

УДК 534.222.2

Численное моделирование горения в трехмерных каналах

И.С. Яковенко

Студент, кафедра «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

Научный руководитель: Иванов М.Ф., д. ф-м. наук, профессор кафедры «Физика»

МГТУ им. Н.Э. Баумана

МГТУ им. Н.Э. Баумана

yakovenko.ivan@bk.ru

Введение.

Явление горения находит применение во многих отраслях промышленности и энергетики. Энергия, высвобождающаяся при горении водородных смесей в каналах, используется в перспективных устройствах водородных двигателей внутреннего сгорания. В тоже время горение в ограниченных объемах приводит к детонационным режимам и часто носит разрушительный характер, что необходимо учитывать при транспортировке и хранении топлива, при обеспечении безопасности на производстве и в горном деле. Горение является сложным нестационарным быстропротекающим процессом.

На сегодняшний день наиболее эффективным методом исследования процессов горения является численное моделирование в совокупности с натурными экспериментами. Горение сопровождается множеством процессов на различных масштабах, что значительно осложняет численное моделирование горения и накладывает жесткие требования к разрешению используемых расчетных сеток.

Нетрудно показать, что трехмерное численное моделирование горения возможно только на современных вычислительных комплексах, совмещающих как высокую мощность, так и большие объемы памяти, необходимые для расчетов на сетках очень высокого разрешения с приемлемым временем счета. Действительно, рассмотрим достаточно типичную задачу распространения пламени в трехмерном пространстве

1x1x1 м. Известно, что ширина фронта пламени в водород-кислородной смеси составляет 0.3 мм при атмосферном давлении. Тесты сходимости показывают [1], что для качественного моделирования горения необходимо разрешение, при котором на ширину фронта пламени приходится порядка 20 расчетных ячеек, что дает размер расчетной ячейки равный 0.015 мм. При таком размере расчетной ячейки расчетная сетка будет состоять из 10^{14} расчетных ячеек. Для решения задач на расчетных сетках с таким огромным числом ячеек необходимо эффективное использование мощных вычислительных систем, что невозможно без применения методов распараллеливания и оптимизации программ-решателей математической модели процесса.

Математическая модель горения.

В данной работе рассматривается моделирование горения стехиометрической водород-кислородной смеси в полуоткрытом канале квадратного сечения. В качестве математической модели была использована система уравнений Навье-Стокса для вязкого сжимаемого теплопроводного газа с учетом энергосвечения и многокомпонентной диффузии [1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (c_i)}{\partial t} + u_j \frac{\partial c_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i(T) \frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right) \right] + \left(\frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_{chem} \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j E)}{\partial x_j} = & \frac{\partial (\sigma_{jk} u_k)}{\partial x_j} - \frac{\partial (p u_j)}{\partial x_j} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \sum_k h_k \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \cdot D_k(T) \frac{\partial c_k}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

$$p = RTn = \left(\sum_i \frac{R}{m_i} c_i \right) \rho T = \rho T \sum_i R_i c_i \quad (5)$$

$$\varepsilon = c_v T + \sum_k h_k c_k \quad (6)$$

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \quad (7)$$

Здесь ρ - плотность; p - давление, u_i - компоненты вектора скорости; $c_i = \rho_i / \rho$ - массовые концентрации отдельных компонент, участвующих в реакции; $E = \varepsilon + (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) / 2$ - плотность полной энергии смеси; ε - плотность внутренней энергии, R - универсальная газовая постоянная $R_i = R / m_i$, m_i - масса моля i -й компоненты, n - молярная плотность смеси; σ_{ij} - компоненты тензора вязких напряжений; $c_V = \sum_i c_{Vi} c_i$ - удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме, h_i - удельная энтальпия образования i -й компоненты, $\kappa(T)$, $\mu(T)$ - коэффициенты теплопроводности и вязкости смеси соответственно; $D_i(T)$ - коэффициент диффузии i -й компоненты в многокомпонентной среде, $(\partial c_i / \partial t)_{chem}$ - изменение концентрации i -й компоненты за счет химических превращений.

Уравнения газовой динамики (1)-(7) были дополнены детальной химической кинетикой горения водород-кислородной смеси. Уравнения состояния и кинетические коэффициенты рассчитываются для многокомпонентной смеси в соответствии с табличными данными [2].

Для решения системы уравнений математической модели (1)-(7) был использован эйлерово-лагранжев метод “крупных частиц” [3]. Метод крупных частиц хорошо зарекомендовал себя для решения задач горения, в частности для исследования возникновения стука в цилиндре свечного двигателя внутреннего сгорания [4,5].

