



Instytut Techniki Ciepłej
Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki
Politechnika Śląska



Streszczenie rozprawy doktorskiej

Enhancement of Monte Carlo Technique in Absorbing/Emitting Radiating Media for CFD Applications

Usprawnienie metody Monte Carlo w ośrodkach emitująco-absorbujących w jej zastosowaniach w numerycznej mechanice płynów

Autor: mgr inż. Paweł Kuczyński

Promotor: prof. dr hab. inż. Ryszard Białycki

Promotor pomocniczy: dr hab. inż. Gabriel Węcel

Gliwice 2017

1. Wstęp

1.1. Motywacja

Modelowanie matematyczne jest szeroko stosowanym przez inżynierów oraz naukowców narzędziem pozwalającym na dogodne i efektywne rozwiązywanie problemów technicznych. Komercyjnie dostępne pakiety umożliwiają modelowanie sprzężonych zjawisk fizycznych, a ich symulacja pozwala inżynierom zgłębić tajniki procesu i uniknąć błędów. Wymienione powyżej czynniki w połączeniu z gwałtownym wzrostem mocy obliczeniowych komputerów spowodowały, że modelowanie matematyczne używane jest w pracach projektowych, dla celów optymalizacji eksploatacji obiektów inżynierskich, a także prowadzenia badań.

Pod koniec ubiegłego wieku na rynku pojawiły się wyspecjalizowane kody obliczeniowe, które następnie zostały połączone w poręczne pakiety CFD. Wskutek połączenia kodów z różnych dziedzin fizycznych poszerzono obszar zastosowania modelowania. W tamtym czasie główny nacisk położono na stabilność i wydajność obliczeniową. Pomimo znacznego rozwoju w obszarze sprzętu komputerowego, możliwości przyspieszenia symulacji poprzez zwiększanie taktowania zegara procesora są praktycznie wyczerpane. Pojawienie się na rynku procesorów wielordzeniowych oraz chmur połączonych ze sobą komputerów otworzyło drogę do dalszego przyspieszania obliczeń. Inną przełomową technologią, wykorzystującą zrównoleglanie obliczeń jest wykorzystanie procesorów kart graficznych. Potencjał, drzemący w nowoczesnych komputerach, umożliwia zastosowanie metod numerycznych dotychczas uważanych za nieefektywne z powodów długich czasów obliczeń i wymagań pamięci.

Zaawansowani użytkownicy pakietów obliczeniowych często są zmuszeni modyfikować kod, tak aby spełnił ich potrzeby. W przypadku pakietów komercyjnych podgląd kodu jest niemożliwy, a jego modyfikacje są dozwolone tylko w ograniczonym zakresie. W odpowiedzi na potrzeby użytkowników, na rynku pojawiły się pakiety z otwartym kodem źródłowym, które dodatkowo konkurują ze swoimi odpowiednikami niskimi, bądź zerowymi, kosztami licencji.

Promieniowanie cieplne jest dominującym sposobem wymiany ciepła w wysokich temperaturach, dlatego ma kluczowe znaczenie w przypadku pieców, kotłów przemysłowych, systemach spalania, silnikach odrzutowych, itp. Wymiana ciepła przez radiację wpływa na ośrodek, cząsteczki w nim zawieszane i szybkość reakcji chemicznych. Problemem przy modelowaniu radiacji stanowi fakt, iż jest to zjawisko działające na duże odległości, na który wpływ ma całe otoczenie, w przeciwieństwie do konwekcji czy przewodzenia, mających charakter lokalny. Złożoność zagadnienia jest odzwierciedlona w matematycznym opisie transportu radiacji, opisanym równaniem całkowo-różniczkowym. Problem staje się jeszcze bardziej skomplikowany, jeżeli weźmie się pod uwagę radiacyjne własności ośrodka, które są nieregularnymi funkcjami temperatury, długości fali oraz składu gazu.

Modele radiacji zaimplementowane w komercyjnych pakietach CFD bazują na uproszczeniach, które ograniczają zakres ich stosowalności lub też powodują powstawanie trudnych do kontroli błędów. Ponadto, użycie specyficznych warunków brzegowych (odbicia lustrzane, wiązki skolimowane) oraz własności materiałowych (powierzchnie niedyfuzyjne, anizotropowość ośrodka) jest ograniczone lub wręcz niemożliwe.

Biorąc powyższe względy pod uwagę, metoda Monte Carlo (MC) jest obiecującym narzędziem do rozwiązywania zagadnień radiacyjnej wymiany ciepła. MC nie wymaga wprowadzania wielu uproszczeń obecnych w innych metodach oraz jest w stanie wygenerować rozwiązania wzorcowe. Jest to jedyna metoda pozwalająca na rozwiązanie problemu radiacyjnej wymiany ciepła o dowolnym, fizycznie uzasadnionym poziomie skomplikowania. Użycie metody MC w problemach inżynierskich było ograniczone ze względu na wysokie koszty obliczeniowe. Dlatego duży nacisk położony jest na

zwiększenie efektywności obliczeniowej. Należy podkreślić, że proces śledzenia promieni może być efektywnie zrównoleglony, co ma znaczący wpływ na czas obliczeń.

1.2. Cel pracy

Głównym celem pracy było rozwinięcie metody Śledzenia Promieni Monte Carlo, zdolnej do rozwiązywania sprzężonych zagadnień wymiany ciepła w obszarach obliczeniowych o dowolnych kształtach w obecności nieszarego ośrodka oraz cząstek stałych.

Powyższy cel jest zrealizowany poprzez rozwiązanie następujących problemów cząstkowych:

- Rozwinięcie systemu do śledzenia promieni na hierarchicznych ortokartezjańskich siatkach z powierzchniami NURBS do opisu geometrii brzegowej obszaru obliczeniowego.
- Implementacja kodu modelu współpracującego z pakietem OpenFoam z otwartym kodem źródłowym.
- Weryfikacja metody przy użyciu rozwiązań wzorcowych.
- Potwierdzenie zasadności stosowania rzadkich siatek w problemach radiacyjnej wymiany ciepła.
- Poprawienie wydajności obliczeniowej metody poprzez:
 - Zastosowanie rzadkiej siatki ortokartezjańskiej,
 - Zrównoleglenie obliczeń.
- Rozszerzenie zakresu stosowalności modelu MC o:
 - Nieszare własności ośrodka,
 - Wpływ obecności cząstek stałych zawieszonych w ośrodku.
- Porównanie metody Monte Carlo z Discrete Ordinates.

1.3. Wcześniejsze badania

Metoda Monte Carlo

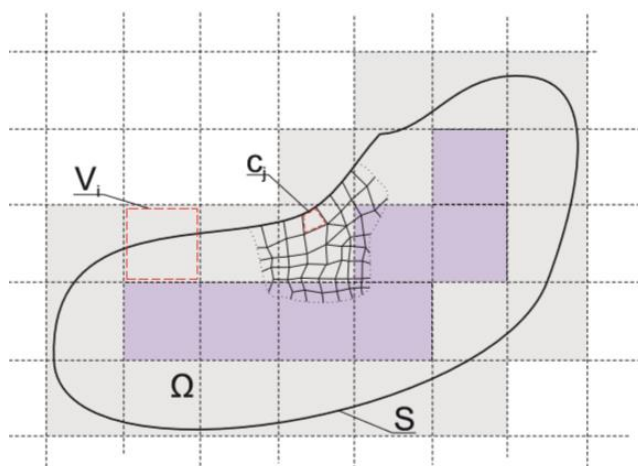
Historycznie, metoda statystycznego próbkowania, nazwana potem Monte Carlo, była rozwinięta na potrzeby Projektu Manhattan podczas II Wojny Światowej w Laboratorium Los Alamos [1] do odtworzenia historii życia neutronów podczas rozpadu atomów. Proces rozpadu atomu może być zamodelowany poprzez śledzenie dużej, ale skończonej liczby neutronów i analizę stanu atomów, z którymi neutrony weszły w interakcję. Poszczególne zdarzenia w procesie, takie jak kierunek i miejsce emisji, absorpcja neutronu, kierunek odbicia, zmiana energii atomu, itp. są określane przez próbkowanie statystyczne ze znanej funkcji gęstości prawdopodobieństwa. Od tamtego czasu, w polu zastosowań metody MC znalazły się obliczanie wielowymiarowych całek, renderowanie i określanie oświetlenia powierzchni w grafice 3D, propagacja fal radiowych [1].

Metoda MC została pierwszy raz zastosowana w radiacyjnej wymianie ciepła przez Fleck'a w latach 1960', później przez Howella i Perlmuttera [2, 3]. Oprócz MC, istnieje szereg metod numerycznych do rozwiązywania zagadnień radiacji włączając Surface to Surface (S2S) [4, 5], Zonal [6], Spherical Harmonics (PN) [7, 8, 9], Discrete Ordinates (DO) [10, 11], Boundary Element Method (BEM) [12, 13, 14] oraz Discrete Transfer (DT) [5, 15, 16]. Metoda MC posiada kilka wyróżniających się cech, które czynią ją faworytem w stosunku do metod wspomnianych wcześniej. W odróżnieniu do DO oraz DT, MC nie posiada efektu promienia. Kod metody MC może być stosunkowo prosty, a pomimo tego zdolny do rozwiązywania zagadnień ze specyficznymi warunkami brzegowymi, czy też dokładnymi danymi materiałowymi. Ponadto, procedura śledzenia promieni jest doskonałym kandydatem do zrównoleglenia.

W czasach bliższych współczesnym, metoda Śledzenia Promieni Monte Carlo została wykorzystana do symulowania radiacyjnej wymiany ciepła pomiędzy powierzchniami w kodzie MONT3D przez C. Zeeb [17]. MC użyto w systemach spalania do określenia interakcji pomiędzy radiacją a turbulencją, modelując tę ostatnią przy pomocy modeli RANS, LES i DNS [18, 19, 20]. Rozpraszanie na cząstkach zawieszonych w ośrodku może być uwzględnione w MC używając teorii Mie [21], wskutek czego kierunek promienia ulega zmianie. W swojej pracy Trivic [22] zaproponował inne podejście do uwzględnienia obecności cząstek w ośrodku. Cząsteczki są traktowane jako gaz szary o ekwiwalentnej absorpcyjności. W swojej pracy Trivic założył, że temperatura cząstek odpowiada temperaturze ośrodka. Takie założenie może prowadzić do znacznych nieścisłości modelu, zwłaszcza podczas modelowania spalania węglowego, w przypadku którego temperatura cząstek węgla znacznie odbiega od temperatury otoczenia. MC znalazło zastosowanie w praktycznych problemach inżynierskich, m.in. w kodzie AIOLOS używanym do symulacji kotłów węglowych [23] i symulacjach płomieni [20, 24].

Śledzenie promieni na rzadkich siatkach

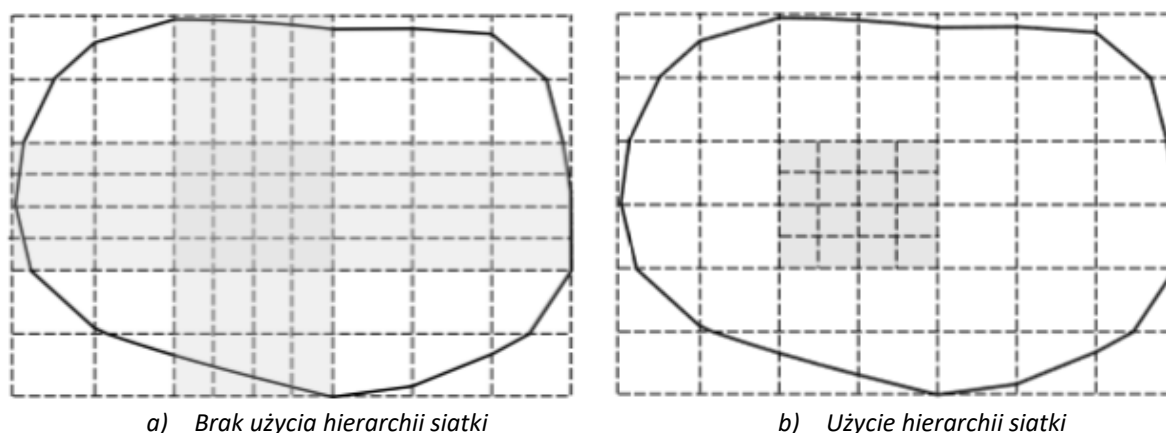
Kluczową procedurą w metodzie Monte Carlo jest śledzenie promieni, a w tej z kolei, procedura obliczania punktu przecięcia promienia z powierzchniami granicznymi [17, 25, 26, 27, 28, 29]. W przypadku ośrodka przezroczystego, wynikiem analizy jest radiacyjny strumień ciepła na ścianach, dlatego interesujący jest tylko punkt przecięcia promienia z granicami obszaru obliczeniowego. W ośrodku aktywnym dodatkowo wyznacza się objętościowe źródła lub upusty energii, odpowiadające całkowitej energii radiacyjnej emitowanej lub pochłanianej w ośrodku. Wynika stąd potrzeba określenia punktów przecięcia promienia z granicami komórki obliczeniowej.



Rys. 1: Komórki siatki ortokartezjańskiej (V_i) stworzone na podstawie komórek siatki konwekcyjnej (c_j). Kolor ciemny – komórki aktywne wewnętrzne, kolor jasny – komórki aktywne brzegowe, kolor biały – komórki nieaktywne.

Metoda objętości skończonych polega na dyskretyzacji obszaru obliczeniowego przy pomocy zbioru komórek objętościowych. Najprostsza implementacja metody MC polega na śledzeniu promieni na oryginalnej siatce konwekcyjnej. Przy takim podejściu przestrzeń obszaru obliczeniowego pokonywana jest przez promień komórka po komórce, co przy znacznej liczbie komórek siatki konwekcyjnej, czyni tę wersję metody MC niepraktyczną ze względu na czas obliczeń. Należy zauważyć, że wymiar charakterystyczny dla radiacji znacznie przewyższa ten odpowiadający turbulencji czy konwekcji. Dlatego zastosowanie zgrubej, rzadkiej siatki, zbudowanej na podstawie siatki CFD jest naturalnym krokiem w celu zmniejszenia liczby komórek, a tym samym skrócenia czasu obliczeń (Rys. 1). Obliczenia na rzadkich siatkach ortokartezjańskich przedstawił G. Węcel [14], co w późniejszym okresie zastosował I. Hunsaker [19]. Niniejsza praca również czerpie z tego pomysłu, uzupełniając go o

możliwość lokalnego zagęszczenia, dzięki wprowadzeniu hierarchii siatki (Rys. 2). Niewątpliwym plusem zastosowanego podejścia jest lokalny charakter zagęszczenia, nie wpływający na wielkość sąsiednich komórek.



Rys. 2: Lokalne zagęszczenie siatki ortokartezjańskiej.

Model rozwinięty w pracy wykorzystuje jednorodną ortokartezjańską siatkę, na której promienie są śledzone komórka po komórce. Powodem wyboru siatki ortokartezjańskiej był wynikowy kształt komórek objętościowych, dla których istnieje bardzo wydajna i prosta procedura obliczania punktu przecięcia promienia i ich ścian [30, 31, 32]. W literaturze napotkano na podobne techniki, jednak niepołączone z opisem granic obszaru obliczeniowego w postaci powierzchni NURBS. W tym miejscu należy wspomnieć, że w przypadku ośrodka nieaktywnego, istnieją techniki bardziej wydajne niż jednorodna siatka. Techniki takie jak octree, BSP-tree, KD-tree czy hierarchia objętości ograniczających odznaczają się szybszym niż liniowe pokonywaniem przestrzeni [30, 32]. Jednakże w przypadku ośrodka aktywnego, wybór techniki bezpośrednio wpływa na wielkość komórki, a tym samym na obszar, w którym własności ośrodka są uśredniane. Rozdzielczość siatki powinna być na tyle dobra, aby odzwierciedlić z wystarczającą dokładnością własności ośrodka. Obszary, w których należałoby zagęścić siatkę w części przypadków nie są z góry znane, co nastręcza dodatkowych problemów. Z wyżej wymienionych względów do dalszych rozważań wybrano jednorodną siatkę ortokartezjańską.

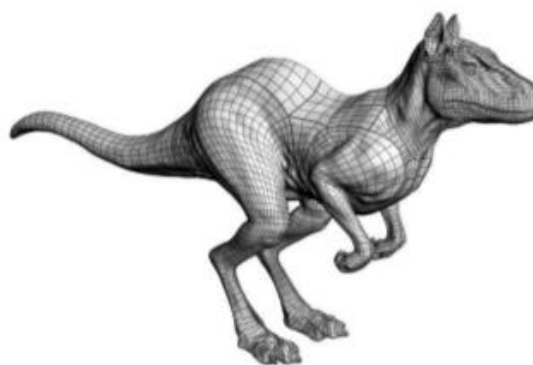
Opis geometrii brzegowej

Najprostszym sposobem opisu geometrii brzegowej jest przybliżenie zbiorem trójkątnych lub czworokątnych powierzchni [17], czego minusami są znaczne zużycie pamięci komputera oraz ograniczona dokładność odwzorowania zakrzywionych powierzchni. Zastosowanie wielomianów jest bardziej wyszukany sposobem opisu geometrii z powodu gładkości wynikowej powierzchni i kompaktowej formy zapisu. Poważnym minusem jest niestabilność podczas operacji zmiennoprzecinkowych, spowodowana tym, iż współczynniki wielomianów mogą przyjmować bardzo małe lub duże wartości [33]. W grafice komputerowej istotna jest możliwość lokalnego modyfikowania geometrii, co jest trudne do zrealizowania w przypadku wielomianów. Wymienione powyżej problemy z opisem geometrii 3D zostały całkowicie rozwiązane przy użyciu parametrycznych powierzchni NURBS (ang. Non-uniform Rational Basis Spline).

