

FDS6.9.1 技术手册

目 录

目 录.....	2
表目录.....	7
图目录.....	8
1 前言.....	10
2 绪论.....	10
3 FDS 模型概述	12
3.1 LES 形式.....	12
3.2 数值网格.....	12
3.2.1 交错网格.....	12
3.2.2 单元边.....	13
3.3 质量和组分输运.....	14
3.4 低马赫数假设.....	15
3.5 动量传输.....	15
3.6 燃烧和辐射.....	16
3.6.1 燃烧.....	16
3.6.2 辐射.....	16
3.7 求解流程.....	17
4 质量、物种和焓传输.....	19
4.1 状态方程.....	19
4.2 质量和组分输运.....	20
4.2.1 通量限制器.....	20
4.2.2 质量源项的时间分割.....	21
4.2.3 温度、物种质量分数和密度的边界条件	21
4.3 速度散度.....	24
4.3.1 质量和能量源项.....	24
4.3.2 扩散项.....	25
4.3.3 数值混合校正.....	25
4.3.4 温度计算.....	25
4.3.5 显焓.....	25
4.3.6 计算背景压力的升高.....	25
4.3.7 组合压力区.....	26
5 动量输运和压力.....	27
5.1 大涡模拟 LES.....	27
5.1.1 DNS 动量方程.....	27
5.1.2 LES 动量方程.....	27
5.1.3 子网格动能生成.....	29
5.2 湍流黏度模型.....	29
5.2.1 Smagorinsky 模型的常数系数.....	29
5.2.2 动态 Smagorinsky 模型.....	30
5.2.3 Deardorff 模型（默认）	30
5.2.4 Vreman 模型.....	30
5.2.5 壁面适应性局部涡粘（WALE）模型.....	30
5.2.6 导热和气体物质扩散.....	31
5.2.7 数值实现.....	31
5.2.8 直接数值模拟（DNS）的传输系数	31

5.3 速度压力耦合	32
5.3.1 动量方程简化	32
5.3.2 动量方程的有限差分近似	33
5.3.3 泊松方程求解压力	35
5.3.4 更新速度的迭代程序	38
5.4 速度边界条件	40
5.4.1 光滑壁面	40
5.4.2 粗糙壁面	40
5.4.3 近壁面涡粘模型	41
5.4.4 湍流粘度的壁面阻尼	41
5.4.5 开放边界（通用，风）	41
5.4.6 网格边界	41
5.5 时间步和稳定性约束	41
5.5.1 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)约束条件	41
5.5.2 Von Neumann 约束条件	42
5.5.3 可实现的质量密度约束	42
5.5.4 可实现的流体体积约束	43
5.5.5 传热约束	43
5.5.6 调整时间步	43
6 燃烧（化学反应流）	44
6.1 集总组分法	44
6.1.1 集总组分和原始组分的关系	44
6.1.2 默认的碳氢燃烧化学	45
6.2 湍流燃烧	46
6.2.1 反应时间尺度模型	46
6.2.2 混合和反应的时间积分	47
6.2.3 通过时间分割的数值解法	48
6.2.4 无限快化学反应	49
6.2.5 有限速率化学反应（Arrhenius 反应）	49
6.2.6 热释放率	51
6.3 灭火	51
6.3.1 临界火焰温度	51
6.3.2 灭火主要基于氧气浓度	52
6.3.3 基于燃料和氧气的灭火	53
6.3.4 自动点火温度	53
7 热辐射	54
7.1 辐射输运方程	54
7.1.1 辐射源项	54
7.1.2 辐射对能量方程的贡献	55
7.1.3 修正发射源项	56
7.2 数值方法	57
7.2.1 角度离散化	57
7.2.2 空间离散	58
7.2.3 切割单元 cut cell 的空间离散化	60
7.2.4 边界条件	60
7.3 小液滴和微粒的吸收与散射	61
7.3.1 吸收和散射系数	61
7.3.2 近似内散射积分	62
7.3.3 前向散射分量	62
7.3.4 求解程序	62

7.3.5	液滴和小颗粒吸收的热量	63
7.4	非散射大颗粒的吸收	63
8	固体相	64
8.1	固体的热传导方程	64
8.1.1	固体辐射传热	64
8.1.2	固体的对流传热	65
8.1.3	成分平均热物性	67
8.2	热解模型	67
8.2.1	指定热释放率	67
8.2.2	通过热通量调节燃烧速率	68
8.2.3	固体燃料	69
8.2.4	液体燃料	70
8.2.5	收缩和膨胀材料	71
9	气溶胶	72
9.1	气溶胶沉积	72
9.1.1	重力沉降	72
9.1.2	热泳沉积	73
9.1.3	湍流沉积	73
9.2	气溶胶凝聚	73
9.3	气溶胶擦洗	75
9.4	气溶胶凝结	76
9.4.1	气体凝结	76
9.4.2	壁面冷凝	76
10	拉格朗日粒子	77
10.1	气相中的粒子传输	77
10.1.1	使用拉格朗日粒子表示植被	78
10.1.2	减少阻力	78
10.2	液滴大小分布	79
10.3	喷雾初始化	81
10.4	液滴的加热和蒸发	81
10.4.1	过滤体积源项	83
10.4.2	拉格朗日对速度散度的贡献	83
10.5	水灭火	83
10.5.1	液滴在表面的迁移	83
10.5.2	水导致热解率降低	83
10.6	使用拉格朗日粒子模拟复杂物体	84
10.6.1	多孔介质（过滤器、筛网、金属网和类似材料）	84
10.7	湍流扩散	85
10.7.1	无质量示踪器	85
10.7.2	大质量粒子	85
11	火灾探测设备	86
11.1	喷洒器	86
11.2	热探测器	86
11.3	烟雾探测器	86
12	Heating, Ventilation, and Air Conditioning (HVAC)	88
12.1	控制方程	88
12.2	求解程序	88
12.2.1	过滤	90
12.2.2	节点损耗	90
12.2.3	管道损耗	90

12.2.4	加热和冷却盘管	91
12.3	泄漏	91
12.4	将暖通空调求解器与 FDS 连接起来	91
12.4.1	暖通空调求解器的边界条件	91
12.4.2	FDS 水动力学求解器的边界条件	91
12.5	风扇曲线	92
12.6	管道输送延迟	93
13	非结构几何 (Beta)	95
13.1	复杂几何的标量传输离散化	95
13.1.1	多物种质量平衡方程	95
13.1.2	二维交错网格有限体积法	96
13.1.3	切割单元中的有限体积离散化	96
13.1.4	扩散项的切分单元离散化	97
13.1.5	平流项的切分单元离散化	99
13.1.6	非稳态演化: 标量的显式时间积分	100
13.2	动量时间行进和沉浸式边界	100
13.2.1	动量-压力耦合	100
13.2.2	应力法: 通过直角坐标应力估算切向速度	101
13.3	能量方程、热力学散度	104
13.3.1	散度约束	104
13.3.2	标量平流项的有限体积离散化	104
13.3.3	离散热力学散度表达式	105
13.3.4	以有限体积形式计算扩散热通量	105
13.3.5	以有限体积形式计算热传导通量	105
参考文献	106
附录 A	术语	115
附录 B	低流速大涡模拟的速度散度约束条件	119
附录 B.1	散度限制	119
附录 B.1.1	来自连续性	119
附录 B.1.2	来自显焓	120
附录 B.1.3	比较	120
附录 B.2	散度离散	120
附录 B.2.1	离散通量散度的因式分解	120
附录 B.2.2	实例: 纯迎风	121
附录 B.2.3	实例: 中心差分	121
附录 B.2.4	通用实现: 使用通量限制器	122
附录 B.3	分解时间导数	122
附录 B.4	散度表达式之间的等价关系	123
附录 B.5	恒定比热的简化	124
附录 C	气相吸收系数	125
附录 D	复杂化学积分的数值方法	132
附录 E	未混合分数	135
附录 F	湍流批式反应器模型的极限行为	137
附录 F.1	Burke-Schumann 解决方案	137
附录 F.2	EDC 基础	137
附录 F.3	扩展 EDC	137
附录 G	标量边界校正	138
附录 H	Lilly 湍流分析法	140
附录 I	流体-粒子动量传递	142
附录 J	辐射传输方程的简化	143

附录 K 液体燃料吸收系数	144
附录 L 导热方程求解	145
附录 L.1 一维固体导热	145
附录 L.2 可选择的三维固体传热	148
附录 M 开发液滴蒸发的隐式求解方案	150
附录 N 解决隧道中泊松比方程的特殊预处理方案	153
附录 O 固相反应的能量和质量守恒	154
附录 O.1 质量守恒	154
附录 O.2 能量守恒	154
附录 O.2.1 固相反应热	154
附录 O.2.2 计算固体单元和气体单元的温度差	155
附录 P 比例热解 (Spyro) 法	157
附录 P.1 固定厚度缩放模型	157
附录 P.2 适应多种厚度	157
附录 P.3 锥面参考热通量	159

表目录

表 7-1 甲烷光谱带的界限 (CH_4)	55
表 7-2 乙烷光谱带的界限 (C_2H_6)	55
表 7-3 乙烯光谱带的界限 (C_2H_4)	55
表 7-4 丙烯光谱带的界限 (C_3H_6)	55
表 7-5 丙烷光谱带的界限 (C_3H_8)	55
表 7-6 庚烷光谱带的界限 (C_7H_{16})	56
表 7-7 甲苯光谱带的界限 (C_7H_8)	56
表 7-8 乙醇光谱带的界限 (CH_3OH)	56
表 7-9 甲基丙烯酸酯光谱带的界限 (MMA)	56
表 8-1 强制对流传热相关系数[75].....	66
表 13-1 RADCAL 中包含的 CO_2 光谱带。.....	127
表 13-2 RADCAL 中包含的 CO 光谱带.....	127
表 13-3 RADCAL 中包含的 CH_4 光谱带.....	127
表 13-4 RADCAL 中包含的 C_2H_4 光谱带.....	128
表 13-5 RADCAL 中包含的 C_2H_6 光谱带.....	128
表 13-6 RADCAL 中包含的 C_3H_6 光谱带.....	128
表 13-7 RADCAL 中包含的 C_3H_8 光谱带.....	129
表 13-8 RADCAL 中包含的 C_7H_8 光谱带.....	129
表 13-9 RADCAL 中包含的 C_7H_{16} 光谱带	129
表 13-10 RADCAL 中包含的 CH_3OH 光谱带.....	129
表 13-11 RADCAL 中包含的 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ 光谱带.....	130
表 13-12 选定液体的有效吸收系数。.....	144

图目录

图 3-1 网格单元 ijk 中流量变量的位置。箭头表示给定变量的正方向。标量变量，如密度 ρ 、温度 T 和压力 p ，定义在单元中心。速度分量 $\mathbf{u} = (u, v, w)$ 定义在各自的单元面上，涡度分量 $\vec{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ 位于单元边缘。	13
图 3-2 沿 x 轴计算边缘周围流量变量的位置。在这种情况下，边缘成分指数 (IEC) 为 1。与边缘连接的面的方向（由面的法线方向定义）为 $\text{IOR} = \pm 2, \pm 3$ 。边缘周围的涡度为 $\omega_x = \partial w / \partial y - \partial v / \partial z$ 。	13
图 4-1 2:1 细化的网格界面边界.....	22
图 4-2 垂直粗化网目。网目 1 是细网。网格 2 是粗网格。在本例中，粗细比为 1:2。实心圆点代表内部气相未知值。开圆代表幽灵单元值	24
图 6-1 反应时间尺度模型.....	46
图 6-2 EXTINCTION 1 模式的灭火标准	52
图 7-1 角度离散化坐标系.....	57
图 10-1 典型工业规模洒水器水滴大小分布的累积体积分数和累积数量分数函数。中位体积直径 $D_{v,0.5}$ 为 1 毫米， $\sigma = 0.48$ ， $\gamma = 2.4^\circ$	80
图 12-1 相互依存的压力解决方案示意图。所有非阴影部分的压力都是相互依存的。	89
图 12-2 暖通空调风机的风机曲线、系统曲线和运行点示意图	92
图 12-3 确定管道走向的插图。左侧有一条管道。右侧有两条管道	93
图 13-1 二维切割单元 FV 离散化： (a) GASPHASE 切割单元 ii 的边界为 1,2 INBOUNDARY 面， 3,6 GASPHASE 切割面和 4,5 GASPHASE 规则面。(b) 用于 GASPHASE 切面 3 和 INBOUNDARY 切面 1 的扩散项离散化的几何元素。	97
图 13-2 通量有限插值： (a) 4 点模板通量有限插值到面 RC 的常规和切割单元物种密度。(b) 模板中较低的单元位于实心区域（单元 S ）内，因此该极值点使用了内部单元值 ρY_2 。	100
图 13-3 使用壁面函数估算穿过顶点 B 并与流体网格对齐的固体边界的壁面应力 τ_w 。	103
图 13-4 速度梯度和应力分量估算。(a) 对切面 (i, j, k) 的速度梯度 $\partial u / \partial y$ 和剪应力分量 $\mu \partial u / \partial y$ 是利用穿过顶点 B 的实体边界的壁面函数估算的，并转移到车轴边缘 IB 、 RC 。(b) 用于获取切向速度导数、剪应力分量的壁面函数细节。	103
图 13-5 一个量围绕一个固定值在 0 和 1 之间波动的示例.....	134
图 13-6 假设计算单元（间歇式反应器）中某一时刻的子网格环境。(a) 湍流传输后高度非混合的解析标量场。(b) 理想化的子网格环境：局部质量分数为 0、1 或等于混合平均值。在本模型中，灰色区域称为“混合反应器区”，在间歇式反应器的整合过程中随时间（体积和成分）而变化。	135
图 13-7 固相单元的布局。在此示例中，每个固相单元拉伸 2 倍，直到达到固相的一半，然后单元收缩 2 倍。气相和固相的界面位于 $x_0 = R - r_0$ ，其中 R 是圆柱体或球体的半	

径。背面边界条件应用于 $x_{10} = R - r_{10}$ 。“虚拟”单元 0 和 $N + 1 = 11$ 位于固相的左右两	
侧，与单元 1 和 $N = 10$ 大小相同。	145
图 13-8 用于开发锥体参考通量的 FDS 几何图形。红色为锥形加热器，绿色为样品表面。	
该域在平面 $y=0$ m 处剪切。	159
图 13-9 (左图) 归一化火焰热通量与 HRRPUA 的函数关系。(右图) 最大火焰热通量与 Δh	
的函数关系。	160
图 13-10 预测热通量与经验参考热通量的散点图。	160

1 前言

本文件遵循“确定性火灾模型预测能力评估标准指南”(ASTME 1355)[1]中规定的总体框架,为火灾动力学模拟器(FDS)提供了理论基础。这是四卷配套文件中的第一卷,统称为《FDS 技术参考指南》[2]。第 2 卷、第 3 卷和第 4 卷分别介绍了模型验证、实验验证和配置管理。

另一份文件《火灾动力学模拟器用户指南》[3]介绍了 FDS 软件的实际使用方法。

2 绪论

Howard Baum, NIST Fellow Emeritus

用数值方法研究火灾动力学的想法可以追溯到计算机时代的初期。事实上,流体动力学、热传递和燃烧的基本守恒方程早在一个多世纪前就被写下来了。尽管如此,由于问题本身的复杂性,实际的火灾数学模型(有别于受控燃烧)还是相对较新的。事实上,霍伊特-霍特尔特(Hoyt Hottel)在其早期火灾研究简史中指出:“可以说,火灾是仅次于生命过程的最复杂的现象”[4]。

困难主要集中在三个方面:首先,由于火灾的偶然性,有大量可能发生的火灾情况需要考虑。其次,对大多数火灾情况进行必要计算所需的物理洞察力和计算能力有限。任何基于基本原理的火灾研究都必须至少考虑崖体空气动力学、多相流、湍流混合和燃烧、辐射传输和共轭传热的某些方面;所有这些方面本身就是活跃的研究领域。最后,大多数火灾中的“燃料”都不是燃料。因此,可能无法获得描述提供燃料的凝结相材料降解特性所需的数学模型和数据。事实上,对真实材料燃烧时的物理和化学变化进行数学建模的工作仍处于起步阶段。

为了取得进展,必须大大简化提出的问题。首先,我们要做的不是寻求一种适用于所有火灾问题的方法,而是先研究几种似乎最适合分析的情况。我们希望,为研究这些“简单”问题而开发的方法能够随着时间的推移得到推广,以便分析更复杂的情况。其次,我们必须学会接受对火灾的理想化描述和理想化方程的近似解。最后,这些方法应该能够得到系统的改进。随着我们的物理洞察力和计算能力越来越强大,分析方法也会随之发展。

迄今为止,已经出现了三种不同的火灾模拟方法。每种方法都将火灾视为随时间演变的三维过程。最先成熟的“区域”模型描述的是隔间火灾。每个隔间被划分为两个空间均质体积,即高温的上层和低温的下层。每一层都强制执行质量和能量平衡,并根据情况以微分方程或代数方程的形式附加描述其他物理过程的模型。这些现象的例子包括火羽、流经门窗和其他通风口、辐射和对流传热以及固体燃料热解。Jones[5]和 Quintiere[6]分别在论文中对区域建模概念背后的物理和数学假设进行了描述,并记录了 1983 年之前的发展情况。从那时起,模型开发工作取得了进展,目前已广泛提供了实现这些模型的有文档支持的软件[7]。

由于区域模型在物理和计算上相对简单,因此在火灾情景分析中得到了广泛应用。只要不需要详细的物理特性空间分布,并且两层描述合理地接近现实,这些模型就相当可靠。然而,就其本质而言,没有办法对其进行系统改进。随着计算能力的快速增长和计算流体动力学(CFD)的相应成熟,以 CFD 为基础的“现场”模型开始应用于火灾研究问题。实际上,所有这些工作都是基于纳维-斯托克斯方程(RANS)的雷诺平均形式所提供的概念框架,特别是 Patankar 和 Spalding 首创的 $k-\varepsilon$ 湍流模型[8]。使用 CFD 模型可以描述复杂几何形状中的火灾,并纳入各种物理现象。然而,这些模型在火灾应用中存在一个根本性的局限--模型方程根部的平均程序。

RANS 模型是作为流体动力学守恒方程的时间平均近似值而开发的。虽然没有明确说明平均时间的确切性质,但它显然足够长,需要引入大的涡流传输系数来描述未解决的质量、动量和能量通量。这就是即使是分辨率最高的火灾模拟结果看起来也很平滑的根本原因。可分辨的最小长度尺度是由局部速度与平均时间的乘积决定的,而不是由底层计算网格的空间分辨率决定的。RANS 模型的这一特性通常在数值计算中通过使用隐式数值技术来获取较大的时间步长来加以利用。

遗憾的是,这种方法失去了大多数火灾羽流所特有的大涡流结构的演变,也失去了对局部瞬态事件的预测。有时有人认为,用于定义方程的平均过程是对相同实验或假设情景的多次重复进行的“集合平均”。然而,这在火灾研究中是一个没有实际意义的问题,因为无论是实验还是真实场景,都没有按照对方程的解释所要求的意义进行复制。将“大涡流模拟”(LES)技术应用于火灾研究的目的,是为了在速度越来越快的计算机所允许的更精细网格上,从火灾模拟中提取更高的时间和

空间保真度。

LES 一词指的是描述气体燃料和燃烧产物与火灾周围局部大气的湍流混合过程。这一过程决定了大多数火灾的燃烧速度,并控制着烟雾和热气的扩散,但却极难准确预测。不仅在火灾研究中,在几乎所有涉及湍流流体运动的现象中都是如此。LES 技术背后的基本理念是,造成大部分混合的涡流足够大,可以通过流体动力学方程以合理的精度计算出来。人们希望(最终必须通过与实验的比较来证明),小尺度的涡流运动可以被粗略地考虑或忽略。

必须简化描述由火灾引起的流体的质量、动量和能量传输的方程,以便能够有效地解决相关的火灾问题。流体动力学的一般方程描述了丰富多样的物理过程,其中许多与火灾无关。如果保留这种一般性,将导致极其复杂的计算任务,而对火灾动力学的深入了解却寥寥无几。雷姆和鲍姆开发的简化方程[9]已被更广泛的燃烧研究界采用,被称为“低马赫数”燃烧方程。它们描述了气体在化学放热和浮力作用下的低速运动。低速指的是气体速度小于 0.3 马赫数(100 米/秒);但需要注意的是,目前对 FDS 的验证仅扩展到约 0.1 马赫数。Oran 和 Boris 在参考文献[10]中题为“快速和慢速流动的耦合连续性方程”一章中,对应用于各种反应流态的技术进行了有益的讨论。他们评论说:“要同时使用一种算法来处理快速和慢速流动,通常需要付出沉重的代价,这种代价转化为每个时间步的许多计算机操作,通常用于求解多个复杂的矩阵运算”。

低马赫数方程的数值求解方法是将模拟火灾的物理空间划分为大量矩形单元。每个单元内的气体速度、温度等被假定为均匀的,只随时间变化。模拟火灾动态的精确度取决于可纳入模拟的单元格数量。这一数量最终会受到可用计算能力的限制。目前,单处理器台式电脑将此类单元的数量限制在最多几百万个。这意味着计算所能解决的最大与最小涡长尺度之比(模拟的“动态范围”)大约为 100。并行处理可以在一定程度上扩大这一范围,但如果要模拟所有相关的火灾过程,需要考虑的长度尺度范围大约为 10^4 到 10^5 ,因为燃烧过程的长度尺度为 1 毫米或更小,而与建筑火灾相关的长度尺度则为数十米。下面讨论的数值方程的形式取决于我们希望直接捕捉光谱的哪一端,以及忽略或近似哪一端。

3 FDS 模型概述

本章介绍了 FDS 的控制方程和一般求解程序概要。详细内容见后续章节。本章的目的是强调求解方法的各个方面，使其适用于热驱动流动模拟，特别是火灾模拟。该模型在默认情况下的一些主要特点包括：

- 低马赫大涡流模拟 (LES)
- 显式、二阶、动能守恒数值计算
- 结构化、均匀、交错的网格
- 处理流动障碍物的简单沉浸边界法
- 通用的“集合物种”法 (利用反应进展变量简化化学反应)
- Deardorff 涡流粘度子网格封闭
- 恒定湍流施密特数和普朗特数
- 燃料和氧化剂之间单步反应的涡流耗散概念 (快速化学反应)
- 灰气辐射与辐射传输方程的有限体积解

不过，该模型并不局限于这些简单的算法。例如，用户可以指定多种反应、有限速率化学、宽带辐射模型以及其他各种特殊功能。更详细的物理过程会增加计算成本，用户有责任从提高特定应用精度的角度来证明增加成本的合理性。默认模型选项是根据各种全尺度验证实验的结果选定的 [11]。

下面概述的算法经历了大约三十年的演变。最初，该算法的设计目的是研究布西内斯克极限的浮力烟羽；也就是说，假设流体不可压缩，但包含一个浮力源项。这种方法基于火灾研究中的一个悠久传统，即使用染色盐水引入装满淡水的水箱来模拟烟雾运动。最终，这种方法被证明局限性太大，但该算法的一些主要特点，如低马赫数近似，仍被保留了下来。

3.1 LES 形式

大涡模拟 (LES) 方程是通过对质量、动量和能量的传输方程进行低通滤波器 (以宽度 Δ 为参数) 得到的。就我们的目的而言，将 LES 方程中的滤波场视为单元手段就足够了。例如，在一维中，宽度为 Δ 的单元的滤波密度为

$$\bar{\rho}(x, t) = \frac{1}{\Delta} \int_{x-\Delta/2}^{x+\Delta/2} \rho(r, t) dr \quad (3.1)$$

在 FDS 中，滤波宽度 Δ 相当于局部单元大小 δx ，是后面讨论的湍流粘度和反应时标子模型中的一个关键参数。取 $\Delta = \delta x$ 的做法称为隐式滤波。不过，需要注意的是，隐式滤波并不意味着耗散数值计算。FDS 对动量采用动能守恒中心差分方案，对湍流应力采用基于物理的闭合。在下文中，由于算法中不执行显式滤波操作，因此滤波形式主义被放宽 (为清晰起见删除了上划符号)。LES 公式的详细推导见第 5 章。

3.2 数值网格

由于 FDS 的设计目的是模拟建筑物内的热驱动气流，因此最明显、最简单的数值网格是直线网格。事实上，由于 FDS 是一种大涡度模拟 (LES) 模型，因此最好采用均匀网格，最终用户选择的唯一数值参数就是网格的三个维度。一旦建立，就可以比较简单地定义矩形障碍物，根据网格确定的分辨率水平来定义几何形状。这些障碍物与底层网格“咬合”，是沉浸边界法 (IBM) 的一种基本形式。在 FDS 中，通过第 13 章所述的切割单元法，可以实现非结构化几何体。

