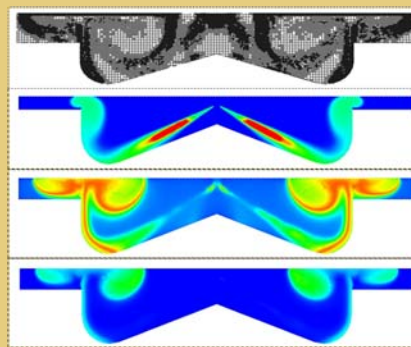
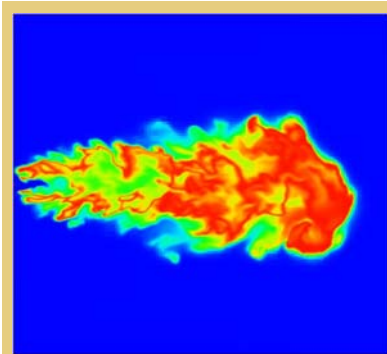


高性能计算对发动机CFD模拟的变革



Sibendu Som 博士

阿贡国家实验室-首席研发工程师
芝加哥大学-研究员

IDA J USER GROUP MEETING

November 2015



阿贡：美国能源部最大的研究机构之一



- 距离芝加哥市中心25英里。建于1946年，是美国第一个国家实验室
- 由芝加哥大学代能源部管理
- 主要研究任务包括基础科学，环境管理，和前沿能源技术
- 3200名员工，其中1000名是科学家和工程师，750人有博士学位
- 年度预算7亿5千万美元（80%来自能源部）
- 自1990年，阿贡已和超过600家公司和许多政府机构合作

<http://www.anl.gov/>

实习机会: <http://www.dep.anl.gov/>

提纲

- 介绍
 - 发动机模拟能有真正的预测性么？
- 预测发动机模拟所必须的开发工作
 - 让CONVERGE能够用于高性能计算
 - 喷嘴内流动
 - 喷嘴内外燃油流动耦合
 - 利用LES的先进湍流模拟
 - 湍流燃烧
 - 不确定性分析
- 模型应用于先进燃烧概念
 - 双燃料燃烧
 - 汽油压燃
- 阿贡的VERIFI项目变革研发流程

3

发动机模拟能有真正的预测性么？ 发动机流场尺度：直接求解vs. 模拟

- 缸内流动雷诺数是适中的；喷雾的雷诺数非常高
- 典型流场尺寸的数量级
 - 最大的漩涡 = $O(100 \text{ mm})$; $O(10^{-3} \text{ s})$
 - 滚流和涡流与缸径数量级相当
 - integral length 尺度 = $O(1-10 \text{ mm})$
 - Kolmogorov尺度 = $O(0.01 \text{ mm})$; $O(10^{-5} \text{ s})$
 - 湍流速度 u' = $O(1-10 \text{ m/s})$
- 动能限制Kinetic Energy Budget
 - 典型网格分辨率 ($\sim 0.5 \text{ mm}$) 能求解50-60% 总动能
 - 我们的网格分辨率 ($\sim 0.1 \text{ mm}$)能求解80-90%总动能
- 但是: 关键的现象在更小的尺度下发生 => 模拟
 - 预混燃烧火焰: 厚度= $O(0.1 \text{ mm})$
 - 喷雾: 液滴大小 $< 0.025 \text{ mm}$, 蒸发时间 = $O(10^{-7}-10^{-8} \text{ s})$
 - 边界层
- 对于液体喷雾，混合和燃烧，亚网格尺度的影响胜过能直接求解的尺度

4

梦想: 同时变革发动机和燃料的设计 与不确定性分析结合的超大规模计算所需的软件

依据康明斯发动机研发总监John Deur, 以下的加速层次能显著影响当今的发动机开发过程*

不确定性分析

- [10x] 360度几何
- [10x] 多循环
- [10x] 更准确的湍流模型(LES)
- [10x] 更准确的喷雾动力学
- [50x] 真实燃料的详细化学反应动力学

超大规模计算

按当今的标准需要500,000 倍的提速
(当今工业界的标准是用 64 核能在24 小时获得结果)



我们的项目是超大规模的=> 3千万核在24 小时内获得结果!

* DOE Engine Simulation Roadmap Workshop - August 18, 2014

5

发动机模拟大致包括:

- 没有被求解的喷嘴内流场
- 简化的燃烧模型
- 粗网格=> 网格收敛
- 简化的湍流模型
- 简易的负荷平衡算法

传统: 大量的模型标定

变革性策略:

- 基于详细化学反应的燃烧模型
- 细网格=>网格收敛
- 高精度湍流模型: LES
- 基于二项流的喷雾模拟
- 喷嘴内流场模拟



- 为高性能计算开发工具

向具有预测性的发动机模拟发展

6

我们选择CONVERGE 因为工业界也是如此...

工具	CONVERGE , 大部分源代码
维度和网格类型	3D, 具有自适应网格加密的结构化网格
空间分割策略	2阶精度有限体积
最小和最大的特征网格尺寸	最细网格: 2.5 μm 喷嘴内流体 (3千1百万最大网格量) 32.5 μm 喷雾 (2千2百万最大网格量) 87.5 μm 发动机 (3千5百万最大网格量)
总网格数	5千万最大网格数
并行性	直到 4096 核有良好的拓展性

湍流模型	RANS: RNG k- ϵ ; LES: Smagorinsky, Dynamic Structure
喷雾模型	Eulerian-Eulerian Near Nozzle Model Lagrangian Models:
喷嘴内流动	Homogeneous Relaxation Model (HRM)
时间步长	依据喷雾, 蒸发, 燃烧 的变量
湍流-燃烧相互作用模型	详细化学反应机理直接积分 well-mixed model Multi-Flamelet Representative Interactive Flamelet (RIF)

所用的工作都在期刊和会议论文中发表 (<http://verifi.anl.gov/publications/>)

7

让CONVERGE能够用于高性能计算

1. S. Som, D.E. Longman, S.M. Aithal, R. Bair, M. Garcia, S. Quan, K.J. Richards, P.K. Senecal, T. Shethaji, M. Weber, SAE Paper No. 2013-01-1095, April 2013
2. J. Kodavasal, K. Harms, P. Srivastava, S. Som, S. Quan, K.J. Richards, M. Garcia, *Proceedings of the ASME 2015 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, ICEF2015-1035, November 2015
3. J. Kodavasal, K. Harms, P. Srivastava, S. Som, S. Quan, K.J. Richards, M.G. Martinez, "Performance Enhancement of an Internal Combustion Engine CFD Simulation on IBM BG/Q," *ISC High Performance Computing Conference*, Frankfurt, Germany, July 2015. Winner of ISC Best poster award

阿贡的计算资源

集群

Fusion Cluster

- 320 节点
- 2560 核
- 12.5 兆字节存储
- 500兆字节磁盘
- 最高25.9兆次浮点运算

Blues Cluster

- 310 节点
- 4960 核
- 最高107.8兆次浮点运算

超级计算机



PETAFLOPS POWER

48 racks
1,024 nodes per rack
1.6 GHz 16-way core processor
16 GB RAM per node
384 I/O nodes
240 GB/s, 35 PB storage

That's a total of **768K cores**,
768 terabytes of RAM,
and a peak performance of
10 petaflops.

The system is capable of carrying out
10 quadrillion floating-point
operations per second.

2017年以后的下一代计算机



50 架

180千兆次浮点运算

0.18 百万兆次: 还不是
超大规模计算



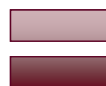
9

高性能计算：过去，现在，未来!!

第一个CRAY 超级计算机



IPAD2



6千万 IPAD2



阿贡10兆次浮点超级计算机

10

高性能计算使过去不可能的模拟成为可能..

- 将单个发动机模拟扩展到**1000核** (性能计算)

- 3千-5千万网格
- 先进的负荷均衡算法, 解决I/O 问题
- 500-1000 核上2-3 周



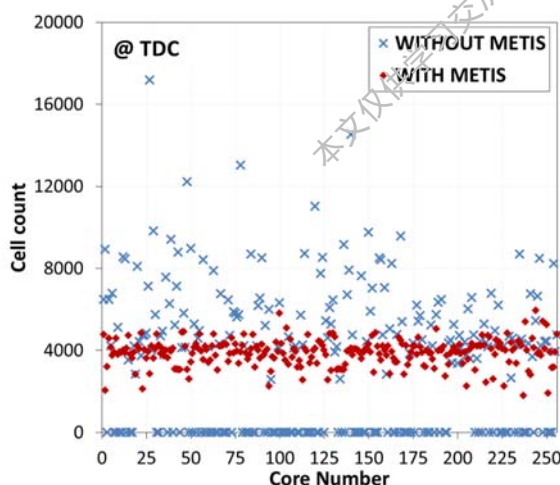
- 使用**1000多核**完成多数 (**100s**) 较小的模拟 (性能计算)

- 1百万-1千万网格每个项目
- 10-100 核上1-3 天
- ❖ 优化发动机运行参数, 遗传算法
- ❖ 发动机运行参数和模型参数不确定性分析
- ❖ 多次LES 模拟以获得足够的统计数据
 - 喷雾LES
 - 喷嘴内流动LES



11

将高性能计算资源用于发动机模拟



科学成就

- 发动机模拟对内存有很高要求
- 加入先进的负荷平衡算法使高性能计算成为可能
- 高时间和空间精度
- 使用基于详细化学机理的燃烧模型

- METIS 是由明尼苏达大学开发的平衡负荷算法
- 在上止点, 若没有METIS, 单核上最大的网格数是 22136, 最小的是0。使用METIS, 两者分别变为 5953 和 1805

阿贡Fusion 集群



12

在超级计算机上拓展发动机CFD模拟

来自S. Ciatti的汽油压燃发动机

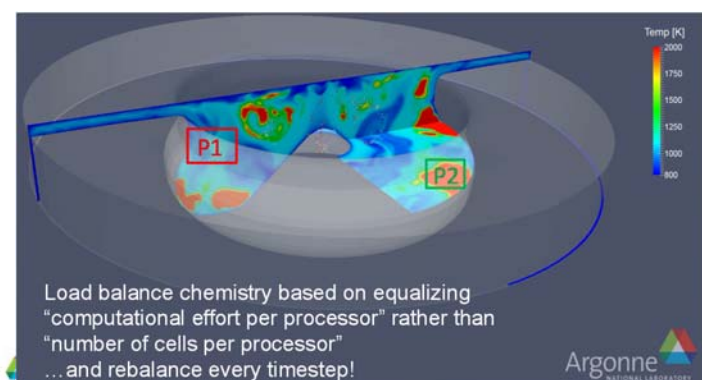
- 上止点1千万网格
- 固定尺寸网格，无加密
- 运动边界和直喷



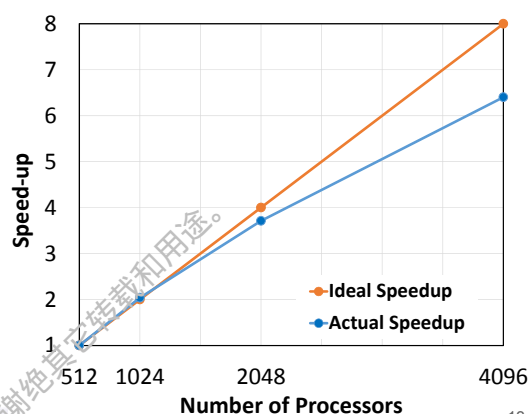
48 racks
1,024 nodes per rack
1.6 GHz 16-way core processor
16 GB RAM per node
384 I/O nodes
240 GB/s, 35 PB storage
That's a total of **768K cores**,
768 terabytes of RAM,
and a peak performance of
10 petaflops.