Powierzchnie NURBS są zdolne do opisu skomplikowanych kształtów 3D, zużywają niewiele pamięci komputera, są stabilne podczas operacji zmiennoprzecinkowych i są szeroko stosowane w narzędziach CAD i grafice komputerowej [33, 34]. Co istotne, istnieją wydajne algorytmy znajdowania punktu przecięcia powierzchni NURBS z promieniem. Większość z tych algorytmów powstała na potrzeby wizualizacji i renderowania obrazów w grafice komputerowej (Rys. 3).



a) Źródło: www.pixar.com



b) Źródło: www.ruiztaravillo.wordpress.com

Rys. 3: Przykłady obiektów 3D opisanych powierzchniami NURBS.

Zgodnie z Pabstem [35] algorytmy znajdowania punktu przecięcia promienia z powierzchnią NURBS można podzielić na: dzielenia, numeryczne, algebraiczne i Bezier Clipping. Techniki bazujące na dzieleniu wykorzystują własność powłoki wypukłej (ang. convex hull) powierzchni parametrycznych [36]. Powierzchnia jest testowana na przecięcie z promieniem i w przypadku powodzenia jest dzielona. Procedura trwa do momentu, gdy wynikająca z podziałów powierzchnia jest mniejsza niż ustalony próg. W przypadku algorytmów numerycznych trzon stanowi iteracyjna metoda Newtona, cechująca się kwadratową zbieżnością, pod warunkiem zainicjalizowania jej dobrym punktem startowym. Punkt startowy pobierany jest z analizy interwałowej powierzchni [37] lub w wyniku przejścia promienia przez hierarchię objętości ograniczających [27, 35, 38], tak aby zminimalizować liczbę stosunkowo kosztownych obliczeniowo testów przecięcia powierzchni NURBS z promieniem. Algorytm algebraiczny znajdowania punktu przecięcia powierzchni parametrycznej z promieniem przedstawił Kajija [39] i polega on na znalezieniu miejsc zerowych wielomianu 18go stopnia. Metoda jest ograniczona do powierzchni 3go rzędu i nie może być rozszerzona o dowolne powierzchnie NURBS, przez co jest niepraktyczna. Algorytm Bezier Clipping jest połączeniem algorytmów dzielenia i numerycznych. Wykorzystuje on własność powłoki wypukłej celem eliminacji obszarów powierzchni, w których nie może wystąpić punkt przecięcia [40]. Bezier Clipping może być tylko zastosowany do powierzchni Beziera. Reasumując, w pracy wykorzystano iteracyjną metodę Newtona, ze względu na jej szybkość oraz możliwość zastosowania do powierzchni NURBS.

Zrównoleglenie obliczeń

Metoda MC wymaga śledzenia ogromnej liczby promieni. Jest ona dobrym kandydatem do zrównoleglenia obliczeń, gdyż podczas śledzenia promienia proces nie wykorzystuje żadnych informacji o innych promieniach [28, 36], co znajduje potwierdzenie w licznych publikacjach [19, 41, 42]. Dlatego naturalnym sposobem na przyspieszenie obliczeń jest zastosowanie obliczeń wielowątkowych.

W początkowym okresie stosowane były maszyny SIMD (ang. Single Input Multiple Data). Używając tych maszyn, możliwe było równoległe przetwarzanie kilku promieni na raz. Załadowanie kolejnej porcji danych do obliczeń możliwe było po zakończeniu wszystkich wcześniejszych. Ponieważ drogi promieni nie mają jednakowej długości, powoduje to nierównomierne obciążenie procesorów i pogorszenie wydajności obliczeniowej. Rozwiązaniem okazało się zasilanie każdego wątku oddzielną porcją danych tak szybko, jak tylko wcześniejszy wątek jest zakończony.

Obecnie możliwe jest zaprojektowanie kodu, wykorzystującego do obliczeń równoległych kartę graficzną. Technika ta okazała się bardzo wydajna i pozwala na renderowanie obrazów 3D w czasie rzeczywistym [25, 35, 43]. Z racji faktu, iż zrównoleglanie obliczeń pojawiło się stosunkowo niedawno, nie istnieje pojedynczy standard programowania dla języka C++. Kodowanie obliczeń równoległych nie jest zadaniem łatwym, gdyż programista musi brać pod uwagę konfigurację sprzętową komputera i sieci. Wykorzystanie procesorów karty graficznej wymaga użycia specjalistycznej biblioteki, dostosowanej do konkretnej wersji sprzętu, przez co znacznie ograniczone jest przeniesienie kodu i jego uruchomienie na innej maszynie. Dla multiprocesorów z pamięcią rozproszoną lub sieci stacji roboczych połączonych w sieć najszerzej stosowanym standardem programowania jest MPI (ang. Message Passing Interface) [44]. W tym przypadku kopie programu współdziałają ze sobą wymieniając informacje. Z kolei standard OpenMP został wprowadzony aby umożliwić uruchomienie sekwencyjnego programu, zawierającego zrównoleglone fragmenty kodu (obliczenia wielowątkowe, farming) [45]. OpenMP wymaga niewielkich modyfikacji standardowego kodu C, C++ przez co jest łatwy w implementacji w przeciwieństwie do MPI. Ograniczeniem OpenMP jest jego przeznaczenie głównie dla maszyn o pamięci współdzielonej. W niniejszej pracy zdecydowano się na wybór biblioteki OpenMP do zrównoleglenia pętli w procedurze śledzenia promieni.

2. Metody numeryczne rozwiązywania transportu radiacji

Opis modeli zawierający więcej szczegółów można znaleźć w pełnym tekście pracy.

Równanie transportu radiacji (RTR) ma postać

$$\frac{dI}{ds} = s \cdot \nabla I = \kappa I_b(T_m) - \kappa I, \quad (1)$$

gdzie κ – współczynnik absorpcji ośrodka, I – intensywność promieniowania, I_b – intensywność promieniowania od emisji, T_m – temperatura ośrodka.

2.1. Metoda strefowa

Metoda strefowa została rozwinięta przez Hottela i Cohena [6] dla ośrodka aktywnego, nierozpraszającego o stałym współczynniku absorpcji. W późniejszym czasie została rozszerzona przez Hottela o jednorodne rozpraszanie oraz zmienny współczynnik absorpcji.

Technika polega na podzieleniu obszaru obliczeniowego na elementy powierzchniowe i objętościowe. W każdym z elementów własności radiacyjne powierzchni i ośrodka są stałe. Metoda używa tzw. powierzchni wymiany ciepła (ang. direct exchange areas) pomiędzy każdą parą elementów. Wielkość tych powierzchni zależy od wzajemnego położenia elementów, ich wielkości oraz średniego współczynnika absorpcji ośrodka, znajdującego się pomiędzy nimi. Dla każdego elementu zapisuje się bilans energii radiacyjnej, otrzymując układ N równań, w którym niewiadomymi jasności na ścianach oraz objętościowe źródła ciepła w ośrodku, gdzie N to całkowita liczba elementów. Główną wadą metody jest obliczeniowo kosztowne wyznaczenie wartości powierzchni wymiany ciepła.

2.2. Metoda elementów brzegowych

Metodę elementów brzegowych w zastosowaniu do problemów radiacyjnej wymiany ciepła rozwinął R. Białecki [12, 13]. G. Węcel ulepszył metodę i zastosował ją m.in. w obliczeniach wzrostu kryształów w procesie Czochralskiego oraz spalaniu gazu naturalnego [14, 31].

Rozwiązaniu podlega przekształcone do formy całkowitej RTR. W wyniku przekształcenia, złożoność problemu jest zredukowana, gdyż całkowanie po objętości obszaru obliczeniowego zastępuje się całkowaniem wzdłuż ścieżek promieni oraz po powierzchni granicznej. Procedura obliczeniowa polega na podzieleniu obszaru na elementy powierzchniowe i objętościowe. W elementach objętościowych

własności ośrodka pozostają stałe. W elementach powierzchniowych rozkład mocy emisji ciała czarnego i radiacyjnych strumieni ciepła są przybliżone funkcjami kształtu. Do wyznaczenia transmitancji ośrodka użyto śledzenia promieni. Wynikowy układ równań rozwiązywany jest metodą kolokacji węzłowej.

2.3. Metoda harmonik sferycznych (P_N)

Metoda PN wykorzystuje harmoniki sferyczne do rozwiązania układu równań różniczkowych cząstkowych, powstałego w wyniku dyskretyzacji RTR [7, 8, 9]. W tym celu intensywność promieniowania w danej lokalizacji oraz kierunku rozwijana jest w szereg Fouriera z wykorzystaniem tzw. harmonik sferycznych. Przybliżenie jest dokładne, dla nieskończonej liczby członów szeregu N . W praktyce, szereg jest uproszczony i zawiera tylko człony najistotniejsze. Współczynniki stojące przy członach szeregu Fouriera wyznaczane są rozwiązaniem tzw. równań momentów, utworzonych przez mnożenie rozwinięcia RTR w szereg przez sinusy i kosinusy kierunkowe oraz całkowanie po kącie bryłowym. Rozwiązaniem równań jest reprezentacja intensywności promieniowania w momentach, które są wyłącznie funkcją położenia. Następnym krokiem jest zapisanie RTR w formie momentów oraz rozwiązanie powstałego w ten sposób układu równań różniczkowych cząstkowych.

Minusem metody jest ograniczona dokładność w przypadku przybliżenia niższego rzędu, a także gwałtowny wzrost stopnia skomplikowania modelu wraz ze wzrostem rzędu przybliżenia.

2.4. Metoda Discrete Ordinates (S_N)

Metoda może być uznana za odmianę metod strumieni (ang. flux methods), które polegają na uproszczeniu kierunkowej zmienności intensywności promieniowania [10, 11]. RTR rozwiązywane jest w m kierunkach, dzielących pełny kąt bryłowy, w których intensywność promieniowania nie zależy od kierunku. W przypadku geometrii 3D, rząd metody N można wyznaczyć z równania $m = N(N + 2)$. Obszar obliczeniowy podzielony jest na elementy powierzchniowe i objętościowe i zdefiniowane są kierunkowe RTR. Następnie równania są dyskretyzowane w przestrzeni, tworząc układ równań różniczkowych cząstkowych. Radiacyjne strumienie ciepła oraz objętościowe źródła ciepła wyznaczane są przez całkowanie po kącie bryłowym.

Discrete Ordinates jest metodą powszechnie stosowaną w problemach inżynierskich, gdyż cechuje ją szybkość, oraz możliwość polepszania jakości rozwiązania przez zwiększenie liczby kierunków, w których rozwiązywane jest RTR. Minusem są efekty dyskretyzacji RTR (efekt promienia, pozorne rozpraszanie), prowadzące do powstawania trudnych do kontroli błędów.

2.5. Discrete Transfer

Metoda discrete transfer posiada cechy charakterystyczne dla metod strefowej i Monte Carlo [5, 15, 16] i polega na pomysłu rozwiązania RTR dla reprezentatywnych promieni.

Procedura obliczeniowa polega na podzieleniu obszaru obliczeniowego na elementy powierzchniowe i objętościowe, w których własności ścian i ośrodka są stałe. Półsfera nad każdym elementem powierzchniowym jest dzielona na określoną przez użytkownika liczbę kątów bryłowych. W każdym z tych przedziałów intensywność promieniowania jest stała. Następnie, wzdłuż osi odpowiadającej każdemu kątowi bryłowemu wypuszczany i śledzony jest promień. Promień przechodzi przez kolejne elementy objętościowe, a przypisana do niego intensywność promieniowania zachowuje się zgodnie z RTR. Śledzenie promienia przebiega do napotkania elementu powierzchniowego. Po skończonej fazie śledzenia promieni, obliczane są źródła ciepła na skutek emisji i absorpcji promieniowania w ośrodku.

2.6. Metoda Monte Carlo

W zastosowaniu do radiacyjnej wymiany ciepła, metoda Monte Carlo, nazywana również metodą próbkowania statystycznego, polega na założeniu, że transport promieniowania w danej przestrzeni można przybliżyć stochastycznym procesem śledzenia dużej liczby promieni. Statystyczna natura metody ujawnia się w tym, iż zachowanie promienia, zdefiniowane przez miejsce i kierunek emisji, kierunek odbicia, prawdopodobieństwo absorpcji promienia na ścianie i ośrodku, zależy od losowego próbkowania ze znanej funkcji gęstości prawdopodobieństwa.

Podobnie jak w metodzie strefowej, obszar obliczeniowy podzielony jest na elementy powierzchniowe i objętościowe. Z każdego z nich emitowana jest duża liczba promieni. Metoda posiada dwie wersje – standardową oraz podziału energii (ang. energy partitioning). Metoda standardowa polega na tym, że podczas absorpcji cała energia niesiona przez promień jest pochłaniana w danym elemencie. Podejście podziału energii polega na tym, iż podczas odbić promienia od ścian oraz jego przejść przez poszczególne objętości, energia niesiona przez promień ulega zmniejszeniu. Promień przestaje być śledzony, gdy niesiona przez niego energia jest mniejsza niż ustalony próg. Zastosowanie podejścia podziału energii przyspiesza obliczenia w przypadku ośrodków o dużej i małej grubości optycznej.

W literaturze wyróżnia się ponadto odwrotną metodę MC, w niektórych przypadkach dającą ogromne oszczędności obliczeniowe. Przypadki, obejmują klasę problemów, w których szukana jest intensywność promieniowania w niewielkiej części obszaru obliczeniowego oraz padająca z ograniczonego kąta bryłowego, np. detektor promieniowania. Metoda wykorzystuje fakt, iż rozwiązanie RTR w danym kierunku może być zastąpione przez problem zdefiniowany w przeciwnym kierunku, i innym warunku brzegowym. Oszczędność czasu polega na tym, że promienie są śledzone z niewielkiego obszaru, zamiast ze wszystkich elementów w obszarze obliczeniowym.

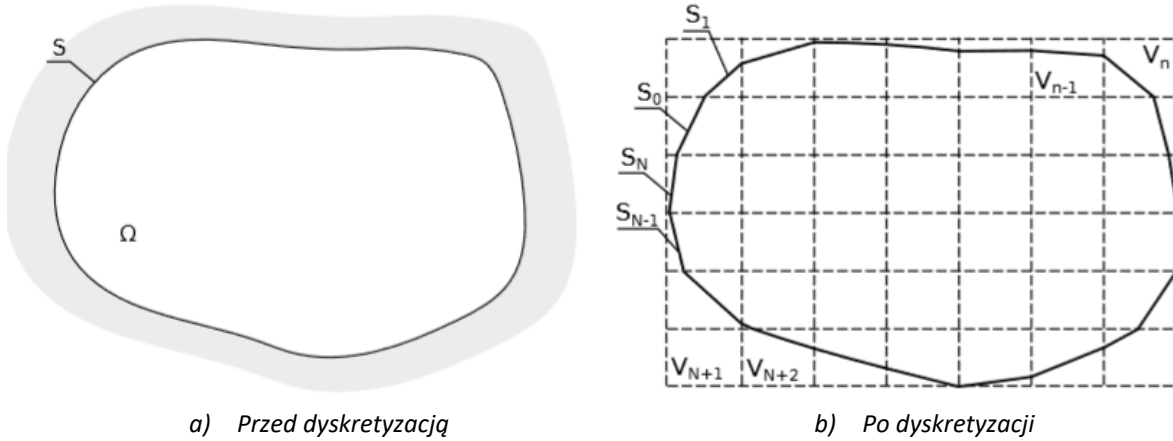
3. Metoda Śledzenia Promieni Monte Carlo w radiacyjnej wymianie ciepła

Rozdział prezentuje szczegóły systemu do Śledzenia Promieni Monte Carlo na rzadkich hierarchicznych siatkach ortokartezjańskich zbudowanych na podstawie siatki CFD. Do opisu geometrii brzegowej wykorzystano powierzchnie NURBS. Zagadnienie transportu radiacji jest rozwiązywane na siatce ortokartezjańskiej, a rozwiązanie jest interpolowane na siatkę konwekcyjną. Model uwzględnia szare i nieszare ośrodki aktywne oraz obecność cząstek. Model jest zaprojektowany jako dodatek do pakietu OpenFoam z otwartym kodem źródłowym.