3.2.1 交错网格

在一系列间距均匀的三维网格上使用二阶精确有限差分法对治理方程进行逼近。使用消息传递接口 (MPI) 库可并行处理多个网格。标量被分配到每个网格单元的中心、相应单元面的速度分量以及单元边缘的涡度分量。这就是通常所说的交错网格 [12][13]。其主要目的是通过自然地表示压力单元的速度散度 (模型中非常重要的热力学量) 来避免压力-速度耦合中的“棋盘格”现象。图

3-1 显示了各种流动变量在给定的网格单元中的位置。

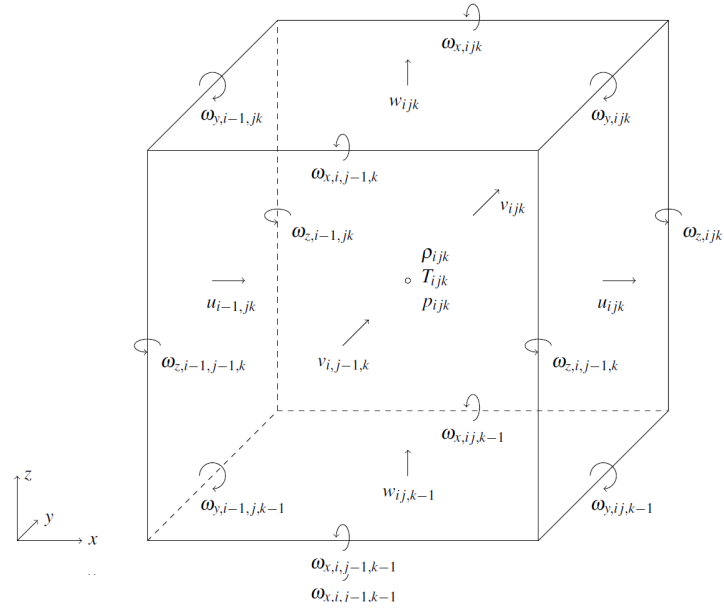


图 3-1 网格单元 ijk 中流量变量的位置。箭头表示给定变量的正方向。标量变量，如密度 ρ 、温度 T 和压力 p ，定义在单元中心。速度分量 $\mathbf{u} = (u, v, w)$ 定义在各自的单元面上，涡度分量 $\vec{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ 位于单元边缘。

3.2.2 单元边

在 FDS 交错网格布置中，单元边缘是离对角线应力和涡度的存储位置。计算边缘可变位置环境如下所述。

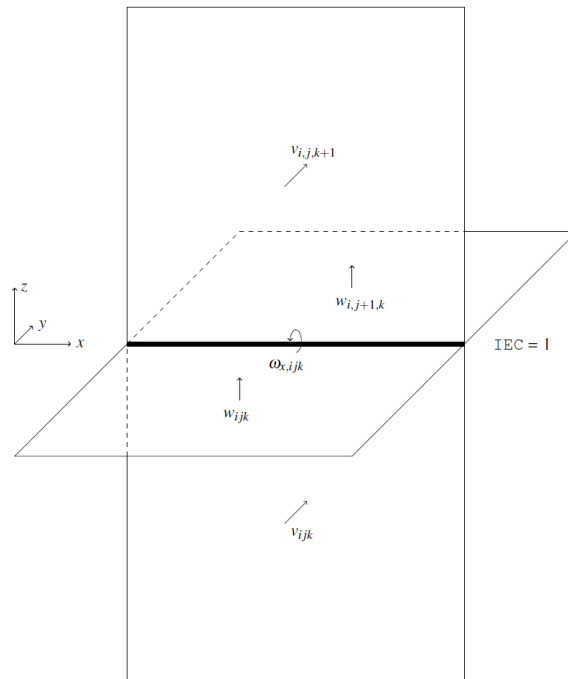


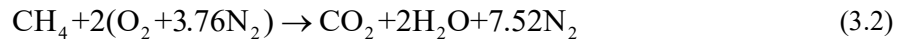
图 3-2 沿 x 轴计算边缘周围流量变量的位置。在这种情况下，边缘成分指数 (IEC) 为 1。与边缘连接的面的方向（由面的法线方向定义）为 $\text{IOR} = \pm 2, \pm 3$ 。边缘周围的涡度为

$$\omega_x = \partial w / \partial y - \partial v / \partial z。$$

3.3 质量和组分输运

对火的化学性质最基本的描述是碳氢化合物燃料与氧气反应产生二氧化碳和水蒸气。由于火是一种相对低效的燃烧过程，涉及多种燃料气体，其中不仅包含碳原子和氢原子，因此在模拟中需要跟踪的气体种类数量几乎是无限的。不过，为了使模拟具有可操作性，我们通常将燃料的数量限制为一种，将反应的数量限制为一到两种。此外，我们还考虑到了这样一种可能性，即反应可能会因为进入的气流中缺乏足够的氧气而无法进行，就像封闭车厢中的火灾会自行熄灭一样。即使采用这种简化的化学方法，我们仍然需要跟踪至少六种气体（燃料、 O_2 、 CO_2 、 H_2O 、 CO 、 N_2 ）和烟尘微粒。如果我们假设只需一步反应，则无需明确求解七个传输方程。事实上，我们只需要求解两个方程，一个是燃料方程，另一个是产物方程。空气是既不是燃料也不是产物的一切。然而，为了确保物种质量分数的可实现性，我们的策略是为每个物种的质量密度求解一个输运方程，然后通过物种密度的求和得到混合物的质量密度。

燃料通常是单一气体种类，而空气和产物通常被称为“混合气体种类”。混合气体代表一种混合气体，它们一起传输（即混合气体具有单一的传输特性）并一起反应，从数值模型的角度来看，混合气体可被视为单一气体。事实上，质量输运方程并不区分单一物种或叠加物种。例如，空气是由氮、氧、微量水蒸气和二氧化碳组成的集合物种。我们使用符号 Z_A 、 Z_F 和 Z_P 表示空气、燃料和产物的质量分数。集合物种质量分数与原始物种质量分数 Y_α 呈线性关系；因此，只需进行矩阵乘法即可将两者转换为另一种。例如，甲烷的完全燃烧：



表示为：



而原始物种可以通过

$$\begin{bmatrix} 0.77 & 0.00 & 0.73 \\ 0.23 & 0.00 & 0.00 \\ 0.00 & 1.00 & 0.00 \\ 0.00 & 0.00 & 0.15 \\ 0.00 & 0.00 & 0.12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_A \\ Z_F \\ Z_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{N_2} \\ Y_{O_2} \\ Y_{CH_4} \\ Y_{CO_2} \\ Y_{H_2O} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

请注意，矩阵的各列是给定集合物种中原始物种的质量分数。

每个集合物种的输运方程与单一物种的输运方程形式相同：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z_\alpha) + \nabla \cdot (\rho Z_\alpha \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Z_\alpha) + \dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''' \quad (3.5)$$

请注意，右侧的源项表示蒸发的水滴或其他亚网格尺度颗粒的质量增加，这些颗粒代表喷洒器和燃料喷洒物、植被以及任何其他类型的无法解决的小物体。假定这些物体不占据任何体积；因此，它们在控制方程中被视为质量、动量和能量的点源。不过，需要注意的是，蒸发的物质种类必须是可以用显式传输方程求解的。例如，水蒸气是燃烧的产物，但它也是由喷洒水滴蒸发形成的。在这种情况下，需要有一个明确的水蒸气传输方程来区分燃烧形成的水蒸气和水滴蒸发的水蒸气。这里的 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ 是蒸发水滴或颗粒产生的物种 α 的速率。

质量密度由 $\rho = \sum (\rho Z)_\alpha$ 求得。公式(3.5)对所有 N_s 物种求和得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{m}_b''' \quad (3.6)$$

因为 $\sum Z_\alpha = 1$ ， $\sum \dot{m}_\alpha''' = 0$ ， $\sum \dot{m}_{b,\alpha}''' = \dot{m}_b'''$ 根据定义，也因为假设 $\sum \rho D_\alpha \nabla Z_\alpha = 0$ 。一般来说，最后一种说法是不正确的。对本地最丰富物种的扩散通量进行了修正，以执行该约束条件。

1. 强制可实现性

物种质量分数的可实现性要求在所有 α 条件下 $Y_\alpha \geq 0$ ，且 $\sum Y_\alpha = 1$ 。需要注意的是，这比有界性约束更为严格，后者只要求 $0 \leq Y_\alpha \leq 1$ 。

如果 $(\rho Y)_\alpha$ 服从有界性， $(\rho Y)_\alpha \geq 0$ ，我们通过 $\rho = \sum_{\alpha=1}^{N_s} (\rho Y)_\alpha$ 求解 N_s 种方程得到密度，那么通过 $Y_\alpha = (\rho Y)_\alpha / \rho$ 得到的质量分数保证是可实现的（对于 $\rho > 0$ ）。因此，我们把可实现性问题简化为 $(\rho Y)_\alpha$ 的有界性这个“更容易”的问题。标量有界性修正的细节将在附录 G 中讨论。

采用这种方法时，我们必须注意确保 $\sum \rho D_\alpha \nabla Z_\alpha = 0$ 。我们的策略是吸收扩散传输中的任何误差，将其转化为局部最丰富的物种。也就是说，对于一个给定的单元面，我们设置 $\rho D_m \nabla Z_m = -\sum_{\alpha \neq m} \rho D_\alpha \nabla Z_\alpha$ ，其中 m 是该单元面附近最丰富的物种。请注意，由于 FDS 通常用作 LES 代码，因此分子扩散的质量输运可能比湍流输运少两三个数量级，后者对所有物种使用相同的湍流扩散系数。因此，扩散通量的求和误差往往很小。

3.4 低马赫数假设

对于低速应用（如火灾），Rehm 和 Baum [9] 观察到，空间和时间分辨率的压力 p 可以分解为“背景”压力 $\bar{p}(z, t)$ 和扰动 $\tilde{p}(x, y, z, t)$ ，状态方程中只保留背景压力（理想气体定律）：

$$\bar{p} = \rho TR \sum_{\alpha} \frac{Z_\alpha}{W_\alpha} \equiv \frac{\rho TR}{\bar{W}} \quad (3.7)$$

请注意， z 是重力方向上的空间坐标；因此，大气分层包含在背景压力中。扰动 \tilde{p} 驱动流体运动。这种近似方法会产生一些后果。首先，通过供暖、通风和空调（HVAC）系统连接的建筑隔间可以各自保持独立的背景压力。隔间之间的气流可以用背景压力的差异来描述，从而无需求解通风管道内的详细流动方程。

低马赫数近似的第二个结果是，内能 e 和焓 h 可以用热力学（背景）压力来表示： $h = e + \bar{p} / \rho$ 。能量守恒方程可以用显焓（ h_s ）来表示：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \nabla \cdot (\rho h_s \mathbf{u}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{q}''' + \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \quad (3.8)$$

\dot{q}''' 是化学反应单位体积的放热率。 \dot{q}_b''' 项是转移到亚网格尺度液滴和颗粒的能量。 $\dot{\mathbf{q}}''$ 表示传导、扩散和辐射热通量：

$$\dot{\mathbf{q}}'' = -k \nabla T - \sum_{\alpha} h_{s,\alpha} \rho D_\alpha \nabla Z_\alpha + \dot{\mathbf{q}}_r'' \quad (3.9)$$

k 是导热率， D_α 是物质 α 的扩散率， $\dot{\mathbf{q}}_r''$ 是辐射通量。

式(3.8)并没有显式求解，取而代之的是将速度散度分解为如下形式：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho h_s} \left[\frac{D}{Dt} (\bar{p} - \rho h_s) + \dot{q}''' + \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \right] \quad (3.10)$$

流体力学求解器保证满足公式(3.10)。由此可见，公式(3.8)也得到了满足（能量守恒）。

将公式(3.10)右侧的物质导数展开，可以得到一个相当复杂的散度表达式，其中包括质量、物种和能量守恒方程中的源项和扩散项。对整个算法来说，它的重要性在于只需使用热力学变量 ρ 、 Z_α 和 \bar{p} 即可计算。如下文所示，在时间上推进流速的方法是首先估计下一时间步的热力学变量，计算散度，然后求解压力方程，以保证更新后的速度散度与仅由热力学变量计算的速度散度相同。

3.5 动量传输

注意到矢量特性 $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla |\mathbf{u}|^2 / 2 - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}$ ，并定义单位质量的停滞能 $H \equiv |\mathbf{u}|^2 / 2 + \tilde{p} / \rho$ ，动量方程可以写成（详细推导见第 5 章）

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} + \nabla H - \tilde{p} \nabla(1/\rho) = \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_0)g + \mathbf{f}_b + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (3.11)$$

\mathbf{f}_b 表示亚网格尺度颗粒和液滴产生的曳力。粘性应力 $\boldsymbol{\tau}$ 通过梯度扩散与从 Deardorff 涡流粘度模型[14][15]获得的湍流粘度闭合。将公式(3.11)写成以下形式比较方便：

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{F} + \nabla H = 0 \quad (3.12)$$

这样就可以通过求散度得出压力的泊松方程：

$$\nabla^2 H = - \left[\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{F} \right] \quad (3.13)$$

注意散度的时间导数的出现。这是时间行进方案的一个重要特征。还请注意，泊松方程的右侧保留了一个包含扰动压力的项，即 $\tilde{p} \nabla(1/\rho)$ 。这个项解释了气压力矩。它通过使用前一时间步长的值被包含在泊松方程的右侧。通过这种近似方法，我们可以求解泊松方程的可分离形式，目前已有针对均匀网格进行优化的快速直接求解器[16]。

3.6 燃烧和辐射

FDS 被称为“火灾模型”，因为它包含了描述气态燃料和氧气湍流燃烧的源项和边界条件、热辐射通过高温烟尘气体的传输、真实材料的热分解、自动喷水灭火装置和烟雾探测器的启动、水和液体燃料液滴的传输以及描述建筑物内外火灾的各种其他特征。

燃烧和辐射是通过能量传输方程中的源项 \dot{q}''' 和 \dot{q}_r''' 引入控制方程的。由于能量方程没有显式求解，这些项会进入散度的表达式。

3.6.1 燃烧

在大多数应用中，FDS 使用的燃烧模型是基于混合受限、无限快的块状物质反应。块状物质是代表混合物的反应标量。例如，空气是氮气、氧气、水蒸气和二氧化碳的混合物。燃料和氧气的反应并不一定是瞬时和完全的，有几种可选方案可以预测通风不足空间的燃烧程度。

对于无限快反应，给定网格单元中的反应物种类转化为生成物种类的速率由特征混合时间 τ_{mix} 决定。单位体积的热释放率是由集合物种的质量生产率乘以它们各自的形成热量之和定义的。

$$\dot{q}''' = - \sum_{\alpha} \dot{m}_{\alpha}''' \Delta h_{f,\alpha} \quad (3.14)$$

关于 τ_{mix} 和 \dot{m}_{α}''' 的详细内容将在第 6 章中讨论。

3.6.2 辐射

能量方程中热辐射的净贡献定义为：

$$\dot{q}_r''' \equiv -\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r''(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}) [U(\mathbf{x}) - 4\pi I_b(\mathbf{x})] \quad ; \quad U(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}' \quad (3.15)$$

其中， $\kappa(\mathbf{x})$ 为吸收系数， $I_b(\mathbf{x})$ 为源项， $I(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ 是非散射灰色气体的辐射传输方程 (RTE) 的解：

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \kappa(\mathbf{x}) [I_b(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}, \mathbf{s})] \quad (3.16)$$

在实际模拟中， I 、 I_b 和 κ 的光谱依赖性无法准确解决，我们也没有真实火灾中典型的非理想燃料的可靠数据。虽然 FDS 可以将辐射光谱划分为相对较少的波段，并为每个波段求解单独的 RTE，但通常没有必要这样做，因为在实际火灾中，烟尘是热辐射的主要源和汇，对波长并不特别敏感。平均吸收系数 κ 是物种组成和温度的函数。其值由一个名为 RadCal 的窄带模型得出[17]。

由于火焰附近的基础数值网格分辨率有限，因此需要对源项 I_b 进行特殊处理。在大规模火灾模拟中，网格单元通常只有几十厘米。火焰片无法解析，这意味着计算出的单元平均温度可能大大低于反应火焰中的预期温度。因此，在燃料和氧气发生反应的网格单元中，源项是近似的。在其他地

方，子网格温度场是均匀的，可以直接计算源项：

$$\kappa I_b = \begin{cases} \kappa \sigma T^4 / \pi & \text{火焰区外部, } \dot{q}''' = 0 \\ C \kappa \sigma T^4 / \pi & \text{火焰区内部, } \dot{q}''' > 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

常数 C 在每个时间步长计算，以便公式(3.15)在整个火焰区域的体积积分近似等于 $\chi_r \dot{q}'''$ 在同一区域的体积积分。这里， χ_r 是根据经验估算的以热辐射形式发射的能量的全局比例。通常情况下，烟尘火灾辐射的能量约为总燃烧能量的三分之一。

辐射方程的求解技术类似于对流传输的有限体积法，因此被称为有限体积法（FVM）。有限体积求解器使用约 100 个离散角度，这些角度在多个时间步长内更新，所需的时间约占计算总 CPU 时间的 20%，考虑到辐射传热的复杂性，这一成本并不高。

水滴可以吸收和散射热辐射。这在涉及水雾抑制系统的情况下非常重要，但在所有洒水器情况下也会起作用。吸收和散射系数基于米氏理论。气态物质和烟尘的散射可忽略不计，不包括在模型中。

3.7 求解流程

在第 n 个时间步长的给定网格单元中，我们有密度 ρ_n 、集合物种质量分数 Z_n^α 、速度矢量 \mathbf{u}^n 和伯努利积分 H^n 。此外，对于计算域中的每个隔室，我们都有一个背景压力 \bar{p}^n 。温度由状态方程求得。这些变量采用显式二阶预测/校正方案进行时间推移。基本程序如下

1. 预测步

- a) 用显式欧拉步估计下一时间步的 ρ 、 Z_α 和 \bar{p} 。物种质量密度的估算方法是：

$$\frac{(\rho Z)_\alpha^* - \rho^n Z_\alpha^n}{\delta t} + \nabla \cdot \rho^n Z_\alpha^n \mathbf{u}^n = \nabla \cdot (\rho^n D_\alpha^n \nabla Z_\alpha^n) + (\dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''')^n \quad (3.18)$$

星号表示下一时间步的一阶精确估计值。请注意，质量源项是在前一时间步骤中使用密度和物种质量分数的修正值计算得出的。

- b) 根据 $\rho^* = \sum_\alpha (\rho Z_\alpha)^*$ 计算密度，根据 $Z_\alpha^* = (\rho Z_\alpha)^* / \rho^*$ 计算质量分数。
- c) 根据状态方程计算温度 T^* 。
- d) 根据公式(3.10)利用估计的热力学量计算散度 $(\nabla \cdot \mathbf{u})^*$ 。请注意，我们使用括号是为了强调尚未计算下一时间步的速度场 \mathbf{u}^* 的估计值，仅计算其散度。
- e) 求解压力项的泊松方程：

$$\nabla^2 H^n = - \frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})^* - \nabla \cdot \mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot \mathbf{F}^n \quad (3.19)$$

- f) 估算下一时间步的速度。

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \mathbf{F}^n + \nabla H^n = 0 \quad (3.20)$$

需要注意的是，这一过程保证了估计速度场的散度 $\nabla \cdot \mathbf{u}^*$ 与步骤 d) 中从估计热力学量 $(\nabla \cdot \mathbf{u})^*$ 得出的散度完全相等。

- g) 检查时间步长 δt 是否满足稳定性条件（见第 5.5 节）。如果时间步长过大，则缩小时间步长，使其满足稳定性约束条件，程序返回到时间步长的起点。如果满足稳定性条件，程序将继续执行校正步骤。

2. 校正步

- a) 在下一个时间步骤校正输运物种的质量密度。

$$\frac{(\rho Z_\alpha)^{n+1} - \frac{1}{2}(\rho^n Z_\alpha^n + \rho^* Z_\alpha^*)}{\delta t / 2} + \nabla \cdot \rho^* Z_\alpha^* \mathbf{u}^* = \nabla \cdot (\rho^* D_\alpha^* \nabla Z_\alpha^*) + (\dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''')^n \quad (3.21)$$

背景压力的校正方法与此类似。请注意，**质量源项与预测步骤中添加的质量源项相同。每个时间步只计算一次。**

- b) 计算密度 $\rho^{n+1} = \sum_\alpha (\rho Z_\alpha)^{n+1}$ 和质量分数 $Z_\alpha^{n+1} = (\rho Z_\alpha)^{n+1} / \rho^{n+1}$ 。
- c) 根据状态方程计算温度 T^{n+1} 。
- d) **质量源项的时间分割。**在对传输方案进行校正步骤后，将计算并存储源项。源项使用修正标量输运方案的结果进行评估。源项包括单位体积热释放率 \dot{q}''' 、热辐射净吸收/辐射 $\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}''$ 和质量物种源项 \dot{m}_α''' 。此外，散度表达式公式(B.7)中涉及源项的项也会被计算和存储。所有这些量都是在时间步长的这一点上计算出来的，并应用于下一个时间步长的预测器和校正器步长。
- e) 根据校正后的热力学量计算散度 $(\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1}$ 。
- f) 使用估计量计算压力。

$$\nabla^2 H^* = -\frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1} - \frac{1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{u}^* + \nabla \cdot \mathbf{u}^n)}{\delta t / 2} - \nabla \cdot \mathbf{F}^* \quad (3.22)$$

- g) 在下一个时间步校正速度。

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \frac{1}{2}(\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^n)}{\delta t / 2} + \mathbf{F}^* + \nabla H^* = 0 \quad (3.23)$$

请再次注意，校正后的速度场散度值与步骤 e) 计算的散度值完全相同。

4 质量、物种和焓传输

本章详细介绍了低马赫数极限的状态方程、质量和物种守恒方程的有限差分近似，以及流场散度作为焓传输方程替代物的作用。由于使用了低马赫数近似，能量守恒方程并没有明确求解，而是通过包含燃烧和辐射源项的流场散度进行隐式定义。

4.1 状态方程

CFD 模型的一个显著特点是其设计所针对的流动速度（相对于声速）。高速流动代码涉及可压缩性效应和冲击波。而低速求解器则明确消除了产生声波的可压缩性效应。纳维-斯托克斯方程描述的信息传播速度与流体流动速度相当（对于火灾，约为 10 米/秒），但也与声波传播速度相当（对于静止空气，为 300 米/秒）。要求解这些方程的离散形式，需要极小的时间步长，才能计算出以声速传播的信息，因此很难进行实际模拟。

根据 Rehm 和 Baum 的研究成果[9]，将压力分解为“背景”部分和扰动部分，从而对状态方程进行近似。假定压力的背景分量可能因隔室而异。如果计算域中的某个分区与其他分区隔离（通过泄漏通道或通风管道隔离除外），则该分区被称为“压力区”，并分配有自己的背景压力。例如，第 m 个区域内的压力场是其背景分量和流动引起的扰动的线性组合：

$$p(\mathbf{x}, t) = \bar{p}_m(z, t) + \tilde{p}(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

请注意，背景压力是垂直空间坐标 z 和时间 t 的函数。对于大多数车厢火灾应用， \bar{p}_m 随高度或时间的变化很小。但是，如果火灾会增加封闭隔间内的压力，或暖通空调系统会影响压力，或隔间高度很高， \bar{p}_m 就会考虑到这些影响[18]。环境压力场表示为 $\bar{p}_0(z)$ 。请注意，下标 0 表示计算域外部，而不是时间 0。这是假定的大气压力分层，既是控制方程的初始条件，也是边界条件。

分解压力的目的是，对于低马赫数流动，可以假定温度和密度成反比，因此状态方程（在第 m 个压力区）可以近似为

$$\bar{p}_m = \rho T R \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{\bar{W}_{\alpha}} = \frac{\rho T R}{\bar{W}} \quad (4.2)$$

回顾第 3.3 节， Z_{α} 是集总物质 α 的质量分数。状态方程和能量方程中的压力 p 由背景压力 \bar{p}_m 代替，以过滤掉传播速度远快于消防应用中典型流速的声波。低马赫数假设有两个目的。首先，过滤声波意味着数值算法中的时间步长仅受流速而非声速的限制；其次，修改状态方程可将方程系统中的因变量数量减少一个。能量方程(3.8)并不显式求解，而是将其源项包含在本章稍后讨论的流动散度表达式中。当速度场满足指定的热力学散度时，显焓方程的保守形式就会得到满足。

大气分层的关系式为

$$\frac{d\bar{p}_0}{dz} = -\rho_0(z)g \quad (4.3)$$

其中 ρ_0 是背景密度， g 是由重力引起的加速度。使用式(4.2)，背景压力可以写为背景温度 $T_0(z)$ 的函数：

$$\bar{p}_0(z) = p_{\infty} \exp\left(-\int_{z_{\infty}}^z \frac{\bar{W}g}{RT_0(z')} dz'\right) \quad (4.4)$$