优化后在MIRA上运行:

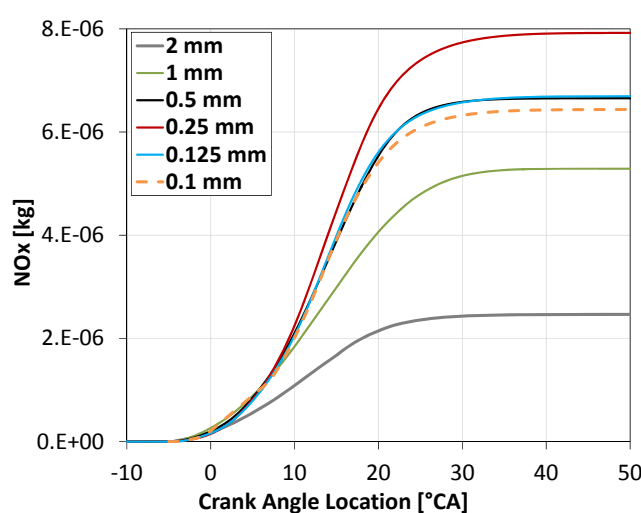
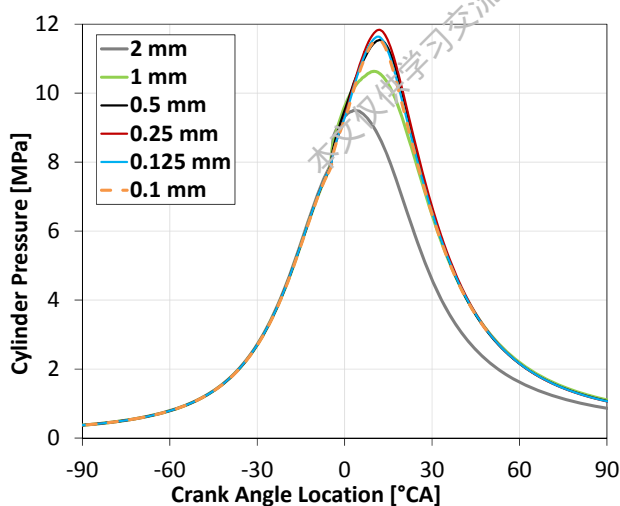
- 加速重启 (>20x)
- 写重启文件 (500x)
- 加速输出和 post 文件 (1000x)
- 平衡化学反应计算负荷



在MIRA上的拓展性改进对工业界的较小模拟 (24-256 核) 也很有用



利用高性能计算资源的柴油机模拟



最小网格(mm)	最大网格数	时间
0.5	2.5 million	14 hours on 64 cores
0.25	9 million	3.5 days on 64 cores
0.125	34 million	13 days on 256 cores
0.1	50 million	14 days on 512 cores

- Caterpillar 单缸机模拟
- 压力，放热率等参数在 0.5 mm网格收敛
- NOx 在0.125mm网格收敛

最大型的柴油机模拟!!

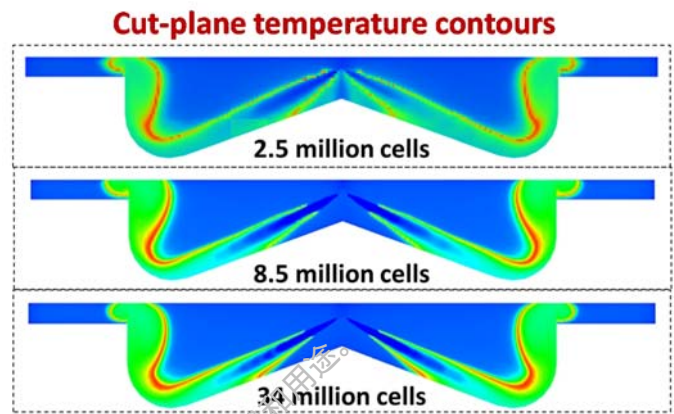
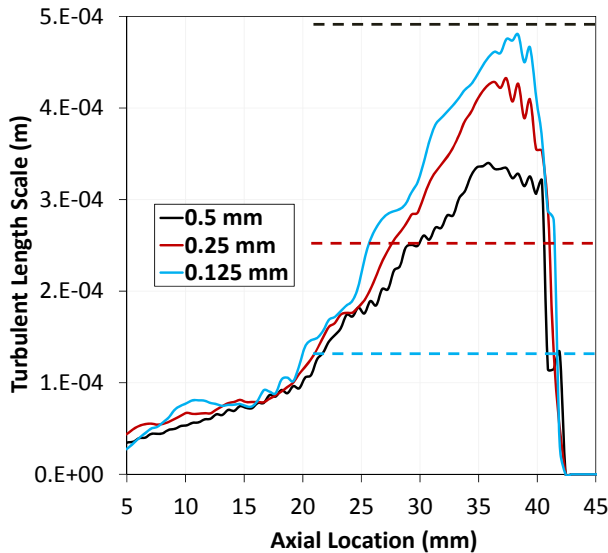
多数工业界的发动机计算都在24-64 核上进行

什么导致了网格收敛?

- **湍流尺度:**

- 在粗网格 (0.5 mm) 上比网格尺寸小, 因此没有完全求解
- 在细网格 (0.125 mm) 上比网格尺寸大, 因此可以完全求解

- **湍流时间尺度在0.25 mm收敛**



15

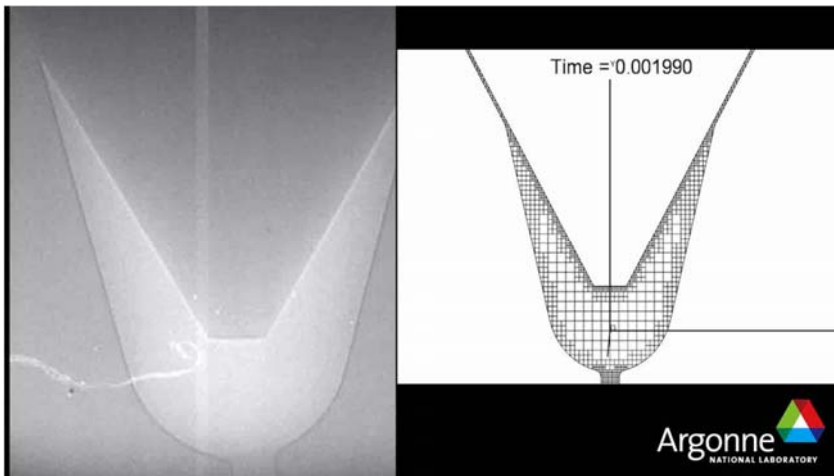
喷嘴内流动

1. M. Battistoni, Q. Xue, S. Som, "LES of Spray Transients: Start and End of Injection Phenomena," *Oil and Gas Science Technology*, 2015
2. M. Battistoni, D.J. Duke, A.L. Kastengren, A.B. Swantek, F.Z. Tilocco, C.F. Powell, S. Som, "Effect of Non-Condensable Gas on Cavitating Fuel Nozzles," Special Issue (invited) titled "Sprays in Automotive Applications" *Atomization and Sprays*, 25(6): 453-483, 2015
3. Q. Xue, M. Battistoni, C.F. Powell, D.E. Longman, S. Quan, E. Pomraning, P.K. Senecal, D.P. Schmidt, S. Som, "An Eulerian CFD Model and x-ray radiography for coupled nozzle flow and spray in internal combustion engines," *International Journal of Multi-phase Flows* 70, 77-88, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2014.11.012>, 2015
4. Q. Xue, M. Battistoni, S. Som, S. Quan, P.K. Senecal, E. Pomraning, D. Schmidt, "Eulerian CFD modeling of coupled nozzle flow and spray with validation against x-ray radiography data," *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 7(2):2014, doi:10.4271/2014-01-1425
5. K. Saha, Y. Li, S. Quan, P.K. Senecal, M. Battistoni, S. Som, "Modeling of internal and near-nozzle flow of a GDI Fuel injector," *Proceedings of the ASME 2015 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, ICEF2015-1112, November 2015

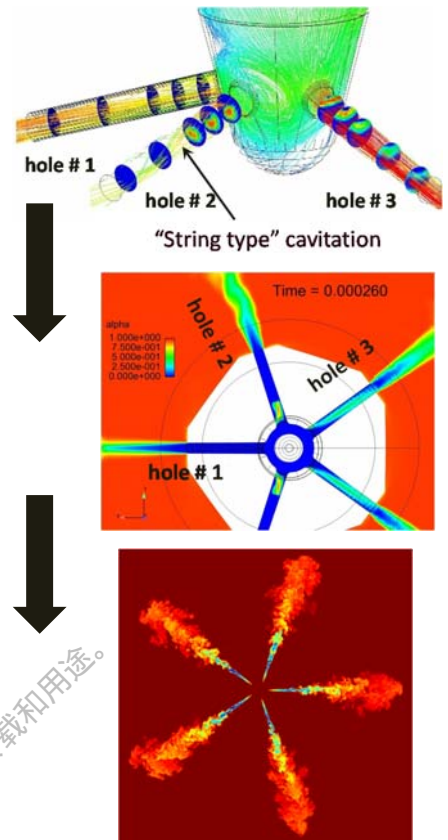
喷嘴内合喷嘴-喷雾耦合模拟

X-ray 相衬成像

CFD 模拟

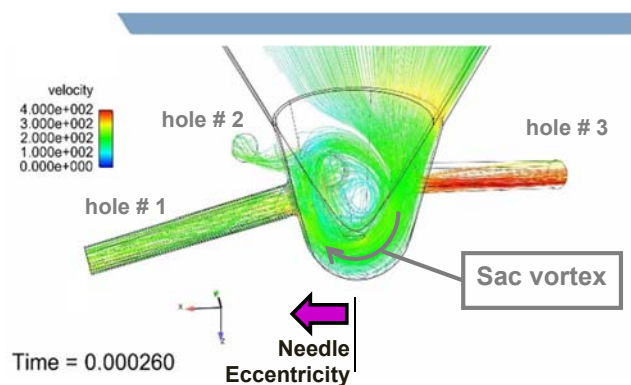
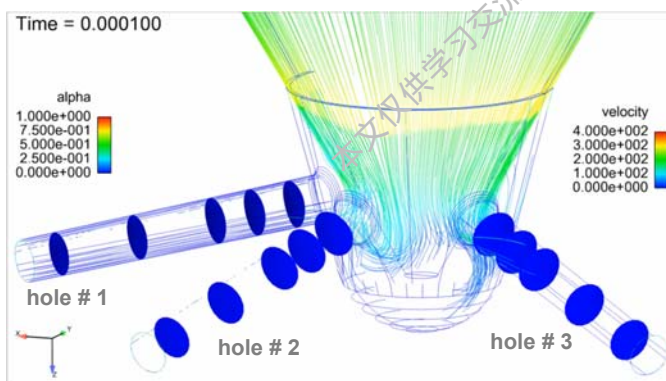