Реализация численного метода на языке программирования FORTRAN 95.

Эйлерово-Лагранжев метод “крупных частиц” был реализован в виде программы-решателя на языке FORTRAN 95. Для выполнения высокопроизводительных расчетов код программы-решателя был распараллелен в соответствии со стандартами интерфейса передачи сообщений OpenMPI для кластерных систем. Для распараллеливания был использован метод декомпозиции расчетной области. В соответствии с этим методом расчетная область делится на подобласти по числу задействованных процессов. В зависимости от шаблона численного метода разбиение производится с перекрытием из так называемых буферных ячеек, так чтобы для каждого процесса подобласть расчетной

<http://sntbul.bmstu.ru/doc/560457.html>

области содержала всю информацию необходимую для обособленного счета. После каждого шага расчета по методу “крупных частиц” осуществляется обмен между процессорами информацией полученной при расчете в буферных ячейках.

Для расчетов были использованы два метода декомпозиции. Первый метод осуществлял декомпозицию по числу процессоров в одном направлении, схематическое изображение декомпозиции представлено на рис.1.

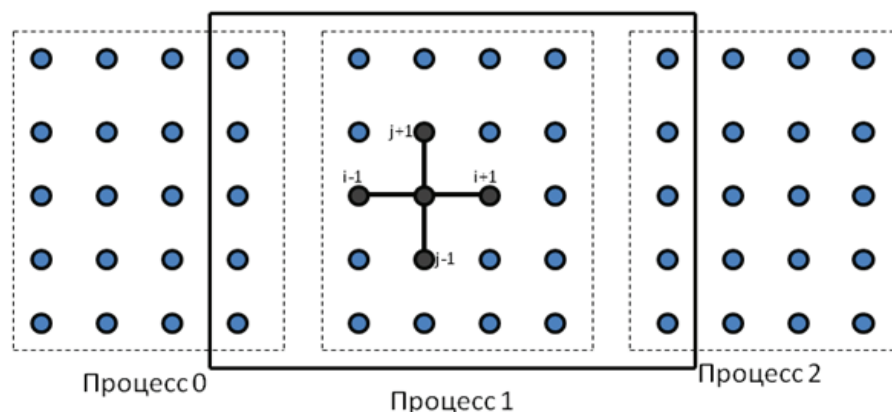


Рис.1. Декомпозиция расчетной области по одному направлению.

Вторым методом декомпозиции была двумерная декомпозиция расчетной области. Для эффективного двумерного разбиения расчетной области по числу процессоров необходимо наиболее оптимально подобрать соотношение между числом процессоров по осям. Одним из способов подбора оптимального соотношения является минимизация информации при межпроцессорных обменах или, что то же самое, минимизация количества буферных ячеек. Число буферных ячеек выражается через число ячеек N_i , N_j и число процессоров P_i , P_j вдоль осей i и j следующей зависимостью [6]:

$$N_{buf} = (N_j - 2) \cdot P_i + (N_i - 2) \cdot P_j$$

Эффективность методов декомпозиции была протестирована на задаче о распространении пламени в полуоткрытом канале квадратного сечения. Инициация пламени в канале, заполненном стехиометрической водород-кислородной смесью при атмосферном давлении и температуре 300 К, осуществлялась у закрытого торца канала плоским слоем смеси подогретой до температуры 3000 К. После воспламенения пламя распространяется от закрытого торца канала к открытому. Расчетная область в канале состояла из 500 ячеек по оси x и по 50 ячеек по осям y и z , общее количество ячеек 1.25 млн. , размер кубической расчетной ячейки составлял 50 мкм. Тест был выполнен на кластере Т-Платформы TEdge-48 установленном в ОИВТ РАН.
Молодежный научно-технический вестник ФС77-51038

Для оценки эффективности код программы был разделен на блоки, при этом можно выделить три основные группы блоков программы: чистый счет на каждом процессоре, межпроцессорный обмен информацией и дополнительные расходы, связанные с вычислением значения временного шага по критерию Куранта и с наблюдением значений параметров потока на фронте пламени. По ходу выполнения программы производилась оценка времени выполнения различных блоков на различных процессорах. На Рис. 2 представлены графики зависимости величины $1/T$, где T – полное время счета 1000 временных шагов, от количества процессоров для двумерной и одномерной декомпозиций расчетной области.