Modele matematyczne opisujące przepływ, pęd, turbulencję, wymianę ciepła, transport składników, reakcje chemiczne są używane przez pakiet OpenFoam i nie wymagały modyfikacji. OpenFoam rozwiązuje równania mechaniki płynów używając metody objętości kontrolnych. Równania są dyskretyzowane na siatce numerycznej, tworząc zbiór równań różnicowych, który następnie jest rozwiązywany metodą iteracyjną. Implementacja modelu MC polegała na dodaniu nowego modelu radiacji do istniejącej struktury programu OpenFoam. Ponieważ model MC działa na odrębnej siatce numerycznej, elementem pracy było opracowanie procedury sprzężenia siatki ortokartezjańskiej i konwekcyjnej. Podczas rozwiązywania problemu transportu radiacji zakłada się, iż pole temperatury na ścianach i w ośrodku jest znane. W praktyce, pole temperatury wynika z rozwiązania równania energii dla płynu w całym obszarze obliczeniowym. Wynik działania modelu radiacji stanowią radiacyjne strumienie ciepła na ścianach oraz objętościowe źródła energii wynikające z emisji i absorpcji energii radiacyjnej w ośrodku.

Równania prezentowanej metody MC są wyprowadzone na podstawie tzw. Net Exchange Formulation i są zbliżone do metod S2S oraz Strefowej (więcej informacji znajduje się w pracy).

Obszar obliczeniowy Ω jest podzielony na n elementów, z których $i \in [1, N]$ są elementami powierzchniowymi, a pozostałe $i \in [N + 1, n]$ to komórki (elementy) objętościowe (Rys. 4).



Rys. 4: Dyskretyzacja obszaru obliczeniowego na elementy powierzchniowe i komórki objętościowe.

Definiuje się tzw. radiacyjny współczynnik wymiany ciepła

$$D_{ij} = \frac{E_{ij}^r}{E_{e,i}^r} \cong \frac{N_{ij}}{N_i}, \quad (2)$$

jako stosunek energii radiacyjnej wyemitowanej z elementu i , zaabsorbowanej w elemencie j , E_{ij}^r , do całkowitej energii radiacyjnej wyemitowanej z elementu i , $E_{e,i}^r$. N_{ij} oznacza liczbę promieni wyemitowanych z elementu i oraz zaabsorbowanych w elemencie j włączając odbicia, obecność ośrodka aktywnego i cząstek, N_i całkowitą liczbę promieni wyemitowanych z elementu i . Radiacyjny strumień ciepła na ścianie q_i^r oraz objętościowe źródło ciepła wynikające z emisji i absorpcji energii radiacyjnej w ośrodku $q_{v,i}^r$ wyznaczane są z:

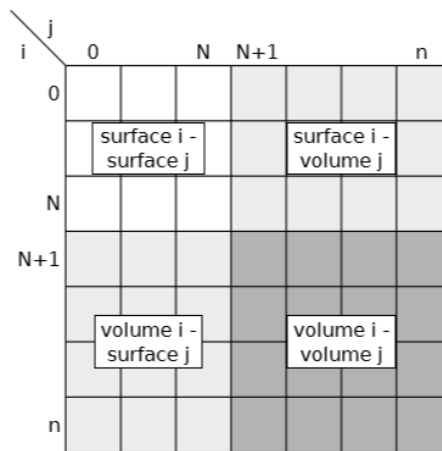
$$q_i^r = \epsilon_i e_{b,i} - \sum_{j=1}^N \epsilon_i e_{b,j} D_{ij} - \sum_{j=N+1}^n \frac{\kappa_j e_{b,j} + \pi E_{p,j}}{\kappa_j + \kappa_{p,j}} \epsilon_i D_{ij}, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (3)$$

$$q_{v,i}^r = 4(\kappa_i e_{b,i} + \pi E_{p,i}) - \sum_{j=1}^N 4(\kappa_i + \kappa_{p,i}) e_{b,j} D_{ij} + \sum_{N+1}^n 4(\kappa_j e_{b,j} + \pi E_{p,j}) \frac{\kappa_i + \kappa_{p,i}}{\kappa_j + \kappa_{p,j}} D_{ij}, \quad N + 1 \leq i \leq n, \quad (4)$$

gdzie: ϵ – emisyjność powierzchni, $e_b = \sigma T^4$ – moc emitowana przez ciało doskonale czarne, κ – współczynnik absorpcji ośrodka, $\kappa_p = \sum_{m=1}^M \epsilon_{p,m} \frac{\pi d_{p,m}^2}{4V}$ – ekwiwalentny współczynnik absorpcji kulistych cząstek, E_p – człon radiacyjnej energii emitowanej przez cząstki. W wyprowadzeniu powyższych równań wykorzystuje się bilans energii radiacyjnej dla każdego elementu oraz własności radiacyjnych współczynników wymiany ciepła: prawo sumowania do 1 oraz prawo odwrotności. W przypadku braku obecności cząstek, zmienne $\kappa_p = 0, E_p = 0$; w przypadku ośrodka przezroczystego $\kappa = 0$.

W modelu radiacji obecność chmury cząstek zawieszonych w ośrodku traktowana jest jako dodatkowy gaz szary absorbujący i emitujący promieniowanie, posiadający ekwiwalentny współczynnik absorpcji. W pracy przeprowadzono symulacje spalania cząstek węgla, których powierzchnie są bardzo nieregularne, a ich absorpcyjność jest bliska 1, co było powodem pominięcia efektu rozpraszania.

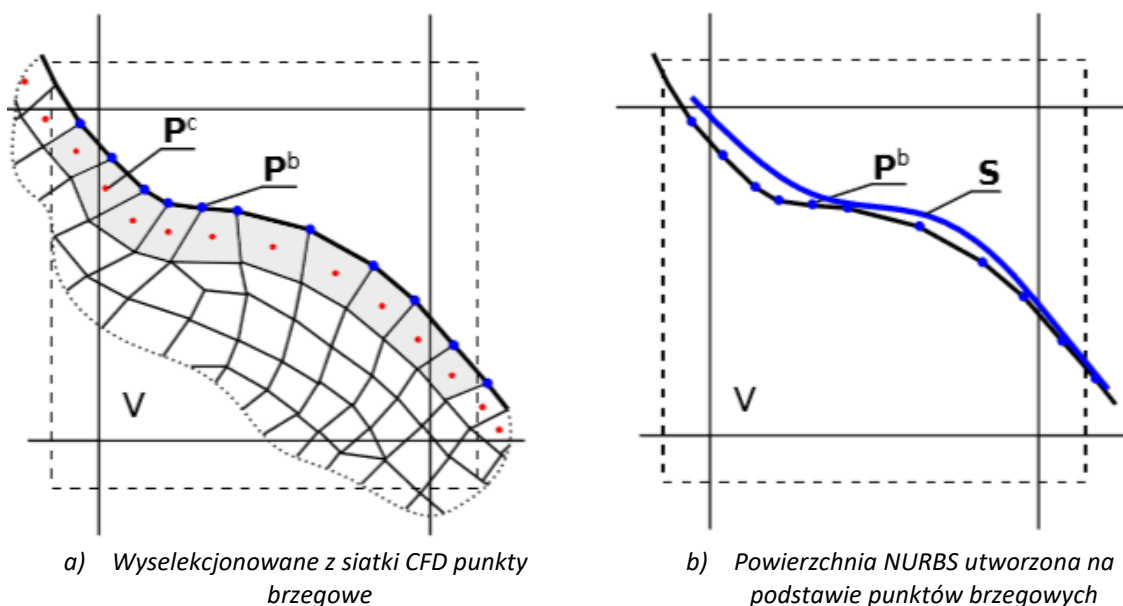
Kluczową procedurą w metodzie MC jest śledzenie promieni. W wyniku tej procedury obliczane są wartości radiacyjnych współczynników wymiany ciepła D_{ij} . Są one zgrupowane w kwadratową macierz D (Rys. 5). Jej wielkość rośnie wraz kwadratem liczby elementów.



Rys. 5: Kwadratowa macierz radiacyjnych współczynników wymiany ciepła D_{ij} .

Opis granic obszaru obliczeniowego

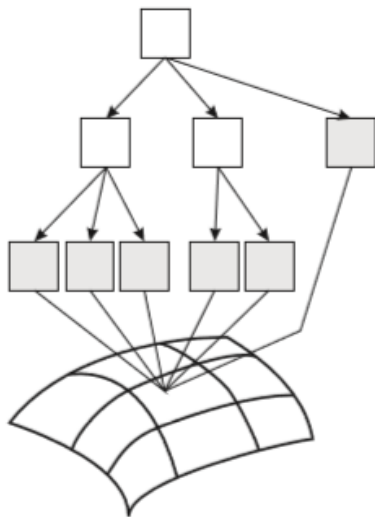
Opisane powyżej równania metody MC dotyczą elementów powierzchniowych oraz objętościowych domeny. Elementami objętościowymi są aktywne komórki siatki ortokartezjańskiej, czyli te zawierające co najmniej jedną komórkę siatki CFD, pozostałe komórki są nieaktywne i nie biorą udziału w obliczeniach (por. Rys. 1). Komórka siatki CFD jest przypisana do danej komórki siatki ortokartezjańskiej, gdy jej środek leży w obrębie tej komórki. Spośród aktywnych komórek siatki ortokartezjańskiej wyróżnia się dodatkowo komórki brzegowe, zawierające co najmniej jedną brzegową komórkę CFD. W każdej komórce brzegowej siatki ortokartezjańskiej tworzona jest powierzchnia NURBS, będąca odpowiednikiem jednego elementu powierzchniowego. Powierzchnia NURBS 3-go rzędu jest tworzona metodą minimalizacji kwadratów odległości powierzchni od punktów brzegowych siatki CFD wyselekcjonowanych z komórek tej siatki, których środki leżą wewnątrz komórki ortokartezjańskiej powiększonej o pewien offset (Rys. 6).



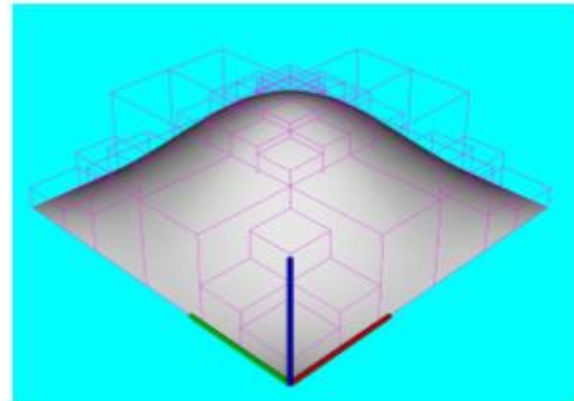
Rys. 6: Etapy tworzenia powierzchni NURBS z punktów brzegowych wyselekcjonowanych z siatki CFD.

Punkt przecięcia promienia z powierzchnią NURBS

Procedura wyznaczania punktu przecięcia powierzchni NURBS z promieniem wykorzystuje iteracyjną metodę Newtona. Cechuje się ona kwadratową zbieżnością pod warunkiem rozpoczęcia od odpowiedniego punktu startowego. W innym przypadku, metoda nie jest zbieżna, lub prowadzi do niewłaściwego rozwiązania. Krok startowy, będący punktem na powierzchni w lokalnym układzie współrzędnych powierzchni u, v pobierany jest przez przejście promienia przez hierarchię objętości ograniczających z ostatniej objętości (z tzw. liścia w drzewie hierarchii), bezpośrednio związanej z geometrią powierzchni NURBS (Rys. 7).



a) Drzewo hierarchii objętości ograniczających z widocznymi (szary) objętościami liśćmi



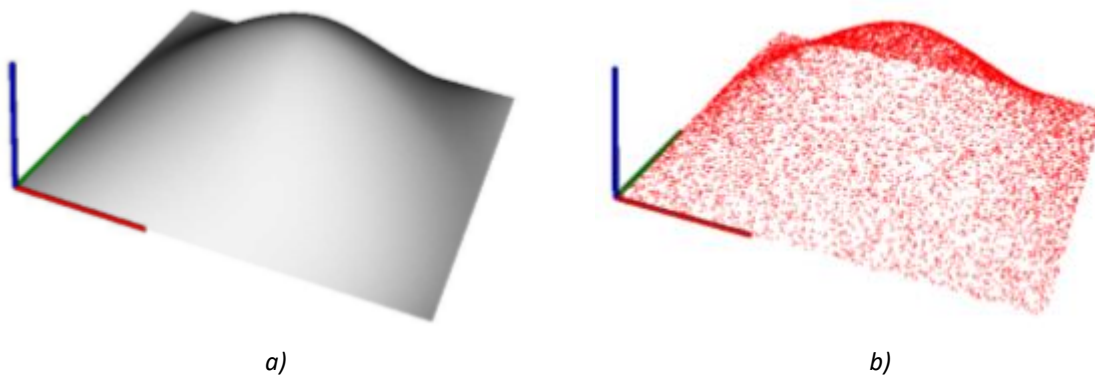
b) Objętości liście zawierające punkt startowy do metody Newtona

Rys. 7: Szczegóły hierarchii objętości ograniczających.

W procesie tworzenia objętości ograniczających liści posłużono się metodą zaproponowaną przez Alberta [25], wykorzystując empiryczny parametr p , będący miarą płaskości powierzchni, a następnie metodą Goldmith-Salmona [26] do umieszczenia tych objętości w drzewie hierarchii. Objętość ograniczająca liść zawiera w sobie płaski fragment powierzchni NURBS, a także punkt startowy do metody Newtona.

Losowanie punktu emisji promienia z powierzchni NURBS

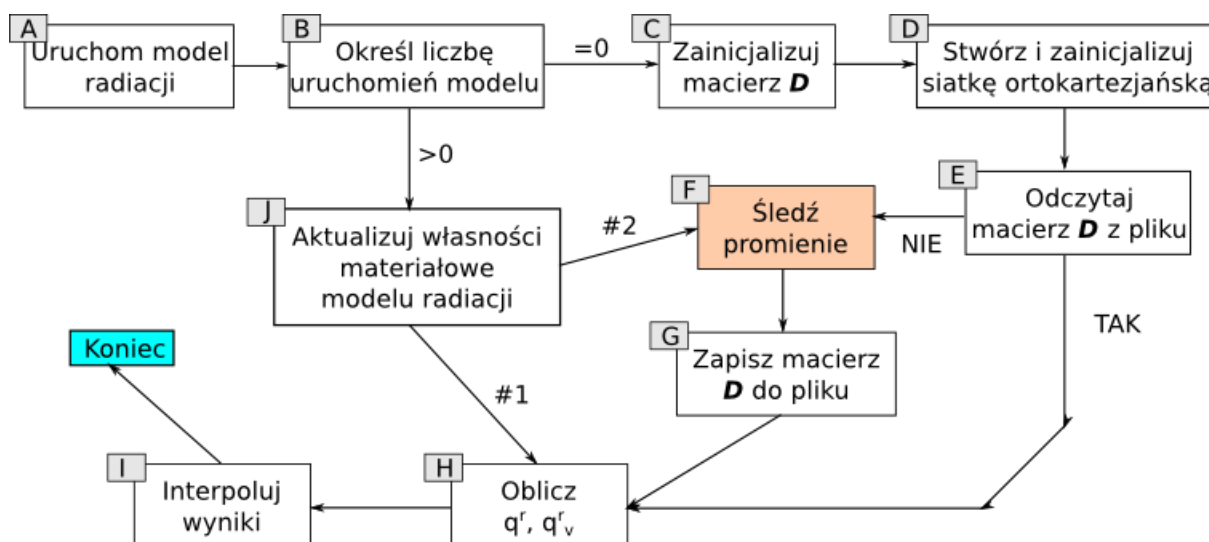
Procedura losowania punktu emisji promienia na powierzchni NURBS wykorzystuje algorytm zaproponowany przez Kopytova [46]. Zgodnie z tym algorytmem aby uzyskać jednorodny rozkład punktów na powierzchni NURBS w układzie $x-y-z$, należy losować punkty w lokalnym parametrycznym układzie współrzędnych $u-v$ proporcjonalnie do wyrażenia $f(u, v) \sim \sqrt{EG - F^2}$, gdzie E, F, G są współczynnikami pierwszej fundamentalnej formy powierzchni (Rys. 8). Algorytm został odpowiednio zmodyfikowany tak, aby losowanie mogło odbywać się z kilku powierzchni, co jest często spotykane w komórkach brzegowych, gdy powierzchnia NURBS została podzielona.



Rys. 8: 10k punktów leżących na przykładowej powierzchni NURBS wylosowanych z rozkładem jednorodnym.

Sekwencja obliczeń modelu

W momencie uruchomienia modelu radiacji przez nadrzędny program CFD, sprawdzane jest czy model uruchomiony został po raz pierwszy (B) (Rys. 9). Jeżeli tak, rozpoczyna się faza pre-processingu, która jest wykonywana jednokrotnie podczas symulacji. Zawiera ona tworzenie i inicjalizację macierzy radiacyjnych współczynników wymiany ciepła (C) oraz wygenerowanie i inicjalizację siatki ortokartezjańskiej (D). Następuje próba wczytania wartości macierzy D z pliku (E). W przypadku powodzenia, program przechodzi do obliczania q^r i q_v^r (H) oraz liniowej interpolacji wyników na siatkę CFD (I). W przeciwnym przypadku uruchamiana jest procedura śledzenia promieni (F), czyli wyznaczania wartości macierzy D , po zakończeniu której wyniki zapisywane są do pliku (G). O szczegółach procedury śledzenia promieni będzie mowa w dalszej części pracy. Jeżeli natomiast model radiacji uruchamiany jest po raz kolejny, następuje aktualizacja własności i parametrów przypisanych elementom powierzchniowym i objętościowym (J). W zależności od tego, czy własności materiałowe uległy zmianie niezbędne może okazać się ponowne przeliczenie macierzy D (J \rightarrow F). Taka sytuacja występuje wtedy, gdy absorpcyjność ośrodka, ścian lub koncentracja cząstek uległa zmianie. W przeciwnym przypadku, program przechodzi do obliczania q^r i q_v^r (J \rightarrow H).



