การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์การเผาไหม้ Flamelet ร่วมกับ Reaction Progress Variable สำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์การฉีดโดยตรง

อิศเรศ ธุชกัลยา[1*]
มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ศูนย์รังสิต ต.คลองหนึ่ง อ.คลองหลวง จ.ปทุมธานี 12121

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ จะศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปร์ยสำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยแบบจำลองสเปร์ยที่ใช้ จะอาศัยหลักทางสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปร์ยขนาดต่างๆ ซึ่งแต่ละโมเมนต์จะแสดงถึงปริมาตร พื้นผิว รัศมี และจำนวนทั้งหมดของละอองฝอยตามลำดับ และโมเมนต์เหล่านี้จะเป็นตัวแปรของแบบจำลองย่อยของสเปร์ยซึ่งประกอบไปด้วยกระบวนการแตกตัว การชนกัน การระเหยของละอองฝอย และการปฏิสัมพันธ์ระหว่างก๊าซและของเหลว สำหรับชุดสมการควบคุมของก๊าซและละอองฝอยนี้ ได้ถูกพัฒนาบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ยเชิงโมเมนต์ และหาคำตอบด้วยวิธี Finite Volume ในกรอบของ Eulerian สำหรับการเผาไหม้ จะใช้แบบจำลอง Steady Laminar Flamelet ร่วมกับ reaction progress variable ในการคำนวณ เพื่อกำหนดระดับของปฏิกิริยา ซึ่งกลไกจลนศาสตร์ทางเคมีแบบโครงร่าง (skeleton chemical kinetic mechanisms) ที่เลือกใช้ในการสร้าง Flamelet library มีจำนวนส่วนประกอบเคมี 43 ชนิดและสมการเคมีทั้งหมด 185 สมการ โดยค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนในฐานข้อมูล ซึ่งได้แก่ อุณหภูมิเปลว อัตราส่วนเชิงมวลของ species ใดๆ ความหนาแน่นของก๊าซผลิตภัณฑ์ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี สามารถคำนวณได้จากการเฉลี่ยเชิง PDF (probability density function averaging) ซึ่งผลการทำนายที่ได้จากจากแบบจำลอง Steady Flamelet ถูกนำไปเปรียบเทียบกับการทดลอง ผลจากการเปรียบเทียบอยู่ในเกณฑ์ที่น่าพึงพอใจ รวมถึงระยะเปลวลอยตัวที่ทำนายได้ใกล้เคียง

คำสำคัญ : การจุดระเบิดเอง / การเผาไหม้ / เครื่องยนต์ดีเซล / แบบจำลอง / สเปร์ย

* *ผู้รับผิดชอบบทความ E-mail : disares@engr.tu.ac.th*

1 *อาจารย์ประจำ ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์*

Development of Flamelet Combustion Model with Reaction Progress Variable for Applying in Direct Injection Engines

Isares Dhuchakallaya[1*]

Thammasat University, Rangsit Campus, Khlong 1, Khlong Luang, Pathum Thani 12121

Abstract

This research investigates on the development of a spray combustion model for diesel engine applications. This spray model is based on the spray droplet number size distribution moments approach. These moments relate to volume, surface area, radius and number of droplets, respectively. The source terms of sub-models including droplet breakup, collision, evaporation, and the interactions between the liquid phase and the gas phase are derived in term of these droplet moments. The governing equations for both the gas and liquid phases are developed based on the moment-average quantities and solved by the finite volume method on an Eulerian framework. For combustion analysis, Steady Flamelet approach is employed here combining with reaction progress variable in order to indicate the reaction level. The skeleton chemical kinetic mechanisms consisting of 43 chemical components and 185 reactions are solved in order to create the Flamelet library. The thermo-chemical variables in this library including flame temperature, species mass fraction, density, and reaction rate are averaged by a probability density function averaging approach. The simulation results predicted by developed Steady Flamelet model are compared with the experimental data. The comparison results are relatively satisfactory. In addition, the lifted-off length predicted is also comparable with the flame luminosity as well.

Keywords : Auto-ignition / Combustion / Diesel Engine / Modelling / Spray

* *Corresponding author E-mail : disares@engr.tu.ac.th*

1 *Lecturer, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering.*

1. บทนำ

ในปัจจุบันนี้ เทคโนโลยีการฉีดน้ำมันโดยตรง (direct injection) ได้เข้ามามีบทบาทสำคัญทั้งในเครื่องยนต์ที่จุดระเบิดด้วยแรงอัดและประกายไฟ ซึ่งเทคโนโลยีนี้จะช่วยให้ประหยัดเชื้อเพลิงมากกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับเครื่องยนต์แบบ indirect injection pre- and swirl-chamber หลักการเบื้องต้นของการเผาไหม้แบบสเปร์ยเริ่มต้นจาก เชื้อเพลิงเหลวถูกฉีดด้วยความดันสูงเข้าสู่ห้องเผาไหม้ซึ่งมีอุณหภูมิและความดันสูง ความดันที่สูงของการฉีดจะไปทำให้ผิวของลำเจ็ตเกิดการแยกเป็นเส้นๆ (ligaments) และแตกตัวเป็นละอองเล็กๆ ถัดมา ละอองที่แตกตัวมานั้นจะถูกทำให้ระเหยกลายเป็นไอเชื้อเพลิงเนื่องจากการถ่ายเทความร้อน ไอเชื้อเพลิงนี้จะไปผสมกับอากาศ เมื่ออุณหภูมิของของผสมสูงเพียงพอ ก็จะเกิดการจุดระเบิดเอง (auto-ignition) ซึ่งนำไปสู่การเผาไหม้ในที่สุด นอกเหนือจากคุณสมบัติทางเคมีของเชื้อเพลิงที่มีผลต่อกระบวนการเผาไหม้แล้ว คุณลักษณะการกระจายตัวของสเปร์ยก็มีผลต่อการจุดระเบิดเอง ซึ่งนำไปสู่รูปร่างของเปลวที่แตกต่างกันด้วย [1]

ในกระบวนการเผาไหม้แบบสเปร์ย อัตราการเผาไหม้ของสเปร์ยจะขึ้นอยู่กับปัจจัยหลักคือ กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีและความปั่นป่วนที่ซับซ้อนของก๊าซเชื้อเพลิง โดยที่กลไกจลนศาสตร์ทางเคมีที่มีความละเอียดแม่นยำสูงซึ่งจะใช้ปฏิกิริยาเคมีและ species ที่เกี่ยวข้องทั้งหมดนั้นค่อนข้างมีขีดจำกัดสูง สำหรับการนำมาประยุกต์ใช้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนสูงๆ อย่างเช่น ดีเซล นอกจากนี้ การปฏิสัมพันธ์ระหว่างความปั่นป่วนและปฏิกิริยาเคมีของก๊าซเชื้อเพลิงนั้นยากที่จะสร้าง และสามารถทำนายได้ใกล้เคียง โดยวิธีที่มีศักยภาพมากที่สุดคือการใช้แบบจำลอง Probability density function (PDF) transport equation เพราะ source term ของปฏิกิริยาเคมีของแต่ละ species สามารถอนุพันธ์ได้โดยตรงจากทฤษฎีทางจลนศาสตร์ทางเคมีโดยปราศจากการจำลองใดๆ ทั้งสิ้น แต่ในทางปฏิบัตินั้น มันเป็นการยากมากที่จะสมมุติรูปร่างของ PDF ที่ใช้ร่วม โดยขึ้นอยู่กับตัวแปรมากกว่าสองตัวแปร และความซับซ้อนของปัญหายิ่งทวีคูณมากยิ่งขึ้น เมื่อจำนวนตัวแปรของ species ที่เกี่ยวข้องเพิ่มขึ้น ดังนั้นวิธีการนี้จึงประสบความสำเร็จได้กับเชื้อเพลิงที่มีค่าไฮโดรคาร์บอนต่ำๆ เท่านั้นโดยใช้วิธี Monte-Carlo ในการแก้ปัญหา [2, 3]