其中下标无穷大一般指地面。用户可以指定大气的线性温度分层，即 $T_0(z) = T_{\infty} + \Gamma z$ 其中 T_{∞} 是地面温度， Γ 是失效率（例如， $\Gamma = -0.0098 \text{ K/m}$ 是绝热失效率）。在这种情况下， \bar{p}_0 和 ρ_0 分别由公式(4.4)和(4.2)得出。然后可以证明，当 $\Gamma \neq 0$ 时，压力分层变为

$$\bar{p}_0(z) = p_{\infty} \left(\frac{T_0(z)}{T_{\infty}} \right)^{\bar{W}g/R\Gamma} \quad (4.5)$$

4.2 质量和组分输运

物种迁移方程采用预测-修正方案求解。平流项采用通量散度（保守）形式。在预测步骤中，根据第 n 层的信息估算第 ijk 单元在第 $n+1$ 层的质量密度：

$$\frac{(\rho Z_\alpha)_{ijk}^* - (\rho Z_\alpha)_{ijk}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\overline{\rho Z_\alpha}^{FL} \mathbf{u})_{ijk}^n = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Z_\alpha)_{ijk}^n + (\dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''')_{ijk}^n \quad (4.6)$$

$\overline{\rho Z_\alpha}^{FL}$ 表明应用在单元面上的值的通量限制器，如 4.2.1 所讨论的。化学、蒸发或热解引起的质量源项在前一时间步结束时计算，并用于预测和校正步骤。平均化学源项 \dot{m}_α''' 将在第 6 章讨论。关于固相热解和拉格朗日粒子的第 8 章和第 10 章分别讨论了块状子网格源项 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ 。

在 DNS 模式中，分子扩散是基于混合物平均二元费克扩散。在 LES 模式（默认）中，扩散率是根据分子和湍流粘度除以湍流施密特数得出的。也就是说，为了节省成本，我们用 $(\mu + \mu_t) / Sc_t$ 来近似分子和湍流扩散系数。湍流施密特数为常数，默认值为 $Sc_t = 0.5$ 。湍流粘度 μ_t 的模型将在第 5.2 节中讨论。可以选择在 MISC 上设置 `SIMULATION_MODE='LES'`，将分子和湍流输运系数分别处理，即 $\rho D_\alpha + \mu_t / Sc_t$ （需要额外花销）。热扩散率也是如此。

校正步如下所示：

$$\frac{(\rho Z_\alpha)_{ijk}^{n+1} - \frac{1}{2}[(\rho Z_\alpha)_{ijk}^n + (\rho Z_\alpha)_{ijk}^*]}{\delta t / 2} + \nabla \cdot (\overline{\rho Z_\alpha}^{FL} \mathbf{u})_{ijk}^* = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Z_\alpha)_{ijk}^* + (\dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''')_{ijk}^n \quad (4.7)$$

4.2.1 通量限制器

通量限制器是一种用于定义单元面质量通量的插值方案。将以单元为中心的标量变量简单地线性插值到单元面会产生中心差分方案。众所周知，这种纯粹的中心差分方案会产生难以容忍的分散误差（虚假晃动），从而导致负密度或质量分数超出 $[0,1]$ 范围等非物理结果。为了解决这个问题，FDS 采用了两种方案：一种是**通量限制器**（下文将讨论），用于处理大部分问题；另一种是**通量修正**（见附录 G），用于增加最小的数值扩散量，以保持有界性。

在流速均匀的情况下，标量输运方程精确解的一个基本特性是，标量场的总变化（相邻单元间标量差的绝对值之和）要么保持不变，要么减小（永远不会增大）。换句话说，不会产生新的极值。保留这一特性的数值方案被称为**总变差不增（TVD）格式**。使用 TVD 方案进行火灾建模的实际意义在于，这种方案能够准确跟踪湍流火焰中的连贯涡旋结构，并且不会产生虚假的反应区。

FDS 采用两种二阶 TVD 方案作为标量传输的选项：**Superbee** 和 **CHARM**。在 LES 中推荐使用 **Superbee** [19]，因为它能更准确地保留粗网格解的标量方差，而粗网格解预计并不平滑。然而，由于 **Superbee** 采用了梯度陡化技术，在网格间距较小的情况下，光滑解的收敛性会下降（该方法将恢复到阶梯模式，而不是精确解）。**CHARM** [20] 虽然比 **Superbee** 稍微耗散，但收敛性很好，因此是火焰前沿解析度较高的 DNS 计算的较佳选择。

为了说明如何将通量限制器应用于标量输运方程，下面我们将对公式(3.5)中的平流项进行一维离散处理：

$$\frac{(\rho Z_\alpha)_i^* - (\rho Z_\alpha)_i^n}{\delta t} + \frac{\overline{\rho Z_\alpha}^{FL} u_{i+1/2} - \overline{\rho Z_\alpha}^{FL} u_{i-1/2}}{\delta x} = \dots \quad (4.8)$$

请注意，后缀 $\pm \frac{1}{2}$ 表示特定单元 i 的面值。通量限制的标量值（本例中为密度）与交错的面心速度相乘，形成标量平流通量。请注意，这些速度值是计算中的原始变量--它们不是插值。考虑单元 i 和单元 $i+1$ 之间的面 $i + \frac{1}{2}$ ，让 ϕ 表示一般标量变量，如 ρZ_α 。本地（loc）和上游（up）数变化为

$$\delta \phi_{loc} = \phi_{i+1} - \phi_i \quad (4.9)$$

$$\delta\phi_{up} = \begin{cases} \phi_i - \phi_{i-1} & u_i > 0 \\ \phi_{i+2} - \phi_{i+1} & u_i < 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

限幅函数 $B(r)$ 取决于上游数据与本地数据的比率，即 $r = \delta\phi_{up} / \delta\phi_{loc}$ 。在 FDS 中，限制器函数的选项包括[21]：

通量限制器	$B(r)$
中心差分	1
Godunov	0
MINMOD	$\max(0, \min(1, r))$
Superbee[19] (LES default)	$\max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2))$
CHARM[20] (DNS default)	$s(3s + 1) / (s + 1)^2$; $s = 1 / r$
MP5[22]	如下所示

对于中心差分、Godunov、MINMOD 和 Superbee 限制器，标量面值由

$$\bar{\phi}_{i+1/2}^{FL} = \begin{cases} \phi_i + B(r) \frac{1}{2} \delta\phi_{loc} & u_i > 0 \\ \phi_{i-1} - B(r) \frac{1}{2} \delta\phi_{loc} & u_i < 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

对于 CHARM，面值由[23]给出

$$\bar{\phi}_{i+1/2}^{FL} = \begin{cases} \phi_i + B(r) \frac{1}{2} \delta\phi_{up} & u_i > 0 \\ \phi_{i-1} - B(r) \frac{1}{2} \delta\phi_{up} & u_i < 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

Suresh 和 Huynh[22]的 MP5 方案基于敏锐的观察，即三点无法区分极值和不连续性。限幅器的函数形式不像上述三点方案那么简单，因此我们请读者参阅原始论文或 FDS 源代码以了解详情。但该方法的基本思想是使用五点模版（三个上风点和两个下风点）重建单元面值，同时考虑精度和单调性保留约束。MP5 方案的另一个优点是，它在设计时专门考虑了强稳定性保留 (SSP) Runge-Kutta 时间离散。FDS 使用的预测器-校正器方案类似于[24]中描述的二阶 SSP 方案。

1. 实施须知

实际上，我们最初设定 $r = 0$ ，只有当分母不为零时才计算 r 。请注意，对于 $\delta\phi_{loc} = 0$ ，使用哪种限幅器并不重要：所有限幅器都产生相同的标量面值。对于 CHARM，我们初始设置 $r = 0$ 和 $B = 0$ ，只有当 $r > 0$ 时才计算 B （这要求数据变化具有相同的符号）。否则，CHARM 将还原为 Godunov 方案。

其中包括中心差分、Godunov 和 MINMOD 限制器，以达到完整、调试和教育的目的。这些方案在典型的 FDS 应用中用处不大。

4.2.2 质量源项的时间分割

在传输方案的校正器步骤之后，计算下一个时间步骤的源项。源项通常与颗粒蒸发或燃烧有关，这些过程在时间步结束时计算。在燃烧的情况下，网格单元的总质量不会改变，但物种的质量分数会改变。平均化学源项 \dot{m}_α''' 将在第 6 章讨论。关于固相热解和拉格朗日粒子的第 8 章和第 10 章分别讨论了块状子网格源项 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ 。

4.2.3 温度、物种质量分数和密度的边界条件

在每个网格单元的中心计算气体温度、物种质量分数和密度。在外部边界或内部障碍物边界，这些值必须在边界界面上的单元格面上计算。一般来说，首先计算边界处的温度 T_w ，然后是物种质

量分数 $Z_{\alpha,w}$ ，最后是密度 ρ_w 。密度通常由状态方程确定：

$$\rho_w = \frac{\bar{p}_m}{RT_w \sum_{\alpha} (Z_{\alpha,w} / W_{\alpha})} \quad (4.13)$$

这里 \bar{p}_m 表示气相区域的背景压力。

必要时，将边界值线性外推半个网格单元到“幽灵”单元，供气相求解器使用。在下面的章节中，与边界相邻的气相单元中心的值用下标“g”表示（表示“气相”，而不是“幽灵”），边界的值用“w”表示（表示“壁”）。

1. 固体边界

在固体边界，表面温度 T_w 可以指定或计算，详见第 8 章。在 LES 计算中，表面的对流热通量通过经验传热系数 h 确定，边界的对流热通量则写为

$$k \frac{T_g - T_w}{\delta n / 2} = h(T_g - T_w) \quad (4.14)$$

其中， $\delta n / 2$ 是表面与相邻气相单元中心之间的距离。对流换热系数 h 在第 8.1.2 节中进行了描述。在 DNS 计算中，对流传热直接由计算或指定的表面温度确定。

固体边界不存在质量转移，因此物种混合物 α 的边界值为

$$Z_{\alpha,w} = Z_{\alpha,g} \quad (4.15)$$

2. 开放边界

“开放”一词表示计算域的非固体外部边界。气体可以自由进出。在这些边界上，如果气流流入，则温度和物种质量分数分别取其外部值；如果气流流出，则温度和物种质量分数分别取其边界附近网格单元中的值。这是一种简单的迎风边界条件。

3. 指定的质量通量

这里，物种 α 的质量通量 \dot{m}_{α}'' 是作为整个固相计算的一部分指定或计算的。要确定边界处物种混合物 α 的质量分数 $Z_{\alpha,f}$ ，必须迭代求解以下方程

$$\sum_{\alpha} \dot{m}_{\alpha}'' = \rho_w u_n \quad (4.16)$$

$$\dot{m}_{\alpha}'' = u_n \rho_w Z_{\alpha,w} - (\rho D_{\alpha})_w \frac{Z_{\alpha,g} - Z_{\alpha,w}}{\delta n / 2} \quad (4.17)$$

其中， u_n 是指向流域的壁面速度法向分量， $\delta n / 2$ 是气体单元中心与壁面之间的距离。公式 (4.16) 和 (4.17) 与状态方程一起，对未知数 u_n 、 ρ_w 和 $Z_{\alpha,w}$ 进行迭代求解。EOS 中使用的表面温度取决于热边界条件。

4. 网格界面边界

在涉及多个数值网格的模拟中，即使网格由不同的计算机处理，网格之间也必须传递信息。如果两个网格相邻，且网格单元对齐且大小相同，则一个网格只需使用相邻网格的密度和物种质量分数作为“幽灵”单元值。但是，如果网格单元的大小不同，信息交换就必须更加谨慎。考虑两个网格相交的情况：

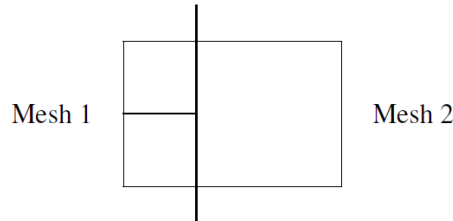


图 4-1 2:1 细化的网格界面边界

平流通量匹配 我们希望网格间的总通量和物种质量通量相同。将网格 2 中的单元 $(1, j', k')$ 的密度记为 $\rho_{1,j',k'}^{(2)}$ 。假设该单元与网格 1 中的两个单元相邻。网格 1 中两个相邻单元的密度记为 $\rho_{I,j,k}^{(1)}$ 。注意, j 和 k 与 j' 和 k' 并不相同。 I 是网格 1 在 x 方向上的单元格数量。网格 1 中的幽灵单元数量的 i 索引为 $I+1$ 。网格 2 中的幽灵单元量的 i 指数为 0:

$$\sum_{j,k} u_{I,j,k}^{(1)} \rho_{w,j,k}^{(1)} \delta y^{(1)} \delta z^{(1)} = u_{0,j',k'}^{(2)} \rho_{w,j',k'}^{(2)} \delta y^{(2)} \delta z^{(2)} \quad (4.18)$$

为了执行这一条件,我们在网格 1 上通过通量限制器(见第 4.2.1 节)获得 $\rho_{w,j,k}^{(1)}$, 在网格 2 上通过通量限制器(见第 4.2.1 节)获得 $\rho_{w,j',k'}^{(2)}$ 。如果网格 1 和网格 2 的网格分辨率相同,则交换两层幽灵单元,以实现平流通量的二阶精度。在细化网格边界使用一阶迎风。

扩散通量匹配 对于未细化的网格边界,交换幽灵单元信息足以实现每个网格处理独立计算的匹配扩散通量。但是,对于细化网格,需要进行特殊处理。采用的策略是计算细网格通量,并将其平均到粗网格。在标量传输更新后,交换标量值,这样粗网格就有了必要的细网格值,可以独立计算和平均细网格通量,以进行匹配。请再次参阅图 4-1,在网格细化边界执行以下关系:

$$\sum_{j,k} \frac{1}{2} \left[(\rho D_\alpha)^{(2)}_{1,j',k'} + (\rho D_\alpha)^{(1)}_{IBAR,j,k} \right] \frac{Z_{\alpha,1,j',k'}^{(2)} - Z_{\alpha,IBAR,j,k}^{(1)}}{\delta x_{I,j,k}^{(1)}} \delta y_{jk}^{(1)} \delta z_{jk}^{(1)} = \underbrace{\left[(\rho D_\alpha) \frac{\partial Z_\alpha}{\partial x} \right]_{0,j',k'}^{(2)}}_{\text{computed term}} \delta y_{j',k'}^{(2)} \delta z_{j',k'}^{(2)} \quad (4.19)$$

请注意, $Z_{\alpha,1,j',k'}^{(2)}$ 值是直接从粗网格注入的细网格幽灵单元值(即没有对细网格幽灵单元中心进行插值;这是一阶近似值)。同样,粗网格扩散项 $(\rho D_\alpha)^{(2)}_{1,j',k'}$ 也直接注入细网格幽灵单元,以计算平均界面值。

5. 专题: 大气流动中的垂直网格粗化

在大气流动中,将垂直方向的网格变粗可能会有好处。由于背景压力分层和大气流动计算通常采用的相对较粗的网格分辨率,在网格界面上匹配热通量并非易事。FDS 并不明确匹配通量。相反,它依赖于由内部(KKG)和幽灵单元(KK)值构建的温度梯度(此外,网格边界处的传输系数插值必须匹配,但这比温度梯度问题要小)。使问题更加复杂的是,FDS 总是从理想气体定律中提取气相温度值,并给定单元物种组成、密度和背景压力。

$$T(z) = \frac{P(z)\bar{W}(z)}{\rho(z)R} = \frac{\text{PBAR}(z)}{\text{RHO}(z)\text{RSUM}(z)} \quad (4.20)$$

在网格粗化(或细化)的 INTERPOLATED 边界,幽灵单元值的位置与邻近网络的内部气相单元值的位置不一致。图 4-2 展示了这种情况。例如,令 $\delta z_{kkg}^{(1)}$ 表示网格 1 上内部气相单元的单元高度。为了与网格界面的温度梯度相匹配,我们需要

$$\frac{T_{kk}^{(1)} - T_{kkg}^{(1)}}{\frac{1}{2}\delta z_{kk}^{(1)} + \frac{1}{2}\delta z_{kkg}^{(1)}} = \frac{T_{kkg}^{(2)} - T_{kk}^{(1)}}{\frac{1}{2}\delta z_{kkg}^{(2)} + \frac{1}{2}\delta z_{kk}^{(1)}} \quad (4.21)$$

现在,假设我们要为网格 1 填入幽灵单元格值。我们的目标是指定密度 $\rho_{kk}^{(1)}$ 的幽灵单元值,使公式(4.21)成立。将公式(4.20)插入公式(4.21),并定义

$$\text{DDO} = \frac{\delta z_{kk}^{(1)} + \delta z_{kkg}^{(1)}}{\delta z_{kkg}^{(2)} + \delta z_{kk}^{(1)}} \quad (4.22)$$

可以得到

$$\rho_{kk}^{(1)} = \left(\frac{P_{kk}^{(1)}}{\text{RSUM}_{kk}^{(1)}} \right) / \left\{ \left(\frac{P_{kkg}^{(1)}}{\rho_{kkg}^{(1)} \text{RSUM}_{kkg}^{(1)}} \right) + \text{DDO} \left[\left(\frac{P_{kkg}^{(2)}}{\rho_{kkg}^{(2)} \text{RSUM}_{kkg}^{(2)}} \right) - \left(\frac{P_{kkg}^{(1)}}{\rho_{kkg}^{(1)} \text{RSUM}_{kkg}^{(1)}} \right) \right] \right\} \quad (4.23)$$

从网格 2 的插值结果也可以得到类似的表达式。

请注意，这种插值可以看作是温度梯度的中心差值。相应的密度变化是非线性的。上述通量限制器方案计算出的质量通量在细化网格界面处仍然匹配，因此无需调整。

通过搜索逻辑标志 `ATMOSPHERIC_INTERPOLATION`，可以在源代码中访问对幽灵单元密度的特殊处理。默认情况下，只有当 `STRATIFICATION=.TRUE` 时，以及任何网格上的垂直单元间距 `DZ` 超过 2 米时，才会在垂直网格细化边界调用该程序。在网格间距较小的情况下，虚假温度效应并不明显，因此更适合将温度变化与通量受限的界面密度保持一致。在 `WIND` 行上设置开发逻辑标志 `USE_ATMOSPHERIC_INTERPOLATION`，可覆盖默认行为。

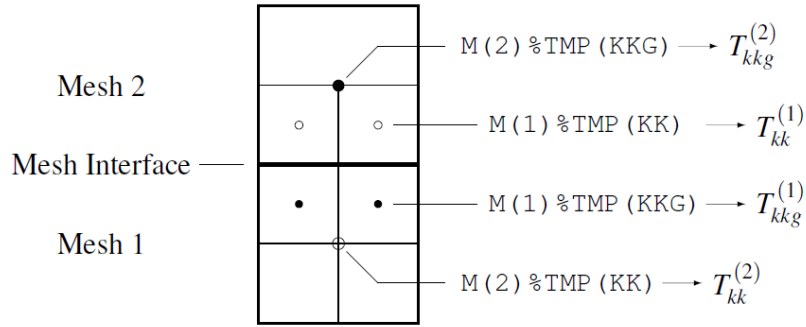


图 4-2 垂直粗化网目。网目 1 是细网。网格 2 是粗网格。在本例中，粗细比为 1:2。实心圆点代表内部气相未知值。开圆代表幽灵单元值

4.3 速度散度

由于低马赫数假设，速度散度（体积膨胀率）在整个求解方案中起着重要作用。在 **FDS** 算法中，散度是能量方程的替代物。散度是从显焓方程的保守形式中分解出来的（见附录 B），当散度约束条件得到满足时（由动量更新和压力泊松方程的求解强制执行），显焓方程的保守形式就会得到满足。

对于第 m 个区域，背景压力为 \bar{p}_m ，散度可写成

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = D - P \frac{\partial \bar{p}_m}{\partial t} \quad (4.24)$$

其中

$$P = \frac{1}{\bar{p}_m} - \frac{1}{\rho c_p T} \quad (4.25)$$

以及

$$\begin{aligned} D = & \frac{1}{\rho c_p T} \left[\dot{q}''' + \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) + w \rho_0 g_z \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{\int_{T_b}^T c_{p,\alpha}(T') dT'}{c_p T} \right) \dot{m}_{b,\alpha}''' \end{aligned} \quad (4.26)$$

4.3.1 质量和能量源项

需要对散度表达式中的体积源项进行深入讨论。单位体积的热释放率 \dot{q}''' 和单位体积物种 α 的

质量生成率 \dot{m}_α''' ，详见第 6 章“燃烧”。通量项 $\dot{\mathbf{q}}''$ 的定义见式(3.9)。辐射源项 \dot{q}_r''' 包含在 $\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}''$ 中，将在第 7 章“热辐射”中讨论。来自拉格朗日粒子的体积热源 \dot{q}_b''' ，考虑了对流换热和辐射吸收，将在第 10 章拉格朗日粒子中讨论。来自拉格朗日粒子的体积质量源 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ ，也可在第 10 章中找到。

源项是在更新密度和物种质量分数之后的时间步校正器阶段计算的。公式(4.26)中涉及 \dot{q}_b''' 、 \dot{m}_α''' 和 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ 的项被存储在一个名为 D_SOURCE 的数组中，并用于构建修正更新速度所需的散度表达式。

4.3.2 扩散项

公式(4.26)中的热扩散和材料扩散项是纯粹的二阶中心差分。例如，热传导项的差分如下

$$(\nabla \cdot k \nabla T)_{ijk} = \frac{1}{\delta x} \left[k_{i+\frac{1}{2},jk} \frac{T_{i+1,jk} - T_{ijk}}{\delta x} - k_{i-\frac{1}{2},jk} \frac{T_{ijk} - T_{i-1,jk}}{\delta x} \right] + \frac{1}{\delta y} \left[k_{i,j+\frac{1}{2},k} \frac{T_{i,j+1,k} - T_{ijk}}{\delta y} - k_{i,j-\frac{1}{2},k} \frac{T_{ijk} - T_{i,j-1,k}}{\delta y} \right] + \frac{1}{\delta z} \left[k_{ij,k+\frac{1}{2}} \frac{T_{ij,k+1} - T_{ijk}}{\delta z} - k_{ij,k-\frac{1}{2}} \frac{T_{ijk} - T_{ij,k-1}}{\delta z} \right] \quad (4.27)$$

单元界面的热导率（用 $\frac{1}{2}$ 单元指数表示）是相邻两个单元的平均值。

4.3.3 数值混合校正

对流项 $\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho h_s)$ 和 $\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho Y_\alpha)$ 的差分比较复杂。如果处理不当，标量传输方案中与数值扩散有关的微妙问题可能会导致隐含能量方程出现重大守恒误差。这些项的正确离散化将在附录 B 中讨论。

4.3.4 温度计算

单元气体平均温度 T 是通过状态方程从密度和物种质量分数得出的：

$$T_{ijk} = \frac{\bar{p}_m}{\rho_{ijk} R \sum_{\alpha=0}^{N_s} (Z_{\alpha,ijk} / W_\alpha)} \quad (4.28)$$

4.3.5 显焓

气体的显焓是（以 α 表示的）集合气体种类焓的质量加权平均值，而集合气体种类焓又是各气体种类焓（以 n 表示）的质量加权平均值：

$$h_s = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} h_{s,\alpha} \quad ; \quad h_{s,\alpha} = \sum_n Y_n h_{s,n} \quad ; \quad h_{s,n}(T) = \int_{T_0}^T c_{p,n}(T') dT' \quad (4.29)$$

各气体种类的 $h_{s,n}$ 和 $c_{p,n}$ 值是根据 NASA 多项式[25]或 NIST-JANAF 表格[26]或通过查表获得的。

4.3.6 计算背景压力的升高

为了描述第 m 个压力区的背景压力 \bar{p}_m 是如何及时更新的，请考虑用紧凑符号写出的散度表达式：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = D - P \frac{\partial \bar{p}_m}{\partial t} \quad (4.30)$$

术语 D 和 P 分别由式(4.26)和(4.25)定义。下标 m 指的是压力区的编号，即计算域内允许其自身背景压力上升的体积。例如，建筑物内的一个封闭房间就是一个压力区。对第 m 个压力区的体积（用 Ω_m 表示）对公式(4.30)进行积分，即可求出第 m 个压力区背景压力的时间导数：

$$\frac{\partial \bar{p}_m}{\partial t} = \left(\int_{\Omega_m} D dV - \int_{\partial\Omega_m} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} \right) / \int_{\Omega_m} P dV \quad (4.31)$$

公式(4.31)基本上是一个一致性条件，确保在密封隔间内送气、排气或起火会导致体积内的散度量发生适当变化。

4.3.7 组合压力区

如果分隔两个压力区的屏障破裂（例如打开一扇门），公式(4.31)将被修改，使新连接区域的压力趋于平衡压力：

$$\bar{p}_{eq} = \sum_m \left(\bar{p}_m \int_{\Omega_m} P dV \right) / \sum_m \int_{\Omega_m} P dV \approx \frac{\sum_m V_m}{\sum_m (V_m / \bar{p}_m)} \quad (4.32)$$