- 可以捕捉针阀偏向移动导致的油束-油束间差异
- 喷嘴-喷雾耦合
- 可以捕捉针阀偏向移动导致的周期性差异

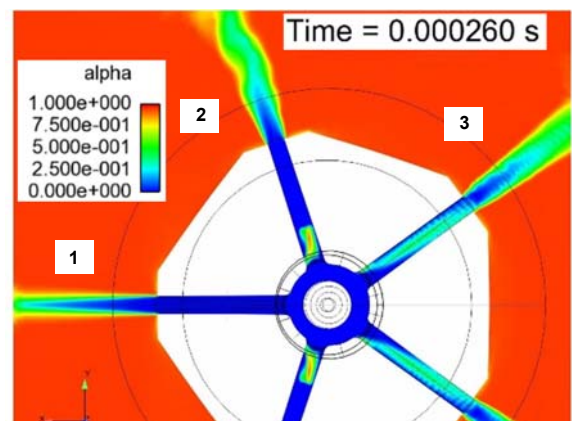
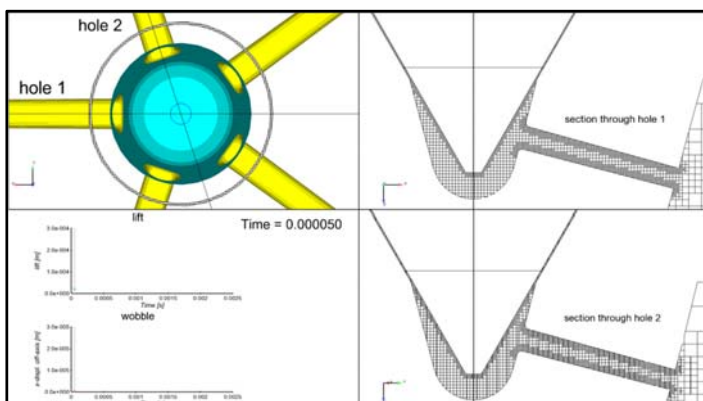


17

油束-油束间差异

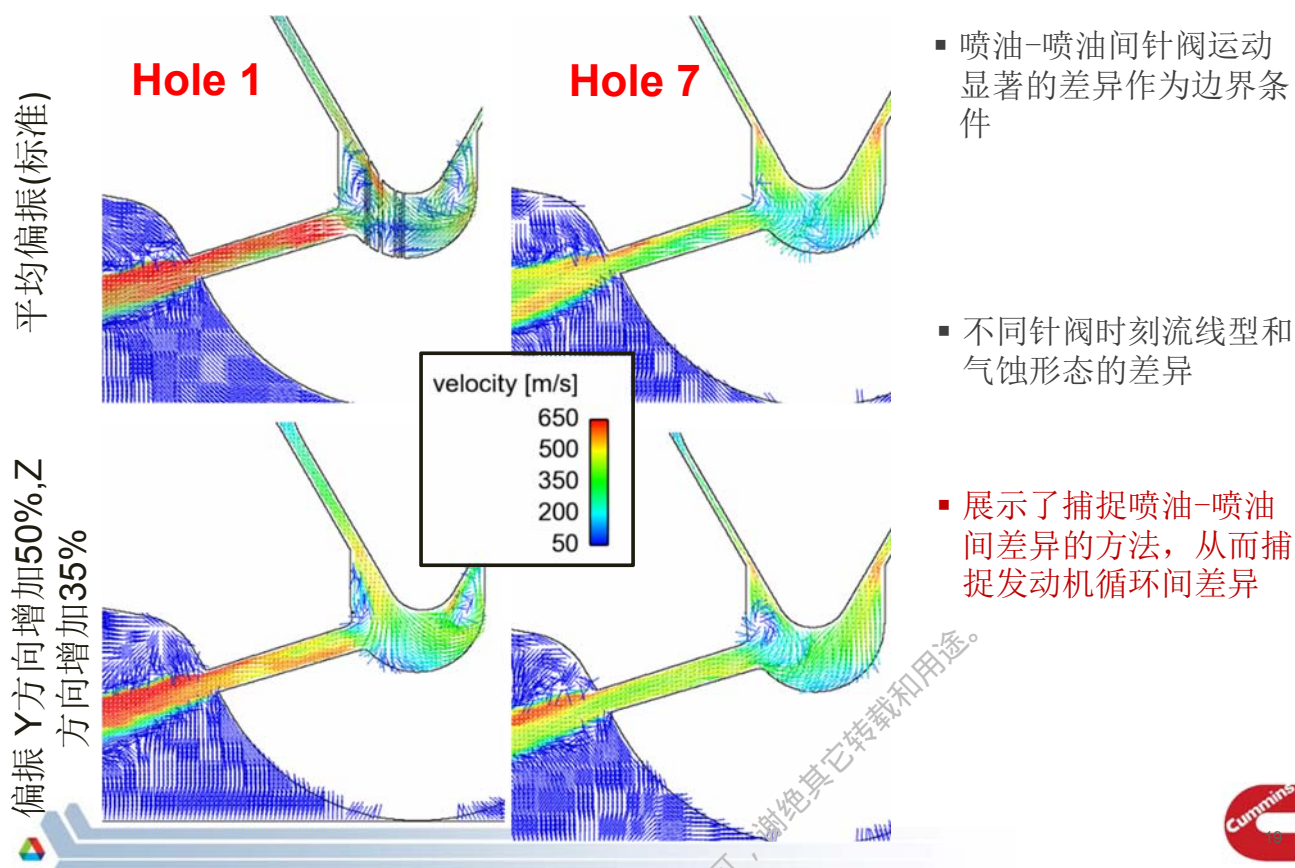


- 孔#2流出的涡流型油束
- 孔#3一半的截面被堵住



18

喷油-喷油间的偏振=> 发动机循环间差异

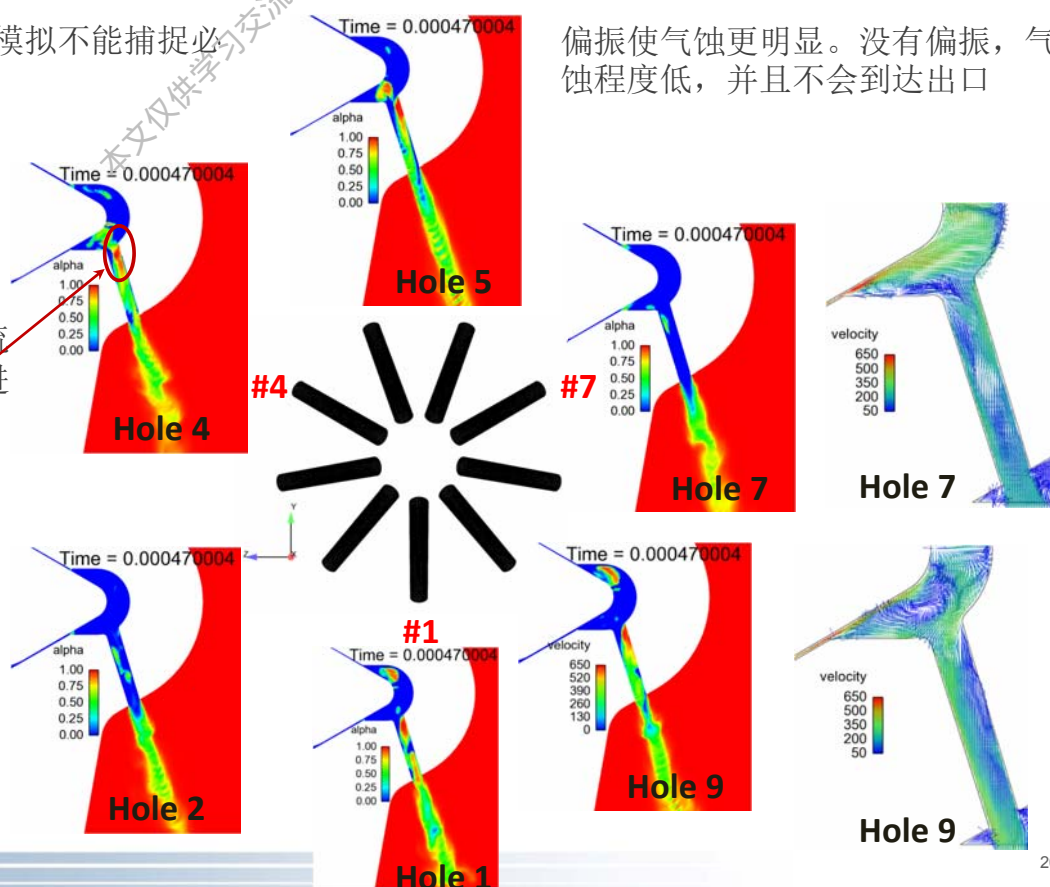


低针阀升程时孔-孔间差异

单孔或sector模拟不能捕捉必须的物理现象

偏振使气蚀更明显。没有偏振，气蚀程度低，并且不会到达出口

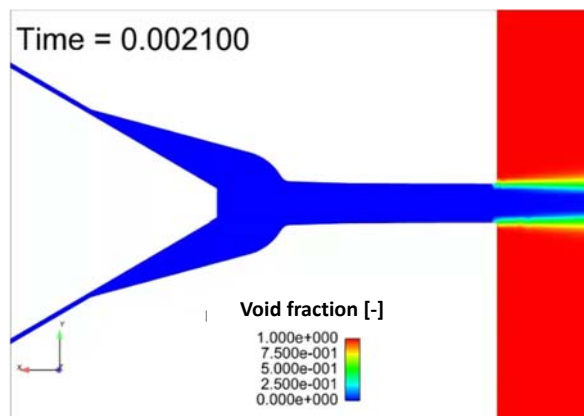
针阀偏振引起流体形态变化，进一步引起气蚀



针阀瞬态：喷油末期

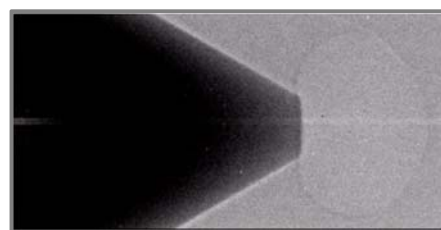


Movie Courtesy: Dr. Chris Powell, ANL

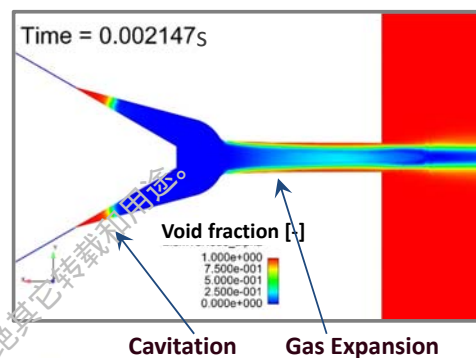
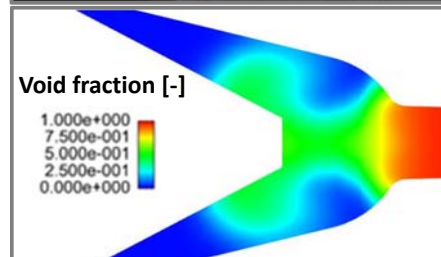


