

УДК: 544.452.2:519.63

Анализ численного метода решения задачи о распространении пламени по вертикальной поверхности горючего материала

А. А. Шаклеин^а, А. И. Карпов^б, А. А. Болкисев^с

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Россия, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, д. 34

E-mail: ^а mx.oryx@gmail.com, ^б karpov@udman.ru, ^с celsior.izh@gmail.com

Получено 19.10.2017, после доработки — 27.08.2018.

Принято к публикации 11.09.2018.

Снижение пожарной опасности при использовании полимерных материалов является одной из актуальных научно-технических задач. В связи со сложностью проведения экспериментальных исследований в данной области важным направлением современной фундаментальной науки является развитие теоретических основ описания реагирующих течений. Для решения вопросов, связанных с распространением пламени по поверхности горючего материала, необходимо совершенствовать методы математического моделирования, что обусловлено большим количеством протекающих физико-химических процессов, требующих моделирования каждого из них в отдельности, и сложным характером взаимодействия между этими процессами как в газовой среде, так и в твердом теле.

Распространение пламени вверх по вертикальной поверхности твердого горючего материала сопровождается нестационарными вихревыми структурами течения газа вблизи области горения, образование которых происходит в результате тепловой неустойчивости и за счет действия сил естественной конвекции, ускоряющей горячие продукты сгорания. За счет вихревых структур от горячего газофазного пламени в твердый материал в каждый момент времени поступает разное количество тепловой энергии. Поэтому адекватный расчет теплового потока и, соответственно, вихревого течения имеет важное значение для оценки скорости распространения пламени.

Данная работа посвящена оценкам параметров численного метода решения задачи распространения пламени по поверхности горючего материала, учитывающего сопряженный характер взаимодействия газовой среды и твердого тела и вихревое течение, вызванное естественной конвекцией. В работе рассмотрены особенности использования различных аппроксимационных схем, используемых при интегрировании исходных дифференциальных уравнений по пространству и во времени, релаксации полей при итерировании внутри шага по времени, различных шагов интегрирования по времени.

Сформулированная в работе математическая модель позволяет описывать процесс распространения пламени по поверхности горючего материала. Газодинамика моделируется системой уравнений Навье–Стокса, вихревое течение описывается комбинированной моделью турбулентности RANS–LES (DDES), турбулентное горение — комбинированной моделью горения Eddy Break-Up с учетом кинетических эффектов, теплопередача излучением — методом сферических гармоник первого порядка аппроксимации (P1). Решение уравнений производится в программном пакете OpenFOAM.

Ключевые слова: метод решения, численные схемы, итерационная процедура, распространение пламени, твердый горючий материал, пиролиз, турбулентное диффузионное горение, тепломассообмен

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-08-00110 а и № 16-38-00543 мол_а).

UDC: 544.452.2:519.63

Analysis of a numerical method for studying upward flame spread over solid material

A. A. Shaklein^a, A. I. Karpov^b, A. A. Bolkisev^c

Udmurt Federal Research Center, UB RAS,
34 T. Baramzinoy st., Izhevsk, 426067, Russia

E-mail: ^a mx.oryx@gmail.com, ^b karpov@udman.ru, ^c celsior.izh@gmail.com

Received 19.10.2017, after completion — 27.08.2018.

Accepted for publication 11.09.2018.

Reduction of the fire hazard of polymeric materials is one of the important scientific and technical problems. Since complexity of experimental procedures associated with flame spread, establishing reacting flows theoretical basics turned out to be crucial field of modern fundamental science. In order to determine parameters of flame spread over solid combustible materials numerical modelling methods have to be improved. Large amount of physical and chemical processes taking place needed to be resolved not just separately one by one but in connection with each other in gas and solid phases.

Upward flame spread over vertical solid combustible material is followed by unsteady eddy structures of gas flow in the vicinity of flame zone caused by thermal instability and natural convection forces accelerating hot combustion products. At every moment different amount of heat energy is transferred from hot gas-phase flame to solid material because of eddy flow structures. Therefore, satisfactory heat flux and eddy flow modelling are important to estimate flame spread rate.

In the current study we evaluated parameters of numerical method for flame spread over solid combustible material problem taking into account coupled nature of complex interaction between gas phase, solid material and eddy flow resulted from natural convection. We studied aspects of different approximation schemes used in differential equations integration process over space and time, of fields relaxation during iterations procedure carried out inside time step, of different time step values.

Mathematical model formulated allows to simulate flame spread over solid combustible material. Fluid dynamics is modeled by Navier–Stokes system of equations, eddy flow is described by combined turbulent model RANS–LES (DDES), turbulent combustion is resolved by modified turbulent combustion model Eddy Break-Up taking into account kinetic effects, radiation transfer is modeled by spherical harmonics method of first order approximation (P1). The equations presented are solved in OpenFOAM software.

Keywords: solution method, numerical schemes, iterative procedure, flame spread, solid combustible material, pyrolysis, turbulent diffusion flame, heat and mass transfer

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2018, vol. 10, no. 6, pp. 755–774 (Russian).

This work was financially supported by Russian Foundation for Basic Research (projects No. 16-08-00110 a and No. 16-38-00543 mol_a).

Список условных обозначений и сокращений

Сокращения

MKO	—	метод конечных объемов
ПММА	—	полиметилметакрилат
СЛАУ	—	система линейных алгебраических уравнений
DDES	—	Delayed Detached Eddy Simulation
EBU	—	Eddy Break-Up
HO	—	High order
LES	—	Large Eddy Simulation
LO	—	Low order
PISO	—	Pressure Implicit with Splitting-Operands
RANS	—	Reynolds Averaged Navier – Stokes
SGS	—	Sub-Grid Scale
SST	—	Shear Stress Transport
TVD	—	Total Variation Diminishing
WENO	—	Weighted Essential Non-Oscillatory

Обозначения

α	—	коэффициент релаксации	ℓ	—	масштаб длины, м
ε	—	диссипация турб. энергии, м ² /с ³	L	—	толщина, м
ε_w	—	степень черноты	M	—	молекулярная масса, кг/моль
κ	—	коэффициент поглощения, м ⁻¹	p	—	давление, Па
λ	—	теплопроводность, Вт/(м·К)	Pr	—	число Прандтля
μ	—	молекулярная вязкость, Па·с	q	—	тепловой поток, Вт/м ²
ν	—	стехиометрический коэффициент	Q	—	тепловой эффект, Дж/кг
ρ	—	плотность, кг/м ³	R_0	—	газовая пост., Дж/(моль·К)
ρD	—	коэффициент диффузии, кг/(м·с ²)	S	—	тензор скоростей деформации
σ	—	конст. Стефана – Больцмана, Вт/(м ² ·К ⁴)	Sc	—	число Шмидта
ω	—	частота турбулентности, с ⁻¹	t	—	время, с
C	—	удельная теплоемкость, Дж/(кг·К)	u, v	—	компоненты скорости, м/с
E	—	энергия активации, Дж/моль	T	—	температура, К
g	—	ускорение свободного падения, м/с ²	V	—	объем, м ³
G	—	интенсивность излучения, Вт/м ²	W	—	скорость реакции, с ⁻¹
h	—	высота, м	x, y	—	координаты, м
k	—	кинетическая энергия турб., м ² /с ²	X	—	мольная доля
K	—	предэкспонента скорости реакции, с ⁻¹	Y	—	массовая доля

Индексы

-	—	фильтрация	n	—	номер шага по времени
~	—	фильтрация по Фавру	P	—	продукты
a	—	в окружающей среде	s	—	в твердом теле
F	—	горючее	sgs	—	подсеточный
g	—	в газе	r	—	теплопередача излучением
k	—	номер итерации	O	—	окислитель
kin	—	кинетический	w	—	на поверхности

Введение

Постоянно развивающиеся теоретические методы исследования процессов, определяющих фундаментальные закономерности распространения пламени как движущей силы пожара, представляют собой современный эффективный инструмент для установления параметров пожара и в конечном итоге для их предотвращения, а также снижения их негативных последствий. В общем смысле распространение пламени может протекать в самых разнообразных условиях, средах и конфигурациях. Так, одним из наиболее часто встречающихся случаев является распространение пламени по поверхности горючих полимерных материалов, поскольку они широко представлены в промышленных в бытовых условиях.