注意，

$$\int_{\Omega_m} P dV \approx \frac{V_m}{\gamma \bar{p}_m} \quad (4.33)$$

其中， V_m 是 m 区的体积， γ 是比热比。为了使相连区域内的压力相互接近，每个区域都会有一个体积流量 \dot{V}_m^* 。该流量的目的是将气体从压力较高的区域流向压力较低的区域。公式(4.31)现在变为

$$\frac{\partial \bar{p}_{eq}}{\partial t} - \frac{\bar{p}_m - \bar{p}_{eq}}{\tau} = \left(\int_{\Omega_m} D dV - \int_{\partial\Omega_m} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} - \dot{V}_m^* \right) / \int_{\Omega_m} P dV \quad (4.34)$$

该方程的解法为 \dot{V}_m^* 。左边第一项是平衡压力随时间的变化：

$$\frac{\partial \bar{p}_{eq}}{\partial t} = \left(\sum_m \int_{\Omega_m} D dV - \sum_m \int_{\partial\Omega_m} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} \right) / \sum_m \int_{\Omega_m} P dV \quad (4.35)$$

求和是对所有相连区域的求和，本质上是整个相连区域压力随时间的净变化。如果计算域外部有任何开口，则该项设为零，所有相连区域的压力都会被推向环境压力。左侧的第二个项迫使第 m 个压力区的压力趋于平衡。常数 τ 是压力达到平衡的特征时间。在现实中，房间压力通常会很快达到平衡，但与压力快速变化相关的空气运动会导致数值不稳定。

注意： 由于假定马赫数较低，FDS 不适用于压力容器的快速排放。

5 动量运输和压力

本章介绍动量方程的求解。这包括三个主要部分：LES 配方、通量项的离散化以及压力椭圆偏微分方程的求解。

5.1 大涡模拟 LES

在本节中，我们暂时回到正式的 LES 滤波符号，并采用笛卡尔张量索引符号（重复后缀意味着求和），以便精确定义建模项。LES 方程是通过将 DNS 方程应用宽度为 Δ 的低通滤波器得出的。通常与有限体积 LES 相关的内核是箱滤波器——网格解析量在物理上被解释为单元平均值。这种解释有一定的误导性（见[27]），但对滤波的深入讨论超出了我们的范围，因此单元平均值的解释就足够了。在 FDS 中，滤波宽度是单元体积的立方根，即 $\Delta = V_c^{1/3}$ ， $V_c = \delta x \delta y \delta z$ 。对于任何连续场 ϕ ，滤波场的定义为

$$\bar{\phi}(x, y, z, t) \equiv \frac{1}{V_c} \int_{x-\delta x/2}^{x+\delta x/2} \int_{y-\delta y/2}^{y+\delta y/2} \int_{z-\delta z/2}^{z+\delta z/2} \phi(x', y', z', t) dx' dy' dz' \quad (5.1)$$

定义质量加权滤波器或法弗尔滤波器也是一种常规方法，即 $\bar{\rho}\tilde{\phi} \equiv \overline{\rho\phi}$ 。

5.1.1 DNS 动量方程

守恒形式下，速度第 i 分量的 DNS 动量方程为

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + f_{d,i} + \dot{m}_b''' u_{b,i} \quad (5.2)$$

在我们的两相公式中， $f_{d,i}$ 表示未解决的拉格朗日粒子所产生的阻力。体积源项 $\dot{m}_b''' u_{b,i}$ 表示蒸发或热解的影响。要适用公式(5.2)，网格分辨率应小于 Kolmogorov 尺度 η ，即最小湍流涡的长度尺度[15]，

$$\eta \equiv (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4} \quad (5.3)$$

这里， ν 是运动粘度， ε 是粘散率（粘度将动能转化为热能），

$$\varepsilon \equiv \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 2\mu \left(S_{ij} S_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right) ; \quad S_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.4)$$

在火灾情况下， η 通常在 1 毫米左右。因此，除特殊研究火焰计算外，DNS 是不切实际的。

5.1.2 LES 动量方程

对于从米到千米不等的域大小，大多数 LES 火灾计算的可承受网格分辨率从厘米到米不等。LES 的目标是明确地演化质量、动量和能量的单元平均值，同时考虑子网格传输和化学对平均场的影响。为此，我们对 DNS 方程进行箱式滤波，得到滤波方程。以动量方程为例。将公式(5.1)应用于公式(5.2)的结果是

$$\frac{\partial \bar{\rho} u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_i u_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b''' u_{b,i}} \quad (5.5)$$

单元平均值 $\bar{\rho} u_i u_j$ 本身并不是计算中的原始变量——我们无法计算横杠下的项来及时推进公式(5.5)。因此，我们必须对项进行分解，这就导致了闭合问题。

下一步就是简单地应用法弗尔过滤器，

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b''' \tilde{u}_{b,i}} \quad (5.6)$$

现在，只要我们有 $\bar{\rho}$ 的解，第一项就是可分离的。但我们仍然无法计算网格上的相关性 $\widetilde{u_i u_j}$ 。我们不能简单地用 $\widetilde{u_i u_j}$ 来代替（这是“平方的均值不等于均值的平方”的老问题）。取而代之的是定义子网格尺度（SGS）应力：

$$\tau_{ij}^{\text{sgs}} \equiv \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (5.7)$$

将式(5.7)代入式(5.6)，可得，

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_i u_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{\text{sgs}}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b} \tilde{u}_{b,i} \quad (5.8)$$

方程(5.8)就是通常所说的 **LES 动量方程**（类似于 Cauchy 方程——构造模型尚未应用）。一旦我们为亚网格尺度应力 τ_{ij}^{sgs} 找到一个合适的闭包，所有变量都是原始的或可计算的。

1. 本构关系

为了使公式(5.8)适用于 FDS，我们还需要做一些修改。首先是分解 SGS 应力，并应用牛顿粘滞定律作为偏离部分的构成关系。请注意， $\bar{\tau}_{ij}$ 已经是粘性应力的偏离部分。我们将总偏离应力建模为

$$\tau_{ij}^{\text{dev}} \equiv \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} = -2(\mu + \mu_t) \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \delta_{ij} \right) \quad (5.9)$$

请注意， δ_{ij} 是 Kronecker delta（如果 $i = j$ $\delta_{ij} = 1$ ；如果 $i \neq j$ $\delta_{ij} = 0$ ）。湍流粘度 μ_t 需要建模，如下所述。

2. 修正压力项

在低流速 LES 中，SGS 应力的各向同性部分必须由压力项吸收。将子网格动能定义为 SGS 应力迹线的一半

$$k_{\text{sgs}} \equiv \frac{1}{2} \tau_{kk}^{\text{sgs}} \quad (5.10)$$

并将修正的滤波压力[15]定义为

$$\bar{p} \equiv \bar{p} + \frac{2}{3} k_{\text{sgs}} \quad (5.11)$$

将公式(5.9)和(5.11)代入公式(5.8)，可得

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^{\text{dev}}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b} \tilde{u}_{b,i} \quad (5.12)$$

请注意，公式(5.12)与 DNS 动量方程公式(5.2)非常相似。因此，在讨论算法的数值细节时，我们可以放宽滤波形式。用户只需理解，在 LES 中，当我们写 τ_{ij} 时，我们指的正是 τ_{ij}^{dev} ，同样，LES 中的压力 p 指的是 \bar{p} 。

3. Bulk Mass Source Term

在以非守恒形式书写动量方程时（我们将在下文中这样做），我们必须考虑到亚网格粒子质量的引入（例如水滴的蒸发）。利用连续性方程公式(3.6)，我们可以将公式(5.12)重写如下：

$$\bar{\rho} \frac{D \tilde{u}_i}{Dt} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^{\text{dev}}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i + \underbrace{\bar{f}_{d,i} + \overline{\dot{m}_b} (\tilde{u}_{b,i} - \tilde{u}_i)}_{\bar{f}_{b,i}} \quad (5.13)$$

公式(5.13)中的最后一个项被吸收到了体积子网格力项 $\bar{f}_{b,i}$ ，其中也包含阻力，这在第 10 章“拉格朗日粒子”中讨论过。

5.1.3 子网格动能生成

单位质量的解析动能 $K \equiv \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$ 的传输方程是通过用解析速度矢量点化 LES 动量方程得出的。结果为

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{DK}{Dt} &= -\tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}^{\text{dev}}}{\partial x_j} + (\bar{\rho} g_i + \bar{f}_{b,i}) \tilde{u}_i \\ \bar{\rho} \frac{DK}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} ([\bar{p} \delta_{ij} + \tau_{ij}^{\text{dev}}] \tilde{u}_i) &= \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} + \tau_{ij}^{\text{dev}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + (\bar{\rho} g_i + \bar{f}_{b,i}) \tilde{u}_i \end{aligned} \quad (5.14)$$

左侧的术语代表运输。右边的项是动能的源或汇。在 LES 中，尤其值得关注的是隐藏在第二个 RHS 项中的 *亚网格动能的产生*。这个项的作用是在运动的解析尺度和非解析尺度之间传递能量。在经典的“能量级联”图中，能量的净转移是从大尺度到小尺度，运动最终在粘度作用下作为热量消散。然而，在 LES 中，这一术语也可能是能量的来源，即所谓的 *反向散射现象*。为 LES 设计子网格闭合具有挑战性的一个问题是，反向散射并非特例，而是无处不在，而且往往对大尺度运动的形成至关重要（想想子网格浮力产生的湍流，如 Rayleigh-Taylor 不稳定性）[28]。大多数简单的 LES 子网格闭合认为子网格动能的产生等于总动能的耗散。利用梯度扩散进行 SGS 闭合时，这一假设的含义如下：

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{\text{dev}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} &= -2(\mu + \mu_t) \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \delta_{ij} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \\ &= -2(\mu + \mu_t) \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \delta_{ij} \right) \tilde{S}_{ij} \\ &= -2(\mu + \mu_t) \left(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2 \right) = -2\mu \left(S_{ij} S_{ij} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right) \equiv \varepsilon \end{aligned} \quad (5.15)$$

利用模型动能谱（见[15]），公式(5.15)可用来推导模型常数的理论值，如下面讨论的 Smagorinsky 常数。见附录 H。

5.2 湍流黏度模型

在 LES 中，“湍流模型”指的是 SGS 通量项的闭合。在 FDS 中，梯度扩散是用于关闭 SGS 动量和标量通量项的湍流模型。然后，我们需要一个湍流传输系数模型：湍流（或涡流）粘度或湍流（或涡流）扩散率。如下文所述，湍流扩散系数是通过恒定的湍流施密特数（用于质量扩散）或普朗特数（用于热扩散）获得的，因此最重要的传输系数是湍流粘度 μ_t 。本节将介绍几种不同的选择。第 5.2.3 节中的 Deardorff 模型是默认模型。选择它作为默认值是基于与各种全尺度实验的比较。

5.2.1 Smagorinsky 模型的常数系数

根据 Smagorinsky [29] 的分析，涡流粘度可按以下方式建模：

$$\mu_t = \rho (C_s \Delta)^2 |S| \quad ; \quad |S| = \left(2S_{ij} S_{ij} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.16)$$

其中 $C_s = 0.2$ 为常数， $\Delta = (\delta x \delta y \delta z)^{1/3}$ 为滤波器宽度。该模型用于 FDS 第 1 版至第 5 版。 $C_s = 0.2$ 名义上是根据 Lilly 的分析[30]得出的频谱截止滤波器值（产生等于耗散）（与盒式滤波器相比，能量守恒方案的隐式滤波器更接近于频谱截止滤波器[27]）。附录 H 从理论上推导出了常数，FDS 验证指南[31]中对衰减各向同性湍流的测试也证实了这一点。

5.2.2 动态 Smagorinsky 模型

对于动态 Smagorinsky 模型[32][33]，公式(5.16)中的系数 C_s 不再作为常数，而是根据当地的流动条件计算得出。

5.2.3 Deardorff 模型（默认）

默认情况下，FDS 使用 Deardorff 模型的变形[14]：

$$\mu_t = \rho C_v \Delta \sqrt{k_{sgs}} \quad ; \quad k_{sgs} = \frac{1}{2} \left((\bar{u} - \hat{u})^2 + (\bar{v} - \hat{v})^2 + (\bar{w} - \hat{w})^2 \right) \quad (5.17)$$

其中， \bar{u} 是网格单元中心 u 的平均值（代表长度尺度为 Δ 的 LES 滤波速度）， \hat{u} 是相邻单元 u 的加权平均值（代表长度尺度为 2Δ 的测试滤波场）：

$$\bar{u}_{ijk} = \frac{u_{ijk} + u_{i-1,jk}}{2} \quad ; \quad \hat{u}_{ijk} = \frac{\bar{u}_{ijk}}{2} + \frac{\bar{u}_{i-1,jk} + \bar{u}_{i+1,jk}}{4} \quad (5.18)$$

\hat{v} 和 \hat{w} 的定义类似。模型常数设定为文献值 $C_v = 0.15$ [15]。该常数的理论推导见附录 H。子网动能的代数形式是基于 Bardina 等人的尺度相似模型[34]中提出的思想。（请注意，Deardorff[14]解决了 k_{sgs} 的传输方程）。

5.2.4 Vreman 模型

Vreman 的涡粘模型[35]的计算公式为

$$\mu_t = \rho c \sqrt{\frac{B_\beta}{\alpha_{ij} \alpha_{ij}}} \quad (5.19)$$

其中，

$$B_\beta = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}^2 + \beta_{11}\beta_{33} - \beta_{13}^2 + \beta_{22}\beta_{33} - \beta_{23}^2 \quad ; \quad \beta_{ij} = \Delta_m^2 \alpha_{mi} \alpha_{mj} \quad (5.20)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (5.21)$$

所选符号与 Vreman 的论文[35]完全一致。该模型考虑了滤波宽度在 m 方向上可能存在的各向异性；公式(5.20)隐含了 m 方向上的收缩。Vreman 模型的基本思想是以泰勒级数展开速度场，并对速度场进行分析测试滤波，从而避免了动态模型中所需的昂贵的显式测试滤波操作。因此，该模型成本低廉。不过，与恒定系数 Smagorinsky 不同，Vreman 模型具有收敛性，因此适用于高分辨率 LES 计算。

模型常数可能与 Smagorinsky 常数 $c \approx 2.5C_s^2$ 有关。由于 Vreman 模型最适用于高分辨率情况，我们将系数设定为 $C_s = 0.17$ ，这对高分辨率衰减各向同性湍流产生了准确的结果（见 FDS 验证指南[31]）。因此，默认的 Vreman 常数设置为 $c=0.07$ 。

5.2.5 壁面适应性局部涡粘（WALE）模型

Nicoud 和 Ducros[36]提出的“壁面适应性局部涡粘度”模型（或 WALE）最初是作为在壁面附近适当缩放涡粘度的方法而设计的。Smagorinsky 模型中使用的不变式 $|S|$ 在靠近壁面时为 $O(1)$ ，而为 WALE 模型设计的不变式则正确地缩放为 $O(y^3)$ ，其中 y 是与壁面的距离。WALE 模型用于计算第一个离壁网格单元中的涡流粘度。动态湍流粘度的写法如下

$$\mu_t = \rho (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(S_{ij} S_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (5.22)$$

其中，

$$S_{ij}^d S_{ij}^d = \frac{1}{6} (S^2 S^2 + \Omega^2 \Omega^2) + \frac{2}{3} S^2 \Omega^2 + 2IV_{S\Omega} \quad (5.23)$$

$$S^2 = S_{ij} S_{ij} \quad ; \quad \Omega^2 = \Omega_{ij} \Omega_{ij} \quad ; \quad IV_{S\Omega} = S_{ik} S_{kj} \Omega_{jl} \Omega_{li}$$

应变张量和旋转张量分别为

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad ; \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.24)$$

Nicoud 和 Ducros[36]建议模型常数应在 $0.55 \leq C_w \leq 0.60$ 的范围内。根据各向同性湍流衰减的结果[31], FDS 使用 $C_w = 0.60$ 。显然, WALE 也可用作体积流涡旋粘度模型。不过, 这还没有在火灾应用中进行过测试。

5.2.6 导热和气体物质扩散

其他扩散参数, 即热导率和质量扩散率, 与湍流粘度的关系是

$$k_t = \frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \quad ; \quad (\rho D)_t = \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (5.25)$$

在给定情景下, 湍流普朗特数 Pr_t 和湍流施密特数 Sc_t 被假定为常数。两者的默认值均为 0.5。文献[37]根据烟羽模拟给出了这些值的理由。

5.2.7 数值实现

在动量方程的离散化形式中, 模型粘度定义在单元中心。例如, 恒定系数 Smagorinsky 模型的形式如下:

$$\mu_{ijk} = \rho_{ijk} (C_s \Delta)^2 |S| \quad (5.26)$$

其中 C_s 是一个经验常数, $\Delta = (\delta x \delta y \delta z)^{1/3}$, 以及

$$|S|^2 = 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \quad (5.27)$$

$|S|$ 量由单元中心平均的二阶空间差分组成。例如

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{ijk} - u_{i-1,jk}}{\delta x_i} \quad (5.28)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i,j+1,k} - u_{ijk}}{\delta y_{j+\frac{1}{2}}} + \frac{u_{ijk} - u_{i,j-1,k}}{\delta y_{j-\frac{1}{2}}} \right) \quad (5.29)$$

散度在第 4.3.2 节中描述。

5.2.8 直接数值模拟 (DNS) 的传输系数

在某些流动情况下, 可以直接使用分子特性 μ 、 k 和 D 。通常, 这意味着数值网格单元的数量级为 1 毫米或更小, 模拟被视为直接数值模拟 (DNS)。在 DNS 模拟中, 粘度、热导率和材料扩散率都是根据动力学理论近似计算的, 因为在燃烧情况下, 它们与温度的关系非常重要。物质的粘度 α 的计算公式为

$$\mu_\alpha = \frac{26.69 \times 10^{-7} (W_\alpha T)^{\frac{1}{2}}}{\sigma_\alpha^2 \Omega_\nu} \quad [=] \quad \text{kg}/(\text{ms}) \quad (5.30)$$

其中, σ_α 是 Lennard-Jones 硬球直径 (\AA), Ω_ν 是碰撞积分, 是温度 T 的经验函数。物种 α

的热导率为

$$k_\alpha = \frac{\mu_\alpha c_{p,\alpha}}{\text{Pr}_\alpha} \quad [=] \quad \text{W}/(\text{mK}) \quad (5.31)$$

请注意，如果没有定义 Pr_α ，则假定氮气的值为 0.71。气体混合物的粘度和导热系数由[38]得出

$$\mu_{\text{DNS}} = \frac{\sum_\alpha \mu_\alpha X_\alpha M_\alpha^{1/2}}{\sum_\alpha X_\alpha M_\alpha^{1/2}} \quad ; \quad k_{\text{DNS}} = \frac{\sum_\alpha k_\alpha X_\alpha M_\alpha^{1/2}}{\sum_\alpha X_\alpha M_\alpha^{1/2}} \quad (5.32)$$

物种 α 扩散到物种 β 的二元扩散系数为

$$D_{\alpha\beta} = \frac{2.66 \times 10^{-7} T^{3/2}}{W_{\alpha\beta}^{\frac{1}{2}} \sigma_{\alpha\beta}^2 \Omega_D} \quad [=] \quad \text{m}^2 / \text{s} \quad (5.33)$$

其中， $W_{\alpha\beta} = 2(1/W_\alpha + 1/W_\beta)^{-1}$ ， $\sigma_{\alpha\beta} = (\sigma_\alpha + \sigma_\beta)/2$ ， Ω_D 是扩散碰撞积分，是温度 T 的经验函数[39]。假定氮气是本文所考虑的任何燃烧情况中的主要物种，因此物种质量守恒方程中的扩散系数为特定物种扩散到氮气中的扩散系数

$$(\rho D)_{\alpha,\text{DNS}} = \rho \mathcal{D}_{\alpha,0} \quad (5.34)$$

其中物质 0 为氮气。

5.3 速度压力耦合

本节将解释如何以有限差分形式书写动量方程，以及动量方程的求解如何需要求解压力的椭圆 PDE。

5.3.1 动量方程简化

守恒形式的动量方程可以写成

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \nabla p = \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_b + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{ij} \quad (5.35)$$

首先，我们从上文介绍的动量方程的非守恒形式开始（见公式(5.13)）

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) + \nabla p = \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_b + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{ij} \quad (5.36)$$

请注意，与拉格朗日粒子的所有动量交换都由力项 \mathbf{f}_b 表示。接下来，我们进行如下替换：

- 从两边减去静水压力梯度 $\rho_0(z)\mathbf{g}$ 。注意， $\nabla p = \rho_0 \mathbf{g} + \nabla \tilde{p}$ ， $\rho_0(z)$ 是环境大气的密度曲线。
- 应用向量特性： $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla |\mathbf{u}|^2 / 2 - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}$ 。
- 用密度 ρ 除以所有项。
- 分解压力项：

$$\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} = \nabla \left(\frac{\tilde{p}}{\rho} \right) - \tilde{p} \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad (5.37)$$

- 定义 $H \equiv |\mathbf{u}|^2 / 2 + \tilde{p} / \rho$ 。

现在动量方程可以写为：

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \underbrace{\mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} - \frac{1}{\rho} [(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_0) \mathbf{g} + \mathbf{f}_b + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{ij}]}_{\mathbf{F}_A} - \underbrace{\tilde{p} \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right)}_{\mathbf{F}_B} + \nabla H = 0 \quad (5.38)$$

请注意，矢量 \mathbf{F} 的下标 A 和 B 分别表示 Advective 和 Baroclinic。正如下文所述，将动量方程的各个项归入这两个项是很方便的。

5.3.2 动量方程的有限差分近似

如上一节所述，动量方程的写法很方便：

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{F} + \nabla H = 0 \quad ; \quad \mathbf{F} = \mathbf{F}_A + \mathbf{F}_B \quad (5.39)$$

平流项 Advective 和气压项 Baroclinic \mathbf{F}_A 和 \mathbf{F}_B 扩展为

$$F_{A,x} = w\omega_y - v\omega_z - \frac{1}{\rho} \left((\rho - \rho_n)g_x + f_x + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \right) \quad ; \quad F_{B,x} = -\tilde{p} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad (5.40)$$

$$F_{A,y} = u\omega_z - w\omega_x - \frac{1}{\rho} \left((\rho - \rho_n)g_y + f_y + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} \right) \quad ; \quad F_{B,y} = -\tilde{p} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad (5.41)$$

$$F_{A,z} = v\omega_x - u\omega_y - \frac{1}{\rho} \left((\rho - \rho_n)g_z + f_z + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) \quad ; \quad F_{B,z} = -\tilde{p} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad (5.42)$$

术语 ∇H 被称为压力梯度，尽管如上所述， H 实际上并不是压力。它的离散化是

$$\frac{\partial u}{\partial t} + F_{x,ijk} + \frac{H_{i+1,jk} - H_{ijk}}{\delta x} = 0 \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + F_{y,ijk} + \frac{H_{i,j+1,k} - H_{ijk}}{\delta y} = 0 \quad (5.44)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + F_{z,ijk} + \frac{H_{ij,k+1} - H_{ijk}}{\delta z} = 0 \quad (5.45)$$

其中， H_{ijk} 取自单元 ijk 的中心， u_{ijk} 和 $F_{x,ijk}$ 取自单元朝前 x 方向的一侧， v_{ijk} 和 $F_{y,ijk}$ 取自朝前 y 方向的一侧， w_{ijk} 和 $F_{z,ijk}$ 取自朝前 z （垂直）方向的一侧。