Благодаря тому, что для тестирования использовалось небольшое число ячеек, разница между двумерным и одномерным способами декомпозиции становится заметна уже при небольшом числе процессоров. В результате минимизации количества буферных ячеек для двумерной декомпозиции при общем числе 16 процессоров разбиение расчетной области для двумерной и одномерной декомпозициях одинаково, но уже при 32 процессорах алгоритм минимизации дает минимум количества буферных ячеек при разбиении на 16 процессоров по оси x и 2 процессора по оси y . Как видно из графика (см. рис. 2) двумерная декомпозиция эффективнее одномерной и сокращает время счета приблизительно в 1.5 раза. Из-за небольшого количества ячеек скорость счета при двумерном разбиении расчетной области не возрастает относительно одномерного и находится на уровне ускорения в 1.5 раза для всего диапазона задействованных процессоров.

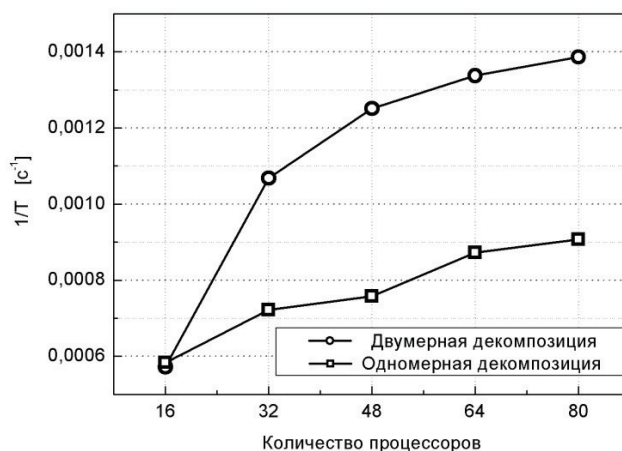


Рис. 2. Зависимость величины обратной времени расчета 1000 временных шагов от числа процессоров для кластера TEdge-48.

Второй тест был проведен на кластере Международного Вычислительного Центра МВС-1000/М. Данный кластер обладает лучшими характеристиками производительности и большим количеством доступных вычислительных узлов по сравнению с кластером Т-Платформы TEdge-48 ОИВТ РАН. Для второго теста был задействован диапазон количества процессоров, начиная от 64 и заканчивая 256. Расчетная область также была увеличена и составляла 1000 расчетных ячеек по оси x , 100 по оси y и 50 по оси z , общее число ячеек 5 млн. Результаты тестирования приведены на рис. 3.

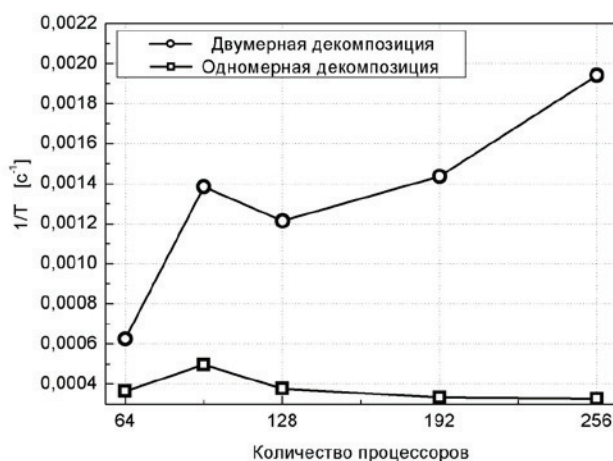


Рис. 3. Зависимость величины обратной времени расчета 1000 временных шагов от числа процессоров для кластера МВС-1000/М на расчетной сетке.

Как видно из графиков (см. рис. 3) расчет по одномерному методу декомпозиции практически не дает прироста к скорости расчета, более того, при числе процессоров, превышающем 128, скорость счета уменьшается, что связано с ростом временных расходов на межпроцессорный обмен. Двумерная декомпозиция показывает практически линейный рост ускорения счета с увеличением числа процессоров. Ускорение относительно одномерного метода растет и для 256 процессоров расчет по двумерному методу декомпозиции проходит в 6 раз быстрее по сравнению с одномерным методом.

Влияние геометрии канала на структуру фронта пламени.

Разработанный программный комплекс был использован для моделирования динамики распространения пламени в трехмерном канале квадратного сечения. На рис. 4 изображены конфигурации фронта пламени, которые наблюдались в канале в зависимости от формы начальных возмущений.