В работе проводится исследование параметров численного метода расчета процесса распространения пламени по поверхности твердого горючего материала (в основном полимера), не содержащего окислителя в исходном составе. Такие материалы горят в диффузионном режиме, для адекватного моделирования которого необходимо учитывать значительное число разнообразных взаимосвязанных факторов. Условия распространения пламени при горении полимерных материалов определяются множеством физико-химических процессов, основными из которых являются: в газовой среде — течение газов, турбулентность, химические реакции взаимодействия горючего и окислителя (воздуха), теплообмен излучением; в твердом теле — химические реакции разложения и теплоперенос в материале. Основная проблема теоретической оценки параметров распространения пламени при горении полимеров заключается в описании сложного взаимодействия всех протекающих процессов. При решении задачи в сопряженной постановке необходимо по возможности максимально точно рассчитывать тепловой поток из пламенной зоны газовой фазы в твердый материал, который определяет выделение газообразных продуктов термического разложения твердого материала в газовую среду. При установлении теплового баланса между тепловыделением (экзотермическая реакция горения в газовой фазе) и затратами тепла (инертный прогрев газа и горючего материала, эндотермическая реакция пиролиза и диссипация в окружающую среду) горение способно самоподдерживаться.

Основное внимание уделяется исследованию распространения пламени вверх по вертикальной поверхности, поскольку такая ориентация относительно вектора силы тяжести приводит к существенным особенностям. В отличие от распространения вниз или распространения по горизонтальной поверхности, при которых имеет место стационарный режим движения фронта пламени с малыми скоростями, здесь ключевую роль играет влияние естественной конвекции, что приводит к увеличению скорости в пламенной зоне газовой фазы и росту размеров пламени и в результате к ускоряющемуся распространению пламени. Как многократно отмечено [Hasemi, 1985; Quintiere et al., 1986], данный факт позволяет рассматривать вышеописанную конфигурацию распространения пламени как наиболее опасную и, соответственно, требующую значительного внимания.

До сих пор остается открытым вопрос о характере протекания нестационарного сопряженного процесса распространения пламени по поверхности горючего материала в условиях турбулентного режима течения газовой фазы. Изучению данного вопроса посвящены работы [de Ris et al., 2003; Ren et al., 2013; Wang, Chateil, 2007; Novozhilov et al., 2011]. В [Novozhilov et al., 2011] авторы используют спутный поток воздуха в качестве источника турбулентности при горизонтальной ориентации горючего материала; в работе [Wang, Chateil, 2007] кроме спутного потока воздуха применяется газовая горелка, что создает повышенное тепловыделение в пристеночной области горения, а также играет роль турбулизатора потока за счет интенсивного вдува с поверхности. В экспериментах [de Ris et al., 2003] вместо твердого горючего материала используется газовая горелка с множеством форсунок при вертикальной ориентации установки. Интенсификацию вихревого характера течения авторы [Ren et al., 2013] в своей модели создают с помощью пульсаций расхода горючего. Таким образом, численного исследования распространения

турбулентного диффузионного пламени по вертикальной поверхности горючего материала в сопряженной постановке «газ–твердое тело» в условиях естественной конвекции не проводилось, и данная работа заполняет этот пробел.

Распространение пламени вверх по вертикальной поверхности твердого горючего материала сопровождается нестационарными вихревыми структурами течения газа вблизи области горения, образование которых происходит в результате тепловой неустойчивости и за счет действия сил естественной конвекции, ускоряющей горячие продукты сгорания. Для моделирования такого вихревого течения необходимо тщательно подходить к выбору аппроксимационных схем, используемых при интегрировании исходных дифференциальных уравнений по пространству и во времени. Не менее важным параметром является шаг по времени, величина которого, с одной стороны, ограничена временем расчета, а с другой — устойчивостью расчета и необходимостью разрешать локальные вихревые структуры. Исследованию этих параметров посвящена данная работа.

Математическая модель

В работе используется методология Фавра для описания пульсационного течения [Warnatz et al., 2006]. Математическая модель представлена ниже (например, [Karpov et al., 2016]).

Модель гидродинамики многокомпонентного газа. Система уравнений, описывающих вихревое течение реагирующего газа, представлена ниже:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \mu_{sgs} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + (\rho_a - \bar{\rho}) g_i, \quad (2)$$

$$\bar{\rho} C \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \rho C \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda + C \frac{\mu_{sgs}}{\text{Pr}_{sgs}} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \nu_F \bar{\rho} Q \tilde{W} - \frac{\partial \tilde{q}_j^r}{\partial x_j}, \quad (3)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_F}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{Y}_F}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_{sgs}}{\text{Sc}_{sgs}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_F}{\partial x_j} - \nu_F \bar{\rho} \tilde{W}, \quad (4)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_O}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{Y}_O}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_{sgs}}{\text{Sc}_{sgs}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_O}{\partial x_j} - \nu_O \bar{\rho} \tilde{W}, \quad (5)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_{sgs}}{\text{Sc}_{sgs}} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial x_j} + (\nu_F + \nu_O) \bar{\rho} \tilde{W}, \quad (6)$$

для удобства в газовой фазе индекс g опущен.

Связь макроскопических параметров многокомпонентного газа описывается уравнением состояния идеального газа:

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{R_0}{M} \tilde{T}. \quad (7)$$

Газовая смесь, состоящая из различных участвующих в реакциях веществ, считается идеальной (подчиняющейся закону Дальтона), на макроуровне отсутствует граница раздела между компонентами [Нигматулин, 1978; Williams, 1985]. Таким образом, многокомпонентный газ описывается теми же уравнениями, что и однокомпонентный. Теплофизические свойства смеси определяются в зависимости от массовых долей компонентов:

$$\tilde{\phi} = \sum \tilde{\phi}_i \tilde{Y}_i, \quad (8)$$

за исключением коэффициента теплопроводности, определяющегося как среднее между средним арифметическим и средним гармоническим значениями для смеси:

$$\tilde{\lambda} = 0.5 \left(\sum_i \tilde{X}_i \tilde{\lambda}_i + \sum_i \frac{1}{\tilde{X}_i / \tilde{\lambda}_i} \right). \quad (9)$$

Молярная масса смеси определяется в виде

$$\tilde{M} = \left(\sum_i \tilde{Y}_i / M_i \right)^{-1}. \quad (10)$$

Коэффициент диффузии определяется через число Sc в виде $\bar{\rho}D = \mu/Sc$, а теплопроводность рассчитывается через число Pr в виде $\lambda = C\mu/Pr$.

Модель турбулентности. Для замыкания исходной системы уравнений движения газа применяется вихреразрешающая модель DDES, основанная на уравнениях $k-\omega$ SST [Menter et al., 2003]:

$$\bar{\rho} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{y}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \sigma_k \mu_{sgs} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} + \min \left[\tilde{G}, c_1 \beta^* \bar{\rho} k \omega \right] - \bar{\rho} \beta^* k \omega F_{DDES}, \quad (11)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{y}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \sigma_\omega \mu_{sgs} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + \alpha \bar{\rho} \tilde{S}^2 - \beta \bar{\rho} \omega^2 + CD_{k\omega} (1 - F_1). \quad (12)$$

Подсеточная вязкость определяется следующим образом:

$$\mu_{sgs} = \frac{a_1 \bar{\rho} k}{\max \left[a_1 \omega, |\tilde{S}| F_2 \right]}. \quad (13)$$

Замыкающая функция F в диссипационном слагаемом уравнения (11) имеет вид

$$F_{DDES} = \max \left[\frac{\ell_{k-\omega}}{C_{DDES} \Delta} (1 - F_1), 1 \right], \quad (14)$$

где $\Delta = \max [\Delta x, \Delta y]$, а описание остальных параметров модели (тензор скоростей деформаций S , $CD_{k\omega}$ и функций смешения F_1 и F_2) приводится в [Menter et al., 2003].

Константы модели определяются в виде весовой комбинации $\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2$ и имеют следующие значения: $\sigma_{k1} = 0.85$, $\sigma_{k2} = 1.0$, $\sigma_{\omega1} = 0.5$, $\sigma_{\omega2} = 0.856$, $\alpha_1 = 0.55$, $\alpha_2 = 0.44$, $\beta_1 = 0.075$, $\beta_2 = 0.0828$. Остальные постоянные имеют следующие величины: $\beta^* = 0.09$, $a_1 = 0.31$, $c_1 = 10.0$, $C_{DDES} = 0.61$ [Menter et al., 2003].

