

РАСЧЁТЫ ТУРБУЛЕНТНОГО ДИФфуЗИОННОГО ГОРЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

А.С. Фролов, А.Ю. Снегирёв

ВВЕДЕНИЕ

Для турбулентного горения газовых топлив характерно тесное взаимодействие физико-химических процессов, среди которых основными являются турбулентность, химические реакции и лучистый теплообмен. В связи с этим, численное моделирование турбулентного горения (Computational Combustion) оформилось как чрезвычайно сложное научное направление вычислительной гидродинамики (Computational Fluid Dynamics, CFD). Это наиболее информативный подход, позволяющий выполнить количественные расчёты полей скорости, температуры, концентраций основных компонентов, тепловых потоков и других физических величин.

К настоящему моменту разработаны разнообразные математические модели для расчёта турбулентных течений, турбулентного горения и переноса теплового излучения. Более того, созданы мощные вычислительные программные комплексы (Ansys Fluent, Ansys CFX и другие), в которых реализованы указанные математические модели. Наконец, возможность распараллеливания вычислений и быстрое развитие высокопроизводительных вычислительных систем позволяет эффективно производить детальные расчёты на сетках большой размерности.

Наиболее важным вопросом является достоверность результатов расчётов и их соответствие экспериментальным данным. Таким образом, внимание данной работы сфокусировано на способности современных пакетов выполнять расчёт турбулентных пламён с требуемой точностью.

Для достижения этой цели предлагается рассмотреть модельную задачу – хорошо документированное струйное диффузионное пламя, для которого имеются достоверные и детальные результаты измерений основных физических величин. Сравнение с результатами измерений позволяет выявить модели турбулентности и горения, как рекомендуемые, так и полностью неприемлемые для данного класса задач. В качестве вычислительного инструмента в данной работе используется Ansys Fluent 6.3.26.

МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ, ГОРЕНИЯ И ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В основе модели находится осреднённая (при использовании моделей осреднения по Рейнольдсу-Фавру – RANS) или отфильтрованная (при использовании метода крупных вихрей – LES) система уравнений Навье-Стокса для многокомпонентной реагирующей среды. К замыкающим систему уравнениям относятся уравнение состояния, а также уравнения, определяющие скорость химических реакций и перенос теплового излучения. В группу RANS попали все имеющиеся в текущей версии Ansys Fluent 6.3.26 модели турбулентности (как модели на основе концепции турбулентной вязкости, так и модели переноса рейнольдсовых напряжений). В рамках метода LES использовали концепцию подсеточной вязкости по Смагоринскому. Расчёты выполнены в пределе малых чисел Маха с учётом подъёмной силы (плавучести).

Для моделирования диффузионного горения газов в турбулентном потоке было использовано два подхода. Первый, наиболее популярный в силу своей простоты и наглядности инженерный подход – модель дробления вихрей – предполагает зависимость средней скорости химической реакции от локальных характеристик турбулентности и не учитывает кинетику реакций. Предполагается, что турбулентность «медленно» смешивает реагенты, после чего они «очень быстро» реагируют.

Второй подход использует концепцию пассивного скаляра – переменной смешения, существование которого обусловлено законом сохранения массы элементов. Средние концентрации всех компонентов, средняя температура и плотность являются функциями среднего значения и переменной смешения и ее дисперсии, для определения которых решаются специальные уравнения переноса. Влияние турбулентных пульсаций учитывается путём осреднения по всем возможным значениям переменной смешения с использованием назначенной функции плотности вероятности (бета-функция). В рамках такого подхода информация о химическом механизме содержится в универсальных зависимостях концентраций компонентов от переменной смешения («флеймлетная» библиотека), а турбулентность – в форме функции плотности вероятности (ФПВ). В данной работе «флеймлетные» зависимости находились из условия химического равновесия.

Перенос энергии теплового излучения рассчитывали по методам дискретного переноса и дискретных ординат. Спектральные свойства смеси продуктов сгорания учитывали в рамках модели взвешенной суммы серых газов.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

В расчётах рассматривали лабораторное пламя Sandia Flame D, которое имеет следующие характеристики. Состав основной струи горючего: 25 % CH_4 , 75 % воздух, диаметр сопла 7.2 мм. Добавление окислителя в состав горючего предотвращает образование сажи. При сгорании смеси в спутном потоке воздуха (скорость спутного потока 1 м/с) формируется диффузионное пламя. Стабилизация пламени у среза сопла обеспечивается пилотным пламенем предварительно перемешанных реагентов (ацетилен–водород–воздух), подаваемых через внешний канал диаметром 18.2 мм. Состав реагентов в пилотном пламени подбирается так, чтобы равновесный состав продуктов совпадал с составом продуктов основного пламени (с учетом этого пилотное пламя моделируется в расчетах потоком горячих продуктов сгорания). Число Рейнольдса основного пламени равно $22.4 \cdot 10^3$. Экспериментальные данные получены из архива Sandia National Laboratories (Livermore, California) и Technical University of Darmstadt.

Выполнено сравнение расчётных и измеренных значений следующих параметров (средних значений и их среднеквадратичных отклонений): температура, скорость, массовые доли горючего, кислорода, водяного пара, углекислого газа и монооксида углерода. Рассматривались распределения по оси пламени и в радиальных сечениях.

Среди моделей горения наилучшее согласие с экспериментом показала модель на основе функции плотности вероятности для переменной смешения. В то же время, расчёт с моделью дробления вихрей привел к сильно укороченному пламени с значительно завышенной температурой. Среди RANS-моделей турбулентности наименьшее расхождение с экспериментом дала модель переноса рейнольдсовых напряжений с квадратичной корреляцией давления и деформации. Среди моделей на основе турбулентной вязкости хорошо себя проявили модели *k-ε Realizable* и *k-ω SST*.

Использование метода крупных вихрей привело к удовлетворительному согласию с экспериментальными данными, причём (как и в случае RANS) модель горения на основе ФПВ для переменной смешения представляется предпочтительной.

Таким образом, в ходе работы было произведено комплексное сравнение моделей турбулентности и горения в составе текущей версии Ansys Fluent 6.3.26 и выполнен анализ их применимости для численного моделирования струйного турбулентного диффузионного пламени. Кроме того, в ходе расчётов выполнен анализ эффективности работы двух многопроцессорных кластеров (48 и 256 ядер AMD Opteron) и двух операционных систем (Windows CCS и Linux SUSE) на данном классе задач.