

К вопросу об усилении и численной реализации полевой модели развития пожара

Ясинский Ф.Н., д-р физ.-мат. наук, Потемкина О.В., канд. хим. наук,
Сидоров С.Г., Ясинский И.Ф., кандидаты техн. наук,

Предложена методика вычислений для полевой модели пожара. Сформулированы способы, позволяющие уменьшить затраты компьютерного времени и увеличить точность результатов.

Ключевые слова: вязкость газовой смеси, дифференциальные уравнения, двухпараметрическая К-Е модель, моделирование горения.

On Strengthening and Numerical Realization of Developing Field Model of Fire

F.N. Yasinskiy, Doctor of Physics and Mathematics, O.V. Potemkina, Candidate of Chemistry,
S.G. Sidorov, I.F. Yasinskiy, Candidates of Engineering

The calculation method is offered for the fire spreading field model. The methods, allowing to decrease the compute time and increase the results exactness are formulated.

Key words: parallel programming, simulation, turbulence, sweep method.

Полевая модель пожара, согласно [1], опирается на следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} + \rho g_j, \quad (2)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \cdot \delta_{ij}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h) = \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_j^R}{\partial x_j}, \quad (4)$$

$$h = h_0 + \int_{T_0}^T c_p dT + \sum_{k=1}^N Y_k H_k, \quad (5)$$

$$c_p = \sum_{k=1}^N Y_k c_{pk}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k) = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + S_k, \quad (7)$$

$$p = \rho R_0 T \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k}. \quad (8)$$

Здесь t – время; u_i , $i = 1, 2, 3$ – три компоненты скорости; ρ , P , h – плотность, давление и теплосодержание газовой смеси; Y_k – весовые доли ее компонентов с молекулярным весом M_k и теплотой образования H_k , $k = 1, 2, \dots, N$; q_j^R , $j = 1, 2, 3$ – лучистый поток в направлении j ; g_j – ускорение свободного падения; T – температура.

Все указанные выше дифференциальные уравнения могут быть приведены к единой форме:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial Q}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v}{\sigma_Q} \frac{\partial Q}{\partial x_j} \right) + F_Q. \quad (9)$$

Здесь Q любая из следующих величин:

$Q = (u_1, u_2, u_3, K, T, E, P, \rho_1, \dots, \rho_N)$

где ρ_1, \dots, ρ_N – плотности компонент газовой смеси.

Исключение представляет лишь уравнение неразрывности (1). Предлагаем заменить его на уравнение

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = \sum_{j=1}^3 \sum \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v}{\sigma_p} \frac{\partial p}{\partial x_j} \right). \quad (10)$$

Здесь σ_p – некоторая специально подобранная константа, учитывающая перенос массы в потоке за счет турбулентных пульсаций, а не только конвективно, как это делается обычно. Впрочем, замена (1) на (10) уже давно делается в теории химических лазеров [2].

Переход от (1) к (10) не только оправдан с физической точки зрения, но (что особенно важно) ведет к большим вычислительным упрощениям. Эти упрощения состоят не только в вытекающем в результате этого единообразии в определении всех искомых величин по уравнениям типа (10), но и в более быстрой сходимости.

В [1] ничего не говорится о предпочтительном методе вычисления турбулентной вязкости. Не говорится также и о расчете химической кинетики, и зависимости теплоемкостей компонентов от температуры. Опираясь на наш вычислительный опыт, рекомендуем поступить следующим образом.

Полная эффективная вязкость газовой смеси состоит из молекулярной ν_{mol} и турбулентной ν_{turb} :

$$\mu = \rho (\nu_{mol} + \nu_{turb}).$$

Для вычисления ν_{turb} наиболее удобны два метода: А.Н. Секундова и К-Е метод.

В модели А.Н. Секундова поле турбулентной вязкости описывается дифференциальным уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} v_{turb} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial}{\partial x_i} v_{turb} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left((v_{mol} + X v_{turb}) \frac{\partial}{\partial x_i} v_{turb} \right) +$$

$$+ v_{turb} f(v_{turb}/8v_{mol}) D - \gamma L_{min}^{-2} (v_{mol} + \beta v_{turb}) v_{turb}. \quad (11)$$

Здесь $f(\cdot)$ – следующая функция:

$$f(z) = 0,2 \frac{z^2 + 1,47 \cdot z + 0,2}{z^2 - 1,47 \cdot z + 1}; \quad (12)$$

X, β, γ – эмпирические константы ($X = 2; \beta = 0,06; \gamma = 50$).

На неподвижных твердых поверхностях Γ ставится граничное условие $v_{turb}|_{\Gamma} = 0$. Чтобы поле турбулентной вязкости сформировалось, нужно задать некоторое его начальное значение.