Модель горения. В работе используется модифицированная модель турбулентного горения EBU с учетом кинетических эффектов [Magnussen, Hjertager, 1997; Fureby, Lofstrom, 1994]:

$$\tilde{W} = \min \left[\tilde{W}_{kin}, \tilde{W}_{sgs} \right], \quad (15)$$

$$\tilde{W}_{kin} = K_g \tilde{Y}_O \tilde{Y}_F \exp \left(-\frac{E_g}{R_0 \tilde{T}} \right), \quad (16)$$

$$\tilde{W}_{sgs} = B \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \min \left[\frac{\tilde{Y}_F}{\nu_F}, \frac{\tilde{Y}_O}{\nu_O} \right], \quad (17)$$

с константой $B = 4.0$ [Magnussen, Hjertager, 1997].

Поскольку оценка образования промежуточных и загрязняющих веществ при горении не входит в задачи исследования, для упрощения моделирования процесса горения газообразных

продуктов пиролиза ПММА предполагается, что в результате пиролиза образуется газообразное вещество $C_5H_8O_2$ [Zeng et al., 2002]. Учитываются горючее, окислитель (кислород), продукты реакции горения (углекислый газ и вода) и инертный компонент (азот). Так, макрореакция сгорания полиметилметакрилата выглядит следующим образом:



При пересчете на массовые стехиометрические коэффициенты уравнение (18) запишется в виде



с константами $\nu_F = 1.0$, $\nu_O = 1.9$.

Теплоперенос излучением. Излучение моделируется моделью сферических гармоник первого порядка аппроксимации (P1). Излучение считается изотропным, рассеянием пренебрегается. Уравнение для интеграла интенсивности излучения выглядит следующим образом [Modest, 2003]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{3\tilde{\kappa}} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_j} \right) + \kappa (4\sigma \tilde{T}^4 - \tilde{G}) = 0. \quad (20)$$

Радиационный тепловой поток в уравнении (3) определяется в виде

$$q_j^r = -\frac{1}{3\tilde{\kappa}} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_j}. \quad (21)$$

Коэффициент поглощения смеси определяется в виде $\tilde{\kappa} = \sum \tilde{X}_i \tilde{\kappa}_i$. Газовая среда считается серой, коэффициент поглощения осредняется по всему спектру и рассчитывается в зависимости от температуры в виде полинома пятой степени вида

$$\kappa = a_0 + a_1 \tilde{T}^b + a_2 \tilde{T}^{2b} + a_3 \tilde{T}^{3b} + a_4 \tilde{T}^{4b} + a_5 \tilde{T}^{5b},$$

где коэффициенты полиномов a_i и b для горючего, окислителя и продуктов приведены в [Ша-клеин и др., 2014].

Принимается допущение о полном поглощении излучения на поверхности ПММА [Jiang et al., 2009], что позволяет решать уравнение переноса излучения только в газовой области, задавая на поверхности твердого материала соответствующее граничное условие с заданной степенью черноты.

Модель теплопереноса в твердом теле. Механизм переноса энергии описывается следующим уравнением:

$$\rho_s C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x_j} + \rho_s W_s Q_s. \quad (22)$$

Скорость термического разложения определяется в виде

$$W_s = K_s \exp \left(-\frac{E_s}{R_0 T_s} \right). \quad (23)$$

Скорость газификации на поверхности твердого материала определяется по следующей зависимости:

$$u_s = \int_{-L}^0 W_s dx. \quad (24)$$

Граничные условия и сопряженная постановка. При моделировании распространения пламени вверх по поверхности горючего материала необходимо задать граничные условия для основных переменных на следующих поверхностях: верх ($y = h$), низ ($y = 0$), правая ($x = L_g$) и левая ($x = -L$) стороны. Одной из основных особенностей распространения пламени по поверхности горючего материала является взаимная связь процессов, протекающих в газовой фазе и твердом теле. Тепловая энергия, поступающая от пламени в твердое тело, нагревает твердый материал. В то же время нагретый материал разлагается с выделением горючего вещества в газовую фазу. Теоретическое описание изучаемого сопряженного процесса существенно отличается от горения газообразных веществ. Необходимо описать процессы тепломассообмена на поверхности контакта «газ–твердый материал» ($x = 0$).

Граничные условия определяются следующим образом:

$x = L_g, y = 0, y = h:$	$\partial\phi/\partial n = 0, \phi = \{\tilde{u}, \tilde{v}, k, \omega, \tilde{G}\};$
$x = L_g, y = 0:$	$\tilde{T} = T_a,$ $\tilde{Y}_O = Y_O^a, \tilde{Y}_F = 0, \tilde{Y}_P = 0;$
$y = h:$	$\partial\tilde{T}/\partial y = 0,$ $\partial\tilde{Y}_m/\partial y = 0, m = \{F, O, P\};$
$x = 0:$	$\tilde{v} = 0, \tilde{\rho}\tilde{u} = \rho_s u_s,$ $-\left(\frac{\mu_{sgs}}{\text{Sc}_{sgs}} + \tilde{\rho}D\right)\frac{\partial\tilde{Y}_m}{\partial x} + \tilde{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_m = \rho_s u_s \tilde{Y}_m^w, m = \{F, O, P\},$ $\tilde{Y}_F^w = 1, \tilde{Y}_O^w = 0, \tilde{Y}_P^w = 0,$ $\tilde{q}_w^r = -\varepsilon_w/(4 - 2\varepsilon_w)(4\sigma\tilde{T}_w^4 - \tilde{G}_w),$ $k = 0, \omega = 6.0\mu/(\tilde{\rho}\beta_1\Delta x^2),$ $T_s = \tilde{T}, -\lambda_s\frac{\partial T_s}{\partial x} + (\rho u C T)_s = -\left(\lambda + C\frac{\mu_{sgs}}{\text{Pr}_{sgs}}\right)\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x} + \tilde{\rho}\tilde{u}C\tilde{T} + \tilde{q}_w^r;$
$x = -L, y = 0, y = h:$	$\partial T_s/\partial n = 0.$

Метод решения

Уравнения (1)–(6), (11), (12), (20), (22) решаются методом конечных объемов в программном пакете OpenFOAM [Weller et al., 1998]. В общем случае для некоторой скалярной величины ϕ процедура дискретизации выглядит следующим образом:

$$\rho\frac{\partial\phi}{\partial t} + \rho u_j\frac{\partial\phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x_j} + S. \quad (25)$$

После интегрирования уравнение (25) принимает следующий вид:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \rho\frac{\partial\phi}{\partial t} dV + \int_V \rho u_j\frac{\partial\phi}{\partial x_j} dV \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \frac{\partial}{\partial x_j}\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x_j} dV + \int_V S dV \right] dt. \quad (26)$$

Дискретизация слагаемых по пространству осуществляется следующим образом. Объемные интегралы слагаемых, обозначающие потоки величины через грани конечного объема, заменяются интегралами по поверхности S с нормалью n_i в соответствии с теоремой Гаусса.

Интегрирование конвективных слагаемых проводится в виде

$$\int_V \rho u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dV = \int_S \rho u_j \phi n_j dS = \sum_f (\rho u_j \phi n_j)_f S_f = \sum_f F \phi_f, \quad (27)$$

что на декартовой сетке в двумерной постановке имеет вид

$$\begin{aligned} & \rho_{i+1/2,j} u_{i+1/2,j} S_{i+1/2,j} \phi_{i+1/2,j} - \rho_{i-1/2,j} u_{i-1/2,j} S_{i-1/2,j} \phi_{i-1/2,j} + \\ & + \rho_{i,j+1/2} v_{i,j+1/2} S_{i,j+1/2} \phi_{i,j+1/2} - \rho_{i,j-1/2} v_{i,j-1/2} S_{i,j-1/2} \phi_{i,j-1/2}, \end{aligned} \quad (28)$$

где под индексом $i + 1/2$ подразумевается грань между ячейками i и $i + 1$, не обязательно находящаяся по центру между ними.

Для расчета конвективных слагаемых (уравнение (27)) необходимо определить значения ϕ на гранях конечных объемов. Интерполяция значений функции с узлов на грани в данной работе осуществляется по следующим схемам: upwind, linear, TVD на основе ограничителя Швеби [Sweby, 1984] и WENO [Shu, 2009].

