

REDUCCION DE TIEMPOS DE EJECUCION EN EL MODELADO NUMERICO DE LA RADIACION DE GASES

Pablo Marino, A.Eugenia Blangino, Eduardo Brizuela
Departamento de Ingeniería Mecánica y Naval - Facultad de Ingeniería
Universidad de Buenos Aires – Paseo Colón 850
(1063) Capital Federal – Argentina
E-mail: ebrizue@fi.uba.ar

RESUMEN

En el proceso de modelar la combustión de gas natural utilizando métodos de simulación numérica es primordial poder estimar la radiación generada por los gases de combustión.

El código más apropiado para este fin es RADCAL [15], que predice la intensidad espectral de la radiación emitida por un volumen no isoterma conteniendo concentraciones no uniformes de gases. RADCAL resuelve la ecuación de transferencia de energía radiante para un medio emisor y absorbente (no dispersivo) descomponiéndolo en una cantidad de elementos uniformes. El cálculo de los coeficientes de absorción para cada una de las especies es llevado a cabo mediante modelos de banda angosta y una combinación de propiedades espectrales tabuladas y aproximaciones teóricas de bandas moleculares.

Sin embargo, la utilidad de RADCAL se ve afectada por el elevado costo computacional de su uso. En estas condiciones, se han generado modificaciones al código para acelerar su ejecución y así permitir su uso en aplicaciones de CFD.

Como para cada geometría y discretización deben practicarse estos cálculos muchas veces bajo las mismas condiciones de entrada, se optó por precalcular los coeficientes de absorción de CO₂ y H₂O, almacenándolos en forma tabulada por bandas de frecuencia, para cada conjunto de combinaciones de presión y temperatura de los gases y temperatura de las paredes. De esta forma se obtuvieron sustanciales mejoras en los tiempos de ejecución, dependiendo -para cada configuración- de la discretización utilizada. En este trabajo se resumen los principales resultados.

ABSTRACT

In the process of numerical modelling of combustion of natural gas the estimation of radiation from the products of combustion is fundamental.

The RADCAL code [15] is most appropriate for this task, predicting the spectral intensity of the radiation emitted by a non-isothermal volume containing non-uniform concentrations of gases. RADCAL solves the equation of transfer of radiant energy for an emitting and absorbing (non-dispersing) medium by considering it formed by a number of volume elements of uniform composition. The calculation of absorption coefficients for each species is done by means of narrow band models and a combination of tabulated spectral properties and theoretical approximations to molecular bands.

However, the usefulness of RADCAL is reduced by its high computational cost. In view of this the code needs to be modified to reduce execution times and allow its use in CFD applications.

Since the same calculations must be performed many times for each geometry and discretization for the same initial conditions, the absorption coefficients for CO₂ and H₂O were precomputed and stored in look-up tables in frequency bands, for each set of gas pressure and temperature and wall temperatures. In this manner substantial improvements in execution times were obtained, depending on the configuration and discretization. Main results are presented in this paper.

INTRODUCCION

Cuando en el tratamiento ingenieril de llamas y de la combustión en recintos (como calderas u hornos) la incidencia de la radiación resulta significativa, la absorción y emisión de los gases y hollín intervinientes, y el efecto de la reflexión, absorción y emisión en las paredes, deben ser considerados a fin de ajustar el modelo a usar. Además, se ha encontrado que la adecuada predicción de la transferencia de calor por radiación en recintos es crucial para un más preciso modelado de la producción de contaminantes.

En estado estacionario, la teoría provee ecuaciones que relacionan propiedades y la temperatura de los gases que llenan el recinto con la cantidad de calor recibida y la temperatura de las paredes que lo limitan; de acuerdo con los valores que se conozcan para estas cantidades, deben hallarse las desconocidas resolviendo las ecuaciones de balance de calor por radiación.

Usualmente no es posible hallar soluciones simples para las ecuaciones de transferencia radiativa y conservación de la energía, ya que las hipótesis simplificadoras deterioran en muchos casos la precisión de los resultados. Por otra parte, para el cálculo de la radiación en la combustión del gas natural es necesario considerar a los gases que constituyen la mezcla como participantes en la absorción, dispersión y emisión de radiación infrarroja.

Para calcular numéricamente la radiación existen diversos metodos: el de Zonas [1], Monte Carlo [2], de Flujo [3], la aproximación P-N [4], Ordenadas Discretas [5] [6] [7] [8] [9] [10], Elementos Finitos [10] [11], Volúmenes finitos [12], y Transferencia Discreta [13] [14]. Estos, a su vez, admiten diferentes formulaciones en lo se refiere a consideraciones de la geometría y las características de los procesos y tipos de flujos intervinientes.