ดังนั้นในงานวิจัยนี้ จึงมุ่งเน้นที่จะพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปร์ยสำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยแบบจำลองจะเริ่มพัฒนาจากแบบจำลองสเปร์ย ของ Beck [4] ซึ่งสามารถทำนายการกระจายตัวของสเปร์ยได้ค่อนข้างถูกต้องแม่นยำ ดังปรากฏในงานตีพิมพ์จำนวนมาก [5-10] ส่วนแบบจำลองของการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้จะถูกพัฒนาขึ้นมา ซึ่งจะใช้แบบจำลอง Steady Laminar Flamelet โดยแบบจำลองนี้เป็นแบบใกล้สมดุลทางเคมี ซึ่งมีความน่าเชื่อถือสูงกว่าแบบจำลองสมดุลทางเคมี [11] เนื่องจากมีจำนวน species ที่พิจารณามากกว่า แต่เวลาที่ใช้ในการคำนวณเพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อย เนื่องจากข้อมูลของค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนจะถูกเก็บไว้ใน Flamelet library ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับค่าสัดส่วนของผสมและ scalar dissipation แต่เนื่องจากแบบจำลองนี้ ไม่สามารถใช้คำนวณการจุดระเบิดหรือการดับลงของเปลวได้ ดังนั้นจึงอาศัยตัวแปรพิเศษคือ reaction progress variable มาใช้ร่วมในการคำนวณ โดยรายละเอียดจะอธิบายต่อไป

2. แบบจำลอง Steady Laminar Flamelet

แบบจำลองนี้อยู่บนสมมุติฐาน chemical time scale นั้นสั้นเพียงพอ ที่จะทำให้ปฏิกิริยาเกิดขึ้นเพียงภายในชั้นบางๆ บริเวณส่วนผสม stoichiometric จึงทำให้โครงสร้างของปฏิกิริยายังคงเป็นลามินาร์ และการแพร่จะเกิดขึ้นในทิศทางตั้งฉากกับชั้นผิวของส่วนผสม stoichiometric ซึ่งสมการ Flamelet จะแสดงสัดส่วนเชิงมวลของ species ต่างๆ และอุณหภูมิเป็นฟังก์ชันกับ สัดส่วนของผสม Z, scalar dissipation χ และเวลา τ ดังนี้

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2}\frac{1}{Le_i}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \qquad (1)$$

เมื่อ χ คือ scalar dissipation ซึ่งเป็นตัวแปรบ่งบอกถึง สภาพการผสมกันในการไหลปั่นป่วนที่มีผลต่อโครงสร้าง Le_i คือ Lewis number ของ species i และ $\dot{\omega}_i$ คืออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีของ species i ในทำนองคล้ายๆ กัน สมการพลังงานก็สามารถพิสูจน์ได้เป็น

$$c_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\chi}{2}\frac{1}{Le_i}\frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^{N} h_i \left\{ \frac{\chi}{2}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \right\} \quad \textbf{(2)}$$

แบบจำลอง Steady Laminar Flamelet ถูกใช้ในการวิเคราะห์โครงสร้างของเปลวไฟ ในสภาวะคงตัว ดังนั้นเทอมอนุพันธ์เทียบกับเวลาจึงไม่พิจารณา สมการ Steady Flamelet จึงลดรูปเป็น

$$\frac{\chi}{2}\frac{1}{Le_i}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\omega_i}{\rho} = 0 \quad \textbf{(3)}$$

และ

$$\frac{\chi}{2}\frac{1}{Le_i}\frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} = \sum_{k=1}^{N} h_i \left\{ \frac{\chi}{2}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \right\} \quad \textbf{(4)}$$

ซึ่งผลลัพธ์ของ Flamelet จึงเป็นฟังก์ชันของ χ และ Z เท่านั้น และสามารถคำนวณล่วงหน้า แล้วเก็บผลลัพธ์ดังกล่าวเป็นฐานข้อมูล (Flamelet library) เพื่อเรียกใช้ภายหลัง

โดยทั่วไปแล้ว รูปแบบสมการของ scalar dissipation rate จะถูกสมมุติขึ้น ซึ่งรูปแบบที่นิยมคือ inverse error function เสนอโดย Peters [12] ส่วนรูปแบบอื่นดังแสดงใน [13, 14] ก็ยังคงมีใช้ทั่วไป สำหรับลักษณะการไหลสวนทางกัน สมการการกระจายตัวของ scalar dissipation rate ในพิกัด Z เป็นดังนี้

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi}\exp\left\{-2\left[erfc^{-1}(2Z)\right]^2\right\} \quad \textbf{(5)}$$

เมื่อ a_s คือ strain rate ซึ่งแสดงถึงเกรเดียนความเร็วสูงสุด และ $erfc^{-1}$ คือ inverse error function เพื่อกำจัดตัวแปร a_s ออก โดยทำเป็นสัดส่วนที่สภาวะ stoichiometric จะได้

$$\chi(Z) = \chi_{st}\frac{\exp\left\{-2\left[erfc^{-1}(2Z)\right]^2\right\}}{\exp\left\{-2\left[erfc^{-1}(2Z_{st})\right]^2\right\}} \quad \textbf{(6)}$$

สำหรับสัดส่วนของผสม (Z) นั้น ในที่นี้จะเลือกใช้สหสัมพันธ์ของ Bilger [15] ซึ่งได้นิยามให้เป็นฟังก์ชันกับ reactive species ไว้ดังนี้

$$Z = \frac{2\frac{Y_C - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2}\frac{Y_H - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_O - Y_{O,2}}{M_O}}{2\frac{Y_{C,1} - Y_{C,2}}{M_C} + \frac{1}{2}\frac{Y_{H,1} - Y_{H,2}}{M_H} - \frac{Y_{O,1} - Y_{O,2}}{M_O}} \quad \textbf{(7)}$$

เมื่อ M คือมวลโมเลกุล และตัวห้อย C, H และ O จะหมายถึงส่วนประกอบคาร์บอน ไฮโดรเจน และออกซิเจนตามลำดับ ส่วนตัวห้อย 1 และ 2 จะอ้างถึงค่าคงที่ในสภาวะเริ่มต้นของสายการไหลเชื้อเพลิงและออกซิเจนตามลำดับ

ดังนั้นผลลัพธ์ของสมการ Flamelet ข้างต้น โดยทั่วไปจะแสดงอยู่ในรูปของ $\phi(Z, \chi_{st})$ ซึ่ง ϕ จะเป็นปริมาณสเกลาร์ใดๆ เช่น อุณหภูมิ สัดส่วนเชิงมวลของ species ใดๆ เป็นต้น โดยผลลัพธ์ดังกล่าว จะต้องถูกพิจารณาบนพื้นฐานของค่าเฉลี่ยเชิงสถิติ Probability Density Function averaging ดังนี้

$$\tilde{\phi} = \int_0^{\infty}\int_0^{1} \phi(Z, \chi_{st})\tilde{P}(Z, \chi_{st})dZd\chi_{st} \quad \textbf{(8)}$$

เพื่อลดความซับซ้อนและเวลาการคำนวณลง จึงสมมุติว่า χ_{st} และ Z เป็นอิสระต่อกัน ดังนั้นจะเขียนใหม่ได้เป็น

$$\tilde{\phi} = \int_0^{\infty}\int_0^{1} \phi(Z, \chi_{st})\tilde{P}(Z)\tilde{P}(\chi_{st})dZd\chi_{st} \quad \textbf{(9)}$$