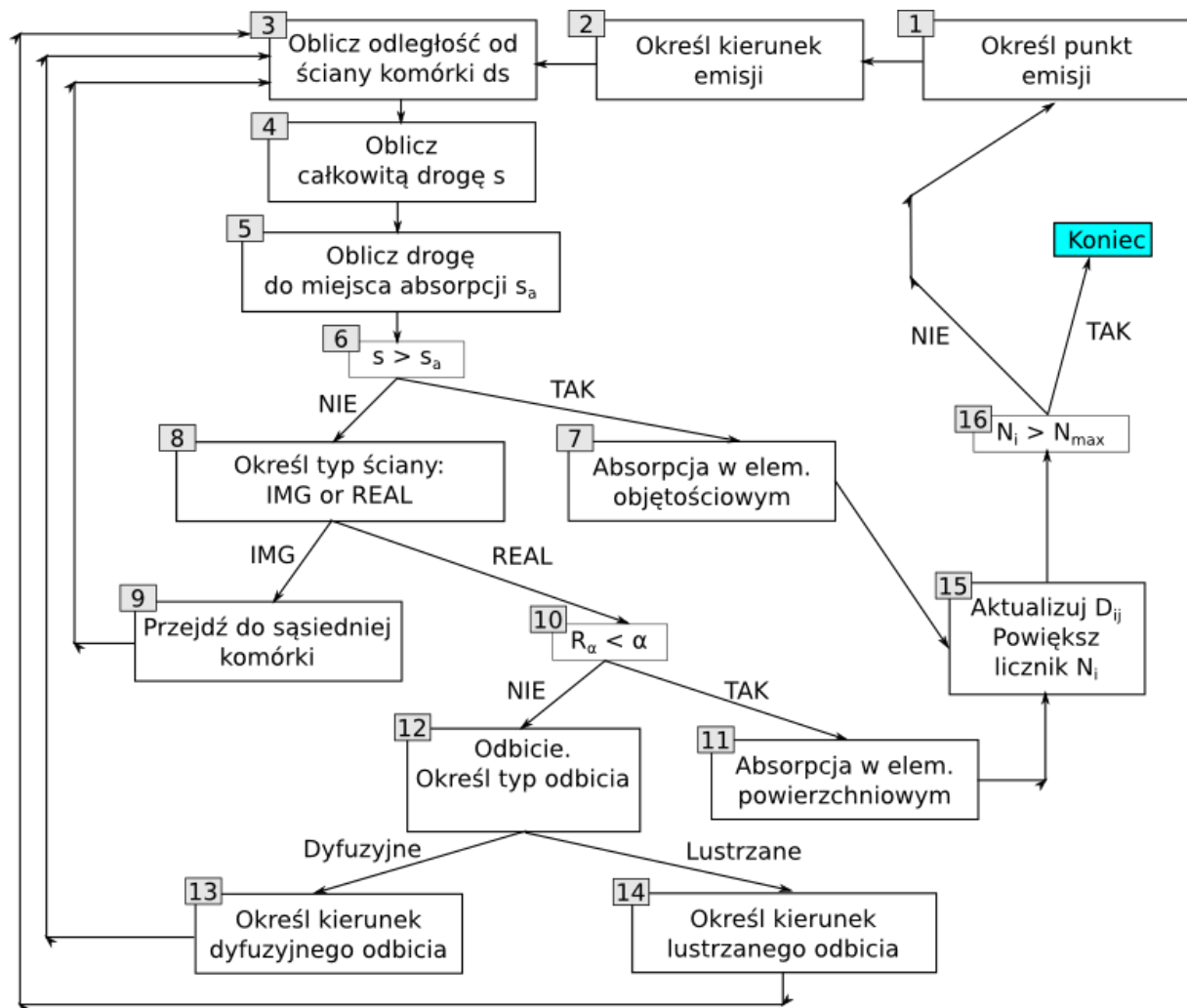
Rys. 9: Schemat blokowy modelu Śledzenia Promieni Monte Carlo.

Inicjalizacja siatki ortokartezjańskiej składa się z następujących kroków: określenie rozdzielczości siatki i obszarów zagęszczenia; przypisanie komórek siatki CFD do właściwych komórek siatki ortokartezjańskiej; sklasyfikowanie komórek jako aktywne, nieaktywne, brzegowe; wyselekcjonowanie w każdej komórce brzegowej punktów brzegowych, na których rozpięta zostaje

powierzchnia NURBS, zorientowanie powierzchni aby jej wektor normalny wskazywał na zewnątrz obszaru; utworzenie hierarchii objętości ograniczających z punktem startowym do metody Newtona; zainicjalizowanie radiacyjnych własności ośrodka i ścian.

Procedura śledzenia promieni

Szczegóły procedury śledzenia promieni przedstawiono na Rys. 10. Dokładny opis każdego z kroków można znaleźć w pracy, tu poruszono tylko najważniejsze kwestie. Zmienne $R_i, i = \{x, y, z, \phi, \theta, \alpha, s\}$ oznaczają liczby wylosowane z przedziału $[0,1]$ o rozkładzie jednorodnym. Z każdego elementu powierzchniowego oraz objętościowego wypuszczana jest określona liczba promieni, zadana przez użytkownika. Promień śledzony jest komórka po komórce aż do punktu absorpcji. Punkt emisji w przypadku powierzchni NURBS losowany jest wg algorytmu Kopytov'a, opisanego wcześniej, natomiast w przypadku objętości losowane są trzy liczby $R_x = \{R_x, R_y, R_z\}$ i wstawiane do równania $r_0 = C + (R_x - 0.5)dx$, gdzie r_0, C, dx oznaczają odpowiednio wektory punktu emisji, środka komórki oraz wymiaru komórki. W przypadku komórki brzegowej wylosowany punkt jest akceptowany, gdy leży w obszarze obliczeniowym.



Rys. 10: Schemat blokowy procedury śledzenia promieni używanej w przypadku ośrodka aktywnego.

Kierunek emisji z powierzchni (lub też kierunek dyfuzyjnego odbicia) określony jest kątami ϕ i θ mierzonymi od wektora stycznego i normalnego do powierzchni w punkcie emisji (odbicia). Wartości kątów wyznacza się losując dwie liczby R_ϕ, R_θ i wstawiając je do równań $\phi = 2\pi R_\phi$ oraz $\theta =$

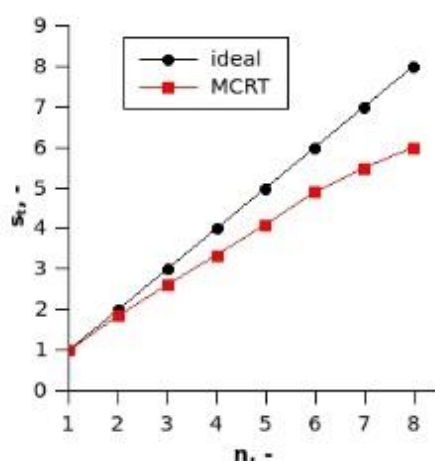
$\text{asin}(\sqrt{R_\theta})$. Dla emisji w objętości, drugie równanie przyjmuje postać $\theta = \text{acos}(2R_\theta - 1)$. W chwili, gdy promień uderzy w ścianę może zostać zaabsorbowany, gdy spełniony jest warunek $R_\alpha < \alpha$, gdzie α jest absorpcyjnością ściany. Jeżeli warunek nie jest spełniony, następuje odbicie lustrzane, gdy $R_s < r_s$, w przeciwnym razie promień odbija się dyfuzyjnie. r_s określa, w jakim procencie powierzchni można traktować jako lustrzaną, $r_s = 1$ oznacza, że wszystkie promienie odbijają się lustrzanie. Absorbacja promienia w ośrodku następuje, gdy przebyta przez niego droga jest większa niż określona losowo droga do miejsca absorpcji $s > s_a$. Droga promienia bez absorpcji określana jest z $s_a = -\frac{1}{\kappa + \kappa_p} \ln(1 - R_a)$ i jest aktualizowana przy przejściu przez każdą komórkę, aby uwzględnić zmiany współczynnika absorpcji κ . W momencie absorpcji promienia w objętości, czy też na powierzchni, aktualizowana jest odpowiednia wartość macierzy radiacyjnych współczynników wymiany ciepła D .

Zrównoleglenie obliczeń

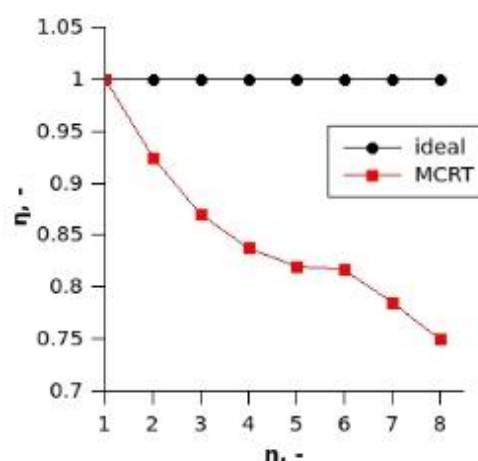
Kod programu został zrównoleglony wykorzystując bibliotekę OpenMP. Biblioteka, w odróżnieniu do standardu MPI, pozwala na zrównoleglenie fragmentów sekwencyjnego programu (obliczenia wielowątkowe) przy stosunkowo niewielkiej modyfikacji kodu źródłowego.

W procesie śledzenia promieni, czyli wyznaczania wartości współczynników macierzy D , mamy do czynienia z dwiema pętlami: zewnętrzną pętlą po elementach (powierzchniowych i objętościowych) oraz zagnieżdżoną w tej pierwszej, pętlą po promieniach. Zrównolegleniu podlega zewnętrzna pętla po elementach. W praktyce, zrównoleglenie oznacza, że do każdego wątku trafia zadanie, polegające na emisji oraz śledzeniu promieni z jednego elementu. W momencie ukończenia pracy przez jakikolwiek wątek, niezwłocznie podawane jest kolejne zadanie, aż do chwili ukończenia pętli po wszystkich elementach. Ten sposób alokowania zadań gwarantuje brak przestoju w pracy procesorów, do których przypisano wątki obliczeniowe.

Przyspieszenie obliczeń mierzone jest współczynnikiem $s_t = t_1/t_n$, gdzie t_1, t_n oznaczają odpowiednio czas wykonywania programu na jednym oraz n wątkach. Definiuje się również sprawność zrównoleglenia jako $\eta = t_1/(nt_n)$. Wyniki testu przeprowadzonego na ośmio-rdzeniowym komputerze ze współdzieloną pamięcią 2x4 Intel Xeon 2.33 GHz są pokazane na Rys. 11 i porównane do maksymalnego, liniowego przyspieszenia.



a) Przyspieszenie obliczeń



b) Sprawność zrównoleglenia

Rys. 11: Wyniki testu zrównoleglenia kodu Monte Carlo

Wyniki potwierdzają tezę, iż kod Monte Carlo jest dobrym kandydatem do zrównoleglenia obliczeń. Sprawność zrównoleglenia wyraźnie maleje dla liczby wątków powyżej 6, gdyż zbliżamy się do liczby 8, odpowiadającej liczbie dostępnych procesorów. Spadek sprawności można tłumaczyć potrzebami obliczeniowymi, niezbędnymi do działania systemu operacyjnego i programów pobocznych. Biblioteka OpenMP jest stworzona z myślą o komputerach z pamięcią współdzieloną, co prowadzi do znacznego ograniczenia maksymalnej liczby procesorów. Autor rekomenduje zastosowanie w przyszłości standardu MPI, aby uzyskać zrównoleglenie na maszynach z pamięcią rozproszoną, sieciach komputerów, które dają ogromne możliwości obliczeniowe.

Śledzenie promieni: siatka ortokartezjańska vs standardowa

W celu wykazania przewagi modelu MC pracującego na rzadkiej siatce ortokartezjańskiej należy go porównać z podstawową wersją modelu MC, wykorzystującą gęstą siatkę CFD. Model podstawowy nie jest dostępny, dlatego przeprowadzono teoretyczne rozważania, analizując dwa przypadki testowe o różnych geometriach. W rozważaniach wzięto pod uwagę różnice w całkowitej liczbie elementów powierzchniowych i objętościowych, obecność hierarchii objętości ograniczających w modelu z siatką ortokartezjańską oraz różnice w definicji elementów objętościowych pomiędzy siatką ortokartezjańską a siatką CFD.

Analiza wykazała, że w wyniku zastosowania rzadszej siatki liczba elementów powierzchniowych i objętościowych spadła 13 i 35 razy, dla pierwszego i drugiego przypadku testowego (więcej szczegółów w pracy). Uwzględniając obecność dodatkowych objętości, z którymi promień musi znaleźć punkt przecięcia i obecnych w hierarchii objętości ograniczających, spadek liczby objętości jest równy odpowiednio 10 i 23. Kolejna aktualizacja tych liczb bierze pod uwagę fakt, że przy przecięciu objętości z siatki ortokartezjańskiej z promieniem wyznaczone są 3 punkty przecięcia. Natomiast w przypadku przecięcia promienia z objętością ze standardowej siatki, składającej się z sześciobocznych elementów, nie ma gwarancji, iż cztery wierzchołki każdej z sześciu ścian, leżą na jednej płaszczyźnie. Wymusza to zatem podział każdej z sześciu ścian na dwa trójkąty i znalezienie dwunastu punktów przecięcia z promieniem. Zatem śledzenie promienia na siatce standardowej jest cztery razy wolniejsze niż na siatce ortokartezjańskiej.

Podsumowując, całkowite przyspieszenie ze względu na użycie siatki ortokartezjańskiej jest równe 40 i 90, odpowiednio dla dwóch analizowanych przypadków. Różnica w wartościach przyspieszeń wynika z innej rozdzielczości siatki ortokartezjańskiej w stosunku do siatki CFD. Liczba komórek siatki CFD przypadająca na jedną komórkę siatki ortokartezjańskiej wynosi 16 i 45, odpowiednio dla testowanych przypadków.

Uwzględnienie nieszarych własności gazów

W celu uwzględnienia nieszarych własności gazów zastosowano model WSGG, charakteryzujący się kompromisem pomiędzy dokładnością a czasem obliczeń. W innych pracach spotyka się dokładniejsze algorytmy obliczania radiacyjnych własności ośrodka, np. model c-k [29]. Algorytm c-k wymaga statystycznego próbkowania znaczącą liczbą promieni, co wymaga bardzo dużego nakładu obliczeniowego co wyklucza jego zastosowanie w praktycznych problemach inżynierskich.

Zastosowany w niniejszej pracy model WSGG był rozwinięty przez G. Węcla [14, 47, 48, 49]. Współczynniki modelu zostały dobrane metodą najmniejszych kwadratów wykorzystując dane z bazy HITEMP 2010. Model można stosować dla mieszanin CO₂-H₂O, znajdujących się w stosunku udziałów molowych (0.01, 4.00), temperaturze (300, 2400) K oraz dla iloczynów ciśnienia całkowitego i drogi promienia (0.01, 60). W modelu, mieszanina gazów CO₂-H₂O jest przybliżona czterema gazami szarymi oraz jednym gazem nieaktywnym. Po implementacji WSGG do modelu MC wymagane jest obliczenie

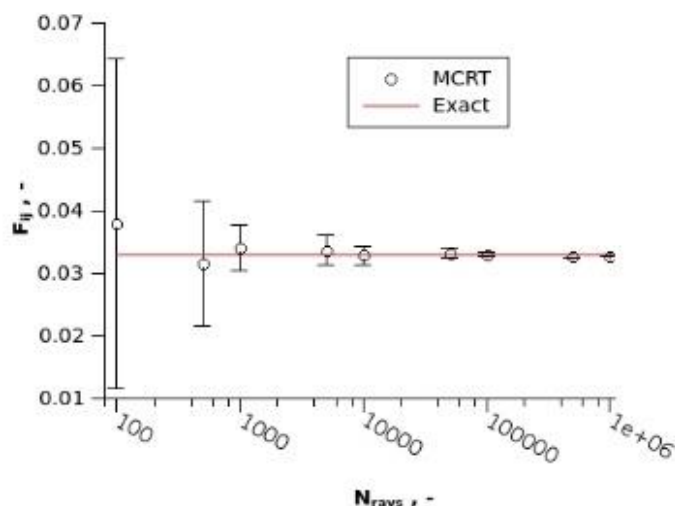
macierzy D , czyli uruchomienie procedury śledzenia promieni, dla czterech gazów szarych, dla których współczynniki absorpcji oraz wagi są wyznaczone z modelu WSGG na podstawie pól koncentracji CO_2 i H_2O oraz temperatury. Radiacyjne strumienie ciepła oraz źródła ciepła są wyznaczone dla każdego gazu, łącznie z nieaktywnym, i sumowane. Obecność cząstek stałych jest uwzględniona w równaniach w zastępczym współczynniku absorpcji oraz członie emisji od cząstek. Szczegółowy opis znajduje się w pracy.