Un código muy apropiado para esta tarea cuando el medio es participante es RADCAL [15], que resuelve la ecuación de transferencia de energía radiante para un medio emisor y absorbente (no dispersivo) descomponiéndolo en una cantidad de elementos uniformes. El cálculo de los coeficientes de absorción para cada una de las especies es llevado a cabo mediante modelos de banda angosta y una combinación de propiedades espectrales tabuladas y aproximaciones teóricas de bandas moleculares. Sin embargo, RADCAL no es de utilidad en este contexto por ser computacionalmente prohibitivo, por los que se analizaron algunas de las posibles modificaciones para acelerar su ejecución, y así permitir su uso en el modelado de la radiación.

EXPERIMENTO NUMERICO

La investigación llevada a cabo en este trabajo consistió en calcular el balance de energía en un recinto cúbico recalentado y lleno de gas participante, con paredes no grises, usando el método de las ordenadas discretas, que propone el cálculo del flujo radiante en varias direcciones alrededor de cada punto de la discretización. Se asumió que el medio era homogéneo y se trabajó en estado estacionario para tres tipos de combustión diferentes: completa (CC), incompleta (CI) y rica (CR).

Se utilizaron dos rutinas para el cálculo de cada uno de los casos: el código RADCAL en su versión original y una modificación del mismo precomputando los coeficientes espectrales de absorción que son calculados sobre todo el espectro, en cada punto de la discretización, tantas veces como direcciones se consideren. Se determinó el grado de influencia del tamaño de las tablas donde se almacenaron los coeficientes precalculados en los tiempos de ejecución y en la precisión de los resultados obtenidos.

Se estableció la incidencia del afinamiento en la discretización del recinto en la eficiencia temporal y el ajuste de los resultados.

Originalmente, en el método de ordenadas discretas, las relaciones de transferencia generales están representadas por un conjunto discreto de ecuaciones para la intensidad promedio en cada punto de un

recinto discretizado, sobre un número finito de direcciones ordenadas, en las cuales las integrales sobre ángulos sólidos son reemplazadas por sumas sobre las direcciones ordenadas (16).

En el presente caso, se calcularon las intensidades en cada una de las direcciones ordenadas usando el código RADCAL, que resuelve la ecuación de transferencia radiante:

$$i'_{\lambda} = i'_{\lambda,w} e^{-\kappa_{\lambda}(l)} + \int_0^{\kappa_{\lambda}(l)} i_{b,\lambda}(l^*) \exp[-(\kappa_{\lambda}(l) - \kappa_{\lambda}(l^*))] d\kappa_{\lambda}(l^*) \quad (1)$$

donde i'_{λ} es la intensidad espectral para la longitud de onda,
 $i_{b,\lambda}$ es la función de cuerpo negro de Planck,
 κ_{λ} es la profundidad óptica, definida como

$$\kappa_{\lambda} = \int_0^l a_{\lambda}(l^*) dl^* \quad (2)$$

donde a_{λ} es el coeficiente de absorción espectral; el subíndice w se refiere a la condición de contorno impuesta por la pared.

Se eligió para las pruebas un recinto cúbico a efectos de explotar todas las relaciones de simetría.

El recinto fue discretizado en un número (NP) de puntos y se creó un programa en lenguaje FORTRAN a fin de invocar las rutinas que resuelven la Ecuación (1) y proceder a integrar los flujos radiantes en superficie y volumen para obtener el intercambio de energía radiante global.

En cada punto se definieron ocho octantes y un número (NL) de direcciones (que dependen de la posición del punto relativo a las fronteras). Las direcciones se definen sobre una esfera (cuyo tamaño calcula el programa dependiendo de la discretización elegida y de la posición del punto) a efectos de establecer las direcciones ordenadas alrededor de cada punto para el cálculo de los flujos. Además de esos datos, deben ingresarse los que necesita la rutina RADCAL (temperatura de las paredes y el gas, presiones parciales de los gases intervinientes, y región espectral en la que se desea el cálculo).

En cada una de las invocaciones, RADCAL llama a subrutinas que calculan el coeficiente de absorción de cada uno de los gases presentes.

En los casos considerados, estas rutinas corresponden a las especies CO_2 , H_2O , CO y CH_4 . Como las dos primeras siempre están presentes por ser productos de combustión, los llamados se hacen en todos los casos, mientras que son las únicas especies en el caso de combustión completa CC. El cálculo para CO_2 se hace mediante modelos moleculares para casi todas las bandas de absorción, mientras que para H_2O se aplican ajustes a valores interpolados de tablas. El coeficiente de absorción de CH_4 (especie presente cuando la combustión es rica CR) se calcula con modelos moleculares en algunas bandas y en otras interpolando en tablas. Los valores correspondientes a CO (que junto con O_2 aparecen como productos intermedios en la combustión incompleta CI) resultan de interpolación en tablas.