При использовании схемы upwind (противопоточная, первого порядка) неизвестные значения расчетной величины на грани ячейки контрольного объема переносятся из смежной ячейки, расположенной со стороны набегающего потока газовой среды:

$$\phi_{i+1/2,j} = \begin{cases} \phi_{i,j}, & \text{если } u_{i+1/2,j} > 0, \\ \phi_{i+1,j}, & \text{если } u_{i+1/2,j} \leq 0. \end{cases} \quad (29)$$

Схема linear (центрально-разностная) второго порядка имеет следующий вид:

$$\phi_{i+1/2,j} = \phi_{i,j} \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_i} + \phi_{i+1,j} \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (30)$$

Подход TVD позволяет обеспечить монотонность аппроксимации с порядком выше первого с помощью смешения с противопоточной схемой в следующем виде:

$$\phi_{i+1/2,j} = \phi_{LO,i+1/2,j} + \psi(r) [\phi_{HO,i+1/2,j} - \phi_{LO,i+1/2,j}], \quad (31)$$

где функция ψ определена в виде $\psi(r) = \max[\min[2r, 1], 0]$. Здесь r представляет собой отношение градиентов $r = (\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}) / (\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j})$ с индексами, соответствующими положительному направлению потока газовой среды (например, вдоль оси x). В данной работе величина $\phi_{HO,i+1/2,j}$ получена аппроксимацией дискретной функции ϕ по схеме linear второго порядка, а $\phi_{LO,i+1/2,j}$ — по схеме upwind первого порядка.

Также в работе рассматривается схема WENO, в рамках которой используются значения 5 точек для аппроксимации функции с целью нахождения значения на грани ячейки, при этом в областях с гладким решением обеспечивается пятый порядок аппроксимации, а при разрывных решениях — не выше первого [Сафронов, 2010]. В работе используется допущение о том, что интерполяция значений дискретной функции на грани ячеек осуществляется только по значениям функции в узлах (центрах конечных объемов), расположенных вдоль нормального к поверхности грани ячейки направления. Таким образом, каждое направление многомерной задачи рассматривается отдельно, что позволяет оперировать одномерным подходом при решении задачи нахождения значения функции на грани. Учитывая используемую в расчетах декартовую сетку, процедура нахождения аппроксимации существенно упрощается. Порядок нахождения значения функции на грани выглядит следующим образом. Определяется пятиточечный шаблон T в окрестности грани $\{\phi_{i-2,j}, \phi_{i-1,j}, \phi_{i,j}, \phi_{i+1,j}, \phi_{i+2,j}\}$, из него выбираются три трехточечных

шаблона S_m : $\{\phi_{i-2,j}, \phi_{i-1,j}, \phi_{i,j}\}$, $\{\phi_{i-1,j}, \phi_{i,j}, \phi_{i+1,j}\}$ и $\{\phi_{i,j}, \phi_{i+1,j}, \phi_{i+2,j}\}$. На каждом S_m функция ϕ аппроксимируется полиномом второй степени, что приводит к

$$\phi_{i+1/2,j}^m = c_{m,1}\phi_{m,1} + c_{m,2}\phi_{m,2} + c_{m,3}\phi_{m,3}, \quad (32)$$

где c — сеточные коэффициенты [Cockburn et al., 1998], определяемые до начала основного расчета.

Далее осуществляется реконструкция полиномов S_m и определяется аппроксимация функции ϕ на общем шаблоне T в виде

$$\phi_{i+1/2,j} = \omega_1\phi_{i+1/2,j}^{(1)} + \omega_2\phi_{i+1/2,j}^{(2)} + \omega_3\phi_{i+1/2,j}^{(3)}, \quad (33)$$

где ω — весовой коэффициент [Shu, 2009].

Использование схем типа WENO, в основе которых лежит оперирование более чем двумя узлами расчетной области, сводится к необходимости применения специальной процедуры для получения итоговой СЛАУ. Если все узловые величины искомой функции оставлять в качестве неизвестных, расчетный шаблон в некоторых случаях может стать громоздким. Поскольку размер расчетного шаблона прямым образом влияет как на объем требуемой для хранения информации памяти, так и на количество затрачиваемых на решение вычислительных ресурсов, размер шаблона выбирается как можно меньше. Обычно на практике принято рассматривать только конечный объем (i, j) и его непосредственных соседей. Например, в двухмерном случае на декартовой сетке шаблон состоит из 5 узлов: (i, j) , $(i+1, j)$, $(i-1, j)$, $(i, j+1)$, $(i, j-1)$. Один из методов, позволяющих свести результат аппроксимации высокого порядка к пятиточечному шаблону, заключается в расчете всех получившихся в результате аппроксимации высокого порядка слагаемых явным образом. В общем случае процедура определения некоторой функции ϕ на грани конечного объема запишется следующим образом:

$$\phi_{i+1/2,j}^{n+1,k+1} = \phi_{LO,i+1/2,j}^{n+1,k+1} + (\phi_{HO,i+1/2,j}^{n+1,k} - \phi_{LO,i+1/2,j}^{n+1,k}), \quad (34)$$

где $\phi_{LO,i+1/2,j}$ аппроксимируется схемой низкого порядка (обычно противоточной), а $\phi_{HO,i+1/2,j}$ — схемой высокого порядка (в данном случае WENO). Слагаемые в скобках с индексом k определяются по известным до начала итерации значениям. На первой итерации внутри шага по времени слагаемые в скобках определяются по значениям с предыдущего шага по времени.

Кроме различных аппроксимационных схем для конвективных слагаемых, в работе используется подход OpenFOAM с обеспечением диагонального преобладания коэффициентов матрицы, заключающийся в сравнении центральных коэффициентов СЛАУ с суммой соседних и увеличении первых до значений последних в тех случаях, когда величины центральных коэффициентов оказываются меньше. Данный метод использовался для оценки возможностей встроенной методики OpenFOAM по устранению немонотонности центрально-разностной схемы и сравнения результатов расчетов с расчетами по схемам upwind, TVD и WENO.

Интегрирование диффузионных слагаемых осуществляется в следующем виде:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dV = \int_S \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j dS = \sum_f \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \right)_f S_f, \quad (35)$$

что на декартовой расчетной сетке выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & \Gamma_{i+1/2,j} S_{i+1/2,j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2,j} - \Gamma_{i-1/2,j} S_{i-1/2,j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1/2,j} + \\ & + \Gamma_{i,j+1/2} S_{i,j+1/2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i,j+1/2} - \Gamma_{i,j-1/2} S_{i,j-1/2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i,j-1/2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Диффузионные слагаемые рассчитываются со вторым порядком аппроксимации по пространству. Таким образом, уравнение (36) принимает вид

$$\begin{aligned} \Gamma_{i+1/2,j} S_{i+1/2,j} \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{x_{i+1} - x_i} - \Gamma_{i-1/2,j} S_{i-1/2,j} \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{x_i - x_{i-1}} + \\ + \Gamma_{i,j+1/2} S_{i,j+1/2} \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{y_{j+1} - y_j} - \Gamma_{i,j-1/2} S_{i,j-1/2} \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{y_j - y_{j-1}}. \end{aligned} \quad (37)$$

Используя выражения (27) и (36), можно выполнить процедуру интегрирования уравнения (26) во времени. Учитывая, что объем ячеек не изменяется, после подстановки получаем следующее выражение:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \Delta V + \sum_f F \phi_f \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \right)_f S_f + S \Delta V \right] dt. \quad (38)$$

Временная производная в уравнениях $\rho \partial \phi / \partial t$ аппроксимируется схемами первого:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} = \rho^n \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \quad (39)$$

и второго:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} = \rho^n \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t} \quad (40)$$

порядков.

Процедура дискретизации исходных дифференциальных уравнений сформулированной математической модели идентична описанию, представленному выше для функции ϕ . Следует отметить, что уравнение количества движения содержит нелинейное слагаемое. В работе применяется линеаризация конвективного слагаемого таким образом, что поток на гранях рассчитывается по известному полю скорости. В итоге система дифференциальных уравнений после дискретизации приводится к системам линейных алгебраических уравнений.