4. Weryfikacja modelu radiacji

4.1. Ośrodek nieaktywny

Współczynnik konfiguracji

Model MC został użyty do wyznaczenia współczynnika konfiguracji F_{ij} dwóch równoległych prostokątnych powierzchni, leżących naprzeciw siebie w odległości $L = 1\text{m}$ o wymiarach $X = Y = 1/3\text{m}$. Dokładną wartość współczynnika F_{ij}^{exact} można obliczyć z odpowiedniego wzoru [50] oraz porównać do wartości otrzymanej z MC poprzez śledzenie promieni $F_{ij} = D_{ij} = N_{ij}/N_i$. Przeprowadzono 10 testów dla różnej liczby promieni, zmieniając wartość ziarna dla generatora liczb losowych. Wyniki przedstawia Rys. 12.

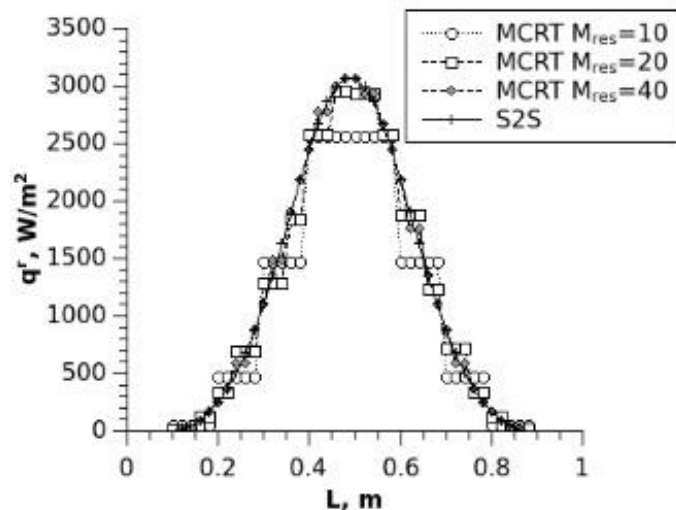


Rys. 12: Wartości współczynnika konfiguracji, obliczonego modelem MC w porównaniu do wartości dokładnej. Punkty oznaczają wartość średnią z 10ciu testów dla różnych wartości ziarna generatora liczb losowych, pionowe linie oznaczają odchylenie standardowe.

Wyniki wykazały poprawne zachowanie modelu, tj. oszacowana wartość F_{ij} dąży do rozwiązania dokładnego wraz z liczbą promieni, przy czym odchylenie standardowe maleje proporcjonalnie do $\sqrt{N_{rays}}$.

Sześcian

Zadaniem testu było porównanie wyników modelu MC z modelem S2S z pakietu Ansys Fluent na geometrii sześcianu o bokach 1m i absorpcyjności ścian 1. Temperatura pięciu ścian wynosi 300K, natomiast dla jednej określona jest za pomocą funkcji, która osiąga swoje maksimum na środku ściany, gdzie temperatura równa jest 500K. Siatka CFD składa się z 125k komórek. Liczba promieni w modelu MC wynosi 10k, a rozdzielczość siatki ortokartezjańskiej jest zmienna i wynosi 10, 20 i 40. Rozwiązanie modelu MC jest bezpośrednio przeniesione na siatkę CFD, nie wykorzystując interpolacji liniowej. Wyniki radiacyjnego strumienia ciepła na ścianie o zmiennej temperaturze przedstawia Rys. 13.



Rys. 13: Wartości radiacyjnego strumienia ciepła na ścianie o zmiennej temperaturze –model MC vs S2S Fluent.

Różnice w wynikach modeli MC i S2S były określone używając normy p : $\|x\|_p = (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{1/p}$. W wyniku dwukrotnego zwiększenia rozdzielczości siatki ortokartezjańskiej, rozwiązanie modelu MC zbliża się do S2S, a różnice mierzone normą maleją dwukrotnie. Co istotne, rozdzielczość siatki ortokartezjańskiej nie może być większa od rozdzielczości siatki CFD.

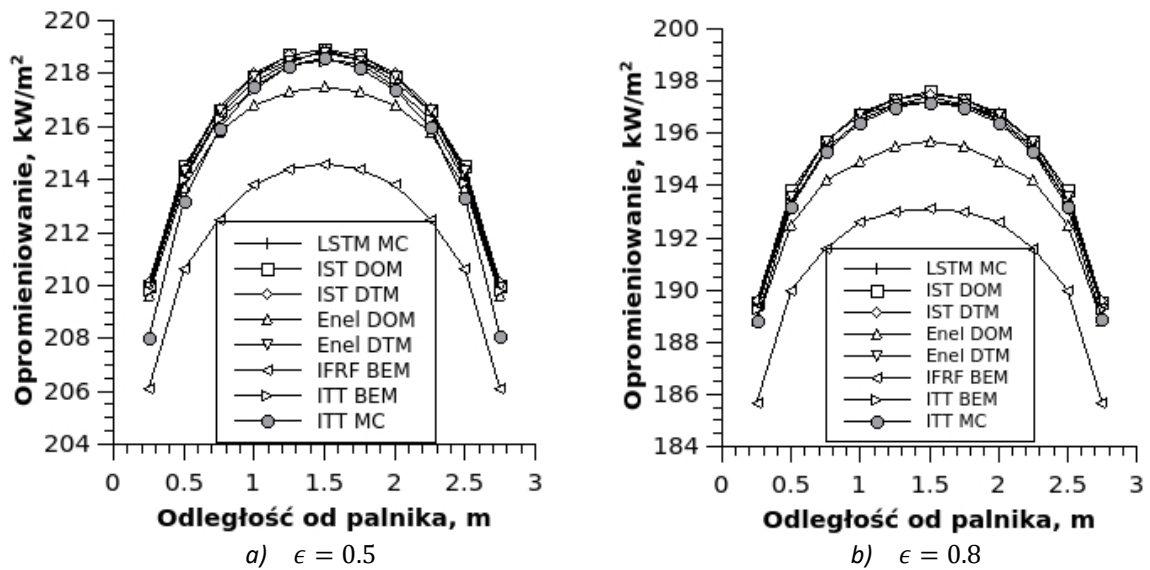
4.2. Ośrodek aktywny szary

Prezentowane poniżej przypadki testowe zostały zdefiniowane w ramach sieci RADIARE, zrzeszającej instytucje naukowe z Europy. Poszczególni partnerzy sieci użyli tych własnych kodów do wygenerowania rozwiązań wzorcowych: ENEL Produzione – Research (ENEL), modele DTM i DOM; Lehrstuhl fuer Sroemungsmechanik (LSTM), model MC; Instituto Superiori Tecnico (IST), modele DTM, DOM; International Flame Research Foundation (IFRF), metoda BEM. Dodatkowe rozwiązanie wzorowe pochodzi z pracy G. Węcla [14]: Institute od Thermal Tehnology (ITT), model BEM.

Izotermiczna prostopadłościenna komora

Prostopadłościenna komora o wymiarach 1x1x3m jest wypełniona gazem szarym o temperaturze 1500°C i współczynniku absorpcji 0.1m^{-1} . Temperatura ścian wynosi 1000°C, a ich emisyjność ϵ jest równa 0.5 i 0.8. Rozdzielczość siatki CFD wynosi $20 \times 20 \times 60 = 24\text{k}$ komórek, natomiast siatki ortokartezjańskiej $8 \times 8 \times 24 = 1536$ komórek. Liczba promieni emitowanych z jednego elementu równa jest 1M. Wyniki będące opromienianiem w osi symetrii dłuższej ściany przedstawia Rys. 14.

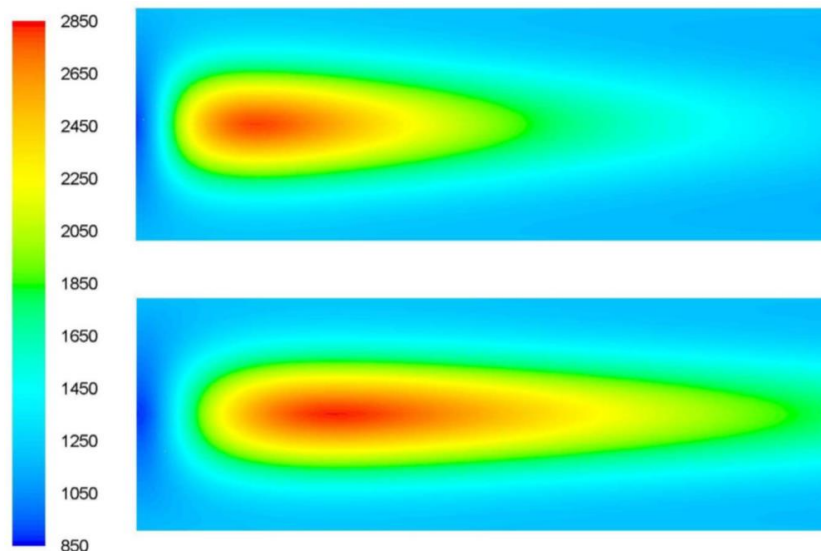
Wyniki uzyskane modelem MC rozwiniętym w niniejszej pracy (ITT MC) wykazują bardzo dobrą zgodność z wynikami wzorcowymi. Zaobserwowane różnice są $< 0.5\%$.



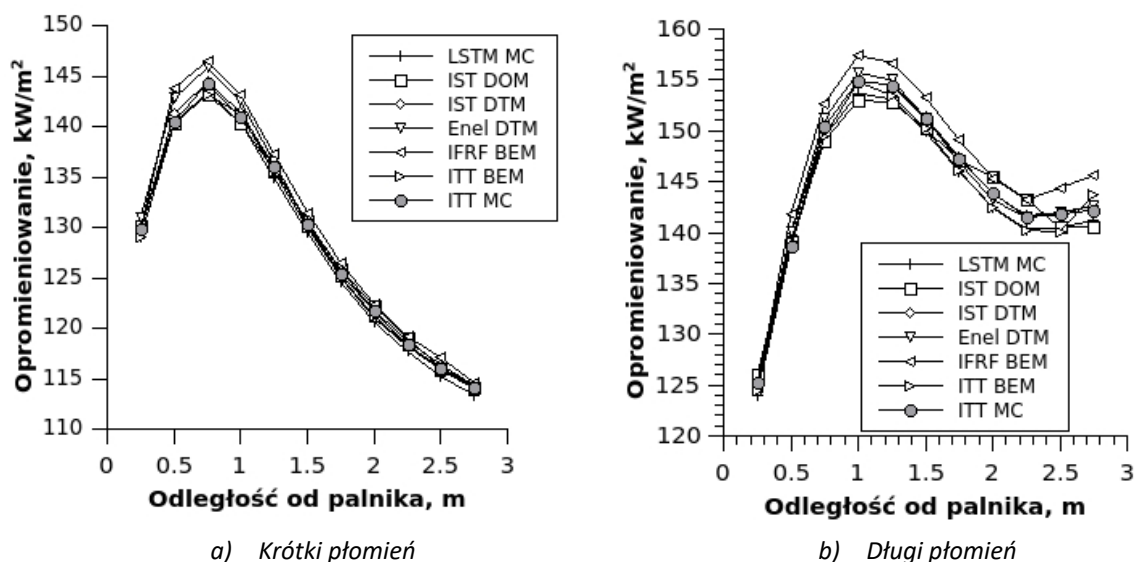
Rys. 14: Opromieniowanie w osi symetrii dłuższej ściany. Model MC (ITT MC) w porównaniu do rozwiązań wzorcowych.

Nieizotermiczna cylindryczna komora

Cylindryczna komora o długości 3m i średnicy 1m wypełniona jest gazem szarym o współczynniku absorpcji 0.1m^{-1} . Temperatura gazu oraz ścian zdefiniowana jest funkcją zależną od położenia w przestrzeni, która imituje płomień z palnika gazowego, umieszczonego na środku przedniej ściany komory. Test przeprowadzono dla dwóch płomieni: krótkiego oraz długiego (por. Rys. 15). Emisyjność ścian jest równa 0.7. Siatka CFD składa się z 100k komórek, rozdzielczość siatki ortokartezjańskiej wynosi $10 \times 10 \times 30$, co odpowiada 3000k komórek. Liczba promieni emitowanych z elementu wynosi 1M. Wyniki, będące opromieniowaniem wzdłuż cylindrycznej ściany komory przedstawia Rys. 16.



Rys. 15: Profil temperatury (K) w płaszczyźnie symetrii komory. U góry: krótki płomień, u dołu: długi płomień.

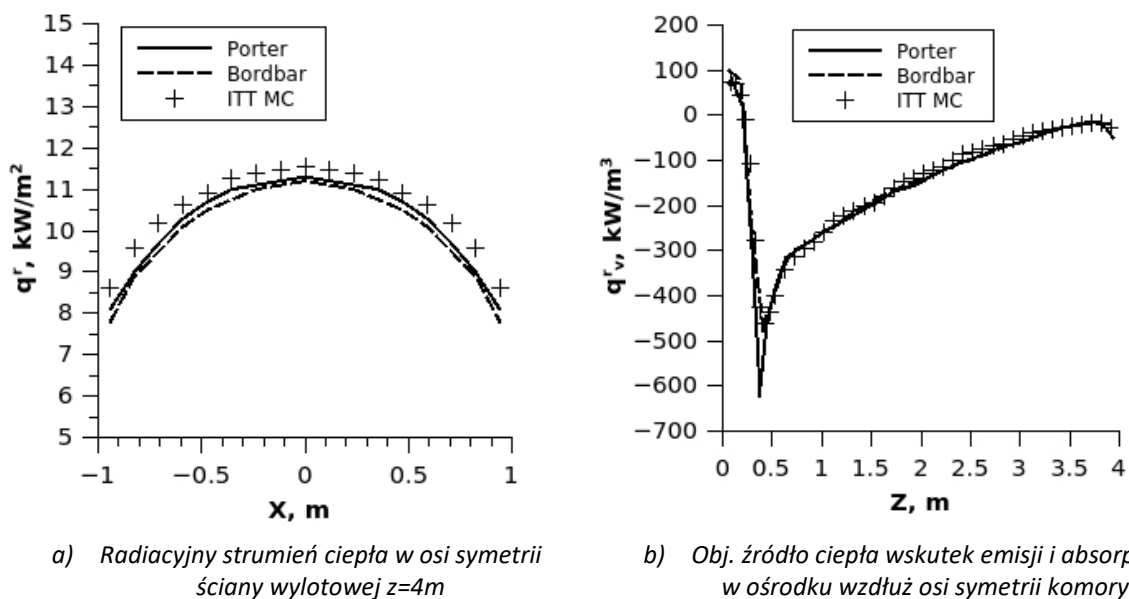


Rys. 16: Opromieniowanie wzdłuż cylindrycznej ściany komory. Model MC (ITT MC) w porównaniu do rozwiązań wzorcowych.

Wyniki uzyskane modelem MC rozwiniętym w niniejszej pracy (ITT MC) wykazują bardzo dobrą zgodność z wynikami wzorcowymi zarówno dla przypadku krótkiego, jak i długiego płomienia. Zaobserwowane różnice są $< 1.5\%$.

4.3. Ośrodek aktywny nie szary

Test weryfikacyjny w aktywnym ośrodku nieszarym zaczerpnięto z artykułów Portera [51] i Bordbara [48]. Geometria odzwierciedla prostopadłościenną komorę spalania o wymiarach $2 \times 2 \times 4$ m, wypełnioną mieszaniną gazów pod ciśnieniem 1 bar i składzie molowym: 85% CO_2 , 10% H_2O , 5% gaz przezroczysty. Ściany komory są czarne i mają temperaturę 300 K. Temperatura mieszaniny zdefiniowana jest w funkcji położenia, która imituje płomień o maksymalnej temperaturze 1800 K dla $z=0.375$ m. Temperatura na wylocie z komory równa jest 800 K. Autorzy pierwszego rozwiązania użyli metody MC ze statystycznym modelem pasm wąskich dla własności radiacyjnych gazów. Rozwiązanie zostało wygenerowane na siatce $17 \times 17 \times 24$, przy czym koncentracja punktów w miejscu piku temperaturowego była większa. Bordbar użył metody strefowej z modelem WSGG, a do obliczeń wykorzystał siatkę jednorodną o rozdzielczości $17 \times 17 \times 34$. Model MC (ITT MC) pracuje na siatce CFD o rozmiarze 128 k komórek i rozdzielczości $17 \times 17 \times 34$. Liczba promieni na element wynosi 100 k. Wyniki, będące radiacyjnym strumieniem ciepła w osi symetrii ściany wylotowej $z=4$ m oraz objętościowymi źródłami ciepła wskutek emisji i absorpcji w ośrodku w osi symetrii komory przedstawiono na Rys. 17.



Rys. 17: Wyniki testu weryfikacyjnego dla ośrodka nieszarego.