- 首次高精度模拟
- 最小网格 $5\ \mu\text{m}$, 超过2千万网格
- 最小时间步长 $1\ \text{E-9}$
- 模拟解释了被吸入喷嘴内气体的物理本质

Experiments



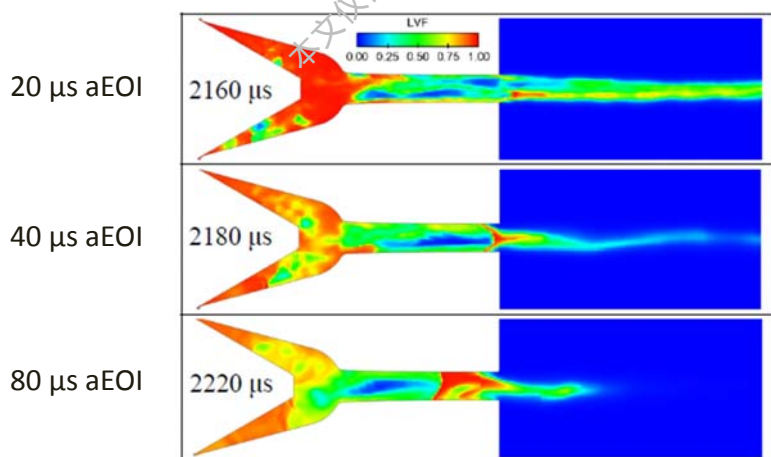
Simulations



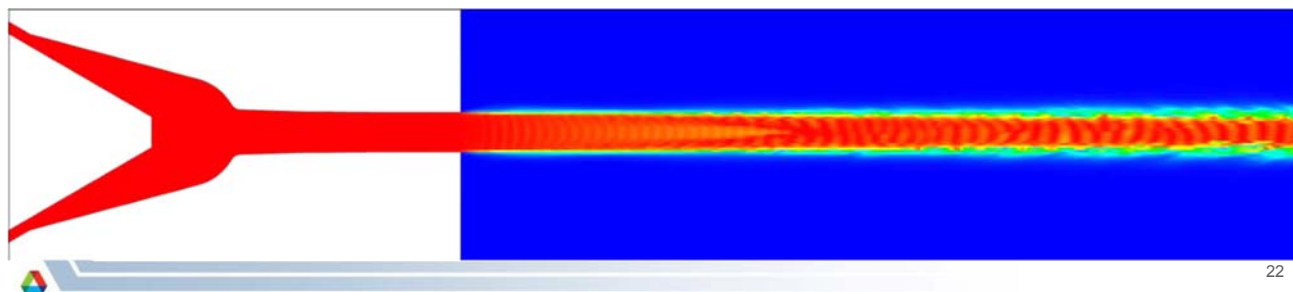
21

喷油末期的油滴“泄露”

大涡模拟捕捉油滴“泄露”



- 油滴“泄露”增加排放因为燃烧不充分
- 很难测量油滴“泄露”量
- 展示了应用LES模型捕捉单孔喷嘴油滴“泄露”（包含针阀偏振）
- 方法正确预测油滴对喷射压力和背压的敏感性

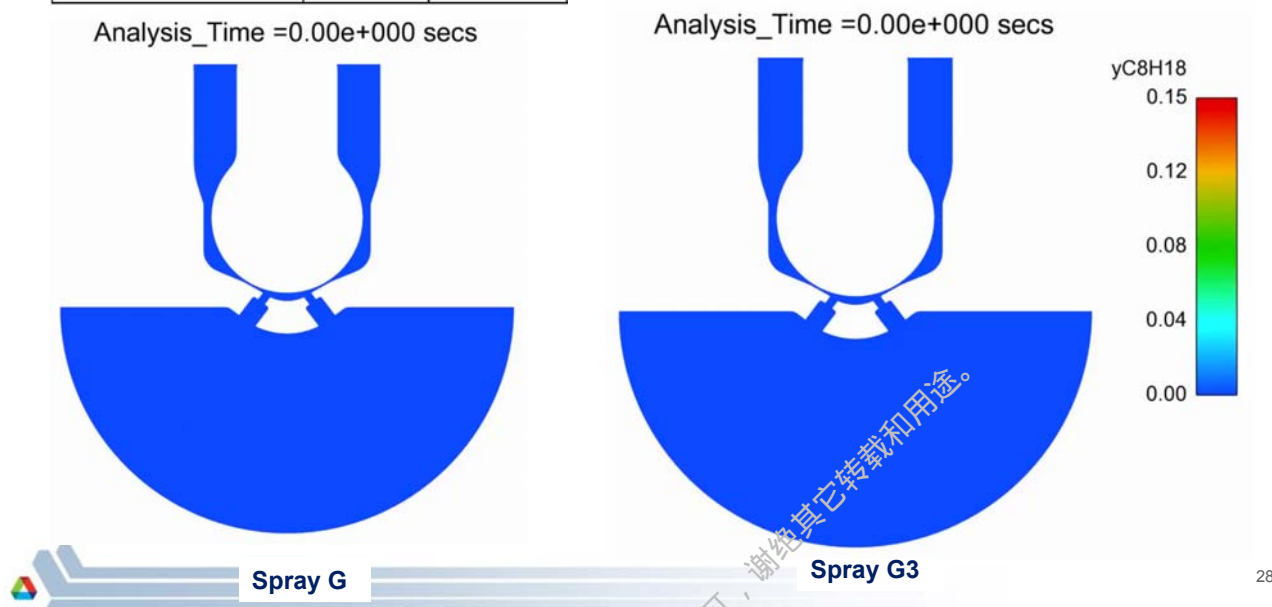


22

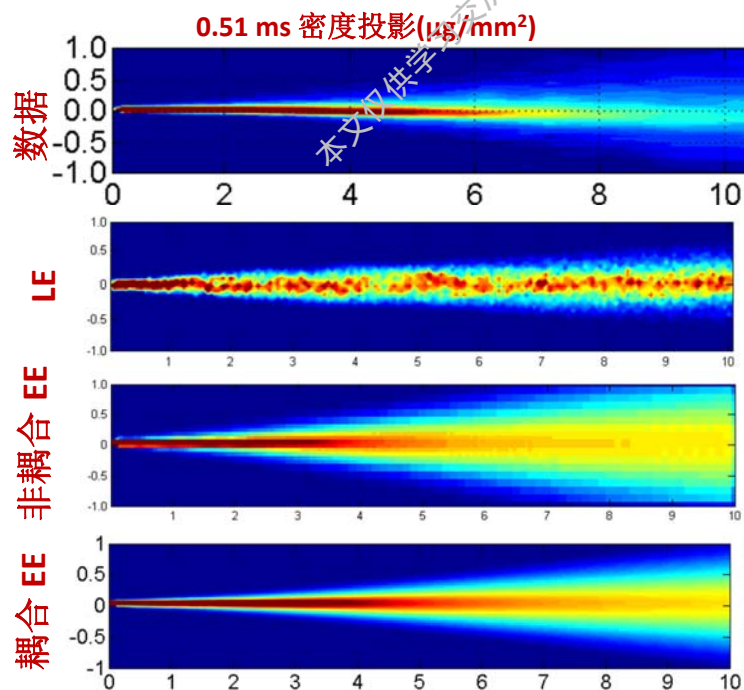
汽油直喷系统的闪沸

Parameters	Spray G	Spray G3
Inj. Press.(MPa)	20	20
Chamber Press.(kPa)	600	100
Chamber Temp.(K)	573	293
Fuel Temp.(K)	363	413
Chamber Fluid	N ₂	N ₂

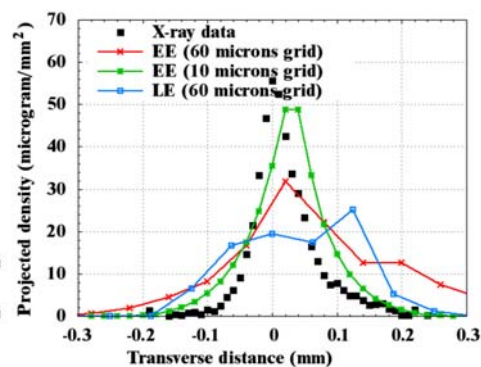
强烈的闪沸=> 油束间相互作用



欧拉和拉格朗日方法对比



- ❖ 耦合的欧拉-欧拉模型是非耦合欧拉-欧拉的3倍时长
- ❖ 对相同解析度，耦合的欧拉-欧拉模型是拉格朗日-欧拉模型 5 倍时长



- ❖ 在喷嘴附近，欧拉-欧拉模型优于拉格朗日-欧拉
- ❖ 拉格朗日模型: 62.5 μm 最小网格; blob 喷射模型; 30万 parcels
- ❖ 如果喷油规律已知并且没有气蚀，非耦合欧拉-欧拉与耦合欧拉-欧拉效果类似