ในที่นี้ จะสมมุติการกระจายตัวของ χ_{st} เป็นแบบ Dirac-delta function ส่วนการกระจายตัวของ Z เป็นแบบ beta function ซึ่งการกระจายตัวของสัดส่วนของผสมแบบ beta นั้น ขึ้นอยู่กับตัวแปร $\tilde{Z}$ และ $\tilde{Z}''^2$ ดังนั้นสเกลาร์ $\tilde{\phi}$ จึงสามารถคำนวณไว้ล่วงหน้า และเก็บไว้ใน Flamelet library โดยจะเป็นฟังก์ชันกับ $\tilde{Z}$, $\tilde{Z}''^2$ และ $\tilde{\chi}_{st}$

ในการเผาไหม้แบบ non-premix สภาวะการผสมกันที่ตำแหน่งและเวลาต่างๆ สามารถระบุได้ด้วยค่าเฉลี่ยของสัดส่วนของผสมและค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสม ภายใต้สมมุติฐานที่ว่า species ทุกชนิดมีค่าการแพร่เชิงโมเลกุลเท่ากันทุกชนิด ตามนิยามของค่าสัดส่วนของผสมจะไม่มี source term แต่ในงานวิจัยนี้ สเปร์ยมีการระเหยของละอองฝอย ดังนั้นจึงได้ปรับปรุงโดยการเพิ่ม

source term สำหรับการระเหยของละอองฝอยเข้าไปในสมการส่งถ่ายสถานะก๊าซ ดังนี้

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Z}}{\partial t}+\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{U}_i\tilde{Z}}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left\{\left(\bar{\rho}D_z+\frac{\mu_t}{Sc_z}\right)\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}\right\}+\dot{m}_F \quad \textbf{(10)}$$

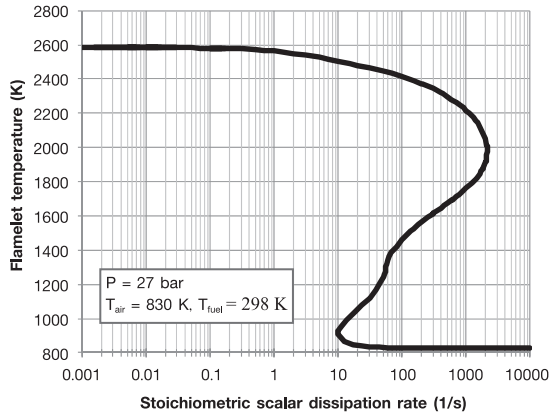
เมื่อ D_Z คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่และ $\dot{m}_F$ คืออัตราการระเหยของละอองฝอย ในการไหลแบบปั่นป่วน ความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมจะมีผลอย่างมากต่อการปฏิกิริยา โดยสมการส่งถ่ายสำหรับค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Z}}{\partial t}+\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{U}_i\tilde{Z}}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left\{\left(\bar{\rho}D_z+\frac{\mu_t}{Sc_z}\right)\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}\right\} +2\frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{Z}''^2}}\left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}\right)-\bar{\rho}C_\chi\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}\tilde{Z}''^2 \quad \textbf{(11)}$$

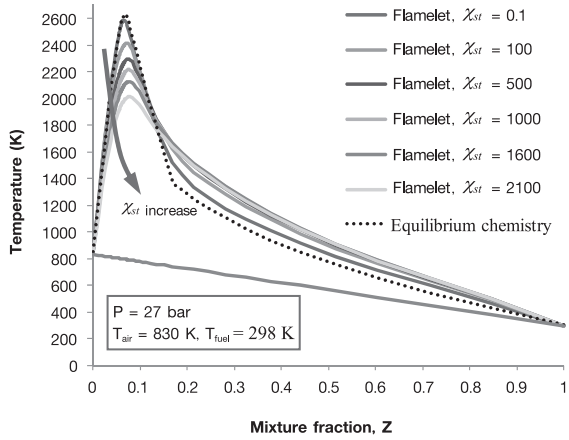
โดยที่ค่า Schmidt number สำหรับค่าเฉลี่ยและค่าความแปรปรวนของสัดส่วนของผสมโดยทั่วไปแล้วมีค่าทั้งคู่เท่ากับ 0.9 และ $C\chi$ เท่ากับ 2.0 [16]

สำหรับในงานวิจัยนี้ การสร้าง Flamelet library จะเลือกใช้กลไกปฏิกิริยาเคมีแบบโครงร่าง (skeletal mechanism) ของ Liu และคณะ [17] ซึ่งใช้เชื้อเพลิง *n*-heptane แทนดีเซล เนื่องจากมีค่าออกเทนใกล้เคียงกัน โดยกลไกนี้มีส่วนประกอบเคมีจำนวน 43 ชนิดและสมการเคมีรวมจำนวน 185 สมการ ผลการคำนวณจะได้อุณหภูมิการเผาไหม้สูงสุดซึ่งเป็นฟังก์ชันกับ stoichiometric scalar dissipation rate ดังแสดงในรูปที่ 1 โดยเส้นโค้งส่วนบนจะแสดงถึงอุณหภูมิที่เกิดจากการเผาไหม้ทั้งหมด และเส้นโค้งด้านล่างจะแสดงถึงสภาวะที่ไม่เกิดการลุกไหม้ ส่วนเส้นโค้งที่เชื่อมระหว่างเส้นโค้งทั้งสองจะแสดงถึงสภาวะไม่เสถียร (unstable) ซึ่งอาจจะลุกไหม้หรือดับไฟก็ได้ สำหรับแบบจำลอง Steady Flamelet จะเลือกใช้เฉพาะเส้นโค้งด้านบนเท่านั้นในการคำนวณ โดยที่ค่า dissipation rate ที่เพิ่มขึ้น จะทำให้อัตราการผสมกันและปฏิกิริยาสูงขึ้น ในขณะที่อุณหภูมิเปลวจะค่อยๆ ลดลง จนกระทั่งอุณหภูมิเปลวต่ำมาก ซึ่งจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีไม่สามารถดำเนินต่อไปได้เนื่องจากอิทธิพลของ Arrhenius kinetic จึงทำให้เปลวไฟเกิดการดับลง

พิจารณาการกระจายตัว ของอุณหภูมิเปลวที่ค่าสัดส่วนของผสมต่างๆ ดังแสดงในรูป 2 จะเห็นได้ว่าอุณหภูมิเปลวสูงสุดจะเกิดขึ้นที่ χ_{st} ต่ำๆ เนื่องจากอัตราการผสมกันและปฏิกิริยาจะลดลง และทำให้สภาวะทางเคมีใกล้เข้าสู่สภาวะสมดุล (แสดงด้วยเส้นประ [11]) โดยในสภาวะที่ $\chi_{st} \longrightarrow 0$ ลักษณะทางกายภาพของสารตั้งต้นจะมีผลน้อยมากต่อการเผาไหม้ เนื่องจากเชื้อเพลิงและออกซิเจน ได้รับการผสมกันอย่างดี ดังนั้นผลการทำนายที่ได้จาก แบบจำลอง Flamelet จึงเป็นการให้ข้อมูลที่สภาวะสมดุลทางเคมี ที่ χ_{st}=0 และเมื่อ χ_{st} เพิ่มมากขึ้นนั่นหมายความว่า การกระจายตัวของค่าสัดส่วนของผสม *Z* ไม่สม่ำเสมอมากยิ่งขึ้น ส่งผลให้อัตราการผสมกันสูงขึ้นแต่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีลดลง ทำให้อุณหภูมิสูงสุดมีค่าลดต่ำลง จนกระทั่งเกิดการดับลงของเปลวในที่สุด