Так, например, уравнение энергии (3) с использованием временной схемы второго порядка, схемы TVD для конвективных слагаемых и линейной схемы для диффузионных слагаемых сводится к следующему виду (для удобства читаемости символы \sim и $\bar{}$, связанные с фильтрацией, опускаются):

$$\begin{aligned} \rho_{i,j}^{n+1,k} C_{i,j}^{n+1,k} \frac{3T_{i,j}^{n+1,k+1} - 4T_{i,j}^n + T_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t} \Delta x_i \Delta y_j + \\ + \rho_{i+1/2,j}^{n+1,k} \Delta y_j u_{i+1/2,j}^{n+1,k} C_{i+1/2,j}^{n+1,k} T_{i+1/2,j}^{n+1,k+1} - \rho_{i-1/2,j}^{n+1,k} \Delta y_j u_{i-1/2,j}^{n+1,k} C_{i-1/2,j}^{n+1,k} T_{i-1/2,j}^{n+1,k+1} + \\ + \rho_{i,j+1/2}^{n+1,k} \Delta x_i v_{i,j+1/2}^{n+1,k} C_{i,j+1/2}^{n+1,k} T_{i,j+1/2}^{n+1,k+1} - \rho_{i,j-1/2}^{n+1,k} \Delta x_i v_{i,j-1/2}^{n+1,k} C_{i,j-1/2}^{n+1,k} T_{i,j-1/2}^{n+1,k+1} = \\ = \left(\lambda_{i+1/2,j}^{n+1,k} + C_{i+1/2,j}^{n+1,k} \frac{(\mu_{sgs})_{i+1/2,j}^{n+1,k}}{Pr_{sgs}} \right) \Delta y_j \frac{T_{i+1,j}^{n+1,k+1} - T_{i,j}^{n+1,k+1}}{x_{i+1} - x_i} - \\ - \left(\lambda_{i-1/2,j}^{n+1,k} + C_{i-1/2,j}^{n+1,k} \frac{(\mu_{sgs})_{i-1/2,j}^{n+1,k}}{Pr_{sgs}} \right) \Delta y_j \frac{T_{i,j}^{n+1,k+1} - T_{i-1,j}^{n+1,k+1}}{x_i - x_{i-1}} + \\ + \left(\lambda_{i,j+1/2}^{n+1,k} + C_{i,j+1/2}^{n+1,k} \frac{(\mu_{sgs})_{i,j+1/2}^{n+1,k}}{Pr_{sgs}} \right) \Delta x_i \frac{T_{i,j+1}^{n+1,k+1} - T_{i,j}^{n+1,k+1}}{y_{j+1} - y_j} - \\ - \left(\lambda_{i,j-1/2}^{n+1,k} + C_{i,j-1/2}^{n+1,k} \frac{(\mu_{sgs})_{i,j-1/2}^{n+1,k}}{Pr_{sgs}} \right) \Delta x_i \frac{T_{i,j}^{n+1,k+1} - T_{i,j-1}^{n+1,k+1}}{y_j - y_{j-1}} + \\ + QW_{i,j}^{n+1,k} \Delta x_i \Delta y_j + (q^r)_{i+1/2,j}^{n+1,k} \Delta y_j - (q^r)_{i-1/2,j}^{n+1,k} \Delta y_j + (q^r)_{i,j+1/2}^{n+1,k} \Delta x_i - (q^r)_{i,j-1/2}^{n+1,k} \Delta x_i, \end{aligned} \quad (41)$$

где n — шаг по времени, k — итерация в рамках решения системы на новом временном шаге, $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, $\Delta y_j = y_{j+1/2} - y_{j-1/2}$.

В уравнении (41) коэффициенты диффузии на границах рассчитываются по среднему гармоническому в виде

$$\lambda_{i+1/2,j}^{n+1,k} = \left(\frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_i} \frac{1}{\lambda_{i,j}^{n+1,k}} + \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i} \frac{1}{\lambda_{i+1,j}^{n+1,k}} \right)^{-1}, \quad (42)$$

остальные параметры (например, $u_{i+1/2,j}^{n+1,k}$) рассчитываются по линейной схеме (30).

Слагаемое $T_{i+1/2,j}^{n+1,k+1}$, согласно схеме TVD, определяется в виде

$$T_{i+1/2,j}^{n+1,k+1} = \begin{cases} \left\{ T_{i,j}^{n+1,k+1} + \max \left[\min \left[2 \frac{T_{i,j}^{n+1,k} - T_{i-1,j}^{n+1,k}}{T_{i+1,j}^{n+1,k} - T_{i,j}^{n+1,k}}, 1 \right], 0 \right] \times \right. \\ \left. \times \left(T_{i,j}^{n+1,k+1} \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_i} + T_{i+1,j}^{n+1,k+1} \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i} - T_{i,j}^{n+1,k+1} \right) \right\}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} > 0, \\ \left\{ T_{i+1,j}^{n+1,k+1} + \max \left[\min \left[2 \frac{T_{i+1,j}^{n+1,k} - T_{i,j}^{n+1,k}}{T_{i+2,j}^{n+1,k} - T_{i+1,j}^{n+1,k}}, 1 \right], 0 \right] \times \right. \\ \left. \times \left(T_{i,j}^{n+1,k+1} \frac{x_{i+1} - x_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_i} + T_{i+1,j}^{n+1,k+1} \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i} - T_{i+1,j}^{n+1,k+1} \right) \right\}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} \leq 0. \end{cases} \quad (43)$$

В случае использования схемы WENO слагаемое $T_{i+1/2,j}^{n+1,k+1}$ определится в виде

$$T_{i+1/2,j}^{n+1,k+1} = \begin{cases} T_{i,j}^{n+1,k+1}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} > 0, \\ T_{i+1,j}^{n+1,k+1}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} \leq 0 \end{cases} + \left[\omega_1 T_{i+1/2,j}^{n+1,k,(1)} + \omega_2 T_{i+1/2,j}^{n+1,k,(2)} + \omega_3 T_{i+1/2,j}^{n+1,k,(3)} - \begin{cases} T_{i,j}^{n+1,k}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} > 0, \\ T_{i+1,j}^{n+1,k}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} \leq 0 \end{cases} \right], \quad (44)$$

где реконструкция WENO определена в соответствии с выражением (33), при этом неявная часть остается в коэффициенте $A_{i+1,j}$, в то время как часть выражения, содержащая известные значения T и заключенная в квадратные скобки, переносится в источниковое слагаемое $b_{i,j}$.

Сгруппировав неизвестные в уравнении (41), получаем

$$A_{i,j} T_{i,j}^{n+1,k+1} + A_{i+1,j} T_{i+1,j}^{n+1,k+1} + A_{i-1,j} T_{i-1,j}^{n+1,k+1} + A_{i,j+1} T_{i,j+1}^{n+1,k+1} + A_{i,j-1} T_{i,j-1}^{n+1,k+1} = b_{i,j}, \quad (45)$$

где, например, $A_{i+1,j}$ (схема TVD) определяется в виде

$$A_{i+1,j} = - \frac{\left(\lambda_{i+1/2,j}^{n+1,k} + C_{i+1/2,j}^{n+1,k} \frac{(\mu_{sgs})_{i+1/2,j}^{n+1,k}}{Pr_{sgs}} \right) \Delta y_j}{x_{i+1} - x_i} + \begin{cases} \max \left[\min \left[2 \frac{T_{i,j}^{n+1,k} - T_{i-1,j}^{n+1,k}}{T_{i+1,j}^{n+1,k} - T_{i,j}^{n+1,k}}, 1 \right], 0 \right] \times \\ \times \frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i}, & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} > 0, \\ 1 + \max \left[\min \left[2 \frac{T_{i+1,j}^{n+1,k} - T_{i,j}^{n+1,k}}{T_{i+2,j}^{n+1,k} - T_{i+1,j}^{n+1,k}}, 1 \right], 0 \right] \times \\ \times \left(\frac{x_{i+1/2} - x_i}{x_{i+1} - x_i} - 1 \right), & \text{если } u_{i+1/2,j}^{n+1,k} \leq 0. \end{cases} \quad (46)$$

В итоге получается СЛАУ следующего вида:

$$A_{i,j}\phi_{i,j}^{n+1,k+1} + \sum_{nb} A_{nb}\phi_{nb}^{n+1,k+1} = b_{i,j}, \quad (47)$$

где $A_{i,j}$ — центральный коэффициент дискретизации, рассчитанный в некотором контрольном объеме i, j , A_{nb} — соседние коэффициенты дискретизации: $A_{i+1,j}$, $A_{i-1,j}$, $A_{i,j+1}$, $A_{i,j-1}$, а $b_{i,j}$ — источниковый член.

В работе применяется релаксация в неявном виде, осуществляемая за счет корректировки центрального коэффициента СЛАУ и источникового слагаемого [Ferziger, Peric, 2002] в виде

$$A_{i,j}^*\phi_{i,j}^{n+1,k+1} + \sum_{nb} A_{nb}\phi_{nb}^{n+1,k+1} = b_{i,j}^*, \quad (48)$$

где $A_{i,j}^* = A_{i,j}/\alpha_\phi$, $b_{i,j}^* = b_{i,j} + [(1 - \alpha_\phi)/\alpha_\phi] A_{i,j}\phi_{i,j}^n$.