LES湍流模拟

1. Z. Wang, A. Swantek, R. Scarcelli, D. Duke, A. Kastengren, C. Powell, **S. Som**, R. Reese, K. Freeman, Y. Zhu, "LES Modeling of Diesel and Gasoline Sprays with Validation Against X-ray Radiography data," *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, doi:10.4271/2015-01-0931, 2015
2. Y. Pei, **S. Som**, E. Pomraning, P.K. Senecal, S.A. Skeen, J. Manin, L. Pickett, "Large Eddy Simulation of a Reacting Spray Flame with Multiple Realizations under Compression Ignition Engine Conditions," *Combustion and Flame*; 000: 1-14, 2015
3. P.K. Senecal, E. Pomraning, Q. Xue, **S. Som**, S. Banerjee, B. Hu, K. Liu, J. Deur, "Large Eddy simulation of vaporizing sprays considering multi-injection averaging and grid-convergent mesh resolution," *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power* 136 (11), 111504: 1-13, 2014
4. Q. Xue, **S. Som**, P.K. Senecal, E. Pomraning, "Large Eddy Simulation of Fuel Spray Under Non-Reacting IC Engine Conditions," *Atomization and Sprays* 23(10), 925-955, 2013
5. B. Hu, S. Banerjee, K. Liu, D. Rajamohan, J.M. Deur, Q. Xue, **S. Som**, P.K. Senecal, E. Pomraning, "Large Eddy Simulation of a turbulent non-reacting spray jet (Spray H)," *Proceedings of the ASME 2015 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, ICEF2015-1033, November 2015

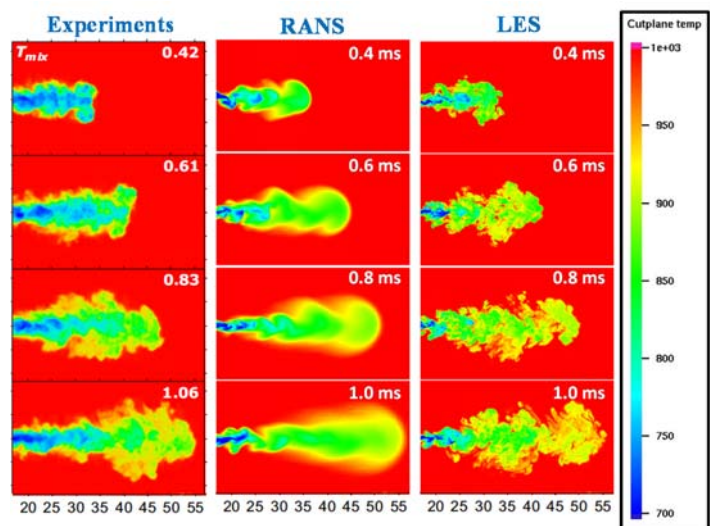
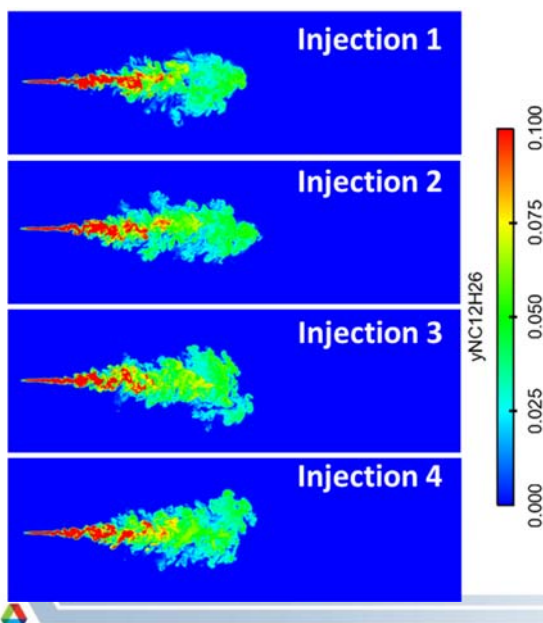
<http://www.verifi.anl.gov/>

25

LES湍流模拟

模拟设置

- 针对内燃机模拟开发 Dynamic structure LES 模型
- 高时间和空间精度导致较少的模拟（参数假设）



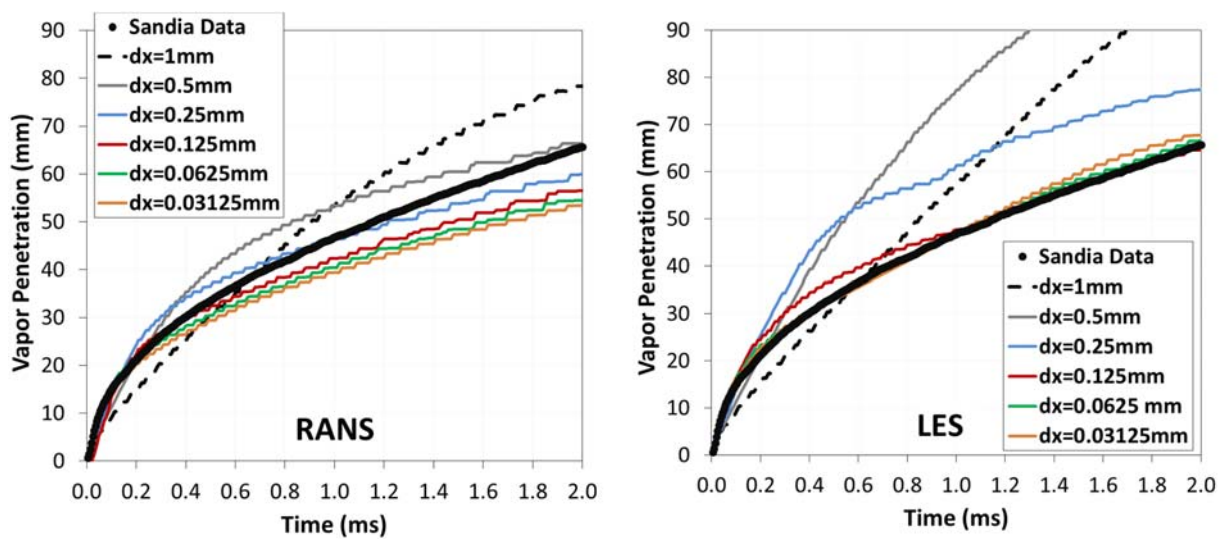
Experimental data : Sandia National Laboratory

项目影响

- LES 模型能捕捉流场结构，而RANS则不能
- LES 也能捕捉循环间差异

26

简化 (RANS) vs. 高精度 (LES) 湍流模型

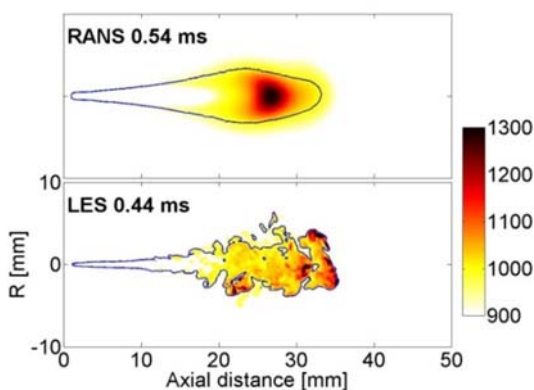


- RANS 结果在网格收敛的情况下不能捕捉实验数据
- **LES (Dynamic structure 模型) 结果能捕捉实验数据**
- 这是因为**LES 求解更多的流体结构**，因此能更好预测燃油-空气混合
- 实验数据来自 Sandia National Laboratory ECN Spray A

27

LES用于喷雾和燃烧模拟

- 我们将 LES 喷雾模拟与 CONVERGE 燃烧求解器 SAGE 结合
- ✓ 大量与 Engine Combustion Network 数据验证



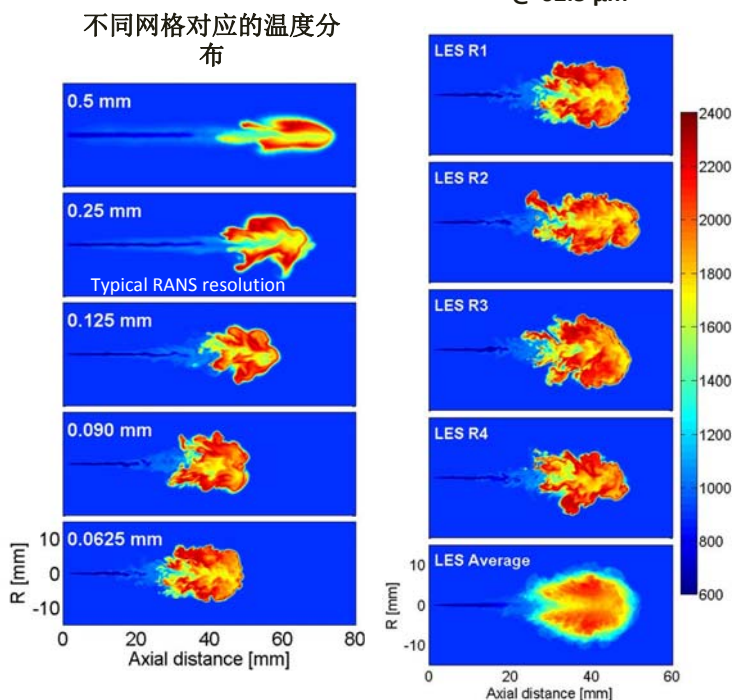
- **LES高时间和空间精度导致较少的模拟**
- **LES 模型能捕捉RANS不能的流体结构**
- **LES 捕捉自燃现象**
- **LES 还能捕捉循环间差异**

28

LES的网格精度和多次 喷射模拟

不同LES喷射对应的温度分布
@ 62.5 μm

工业界的问题: 多少次LES喷射才能达到统计学上的收敛数据?

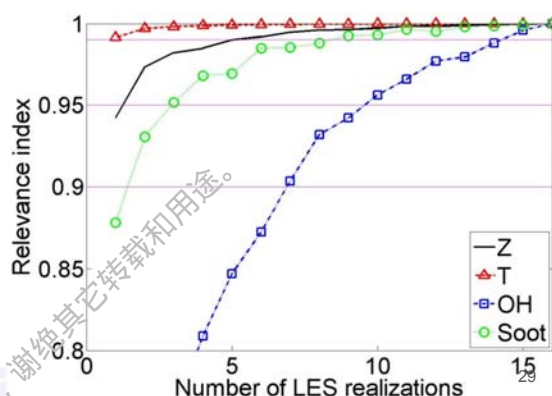


- 网格收敛性接近62.5 μm
- 每一次喷射在200核上需 3 周，大于 2千5百万网格

- 温度: 2
- 混合物分数(Z): 5
- 炭烟: 8

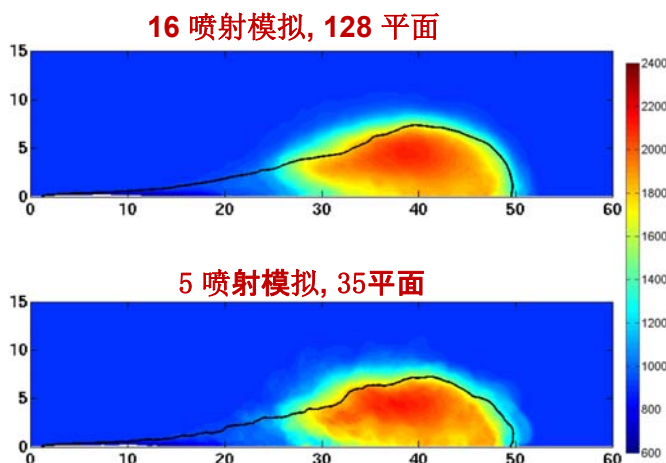
$$\text{相关性指数}(RI_i) = \frac{(\vec{\phi}_i, \vec{\phi}_b)}{\|\vec{\phi}_i\| \|\vec{\phi}_b\|}$$

“i” 任意一次喷射
“b” 总喷射次数

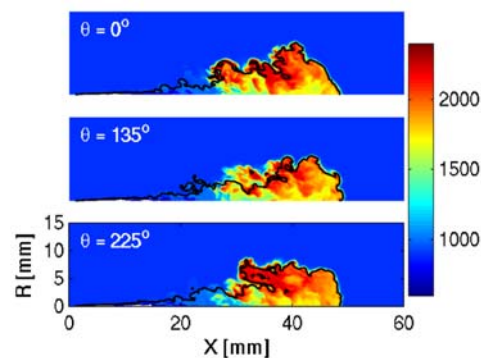


使用方位角平均来减少计算成本

➤ 我们能否利用轴对称性来减少喷射模拟的次数?