Como estas subrutinas calculan muchas veces los valores de los coeficientes de absorción en condiciones casi idénticas, se construyeron tablas para cada una de las composiciones gaseosas (CC, CR y CI) para el recinto de prueba, temperaturas e intervalo espectral bajo consideración.

RESULTADOS

El presente trabajo se llevó a cabo en un equipo de escritorio constituido por una PC con un procesador Pentium MMX de 200MHz, con 64 Mb de memoria RAM.

Se encontró que la cantidad de llamadas a RADCAL depende polinómicamente de el producto $NP*NL$.

El costo temporal del algoritmo completo (programa de cálculo del balance energético del recinto con la incorporación de RADCAL como subrutina) es, además, polinómico en $NP*NL$, cualquiera sea el tipo de combustión que se considere. El término en el cual se tiene en cuenta el peso de la ejecución de RADCAL se ve afectado además por el número de bandas en las cuales esta rutina divide al espectro a efectos de resolver la ecuación de transferencia.

Se concluyó que el producto $NP*NL$ era una variable adecuada para medir el crecimiento en los tiempos de ejecución, ya que un análisis de la estructura de los algoritmos involucrados permite ver que el orden asintótico del programa es $(NP*NL)^4$.

El término de orden superior no es, sin embargo, dominante dentro del rango de valores considerados, debido a las constantes ocultas que afectan otros términos, en particular la cantidad de subintervalos en los que se divide el rango completo de números de onda a considerar. Recién cuando $(NP*NL)^3$ es del orden del número de bandas en las que RADCAL divide el espectro, se aprecia un cambio de tendencia en la evolución de la eficiencia temporal. Esto puede notarse en las figuras 1 y 2.

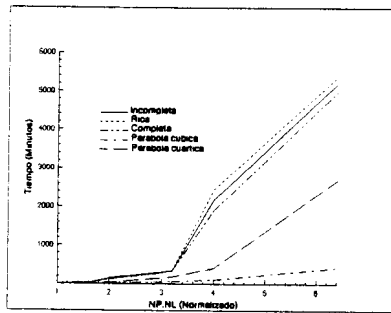


Figura 1: Tiempos de corrida con cálculos completos.

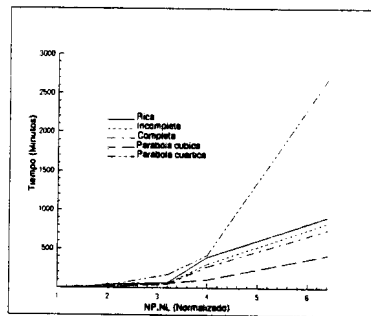


Figura 2: Tiempos de corrida con búsqueda en tabla.

En la primera se muestran los tiempos de ejecución del programa con el cálculo completo de los coeficientes de absorción para CC, CI y CR y, como referencia los valores de las curvas cúbica y cuártica en la variable. En la Fig. 2 se ven los tiempos que resultan de correr el programa con búsqueda de los coeficientes en tablas para los tres casos de combustión, y las parábolas cúbica y cuártica como referencia.

Las figuras 3, 4 y 5 muestran, para los tres tipos de combustión considerada, los tiempos de corrida de ambas versiones del programa.

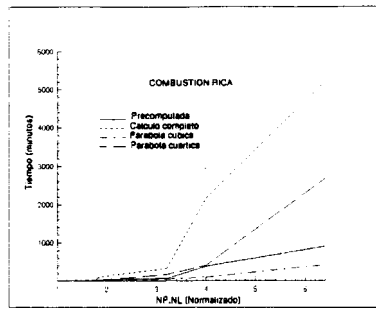


Figura 3: Tiempos de corrida para combustión rica.

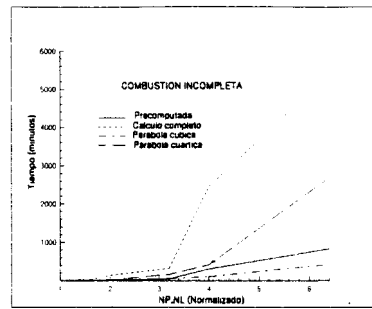


Figura 4: Tiempos de corrida para combustión incompleta.

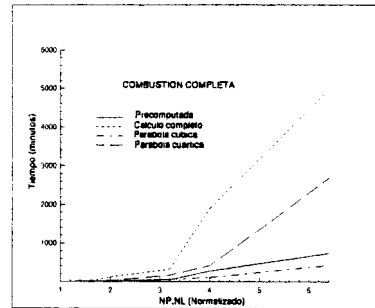


Figura 5: Tiempos de corrida para combustión completa.