รูปที่ 1 เส้นโค้งอุณหภูมิรูปตัว S ที่ได้จากการเผาไหม้ของ *n*-heptane กับอากาศ



รูปที่ 2 การกระจายตัวของอุณหภูมิจากการเผาไหม้ของ *n*-heptane กับอากาศ

3. แบบจำลอง Laminar Flamelet/ Reaction Progress Variable

ข้อมูลที่เก็บไว้ใน Flamelet library จะเป็นฟังก์ชันกับ $\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}$ และ $\widetilde{\chi_{st}}$ ซึ่งตัวแปรเหล่านี้ ไม่ได้บ่งบอกถึงระดับปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้น จึงทำให้ไม่สามารถทำนายการจุดระเบิดเอง (auto-ignition) การพัฒนาตัวของเปลว และการดับลงของเปลวไฟ (extinction) ได้ ดังนั้นเพื่อให้แบบจำลองนี้ สามารถทำนายการจุดระเบิดและการเคลื่อนที่ของเปลวไฟได้ จึงต้องนำตัวแปรซึ่งเป็นอิสระจากค่าสัดส่วนของผสมมาใช้ร่วมในการระบุระดับของปฏิกิริยาการเผาไหม้ มีชื่อว่า reaction progress variable โดยสมการส่งถ่ายของค่าเฉลี่ยถ่วงน้ำหนักของ reaction progress variable สามารถคำนวณได้จาก

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\bar{\rho}_g \widetilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}_g \widetilde{U}_{gi} \widetilde{C}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_C}\left(\frac{\partial \widetilde{C}}{\partial x_j}\right)\right) + \bar{\dot{\omega}} \quad \textbf{(12)}$$

เมื่อ $\bar{\dot{\omega}}$ คือค่าเฉลี่ยอัตราการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งเป็นที่ทราบกันว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีจะมีอิทธิพลมากในช่วงการเผาไหม้แบบ premixed ส่วนอัตราการผสมกันจะเข้ามาแทนที่เมื่อเข้าสู่ช่วงการเผาไหม้แบบ non-premixed ดังนั้นเพื่อให้การเปลี่ยนถ่ายสมการควบคุมอัตราการเผาไหม้เป็นไปอย่างราบเรียบ Pires da Cruz และคณะ [18] จึงได้นำเสนอสมการเปลี่ยนถ่ายดังนี้

$$\bar{\dot{\omega}} = \bar{\dot{\omega}}_{che}(1-\widetilde{C}) + \bar{\dot{\omega}}_{tur}\widetilde{C} \quad \textbf{(13)}$$

สำหรับการคำนวณหาอัตราการเกิด ปฏิกิริยาเคมีจะเลือกใช้สมการขั้นเดียว ย้อนกลับไม่ได้ ซึ่งอยู่ในรูปของสมการ Arrhenius ดังนี้

$$\bar{\dot{\omega}} = A\bar{\rho}_g^{a+b}\widetilde{Y}_F^a \widetilde{Y}_{O_2}^b \exp(-E_A / R_u \widetilde{T}) \quad \textbf{(14)}$$

ส่วนอัตราการผสมกัน สามารถคำนวณหาได้จากแบบจำลอง Eddy Break-Up ดังนี้

$$\bar{\dot{\omega}}_{tur} = B\bar{\rho}_g \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} \min\left(\widetilde{Y}_F, \frac{\widetilde{Y}_{O_2}}{s}\right) \quad \textbf{(15)}$$

เมื่อ A, B, a, b และ E_A คือค่าคงที่ซึ่งขึ้นอยู่กับชนิดของเชื้อเพลิง โครงสร้างของเปลว และปฏิกิริยาระหว่างเชื้อเพลิงและออกซิเจน ส่วน s คือ อัตราส่วนออกซิเจนต่อเชื้อเพลิงเชิงมวลตาม stoichiometric

จากสมการเปลี่ยนถ่ายของ Pires da Cruz และคณะ [18] ที่กล่าวถึงการเปลี่ยนถ่ายสมการควบคุมจากการเผาไหม้แบบ premixed ไปเป็นการเผาไหม้แบบ non-premixed ดังนั้น ในที่นี้จึงขอนิยาม reaction progress variable ในลักษณะคล้ายๆ กัน ดังนี้

$$\widetilde{C} = \frac{\widetilde{\phi}(\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \widetilde{\chi}_{st}) - \widetilde{\phi}_{premixed}(\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \widetilde{\chi}_{st})}{\widetilde{\phi}_{non-premixed}(\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \widetilde{\chi}_{st}) - \widetilde{\phi}_{premixed}(\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \widetilde{\chi}_{st})} \quad \textbf{(16)}$$

โดย $\widetilde{\phi}$ แสดงถึงค่าเฉลี่ยตัวแปรอุณหภาพเชิงเคมีต่างๆ (thermo-chemical variables) ซึ่งเป็นฟังก์ชันกับ $\widetilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \widetilde{\chi_{st}}$ ดังนั้นเมื่อคำนวณค่า $\widetilde{C}$ ได้จากสมการส่งถ่ายค่าคุณสมบัติต่างๆ ของของไหล ก็จะสามารถหาได้ทันทีจาก Flamelet library ทำให้การคำนวณใช้เวลาลดลงเป็นอย่างมาก เมื่อเปรียบเทียบกับการสร้างสมการส่งถ่ายสำหรับ species ต่างๆ แล้วคำนวณโดยตรง

4. ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลข

การพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยใช้ระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขชั้นสูง อาศัยเทคนิค Finite Volume และ Finite Difference Time Domain เพื่อหาคำตอบของปัญหาที่สามารถอธิบายได้จากกลุ่มของสมการอนุพันธ์ซึ่งไม่เป็นอิสระต่อกัน (Coupled) และมีความไม่เป็นเชิงเส้นสูง ประกอบไปด้วยสมการอนุพันธ์ย่อยมวลโมเมนตัมของอากาศ ไอเชื้อเพลิง เชื้อเพลิงเหลวและก๊าซผลิตภัณฑ์ต่างๆ และสมการพลังงาน จะถูกนำเสนอในรูปของชุดสมการส่งถ่าย โดยที่ชุดสมการส่งถ่ายสำหรับทั้งสถานะก๊าซและของเหลวที่ใช้ในการแก้ปัญหาจะอยู่ในรูปของ Eulerian และการเรียงตัวของกริดแบบเยื้อง (Staggered grid arrangement) จะถูกใช้สำหรับความเร็วของทั้งสถานะก๊าซและของเหลว วิธี Euler implicit temporal differencing และ hybrid upwind/central spatial differencing จะถูกใช้ในการดีสครีตชุดสมการส่งถ่าย ให้อยู่

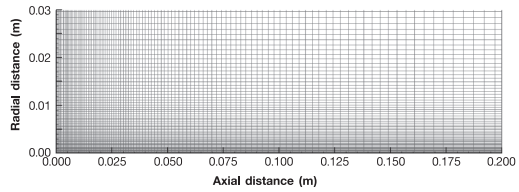
ในรูปของ Finite volume และแบบจำลองความปั่นป่วนเลือกใช้ standard k-ε เนื่องจากต้องการเวลาการคำนวณน้อย ประกอบกับการเผาไหม้ของสเปร์ยมีค่า Reynolds number ค่อนข้างสูง สำหรับกระบวนการหาคำตอบ จะอ้างอิงกระบวนการ PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) ของ Issa [19] โดยมีการเพิ่มสมการของเหลวเข้าไป กระบวนการ PISO นั้น เป็นการหาคำตอบแบบ non-iterative ที่มีสิทธิภาพ โดยจะปรับค่าความดัน และความเร็วให้สอดคล้องกันโดยอาศัยเทคนิค operator splitting แล้วหาคำตอบของสมการโมเมนตัมตามแนวทาง predictor-corrector