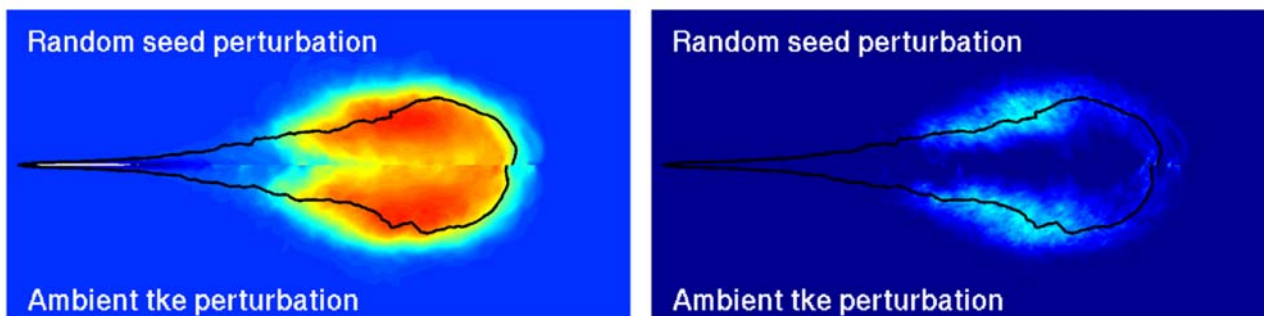
对5次喷射模拟使用方位角平均显著减少计算成本!



- 对16次喷射模拟的每一次都在128个平面上用方位角平均
- 由相关性分析可知
 - 最少的喷射模拟次数
 - 最小的平面数

扰乱环境湍流强度

通常我们扰乱随机数种子来获得不同LES喷射间的差异

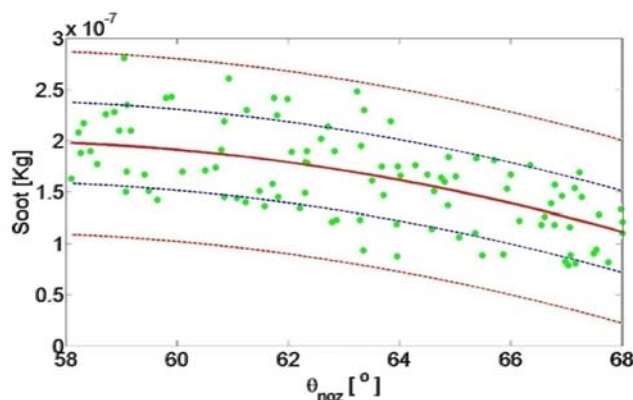


- 上半区: 根据随机数种子扰动平均
- 下半区: 根据环境湍流强度扰动平均
- 对环境湍流强度扰动, 模拟了5次喷射, 环境湍流强度为 0.1, 0.6, 1.2, 5.0 and 10 m^2/s^2
- 扰动环境湍动能产生相似的平均温度和OH质量分数

31

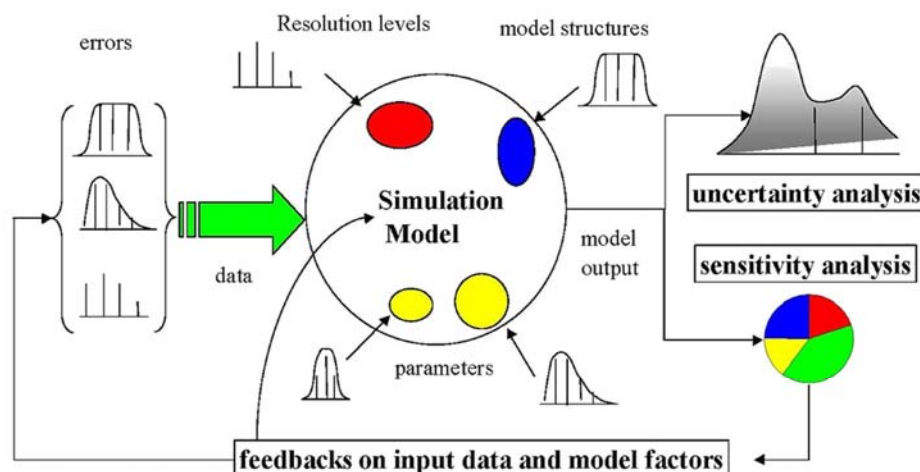
不确定性分析

1. Y. Pei, M.J. Davis, L.M. Pickett, S. Som, "Engine Combustion Network (ECN): uncertainty quantification of Spray A for different combustion vessels," *Combustion and Flame*; 162: 2337-2347, 2015
2. Y. Pei, R. Shan, S. Som, T. Lu, D.E. Longman, M.J. Davis, "Global sensitivity analysis of a diesel engine simulation with multi-target functions," SAE Paper No. 2014-01-1117, April 2014



32

敏感性分析

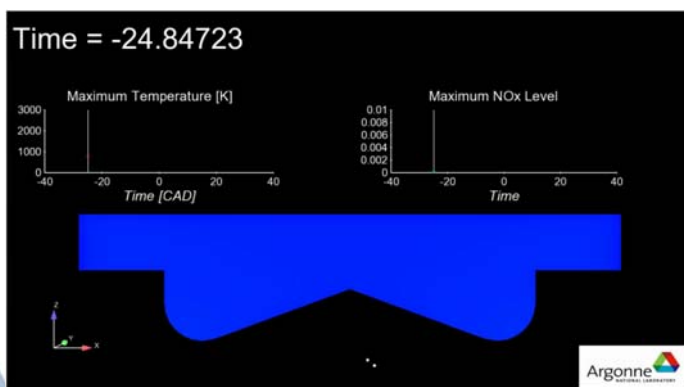


- 不确定性有很多来源:
 - 实验
 - 参数预估
 - 模型结构
- 通过模型传递
- 他们的相对重要性通过敏感性分析量化
 - 设计实验
 - 获得更精确预测

33

发动机参数不确定性分析

- **CAT** 单缸机闭循环模拟
- **32** 不确定变量 (实验和模拟) 可能影响模拟结果
- 所有的变量在不确定性的范围内使用蒙特卡洛采样同时, 随机被扰动
- 全局敏感性分析(**GSA**) 帮助理解某一不确定参数对目标的影响
- GSA 代码由阿贡化学工程部Dr. M.J. Davis开发

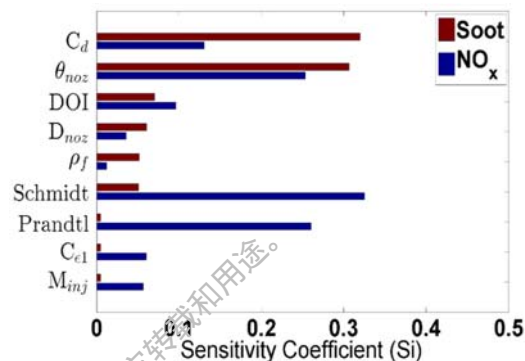
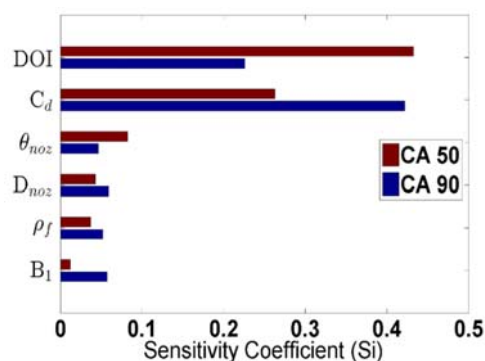


Variable	Description	Baseline	Min.	Max.
T_{piston}	piston wall temperature [K]	553	538	568
$T_{cylinder}$	cylinder wall temperature [K]	433	423	443
T_{head}	Cylinder head temperature [K]	523	508	538
RPM	engine speed [RPM]	1500	1495	1505
SR	Swirl Ratio	0.98	0.95	1.00
Schmidt	Schmidt number	0.78	0.70	0.90
Prandtl	Prandtl number	0.9	0.8	1.0
I_{turb}	initial turbulence intensity [m ² /s ²]	1.6	1.0	2.0
L_i	initial length scale [mm]	11.2	5.0	15.0
M_{res}	residual mass [mg]	0.05	0.02	0.10
$T_{f,crit}$	fuel critical temperature [K]	657	645	659
ρ_f	Normalized fuel density	1.00	0.95	1.05
HOV_f	Normalized fuel heat of vaporization	1.0	0.9	1.1
VP_f	Normalized fuel vapor pressure	1.0	0.9	1.1
μ_f	Normalized fuel viscosity	1.0	0.7	1.3
$Par_{G_{inlet}}$	total parcels injected	1.0E+6	1.0E+5	2.0E+6
B_{KH}	KH breakup length constant	0.60	0.55	0.65
B_1	KH breakup time constant	7	5	15
Par_{cut}	new parcel cut off	0.05	0.03	0.07
$C_{RT,0}$	RT time constant	1.0	0.5	2.0
C_{RT}	RT size constant	0.1	0.1	1.0
D_{noz}	nozzle diameter [microns]	169	164	174
θ_{noz}	nozzle orientation angle [degrees]	63	58	68
C_d	discharge coefficient	0.70	0.65	0.85
θ_{cone}	spray cone angle [degrees]	9	7	15
SOI	start of injection [°CA]	-7.7	-8.2	-7.2
DOI	duration of injection [°CA]	25.7	23.7	27.7
M_{inj}	total fuel mass injected [mg]	13.00	12.35	13.65
T_{inj}	injected fuel temperature [K]	312.9	307.0	317.0
$D_{f,eff}$	fuel mass diffusivity constant [m ² /s]	3.7E-6	1.9E-6	5.6E-6
C_{d1}	dissipation constant 1	1.42	1.35	1.50
C_{d2}	dissipation constant 2	1.68	1.60	1.76