Wyniki modelu MC wykazują bardzo dobrą zgodność z wynikami wzorcowymi Portera i Bordbara. Zaobserwowane różnice dla objętościowych źródeł ciepła są $< 5\%$ we wszystkich obszarach oprócz rejonu w okolicy $z=0.375\text{m}$, gdzie występuje pik temperatury i w którym rozdzielczość siatki jest różna od tej zastosowanej przez Portera. W przypadku radiacyjnych strumieni ciepła na ścianie, różnice nie przekraczają 5% .

Podsumowując testy weryfikacyjne, model MC można uznać za zweryfikowany.

5. Zastosowania praktyczne

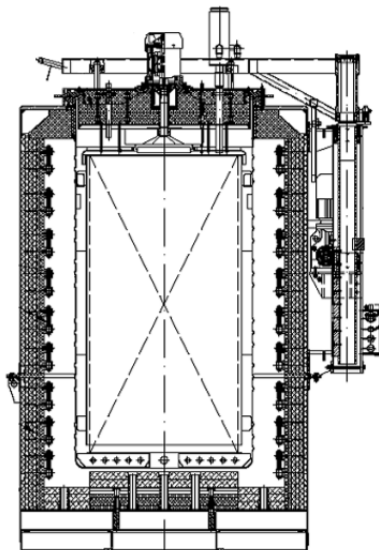
5.1. Piec węglbny

Model MC został wykorzystany do symulacji sprzężonej wymiany ciepła podczas stanu ustalonego pracy pieca węglbny. Wyniki zostały porównane do modelu S2S Fluent. Szczegółowy opis można znaleźć w pełnym tekście pracy oraz artykule [52].

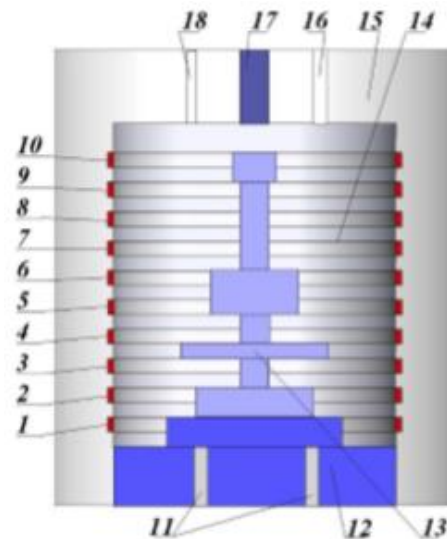
Piece tego typu są wykorzystywane w przemyśle w procesie azotowania części metalowych, dzięki czemu metal zyskuje powłokę, cechującą się zwiększoną twardością i odpornością na zużycie. Azotowanie przebiega w atmosferze kontrolowanej, mieszaninie 20% amoniaku i 80% azotu w temperaturze od 753 do 973K .

Piec składa się z komory węglbnej, o średnicy 0.6m i wysokości 0.9m , w której umieszcza się azotowaną część, w tym przypadku wał (Rys. 18Rys. 1). Komora wsparta jest na czterech łapach, otoczonych cegłą izolacyjną. Na cylindrycznej ścianie bocznej znajduje się 10 elektrycznych grzałek, o łącznej mocy maksymalnej 40kW . Całość jest zaizolowana warstwą wełny mineralnej. Czynniki azotujący o temperaturze 300K wpływają do komory kanałem, znajdującym się w górnej pokrywie. W pokrywie znajduje się również kanał odpływowy. Geometria została uproszczona i nie uwzględnia obecności wiatraka oraz gazoszczelnej retorty. Uproszczenia nie wpływają na bilans energetyczny układu.

Podczas symulacji łączna moc wszystkich grzałek była równa 4kW , założona jako objętościowe źródło energii. Na zewnątrz warstwy izolacyjnej występuje konwekcja naturalna. Wewnątrz komory założono emisyjność ścian równą 1 . Siatka CFD miała rozmiar 30k , natomiast rozdzielczość siatki ortokartezjańskiej wynosiła $20 \times 20 \times 22$. Liczba promieni emitowanych przypadająca na element wynosiła 10k . Przykładowe wyniki przedstawia Rys. 19.

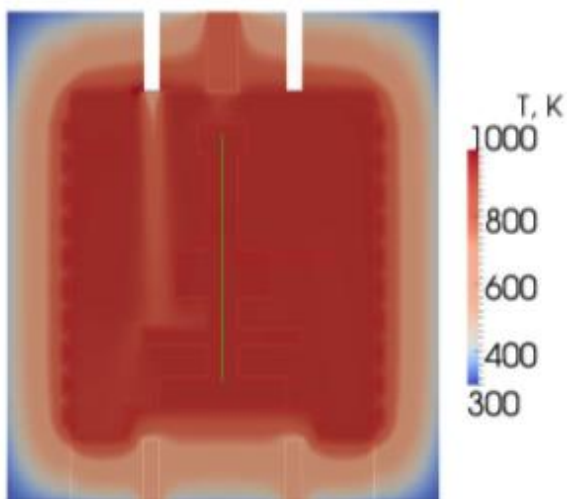


a) Rysunek techniczny, udostępnione przez Seco/Warwick Group

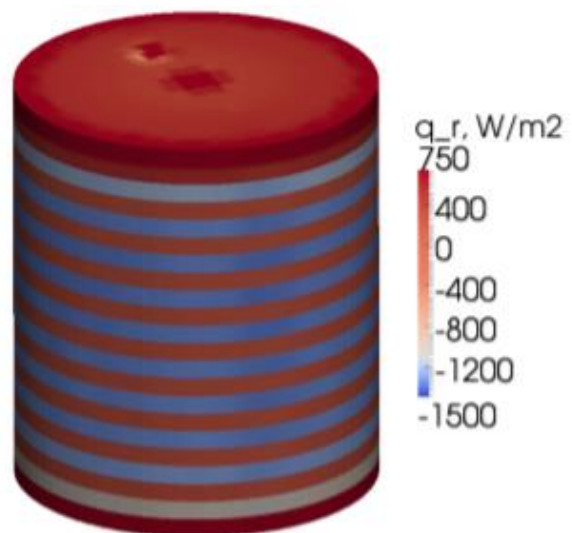


b) Przekrój przez model geometryczny 3D użyty podczas symulacji

Rys. 18: Przekrój w pionowej płaszczyźnie symetrii przez cylindryczny piec węglony.



a) Pole temperatury w pionowej płaszczyźnie symetrii



b) Radiacyjny strumień ciepła na powierzchni komory oraz grzałek elektrycznych

Rys. 19: Wyniki modelowania pracy pieca węglonego.

Symulacja pozwoliła na sporządzenie bilansu energii pieca węglonego, wyznaczenie pola temperatury oraz radiacyjnych strumieni na grzałkach. Wyniki wykazały, że temperatura wale, czyli części azotowanej, wynosi $967 \pm 4 \text{K}$, a tym samym nie spełnia wymogów jakościowych procesu. W celu wyrównania temperatury w komorze należy zastosować wentylator. Pomimo zadanej jednakowej mocy elektrycznej, radiacyjny strumień ciepła grzałek będących na skraju ściany jest wyraźnie mniejszy. Powodem jest niższa temperatura tych grzałek na skutek zwiększonego oddawania ciepła do warstwy izolacyjnej. Wykazano, iż do utrzymania wymaganej temperatury wewnątrz komory niezbędne jest wykorzystanie tylko 10% maksymalnej mocy grzałek. Porównanie wyników modelu MC z S2S wykazało bardzo dobrą zgodność. W przypadku modelu MC niezbilansowanie radiacyjnych strumieni ciepła wyniosło $< 0.7\%$.

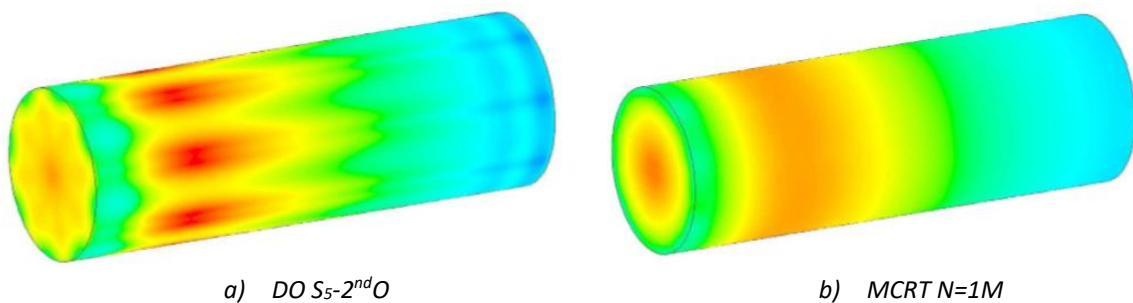
5.2. Komora wypełniona gazem szarym

Do obliczeń wykorzystano geometrię oraz warunki brzegowe dla nieizotermicznej cylindrycznej komory, opisanej w rozdziale 4.2. Wyniki prezentowane poniżej mają na celu porównanie modeli DO oraz MC pod względem jakości rozwiązania oraz szybkości obliczeń, a także wykazanie zasadności stosowania lokalnego zagęszczenia siatki ortokartezjańskiej.

Efekt promienia

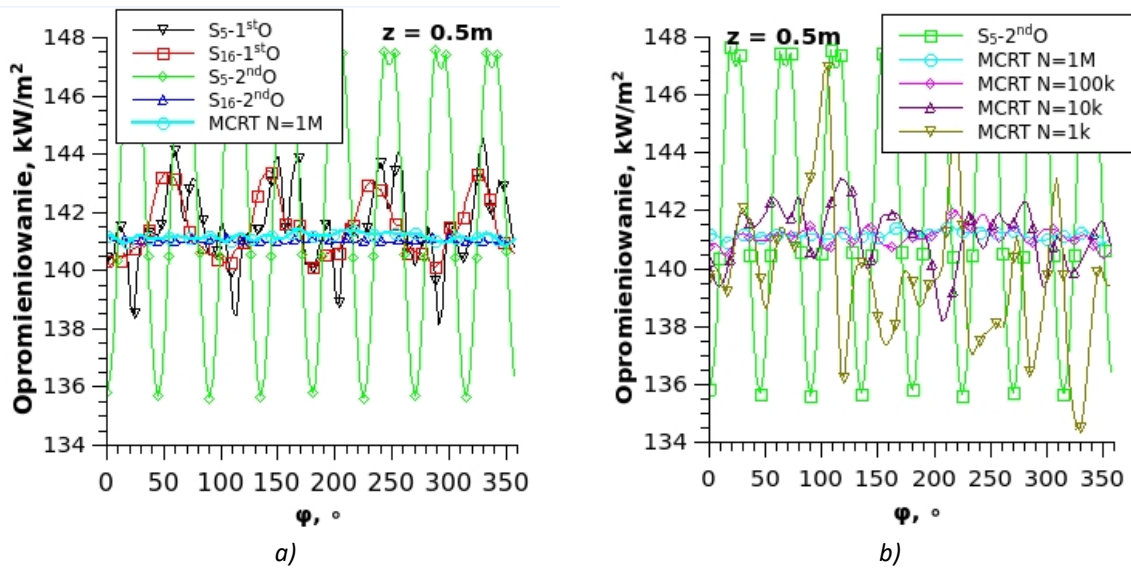
Efekt promienia (ang. ray effect) nazywa się pogorszenie jakości rozwiązania RTR (1) spowodowane jego dyskretyzacją kątową [53]. Efekt jest obecny w metodzie DO i objawia się zwiększonym transportem radiacji w kierunkach wynikających z podziału kąta bryłowego. Jest on szczególnie widoczny w przypadku gorących obszarów w ośrodku lub na powierzchniach brzegowych. Innym efektem, spowodowanym dyskretyzacją przestrzenną kierunkowego RTR oraz faktem, iż siatka nie jest prostopadła do kierunku rozwiązywania RTR, jest tzw. efekt pozornego rozpraszania (ang. false diffusion or false scattering) [53]. Powoduje on, że rozwiązanie, które powinno cechować się ostrym schodkowym zakończeniem, jest wygładzone i rozmyte. Efekt promienia oraz pozorne rozpraszanie są sobie przeciwstawne.

Przeprowadzono test, w którym wygenerowane zostały rozwiązania przy użyciu modeli DO i MC. W przypadku DO zmieniano liczbę kierunków dyskretnych oraz rząd dyskretyzacji przestrzennej 1st i 2nd. Dla MC zmienną była liczba promieni przypadających na jeden element. Przykładowe wyniki opromieniowania ścian przedstawiają Rys. 20 i Rys. 21.



Rys. 20: Opromieniowanie ścian komory, kolor czerwony 151 kW/m², kolor niebieski 100 kW/m².

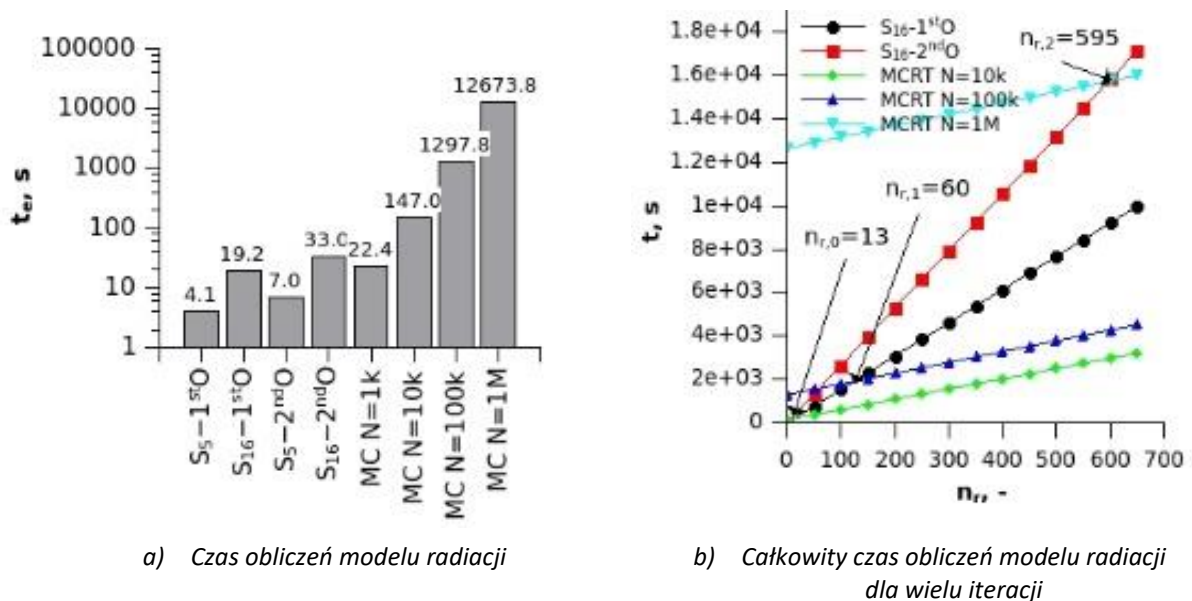
W przypadku modelu DO rozwiązanie regularnie oscyluje wokół rozwiązania średniego, przy czym nie można wyeliminować oscylacji zwiększając tylko rząd metody (liczbę kierunków dyskretnych). Niewystarczające okazuje się również zwiększenie rzędu dyskretyzacji przestrzennej. Zatem potwierdzono występowanie efektu promienia oraz fałszywego rozpraszania. Rozwiązanie metodą MC nie podlega efektowi promienia. Rozwiązanie również oscyluje wokół wartości pseudo-dokładnej, jednak charakter oscylacji jest losowy, co jest specyficzne dla MC. Mierząc jakość rozwiązania normami-p, okazuje się, iż rozwiązania MCRT N=100k oraz DO S₁₆-2ndO są porównywalne.



Rys. 21: Opromieniowanie ściany komory wzdłuż linii próbkującej. Linia jest położona na obwodzie w odległości 0.5m od czoła komory.

Porównanie czasu obliczeń

Porównano czas obliczeń wygenerowanych metodami DO i MC. Model DO oraz śledzenie promieni MC uruchomiono na 8miu wątkach. Fazy pre- i post-processingu w MC wykorzystywały 1 procesor, jednak dla celów porównawczych, ich czas został podzielony przez przyspieszenie MC dla 8 wątków. Wyniki przedstawiono na Rys. 22.



a) Czas obliczeń modelu radiacji

b) Całkowity czas obliczeń modelu radiacji dla wielu iteracji

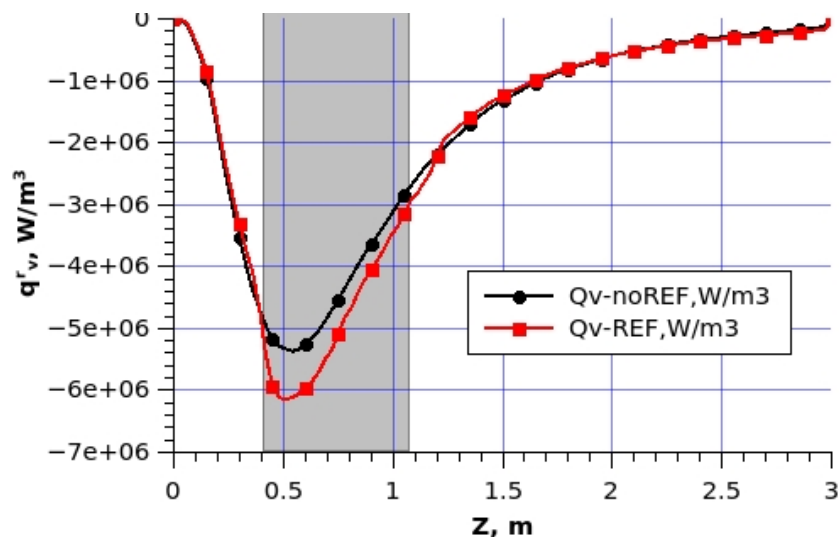
Rys. 22: Wyniki porównania czasu obliczeń modeli DO oraz MC przy różnych ustawieniach.

