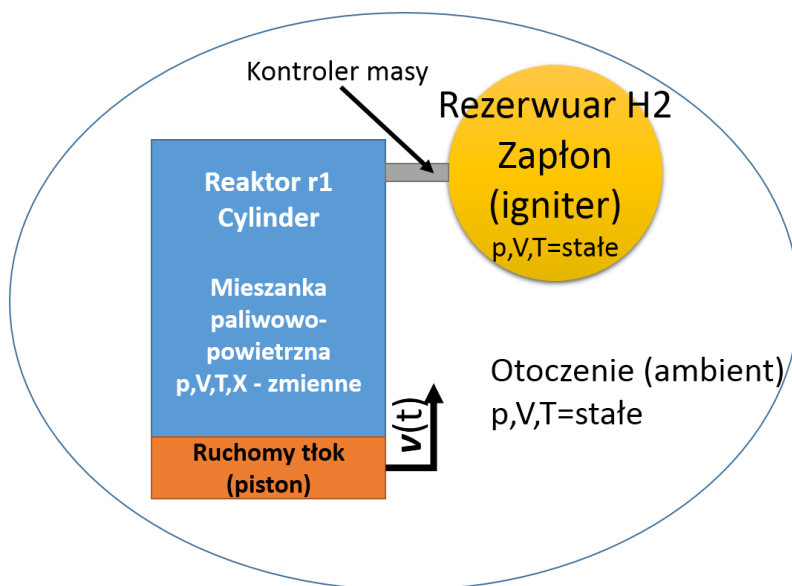
14.2 Opis modelu 0D

Na rysunku 56 przedstawiono poglądowy schemat modelu symulacji 0D. Model można podzielić na kilka bloków. Podstawowym elementem jest reaktor gazu idealnego, który stanowi objętość cylindra. W reaktorze znajduje się mieszanka etanu z powietrzem o współczynniku ekwiwalencji 0,52. Reaktor jest oddzielony od otoczenia, które stanowi rezerwuár zawierający powietrze o temperaturze 300 K i ciśnieniu 1 bara, ruchomym tłokiem o średnicy 84 mm.

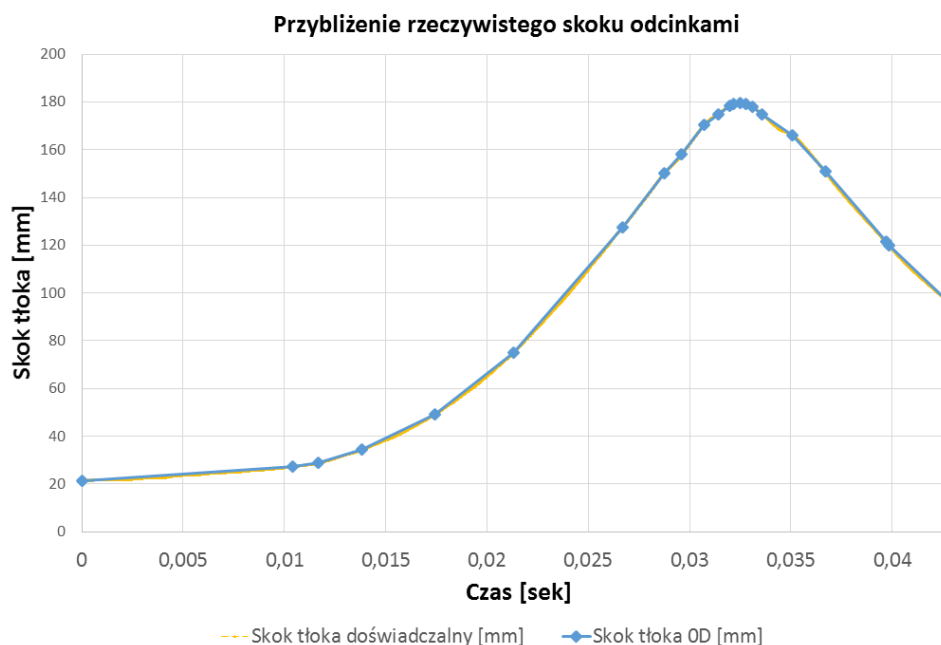
Ruch tłoka jest definiowany za pomocą prędkości. Konieczne było uzyskanie zależności prędkości tłoka od czasu na podstawie zmierzonego podczas eksperymentu położenia tłoka. Postanowiono aproksymować położenie tłoka funkcją wielomianową przy użyciu pakietu *Curve Fitting Toolbox* zaimplementowanego w MATLABie, ale wykres uzyskanej funkcji znacznie różnił się od wykresu z danymi eksperymentalnymi, dlatego ostatecznie przybliżono położenie tłoka za pomocą odcinków. Na wykresie 57 przedstawiono zmierzony podczas eksperymentu skok tłoka i jego aproksymację za pomocą odcinków. Następnie zróżniczkowano przybliżone za pomocą odcinków położenie tłoka po czasie, uzyskując stałe wartości prędkości na odcinkach. Wykres prędkości, użytej do symulacji 0D, przedstawiono na 58. Dodatkowo na wykresie 59 porównano zmianę objętości cylindra (dokładnie to 1/3 objętości) w symulacji 3D oraz 0D. Widoczna jest zgodność w zakresie zmiany objętości między symulacją 3D a 0D. Warto zaznaczyć, że w Canterze można uwzględnić wpływ różnicy ciśnienia między zbiornikami oddzielonymi tłokiem na jego ruch oraz przewodzenie ciepła przez tłok. W tej symulacji te aspekty nie zostały uwzględnione, a parametry otoczenia mogłyby być dowolne, bo nie mają wpływu na przebieg symulacji.