34

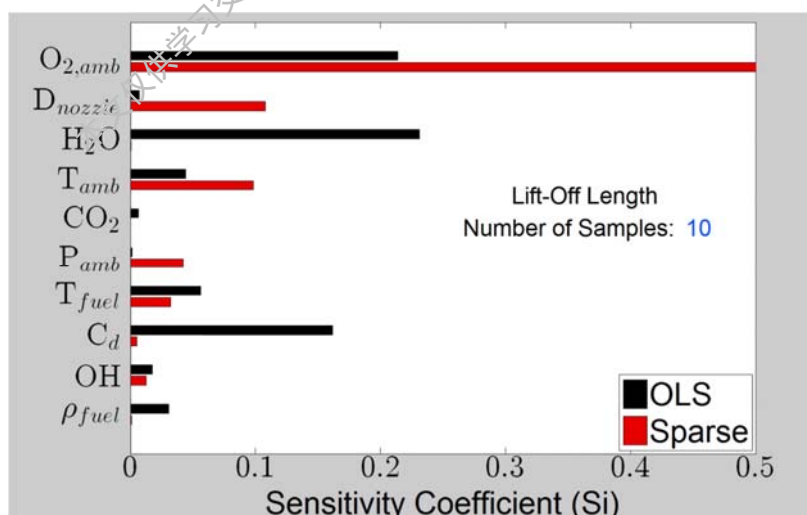
变量对目标的敏感性

- 每个转速-符合点100个模拟，用稀疏算法取得统计上收敛的结果
 - 每个算例在48核上40-50小时
 - 最大网格数: 2百万 (最小网格0.25 mm)
- 相对一次只能扰动一个变量的强力计算，GSA 显得更有效
 - ✓ 能捕捉变量间和变量对目标的非线性相互影响
 - ✓ 计算高效



35

收敛性排序: 最小二乘 vs. Sparse



➤ 最小二乘 vs. 稀疏技术 对lift-off length:

- 900 K 条件下分析340个算例
- 前10排名如图所示，剩下的7个敏感性小于0.01
- 收敛后，两种方法的排序是相同的
- 取得合理的收敛的排序:
 - 最小二乘和稀疏技术60次
 - 稀疏技术30次能得出合理排序

36

应用于低温燃烧概念开发

1. Z. Wang, R. Scarcelli, S. Som, S.S. McConnell, N. Salman, Y. Zhu, K. Freeman, K. Hardman, R.A. Reese, P.K. Senecal, M. Raju, S.D. Gilver, "Multi-dimensional modeling and validation of combustion in a high-efficiency dual-fuel light-duty engine," SAE Paper No. 2013-01-1091, April 2013
2. Y. Zhu, N. Salman, K. Freeman, R. Reese, Z. Wang, R. Scarcelli, S. Som, "Numerical study of the combustion characteristics of a turbocharged DI gasoline engine with diesel micro pilot ignition and cooled EGR," *Proceedings of the ASME 2013 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, ICEF2013-19170, October, 2013
3. J. Kodavasal, C. Kolodziej, S. Ciatti, S. Som, "CFD Simulation of Gasoline Compression Ignition," *Journal of Energy Resource Technology*; 137(3):032212-032212-13, JERT-15-1029, 2015



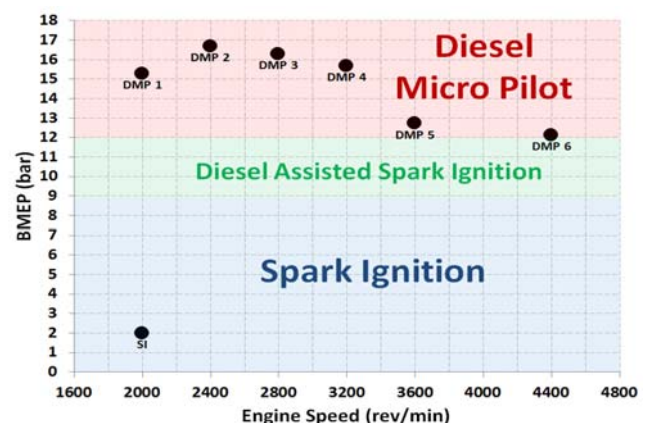
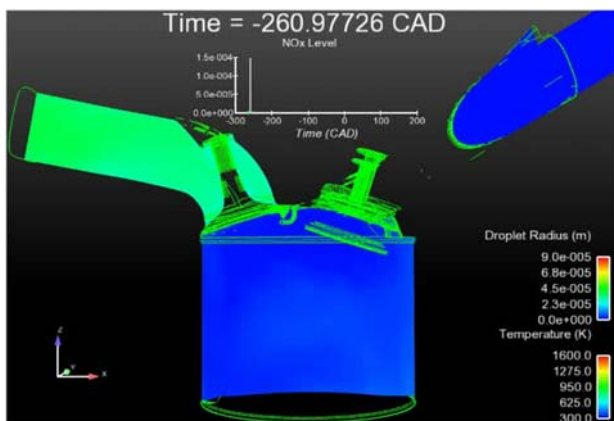
<http://www.verifi.anl.gov/>

37

Dual - Fuel Combustion with Chrysler LLC.

项目影响

- 为克莱斯勒开发在SI, CASI, 和 DMP 间灵活转换的燃烧策略
- 双燃料策略: 柴油作为点火能量, 汽油直喷贡献主要放热



科学成就

- 用基于遗传算法的优化取得发动机运行和排放的优势
- NOx 和 炭烟排放均有降低
- 模拟帮助实验发现最优的运行参数



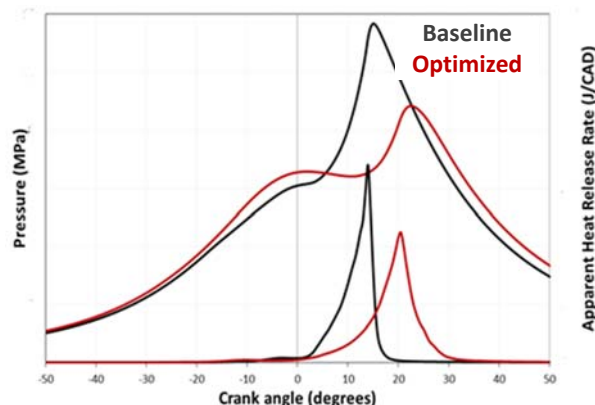
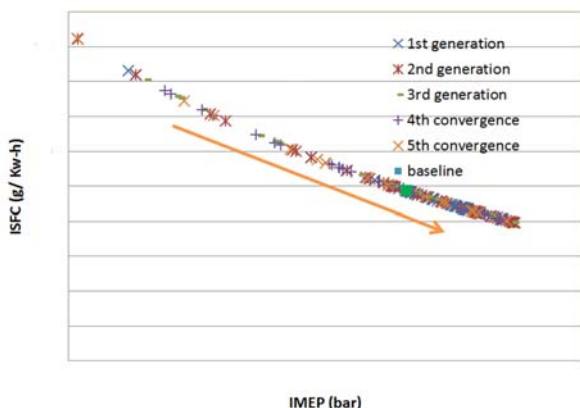
CHRYSLER

Argonne contributors: Z. Wang, R. Scarcelli, S. McConnell

38

优化的结果

50 代 (每代8个模拟): 总共 400 个模拟
每个模拟在48核上用40-50小时
最大网格数: 3百万



Parameters	Baseline	Optimized
EGR ratio (%)	35.3	↓
ICL (° CA ATDC)	461.8	↓
DMP ratio (%)	13.4	↓
Diesel SOI (° CA BTDC)	19.5	↑

优化显示:

- 更高进气压力
- 较早和更早的柴油喷射

导致:

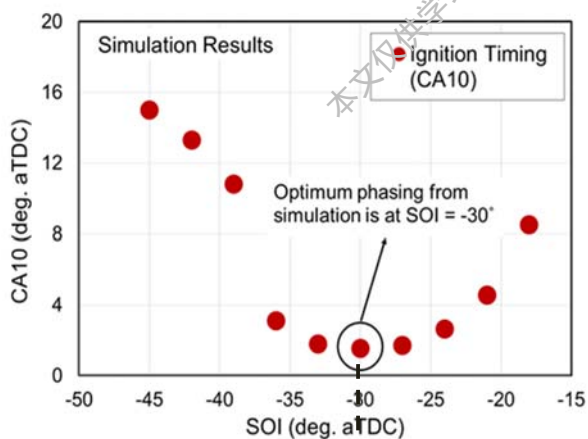
- 滞后的燃烧相位
- 更长的燃烧持续期

Argonne contributors: Z. Wang, R. Scarcelli, S. McConnell



39

优化汽油压燃发动机

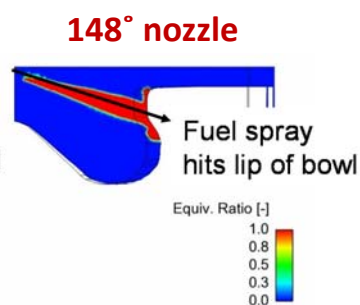
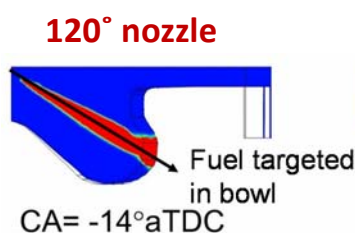


- 优化阿贡汽油压燃发动机
- 推迟SOI, 滞燃期缩短因为燃油分层更加明显
- 但是, 滞燃期的缩短比停留时间的缩短少 (因为SOI推迟)
- 因此, 当SOI迟于“最优点”后, 自燃推迟直到失火