Еще более совершенной моделью для вычисления поля турбулентной вязкости является двухпараметрическая K - E модель. Здесь K – кинетическая энергия турбулентных пульсаций, а E – скорость диссипации кинетической энергии этих пульсаций. Модель задается следующими выражениями:

$$v_{turb} = c_{\mu} \frac{K^2}{E}; \quad (13)$$

$$\frac{\partial K}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial K}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_{eff}}{\sigma_K} \cdot \frac{\partial K}{\partial x_j} \right) + S_K; \quad (14)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial E}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{v_{eff}}{\sigma_E} \cdot \frac{\partial E}{\partial x_j} \right) + S_E; \quad (15)$$

$$S_K = v \cdot D - E; \quad (16)$$

$$S_E = (c_1 D - c_2 E) \cdot E / K; \quad (17)$$

где $v_{eff} = v_{\mu} + v_{turb}$; $c_{\mu} = 0,09$; $c_1 = 1,44$; $c_2 = 1,92$;

$\sigma_K = 1$; $\sigma_E = 1,3$.

Начальные и граничные условия обычно берут в виде

$$K_0 = c_K \sum_j u_j^2; \quad E_0 = c_E \cdot K_0^{3/2}, \quad (18)$$

где c_K, c_E – некоторые малые положительные постоянные.

Граничные условия на твердых поверхностях имеют вид

$$\left. \frac{\partial K}{\partial y} \right|_{\Gamma} = 0; \quad \left. \frac{\partial E}{\partial y} \right|_{\Gamma} = 0. \quad (19)$$

Здесь y – нормаль к неподвижной твердой поверхности.

Очевидно, что обе модели предлагают уравнения, удовлетворяющие универсальной форме (10).

Указанная выше система уравнений, дополняется уравнениями химической кинетики. Если X_{α} – символ компонента номер α , а $a_{\alpha r}$ и $b_{\alpha r}$ – стехиометрические коэффициенты r -реакции

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha r} X_{\alpha} \leftrightarrow \sum_{\alpha} b_{\alpha r} X_{\alpha}, \quad (20)$$

то изменение плотности ρ_{α} в заданном жидком микрообъеме компонента номер α за счет реакций описывается системой

$$F_{\alpha} = \left(\frac{d\rho_{\alpha}}{dt} \right)_c = M_{\alpha} \sum (b_{\alpha r} - a_{\alpha r}) \frac{d\omega_r}{dt} \quad (21)$$

$$\frac{d\omega_r}{dt} = \hat{K}_{fr} \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right)^{a_{\alpha r}} - \hat{K}_{br} \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho_{\alpha}}{M_{\alpha}} \right)^{b_{\alpha r}} \quad (22)$$

где $\hat{K}_{fr}, \hat{K}_{br}$ – коэффициенты скоростей для прямой и обратной реакции, очень сильно зависящие от температуры:

$$\hat{K}_r = K_r^0 T^{n_r} \exp(-\hat{E}_r / T), \quad (23)$$

где K_r^0, \hat{E}_r, n_r – некоторые постоянные, характерные для r -реакции.

Выделение или поглощение тепла на множестве реакций и соответствующее изменение температуры определяется источником членом для температурного уравнения

$$F_T = \frac{1}{c \cdot \rho} \sum_r q_r \frac{d\omega_r}{dt}, \quad (24)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{\sigma_p} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + F_T. \quad (25)$$

Наша вычислительная практика позволяет рекомендовать следующую методику интегрирования описанной системы уравнений.

1. Расщепление универсального уравнения (10) для всех искомых величин на множество одномерных уравнений:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + u_i \frac{\partial Q}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v}{\sigma_Q} \frac{\partial Q}{\partial x_i} \right), \quad (26)$$

$i = 1, 2, 3$,

$$\left(\frac{dQ}{dt} \right) = F_Q. \quad (27)$$

Локально-одномерное расщепление хорошо описано в [3].

В пределах малого шага по времени τ эти уравнения интегрируются последовательно. Результаты, полученные при решении предыдущего уравнения, являются исходными для следующего. Интегрируются уравнения переноса методом скалярных прогонок по прямому, параллельному соответствующей оси. При построении разностных схем используются «противоточные производные», что существенно увеличивает устойчивость вычислений. Разностная схема для направления, например, x_1 будет иметь вид

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau} (Q_{ijl}^{K+1} - Q_{ijl}^K) + \\
& + \frac{1}{2h} \left((u_{xijl}^K - |u_{xijl}^K|) (Q_{i+1jl}^{K+1} - Q_{ijl}^{K+1}) + \right. \\
& \left. + (u_{xijl}^K + |u_{xijl}^K|) (Q_{ijl}^{K+1} - Q_{i-1jl}^{K+1}) \right) = \\
& = \frac{1}{2\sigma_Q h_1^2} \left((v_{i+1jl}^K + v_{ijl}^K) (Q_{i+1jl}^{K+1} - Q_{ijl}^{K+1}) - \right. \\
& \left. - (v_{xijl}^K + v_{i-1jl}^K) (Q_{ijl}^{K+1} - Q_{i-1jl}^{K+1}) \right).
\end{aligned} \quad (28)$$

Нижние индексы соответствуют номерам узлов трехмерной сетки, а верхний – номеру момента времени.