Полученные в результате дискретизации исходных дифференциальных уравнений линейные алгебраические аналоги (48) решаются методом сопряженных градиентов. Критерием для остановки итерационной процедуры решения СЛАУ вида $Ax = b$ выступает нормированная невязка

$$r_k = \frac{\sum |b - Ax_k|}{f_k}, \quad (49)$$

где f_k — нормировочный фактор, определяющийся следующим образом:

$$f_k = \sum (|A(x_k - x_{ave})| + |b - Ax_{ave}|), \quad (50)$$

а x_{ave} — среднее по расчетной области значение искомой величины. Так, расчет прерывается при снижении r_k до определенного значения: $10^{-6}\{\bar{p}, \tilde{u}, \tilde{v}, k, \omega, \tilde{Y}_i\}$, $10^{-7}\{\tilde{G}\}$, $10^{-10}\{\tilde{T}, T_s\}$.

Скорость и давление связываются алгоритмом PISO [Issa, 1985]. Для корректировки давления решается уравнение следующего вида:

$$\frac{\partial p/(RT)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_\ell} \frac{\rho}{A_{i,j}^{u_\ell}} \frac{\partial p}{\partial x_\ell} + \frac{\partial \rho H(u_\ell)/a_{i,j}^{u_\ell}}{\partial x_\ell} = 0, \quad (51)$$

где оператор H представляет собой сумму потоков на гранях (конвективных и диффузионных), а также источниковых слагаемых, за исключением градиента давления:

$$H(u_{i,j}^{n+1,k+1,*}) = \sum_{nb} A_{nb}^u u_{nb}^{n+1,k+1,*} + \rho_{i,j}^{n+1,k} \frac{4u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t} \Delta x_i \Delta y_j + (\rho_a - \rho_{i,j}^{n+1,k}) g_x \Delta x_i \Delta y_j; \quad (52)$$

индекс $*$, например в $u_{i,j}^{n+1,k+1,*}$, обозначает итерационную процедуру поиска полей скорости и давления на итерации $k+1$ в рамках временного шага $n+1$.

Поле скорости корректируется по рассчитанному давлению $p^{n+1,k+1,*}$ в виде

$$u_{i,j}^{n+1,k+1,**} = \frac{H(u_{i,j}^{n+1,k+1,*})}{A_{i,j}^u} - \frac{1}{A_{i,j}^u} \frac{p_{i+1/2,j}^{n+1,k+1,*} - p_{i-1/2,j}^{n+1,k+1,*}}{\Delta x_i}. \quad (53)$$

В OpenFOAM используется совмещенная расчетная сетка, то есть все расчетные параметры (в том числе скорость и давление) определены в одних узлах, поэтому необходимо применять меры для предотвращения появления шахматного поля давления [Patankar, 1980]. Для этого используется специальная методика, описанная в работах [Rhie, Chow, 1982; Karrhorm, 2008].

Общий порядок расчета выглядит следующим образом. Производится процедура дискретизации исходных дифференциальных уравнений, в результате которой получаются системы линейных алгебраических уравнений. Задаются начальные условия для всех величин, относительно которых осуществляется решение дифференциальных уравнений. Запускается расчет по определению значений на новом временном шаге. Поскольку уравнения энергии и переноса компонентов газовой смеси обладают сильной нелинейностью, внутри каждого временного шага производится цикл итераций. Оценка сходимости решения оценивается по полю температуры. Процесс итерирования прерывается, если выполняется условие $\Delta_{rel}^k < \text{tol}_{rel}$, где tol_{rel} — константа, принимаемая равной 10^{-3} , $\Delta_{rel}^k = \Delta^k / \Delta^{k=1}$ — относительное изменение, $\Delta^k = \frac{\sum (T_i^k - T_i^{k-1}) \Delta V_i}{\sum \Delta V_i}$ — абсолютное изменение, $\Delta^{k=1} = \frac{\sum (T_i^{k=1} - T_i^{k=0}) \Delta V_i}{\sum \Delta V_i}$.

Порядок решения уравнений, описывающих сопряженный теплоперенос при распространении диффузионного пламени по поверхности горючего материала, выглядит следующим образом.

1. | $t = t + \Delta t$.
2. | $k = k + 1$.
3. | Решаются уравнения количества движения (2).
4. | $it_{p, u_i} = it_{p, u_i} + 1$.
5. | Решается уравнение давления (51).
6. | Корректируется поле скорости (53).
7. | Рассчитываются уравнения энергии в газовой фазе и твердом теле (3), (22).
8. | Решаются уравнения переноса концентраций (4), (5), (6).
9. | Определется новое поле интенсивности излучения (20).
10. | Рассчитываются уравнения турбулентной модели (11), (12).
11. | Корректируются теплофизические свойства (8), (10), (7).
12. | Пересчитываются скорости реакций и газификации и турбулентная вязкость (15), (23), (24), (13).

Результаты

Исследуется методика решения задачи распространения турбулентного диффузионного пламени по вертикальной поверхности горючего материала (рис. 1).

В работе используются приведенные ниже параметры (таблица 1).

Дополнительные параметры газа: $p = 1 \cdot 10^5$ Па, $T_a = 300$ К, $Y_O^a = 0.233$, $\mu = 1.8 \cdot 10^{-5}$, $Pr = 0.7$, $Sc = 0.7$, $Pr_{sgs} = 0.85$ [Yoder, 2016], $Sc_{sgs} = 0.9$ [Gualtieri et al., 2017].

Таблица 1. Теплофизические и кинетические параметры

Параметр	Газ, g	Твердый материал, s [Bhattacharjee et al., 2004]
ρ , кг/м ³	—	1200
C , Дж/(кг·К)	1005.6*	1466.5
λ , Вт/(м·К)	0.0254*	0.19
K , с ⁻¹	$1.0 \cdot 10^{10}$ [Карпов и др., 2016]	$2.82 \cdot 10^9$
E , Дж/моль	$9 \cdot 10^4$ [Карпов и др., 2016]	129890
Q , Дж/кг	$2.5 \cdot 10^7$ [Zeng et al., 2002]	$-1.0 \cdot 10^6$

* — свойства воздуха при постоянной температуре.

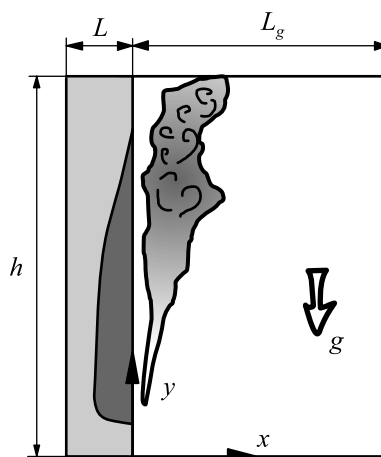


Рис. 1. Схематичное изображение горения твердого материала

Построенная расчетная сетка имеет структурированный вид, линии сетки совпадают с координатными осями декартовой системы. Размеры (и количество элементов) расчетной области (рис. 1) следующие: $L = 6.0$ мм (60), $L_g = 1.0$ м (160), $h = 5$ м (2000). Шаг сетки у поверхности горения по нормали к ней составляет порядка $2 \cdot 10^{-5}$ м. Толщина твердого материала имеет один порядок с образцами ПММА, используемыми в экспериментальных работах [Drysdale, Macmillan, 1992; Leventon, Stoliarov, 2013]. Ширина газовой области L_g , а также сеточные параметры расчетной области (шаг и количество элементов) подбирались на основании того, чтобы в результате решения задачи получать независимые от этих параметров результаты.

Степень черноты поверхности принимается равной единице, что достаточно близко к значениям, отмеченным в литературе [Steinhaus, 1999], $g = 9.81$ м/с², $R_0 = 8.314$ Дж/(моль·К), $\sigma = 5.67 \cdot 10^8$ Вт/(м²·К⁴).

В качестве начальных условий используются поля газодинамических и теплофизических параметров с момента времени устойчивого горения. Задача решается 0.5 с для всех вариантов. Вычислительный процесс запускается с одним потоком (без распараллеливания). Оценивается влияние параметров решения (релаксация внутри шага по времени, шаг по времени, порядки аппроксимации при интегрировании уравнений по времени и по пространству). Исследуемые варианты параметров решения сведены в таблицу 2.

При использовании проверки на диагональное преобладание (вариант 4) при возникновении негладкого решения ($\Delta t = 10^{-2}$ с) матрица коэффициентов корректируется, а решение приближается к решению, полученному при использовании схем первого порядка.