对于 \mathbf{F}_A 的离散化，涡度的分量 $(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ 分别位于指向 x 、 y 和 z 方向的单元边缘。粘性应力张量的非对角项也是如此： $\tau_{zy} = \tau_{yz}$ ， $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ， $\tau_{yx} = \tau_{xy}$ 。应力张量的对角线分量 τ_{xx} 、 τ_{yy} 和 τ_{zz} 以及外力分量 f_x 、 f_y 和 f_z 位于各自的单元面上。

$$F_{A,x,ijk} = \frac{1}{2} \left(w_{i+\frac{1}{2},jk} \omega_{y,ijk} + w_{i+\frac{1}{2},j,k-1} \omega_{y,ij,k-1} \right) - \frac{1}{2} \left(v_{i+\frac{1}{2},jk} \omega_{z,ijk} + v_{i+\frac{1}{2},j-1,k} \omega_{z,i,j-1,k} \right) - \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},jk}} \left(f_{x,ijk} + \frac{\tau_{xx,i+1,jk} - \tau_{xx,ijk}}{\delta x} + \frac{\tau_{xy,ijk} - \tau_{xy,i,j-1,k}}{\delta y} + \frac{\tau_{xz,ijk} - \tau_{xz,i,j,k-1}}{\delta z} \right) \quad (5.46)$$

$$F_{A,y,ijk} = \frac{1}{2} \left(u_{i,j+\frac{1}{2},k} \omega_{z,ijk} + u_{i-1,j+\frac{1}{2},k} \omega_{z,i-1,jk} \right) - \frac{1}{2} \left(w_{i,j+\frac{1}{2},k} \omega_{x,ijk} + w_{i,j+\frac{1}{2},k-1} \omega_{x,ij,k-1} \right) - \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2},k}} \left(f_{y,ijk} + \frac{\tau_{yx,ijk} - \tau_{yx,i-1,jk}}{\delta x} + \frac{\tau_{yy,i,j+1,k} - \tau_{yy,ijk}}{\delta y} + \frac{\tau_{yz,ijk} - \tau_{yz,i,j,k-1}}{\delta z} \right) \quad (5.47)$$

$$F_{A,z,ijk} = \frac{1}{2} \left(v_{ij,k+\frac{1}{2}} \omega_{x,ijk} + v_{i,j-1,k+\frac{1}{2}} \omega_{x,i,j-1,k} \right) - \frac{1}{2} \left(u_{ij,k+\frac{1}{2}} \omega_{y,ijk} + u_{i-1,j,k+\frac{1}{2}} \omega_{y,i-1,jk} \right) - \frac{1}{\rho_{ij,k+\frac{1}{2}}} \left(f_{z,ijk} + \frac{\tau_{zx,ijk} - \tau_{zx,i-1,jk}}{\delta x} + \frac{\tau_{zy,ijk} - \tau_{zy,i,j-1,k}}{\delta y} + \frac{\tau_{zz,ij,k+1} - \tau_{zz,ijk}}{\delta z} \right) \quad (5.48)$$

涡度矢量的分量被离散化:

$$\omega_{x,ijk} = \frac{w_{i,j+1,k} - w_{ijk}}{\delta y} - \frac{v_{ij,k+1} - v_{ijk}}{\delta z} \quad (5.49)$$

$$\omega_{y,ijk} = \frac{u_{ij,k+1} - u_{ijk}}{\delta z} - \frac{w_{i+1,jk} - w_{ijk}}{\delta x} \quad (5.50)$$

$$\omega_{z,ijk} = \frac{v_{i+1,jk} - v_{ijk}}{\delta x} - \frac{u_{i,j+1,k} - u_{ijk}}{\delta y} \quad (5.51)$$

粘性应力张量的分量被离散化:

$$\tau_{xx,ijk} = \mu_{ijk} \left(\frac{4}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} - 2 \frac{v_{ijk} - v_{i,j-1,k}}{\delta y} - 2 \frac{w_{ijk} - w_{ij,k-1}}{\delta z} \right) \quad (5.52)$$

$$\tau_{yy,ijk} = \mu_{ijk} \left(\frac{4}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} - 2 \frac{u_{ijk} - u_{i-1,jk}}{\delta x} - 2 \frac{w_{ijk} - w_{ij,k-1}}{\delta z} \right) \quad (5.53)$$

$$\tau_{zz,ijk} = \mu_{ijk} \left(\frac{4}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} - 2 \frac{u_{ijk} - u_{i-1,jk}}{\delta x} - 2 \frac{v_{ijk} - v_{i,j-1,k}}{\delta y} \right) \quad (5.54)$$

$$\tau_{xy,ijk} = \tau_{yx,ijk} = \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} \left(\frac{u_{i,j+1,k} - u_{ijk}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,jk} - v_{ijk}}{\delta x} \right) \quad (5.55)$$

$$\tau_{xz,ijk} = \tau_{zx,ijk} = \mu_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{ij,k+1} - u_{ijk}}{\delta z} + \frac{w_{i+1,jk} - w_{ijk}}{\delta x} \right) \quad (5.56)$$

$$\tau_{yz,ijk} = \tau_{zy,ijk} = \mu_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} \left(\frac{v_{ij,k+1} - v_{ijk}}{\delta z} + \frac{w_{i,j+1,k} - w_{ijk}}{\delta y} \right) \quad (5.57)$$

气压线项 \mathbf{F}_B 的分量被离散化:

$$F_{B,x,ijk} = - \frac{\tilde{p}_{i+1,jk} \rho_{ijk} + \tilde{p}_{ijk} \rho_{i+1,jk}}{\rho_{ijk} + \rho_{i+1,jk}} \frac{1}{\delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1,jk}} - \frac{1}{\rho_{ijk}} \right) \quad (5.58)$$

$$F_{B,y,ijk} = - \frac{\tilde{p}_{i,j+1,k} \rho_{ijk} + \tilde{p}_{ijk} \rho_{i,j+1,k}}{\rho_{ijk} + \rho_{i,j+1,k}} \frac{1}{\delta y} \left(\frac{1}{\rho_{i,j+1,k}} - \frac{1}{\rho_{ijk}} \right) \quad (5.59)$$

$$F_{B,z,ijk} = -\frac{\tilde{p}_{ij,k+1}\rho_{ijk} + \tilde{p}_{ijk}\rho_{ij,k+1}}{\rho_{ijk} + \rho_{ij,k+1}} \frac{1}{\delta z} \left(\frac{1}{\rho_{ij,k+1}} - \frac{1}{\rho_{ijk}} \right) \quad (5.60)$$

请注意， $\tilde{p}\nabla(1/\rho)$ 项的离散化有点不同寻常，这需要与公式(5.37)中其他两个项的离散化保持一致：

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\rho_{ijk} + \rho_{i+1,jk})/2} \frac{\tilde{p}_{i+1,jk} - \tilde{p}_{ijk}}{\delta x} &= \frac{1}{\delta x} \left(\frac{\tilde{p}_{i+1,jk}}{\rho_{i+1,jk}} - \frac{\tilde{p}_{ijk}}{\rho_{ijk}} \right) \\ -\frac{\tilde{p}_{i+1,jk}\rho_{ijk} + \tilde{p}_{ijk}\rho_{i+1,jk}}{\rho_{ijk} + \rho_{i+1,jk}} \frac{1}{\delta x} &\left(\frac{1}{\rho_{i+1,jk}} - \frac{1}{\rho_{ijk}} \right) \end{aligned} \quad (5.61)$$

5.3.3 泊松方程求解压力

在将速度分量在时间上向前推进之前，必须求解压力项 H 的椭圆偏微分方程（称为泊松方程）。该方程由动量方程的散度形成：

$$\nabla^2 H = -\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{F}_A + \mathbf{F}_B) \quad (5.62)$$

请注意，扰动压力 \tilde{p} 出现在公式(5.62)的两边。 \mathbf{F}_B 中 \tilde{p} 的值取自最后计算的 H 。左侧的压力（包含在变量 H 中）可直接求解。对压力项进行分解的原因是为了使公式(5.62)离散化产生的线性代数系统具有常数系数（即可分离），并可通过快速、直接（即非迭代）方法（利用快速傅立叶变换 (FFT)）求解到机器精度。如下文所述，泊松方程需要多次求解，每次都会使新旧 \tilde{p} 值更加接近。

泊松方程的离散形式为：

$$\begin{aligned} &\frac{H_{i+1,jk} - 2H_{ijk} + H_{i-1,jk}}{\delta x^2} + \frac{H_{i,j+1,k} - 2H_{ijk} + H_{i,j-1,k}}{\delta y^2} + \frac{H_{ij,k+1} - 2H_{ijk} + H_{ij,k-1}}{\delta z^2} \\ &= -\frac{F_{x,ijk} - F_{x,i-1,jk}}{\delta x} - \frac{F_{y,ijk} - F_{y,i,j-1,k}}{\delta y} - \frac{F_{z,ijk} - F_{z,ij,k-1}}{\delta z} - \frac{\delta}{\delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} \end{aligned} \quad (5.63)$$

这个椭圆偏微分方程使用基于 FFT 的直接求解器[16]求解，该求解器是名为 CRAYFISHPAK¹ 的椭圆 PDE 求解例程库的一部分。为确保流体的散度与公式(4.24)中给出的定义一致，散度的时间导数在预测步被定义为

$$\frac{\delta}{\delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} \equiv \frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk}^* - (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk}^n}{\delta t} \quad (5.64)$$

然后，在校正步有，

$$\frac{\delta}{\delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} \equiv \frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk}^{n+1} - \frac{1}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk}^* + (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk}^n]}{\delta t / 2} \quad (5.65)$$

根据构造，公式(4.24)中定义的热力学散度与下列公式定义的散度完全相等

$$(\nabla \cdot \mathbf{u})_{ijk} = \frac{u_{ijk} - u_{i-1,jk}}{\delta x} + \frac{v_{ijk} - v_{i,j-1,k}}{\delta y} + \frac{w_{ijk} - w_{ij,k-1}}{\delta z} \quad (5.66)$$

两种散度定义的等价性是离散方程的形式、时间步进方案和直接求解压力泊松方程的结果。

下文将介绍如何指定压力方程的边界条件。

1. 开放式边界条件（通用）

开放边界是指允许流体根据局部压力梯度流入或流出计算域。压力的边界条件取决于局部流动

¹ CRAYFISHPAK 是椭圆方程求解器 FISHPAK 的矢量化形式，最初由位于科罗拉多州博尔德的美国国家大气研究中心 (NCAR) 开发。

是流入还是流出。无论哪种情况，都假定 $H = \tilde{p} / \rho + |\mathbf{u}|^2 / 2$ 沿流线保持不变。还假设边界处的压力扰动是用户指定的输入值 \tilde{p}_{ext} ，默认为零。 H 的泊松求解器要求在开放边界处使用狄利克特条件，即在网格外部边界处指定其值。例如，考虑 $x = x_{min}$ 边界。 H 的边界值由以下表达式给出，取决于流过外部单元面的流动方向：

$$\text{BXS}(\text{J}, \text{K}) \equiv H_{\frac{1}{2},jk} = \begin{cases} \frac{\tilde{p}_{ext}}{\rho_{1,jk}} + \frac{1}{2}(\bar{u}_{1,jk}^2 + \bar{v}_{1,jk}^2 + \bar{w}_{1,jk}^2) & \text{outgoing} \\ \frac{\tilde{p}_{ext}}{\rho_{\infty}} + \frac{1}{2}(u_{\infty}^2 + v_{\infty}^2 + w_{\infty}^2) & \text{incoming} \end{cases} \quad (5.67)$$

BXS 是发送给压力求解器的数组名称。速度分量上的横杠表示与边界相邻网格单元各面的平均值。下标 ∞ 表示用户指定的远场速度和密度值。通常情况下，远场速度为零，但对于涉及外部风的模拟，可以相应指定这些值。

2. 开放边界条件（风）

如果用户指定了风速 **SPEED**，则会调用略有不同的 **OPEN** 边界条件。流出边界条件与公式 (5.67) 所示相同。在流入边界，假设平均粘性力和对流力很小，并使用简化动量方程来计算 H 的边界值， $\partial u_i / \partial t = -\partial H / \partial x_i$ 。例如，下 x 边界的 H 值 $H_{\frac{1}{2},jk}$ 是为了近似诺伊曼边界而设置的，边界法线上有一个指定的速度分量：

$$\text{BXS}(\text{J}, \text{K}) \equiv H_{\frac{1}{2},jk} = H_{1,jk}^n + \frac{\delta_x}{2} \left[\frac{u_{\infty}(z, t) - u_{0,jk}^n}{\delta t} \right] \quad (5.68)$$

其中 $u_{\infty}(z, t)$ 是高度 z 和时间 t 处的规定外部风场速度分量。请注意，如第 5.4.5 节所述，风场规定的速度矢量切向分量也会应用于外部域边界。

3. 固体边界条件

固体表面的边界条件可分为三类：

- a) 外部边界，网格的整个面都是实体或强制流。
- b) 开放和固体表面混合的外部边界。
- c) 内部固体障碍物。

案例 1: FDS 使用直接泊松求解器，要求在网格外部指定 **Neumann**（指定法向梯度）或 **Dirichlet**（指定值）边界条件。如果网格的整个面都是固体或强制流边界，我们可以对整个面使用诺伊曼边界条件。例如，在 $x = x_{max}$ 边界，我们可以指定 H 的法向梯度：

$$\text{BXF}(\text{J}, \text{K}) \equiv \frac{H_{I+1,jk}^n - H_{I,jk}^n}{\delta x} = -F_{x,I,jk}^n - \frac{u_{I,jk}^* - u_{I,jk}^n}{\delta t} \quad (5.69)$$

其中，**BXF** 是发送给压力求解器的边界条件阵列名称， $H_{I+1,jk}$ 位于边界右侧幽灵单元的中心， $H_{I,jk}$ 位于边界左侧单元的中心， $F_{x,I,jk}^n$ 是时间步开始时通风口或实体墙处 **F** 的 x 分量， $u_{I,jk}^*$ 是用户指定的下一个时间步的速度 x 分量值。

请注意，对于诺伊曼压力边界，计算边界力项有多种选择（甚至可以设为零）。重要的是，无论在这里使用什么力值，在速度预测器和校正器步骤（公式 (5.88) 和 (5.89)）中都必须使用相同的值。我们选择使用之前的法向压力梯度值计算边界力项，就像计算浸没边界表面一样：

$$F_{x,I,jk}^{n,k} = -\frac{H_{I+1,jk}^{n,k-1} - H_{I,jk}^{n,k-1}}{\delta x} - \frac{u_{I,jk}^* - u_{I,jk}^n}{\delta t} \quad (5.70)$$

对于校正步，有，

$$\text{BXF(J,K)} \equiv \frac{H_{l+1,jk}^* - H_{l,jk}^*}{\delta x} = -F_{x,l,jk}^* - \frac{u_{l,jk}^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{l,jk}^* + u_{l,jk}^n)}{\delta t / 2} \quad (5.71)$$

下一时间步的法向速度分量 $u_{l,jk}^{n+1}$ 恰好是指定值（机器精度）。如果边界是实心墙，则该值开始为零并保持为零。如果边界是强制流动通风口，则该值将遵循用户指定的时间历史。

案例 2：在混合了实体边界和开放边界的外部网格面上，我们必须在所有单元应用 **Dirichlet** 边界条件，即指定 H 而不是其梯度。考虑与情况 1 相同的网格面。与前一种情况一样，我们首先使用之前计算的压力值和速度分量的所需时间导数修改通量项：

$$F_{x,l,jk}^{n,k} = -\frac{H_{l+1,jk}^{n,k-1} - H_{l,jk}^{n,k-1}}{\delta x} - \frac{u_{l,jk}^* - u_{l,jk}^n}{\delta t} \quad (5.72)$$

然后，在网格边界指定 H 值：

$$\text{BXF(J,K)} \equiv H_{l+\frac{1}{2},jk}^{n,k} = \frac{H_{l,jk}^{n,k-1} + H_{l+1,jk}^{n,k-1}}{2} + \frac{\delta x}{4\delta t} (u_{l,jk}^{*,k-1} - u_{l,jk}^*) \quad (5.73)$$

上标 k 是迭代索引。我们使用上一次迭代的 H 界面值来估计当前迭代的 H 值。项 $u_{l,jk}^{*,k-1}$ 是对下一时间步预期法向速度分量 u_l^* 的一阶估计。将式(5.72)和式(5.73)相加，即可得到式(5.73)右侧第二项的目的：

$$u_{l,jk}^* = u_{l,jk}^n + \frac{u_{l,jk}^{*,k-1} - u_{l,jk}^*}{2} - \delta t \left(F_{x,l,jk}^{n,k} + \frac{H_{l+\frac{1}{2},jk}^{n,k} - H_{l,jk}^{n,k-1}}{\delta x / 2} \right) \quad (5.74)$$

从广义上讲，这收敛于

$$\left| u_{l,jk}^{*,k} - u_{l,jk}^* \right| \approx \left| \frac{u_{l,jk}^{*,k-1} - u_{l,jk}^*}{2} \right| \quad (5.75)$$

这个迭代过程一直持续到 $\left| u_{l,jk}^{*,k} - u_{l,jk}^* \right|$ 低于指定的容差为止。默认情况下，容差为 $\delta x / 2$ 。对于校正步，除了压力项的边界条件为

$$\text{BXF(J,K)} \equiv H_{l+\frac{1}{2},jk}^{*,k} = \frac{H_{l,jk}^{*,k-1} + H_{l+1,jk}^{*,k-1}}{2} + \frac{\delta x}{2\delta t} (u_{l,jk}^{n+1,k-1} - u_{l,jk}^{n+1}) \quad (5.76)$$

案例 3：FDS 采用简单的直接强制沉浸边界法 (IBM)[40]，适用于块笛卡尔几何图形。内部固体障碍物表示为遮挡网格单元，但在这些遮挡单元的边界无法直接规定无流动条件(5.69)。不过，通过在一个时间步长内多次求解压力方程，可以将速度的法向分量控制在理想值的某个指定公差范围内。在一个时间步开始时，在所有不与墙壁相对应的单元面上计算 \mathbf{F} 的分量。在那些与实体墙相对应但不位于计算网格外部的单元面上，我们会对其进行规定（例如，在 u_{ijk} “所在”的单元面上）：在预测步，有

$$F_{x,ijk}^{n,k} = -\frac{H_{i+1,jk}^{n,k-1} - H_{ijk}^{n,k-1}}{\delta x} - \frac{u_{ijk}^* - u_{ijk}^n}{\delta t} \quad (5.77)$$

在校正步，有

$$F_{x,ijk}^{*,k} = -\frac{H_{i+1,jk}^{*,k-1} - H_{ijk}^{*,k-1}}{\delta x} - \frac{u_{ijk}^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{ijk}^* + u_{ijk}^n)}{\delta t / 2} \quad (5.78)$$

请注意，上标 n 指的是时间步长， k 指的是压力求解器的迭代次数。请注意， u_{ijk}^* 和 u_{ijk}^{n+1} 是近似值，因为速度时间导数的真实值取决于压力方程的解，但由于使用的是最新的压力估计值，因此

近似效果相当好。此外，即使固体表面的法向速度存在微小误差，每个阻塞单元的散度值在计算过程中仍完全为零。换句话说，进入给定阻塞单元的总通量始终为零，法向速度误差通常至少比特征流速小几个数量级。当作为预测器-校正器更新方案的一部分实施时，固体表面的无流量条件可以得到很好的保持。

4. 网格交界面的边界条件

狄利克雷边界条件适用于两个网格之间的界面，这意味着在界面上指定的是 H ，而不是 ∇H 。考虑两个非重叠网格之间的界面，它们在共同的 x 边界处相邻。左边网格最右边单元格中心的 H 值表示为 $H_{l,jk}$ ，右边网格最左边单元格中心的 H 值表示为 $H_{l,jk}$ 。左网格的界面值表示为 $H_{l+\frac{1}{2},jk}$ ，右网格的界面值表示为 $H_{\frac{1}{2},jk}$ 。

在给定的时间步长 n 开始时，每个网格界面上的速度法向分量 $\bar{u}_{l,jk}^n$ 和 $\bar{u}_{0,jk}^n$ 被强制取相同的值，即上一个时间步长的平均值。在时间步的预测阶段，这些值会独立更新，以便在下一个时间步提供一阶估计值：

$$u_{l,jk}^{*,m} = \bar{u}_{l,jk}^n - \delta t \left(F_{x,l,jk}^n + \frac{H_{l+\frac{1}{2},jk}^m - H_{l,jk}^m}{\delta x / 2} \right) ; \quad u_{l,jk}^* = \lim_{m \rightarrow \infty} u_{l,jk}^{*,m} \quad (5.79)$$

$$u_{0,jk}^{*,m} = \bar{u}_{0,jk}^n - \delta t \left(F_{x,0,jk}^n + \frac{H_{\frac{1}{2},jk}^m - H_{l,jk}^m}{\delta x / 2} \right) ; \quad u_{0,jk}^* = \lim_{m \rightarrow \infty} u_{0,jk}^{*,m} \quad (5.80)$$

理想情况下，这些估计值 $u_{l,jk}^{*,m}$ 和 $u_{0,jk}^{*,m}$ 应该相同，但它们通常不相同，因为各自的压力场只保证在界面处连续，而不是可微（平滑）的。界面边界处压力场的常用值为

$$H_{\frac{1}{2},jk}^m \equiv H_{l+\frac{1}{2},jk}^m = \frac{H_{l,jk}^{m-1} + H_{l,jk}^{m-1}}{2} + \frac{\delta x}{4\delta t} (u_{l,jk}^{*,m-1} - u_{0,jk}^{*,m-1}) \quad (5.81)$$

将公式(5.81)中的 $H_{l+\frac{1}{2},jk}^m$ 代入公式(5.79)，可得出公式(5.81)右侧第二项的目的：

$$u_{l,jk}^{*,m} = \bar{u}_{l,jk}^n - \frac{u_{l,jk}^{*,m-1} - u_{0,jk}^{*,m-1}}{2} - \delta t \left(F_{x,l,jk}^n + \frac{(H_{l,jk}^{m-1} + H_{l,jk}^{m-1}) / 2 - H_{l,jk}^m}{\delta x / 2} \right) \quad (5.82)$$

右侧的额外项会将 $u_{l,jk}^{*,m}$ 推向 $u_{0,jk}^{*,m}$ 的一半，反之亦然。这个迭代过程一直持续到 $|u_{l,jk}^{*,m} - u_{0,jk}^{*,m}|$ 低于指定的容差为止。默认情况下，容差为 $\delta x / 2$ 。

对于时间步长的校正阶段，程序相同，只是压力项的边界条件是

$$H_{\frac{1}{2},jk}^m \equiv H_{l+\frac{1}{2},jk}^m = \frac{H_{l,jk}^{m-1} + H_{l,jk}^{m-1}}{2} + \frac{\delta x}{2\delta t} (u_{l,jk}^{n+1,m-1} - u_{0,jk}^{n+1,m-1}) ; \quad u_{l,jk}^{n+1} = \lim_{m \rightarrow \infty} u_{l,jk}^{n+1,m} \quad (5.83)$$

最后一项的系数为 $1/2$ 而不是 $1/4$ 是由于校正器速度阶跃的结构造成的：

$$u_{l,jk}^{n+1,m} = \frac{\bar{u}_{l,jk}^n + \bar{u}_{l,jk}^*}{2} - \frac{u_{l,jk}^{n+1,m-1} - u_{0,jk}^{n+1,m-1}}{2} - \frac{\delta t}{2} \left(F_{x,l,jk}^* + \frac{(H_{l,jk}^{m-1} + H_{l,jk}^{m-1}) / 2 - H_{l,jk}^m}{\delta x / 2} \right) \quad (5.84)$$

请注意，在整个迭代过程中，MPI 调用都是为了交换相邻单元中的 u 和 H 值。

5.3.4 更新速度的迭代程序

FDS 中的泊松求解器会在每个网格上生成公式(5.63)的精确解。然而，这种解法存在三个问题：

- 解 H 在网格界面上是连续的，但其梯度的有限差分却不是。这意味着网格界面上的速度

法向分量在下一时间步长上将不一致。

- b) 在固体内部边界，速度的法向分量并不完全为零，因为 \mathbf{F} 的法向分量等于 H 梯度的前一个值。只有在外边界，无流动边界条件才是精确的。
- c) \mathbf{F} 中包含的扰动压力 \tilde{p} 来自上一时间步。因此，在求解泊松方程后， H 中隐含的 \tilde{p} 值将不等于 \mathbf{F} 中的值。

解决这三个问题的一种方法是多次求解泊松方程，每次都更新压力的滞后值，直到内部固体和网格边界的速度法向分量收敛到规定的容差范围内，直到扰动压力的新旧值 \tilde{p} 收敛到规定的容差范围内。

以下是推进速度分量的步骤。在时间步长的预测器和校正器阶段，除少数注意到的例外情况外，都遵循相同的程序。

- a) 网格界面上共存的重叠速度法向分量由其平均值代替。考虑两个在 x 方向并排连接的网格。分量 $u_l \equiv u_{l,jk}$ 位于左侧网格的右边界，而 $u_0 \equiv u_{0,jk}$ 位于右侧网格的左边界。定义离散的“块平均 patch-averaged” $\bar{\mathbf{u}}$ 场，它在所有重叠网格点上都是相同的。为此，我们只需对网格界面上的法向速度分量的重合值进行平均。例如，考虑与之前相同的并排网格，对所有块边界单元 j 和 k ，有

$$\bar{u}_l = \bar{u}_0 \equiv \frac{1}{2}(u_{l,jk} + u_{0,jk}) \quad (5.85)$$

为简单起见，这里我们只考虑相邻网格的单元大小相等的情况（粗-细网格接口是可能的）。

- b) 按第 5.3.2 节所述计算 $\mathbf{F}_A(\bar{\mathbf{u}})$ 。
- c) 如第 5.3.2 节所述，加入斜压项 $\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}) = \mathbf{F}_A(\bar{\mathbf{u}}) + \mathbf{F}_B(\bar{\mathbf{u}})$ 。
- d) 根据公式(5.77)或公式(5.78)计算固体表面 \mathbf{F} 的法向分量。
- e) 如第 5.3.3 节所述，求解压力 H 的泊松方程。在预测阶段

$$\nabla^2 H^n = - \left(\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^* - \nabla \cdot \mathbf{u}^n - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}^n - \mathbf{u}^n)}{\delta t} \right) - \mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^n) \quad (5.86)$$