5. ผลลัพธ์ของแบบจำลองและการวิเคราะห์

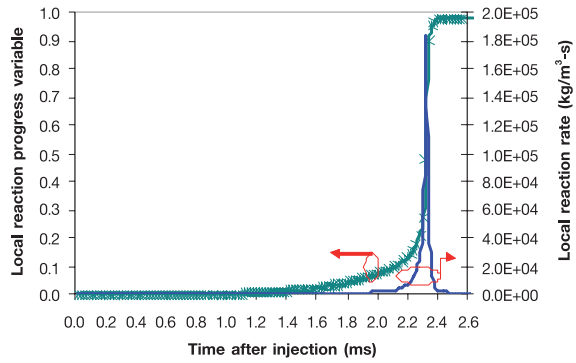
การคำนวณแบบจำลอง Steady Laminar Flamelet จะใช้ข้อมูลสำหรับการคำนวณดังแสดงในตารางที่ 1 ซึ่งเป็นข้อมูลที่สอดคล้องกับการทดลองของ Akiyama และคณะ [20] ที่จะใช้ในการเปรียบเทียบ ส่วนลักษณะทางกายภาพของห้องเผาไหม้จะสมมุติว่า เป็นทรงกระบอกสมมาตร พิกัด (z, r) ดังแสดงในรูปที่ 5 ซึ่งผลที่ได้จากการคำนวณมีดังนี้

ตารางที่ 1 ข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณแบบจำลองการเผาไหม้สเปร์ย

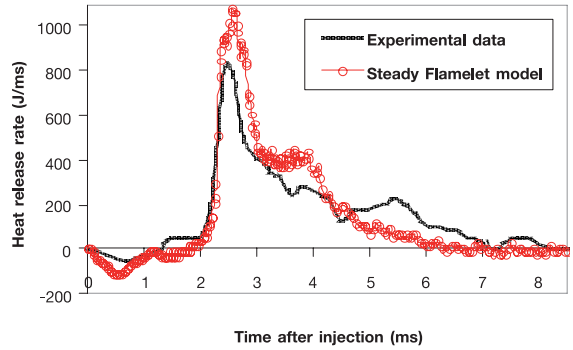
Time step (μs)	0.5
Inlet SMR (μm)	10
The smallest grid width (mm)	0.5
Cell grid (z×r cells)	109×73
Trap pressure (MPa)	2.7
Injection pressure (MPa)	80.0
Trap temperature (K)	830
Liquid temperature (K)	298
Injector radius (mm)	0.09
Injector duration (ms)	3.8



รูปที่ 5 ลักษณะของกริดที่ใช้ในปริมาตรควบคุม



รูปที่ 6 ค่า reaction progress variable และอัตราการเกิดปฏิกิริยา ณ ตำแหน่งจุดระเบิด



รูปที่ 7 อัตราการปลดปล่อยความร้อนจากการเผาไหม้

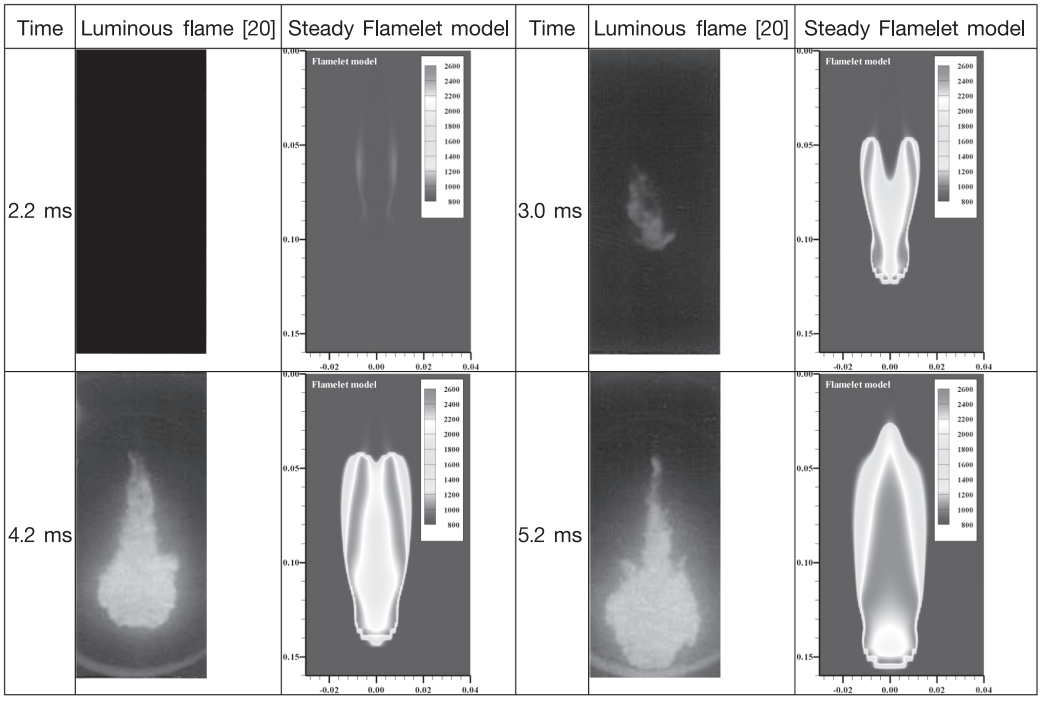
เมื่อพิจารณาตำแหน่งที่เกิดการจุดระเบิดเอง ซึ่งเกิดขึ้นที่เวลา 2.2 ms ที่ระยะ 62 mm ห่างจากหัวฉีด และอยู่เหนือจากเส้นศูนย์กลางเป็นระยะ 7.3 mm โดยเกิดขึ้นในบริเวณเปลือกของสเปร์ย ซึ่งเป็นบริเวณที่มีความเข้มข้น

ของส่วนผสมต่ำ (lean mixture) โดยผลดังกล่าว สอดคล้องกับผลการทดลองของ [21-24] และผลการจำลองของ [25, 26] ซึ่งเป็นไปได้ว่า ในบริเวณที่มีส่วนผสมบาง จะมีการระเหยของละอองฝอยต่ำ เนื่องจากมีปริมาณเชื้อเพลิงน้อย ทำให้อุณหภูมิสามารถเพิ่มขึ้นได้ง่ายกว่า นอกจากนี้ Laguitton และคณะ [27] ยังได้เสริมว่า สำหรับการฉีดน้ำมันที่มีความดันมากกว่า 100 MPa ตำแหน่งของการจุดระเบิดเองจะอยู่ในบริเวณหัวของสเปร์ย จากรูปที่ 6 ค่า $\widetilde{C}$ ซึ่งบ่งบอกถึงระดับการเผาไหม้ของสารตั้งต้น จะเริ่มเพิ่มขึ้นที่เวลา 1.6 ms ดังแสดงในรูปที่ 6 และจะเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วที่เวลา 2.3 ms จนกระทั่งมีค่าเข้าใกล้ 1 นั่นหมายความว่า การเผาไหม้เปลี่ยนจากแบบ premixed มาเป็น non-premixed เกือบทั้งหมด ซึ่งสอดคล้องกับอัตราการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งเป็น source term ของ $\widetilde{C}$ กล่าวคือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะเกิดขึ้นอย่างรวดเร็วที่เวลา 2.3 ms เนื่องจากเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น จะส่งผลให้ปฏิกิริยาเคมีเกิดเร็วขึ้น หลังจากนั้น อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะลดลงทันที เนื่องจากสารตั้งต้นผสมกันไม่ทันต่อการเกิดปฏิกิริยาเคมี ทำให้อัตราการเผาไหม้ถูกควบคุมด้วยอัตราการผสมกันของสารตั้งต้นแทน