W przypadku czasu obliczeń jednej iteracji modelu radiacji, MC jest metodą zdecydowanie wolniejszą niż model DO: 6 razy dla MCRT N=1k i S5-1stO, 39 razy dla MCRT N=100k i S16-2ndO (Rys. 22 a)). Spowodowane jest to pracochłonnym procesem śledzenia promieni, na który, w zależności od liczby promieni emitowanych z elementu, przypada od 60 do 99% czasu pracy modelu. W praktyce często spotyka się problemy sprzężonej wymiany ciepła, w których pole temperatury obliczane jest iteracyjnie. Taki proces wymaga cyklicznej aktualizacji rozwiązania problemu radiacji, dlatego co 10-20 iteracji modelu przepływowego, uruchamiany jest model radiacji. Tu warto wspomnieć, iż w

przypadku, gdy własności ośrodka i ścian nie są funkcją temperatury, oraz pole koncentracji cząstek jest ustalone, śledzenie promieni można wykonać jednokrotnie. Podczas kolejnych wywołań modelu radiacji, uruchamiana jest tylko faza post-processingu, w której wartości macierzy D są podstawiane do odpowiednich równań. Dla modelu DO niezbędne jest iteracyjne osiągnięcie rozwiązania, które zajmuje więcej czasu niż proste podstawienie do wzoru w fazie post-processingu MC. W przypadku obliczeń sprzężonej wymiany ciepła okazuje się, że model MC może być konkurencyjny do DO. Porównując model MCRT N=100k oraz S₁₆-2ndO, generujące rozwiązania o zbliżonej jakości, już po 60ciu iteracjach modelu radiacji MC staje się bardziej efektywny (Rys. 22 b)).

Efekt lokalnego zagęszczenia siatki ortokartezjańskiej

Efekt lokalnego zagęszczenia siatki ortokartezjańskiej w przypadku znanego, stałego pola temperatury przedstawia Rys. 23. Zagęszczenie obejmowało obszar $p_{min} = \{-0.2, -0.2, 0.4\}m$ oraz $p_{max} = \{0.2, 0.2, 1.2\}m$ i polegało na podzieleniu komórek na osiem mniejszych. W wyniku zastosowania zagęszczenia otrzymano dokładniejszy wynik, gdyż z większą rozdzielczością odwzorowano profil temperaturowy.



Rys. 23: Wartości objętościowych źródeł ciepła w osi symetrii komory dla przypadków bez i z lokalnym zagęszczeniem siatki ortokartezjańskiej. Obszar zagęszczenia zaznaczony szarym polem.

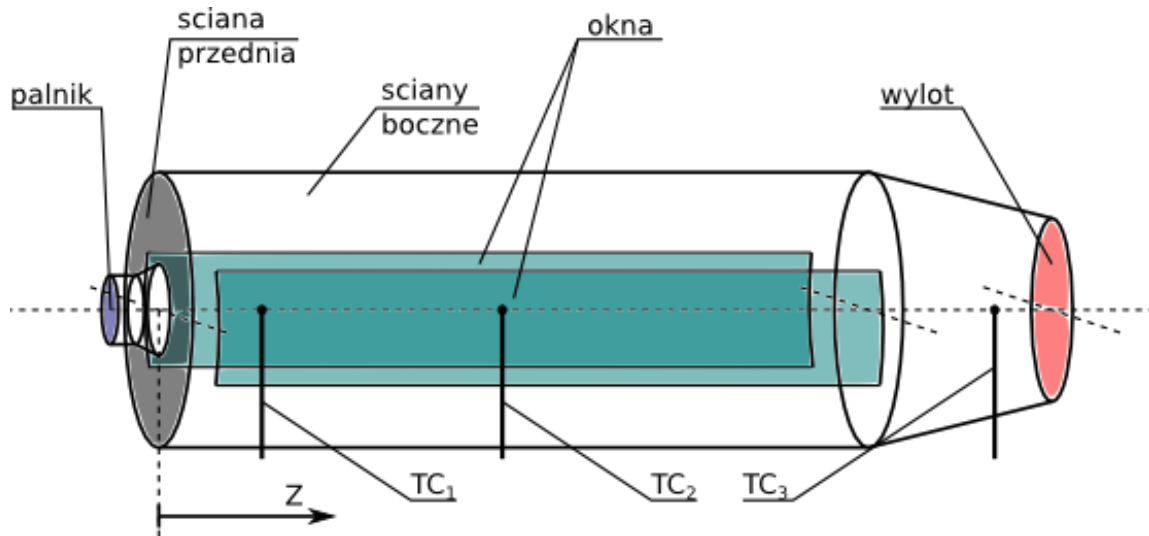
5.3. Spalanie pyłu węglowego na stanowisku 0.5 MW

W rozdziale przedstawiono modelowanie spalania pyłu węglowego w atmosferach powietrznej oraz mieszaninie CO₂, O₂ i H₂O w testowej komorze spalania, zainstalowanej w Instytucie Energetyki w Warszawie. Symulacje przeprowadzono używając modelu OpenFoam MC (przypadki nazwano AIR-OF, OXY-OF) i porównano z wynikami pomiarów na stanowisku. Dodatkowo, przypadek powietrzny obliczono modelem Fluent DO (AIR-FI).

Schemat testowej cylindrycznej komory spalania o długości 3.92m oraz średnicy 0.64m przedstawia Rys. 24. Na ścianie czołowej komory, chłodzonej płaszczem wodnym, znajduje się pyłowy palnik wirowy. Ściana boczna wyposażona jest w okna inspekcyjne, a pozostała jej część izolowana jest warstwą wełny mineralnej. Warstwa izolacyjna znajduje się w pewnej odległości od płaszcza komory spalania, tworząc szczelinę przedmuchiwana powietrzem. Trzy termopary mierzą temperaturę w osi.

Obszar palnika zamodelowany był oddzielnie, a rozwiązanie w wylocie z palnika przeniesiono za pomocą interfejsu. Taki zabieg pozwolił znacznie zredukować wielkość siatki i czas obliczeń nie

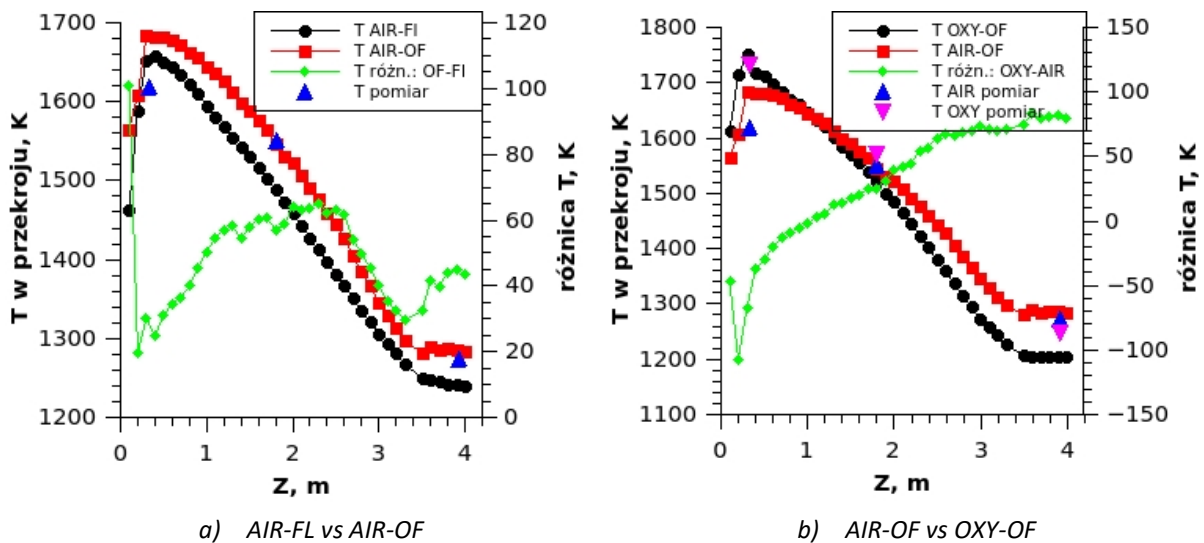
wpływając na jakość rozwiązania. Siatka modelu komory miała 356k komórek. Rozdzielczość siatki ortokartezjańskiej ustawiono na 12x12x60.



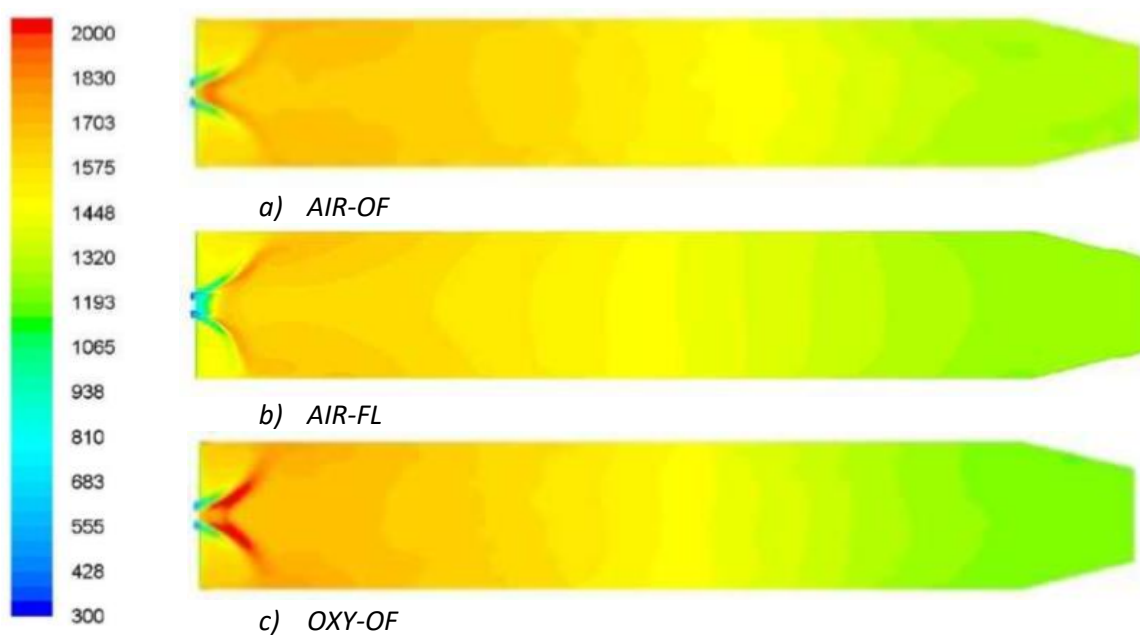
Rys. 24: Schemat testowej komory spalania.

Podczas testów i symulacji spalano węgiel o wartości opałowej 24.58 MJ/kg, zawartości wilgotności 4.2%, popiołu 11.7% i części lotnych 33.7%, w ilości 47.9 kg/h. Średnice cząstek przybliżono rozkładem Rosina-Rammlera, którego parametry wyznaczono na podstawie analizy sitowej. Do spalania węgla wykorzystano model FR-ED z reakcjami homo- i heterogenicznymi. Stałe kinetyczne oraz współczynniki dyfuzji składników przyjęto na podstawie literatury [54, 55]. Temperatura utleniacza pierwotnego wynosiła 338K, wtórnego 553K. Dla ściany czołowej przyjęto temperaturę 1000K, natomiast na ścianie bocznej zdefiniowano strumień ciepła obliczony jako suma konwekcyjnego i radiacyjnego strumienia ciepła. Na oknach inspekcyjnych zadano strumień ciepła wynikający z radiacyjnej wymiany ciepła z otoczeniem.

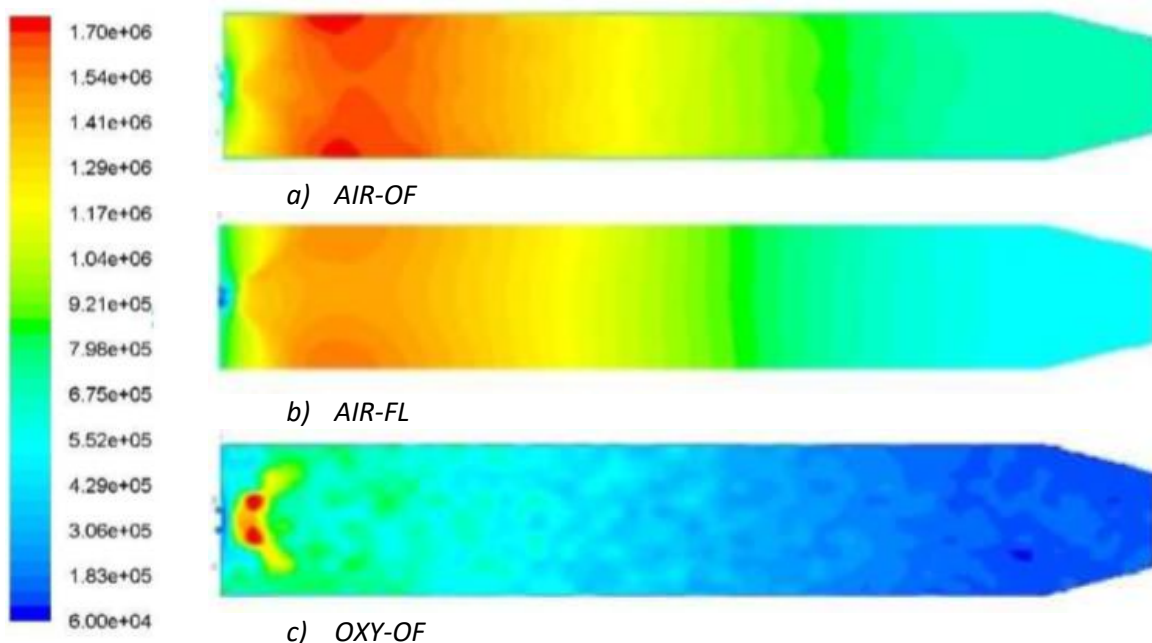
W przypadku modelu MC liczba promieni przypadająca na element wynosiła 400k. Emisyjność ścian komory ustawiono na 0.9, a ścian bocznych na 1.0. Emisyjność cząstek węgla równa była 0.9. Współczynnik absorpcji ośrodka w przypadku powietrznym wynosił 1.0m^{-1} , natomiast w przypadku oxy-spalania wyliczany był modelem WSGG. Do porównania użyto model DO S_{16} .



Rys. 25: Porównanie profili temperatury wzdłuż osi komory spalania. Na wykresach zaznaczono wyniki pomiarów.



Rys. 26: Porównanie pól temperatury (K) w płaszczyźnie symetrii komory.



Rys. 27: Porównanie pól opromieniowania (W/m^2) w płaszczyźnie symetrii komory.

Rys. 25 przedstawia porównanie temperatury w osi symetrii komory otrzymanej w wyniku modelowania w dwóch atmosferach. Naniesiono również punkty odpowiadające wartościom zmierzonym podczas testów. Wyniki symulacji spalania powietrznego otrzymane modelem MC wykazały bardzo dobrą zgodność zarówno z modelem Fluent DO, jak również wynikami testów. Różnice nie przekraczają 60K. Bardzo dobrą zgodność widać również w przypadku pól temperatury (Rys. 26 a), b)) oraz opromieniowania (Rys. 27 a), b)).

W przypadku modelowania oxy-spalania wyniki otrzymane modelem OXY-OF wykazały bardzo dobrą zgodność z wynikami pomiarów na stanowisku (Rys. 25 b)). Pola temperatury oraz opromieniowania przedstawiają Rys. 26 c) oraz Rys. 27 c).

Przypadek spalania w powietrzu lokalnie zagęszczono siatkę ortokartezjańską w pobliżu wylotu z palnika. Analiza wyników nie wykazała znaczących różnic w rozwiązaniach pomiędzy siatką bez i z lokalnym zagęszczeniem. Powodem braku wyraźnych różnic jest obecność zimnego gazu wylatującego z palnika przy jednoczesnej obecności gorących cząstek węgla. Dlatego też zagęszczenie siatki nie spowodowało znacznej różnicy w energii radiacji wypromieniowywanej z komórki.

Reasumując, model MC jest w pełni zdolny do symulacji spalania pyłu węglowego w atmosferach powietrznej oraz modyfikowanej.