在校正阶段：

$$\nabla^2 H^* = - \left(\frac{2\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} - \nabla \cdot \mathbf{u}^* - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}^* - \mathbf{u}^*) - \nabla \cdot \mathbf{u}^n - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}^n - \mathbf{u}^n)}{\delta t} \right) - \mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^*) \quad (5.87)$$

时间导数中的额外项 $\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}^n - \mathbf{u}^n)$ 和 $\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}^* - \mathbf{u}^*)$ “校正”了散度误差。对网格界面上的速度法向分量进行平均的好处是，界面两侧的 \mathbf{F} 是相同的，因为所有力项都是使用补丁平均场确定的。这也意味着在网格界面计算的应力张量（埋入 \mathbf{F} 中）是对称的；这种对称性是角动量守恒的要求。因此，斑块平均程序可以防止在网格界面上产生虚假的涡度。

- f) 估计下一时间步的速度场。预测器步骤

$$\mathbf{u}^{*,k} = \bar{\mathbf{u}}^n - \delta t (\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^n) + \nabla H^{k-1}) \quad (5.88)$$

在校正步，有：

$$\mathbf{u}^{n+1,k} = \frac{1}{2} \left(\bar{\mathbf{u}}^n + \bar{\mathbf{u}}^* - \delta t (\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^*) + \nabla H^{k-1}) \right) \quad (5.89)$$

请注意，对于这两个阶段，界面处的速度法向分量不再匹配，因为界面处的单个压力场并不完全匹配。

- g) 检查收敛标准。默认速度容差为

$$|u_l^* - u_0^*| < 0.5\delta x \quad (5.90)$$

以及压力 $p = \rho(H - |\mathbf{u}|^2 / 2)$ 的默认收敛标准为

$$|\nabla \cdot (p^k - p^{k-1}) \nabla (1/\rho)| < 20 / \delta x^2 \quad (5.91)$$

如果不符合标准，请返回步骤 c)。

这种迭代方案对大多数多网格配置都很有效，但在隧道几何形状的情况下，速度会过于缓慢，因为在隧道中可能会有数十个网格首尾相接。在这种情况下，附录 N 中介绍了一种用于求解泊松方程的可选预处理方案。

5.4 速度边界条件

本节介绍如何在固体表面、网格界面或通向外部大气的开放边界指定速度的切线分量。速度的法向分量不直接在这些边界处指定，而是通过压力边界条件间接指定，详见第 5.3.3 节。

5.4.1 光滑壁面

在有限体积 LES 中，当动量方程在邻近壁面的单元上积分时，发现最难处理的项是粘性应力 τ_w ，因为无法解析流向速度分量的壁面法向梯度；壁面的 SGS 应力完全为零。因此，我们遇到的情况与高雷诺数下的体流完全不同，在高雷诺数下，粘性项可以忽略不计，而 SGS 应力则至关重要。然而，SGS 模型的保真度仍然会影响壁面应力，因为 SGS 张量的其他分量会影响近壁速度值，从而影响由壁面模型确定的粘性应力。FDS 采用对数速度曲线 τ_w 建模[15]，具体如下。

近壁区域的一个重要比例量是摩擦速度，定义为 $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho}$ 。根据摩擦速度，我们可以定义非一维流向速度 $u^+ \equiv u / u_\tau$ 和非一维壁面法向距离 $y^+ \equiv y / \delta_v$ ，其中 $\delta_v = \nu / u_\tau = \mu / (\rho u_\tau)$ 是粘性长度尺度。在 FDS 中，壁面定律近似为

$$u^+ = y^+ \quad y^+ < 11.81 \quad (5.92)$$

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + B \quad y^+ \geq 11.81 \quad (5.93)$$

其中， $\kappa = 0.41$ 是 von Kármán 常数， $B = 5.2$ 。粘性应力和惯性应力都很重要的 $5 < y^+ < 30$ 区域被称为缓冲层。根据 Werner 和 Wengle 的研究[41]，该区域的解近似于 $y^+ = 11.81$ 时的粘性区域和对数区域。

为了将对数定律模型应用于 FDS，我们假设第一个离壁速度分量代表在壁面法线方向距离 $\delta y / 2$ 处采样的剖面——流向速度分量存储在交错网格的面中心。密度和分子粘度取相邻单元值的平均值，并在存储流向速度分量的单元面上均匀分布。

5.4.2 粗糙壁面

对于粗糙墙面，FDS 采用 Pope[15] 提出的对数定律

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{y}{s} \right) + \tilde{B}(s^+) \quad (5.94)$$

其中， $s^+ = s / \delta_v$ 是以粘性单位表示的粗糙度长度， s 是尺寸粗糙度。第一个离墙网格单元的离墙距离 y 取为 $\delta y / 2$ 。参数 \tilde{B} 随 s^+ 的变化而变化，但在完全粗糙极限时达到恒定值 $B_2 = 8.5$ 。在 FDS 中，我们用以下分段函数来实现 \tilde{B} ：

$$\tilde{B} = \begin{cases} B + (1/\kappa) \ln(s^+) & s^+ < 5.83 \\ \tilde{B}_{max} & 5.83 \leq s^+ < 30.0 \\ B_2 & s^+ \geq 30.0 \end{cases} \quad (5.95)$$

其中 $\tilde{B}_{max} = 9.5$ 。

5.4.3 近壁面涡粘模型

WALE 模型（见第 5.2.5 节）被用作近壁涡流粘度模型；也就是说，WALE 被用来计算与固体边界相邻的任何笛卡尔单元的涡流粘度。这样做有两个原因。首先，在我们实现 Deardorff 模型的过程中，子网格动能所需的测试滤波操作在靠近墙壁的地方定义不清。其次，在 WALE 模型中，涡流粘度以正确的速率（ $\nu_t = O(y^3)$ ）归零，不需要明确（显式？）的阻尼函数。

5.4.4 湍流粘度的壁面阻尼

WALE 模型的另一个替代方法是使用 Van Driest 阻尼²。湍流粘度 $\nu_t = \mu_t / \rho$ 可以看作是“混合长度”的平方除以时间尺度。例如，在 Smagorinsky 模型中，混合长度为 $\ell_{mix} = C_s \Delta$ ，时间尺度为应变速率不变式 $1/|S|$ 的倒数。因此，湍流运动粘度的单位是长度²/时间。

为了实现壁面附近雷诺应力的正确衰减，Van Driest[42]提出了以下修改方案：

$$\ell_{mix} = C_s \Delta \left[1 - e^{-y^+/A} \right] \quad (5.96)$$

其中 A 是一个无量纲经验常数，等于 26。括号中的项称为 Van Driest 阻尼函数。在 FDS 中，由于很难定义一个与 Deardorff 或动态 Smagorinsky 湍流模型相一致的测试滤波器，因此第一个离壁单元的湍流粘度是通过 Smagorinsky 模型得到的，并在混合长度上应用了 Van Driest 阻尼，如式(5.96)所示， $y^+ = (\delta y / 2) / \delta_\nu$ 和 $C_s = 0.2$ 。术语解释见第 5.4.1 节。因此，壁面附近的粘度为

$$\nu_t = \ell_{mix}^2 |S| \quad (5.97)$$

其中应变率 $|S|$ 在式(5.16)中定义。

5.4.5 开放边界（通用，风）

开放边界是指根据局部压力梯度允许流体进入或流出计算域的地方，如建筑物打开的门窗处。通常情况下，切向速度分量的梯度在开放边界处设为零。也就是说，切向速度分量的“幽灵单元”值等于其在第一个网格单元中的值。但是，如果用户指定了一个风场（ $u_\infty(z, t), v_\infty(z, t)$ ），那么在所有流入边界，速度切向分量都将设置为各自的远场值。在流出边界，采用标准的零梯度条件。

5.4.6 网格边界

在两个网格的接口处，速度的切线分量通过 MPI 交换直接从相邻网格获取。

5.5 时间步和稳定性约束

在显式方案中，稳定性标准通常可以理解为利用时间步长来维持物理上可实现的条件。下面我们将研究在存在平流、扩散以及速度场和标量场膨胀的情况下保持稳定的必要条件。

5.5.1 Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)约束条件

广为人知的 CFL 约束条件为

$$CFL = \delta t \frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} \approx 1 \quad (5.98)$$

由于平流速度的原因，时间步长受到限制。从物理角度看，该限制条件是流体元素在一个时间步长内的穿越单元不应超过一个。对于 LES 来说，这种限制还有一个好处，就是可以使隐式时间和空间滤波器保持一致。换句话说，为了解析大小为 δx 的涡，时间步长需要与 CFL 保持一致。如果采用隐式方案，时间步长比 CFL 限制大 10 倍，那么可解析的最小湍流运动将是网格间距的 10 倍，这将严重限制 LES 的优势。在大多数情况下，如果希望模拟运行得更快，更好的策略是在保持 $CFL \approx 1$ 的情况下粗化网格分辨率。

保持稳定所需的确切 CFL 取决于时间积分方案的阶次（以及其他属性）和速度规范的选择。

² Van Driest 阻尼是 FDS 第 6 版的默认壁面模型

FDS 中有三种速度标准可供选择（在 MISC 上设置）：

CFL_VELOCITY_NORM=0 （对应于速度矢量的 L_∞ 范数）

$$\frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} = \max\left(\frac{|u|}{\delta x}, \frac{|v|}{\delta y}, \frac{|w|}{\delta z}\right) + |\nabla \cdot \mathbf{u}| \quad (5.99)$$

CFL_VELOCITY_NORM=1 （DNS 和 LES 默认值，最严格，对应于速度矢量的 L_1 范数）

$$\frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} = \frac{|u|}{\delta x} + \frac{|v|}{\delta y} + \frac{|w|}{\delta z} + |\nabla \cdot \mathbf{u}| \quad (5.100)$$

CFL_VELOCITY_NORM=2 （VLES 默认值。对应于速度矢量的 L_2 范数）

$$\frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} = \sqrt{(u/\delta x)^2 + (v/\delta y)^2 + (w/\delta z)^2} + |\nabla \cdot \mathbf{u}| \quad (5.101)$$

CFL_VELOCITY_NORM=3 （SVLES 默认值，最严格。对应于速度矢量的 L_∞ 范数）

$$\frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} = \max\left(\frac{|u|}{\delta x}, \frac{|v|}{\delta y}, \frac{|w|}{\delta z}\right) \quad (5.102)$$

下文第 5.5.3 节将讨论将速度散度的大小添加到速度规范中的问题。请注意，CFL_VELOCITY_NORM=3 忽略了这一限制，因此只能用于不可压缩流。

5.5.2 Von Neumann 约束条件

Von Neumann 约束条件为

$$VN = \delta t \max[(\mu/\rho), D_\alpha] \sum_i \frac{1}{\delta x_i^2} < \frac{1}{2} \quad (5.103)$$

我们可以通过几种不同的方式来理解这种限制。首先，我们可以考虑物种 α 在方向 i 上的扩散速度模型： $V_{\alpha,i} Y_\alpha = -D_\alpha \partial Y_\alpha / \partial x_i$ ，然后我们就会发现，**VN 只是由于扩散传输而产生的 CFL 约束**。

我们也可以从总变差不增（TVD）约束的角度来理解 VN。也就是说，如果我们的标量场存在变化（曲率），我们就不希望产生虚假的踌躇，因为虚假的踌躇会导致平滑步长过大，从而导致不稳定。下面是一维 u 热方程的显式更新。这里的下标表示网格指数， ν 是扩散率。

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\delta t \nu}{\delta x^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \quad (5.104)$$

非常简单，注意如果 $\delta t \nu / \delta x^2 = 1/2$ ，则 $u_i^{n+1} = (u_{i-1}^n + u_{i+1}^n) / 2$ 。如果时间步长再大一些，我们就会超越连接相邻单元值的直线。当然，只有在 u 场“平滑”的情况下才能保证这一限制是 TVD，否则相邻单元值可能会向相反的方向移动。遗憾的是，在 LES 中并没有这样的保证，因此 VN 约束在产生不稳定性方面可能会特别致命。因此，一些实践者喜欢采用隐式方法来计算扩散项。

5.5.3 可实现的质量密度约束

在连续性方程的显式欧拉更新中，如果时间增量过大，计算单元的质量可能会被完全耗尽，这当然不是物理现象。因此，约束条件 $\rho^{n+1} > 0$ 导致了时间步长的如下限制：

$$\delta t < \frac{\rho^n}{\mathbf{u}^n \cdot \nabla \rho^n + \rho^n \nabla \cdot \mathbf{u}^n} \quad (5.105)$$

我们可以认为，我们最关心的情况是 ρ^n 接近于零。这样，(5.105) 的合理近似值就变成了（时间位置被抑制，对 i 求和是隐含的）

$$\delta t < \frac{\rho}{\bar{u}_i \left(\frac{\rho - 0}{\delta x_i} \right) + \rho \nabla \cdot \mathbf{u}} = \left[\frac{\bar{u}_i}{\delta x_i} + \nabla \cdot \mathbf{u} \right]^{-1} \quad (5.106)$$

等式 (5.106) 基本上是在 CFL 约束中加入了热膨胀的影响，并提供了首选 CFL_VELOCITY_NORM=1 作为时间步长限制基础的理由。

5.5.4 可实现的流体体约束

质量守恒告诉我们，质量为 ρV 的流体元素的时间变化率不会改变：

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = 0 \quad (5.107)$$

利用连续性，公式(5.107)重排为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \quad (5.108)$$

其中， $V(t)$ 是与时间相关的流体元的体积。如果 $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$ ，流体元被压缩。在火灾动力学中，这通常是由于冷却（例如通过辐射散失热量）造成的。公式(5.108)强调了速度散度作为单位体积流体体积膨胀率的物理解释。

公式(5.108)还意味着时间步长限制。考虑对公式(5.108)的流体体积进行显式更新：

$$V^{n+1} = V^n + \Delta t V^n (\nabla \cdot \mathbf{u})^n \quad (5.109)$$

如果流体元处于压缩状态（散度为负），则流体体积的正向性要求时间步长受以下限制

$$\Delta t < -(\nabla \cdot \mathbf{u})^{-1} \quad (5.110)$$

请注意，当散度为正值时，这与正质量密度约束类似，并为在下图所示的 CFL 约束最终版本中使用散度的绝对值 $|\nabla \cdot \mathbf{u}|$ 提供了理论依据。

5.5.5 传热约束

请注意，热通量 \dot{q}_c'' 的单位是 W/m^2 。因此，速度尺度可以由 $(\dot{q}_c''/\rho_w)^{1/3}$ 形成，其中 ρ_w 是壁面的气相密度。只要有速度尺度需要解决，就会出现 CFL 型稳定性限制。因此，传热稳定性检查会循环检查所有壁面单元，以确保 $\delta t < (\delta x / 2) / (\dot{q}_c''/\rho_w)^{1/3}$ 。该检查是一个选项。默认情况下不会进行。

5.5.6 调整时间步

默认情况下，CFL 的增减保持在 0.8 和 1 之间。为清楚起见，CFL 约束条件现在由以下公式给出

$$\text{CFL} = \delta t \frac{\|\mathbf{u}\|}{\delta x} \quad (5.111)$$

在 DNS 模式下，还需调整时间步长，以将 VN 保持在 0.4 和 0.5 之间。如果 CFL 或 VN 过大，则新的时间步长将设置为允许值的 90%。如果 CFL 和 VN 都低于最小值，则当前时间步长将增加 10%。详情请参见《用户指南》[3]。

6 燃烧（化学反应流）

燃烧模型决定了物种传输方程（公式(3.5)）中物种 α 在单位体积内的平均化学生产率 \dot{m}_α''' 。一般来说， \dot{m}_α''' 需要闭合模型，因为火焰厚度约为一毫米，而网格间距通常为几十厘米。本章介绍了一种能够处理各种混合条件和化学动力学的 \dot{m}_α''' 湍流批式反应器模型。在非预混合、快速化学极限（这在绝大多数 FDS 应用中都有效）下，反应器模型简化为简单的“混合即燃烧”近似，即涡流耗散概念（Eddy Dissipation Concept, EDC）[43][44]。

燃烧模型还确定了单位体积的热释放率 \dot{q}''' ，这是火灾物理学中一个非常重要的基本量，通常是对速度散度的最大贡献，公式(4.26)。一旦确定了 \dot{m}_α''' ，就可以通过将每种物质的质量产生率乘以各自的形成热量求和来得出热释放率。详情将在下文第 6.2.6 节讨论。

在讨论燃烧模型之前，我们首先讨论我们的**集总组分方法**（第 6.1 节），该方法通过将物种组合成一起传输和反应的组来减轻整个化学系统的计算负担。换句话说，我们减少了需要求解的传输方程数量，从而大大提高了计算速度。

在第 6.2 节中，我们将开始讨论我们的广义燃烧模型，该模型旨在处理快速和慢速化学反应以及一系列混合条件。对于火灾，这种方法有望改进对一氧化碳和烟尘的预测。每个计算单元都被视为具有特定混合时间的部分搅拌间歇式反应器。反应物混合后，可用的反应机制包括无限快速化学反应、阿伦尼乌斯速率定律和可逆反应。第 6.2.4 节介绍了我们的基本混合控制快速化学燃烧模型。第 6.3 节讨论了建立灭火模型的几种方案。

6.1 集总组分法

在典型的 FDS 问题中，原始物种被归入反应组，我们考虑的是简单反应



我们将公式(6.1)中的燃料、空气和产物称为总类。集合物种法是一种简化的反应进展变量法[45]，其中所有进展变量都是质量分数。这就避免了与有界性和定义不清的初始条件和边界条件有关的任何复杂问题。

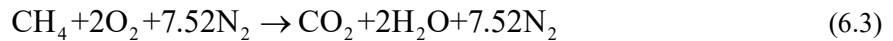
6.1.1 集总组分和原始组分的关系

在简单的碳氢化合物反应中，反应物是燃料、氧气和氮气，生成物是二氧化碳、水蒸气和氮气。对于甲烷，原始物质的质量分数由成分矢量给出

$$\mathbf{Y} = [Y_{\text{CH}_4} Y_{\text{O}_2} Y_{\text{N}_2} Y_{\text{CO}_2} Y_{\text{H}_2\text{O}}]^T \quad (6.2)$$

块状物种是指在水流中只以一定比例存在的原始物种群。例如，可以假定空气是由体积分数为 21% 的氧气和 79% 的二氧化氮以及微量的水蒸气和二氧化碳组成的集合物种。将原始物种归为一类的关键假设是，新物种群会一起迁移（**意味着扩散率相等**）和反应。

就原始物种而言，一步甲烷反应可写成



这等效于

$$9.52 \underbrace{(0.21\text{O}_2 + 0.79\text{N}_2)}_{\text{Air}, Z_1} + \underbrace{\text{CH}_4}_{\text{Fuel}, Z_2} \rightarrow 10.52 \underbrace{(0.095\text{CO}_2 + 0.19\text{H}_2\text{O} + 0.715\text{N}_2)}_{\text{Products}, Z_3} \quad (6.4)$$

其中 9.52 摩尔空气与 1 摩尔燃料反应生成 10.52 摩尔产物。请注意，原始物质已按体积分数归类为集合物种，集合物种的化学计量系数是公式(6.3)中原始物质系数的总和。注意 9.52×0.21 只近似等于 2。实际上，原子平衡需要机器精确计算。为了解决这个问题，FDS 在内部对集合物种体积分数进行归一化处理，并对指定的集合化学系数进行必要的调整。集合物种质量分数用 Z_i 表示， $i=1, \dots, N_Z$ ，其中 N_Z 是跟踪物种的数量。**第一个被跟踪的物种 Z_1 通常是背景物种 Air。**

从集合物种到原始物种的线性变换由以下公式给出

$$\mathbf{Y} = \mathbf{AZ} \quad (6.5)$$

其中 A 为变换矩阵（ N_y 行 \times N_z 列）。 A 的每一列代表不同的集合物种。 A 的元素是给定集合物种中每个原始物种的质量分数：

$$a_{\alpha i} = \frac{\nu_{\alpha i} W_{\alpha}}{\sum_{\beta} \nu_{\beta i} W_{\beta}} \quad (6.6)$$

其中， $\nu_{\alpha,i}$ 是原始物种 α 在总物种 i 中的体积分数， W_{α} 是分子量。如果我们想要公式(6.4)中的原始物种，例如，我们有 $\mathbf{Z} = [0.3 \ 0.2 \ 0.5]^T$ ，我们可以通过以下方法将集总物种转换为原始物种

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_{O_2} \\ Y_{N_2} \\ Y_{CH_4} \\ Y_{CO_2} \\ Y_{H_2O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2330 & 0 & 0 \\ 0.7670 & 0 & 0.7248 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1514 \\ 0 & 0 & 0.1238 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.2 \\ 0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.0699 \\ 0.5925 \\ 0.2000 \\ 0.0757 \\ 0.0619 \end{bmatrix} \quad (6.7)$$

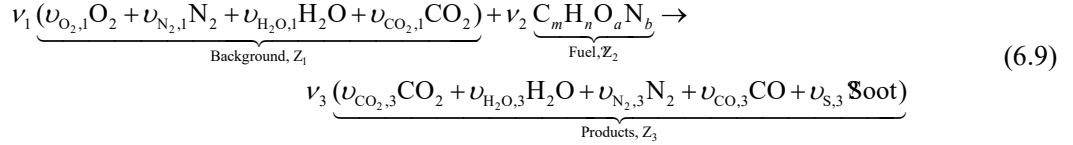
要从原始物种变回集合物种，我们可以使用

$$\mathbf{Z} = \mathbf{B}\mathbf{Y} \quad ; \quad \mathbf{B} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \quad (6.8)$$

前提是 A 具有满秩，且 \mathbf{Y} 是可实现的（即正向变换也是可能的）。

6.1.2 默认的碳氢燃烧化学

FDS 中的默认反应方程式被称为“简单化学方程式”，其定义如下：



这里，原始物种 α 在集合物种 i 中的体积分数用 $\nu_{\alpha,i}$ 表示，集合物种 i 的化学计量系数用 ν_i 表示。

一氧化碳和烟尘生成量默认为零。用户可以指定一氧化碳和烟尘产率（分别为 y_{CO} 和 y_S ）。一氧化碳产率和烟尘产率同样是指每反应一定质量的燃料所产生的一氧化碳质量：

$$y_{CO} = \frac{\text{mass CO in Products}}{\text{mass of Fuel reacted}} \quad (6.10)$$

在该反应系统中，空气（背景）为集合物种 1，燃料为集合物种 2，产物为集合物种 3。为了找出产物集总组分中 CO 和烟尘的化学计量系数，FDS 使用了

$$\nu_2 \nu_{CO,2} = -\nu_1 \frac{W_1}{W_{CO}} y_{CO} \quad (6.11)$$

$$\nu_2 \nu_{S,2} = -\nu_1 \frac{W_1}{W_S} y_S \quad (6.12)$$

其余系数来自原子平衡。

例子 考虑一个甲烷-空气反应，其中甲烷的指定 CO 产率为 $y_{CO}=0.1$ ，烟尘产率为 $y_S=0.01$ 。默认的 FDS 反应系统将这些物质归入“产物”。请注意，默认情况下空气主要由氧气和氮气组成，但也包括微量的二氧化碳和水蒸气。该反应的转化矩阵 A 为

	Air	Fuel	Products
CH ₄	0.000000	1.000000	0.000000
N ₂	0.762470	0.000000	0.719891

O ₂	0.230997	0.000000	0.000000
CO ₂	0.000591	0.000000	0.142935
CO	0.000000	0.000000	0.005584
H ₂ O	0.005941	0.000000	0.131032
C	0.000000	0.000000	0.000558

上表显示，加入一氧化碳和烟尘后，反应中的原始物质从 5 种增加到 7 种。然而，集合物种的数量仍为 3 种--“产物”的组成发生了变化，增加了两种物种。请注意，FDS 会在 CHID.out 文件中打印 A 矩阵，以便用户仔细检查反应体系。

6.2 湍流燃烧

模拟湍流中的化学反应在数学上具有挑战性，因为与反应相关的长度和时间尺度可能比模拟所能解决的空间和时间尺度低几个数量级。当燃料和氧化剂最初未混合（扩散火焰），且与混合相比反应动力学较快时，简单的涡流耗散概念（EDC）模型[43][44]就足够了。然而，对于更复杂的反应（如一氧化碳和烟尘的形成），反应和混合的时间尺度可能会重叠，因此我们需要一种更通用的方法。