Ostatnim elementem modelu 0D jest rezerwuár cząsteczek wodoru wraz z kontrolerem strumienia masy, który posłużył do zamodelowania zapłonu iskrowego. W określonym czasie, odpowiadającemu przepłynięciu prądu przez cewkę zapłonową w eksperymencie i zapłonowi w 3D, z rezerwuáru zawierającego wodór (o temperaturze 500 K) i ciśnieniu jednej atmosfery) do objętości cylindra następował przepływ cząsteczek wodoru, które inicjowały proces spalania. Strumień masy cząsteczek wodoru modelowany był funkcją Gaussa, której amplitudę dobrano tak, by była jak najmniejsza, ale żeby przy tym uzyskać także pełne spalanie mieszanki.

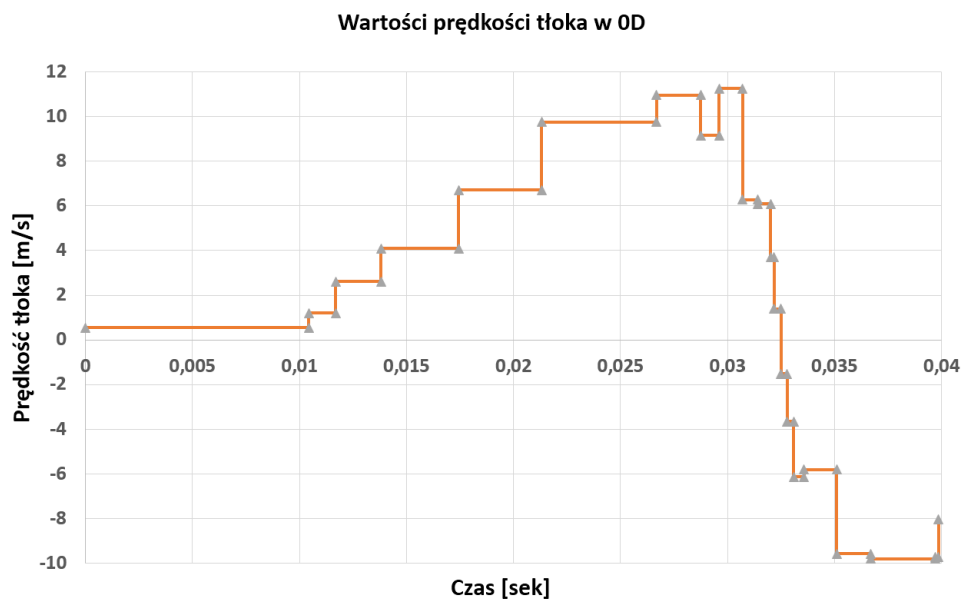
W następnym podrozdziale przedstawiono najważniejsze fragmenty kodu, który został użyty do symulacji, wraz z komentarzami.