Con relación a la precisión en el cálculo de las intensidades, con una tabla mínima (en la cual la cantidad de números de onda sea igual al menor número de subdivisiones del espectro que hace RADCAL) se encontraron discrepancias de hasta un 20% con relación a los valores que se obtienen en la versión de cálculo completa. Se hicieron pruebas construyendo tablas más finas lo que redujo las diferencias al 5%, sin un aumento apreciable del tiempo de corrida reducido, como se aprecia en la siguiente tabla para el caso de combustión completa:

NP*NL (normalizado)	1	1.6	2	3.2	4	6.4
Tiempos para tabla gruesa (h:m:s)	0:01:18	0:03:04	0:12:39	0:47:45	4:37:16	12:52:5
Tiempos para tabla fina (h:m:s)	0:01:28	0:03:38	0:25:02	0:48:02	5:11:59	13:14:0

DISCUSION Y CONCLUSIONES

Los tiempos de corrida para la versión con cálculos completos en el peor caso considerado (la más fina de las discretizaciones con la mayor cantidad de direcciones para el calculo de radiación por punto) insumieron varios días, mientras que con la versión con búsqueda en tablas, no llegó a dieciséis horas.

Como resumen, se puede concluir que la modificación efectuada logra una aceleración en la ejecución del programa de cálculo de radiación de gases de casi un orden de magnitud. La finura de la discretización y/o el número de direcciones adoptados (aunque aumenta el tiempo total de ejecución) no tiene mayor influencia en el grado de mejora aquí reportado.

La modificación aquí reportada quizás no es suficiente para convertir a RADCAL en una herramienta aceptable para cálculos de ingeniería de hornos y calderas. Se continúa esta tarea con el objetivo de hacer aún mayores incrementos en la performance del programa.

REFERENCIAS

- [1]Hottel,H. & Sarofim,A.; *Radiative Transfer*, McGraw Hill (1967).
- [2]Taniguchi,H.; *The Radiative Heat Transfer of Gas in a Three Dimensional System Calculated by Monte Carlo Method*, Bull. JSME, Vol.12, pp 67-78 (1969).
- [3]Lockwood, F. & Shah,N.; *Evaluation of an Efficient Radiation Flux Model for Furnace Prediction Procedures*, Proc. of the VI International Heat Transfer Conference, Toronto, paper EC-6, pp.33 (1978).
- [4]Ratzel, A. & Howell,J.; *Two-Dimensional Radiation in Absorbing-Emitting Media using the P-N Approximation*, J. of Heat Transfer, Vol. 111, pp. 141-147 (1989).
- [5]Chandrasekhar, S.; *Radiative Transfer*, Dover (1960).
- [6]Fiveland,W.; *Discrete-Ordinate Solution of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures*, J. of Heat Transfer, Vol.106, pp.699-706 (1984).
- [7]Fiveland,W. & Jamaluddin, A.; *Three-Dimensional Spectral Radiative Heat Transfer Solutions by the Discrete Ordinates Method*, J. of Thermophysycs and Heat Transfer, Vol.5 No.3, pp.335 (1991).
- [8]Kim, T., & Lee,H.; *Effect of Anisotropic Scattering on Radiative Heat Transfer in Two-Dimensional Rectangular Enclosures*, International J. of Heat and Mass Transfer, Vol.31, pp.1711 (1988).
- [9]Chai, J.,Lee, H. & Patankar, S.; *Treatment of Irregular Geometries using a Cartesian-Coordinates-Based Discrete-Ordinates Method*, HTD-ASME – vol. 244 Radiative Heat Transfer(1993).
- [10]Fiveland, W. & Jesse, J.; *A Finite Element Formulation of the discrete –Ordinates Method for multidimensional Geometries*, HTD-ASME – vol. 244 Radiative Heat Transfer(1993).
- [11]Razzaque, M., Klein, D. & Howell, J.; *Finite Element Solution of Radiative Heat Transfer in a Two-Dimensional Rectangular Enclosure with Gray Participating Media*, J. of Heat Transfer, Vol.105, pp.933-936 (1983).
- [12]Raithby, G. & Chui, E.; *A Finite Volume Method for Predicting Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media*, J. of Heat Transfer, Vol.112, pp.4115-423 (1990).
- [13]Shah, N.; *New Method of Computation of Radiating Heat Transfer in Combustion Chambers. Ph.D dissertation*, University of London (1979).
- [14]Lockwood, F. & Shah, N.; *A New Radiation Solution Method for Incorporation in General Combustion Procedure Prediction*, XVIII International Symposium on Combustion, The Comb. Inst., pp.1405-1414 (1981).
- [15]Grosshandler, W.; *RADCAL: A Narrow-Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment*; NIST Technical Note 1402, US Depart. Of Commerce (1993).
- [16]Siegel,R. & Howell,J.; *Thermal Radiation Heat Transfer*, 3ª. Ed., Taylor & Francis.