为此，我们开发了一种简单的混合环境方法来关闭公式(3.5)中的平均化学源项 \dot{m}_a''' 。对于纯扩散火焰，我们的方法与 EDC 相似，但并不局限于扩散火焰。每个计算单元被视为一个湍流批量反应器。在一个时间步开始时，每个单元都有一个物种（反应物、产物、惰性物质）的初始浓度，这些物种存在一定程度的混合。一般来说，混合速率由湍流主导。混合时间 τ_{mix} 将在第 6.2.1 节中讨论。混合/反应演化方程及其数值解将在第 6.2.2 和 6.2.3 节中介绍。一旦混合，物种可根据指定的动力学参数发生反应——反应可能是无限快的（第 6.2.4 节），也可能受阿伦尼乌斯速率定律支配（第 6.2.5 节）。

6.2.1 反应时间尺度模型

在本节中，我们将根据流场的局部状态给出混合时间的表达式。我们在此提出的模型的基本思想是考虑扩散、亚网格尺度（SGS）平流和浮力加速这三个物理过程，并将这些过程中最快的过程（局部）作为控制流动的时间尺度[46]。

考虑 SGS 模型在 LES 滤波宽度（单元大小）变化时的行为非常重要。扩散、SGS 平流和浮力加速的混合时间随滤波宽度的变化而变化。参考图 6-1，让我们沿着横轴从左到右移动，粗黑线表示假设流动条件下的时间尺度模型。

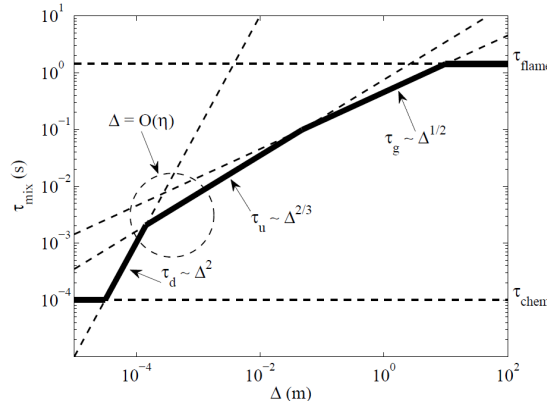


图 6-1 反应时间尺度模型

首先，请注意反应时间尺度必须大于或等于化学时间尺度 τ_{chem} ，其数量级为火焰厚度的穿越时间 $\tau_{chem} \sim \delta / s_L$ ，其中 $\delta = D_F / s_L$ ， D_F 为燃料的扩散率， s_L 为火焰速度。在稍大的范围内，我们预计混合时间会随着过滤器宽度的平方而变化，因为混合是由分子扩散控制的。在这种情况下（用 τ_d 表示），数值解为 DNS。当 Δ 小于 Kolmogorov 尺度 η （最小湍流涡旋的长度尺度）时，这一缩放规律有效（在本讨论中，我们假设施密特数 (Sc) 为一阶）。对于雷诺数足够高的流体（存在惯性

子范围)，当滤波器宽度增加到超过 Kolmogorov 尺度时，我们会遇到一个标为 τ_u 的状态，在该状态下，湍流平流控制着混合速度。在这里，混合时间的变化是滤波宽度的三分之二次幂[15]。这也是大多数 LES 子模型有效的状态（需要注意的是，火灾不同于湍流燃烧，局部高 Re 假设经常无效）。

现在，让我们想象一下，当滤波器宽度增加到超过惯性子范围，长度尺度大于火焰本身的高度（实际上在野火模型中是可能的）时，混合时间会发生什么变化。我们不会期望惯性范围的缩放一直持续到所谓的“energy containing”湍流长度尺度范围。相反，对于火灾，我们希望浮力加速度能在这些相对较粗的尺度上控制混合。基于恒定加速度的时间尺度为滤波宽度的平方根，如图中标有 τ_g 的区域所示。从图中的对数性质来看，缩放比例的这种变化似乎并不明显，但对于较大的单元尺寸来说，基于加速度的时间刻度的影响确实很大。最后要注意的是，火焰高度对反应时间标度（此处表示为 τ_{flame} ）有限制，因为所有燃料必须在单个单元内消耗完毕。

当然，物理过程的相对重要性取决于流量。例如，如果重力较弱， τ_g 线会上移，在达到火焰时间尺度之前可能不会影响反应时间。如果流动非常湍急，惯性范围缩放可能更占优势， τ_u 线的降低就表明了这一点。或者，对于高湍流喷射火焰， τ_{flame} 火焰可能在加速时间尺度产生任何影响之前就已达到。对于低应变火焰来说，如果不存在惯性子范围（如果雷诺数相对于弗劳德数过低），那么图 6-1 中的 τ_u 线就会向上移动，我们只能通过扩散和浮力来控制混合。

图 6-1 中的粗实线在数学上表示为

$$\tau_{mix} = \max(\tau_{chem}, \min(\tau_d, \tau_u, \tau_g, \tau_{flame})) \quad (6.13)$$

子模型的数学细节如下：

$$\tau_d = \frac{\Delta^2}{D_F} \quad (6.14)$$

$$\tau_u = \frac{C_u \Delta}{\sqrt{(2/3)k_{sgs}}} \quad (6.15)$$

$$\tau_g = \sqrt{2\Delta / g} \quad (6.16)$$

其中， D_F 是燃料种类的扩散率。请注意， k_{sgs} 是单位质量的非封闭子网格动能，默认取自湍流粘度模型（见第 5.2 节，公式(5.17)）。平流时间尺度常数是依据 Heskestad 火焰高度相关性[11]校准的，设定为 $C_u = 0.4$ 。加速度时间尺度 τ_g 是在恒定加速度 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 条件下从静止开始运动一段距离 Δ 所需的时间。

6.2.2 混合和反应的时间积分

将物种 α 的单元平均质量分数记为 $\tilde{Y}_\alpha(t)$ 。假设小室中的任何一小包气体都处于两种状态之一：完全未混合或完全混合。让 $\hat{Y}_\alpha(t)$ 表示混合反应区中物种 α 的质量分数，初始值等于单元平均值，即 $\hat{Y}_\alpha(0) = \tilde{Y}_\alpha^0 \equiv \tilde{Y}_\alpha(0)$ 。为方便起见，我们将 $\zeta(t)$ 定义为单元内的非混合质量分数。如附录 E 所示，未混合分数由以下简单的常微分方程（ODE）演变而来：

$$\frac{d\zeta}{dt} = -\frac{\zeta}{\tau_{mix}} \quad (6.17)$$

该 ODE 的解为

$$\zeta(t) = \zeta_0 e^{-t/\tau_{mix}} \quad (6.18)$$

初始条件 ζ_0 可以指定、代数建模或从被动标量传输方程的更新中获取。目前，FDS 默认设置 $\zeta_0 = 1$ ，这是湍流扩散火焰的一个适当假设。

在任何时间点，都可以通过合并未混合部分和混合部分来确定计算单元的组成：

$$\tilde{Y}_\alpha(t) = \zeta(t)\tilde{Y}_\alpha^0 + (1 - \zeta(t))\hat{Y}_\alpha(t) \quad (6.19)$$

利用(6.17)并对(6.19)进行时间微分，我们可以得出(3.5)所需的化学源项模型为

$$\dot{\tilde{m}}_\alpha''' = \rho \frac{d\tilde{Y}_\alpha}{dt} = \rho \left[\frac{\zeta}{\tau_{\text{mix}}} (\hat{Y}_\alpha - \tilde{Y}_\alpha^0) + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \right] \quad (6.20)$$

请注意，未混合部分与其他 EDC 配方中“反应精细结构”部分的补充部分相当[47][48]，但在我们的模型中，这部分是随时间变化的。附录 F 对我们的模型和 Panjwani 等人的模型[48]作了进一步比较。附录 E 给出了(6.19)和(6.20)的另一种推导，即 PDF 的输运方程矩。这一推导强调了隐式混合模型是均值交换相互作用或 IEM 模型[49]的变种，我们称之为混合均值交换相互作用或 IEMM。

与使用反应池平均质量分数 $\tilde{Y}_\alpha(t)$ 的演化方程(6.20)相比，使用混合反应区内质量分数 $\hat{Y}_\alpha(t)$ 的类似方程更为方便。这个等效演化方程的推导过程如下。假设网格单元内的总质量在一个时间步长内保持不变。混合反应器区内的成分通过两个过程发生变化：混合（质量从非混合区转移到混合区）和化学反应。我们用 ρV_c 表示该质量，其中 ρ 是初始单元质量密度， V_c 是单元体积。未混合质量表示为 $U(t)$ ，混合质量表示为 $M(t)$ 。根据(6.18)，以下方程描述了单元质量的演变：

$$\rho V_c = U(t) + M(t) \quad (6.21)$$

$$U(t) = \zeta(t) \rho V_c \quad (6.22)$$

$$M(t) = (1 - \zeta(t)) \rho V_c \quad (6.23)$$

在混合反应区内，让 $\hat{m}_\alpha(t)$ 表示物种 α 的质量。混合区中 α 的质量分数可写成

$$\hat{Y}_\alpha(t) \equiv \frac{\hat{m}_\alpha(t)}{M(t)} \quad (6.24)$$

这一浓度非常重要，因为阿伦尼乌斯速率定律仅以混合成分为基础。控制混合物种质量的 ODE 为

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{m}_\alpha}{dt} &= \hat{Y}_\alpha \frac{dM}{dt} + M \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \\ &= -\tilde{Y}_\alpha^0 \frac{dU}{dt} + M \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \\ &= \rho V_c \left[\frac{\zeta \tilde{Y}_\alpha^0}{\tau_{\text{mix}}} + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \right] \end{aligned} \quad (6.25)$$

RHS 上的第一个项表示混合。第二项表示化学动力学。请注意，在第二步中，我们利用了未混合成分在整个时间步长内保持恒定（初始单元平均值）这一事实。第三步由(6.17)、(6.22)和(6.23)得出。

6.2.3 通过时间分离的数值解法

本节将讨论(6.25)的数值解法。让 Δt^k 代表积分中的第 k 个子时间步长（小于或等于 LES 时间步长 δt ）；反应器积分开始时 $t^k=0$ 。积分的时间分离为先混合后反应。(6.25)在 t^k 至 $t^k + \Delta t^k$ 子时间间隔内的简单显式更新为

$$\hat{m}_\alpha^* = \hat{m}_\alpha(t^k) - \left[\zeta(t^k + \Delta t^k) - \zeta(t^k) \right] \tilde{Y}_\alpha^0 \rho V_c \quad (6.26)$$

$$\hat{Y}_\alpha^* = \hat{m}_\alpha^* / M^* \quad (6.27)$$

$$\hat{Y}_\alpha(t^k + \Delta t^k) = \hat{Y}_\alpha^* + \Delta \hat{Y}_\alpha^* \quad (6.28)$$

上标 * 表示混合后的值。第一步, (6.26)是混合步骤((6.25)中的第一项)的解析解, 通过(6.18)获得。(6.18)中所需的混合时间尺度 τ_{mix} 在每个 LES 时间步长中使用(6.13)计算一次, 并在反应器积分过程中保持不变。混合质量 $M^* = M(t^k + \Delta t^k)$, 在子区间结束时使用(6.23)进行评估。对于快速化学, 我们只取一个子步骤($\Delta t^{k+1} = \delta t$)。在时间积分结束时, 混合区成分 $\hat{Y}_\alpha(\delta t)$ 与未混合质量相结合, 得到最终的网格单元成分。

确定(6.28)中 $\Delta \hat{Y}_\alpha^*$ (化学反应导致的 α 质量分数变化)的方法取决于反应系统的复杂程度。在下一节中, 我们首先讨论最简单的无限快化学反应。然后讨论有限速率化学。

6.2.4 无限快化学反应

1. 单个反应

对于单一反应, 燃料的变化基于限制反应物[44]:

$$\Delta \hat{Y}_F = -\min\left(\hat{Y}_F, \hat{Y}_\alpha \frac{\nu_F W_F}{\nu_\alpha W_\alpha}\right); \quad \text{对所有反应物, } \alpha \quad (6.29)$$

在公式(6.29)中取最小值, 以确保反应物种类的质量分数仍可实现。

绝大多数大规模火灾应用都采用了这种方法——所谓的“混合燃烧”假设, 即使用 Magnussen 和 Hjertager 的涡流耗散概念 (EDC) 对燃料的平均化学源项 \dot{m}_F 进行建模[43][44]:

$$\dot{m}_F''' = -\rho \frac{\min(Y_F, Y_A / s)}{\tau_{mix}} \quad (6.30)$$

这里, Y_F 和 Y_A 分别是燃料和空气的单元平均质量分数, s 是空气的质量计量系数。

2. 多个反应

对于具有无限快化学反应的多重反应, 反应速率被视为活化能为零的二阶阿伦尼乌斯反应(假设有两个反应物)。阿伦尼乌斯常数设为较大值。附录 D 进一步讨论了这些情况下的时间积分。

6.2.5 有限速率化学反应 (Arrhenius 反应)

考虑一个简单的一步正向反应:



混合区浓度为 C_A (mol/cm^3)、速率常数为 k 的物种 A 的速率表达式为

$$\frac{dC_A}{dt} = -k C_A^a C_B^b \quad (6.32)$$

考虑一组含有燃料 F 的 N_r 个反应。 F 在第 i 个反应中的反应速率 ($\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{s})$) 为

$$r_{F,i} = -k_i \prod C_\alpha^{a_{\alpha,i}} \quad (6.33)$$

对于第 i 个阿伦尼乌斯反应, 速率常数 k_i 取决于温度 T 、温度指数 n_i 、指前因子 A_i 和活化能 E_i :

$$k_i = A_i T^{n_i} e^{-E_{a,i}/RT} \quad (6.34)$$

请注意, E_a 的单位是 J/mol , A 的单位是 $((\text{mol}/\text{cm}^3)^{1-\sum a_\alpha})/\text{s}$ 。请注意, $\sum a_\alpha$ 是反应的阶次。 A 的单位采用适当的形式, 以确保公式(6.33)的单位是 $\text{mol}/(\text{cm}^3 \text{s})$ 。

第 i 个反应中物种 α 反应速率基于化学计量系数之比:

$$r_{\alpha,i} = \left(\frac{\nu_{\alpha,i}}{\nu_{F,i}} \right) r_{F,i} \quad (6.35)$$

因此，混合反应器区域内物种 α 的浓度变化为

$$\frac{dC_{\alpha}}{dt} = \sum_i r_{\alpha,i} \quad (6.36)$$

FDS 只传输集合物种，且只能消耗或创建集合物种。但请注意，任何原始物种都可以参与反应速率规律。

对于 FDS 来说，用质量分数 Y_{α} 表示更为方便。浓度 ($\text{mol}-\alpha / \text{cm}^3$) 和质量分数 ($\text{kg}-\alpha / \text{kg}$) 的关系为 $C_{\alpha} = Y_{\alpha} \rho / (W_{\alpha} \times 1000)$ ，其中密度 ρ 的单位为 kg/m^3 。为简化 FDS 中的计算，密度和分子量从式(6.33)右侧的产物浓度中提取，并与其他常数合并成 A' ：

$$A'_i = A_i \left(\prod [W_{\alpha} \times 1000]^{-a_{\alpha,i}} \right) \times \left(\frac{1 \text{ kmol}}{10^3 \text{ mol}} \right) \times \left(\frac{10^6 \text{ cm}^3}{1 \text{ m}^3} \right) \times W_F \quad (6.37)$$

利用 A'_i ，以质量单位表示的反应速率变为

$$r'_{F,i} = -A'_i \rho^{\sum \alpha_{\alpha,i}} T^{n_i} e^{-E_i/RT} \prod Y_{\alpha}^{a_{\alpha,i}} \quad [=] \quad \left(\frac{\text{kgF}}{\text{m}^3 \text{ s}} \right) \quad (6.38)$$

物种 α 在第 i 个反应中单位体积的反应质量速率为

$$r'_{\alpha,i} = \left(\frac{\nu_{\alpha,i} W_{\alpha}}{\nu_{F,i} W_F} \right) r'_{F,i} \quad [=] \quad \left(\frac{\text{kg}\alpha}{\text{m}^3 \text{ s}} \right) \quad (6.39)$$

最后，混合反应器区中物种 α 的成分变化率变为

$$\frac{d\hat{Y}_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} \sum_i r'_{\alpha,i} \quad [=] \quad \left(\frac{\text{kg}\alpha}{\text{kg s}} \right) \quad (6.40)$$

有关为确保物种保持边界而使用的算法的讨论，请参见附录 D。

1. 第三体反应

在低压条件下，通常会出现所谓的第三体反应。这些反应需要其他分子 M 的存在来散热[50]。反应方案通常写为



阿伦尼乌斯速率定律对 M 的浓度具有一阶依赖性。由于 M 可以是任何其他分子，我们取 $C_M = \bar{p} / (RT) = \rho / (\bar{W} \times 1000) [=] \text{mol}/\text{cm}^3$ 。某些分子作为碰撞物种的效率可能更高，也可能更低。可以在输入文件中指定这种非统一效应。如果存在非统一物种，则 M 的浓度取为所有单个物种浓度乘以其权重因子的总和（如果所有物种的权重因子均为 1，则结果为 C_M ）。

2. 平衡化学

考虑下述可逆化学反应



在平衡状态下，正向和逆向反应速率相等，即 $r_1 = r_2$ 。每个方向的速率常数为式(6.32)中的 k_s 。平衡常数定义为 $K \equiv k_1 / k_2$ 。平衡常数的计算公式为

$$K(T) = C_M^{\nu_n} \exp(-\Delta G_{\text{rxn}}^{\circ}(T) / (RT)) \quad (6.43)$$

其中， ν_n 是净反应顺序（阶数？）（对于公式(6.42）， $\nu_n = a + b - c - d$ ）和

$$G_{\text{rxn}}^{\circ} = dG_D^{\circ} + cG_C^{\circ} - bG_B^{\circ} - aG_A^{\circ} \quad (6.44)$$

请注意，吉布斯自由能与温度的函数关系是为任何使用 NASA 多项式的 FDS 数据库定义的。

可以为用户定义的物种指定吉布斯自由能。

3. 有限速率化学的时间积分

对于单步混合控制化学反应以外的反应，则使用带误差控制的四阶显式积分器。时间积分遵循公式(6.26)和(6.28)中概述的程序，但通常需要多次子迭代。混合反应区子区间内的成分变化 $\Delta \hat{Y}_\alpha^*$ 通常是通过阿伦尼乌斯速率定律积分得到的（之所以说“通常”，是因为可以结合快速和有限速率化学）。关于积分器数值方法的更多细节，包括应对僵化化学反应的方法，请参见附录 D。

6.2.6 热释放率

在 LES/DNS 时间步长 δt 结束时，利用每个 N_r 反应的燃料浓度变化，计算出混合反应器区域中物种 α 的质量分数：

$$\hat{Y}_\alpha(\delta t) = \tilde{Y}_\alpha^0 + \sum_{i=1}^{N_r} \left(\frac{\nu_{\alpha,i} W_\alpha}{\nu_{F,i} W_{F,i}} \right) \Delta \hat{Y}_{F,i} \quad (6.45)$$

在时间步结束时，计算式(6.19)即可得出新的单元平均质量分数：

$$\tilde{Y}_\alpha(\delta t) = \zeta(\delta t) \tilde{Y}_\alpha^0 + (1 - \zeta(\delta t)) \hat{Y}_\alpha(\delta t) \quad (6.46)$$

单位体积释放的热量定义为 $\dot{q}''' \equiv -\sum_\alpha \dot{m}_\alpha''' \Delta h_{f,\alpha}^0$ ，然后将物种的质量产生率乘以各自的形成热量求和得出：

$$\dot{q}''' = -\rho \sum_\alpha \frac{(\tilde{Y}_\alpha(\delta t) - \tilde{Y}_\alpha^0)}{\delta t} \Delta h_{f,\alpha}^0 \quad (6.47)$$

6.3 灭火

上述默认混合控制反应模型的局限性在于，它假定燃料和氧气始终在发生反应，而与本地温度、反应物浓度或应变速率无关。对于大规模、通风良好的火灾，这种近似值通常就足够了。但是，如果火灾发生在通风不良的隔间内，或者引入了水雾或二氧化碳等灭火剂，或者燃料流和氧化流之间的应变较高，则可能不会发生燃烧。

FDS 使用简单的经验规则（忽略应变），根据已解析的物种浓度和单元平均温度预测给定网格单元内的局部熄灭。预测熄灭有两种方法，均基于临界火焰温度的概念。贝勒在《SFPE 手册》[51] 中描述了临界火焰温度背后的基本理论，尽管他从未明确使用过这一术语。事实上，《手册》中只提到过几次临界火焰温度，而且每次的解释都略有不同。

6.3.1 临界火焰温度

浸没在虚弱气氛中的扩散火焰会在消耗完所有可用氧气之前熄灭。这种行为的典型例子就是在一个倒置的罐子中燃烧的蜡烛。考虑到这一情况，请考虑一个控制体积，其特征是体积温度 T 、质量 m 和氧气质量分数 Y_{O_2} 。控制体积内的氧气完全燃烧会释放出一定量的能量，其值为

$$Q = m Y_{O_2} \left(\frac{\Delta H}{r_{O_2}} \right) \quad (6.48)$$

其中， $\Delta H / r_{O_2}$ 对于火灾应用中的大多数燃料而言，具有一个相对恒定的值，约为 13100 kJ/kg[52]。在绝热条件下，可用氧气和相应的化学计量燃料反应释放的能量会将气体的体积温度升高到 T_f ：

$$Q = m \bar{c}_p (T_f - T) \quad (6.49)$$

根据燃烧产物的成分，可以计算出气体的平均比热：

$$\overline{c_p} = \frac{1}{(T_f - T)} \sum_a \int_T^{T_f} Y_a c_{p,a}(T') dT' \quad (6.50)$$

将式(6.48)和(6.49)相等，即可得出

$$Y_{O_2} = \frac{\overline{c_p}(T_f - T)}{\Delta H / r_{O_2}} \quad (6.51)$$

临界火焰温度（CFT）在 FDS 中的解释是基于极限氧指数（LOI），即火焰熄灭时氧化剂流中氧的体积分数。使用公式(6.51)可以得出在 LOI 处与燃料和氧气的化学计量混合物相对应的绝热火焰温度：

$$T_{OI} = T_\infty + Y_{OI} \left(\frac{\Delta H / r_{O_2}}{\overline{c_p}} \right) ; \quad Y_{OI} = \frac{X_{OI} W_{O_2}}{X_{OI} W_{O_2} + (1 - X_{OI}) W_{N_2}} \quad (6.52)$$

贝勒的《SFPE 手册》[51] 章节中包含了几种常见燃料的 X_{OI} 和 T_{OI} 。对于其他燃料，则使用默认值。这些值在 FDS 用户指南[3]中给出。

6.3.2 灭火主要基于氧气浓度

两个可选消光模型中的第一个模型（在 FDS 输入文件中称为“EXTINCTION 1”）将公式(6.51)线性化，形成极限氧浓度¹³，该浓度是单元体积温度 T_{ijk} 的分段线性函数（见图 6-2）：

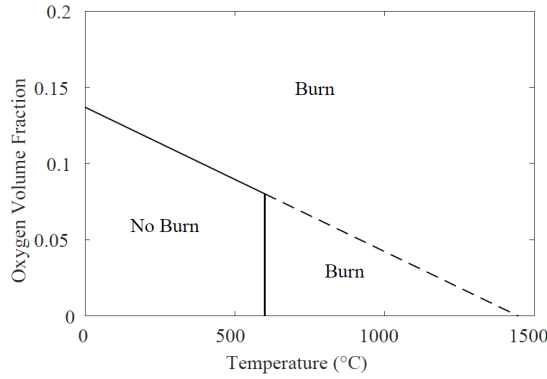


图 6-2 EXTINCTION 1 模式的灭火标准

$$X_{O_2,lim}(T_{ijk}) = \begin{cases} X_{OI} \left(\frac{T_{OI} - T_{ijk}}{T_{OI} - T_\infty} \right) & T_{ijk} < T_{fb} \\ 0 & T_{ijk} \geq T_{fb} \end{cases} \quad (6.53)$$

如果 $X_{O_2,ijk} < X_{O_2,lim}$ ，则假定该网格单元在该时间步的局部消光， $\dot{m}_\alpha''' = 0$ ， $\dot{q}''' = 0$ 。环境温度为 20 °C 时，默认极限氧体积分数为 0.135。这一数值与 Morechart 等人[53]的测量结果一致，他们测量了自熄火焰附近的氧气浓度。他们发现火焰在氧气体积分数为 12.4% 到 14.3% 时会自熄。请注意，他们的结果是以体积分数而非质量分数表示的。贝勒在《SFPE 手册》的章节中提到了其他研究人员的研究结果，他们测量的氧气浓度在 12 % 到 15 % 之间。