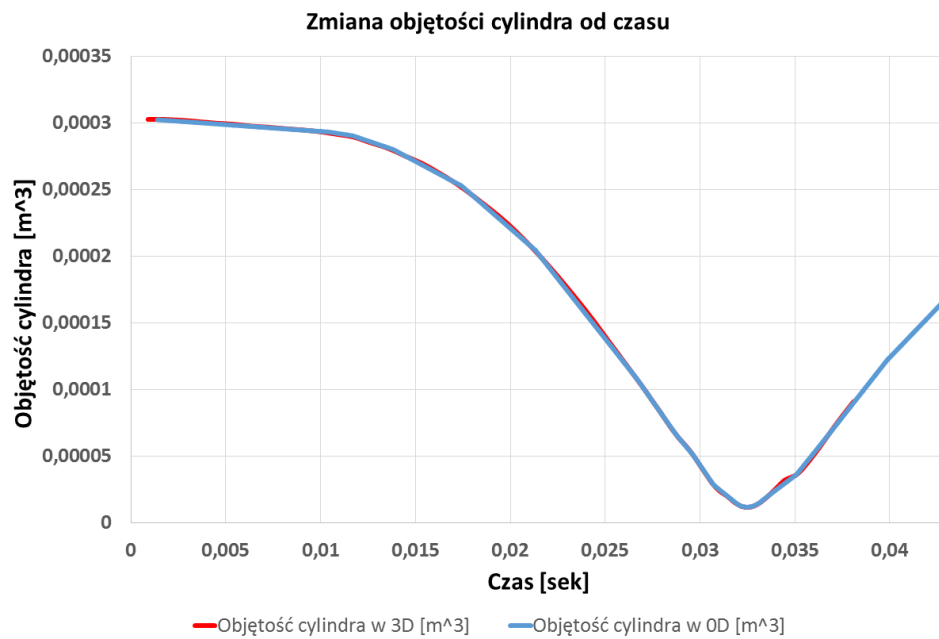
Rysunek 56: Poglądowy schemat modelu symulacji 0-wymiarowej.



Rysunek 57: Zmierzony w eksperymencie skok tłoka wraz z jego aproksymacją za pomocą odcinków, która została użyta do wyznaczenie prędkości tłoka w symulacji 0D.



Rysunek 58: Prędkość tłoka od czasu, która została użyta do symulacji 0D.



Rysunek 59: Porównanie zmiany objętości cylindra w symulacji 0D i 3D.

14.3 Kod programu

Symulację rozpoczęto od wybrania mechanizmu reakcji chemicznych, który opisano już we wstępie. Następnie utworzono rezerwuar powietrza z zadaniem ciśnieniem i temperaturą oraz reaktor gazu idealnego stanowiący objętość cylindra i wypełniono go mieszkanką etanu i powietrza, której nadano temperaturę i ciśnienie początkowe. Kolejno przypisano początkową objętość cylindra, którą zaczerpnięto z przedstawionych we wcześniejszych rozdziałach symulacji 3D. Następnie utworzono ruchomy tłok między otoczeniem a objętością cylindra oraz stworzono rezerwuar wodoru wraz z kontrolerem strumienia masy, by móc zamodelować zapłon. Następnie utworzono połączenie między rezerwuarami i reaktorem. W kolejnym kroku ustawiono początkowy czas w symulacji i prędkość tłoka. Ze względu na problemy przy ustawianiu skokowo zmiennej prędkości tłoka, konieczny był podział na 21 oddzielnych pętli z obliczeniami parametrów w objętości cylindra. Prędkość tłoka była stała w każdej pętli z obliczeniami, natomiast pozostałe parametry i dane pochodziły z ostatniej iteracji w poprzedniej pętli. Obliczenia parametrów gazu w cylindrze w zależności od czasu przeprowadzono z użyciem solvera advance z maksymalnym krokiem czasowym $10e-6$. W trakcie symulacji oprócz podstawowych parametrów takich jak ciśnienie, temperatura czy objętość, obliczano także szybkość wydzielania ciepła zgodnie z wzorem [4] przedstawionym w rozdziale [12.8], do której obliczenia konieczne było obliczenie różniczki ciśnienia i objętości po czasie oraz wykładnika adiabaty. Całkowite wydzielone ciepło uzyskano natomiast całkując metodą trapezów szybkość wydzielania ciepła po czasie. Dodatkowo wyznaczono udział frakcji niespalonej jako stosunek masy etanu w danej chwili do początkowej masy etanu w cylindrze. Na samym końcu wyznaczone są maksymalne parametry w całej symulacji. Poniżej przedstawiono kod programu z uwzględnieniem tylko dwóch pętli z obliczeniami, bo dalsze różnią się tylko indeksem przypisanej prędkości i końcowego czasu obliczeń.