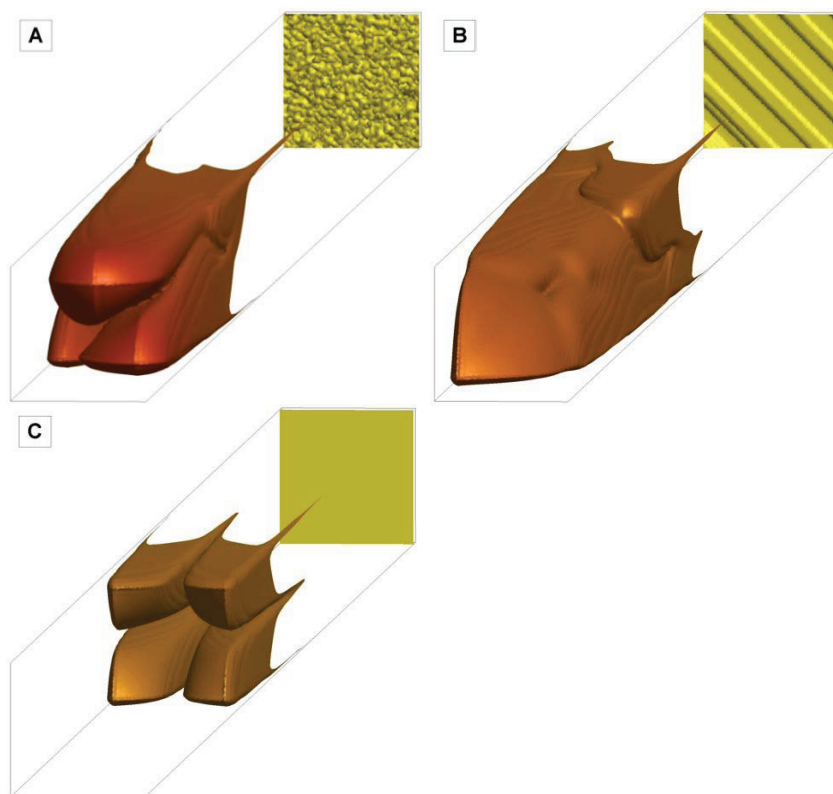


Рис.4. Структура фронта пламени в зависимости от начальных возмущений.

В случае случайной ширины нагретой области (рис. 4а), возмущения в начальных условиях растут на протяжении всего процесса распространения пламени, при этом геометрическая конфигурация канала не оказывает существенного влияния на структуру фронта пламени. При регулярных возмущениях начальных условий (рис. 4б) фронт пламени вытягивается по одному из ребер канала. Воспламенение плоским слоем нагретой смеси (рис. 4в) приводит к формированию тюльпанообразной формы пламени, что объясняется влиянием геометрии канала на структуру фронта пламени. Из описанных наблюдений можно заключить, что пламя модулируется геометрией канала, но влияние геометрии канала слабее роста гидродинамической неустойчивости на фронте пламени развивающейся при расширении продуктов горения на начальной стадии распространения пламени.

Заключение

Программный комплекс для моделирования сложных газодинамических течений реализованный на языке программирования FORTRAN 95 был распараллелен в соответствии со стандартом интерфейса передачи сообщений OpenMPI. Для распараллеливания были использованы одномерная и двумерная схемы декомпозиции

расчетной области. По результатам тестирования двумерная схема обладает лучшей эффективностью и может быть использована для решения задач горения с высоким разрешением.

С помощью созданного программного комплекса было проведено моделирование горения стехиометрической водород-кислородной смеси в полуоткрытых каналах. Результаты моделирования позволяют выявить влияние геометрической конфигурации канала на динамику распространения пламени в канале. В частности анализ результатов показывает, что геометрия канала модулирует возмущения на фронте пламени, что объясняет возникновение тюльпанообразного пламени в полуоткрытом канале.

Список литературы

1. Ivanov M. F., Kiverin A. D., Liberman M. A., Hydrogen-oxygen flame acceleration and transition to detonation in channels with no-slip walls for a detailed chemical reaction model.// Phys. Rev. E83, №5, 056313 (2011).
2. Heywood J.B. Internal Combustion Engine Fundamentals. Mc.Graw-Hill, New York. 1988.
3. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент. М.: Наука, 1982.
4. Liberman M.A., Ivanov M.F., Valiev D.M., Eriksson L.-E. Hot spot formation by the propagating flame and the influence of EGR on knock occurrence in SI engines.// Combust. Sci. and Tech. 2006. V. 178. №9. pp. 1613-1647.
5. Liberman M.A., Ivanov M.F., Peil O.E., Valiev D.M., Eriksson L.-E. Numerical modeling of a propagating flame and knock occurrence in spark-ignition engines.// Combust. Sci. and Tech. 2005. V. 177. №1. pp. 151-182.
6. Myklebust E., Parallelization of a combustion code, Master's Thesis, Uppsala University, Sweden, July 2004.