6. Podsumowanie

W pracy rozwinięto, zweryfikowano oraz zastosowano w praktyce model radiacyjnej wymiany ciepła wykorzystujący metodę Śledzenia Promieni Monte Carlo. Model może być używany w problemach sprzężonej wymiany ciepła w obszarach obliczeniowych o dowolnych kształtach w ośrodku nieaktywnym, aktywnym szarym, nieszarym oraz w obecności cząstek i cechuje się akceptowalnym czasem obliczeń.

Standardowa metoda Monte Carlo jest bardzo kosztowna obliczeniowo, co uniemożliwia jej zastosowanie w praktycznych problemach inżynierskich. Dlatego też, w ramach pracy zbudowano system do śledzenia promieni pracujący na rzadkich hierarchicznych siatkach ortokartezjańskich. Do opisu geometrii brzegowej użyto powierzchni NURBS. Skrócenie czasu obliczeń uzyskano przez ich zrównoleglenie biblioteką OpenMP. Kod jest napisany w C++ i współpracuje z pakietem OpenFoam o otwartym kodzie źródłowym.

Dzięki zastosowaniu powierzchni NURBS możliwe jest przybliżenie geometrii o dowolnym kształcie. Model może być stosowany w obszarach o wklęsłych i zacienionych powierzchniach. Udowodniono, iż wykorzystanie rzadkich siatek ortokartezjańskich do śledzenia promieni powoduje przyspieszenie obliczeń 40 – 90 razy w porównaniu do standardowej metody MC, pracującej na gęstej siatce CFD. Przyspieszenie jest tym większe im większa jest różnica w rozdzielczościach siatek ortokartezjańskiej i CFD. W wyniku zrównoleglenia kodu stwierdzono sześciokrotne skrócenie czasu obliczeń na ośmioprocessorowej maszynie. Nieszare własności ośrodka są uwzględnione modelem WSGG, rozwiniętym m.in. przez G. Węcla.

Model został pozytywnie zweryfikowany na przykładach obliczenia wartości współczynnika konfiguracji, wymiany ciepła w ośrodku nieaktywnym, aktywnym szarym (różnice w stosunku do rozw. wzorcowego $\leq 1.5\%$) i aktywnym nieszarym (różnice $\leq 5\%$).

W praktyce, model MC zastosowano do obliczeń sprzężonej wymiany ciepła podczas ustalonego stanu pracy pieca węglowego. Uzyskano bardzo dobrą zgodność wyników z modelem S2S Fluent i potwierdzono zdolność modelu do pracy w przypadku geometrii z przysłoniętymi jej fragmentami.

Przewaga modelu MC nad powszechnie używanym w praktyce inżynierskiej DO została wykazana na przykładzie symulacji komory spalania wypełnionej gazem szarym. W przeciwieństwie do DO, rozwiązanie MC nie jest podatne na efekty promienia i pozornego rozpraszania. W przypadku symulacji sprzężonej wymiany ciepła, w której rozwiązanie modelu radiacji generowane jest wielokrotnie co 10-20 iteracji przepływu, model MC może być konkurencyjny pod względem czasu obliczeń do DO. Uwarunkowane jest to tym, że w przypadku, gdy własności ośrodka nie zależą od temperatury i składu gazu, macierz radiacyjnych współczynników wymiany ciepła jest wyznaczana w pierwszej iteracji. W

każdej następnej iteracji, wartości są podstawiane do równań, co jest szybsze niż otrzymanie zbieżnego rozwiązania modelem DO. Wykazano, że powyżej 60ciu iteracji modelu radiacji, model MC jest mniej kosztowny obliczeniowo niż DO. Na tym przykładzie wykazano również zasadność stosowania lokalnego zagęszczenia siatki ortokartezjańskiej. Siatkę zagęszczono w rejonie największego gradientu temperatury, uzyskując różnice w wynikach rzędu 16%.

Model MC użyto do symulacji procesu spalania pyłu węglowego na stanowisku doświadczalnym o mocy 500kW zainstalowanym w Instytucie Energetyki w Warszawie. Symulacje dotyczyły spalania w atmosferach powietrznej oraz mieszaninie O_2 i CO_2 , a ich wyniki zostały skonfrontowane z pomiarami temperatury oraz tlenu. W przypadku spalania w atmosferze powietrznej, ośrodek traktowano jako gaz szary o stałym współczynniku absorpcji. Dodatkowo ten przypadek przeliczono modelem DO Fluent. Wyniki otrzymane modelem MC wykazały bardzo dobrą zgodność z wynikami symulacji DO Fluent oraz pomiarami na stanowisku (różnice < 5%) zarówno jeżeli chodzi o temperaturę, jak i stężenie O_2 na wylocie. W przypadku spalania w mieszaninie O_2 i CO_2 zastosowano model WSGG, uwzględniający spektralne własności ośrodka gazowego. Otrzymano bardzo dobrą zgodność przewidywanych temperatur z pomiarami stanowiskowymi – różnice były $\leq 3\%$. Wartość O_2 na wylocie oraz udział niespalonego węgla w popiele lotnym na wylocie z komory są wyższe w przypadku symulacji niż w pomiarach. Znaczące różnice w tym względzie można przypisać zastosowanej kinetyce spalania węgla, której stałe zostały zaczerpnięte z literatury i nie są stosowne do węgla użytego podczas testów.

Podsumowując wyniki pracy, należy stwierdzić, że rozwinięty w pracy model Śledzenia Promieni Monte Carlo może być z powodzeniem stosowany do modelowania sprzężonych problemów wymiany ciepła w obecności ośrodków szarych, nieszarych oraz cząstek.

7. Propozycje dalszych prac

Poniżej znajduje się lista zagadnień, którą, zdaniem autora warto zgłębić, chcąc dalej rozwijać zaprezentowaną metodę:

- Odczyt parametrów powierzchni NURBS bezpośrednio z pliku geometrii CAD. Efektem byłoby przyspieszenie czasochłonnego procesu tworzenia powierzchni NURBS z punktów siatki CFD.
- Zmiana struktury siatki ortokartezjańskiej na taką, która dopuszcza sytuację, gdy jedna powierzchnia NURBS, reprezentująca granicę obszaru obliczeniowego, należy do kilku komórek tej siatki. Efektem będzie zmniejszenie liczby powierzchni NURBS oraz liczby objętości ograniczających, a tym samym przyspieszenie obliczeń śledzenia promieni.
- Przystosowanie kodu MC do zrównoleglenia obliczeń na maszynach z pamięcią rozproszoną. Likwidacja ograniczenia na liczbę procesorów dostępną na maszynie z pamięcią współdzieloną.
- Uwzględnienie rozpraszania promieniowania na cząstkach.
- Obecna struktura modelu pozwala na jej rozszerzenie o zaawansowany model własności ośrodka.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Kalos M. H., Whitlock P. A.: Monte Carlo Methods, Second, Revised and Enlarged Edition. Wiley-Vch Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008.
- [2] Fleck J.: The calculation of non-linear radiation transport by a Monte Carlo method: statistical physics. *Methods in Computational Physics*, 1 (1961), pp. 43-65.
- [3] Howell J., Perlmutter M.: Monte Carlo solution of thermal transfer in a nongray nonisothermal gas with temperature dependent properties. *AIChE Journal*, 10 (1964), No. 4, pp. 562-567.
- [4] Hottel H. C., Hoyt C.: Radiant Heat Transmission. in William H. McAdams (ed.), "Heat Transmission", 3rd ed., McGraw-Hill, New-York, 1954.
- [5] Modest M. F.: Radiative Heat Transfer, Second Edition. Academic Press An imprint of Elsevier Science, 2003.
- [6] Hottel H. C., Cohen E. S.: Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: Allowance for nonuniformity of gas temperature. *AIChE Journal*, 4 (1958), pp. 3-14.
- [7] Bayazitoglu Y., Higenyi J.: The Higher-Order Differential Equations of Radiative Transfer: P3 Approximation. *AIAA*, 17 (1979), No. 4, pp. 424-431.
- [8] Higenyi J.: Higher Order Differential Approximation of Radiative Energy Transfer in a Cylindrical Gray Medium. Ph.D. dissertation, Rice University, 1979.
- [9] Liu F., Swithenbank J., Garbett E. S.: The Boundary Condition of the PN-Approximation Used to Solve the Radiative Transfer Equation. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 35 (1992), No. 8, pp. 2043-2052.
- [10] Fiveland W. A.: Discrete ordinates methods for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media. *ASME Journal of Heat Transfer*, 109 (1987), pp. 809-812.
- [11] Truelove J. S.: Discrete-ordinates solutions of the radiation transport equation. *ASME Journal of Heat Transfer* 109 (1987), No. 4, pp. 1048-1051
- [12] Białocki R. A.: Applying BEM to calculations of temperature field in bodies containing radiating enclosures. In C. A. Brebbia and G. Maier, *Boundary Elements VII*, 2 (1985), pp. 35-50.
- [13] Białocki R. A., Grela Ł.: Application of the boundary element method in radiation. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2 (1995), No. 36, pp. 351-364.
- [14] Węcel G.: Mathematical modelling of coupled radiative and convective heat transfer. Ph.D. Thesis. Silesian University of Technology, Institute of Thermal Technology, Gliwice 2003.
- [15] Coelho P. J., Carvalho M. G.: A conservative formulation of the discrete transfer method. *Journal of Heat Transfer*, 119 (1997), No. 1, pp. 118-128.
- [16] Lockwood F. C., Shah N. G.: A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. 18th International Combustion Symposium, Combustion Institute, (1981), pp. 1405-1414.
- [17] Zeeb C. N., Burns P. J., Branner K., Dolaghan J.: User's manual for MONT3D-Version 2.4. Department of Mechanical Engineering. Colorado State University, Fort Collins, CO, 1999.
- [18] Deshmukh K. V., Modest M. F., Haworth D. C.: Direct numerical simulation of turbulence-radiation interactions in a statistically one-dimensional nonpremixed system. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 109 (2008), pp. 2391-2400.
- [19] Hunsaker I. L.: Parallel-distributed, reverse Monte-Carlo radiation in coupled, large eddy combustion simulations. Ph.D. dissertation, The University of Utah, Chemical Engineering, Nov. 2013.
- [20] Snegirev A. Y., Isaev S.: Turbulent combustion and thermal radiation in a massive fire. *Advanced Combustion and Aerothermal Technologies*, (2007), pp. 197-209.
- [21] Trivic D. N., Amon C. H.: Modeling the 3-D radiation in anisotropically scattering media by two different numerical methods. *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), pp. 2711-2732.

- [22] Trivic D. N.: 3-D radiation modeling of nongray gases-particles mixture by two different numerical methods. *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*, 70 (2014), pp. 298-312.
- [23] Schnell U., Schneider R., Magel H. C., Risio B., Lepper J., Hein K. R. G.: Numerical simulation of advanced coal-fired combustion systems with in-furnace NO_x control technologies. 3rd Int. Conf. on Combustion Technologies for a Clean Environment, (1995), Lisbon, Portugal.
- [24] Tesse L., Dupoirieux F., Taine J.: Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *Int. Journal of Heat and Mass Transfer* 47 (2004), pp. 555-572.
- [25] Abert O. P.: Interactive Ray Tracing of NURBS Surfaces by Using SIMD Instructions and the GPU in Parallel. Master's Thesis. University of Koblenz-Landau, 2005.
- [26] Goldsmith J., Salmon J.: Automatic Creation of Object Hierarchies for Ray Tracing. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 7 (1987), No. 5, pp. 14-20.
- [27] Martin W., Cohen E., Fish R., Shirley P.: Practical Ray Tracing of Trimmed NURBS Surfaces. *Journal of Graphical Tools*, 5 (2000), No. 1, pp. 27-52.
- [28] Smits B.: Efficiency issues for ray-tracing. *Journal of Graphics Tools*, 3 (1998), No. 2, pp. 1-14.
- [29] Zhang H., Modest M. F.: A multi-scale full-spectrum correlated $-k$ distribution for radiative heat transfer in inhomogeneous gas mixtures. *JQSRT* 73 (2002) No. 2-5, pp. 349-360.
- [30] Amanatides J., Woo A.: A Fast Voxel Traversal Algorithm for Ray Tracing. In *Eurographics Conference*, (1987).
- [31] Bialecki R. A., Węcel G.: Solution of conjugate radiation convection problems by a BEM FVM technique. *Journal for Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 84 (2004) pp. 539-550.
- [32] Fujimoto A.: Accelerated Ray Tracing. *Proc. Computer Graphics*, Tokyo (1985), pp. 41-65.
- [33] Farin G.: *Curves and Surfaces for Computer Aided Geometric Design: A Practical Guide*. Academic Press Inc., New York, NY, USA, 1990.
- [34] Piegl L., Tiller W.: *The NURBS Book*, Monographs in Visual Communication, 2nd edition. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1997.
- [35] Pabst H. F., Springer J. P., Schollmeyer A., Lenhart R., Lessig C., Froehlich B.: Ray Casting of Trimmed NURBS Surfaces on the GPU. *Interactive Ray Tracing 2006*, IEEE Symposium. (2006), pp. 151-160.
- [36] Whitted T.: An improved illumination model for shaded display. *Communications of the ACM*, 23 (1980), No. 6, pp. 343-349.
- [37] Toth D. L.: On Ray Tracing Parametric Surfaces. *Computer Graphics (SIGGRAPH '85 Proceedings)*, 19 (1985), No. 3, pp. 171-179.
- [38] Abert O. P., Geimer M., Muller S.: Direct and Fast Ray Tracing of NURBS Surfaces. *Interactive Ray Tracing 2006*, IEEE Symposium. (2006), pp. 161-168.
- [39] Kajiya J. T.: Ray tracing parametric patches. *Computer Graphics (SIGGRAPH '82 Proceedings)*, 16 (1982), No. 3, pp. 245-254.
- [40] Efremov A., Havran V., Seidel H. P.: Robust and Numerically Stable Bézier Clipping Method for Ray Tracing NURBS Surfaces. *Proceedings of the 21st Spring Conference on Computer Graphics SCCG'05*, (2005) pp. 127-135.
- [41] Farmer J. T., Howell J. R.: Comparison of Monte Carlo Strategies for Radiative Transfer in Participating Media. *Advances in Heat Transfer*, 31 (1998) pp. 333-425
- [42] Mehta R. S.: Detailed modeling of soot formation and turbulence-radiation interactions in turbulent jet flames. Ph.D. dissertation, The Pennsylvania State University, Department of Mechanical Engineering, 2008.

- [43] dos Santos A., Teixeira J., de Farias T., Teichrieb V., Kelner J.: kd-tree traversal implementations for ray tracing on massive multiprocessors: A comparative study". In Computer Architecture and High Performance Computing, 2009. SBAC-PAD'09. 21st Int. Symp on, IEEE, (2009) pp. 41-48.
- [44] A Message-Passing Interface Standard, Version 3.0, September, 2012.
- [45] Chandra R., Dagum L., Kohr D., Maydan R., McDonald J., Menon R.: Paralell Programming in OpenMP. Morgan Kaufmann Publishers, Academic Press, 2001.
- [46] Kopytov N. P., Mityushov E. A.: The Universal Algorithm of Uniform Distribution of Points on Arbitrary Analytic Surfaces in ThreeDimensional Space. Fundamental Research, 4 (2013), p. 618-622.
- [47] Wecel G., Ostrowski Z., Bialecki R.: A novel approach of evaluating absorption line black body distribution function employing proper orthogonal decomposition. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 111 (2010), No. 2, pp. 309-317.
- [48] Bordbar M. H., Wecel G., Hyppanen T.: A line by line based weighted sum of gray gases model for inhomogeneous CO₂-H₂O mixture in oxy-fired combustion. Combustion and Flame, 161 (2014), pp. 2435-2445.
- [49] Wecel G., Ostrowski Z., Kozolub P.: Absorption line black body distribution function evaluated with proper orthogonal decomposition for mixture of CO₂ and H₂O. Int. Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 24 (2014) No. 4, pp. 932-948.
- [50] Cengel Y. A.: Heat Transfer: A Practical Approach, International Edition, 2nd Edition. McGraw-Hill, 2003.
- [51] Porter R., Liu F., Pourkashanian M., Williams A., Smith D.: Evaluation of solution methods for radiative heat transfer in gaseous oxyfuel combustion environments. JQRST 111 (2010), pp. 2084-2094.
- [52] Kuczyński P., Bialecki R.: Radiation heat transfer model using Monte Carlo ray tracing method on hierarchical ortho-Cartesian meshes and non-uniform rational basis spline surfaces for description of boundaries. Archives of Thermodynamics, 35 (2014), No. 2, pp. 65-92.
- [53] Coelho P. J.: The role of ray effects and false scattering an the accuracy of the standard and modified discrete ordinates methods. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 73 (2002), No. 2-5, pp. 231-238.
- [54] Chen L., Zheng Yong Sze., Goniem A. F.: Oxy-fuel combustion of pulverized coal: Characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling, Progress in Energy and Comb. Science, 38 (2012) pp. 156-214
- [55] Toporov D., Bocian P., Heil P., Kellerman A., Stadler H., Tschunko S., Forster M., Kneer R.: Detailed investigation of a pulverized fuel swirl flame in CO₂/O₂ atmosphere. Combustion and Flame, 155 (2008), pp. 605-618.