Kod 1: Kod programu do symulacji 0D

```
1 clear all
2 %Przypisanie mechanizmu GRI-3.0, który zawiera m.in. złożone reakcje prowadzące
   do samozapłonu w gazach naturalnych.
3 %Mechanizm GRI-3.0 był walidowany i optymalizowany także dla etanu. Parametry w
   reakcjach były optymalizowane,
4 %by otrzymać m.in. czas opóźnienia samozapłonu zgodny z badaniami dos
   wiadczalnymi.
5 gas=Solution('gri30.xml')
6
7 %Parametry powietrza znajdującego się na zewnątrz komory spalania (parametry
   otoczenia)
8 T_ambient = 300. % K
9 p_ambient = 1e5 % Pa
10 comp_ambient = 'O2:1, N2:3.76'
11
12 %Utworzenie rezerwuaru powietrza na zewnątrz komory spalania (otoczenia)
13 set(gas, 'T', T_ambient, 'P', p_ambient, 'X', comp_ambient)
14 ambient_air = Reservoir(gas)
15
16 %Ustawienie parametrów początkowych mieszanki znajdującej się w cylindrze
17 %Odpowiednio temperatury, ciśnienia i składu mieszanki
18 %Utworzenie ubogiej mieszanki 1/lambda=0.52
19 set(gas, 'T', 340.33, 'P', 2.97*oneatm(), 'X', 'C2H6:0.52, O2:3.5, N2:13.16')
20
21 %Utworzenie reaktora, który stanowi komorę spalania
22 r1 = IdealGasReactor(gas)
```

```

23
24 %Ustawienie początkowej objętości cylindra i przypisanie jej do reaktora
25 vol_start=0.000907335
26 setInitialVolume(r1,vol_start)
27
28 %Utworzenie ruchomej ścianki tłoka oddzielającej objętość cylindra od otoczenia
29 piston = Wall(ambient_air, r1)
30 A=0.084*0.084/4*pi %Ustawienie powierzchni tłoka
31 setArea(piston,A)
32
33 %Ustawienie parametrów gazu składającego się z atomów wodoru
34 set(gas, 'T', 500.0, 'P', oneatm(), 'X', 'H:1.0')
35
36 %Utworzenie rezerwuaru z atomami wodoru
37 %które wstrzyknięte do komory spalania mają modelować zapłon iskrowy
38 igniter = Reservoir(gas)
39
40 %Przepływ masowy atomów wodoru z rezerwuaru do objętości cylindra jest
41 %modelowany zależną od czasu funkcją Gaussa
42 amplitude=0.0009; %z zapłonem
43 %amplitude=0.000; %brak zapłonu
44 t0 = 0.0293 % czas zapłonu, wstrzyknięcia atomów wodoru do komory spalania
45 m3=MassFlowController(igniter,r1);
46 mdot=gaussian(amplitude, t0, 0.0003);
47 setFunction(m3, mdot)
48
49 %Utworzenie połączeń między rezerwuarami i reaktorem, przypisanie komory
    spalania do symulacji
50 sim123 = ReactorNet([r1])
51
52 %Utworzenie pustych macierzy potrzebnych podczas obliczeń i do archiwizacji
    wyników
53 Press=[]; %ciśnienie
54 Vol=[]; %objętość
55 Temp=[]; %temperatura
56 Tim=[]; %czas
57 dQdt=[]; %heat release rate, szybkość wydzielania ciepła
58 dQdt4=[]; %alternatywny sposób liczenia szybkości wydzielania ciepła
59 dpdt=[]; %różniczka ciśnienia po czasie
60 dVdt=[]; %różniczka objętości po czasie
61 Qdt=[]; % wydzielone ciepło
62 x_ub=[]; %udział masowy frakcji niespalonej
63 gamma=[]; %wykładnik adiabaty
64
65 massFuel0=massFraction(r1,'C2H6'); %masa etanu w cylindrze w chwili początkowej
66
67 %wartości prędkości tłoka
68 piston_velocity=[552.924257e-3 1207.673032e-3 2604.261203e-3 4096.098903e-3
    6705.682123e-3 9753.71566e-3 10963.79976e-3 9161.470345e-3 11251.03518e-3
    6276.102e-3 6096.5825e-3 3698.214118e-3 1395.119063e-3 -1522.798929e-3
    -3658.656129e-3 -6136.002245e-3 -5806.578477e-3 -9580.858509e-3 -9792.539e-3
    -9712.99375e-3 -8022.472364e-3];
69