จากรูปที่ 7 จะเห็นว่า จากการทำนายของแบบจำลองในช่วงแรก อัตราการปลดปล่อยความร้อนจะมีค่าลดลงต่ำกว่าศูนย์ เนื่องจากละอองฝอยของสเปร์ยรับความร้อนจากอากาศร้อนในห้องเผาไหม้ ทำให้เกิดการระเหยของละอองฝอยขึ้น ส่งผลให้ค่าสัดส่วนของผสมสูงมากขึ้นและอุณหภูมิลดต่ำลงในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งช่วงเวลานี้เรียกว่าช่วงการให้ความร้อน (heating up period) แต่ผลการทดลองจะให้ค่าที่ติดลบน้อยกว่า เนื่องจากเชื้อเพลิงที่ใช้ในแบบจำลองคือ n-heptane ซึ่งระเหยได้ง่ายกว่าน้ำมันดีเซล หลังจากนั้น เมื่อไอเชื้อเพลิงมีปริมาณมากขึ้น อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีก็จะเพิ่มสูงขึ้น ส่งผลให้ก๊าซมีอุณหภูมิสูงขึ้นตาม จนในที่สุด เกิดการจุดระเบิดเองขึ้น ก่อนนำไปสู่การเผาไหม้หลัก โดยในช่วงเริ่มต้นของการเผาไหม้หลัก จะมีอัตราการปลดปล่อยความร้อนสูงมาก เนื่องจากมีปริมาณอากาศและไอเชื้อเพลิงมาก ซึ่งได้รับการผสมกันอย่างดี พร้อมที่จะลุกไหม้เมื่ออุณหภูมิสูงพอ แต่ค่าสูงสุดที่ได้จากแบบจำลองจะทำนายค่าสูงกว่าผลการทดลองค่อนข้างมาก เมื่อปริมาณของผสมส่วนใหญ่ของสเปร์ยถูกเผาไหม้ จึงทำให้อัตราการปลดปล่อยความร้อนลดต่ำลงอย่างมาก เนื่องจากการเผาไหม้จะต้องอาศัยการแพร่ของออกซิเจนผ่านกลุ่มก้อนก๊าซผลิตภัณฑ์ เพื่อเข้ามาผสมกับไอเชื้อเพลิงที่เหลืออยู่ภายในสเปร์ย ซึ่งช่วงนี้จะเป็นการเผาไหม้แบบ non-premixed ดังนั้นอัตราการปลดปล่อยพลังงานที่ช่วงเวลาประมาณ 3-4 ms จึงมีค่าค่อนข้างคงที่และใกล้เคียงกับผลการทดลอง โดยปฏิกิริยาการเผาไหม้ส่วนใหญ่จะเกิดขึ้นในบริเวณใกล้หัวฉีด ซึ่งเป็นรอยต่อระหว่างบริเวณไม่เกิดปฏิกิริยา (non-reactive region) และบริเวณเกิดปฏิกิริยา(reactive region) เนื่องจากออกซิเจนจะถูกดึงดูดเข้ามาในลำตัวของสเปร์ยทางด้านนี้มากที่สุด โดยระยะห่างระหว่างหัวฉีดและรอยต่อนี้จะเรียกว่า ระยะเปลวลอยตัว (lift-off length) และเปลวไฟที่เกิดขึ้นบริเวณรอยต่อนี้เป็นแบบ premixed โดยที่เวลา 3.8 ms จะเป็นการสิ้นสุดของการฉีดน้ำมันเชื้อเพลิงเข้าไปในห้องเผาไหม้ ดังนั้นอัตราการปลดปล่อยพลังงาน จึงลดลงอย่าง exponential จนกระทั่งสิ้นสุดกระบวนการเผาไหม้ แต่ในการทดลอง เปลวไฟจะกระทบผนังของห้องเผาไหม้ที่เวลา 5.2 ms ดังนั้นช่วงเวลาหลังจากนั้น จึงไม่มีนัยสำคัญในการเปรียบเทียบ

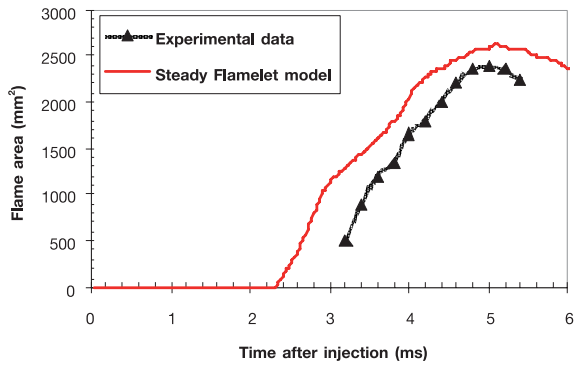
จากรายงานของ Akiyama และคณะ [20] ว่า เวลาหน่วงการจุดระเบิดเองที่ได้จากการทดลองซึ่งนิยามว่า ณ ช่วงเวลาที่ความดันของห้องเผาไหม้เริ่มสูงขึ้นมีค่าประมาณ 1.4 ms แต่อย่างไรก็ตามประกายไฟแรกที่ปรากฏในภาพถ่ายจะเริ่มที่เวลา 2.8 ms เมื่อนำผลจากแบบจำลองที่พัฒนาขึ้นมาเปรียบเทียบดังแสดงในรูปที่ 7 พบว่า ที่เวลา 3.0 ms อุณหภูมิเปลวที่คำนวณได้จากแบบจำลองต่างๆ จะมีค่าสูงกว่าผลการทดลอง ทั้งนี้เนื่องมาจาก การปรากฏของเปลวที่ล่าช้าจากการทดลองทำให้การพัฒนาตัวของเปลวช้ากว่า แต่เป็นที่น่าสังเกตว่า ในการทดลอง จะใช้การเปลี่ยนแปลงของความดันมาคำนวณหาอัตราการปลดปล่อยพลังงาน ซึ่งจะให้อัตราการปลดปล่อยพลังงานสูงสุดที่เวลาประมาณ 2.5 ms ดังแสดงในรูปที่ 7 โดยความดันที่เพิ่มขึ้น เกิดขึ้นเนื่องจากอุณหภูมิที่สูงขึ้น แต่ทำไมภาพถ่ายจึงไม่ปรากฏ ขนาดเปลวไฟที่ใหญ่เท่าที่ควร สำหรับระยะเปลวลอยตัวที่ได้จากแบบจำลองซึ่งในที่นี้กำหนดที่อุณหภูมิเท่ากับ 2200 K ตามอ้างอิงใน [26, 28] มีค่าประมาณ 47 mm เนื่องจากภาพถ่ายจาก

การทดลองที่เวลา 3.0 ms ไม่ชัดเจน ทำให้ไม่สามารถระบุระยะดังกล่าวได้ ดังนั้นจึงต้องอาศัยสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [29, 30] ใช้ในการทำนายระยะเปลวลอยตัว ซึ่งให้ค่าออกมาประมาณ 40-55 mm ซึ่งสอดคล้องกับผลการทำนายของแบบจำลองที่พัฒนาขึ้น ต่อมาที่เวลา 4.2 เปลวไฟที่ได้จากแบบจำลองจะมีความยาวของเปลวที่ใกล้เคียงกับภาพถ่าย แต่ขนาดความกว้างของเปลวที่ได้จากแบบจำลองจะเล็กกว่า ก่อนที่เปลวไฟจะกระทบกับผนังของห้องเผาไหม้ ที่เวลา 5.2 ms รูปร่างของเปลวไฟที่ได้จากแบบจำลองจะใกล้เคียงกับภาพถ่าย ยกเว้นขนาดที่ยังคงเล็กกว่า