Это выражение приводится к виду, при котором искомые Q_{ijl}^{K+1} , соответствующие новому моменту времени, собраны в левой части равенства

$$A_{ijl}^K Q_{i-1jl}^{K+1} + B_{ijl}^K Q_{ijl}^{K+1} + C_{ijl}^K Q_{i+1jl}^{K+1} = D_{ijl}^K, \quad (29)$$

где $A_{ijl}^K, B_{ijl}^K, C_{ijl}^K, D_{ijl}^K$ – коэффициенты, получающиеся при приведении (28) к форме (29).

Согласно правилам прогонки, решение ищется в виде

$$Q_{i-1jl}^{K+1} = L_{ijl}^K Q_{ijl}^{K+1} + M_{ijl}^K. \quad (30)$$

Прямая прогонка выполняется по формулам

$$L_{i+1jl}^K = -C_{ijl}^K / (B_{ijl}^K + A_{ijl}^K L_{ijl}^K), \quad (31)$$

$$M_{i+1jl}^K = (D_{ijl}^K - A_{ijl}^K M_{ijl}^K) / (B_{ijl}^K + A_{ijl}^K L_{ijl}^K). \quad (32)$$

А обратная – согласно (30).

После окончания операций с уравнениями переноса делается шаг по времени для уравнений химической кинетики (21), (22). Обычно они отличаются высокой жесткостью, мерой чего является отношение абсолютных значений собственных чисел (максимального к минимальному) якобиана правых частей кинетических уравнений.

Наилучшим в этом случае оказывается метод Гира [3].

При решении уравнений химической кинетики удобно воспользоваться асинхронным интегрированием, состоящим в том, что для

различных кинетических уравнений выбираются различные шаги по времени. Эти шаги являются кратными друг другу, что позволяет затем их вместить в некоторый объединяющий шаг. За счет такого подхода исключается ситуация, когда небольшая жесткая подсистема навязывает малый шаг по времени всей системе. При применении асинхронной технологии для значений переменных, соответствующих некоторому локальному времени, применяется интерполяция по Лагранжу. Отметим, что такая технология успешно применяется в молекулярной динамике [4] и в расчетах лазерных систем [5].

Главная трудность при моделировании горения состоит в большом числе уравнений химической кинетики и уравнений переноса для каждой из многочисленных компонент. Весьма обнадеживающим является следующее: возникшее в последнее время направление по созданию суперкомпьютеров на базе графических процессоров и программной системы CUDA обладает тем большей эффективностью, чем на большее число потоков удается разбить вычислительный процесс. Число таких потоков может быть очень велико. Это вселяет определенные надежды на прогресс в вопросе математического моделирования горения.

Список литературы

1. МЧС России, Приказ №382 от 30.06.2009. «Об утверждении методики определения расчетных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности».
2. Риврд У., Батлер Т., Фармер О. Нестационарные турбулентные течения химически реагирующих газовых смесей / Численное решение задач гидромеханики. – М.: Мир, 1977. – С. 184–193.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – С. 512.
4. Street W.B., Tildesley, Multiple time-step methods in molecular dynamics // Molecular Physics. – 1978. – Vol. 35. – №03. – P. 639–648.
5. О построении быстрых алгоритмов для задач релаксационной газовой динамики / Э.Л. Комаров, И.Н. Макаров, Н.Н. Романова, Ф.Н. Ясинский // Сб. «Физико-химическая кинетика в газовой динамике» / Институт механики МГУ. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – С. 109–114.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ ГК № 13 G25.31.0077.

Ясинский Федор Николаевич,

ГОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», доктор физико-математических наук, профессор кафедры высокопроизводительных вычислительных систем, телефон (4932) 26-98-29.

Потемкина Ольга Владимировна,

Ивановский институт государственной противопожарной службы МЧС России, заместитель начальника, телефон (4932) 26-16-24.

Сидоров Сергей Георгиевич,

ГОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», кандидат технических наук, доцент, зав. кафедрой высокопроизводительных вычислительных систем, телефон (4932) 26-98-29.

Ясинский Игорь Федорович,
Ивановская государственная текстильная академия,
кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной математики и информационных технологий,
e-mail: igor2266@yandex.ru