Результаты решения сведены в таблицу 3. Используемый метод решения уравнений накладывает ограничения на шаг по времени при интегрировании исходных дифференциальных уравнений при использовании высокого порядка аппроксимации конвективных потоков (не выше 10^{-3} с), что негативно отражается на общем времени решения задачи. С другой стороны, эффективное быстроедействие достигается при использовании шага по времени 10^{-2} с (вариант 6), что становится возможным за счет использования противопоточной схемы (первого порядка).

Из рис. 2 и 3 видно, что использование схем высокого порядка (вариант 1, $\Delta t = 10^{-4}$ с, вариант 4, $\Delta t = 10^{-4}$ с) приводит к образованию сильной неустойчивости в газовой области. С первого взгляда данное наблюдение свидетельствует о наличии в области сильного вихревого течения. Однако при детальном количественном анализе (рис. 2) видно, что амплитуда распределения теплового потока в области сильной негладкости профиля сильно завышена, что говорит о слабом подавлении моделью турбулентности возникающих осцилляций решения, появляющихся в результате использования схем высокого порядка.

Таблица 2. Исследуемые варианты параметров решения

Вариант	Особенности
1	Без релаксации, конвективные потоки — TVD, время — 2-й порядок
2	Без релаксации, конвективные потоки — upwind, время — 1-й порядок
3	С релаксацией ($\alpha_i = \{0.1, 0.2\}$, i — все расчетные поля, $\alpha_P = \{0.8, 1.0\}$), конвективные потоки — TVD, время — 2-й порядок
4	С диагональным преобладанием ($\alpha_i = 1.0$, i — все расчетные поля), конвективные потоки — linear, время — 2-й порядок
5	Без релаксации, конвективные потоки — TVD, время — 1-й порядок
6	Без релаксации, конвективные потоки — upwind, время — 2-й порядок
7	Без релаксации, конвективные потоки — WENO, время — 1-й порядок
8	Без релаксации, конвективные потоки — WENO, время — 2-й порядок

Таблица 3. Особенности решений

Вариант	Δt , с	Итерации	max T_g , К	t_{sol} , ч
1	10^{-4}	6–7	1790	4.7
1	10^{-3}	100	1774	8.7
1	10^{-2}	х		
2	10^{-4}	8–9	1801	5.5
2	10^{-3}	8–9	1780	6.5
2	10^{-2}	100	1604	1.26
3	10^{-2}	х		
4	10^{-4}	6	1786	4.78
4	10^{-2}	23–24	1698	0.4
5	10^{-2}	х		
6	10^{-2}	9–10	1700	0.35
7	10^{-2}	х		
8	10^{-2}	х		

х — решение разошлось.

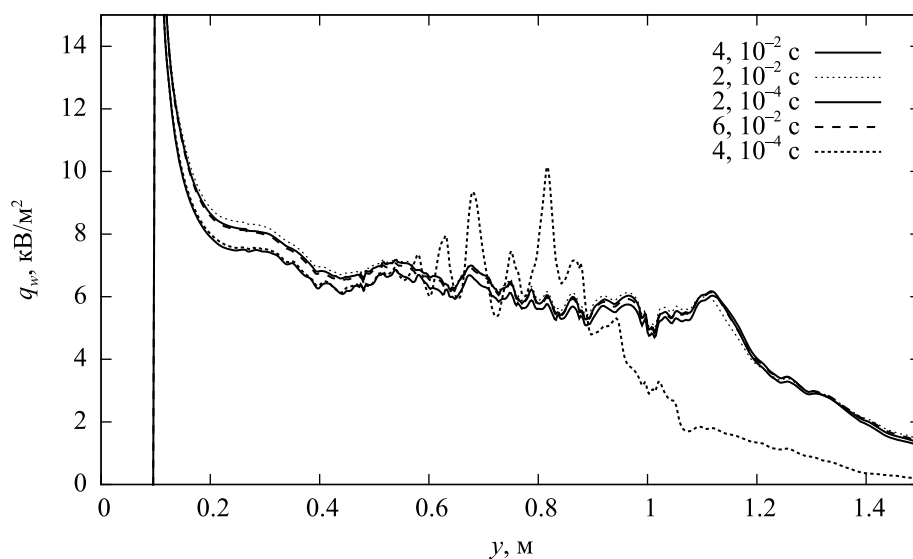
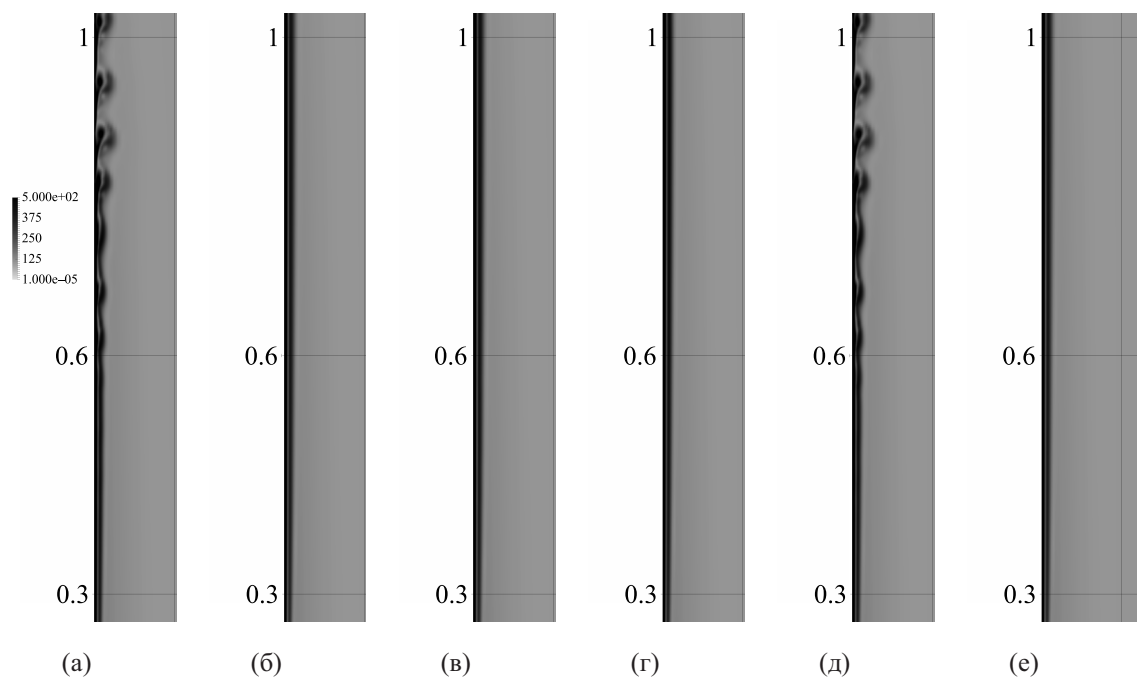


Рис. 2. Распределение молекулярного теплового потока на поверхности горючего материала

Рис. 3. Распределение модуля завихренности в расчетной области при различных параметрах расчета: а) вариант 1, $\Delta t = 10^{-4}$ с; б) вариант 2, $\Delta t = 10^{-2}$ с; в) вариант 2, $\Delta t = 10^{-4}$ с; г) вариант 4, $\Delta t = 10^{-2}$ с; д) вариант 4, $\Delta t = 10^{-4}$ с; е) вариант 6, $\Delta t = 10^{-2}$ с

С другой стороны, использование схем первого порядка приводит к снижению амплитуды пульсаций газодинамических и теплофизических параметров за счет повышенной численной вязкости схем. Из рис. 3 видно образование ровного безвихревого поля течения. При рассмотрении рис. 2 следует, что, несмотря на использование схем первого порядка, негладкость профиля теплового потока сохраняется, что говорит о необходимости более детального изучения поля течения, а именно анализа спектров пульсаций, что позволит показать насколько хорошо разрешается вихревое течение.