- 喷射角度是获得良好燃烧效率的关键

更多的燃油在挤气间隙,
更多地热损失和更低的
反应活性

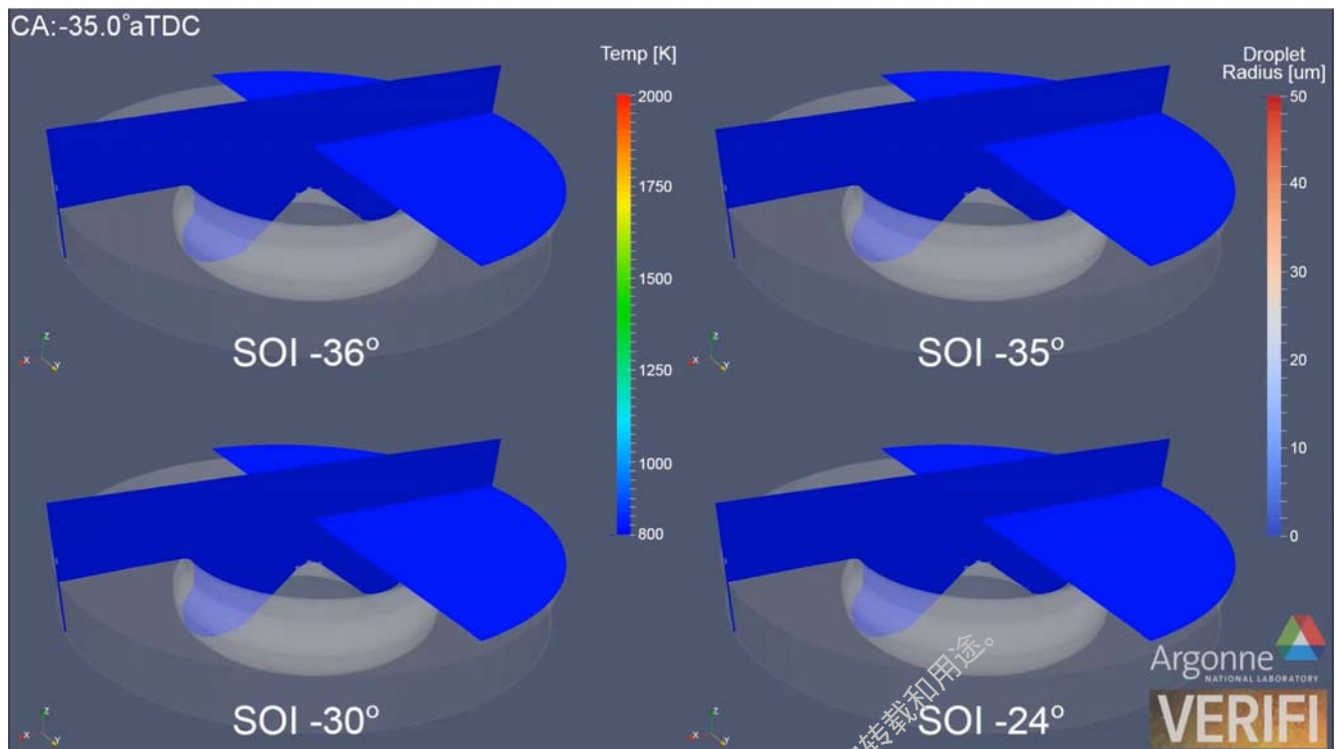
对自燃动力学合
适的停留时间快
速减少



Experimental data from Argonne: S. Ciatti, C. Kolodziej

40

用高性能计算优化汽油压燃发动机喷油时刻



41

结论

- 高性能计算让5年前都不可行的计算成为可能
 - 不久的将来发动机模拟的变革
- 一百万核小时 (集群上) 是常规的并且可以提供独特性的结果。展示的案例:
 - 优化, 不确定性分析
 - 多循环模拟, 特别是用LES
 - 喷嘴内流体LES模拟
- 模拟比实验更快, 但是取决于应用, 他们能提供实验不能提供的数据, 例如, 敏感性分析, 不确定性量化
- 我们为工业界伙伴修正了针对发动机模拟的“最优策略”
- 为了利用下一代计算架构 (千万亿级别和更高), 把计算扩展到1000多核是非常重要的
 - 高的时间和空间上精度, 现今湍流, 湍流燃烧模型, 详细反应机理, 稳定的多相流模型
 - 这些模拟产生大量数据, 需要高效的数据挖掘来协助“工程”等级的简单模型的开发

42

LEAPFROG YOUR COMPETITION: Shrink Your Combustion Engine Development Cycle!

From new fuels
to fuel injection
to combustion
to power
to emissions...



VERIFI's World-Class Chemists Quantify the Effects of Combustion

VERIFI's Supercomputers Do the "Heavy Lifting" of Computation and Visualization

VERIFI's Testing Capabilities Provide Unmatched Experimental Data to Validate Simulation Models

VERIFI's Computational Scientists & Engineers Put It All Together for You

VERIFI creates design-optimizing simulations that can reduce your financial investment and cut years from your product development cycles.

You supply the problem, VERIFI provides the answers!

<http://www.verifi.anl.gov/>

43

Acknowledgements

Sponsors: U.S. Department of Energy, Office of Vehicle Technology under the management of Gurpreet Singh, Leo Breton, Kevin Stork

IDAJ staff and researchers for kindly organizing this presentation!

Argonne National Laboratory

Y. Pei, Z. Wang, J. Kodavasal, Q. Xue, K. Saha, M. Ameen, N. Van Dam, P. Kundu, D. Longman

M.J. Davis, R. Sivaramakrishnan, A. Wagner (Chemical Science and Engineering)

K. Harms, J. Insley, M. Garcia, R. Bair (Leadership Computing Facility)

Prof. M. Battistoni at University of Perugia (visiting researcher at Argonne)

Researchers at Convergent Science Inc.: P. K. Senecal, K. Richards, E. Pomraning, S. Quan, M. Wang, S. Wijeyakulasuriya, S. Shah, ...

44

High Performance Computing Enabling a Paradigm Shift in Engine CFD



Dr. Sibendu Som

Principal Mechanical Engineer - Argonne National Laboratory
Computational Fellow – University of Chicago

CONVERGE USER GROUP MEETING

November 2015

Key Steps For GSA

- Simulations varying all variables over uncertainty ranges simultaneously
- Fit the response (ignition delay, liquid length, etc) to the uncertainties

$$t_{ign}(\{u_i\}) = t_0 + \sum A_i(u_i) + \sum \sum B_{ij}(u_i, u_j) + \dots, u_i \text{'s : uncertainties} \quad A_i(u_i) = \sum_{k=1}^4 a_{ik} u_i^k$$

- The fit of the response to the uncertainties leads to a variance associated with each variable (partial variance: V_i)
- Calculate sensitivity coeffs., $S_i = V_i/V$, $\sum S_i \cong 1$, (V : total variance)

Eulerian Mixture & Cavitation Model

Mixture Model equations (homogeneous multi-phase model)

Continuity: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} = 0$ mixture density: $\rho = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i$

Momentum: $\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) \vec{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{f}$ volume & mass fractions: $\alpha_i \rho_i = Y_i \rho$

Species: $\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho Y_i) \vec{v} = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + S_i$ void fraction: $\alpha_g = \frac{Y_g / \rho_g}{\sum Y_i / \rho_i}$

(plus: Energy, Turbulence)

Mass transfer: Homogeneous Relaxation Model (HRM) ^{1,2}

The model accounts for non-equilibrium heat transfer phenomena, using an empirical correlation

Hypothesis: finite rate of relaxation to equilibrium $\frac{dY_v}{dt} = \frac{Y - \bar{Y}_v}{\Theta}$

Exponential relaxation of the vapor quality Y to the equilibrium table value \bar{Y}_v over a timescale Θ . $\bar{Y}_v = \frac{h - h_l}{h_v - h_l}$ $\Theta = \Theta_0 \alpha^a \psi^b$ $\psi = \left| \frac{p_{sat} - p}{p_{crit} - p_{sat}} \right|$

Mixture: 1. liquid + 2. vapor + 3. air

1. Schmidt, D. P., et al., *Int. J. of Multiphase Flow*, 2012
2. Bilicki and Kestin, *Proc. Roy. Soc. Lond. A.*, 1990

47

Further Details About Eulerian Mixture Model

- ❑ VOF method used to model the internal nozzle two-phase flow with cavitation description closed by the homogeneous relaxation model
- ❑ Eulerian single velocity field approach by Vallet et al. (2001) is implemented for near-nozzle spray simulations
 - Large scale flow features dominate rather than the small scale structures under the high Reynolds and Weber number conditions
- ❑ This approach considers the liquid and gas phases as a complex mixture with a highly variable density to describe the dense spray region
 - Mean density is obtained from Favre-averaged liquid mass fraction: $\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\bar{Y}}{\rho_l} + \frac{1 - \bar{Y}}{\rho_g}$
- ❑ The liquid mass fraction is transported with a model for the turbulent liquid diffusion flux into the gas: $\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \bar{Y}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i' \bar{Y}'}{\partial x_i} - \bar{\rho} \tilde{Y}_{evap}$
- ❑ Closure for the liquid mass transport is based on a turbulent gradient flux model: $\bar{\rho} \tilde{u}_i' \bar{Y}' = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_i}$
- ❑ Void fraction (α) = $\begin{cases} 0 & \text{if the computational cell is filled with pure liquid} \\ 1 & \text{if the computational cell is filled with pure gas} \\ (0, 1) & \text{if the computational cell is filled with both liquid and gas} \end{cases}$

* Xue, Som, et al. SAE Journal of Fuel and Lubricants, 2014

48

Core Capabilities & Collaborations

Large variety of engine platforms and fuels

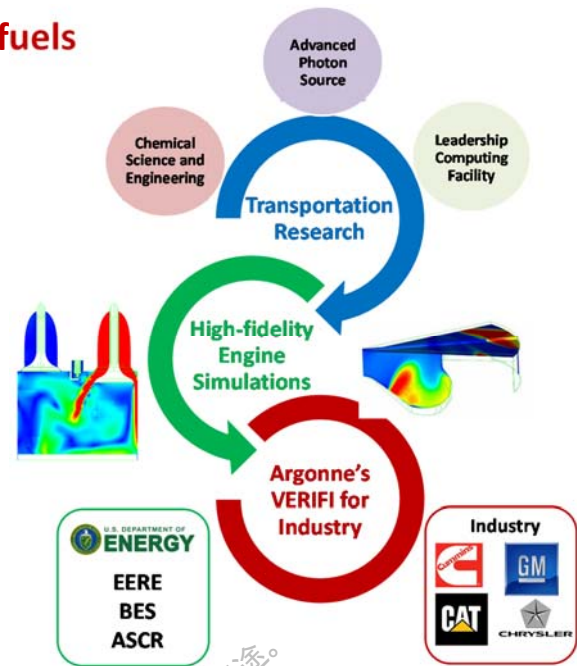
- Light- and heavy-duty engines
- CI – SI – LTC – Dual-fuel
- Gasoline – Diesel – Biofuels
- Gasoline Compression Ignition

Model Development

- Nozzle internal flow
- Sprays
 - Lagrangian models
 - Eulerian models
- Detailed chemistry
- Mechanism reduction
- RANS and Large Eddy Simulations
- Cyclic variability
- Turbulence chemistry interaction
- Optimization
- Uncertainty Analysis

Computational resources

- Clusters and Super-Computer Facility



<http://verifi.anl.gov/publications/#uncertainty>