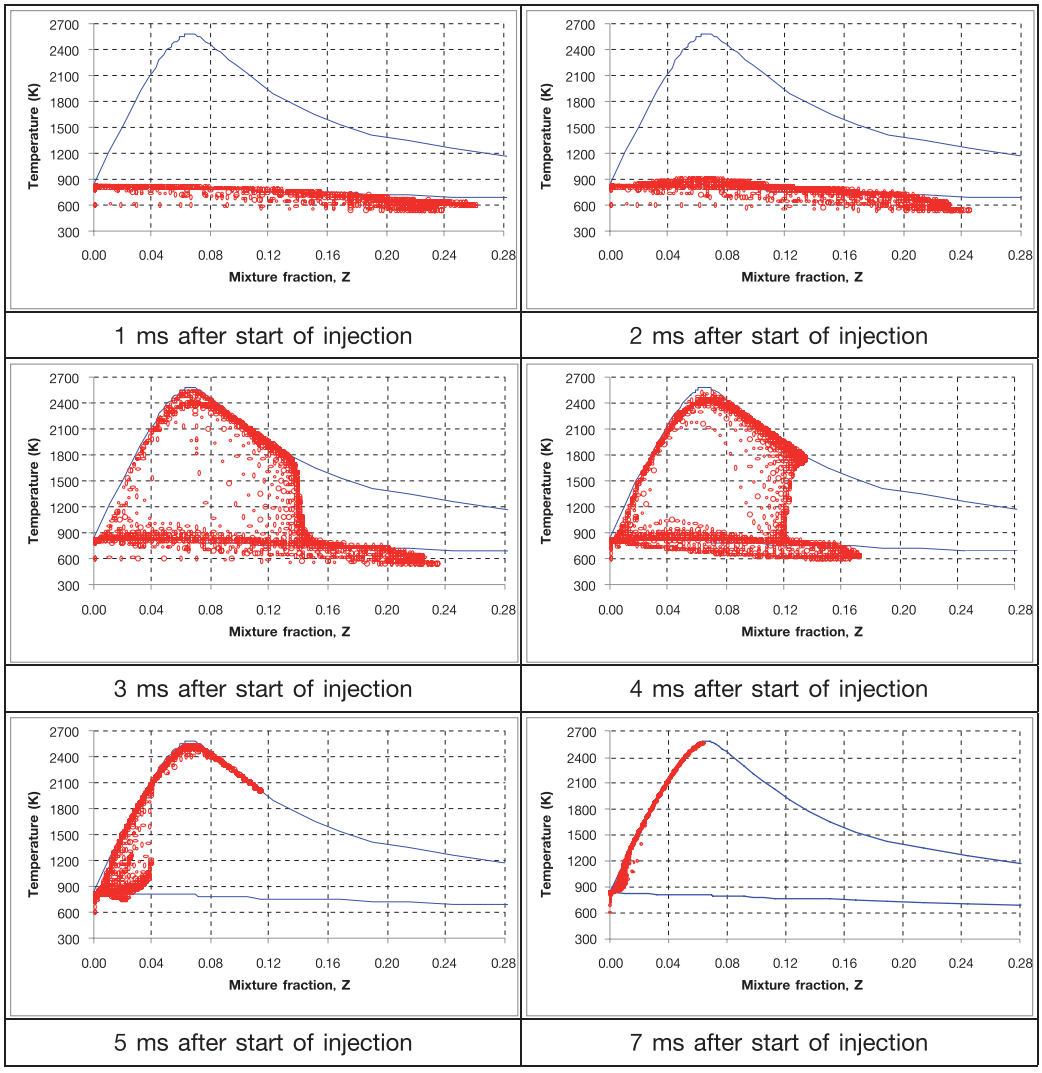
รูปที่ 8 ภาพถ่ายเปลวไฟจากการทดลองเปรียบเทียบกับผลการทำนายอุณหภูมิเปลว

นอกจากนี้ การพัฒนาตัวของเปลวสามารถเปรียบเทียบได้ในเชิงของพื้นที่เปลวดังแสดงในรูปที่ 9 จะเห็นได้ว่า เปลวที่ทำนายได้จะเกิดขึ้นก่อนการปรากฏของเปลวจากการทดลองประมาณ 0.6 ms ซึ่งการปรากฏของเปลวที่ล่าช้าในการทดลอง เป็นประเด็นหนึ่งที่ขัดแย้งกับความดันที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากอุณหภูมิที่สูงขึ้น แต่อย่างไรก็ตาม ลักษณะของกราฟที่ได้จากการทดลองและจากแบบจำลองจะมีลักษณะที่คล้ายกัน ต่างกันเพียงเวลาที่เลื่อนไป โดยพื้นที่เปลวสูงสุดที่คำนวณได้จากแบบจำลองจะมีค่ามากกว่าผลการทดลองเพียงประมาณ 8%



รูปที่ 9 การเปลี่ยนแปลงของพื้นที่ของเปลวไฟจากการเผาไหม้

อุณหภูมิของเซลล์ต่างๆ ภายในสเปร์ยมีลักษณะการกระจายตามค่าสัดส่วนของผสม ดังแสดงในรูปที่ 10 โดยในช่วง 2 ms แรก ซึ่งเป็นช่วงการให้ความร้อน อุณหภูมิของเซลล์ทั้งหมดจะอยู่ในบริเวณเส้นการผสมกัน (mixing line) โดยอุณหภูมิของเซลล์บางส่วน จะมีค่าต่ำกว่าอุณหภูมิผสมกัน เนื่องมาจากได้รับอิทธิพลจากการระเหยของละอองฝอย เป็นที่น่าสังเกตว่า ที่เวลา 2 ms อุณหภูมิของเซลล์ที่มีค่าสัดส่วนของผสมใกล้เคียงกับค่าสัดส่วน stoichiometric จะให้อุณหภูมิที่เพิ่มขึ้น จนกระทั่งเกิดการจุดระเบิดเองที่เวลาประมาณ 2.2 ms หลังจากที่มีการติดไฟแล้ว อุณหภูมิของเซลล์ที่ติดไฟจะอยู่ในใกล้เส้นสภาวะสมดุล (equilibrium line) ส่วนอุณหภูมิที่อยู่ระหว่างเส้นทั้งสองคือ เซลล์ที่มีการเผาไหม้บางส่วน แต่ที่น่าสนใจคือ บริเวณที่มีค่าสัดส่วนของผสมมากกว่า 0.14 จะไม่เกิดปฏิกิริยาเลย ซึ่งอุณหภูมิของเซลล์ดังกล่าวนี้ จะอยู่บริเวณใกล้หัวฉีด เมื่อสิ้นสุดกระบวนการฉีดน้ำมันที่เวลา 3.8 ms ค่าสัดส่วนของผสมที่เซลล์ต่างๆ ก็จะลดต่ำลง เซลล์ต่างๆ ก็จะมีอุณหภูมิเข้าใกล้อุณหภูมิที่สภาวะสมดุลเพิ่มมากขึ้น จนในที่สุด อุณหภูมิของทุกเซลล์จะวางตัวบนเส้นสภาวะสมดุล



รูปที่ 10 การกระจายตัวของอุณหภูมิที่ค่าสัดส่วนของผสมต่างๆ ในระหว่างการเผาไหม้ที่ทำนายได้เทียบกับเส้นสมดุล