Выводы

В ходе проделанной работы проведен анализ численного метода решения сопряженной задачи распространения пламени вверх по вертикальной поверхности горючего материала в части, касающейся этапа приведения дифференциальных уравнений к алгебраическим аналогам, а именно схем аппроксимаций слагаемых уравнений, применяющихся после проведения процедуры интегрирования исходных уравнений в рамках метода конечных объемов программного пакета OpenFOAM. Одним из важных критериев оценки метода решения является время, затраченное на проведение расчета, поскольку данный параметр существенным образом определяет в конечном итоге целесообразность проведения исследований, ориентированных на изучение процесса распространения пламени вверх по вертикальной поверхности твердого горючего тела большой высоты, в результате чего становится возможным получение вихревого течения газовой фазы. Использование расчетного шага по времени $\Delta t = \{10^{-3}, 10^{-2}\}$ с выглядит привлекательным с точки зрения ускорения вычислений, однако ни один из подходов, рассматриваемых в работе (релаксация внутри шага по времени, обеспечение диагонального преобладания матрицы, использование различных аппроксимационных схем конвективных слагаемых и производных по времени), не позволил достичь желаемого результата без изменения конечных результатов существенным образом или увеличения времени расчетов. Использование схемы высокого порядка на основе ограничителей TVD выглядит компромиссным решением между простотой реализации по сравнению со схемой WENO, которая даже в одномерном варианте (реконструирование по одному направлению) вызывает сложности, например, при распараллеливании задачи (необходимо обмениваться большим количеством данных между потоками), и низкой численной вязкостью по сравнению с противопоточной схемой.

Список литературы (References)

- Карпов А. А., Шаклеин А. А., Болкисев А. А., Корепанов М. А. К расчету скорости распространения пламени по поверхности полимерного материала. Влияние кинетики газовой фазной реакции // Химическая физика и мезоскопия. — 2016. — Т. 18, № 4. — С. 501–508.
- Karpov A. A., Shaklein A. A., Bolkisev A. A., Korepanov M. A. K raschetu skorosti rasprostraneniya plameni po poverhnosti polimernogo materiala. Vliyanie kinetiki gazofaznoy reakcii [On the prediction of the flame spread rate over polymer fuel surface. Effect of the gas-phase reaction kinetics] // Himicheskaya fizika i mezoskopiya [Chemical kinetics and mesoscopy]. — 2016. — Vol. 18, No. 4. — P. 501–508.
- Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. — М.: Наука, 1978. — 336 с.
- Nigmatulin R. I. Osnovi mekhaniki geterogennykh sred [Heterogeneous medium mechanics theory]. — Moscow: Nauka, 1978. — 336 p. (in Russian).
- Сафронов А. В. Оценка точности и сравнительный анализ разностных схем сквозного счета повышенного порядка // Вычислительные методы и программирование. — 2010. — Т. 11. — С. 137–143.
- Safronov A. V. Otsenka tochnosti i sravnitelnyy analiz raznostnykh schem skvoznogo scheta povishennogo poryadka [Accuracy estimation and comparative analysis of difference schemes of high-order approximation] // Vichislitelnye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. — 2010. — Vol. 11. — P. 137–143.
- Шаклеин А. А., Карпов А. А., Корепанов М. А. Моделирование распространения пламени по вертикальной поверхности горючего материала. Оценка вклада радиационного теплопереноса // Химическая физика и мезоскопия. — 2014. — Т. 16, № 2. — С. 226–234.
- Shaklein A. A., Karpov A. A., Korepanov M. A. Modelirovaniye rasprostraneniya plameni po vertikalnoy poverhnosti goruchego materiala. Otsenka vklada radiatsionnogo teploperenosa [Simulation of the upward flame spread. Radiative heat transfer evaluation] // Himicheskaya fizika i mezoskopiya [Chemical kinetics and mesoscopy]. — 2014. — Vol. 16, No. 2. — P. 226–234.
- Bhattacharjee S., King M. D., Paolini C. Structure of downward spreading flames: a comparison of numerical simulation, experimental results and a simplified parabolic theory // Combustion Theory and Modelling. — 2004. — Vol. 8, No. 1. — P. 23–39.

- Cockburn B., Jonhson C., Shu C.-W., Tamdor E. Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations. — Springer, 1998. — 454 p.
- de Ris J. L., Markstein G. H., Orloff L., Beaulieu P. A. Similarity of turbulent wall fire // Fire safety science. — 2003. — Vol. 7. — P. 259–270.
- Drysdale D. D., Macmillan A. J. R. Flame spread on inclined surfaces // Fire safety journal. — 1992. — Vol. 18. — P. 245–254.
- Ferziger J. H., Peric M. Computational methods for fluid dynamics. — Springer, 2002. — 426 p.
- Fureby C., Lofstrom C. Large-eddy simulations of bluff body stabilized flames // Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute. — 1994. — P. 1257–1264.
- Gualtieri C., Angeloudis A., Bombardelli F., Jha S., Stoesser T. On the values for the turbulent Schmidt number in environmental flows // Fluids. — 2017. — Vol. 2, No. 2. — 27 p.
- Hasemi Y. Thermal modeling of upward wall flame spread // Fire Safety Science: Proceedings of the First International Symposium. — 1985. — P. 87–96.
- Issa R. I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // Journal of Computational Physics. — 1985. — Vol. 62. — P. 40–65.
- Jiang F., de Ris J. L., Khan M. M. Absorption of thermal energy in PMMA by in-depth radiation // Fire Safety Journal. — 2009. — Vol. 44. — P. 106–112.
- Karpov A., Shaklein A., Korepanov M., Galat A. Numerical Study of the Radiative and Turbulent Heat Flux Behavior of Upward Flame Spread Over PMMA // Fire Science and Technology 2015. The Proceedings of 10th Asia-Oceania Symposium on Fire Science and Technology. — 2016. — P. 841–848.
- Karrhorm F. P. Numerical modelling of diesel spray injection, turbulence interaction and combustion: diss. ... PhD. Chalmers University of Technology, Goteborg, 2008. — 110 p.
- Leventon I. T., Stoliarov S. I. Evolution of flame to surface heat flux during upward flame spread on poly(methyl methacrylate) // Proceedings of the Combustion Institute. — 2013. — Vol. 34. — P. 2523–2530.
- Magnussen F. B., Hjertager B. H. On mathematical modelling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion // Symposium (International) on Combustion. — 1977. — P. 719–729.
- Menter F. R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // Turbulence, Heat and Mass Transfer. — 2003. — Vol. 4. — P. 625–632.
- Modest M. F. Radiative heat transfer. — Academic Press, 2003. — 822 p.
- Novozhilov V., Joseph P., Ishiko K., Shimada T., Wang H., Liu J. Polymer combustion as a basis for hybrid propulsion: a comprehensive review and new numerical approaches // Energies. — 2011. — Vol. 4. — P. 1779–1839.
- Patankar S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. — CRC Press, 1980. — 214 p.
- Quintiere J., Harkleroad M., Hasemi Y. Wall Flames and implications for Upward Flame Spread // Combustion Science and Technology. — 1986. — Vol. 48, No. 3–4. — P. 191–222.
- Ren N., Wang Y., Troune A. Large eddy simulation of vertical turbulent wall fires // The 9th Asia-Oceania Symposium on Fire Science and Technology. — 2013. — P. 443–452.
- Rhie C. M., Chow W. L. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation // AIAA/ASME 3rd joint thermophysics, fluids, plasma and heat transfer conference. — 1982. — P. 0998-1–0998-12.

- Shi J., Hu C., Shu C.-W.* A technique of treating negative weights in WENO schemes // *Journal of Computational Physics*. — 2002. — Vol. 175. — P. 108–127.
- Shu C.-W.* High orded weighted essentially nonoscillatory schemes for convection dominated problems // *SIAM Review*. — 2009. — Vol. 51, No. 1. — P. 82–126.
- Steinhaus T.* Evaluation of the thermophysical properties of poly(methylmethacrylate): a reference material for the development of a flammability test for micro-gravity environments: diss. . . MSc. The University of Maryland, 1999. — 194 p.
- Sweby P.K.* High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1984. — Vol. 21, No. 5. — P. 995–1011.
- Wang H. Y., Chateil B.* Numerical simulation of wind-aided flame spread over horizontal surface of condensed fuel in a confined channel // *International journal of on engineering performance-based fire codes*. — 2007. — Vol. 9, No. 2. — P. 65–77.
- Warnatz J., Maas U., Dibble R. W.* Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation. — Springer, 2006. — 389 p.
- Weller H. G., Tabor G., Jasak H., Fureby C.* A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques // *Computers in physics*. — 1998. — Vol. 12, No. 6. — P. 620–631.
- Williams F. A.* Combustion theory. — Princeton University, 1985. — 699 p.
- Yoder D. A.* Comparison of Turbulent Thermal Diffusivity and Scalar Variance Models // 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA SciTech Forum. — 2016. — No. AIAA 2016-1561. — 22 p.
- Zeng W. R., Li S. F., Chow W. K.* Review on chemical reactions of burning poly(methyl methacrylate) PMMA // *Journal of Fire Sciences*. — 2002. — Vol. 20. — P. 401–433.