```

```

70 %wartosci czasow koncowych, do ktorych trwa symulacja z zadna prędkością tłoka
71 t_end=[0.01043 0.01169 0.01381 0.01743 0.02132 0.02668 0.02874 0.02961 0.03071
      0.03141 0.03201 0.03218 0.0325 0.03278 0.03309 0.03358 0.03509 0.0367 0.0397
      0.03986 0.04277];
72
73 i=0; %pomocniczy iterator
74
75 t = 0.0014 %czas początkowy
76 setInitialTime(sim123, t); %przypisanie początkowego czasu
77 setVelocity(piston,polynom(piston_velocity(1))); %przypisanie prędkosci tłokowi
78
79 %Proces symulacji wraz z obliczaniem oprócz podstawowych parametrow jak T,p,V,
80 %także HRR,wydzielone ciepło i udział frakcji spalonej.
81 %W jednej pętli while prowadzone są obliczenia tylko dla jednej prędkosci tłoka
82 %i dla pewnego zakresu czasu.
83
84 while t < t_end(1)
85     t_pocz=t;
86     t=t+1.0e-6; %maksymalny krok czasowy 1e-6, solver może go zmniejszac w razie
      konieczności
87     i=i+1;
88     advance(sim123,t) %solver
89
90     %Przypisanie wyników
91     Press(i)=pressure(r1);
92     Vol(i)=volume(r1);
93     Temp(i)=temperature(r1);
94     Tim(i)=t;
95
96     if i==1 %przypisanie zerowych wartosci w pierwszym kroku
97         dQdt(i)=0;
98         Qdt(i)=0;
99         dQdt4(i)=0;
100
101     else %obliczenia w dalszych krokach czasowych
102
103         %obliczenia wykładnika adiabaty
104         gamma(i)=cp_mole(gas)/cv_mole(gas);
105
106         %obliczenia różniczki objętości po czasie
107         dVdt(i)=(Vol(i)-Vol(i-1))/(Tim(i)-Tim(i-1));
108
109         %obliczenia różniczki ciśnienia po czasie
110         dpdt(i)=(Press(i)-Press(i-1))/(Tim(i)-Tim(i-1));
111
112         %obliczenia szybkości wydzielania ciepła
113         dQdt(i)=gamma(i)/(gamma(i)-1)*Press(i)*dVdt(i)+(1/(gamma(i)-1))*Vol(i)*dpdt(i)
      ;
114
115         %całkowanie HRR, by otrzymać wydzielone ciepło
116         Qdt(i)=(dQdt(i)+dQdt(i-1))*0.5*(Tim(i)-Tim(i-1))+Qdt(i-1);
117
118         %alternatywny sposób obliczenia HRR

```