6. สรุป

ในงานวิจัยนี้ ได้มุ่งเน้นศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการเผาไหม้ของสเปร์ยสำหรับประยุกต์ใช้ในเครื่องยนต์ดีเซล โดยใช้แบบจำลองสเปร์ยของ Beck [4] ซึ่งอาศัยหลักการสถิติของโมเมนต์ของการกระจายตัวของจำนวนละอองสเปร์ยขนาดต่างๆ ส่วนแบบจำลองการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้จะถูกพัฒนาขึ้นมา ซึ่งจะใช้แบบจำลอง Steady Laminar Flamelet ซึ่งมีความแม่นยำสูง และใช้เวลาในการคำนวณที่ไม่มาก เนื่องจากข้อมูลของค่าเฉลี่ยของตัวแปรเคมีเชิงความร้อนจะถูกคำนวณไว้ล่วงหน้าและถูกเก็บไว้ใน Flamelet library แต่เนื่องจากแบบจำลองนี้ ไม่สามารถใช้คำนวณการจุดระเบิดเองหรือการดับลงของเปลวได้ ดังนั้นจึงอาศัย reaction progress variable มาใช้ร่วมในการคำนวณ ซึ่งผลที่ได้จากการคำนวณเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Akiyama และคณะ [20] แล้วพบว่า สามารถทำนายการจุดระเบิดเองและการเผาไหม้ได้เป็นที่น่าพึงพอใจ โดยรูปร่างของเปลวไฟที่ทำนายได้จะใกล้เคียงกับผลการทดลอง เพียงแต่ขนาดของเปลวที่เล็กกว่า ส่วนระยะเปลวลอยตัวที่ทำนายได้จากแบบจำลองนี้ ก็สอดคล้องกับผลการทดลองและสหสัมพันธ์ของ Siebers และคณะ [29, 30]

7. กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบคุณ คณะกรรมการส่งเสริมงานวิจัย มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ที่สนับสนุนทุนในการทำวิจัยครั้งนี้ จากเงินกองทุนวิจัยมหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ ประจำปี 2554

8. เอกสารอ้างอิง

1. Heywood, J.B., *Internal Combustion Engine Fundamentals*1988, New York: McGraw-Hill International.

2. Tang, Q., Zhao, W., Bockelie, M., and Fox, R.O., 2007, "*Multi-Environment Probability Density Function Method for Modelling Turbulent Combustion using Realistic Chemical Kinetics*", Combustion Theory and Modelling, Vol. 11, pp. 889–907.

3. Kuan, T.S. and Lindstedt, R.P., 2005, "*Transported Probability Density Function Modeling of a Bluff Body Stabilized Turbulent Flame*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, pp. 767–774.

4. Beck, J.C., 2000, Computational Modelling of Polydisperse Sprays without Segregation into Droplet Size Classes, Ph.D. Thesis, UMIST, Manchester.

5. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2002, "*On the Development of Spray Sub-Models Based on Droplet Size Moments*", Journal of Computational Physics, Vol. 182, pp. 586-621.

6. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*The Simulation of Water and Other Non-Fuel Sprays using a New Spray Model*", Atomization and Sprays, Vol. 13, pp. 1-26.

7. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*On the Development of a Spray Model Based on Drop-Size Moments*", Proceedings of the Royal Society of London - Series A, Vol. pp. 1365-1394.

8. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2003, "*The Droplet Number Moments Approach to Spray Modelling: The Development of Heat and Mass Transfer Sub-Models*", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 2, pp. 242-259.

9. Beck, J.C. and Watkins, A.P., 2004, "*The Simulation of Fuel Sprays using the Moments of the Drop Number Size Distribution*", International Journal of Engine Research, Vol. 5, pp. 1-21.

10. Watkins, A.P., 2007, "*Modelling of Mean Temperatures Used for Calculating Heat and Mass Transfer in Sprays*", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 28, pp. 388-406.

11. Dhuchakallaya, I. and Watkins, A.P., 2010, "*Application of spray combustion simulation in DI diesel engine*", Applied Energy, Vol. 87, pp. 1427-1432.

12. Peters, N., 1984, "*Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Combustion*", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, pp. 319-339.

13. Kim, J.S. and Williams, A., 1993, "*Structures of Flow and Mixture Fraction Fields for Counter-flow Diffusion Flames with Small Stoichiometric Mixture Fractions*", SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 53, pp. 1551-1566.

14. Pitsch, H., Chen, M., and Peters, N., 1998, "*Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen/Air Diffusion Flames*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 27, pp. 1057-1064.

15. Bilger, R.W., Stårner, S.H., and Kee, R.J., 1990, "*On Reduced Mechanisms for Methane---air Combustion in Nonpremixed Flames*", Combustion and Flame, Vol. 80, pp. 135-149.

16. Pitsch, H., Barths, H., and Peters, N., *Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach, in SAE Technical Paper Series* No. 9620571996.

17. Liu, S., Hewson, J.C., Chen, J.H., and Pitsch, H., 2004, "*Effects of Strain Rate on High-Pressure Nonpremixed n-Heptane Autoignition in Counterflow*", Combustion and Flame, Vol. 137, pp. 320-339.

18. Pires da Cruz, A., Baritaud, T.A., and Poinsot, T.J., 2001, "*Self-Ignition and Combustion Modeling of Initially Nonpremixed Turbulent Systems*", Combustion and Flame, Vol. 124, pp. 65-81.

19. Issa, R.I., 1986, "*Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting*", Journal of Computational Physics, Vol. 62, pp. 40-65.

20. Akiyama, H., Nishimura, H., Ibaraki, Y., and Iida, N., 1998, "*Study of Diesel Spray Combustion and Ignition using High-Pressure Fuel Injection and a Micro-Hole Nozzle with a Rapid Compression Machine: Improvement of Combustion using Low Cetane Number Fuel*", Society of Automotive Engineers of Japan, Vol. 19, pp. 319-327.

21. Crua, C., 2002, Combustion Processes in a Diesel Engine, Ph.D. Thesis, University of Brighton, Brighton.

22. Bruneaux, G., Augé, M., and Lemenand, C. *A Study of Combustion Structure in High Pressure Single Hole Common Rail Direct Diesel Injection Using Laser Induced Fluorescence of Radicals. in The Sixth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines, COMODIA 2004*. 2004. Yokohama, Japan.

23. Ganippa, L.C., Andersson, S., and Chomiak, J., 2003, "*Combustion Characteristics of Diesel Sprays from Equivalent Nozzles with Sharp and Rounded Inlet Geometries*", Combustion Science and Technology, Vol. 175, pp. 1015-1032.

24. Larsson, A., *Optical Studies in a DI Diesel Engine, in SAE Technical Paper Series No. 1999-01-3650*1999.

25. Chomiak, J. and Karlsson, A. *Flame Lift-off in Diesel Sprays. in The 26th International Symposium on Combustion*. 1996. Pittsburgh.

26. Tap, F.A. and Veynante, D., 2005, "*Simulation of Flame Lift-off on a Diesel Jet using a Generalized Flame Surface Density Modeling Approach*", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30, pp. 919-926.

27. Laguitton, O., Gold, M.R., Kennaird, D.A., Crua, C., Lacoste, J., and Heikal, M.R. *Spray Development and Combustion Characteristics for*

Common Rail Diesel Injection Systems. in IMechE Conference on Fuel Injection Systems. 2002. London, UK.

28. Senecal, P.K., Pomraning, E., Richards, K.J., Briggs, T.E., Choi, C.Y., McDavid, R.M., and Patterson, M.A., *Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off using CFD and Parallel Detailed Chemistry, in SAE Technical Paper Series No. 2003-01-1043*2003.

29. Siebers, D.L. and Higgins, B.S., *Flame Lift-off on Direct-Injection Diesel Sprays under Quiescent Conditions, in SAE Technical Paper Series No. 2001-01-0530*2001.

30. Siebers, D.L., Higgins, B.S., and Pickett, L.M., *Flame Lift-off on Direct Injection Diesel Fuel Jets: Oxygen Concentration Effects, in SAE Technical Paper Series No. 2002-01-0890*2002.