EXTINCTION 1 "模型适用于相对粗糙的火灾模拟，在这种模拟中，网格单元无法解析火焰结构的细节或捕捉火焰温度。公式(6.53)中的“自由燃烧”温度 T_{fb} 适用于特征网格单元尺寸 δt 远大于 1 厘米的模拟。在这种情况下，燃烧发生在网格单元的一小部分内，其能量无法将单元体温度提高到临界值。其默认值为 600 °C。Pitts [54]、Bundy[55]等人的测量结果表明，在闪燃隔间火灾

¹³ 灭火模型是以氧气体积分数 X_{O_2} 来表示的，因为实验结果通常是这样报告的。不过，在数值算法中，所有数值都转换成了质量分数 Y_{O_2} 。

实验中，当温度升高到大约 600 °C 以上时，上层氧气浓度会降至零。

6.3.3 基于燃料和氧气的灭火

FDS 中的第二个可选熄灭模型被称为 “EXTINCTION2”，它同时考虑时间步开始时给定网格单元中的氧气和燃料含量。如果反应物释放的潜在热量不能使单元的温度超过根据经验确定的临界火焰温度 (T_{CFT})，燃烧就会被抑制。考虑简单反应 “Fuel+Air \rightarrow Products”。在时间步长的反应部分开始和结束时，网格单元混合部分的燃料、空气和产物的质量分数分别为 $[Z_F^0, Z_A^0, Z_P^0]$ 和 $[Z_F, Z_A, Z_P]$ 。产物包括燃烧产物以及氩气或液滴蒸发产生的水蒸气等稀释剂。定义等效比的修正形式：

$$\tilde{\phi} \equiv \min \left(1, \frac{sZ_F^0}{Z_A^0} \right) = \frac{Z_A^0 - Z_A}{Z_A^0} \quad (6.54)$$

其中， s 是空气的质量计量系数（每消耗一定质量的燃料所需的空气质量）。熄灭标准假定过量的燃料会起到稀释剂的作用，而过量的空气和一定比例的产物则不会。因此，大部分为空气、少量为燃料的大型计算单元可能会燃烧，而大部分为燃料、少量为空气的计算单元则不会燃烧。为此，在计算焓值时，我们去掉了网格单元总质量的一部分，相当于 $(1-\tilde{\phi})(Z_A^0 + Z_P^0)$ 。去掉这一质量后，灭火标准为

$$Z_F^0 h_F(T) + \tilde{\phi} Z_A^0 h_A(T) + \tilde{\phi} Z_P^0 h_P(T) < Z_F h_F(T_{CFT}) + [Z_P - (1-\tilde{\phi})Z_P^0] h_P(T_{CFT}) \quad (6.55)$$

其中， T 是反应前的平均单元温度， T_{CFT} 是临界火焰温度。请注意， $h_\alpha(T)$ 代表化学焓和显焓；因此，左侧包括燃烧释放的热量。如果不等式(6.55)成立，则燃烧被抑制--燃烧释放的热量不足以使生成物混合物升至临界火焰温度以上。请注意，不等式的右边不包含空气，因为所有多余的空气都已被排除在外。换句话说，对于一个无限快的反应， $Z_A - (1-\tilde{\phi})Z_A^0 \equiv 0$ 。

该熄灭模型可用于多种反应方案。临界火焰温度标准适用于整个反应。换句话说，允许发生单个反应，并将焓不等式(6.55) 应用于初始和最终物种质量分数。如果释放的能量不足，所有反应将被抑制，物种质量分数将恢复到时间步开始时的原始值。

如果模拟中存在多种燃料，则临界火焰温度取为时间步开始时网格单元内可能存在的多种燃料 CFT 的加权平均值。

6.3.4 自动点火温度

为方便用户使用，FDS 的设计不需要创建点火源来启动燃烧——燃料和空气接触后燃烧，直到燃烧变得不可行（如上所述）。然而，在某些火灾情况下，这一假设会导致燃料气体在缺氧隔间的边界处发生虚假燃烧。为了防止这种情况，可以通过自动点火温度来关闭先导点火假设。如果单元温度低于用户指定的单元中所有燃料的自动点火温度 (AIT)，则燃烧将被抑制。默认情况下，每种燃料的自动点火温度为零；因此，在使用默认燃烧模型时，用户无需指定点火源，因为燃料和氧气一接触就会燃烧。

7 热辐射

气相热传导和辐射由能量方程 $\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}''$ 中热通量矢量的散度表示。本章将介绍辐射分量 $\dot{\mathbf{q}}_r''$ 的计算公式。

7.1 辐射输运方程

吸收、发射和散射介质的辐射传输方程（RTE）为[56]

$$\begin{aligned} \mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = & \underbrace{-\kappa(\mathbf{x}, \lambda) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})}_{\text{Energy loss by absorption}} - \underbrace{\sigma_s(\mathbf{x}, \lambda) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})}_{\text{Energy loss by scattering}} \\ & + \underbrace{B(\mathbf{x}, \lambda)}_{\text{Emission source term}} + \underbrace{\frac{\sigma_s(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}'}_{\text{In-scattering term}} \end{aligned} \quad (7.1)$$

其中， $I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ 是波长 λ 处的辐射强度； \mathbf{s} 是强度的方向向量； $\kappa(\mathbf{x}, \lambda)$ 和 $\sigma_s(\mathbf{x}, \lambda)$ 分别是本地吸收系数和散射系数。 $B(\mathbf{x}, \lambda)$ 是发射源项，描述了由气体、烟尘和液滴/颗粒组成的局部混合物所发射的热量。右侧的积分描述了来自其他方向的内散射。内散射和散射项详见第 7.3 节。

在实际模拟中，RTE 的光谱依赖性无法准确解决。取而代之的是，将辐射光谱划分为相对较少的波段，并为每个波段单独推导 RTE。例如，非散射气体的特定波段 RTE 为

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = B_n(\mathbf{x}) - \kappa_n(\mathbf{x}) I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}), n = 1 \dots N \quad (7.2)$$

其中， I_n 是频带 n 的积分强度， κ_n 是该频带的适当平均吸收系数。当已知各波段对应的强度时，可通过对所有波段求和来计算总强度

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \sum_{n=1}^N I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \quad (7.3)$$

7.1.1 辐射源项

辐射波段 n 的发射源项为

$$B_n(\mathbf{x}) = \kappa_n(\mathbf{x}) I_{b,n}(\mathbf{x}) \quad (7.4)$$

其中， $I_{b,n}$ 是温度 $T(\mathbf{x})$ 时的黑体辐射量：

$$I_{b,n}(\mathbf{x}) = F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max}) \sigma T(\mathbf{x})^4 / \pi \quad (7.5)$$

和 σ 是斯蒂芬-玻尔兹曼常数。参考文献[57]解释了因子 F_n 的计算方法。附录 C 讨论了吸收系数 κ_n 的计算。

即使波段数量较少，求解多个 RTE 也非常耗时。幸运的是，在大多数大规模火灾场景中，烟尘是控制火灾热辐射和热烟雾的最重要燃烧产物。由于烟尘的辐射光谱是连续的，因此可以假设气体表现为灰色介质。然后将光谱依赖性归结为一个吸收系数 ($N=1$)，源项由黑体辐射强度给出[58]。

$$I_b(\mathbf{x}) = \frac{\sigma T(\mathbf{x})^4}{\pi} \quad (7.6)$$

这是 FDS 的默认模式。然而，对于光学稀薄的火焰，由于烟尘的产量比二氧化碳和水蒸气的产量小，灰气假设可能会导致对发射辐射的过度预测。从一系列使用甲烷作为燃料的数值实验中发现，六个波段 ($N=6$) 可以准确表示燃料、二氧化碳和水蒸气最重要的辐射波段[59]。表 7-1 至表 7-9 列出了各种燃料的辐射带限制。这些波段的位置已经过调整，以适应燃料光谱的大部分特征。如果已知燃料的吸收很重要，可以为燃料保留单独的波段，增加波段总数 N 。附加波段的数量取决于燃料，详见附录 C。

7.1.2 辐射对能量方程的贡献

辐射热通量矢量 $\dot{\mathbf{q}}_r''$ 的定义是

$$\dot{\mathbf{q}}_r''(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \mathbf{s} d\Omega \quad (7.7)$$

电能辐射与气体分子和烟尘粒子之间的相互作用通过源项作用于气相能量方程，在灰色气体假设条件下，源项可写为

$$-\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r''(\mathbf{x})(\text{gas}) = \kappa(\mathbf{x})[U(\mathbf{x}) - 4\pi I_b(\mathbf{x})] \quad ; \quad U(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\Omega \quad (7.8)$$

然后，这个项作为气相损失项出现在辐射传输方程中。对于 N 波段，能量方程中辐射源项的贡献为

$$-\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r''(\mathbf{x})(\text{gas}) = \sum_{n=1}^N \kappa(\mathbf{x}) U_n(\mathbf{x}) - 4\pi B_n(\mathbf{x}) \quad ; \quad U_n(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\Omega \quad (7.9)$$

换句话说，网格单元从辐射场中获得的净热能是吸收的热能与释放的热能之差。

表 7-1 甲烷光谱带的界限 (CH₄)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3400	2400	2174	1000	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ , H ₂ O	CO ₂ H ₂ O, Soot	CH ₄ Soot	CO ₂ Soot	H ₂ O, CH ₄ Soot	H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	2.94	4.17	4.70	10.0	200

表 7-2 乙烷光谱带的界限 (C₂H₆)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3350	2550	1650	1090	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ , H ₂ O	CO ₂ H ₂ O, Soot	C ₂ H ₆ Soot	CO ₂ CO, H ₂ O, Soot	C ₂ H ₆ H ₂ O, Soot	H ₂ O CO ₂ , C ₂ H ₆	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	2.99	3.92	6.06	9.17	200

表 7-3 乙烯光谱带的界限 (C₂H₄)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3375	2800	1650	780	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ , H ₂ O	CO ₂ H ₂ O, Soot	C ₂ H ₄ Soot	CO ₂ CO, H ₂ O, Soot	C ₂ H ₄ H ₂ O, Soot	H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	2.96	3.57	6.06	12.82	200

表 7-4 丙烯光谱带的界限 (C₃H₆)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3250	2600	1950	1175	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ , H ₂ O	CO ₂ H ₂ O, Soot	C ₃ H ₆ Soot	CO ₂ CO, Soot	C ₃ H ₆ H ₂ O, Soot	C ₃ H ₆ , H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	3.08	3.85	5.13	8.51	200

表 7-5 丙烷光谱带的界限 (C₃H₈)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3350	2550	1650	1175	50
----------------	-------	------	------	------	------	------	----

6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ ,H ₂ O	CO ₂ H ₂ O,Soot	C ₃ H ₈ Soot	CO ₂ CO,H ₂ O,Soot	C ₃ H ₈ H ₂ O,Soot	H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	2.99	3.92	6.06	8.51	200

表 7-6 庚烷光谱带的界限 (C₇H₁₆)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3250	2550	1775	1100	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ ,H ₂ O	CO ₂ H ₂ O,Soot	C ₇ H ₁₆ Soot	CO ₂ CO,Soot	C ₇ H ₁₆ H ₂ O,Soot	H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	3.08	3.92	5.63	9.09	200

表 7-7 甲苯光谱带的界限 (C₇H₈)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3200	2550	2050	1200	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ ,H ₂ O	CO ₂ H ₂ O,Soot	C ₇ H ₈ Soot	CO ₂ H ₂ O,Soot	C ₇ H ₈ H ₂ O,Soot	C ₇ H ₈ ,H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	3.12	3.92	4.88	8.33	200

表 7-8 乙醇光谱带的界限 (CH₃OH)

$\omega(1/cm)$	10000	3825	3200	2600	1675	1125	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ ,H ₂ O	CH ₃ OH H ₂ O,Soot	CH ₃ OH Soot	CO ₂ CO,Soot	CH ₃ OH H ₂ O,Soot	CH ₃ OH,H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.61	3.12	3.85	5.97	8.89	200

表 7-9 甲基丙烯酸酯光谱带的界限 (MMA)

$\omega(1/cm)$	10000	3800	3250	2650	2050	1250	50
6 Band Model	1	2	3	4	5	6	
主要物质	Soot CO ₂ ,H ₂ O	CO ₂ H ₂ O,Soot	MMA Soot	CO ₂ CO,Soot	MMA H ₂ O,Soot	MMA,H ₂ O CO ₂	
$\lambda(\mu m)$	1.00	2.63	3.08	3.77	4.88	8.00	200

7.1.3 修正发射源项

在有限空间分辨率的计算中,公式(7.6)中定义的源项 I_b 需要在火焰区域进行特殊处理。典型的 FDS 计算使用的网格单元只有几十厘米大小,因此计算出的温度是给定网格单元的整体平均值,大大低于扩散火焰的最高温度。由于源项与温度的四次方关系,因此必须在发生燃烧的网格单元中建立源项模型。在其他地方,计算温度直接用于计算源项。假定这个“燃烧区域”是局部名义辐射损失大于指定下限 $\chi_r \dot{q}''' > 10 \text{ kW/m}^3$ 的地方。在这一区域,使用了全球辐射分量模型。发射源项乘以校正因子 C :

$$I_{b,f}(\mathbf{x}) = C \frac{\sigma T(\mathbf{x})^4}{\pi} ; \quad C = \min \left(100, \max \left[1, \frac{\sum_{\chi_r \dot{q}''' > 10} (\chi_r \dot{q}''' + \kappa_{ijk} U_{ijk}) V_{ijk}}{\sum_{\chi_r \dot{q}''' > 10} (4\kappa_{ijk} \sigma T_{ijk}^4) V_{ijk}} \right] \right) \quad (7.10)$$

将式(7.10)中定义的源项代入式(7.8)，火焰区域的净辐射辐射量将成为总热释放率的理想部分。请注意，该修正系数的下限为 1，上限为 100。上限是任意设定的，目的是防止模拟开始时出现虚假行为。

辐射分数 χ_r 是火灾科学中的一个有用量。它是以热辐射形式发射的燃烧能量的标称分数。对于大多数可燃物， χ_r 在 0.3 和 0.4 之间[60]。不过，在公式(7.10)中， χ_r 被解释为从火焰区域辐射的能量部分。对于基底直径小于约 1 米的小型火灾，局部的 χ_r 与全局的 χ_r 大致相等。然而，随着火势的增大，由于不断增加的烟幔对热辐射的净再吸收，全局值通常会降低[61]。

为了考虑到不同燃料可能具有不同的辐射分数值， χ_r 是按反应定义的，类似于 Gupta 等人讨论的方法[62]。如果给出了多个 χ_r 值，FDS 将根据当地反应速率对特定反应的 χ_r 值进行加权，生成当地的 χ_r 值。

7.2 数值方法

本节将介绍如何计算所有气相单元的 $\nabla \cdot \mathbf{q}''$ （辐射损失项），以及如何计算固体边界的辐射热通量 \dot{q}_r'' 。

7.2.1 角度离散化

为获得 RTE 的离散形式，单位球体被划分为有限个实体角。用于离散化实体角的坐标系如图 7-1 所示。实角离散化首先是将极角 θ 分成 N_θ 带，其中 N_θ 为偶数整数。然后将每个 θ 波段沿方位角 (ϕ) 方向分成 $N_\phi(\theta)$ 部分。 $N_\phi(\theta)$ 必须能被 4 整除。选择 N_θ 和 $N_\phi(\theta)$ 的目的是使角度总数 N_Ω 尽可能接近用户定义的值。 N_Ω 的计算公式为

$$N_\Omega = \sum_{i=1}^{N_\theta} N_\phi(\theta_i) \quad (7.11)$$

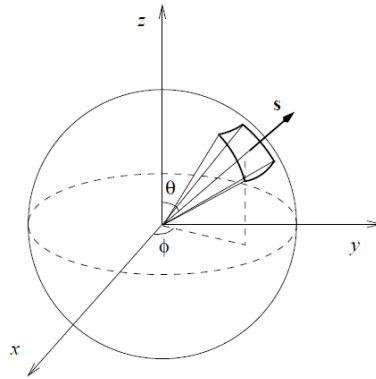


图 7-1 角度离散化坐标系

角度的分布基于经验规则，即尽量产生相等的实心角 $\delta\Omega^l = 4\pi / N_\Omega$ 。

θ 带的数量为

$$N_\theta = 1.17 N_\Omega^{1/2.26} \quad (7.12)$$

四舍五入为最接近的偶数整数。每个波段上 ϕ 角的个数为

$$N_\phi(\theta) = \max \left\{ 4, 0.5 N_\Omega \left[\cos(\theta^-) - \cos(\theta^+) \right] \right\} \quad (7.13)$$

θ^+ 和 θ^- 分别是 θ 波段的下限和上限。离散化相对于 $x=0$ 、 $y=0$ 和 $z=0$ 平面是对称的。这种对称性有三个重要好处：首先，它避免了用于计算单元边界强度的一阶上风方案在非轴向比在轴向更具扩散性这一事实所带来的问题。其次，镜面边界的处理变得非常简单，这将在后面的章节

中说明。第三，它避免了所谓的“悬垂”情况，即 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{i}$ 、 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}$ 或 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{k}$ 在控制角内改变符号。这些“悬垂”会使线性方程组变得更加复杂。

在轴对称情况下，这些“悬垂”无法避免，因此采用了 Murthy 和 Mathur[63]提出的特殊处理方法。在这种情况下， $N_\phi(\theta_i)$ 保持不变，角度总数为 $N_\Omega = N_\theta \times N_\phi$ 。此外，圆柱体垂直切面的角度选择与 $\delta\phi$ 相同。

7.2.2 空间离散

RTE 求解器使用的网格与流体力学求解器相同。辐射输运方程(7.2)的求解技术与流体流动有限体积法中的对流输运技术类似[64]，因此被称为有限体积法(FVM)。模型实现的更多细节见参考文献[65]。

如第 7.1 节所述，首先将热辐射光谱划分为不同的波段。下面概述的程序适用于宽频带模型的每个频带，因此为了清晰起见，去掉了下标 n 。然后按照第 7.2.1 节所述对单位球面进行离散化。最后，按照第 3.2 节所述，将计算域划分为数值网格。在每个网格单元中，通过对单元 ijk 的体积和控制角 $\delta\Omega^l$ 对公式(7.2)进行积分，得到离散方程

$$\int_{\delta\Omega^l} \int_{V_{ijk}} \mathbf{s} \cdot \nabla I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) dV d\Omega = \int_{\delta\Omega^l} \int_{V_{ijk}} \kappa(\mathbf{x}) [I_b(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}, \mathbf{s})] dV d\Omega \quad (7.14)$$

利用散度定理，将左侧的体积积分替换为单元面上的表面积分。

$$\int_{\delta\Omega^l} \int_{A_{ijk}} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}) I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) dA d\Omega = \int_{\delta\Omega^l} \int_{V_{ijk}} \kappa(\mathbf{x}) [I_b(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}, \mathbf{s})] dV d\Omega \quad (7.15)$$

假设每个单元面上的辐射强度 $I(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ 都是恒定的，那么表面积分可以用单元面上的总和来近似表示。进一步假设 $I(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ 在体积 V_{ijk} 内和角度 $\delta\Omega^l$ 上恒定，并且 $\kappa(\mathbf{x}')$ 和 $I_b(\mathbf{x}')$ 在体积 V_{ijk} 内恒定，我们得到

$$\sum_{m=1}^6 A_m I_m^l \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_m) d\Omega = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.16)$$

其中，

I_{ijk}^l	l 方向的辐射强度
I_m^l	单元面 m 的辐射强度
$I_{b,ijk}$	单元中的黑体辐射强度
$\delta\Omega^l$	与方向 l 相对应的固体角
V_{ijk}	ijk 单元的体积
A_m	单元面 m 的面积
\mathbf{n}_m	单元面的单位法向量 m

请注意，虽然假定强度在角度 $\delta\Omega^l$ 内保持不变，但其方向正好覆盖角度 $\delta\Omega^l$ 。局部入射辐射强度为

$$U_{ijk} = \sum_{l=1}^{N_\Omega} I_{ijk}^l \delta\Omega^l \quad (7.17)$$

在直角坐标系中⁴，法向量 \mathbf{n}_m 是坐标系的基向量，固体角上的积分与物理坐标无关，只与方向有关。这些积分记为

⁴ 在轴对称情况下，方程(7.16)变得稍微复杂一些，因为单元面法向量 \mathbf{n}_m 并不总是恒定的。不过，计算效率仍然可以保持。

$$D_m^l = \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_m) d\Omega \quad (7.18)$$

离散方程就变成了

$$\sum_{m=1}^6 A_m I_m^l D_m^l = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.19)$$

(7.19)左侧的单元面强度 I_m^l 采用一阶迎风方案计算。例如，考虑一个具有方向向量 \mathbf{s} 的控制角。如果辐射沿正 x 方向传播，即 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{i} \geq 0$ ，则迎风侧的强度 I_{xu}^l 假设为邻近单元的强度 $I_{i-1,jk}^l$ ，下风侧的强度为单元本身的（未知）强度 I_{ijk}^l 。离散 RTE 现在可以用迎风强度 I_{xu}^l 、 I_{yu}^l 和 I_{zu}^l 以及 I_{ijk}^l 来表示：

$$\begin{aligned} & A_x I_{xu}^l D_{xu}^l + A_x I_{ijk}^l D_{xd}^l + \\ & A_y I_{yu}^l D_{yu}^l + A_y I_{ijk}^l D_{yd}^l + \\ & A_z I_{zu}^l D_{zu}^l + A_z I_{ijk}^l D_{zd}^l \\ & = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l - \kappa_{ijk} I_{ijk}^l V_{ijk} \delta\Omega^l \end{aligned} \quad (7.20)$$

其中 LHS 上的 D 项是对式(7.18)在单元的迎风侧和下风侧求得的积分。在直线网格中， $D_{xu}^l = -D_{xd}^l$ ，方程可以进一步简化。此外，实体角上的积分可以通过分析计算得出

$$\begin{aligned} D_x^l &= \int_{\Omega^l} (\mathbf{s}^l \cdot \mathbf{i}) d\Omega = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} (\mathbf{s}^l \cdot \mathbf{i}) \sin\theta d\theta d\phi = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} \cos\phi \sin\theta \sin\theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{2} (\sin\phi^+ - \sin\phi^-) [\Delta\theta - (\cos\theta^+ \sin\theta^+ - \cos\theta^- \sin\theta^-)] \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$\begin{aligned} D_y^l &= \int_{\Omega^l} (\mathbf{s}^l \cdot \mathbf{j}) d\Omega = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} \sin\phi \sin\theta \sin\theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{2} (\cos\phi^- - \cos\phi^+) [\Delta\theta - (\cos\theta^+ \sin\theta^+ - \cos\theta^- \sin\theta^-)] \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$\begin{aligned} D_z^l &= \int_{\Omega^l} (\mathbf{s}^l \cdot \mathbf{k}) d\Omega = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} \cos\theta \sin\theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{2} \Delta\phi [(\sin\theta^+)^2 - (\sin\theta^-)^2] \end{aligned} \quad (7.23)$$

$$\delta\Omega^l = \int_{\Omega^l} d\Omega = \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} \sin\theta d\theta d\phi \quad (7.24)$$

未知强度 I_{ijk}^l 的方程(7.20)可写成以下形式

$$a_{ijk}^l I_{ijk}^l = a_x^l I_{xu}^l + a_y^l I_{yu}^l + a_z^l I_{zu}^l + b_{ijk}^l \quad (7.25)$$

其中

$$a_{ijk}^l = A_x |D_x^l| + A_y |D_y^l| + A_z |D_z^l| + \kappa_{ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.26)$$

$$a_x^l = A_x |D_x^l| \quad (7.27)$$

$$a_y^l = A_y |D_y^l| \quad (7.28)$$

$$a_z^l = A_z |D_z^l| \quad (7.29)$$

$$b_{ijk}^l = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.30)$$

这里 \mathbf{i} 、 \mathbf{j} 和 \mathbf{k} 是直角坐标系的基向量。 θ^+ 、 θ^- 、 ϕ^+ 和 ϕ^- 分别是极坐标方向和方位角方向上控制角的上限和下限， $\Delta\theta = \theta^+ - \theta^-$ ， $\Delta\phi = \phi^+ - \phi^-$ 。

(7.20)的求解方法基于显式行进序列[66]。行进方向取决于辐射强度的传播方向。由于行进是在“下风”方向上进行的，因此三个空间方向上的“上风”辐射强度都是已知的，辐射强度 I_{ijk}^l 可以直接通过代数方程求解。在要求解的第一个单元中，所有上风强度都是根据固相或气相边界确定的。理论上，如果反射或散射很重要，或者场景的光学厚度很高，则需要迭代。目前没有进行迭代。

7.2.3 切割单元 cut cell 的空间离散化

对于可能存在不规则切割单元的复杂几何（见第 13 章），采用公式(7.19)中的非结构化 RTE 版本

$$\sum_{f=1}^n A_f I_f^l D_f^l = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.31)$$

其中， A_f 是 n 个切割面的面积。这些切面包括气相切面和边界内切面，气相切面与笛卡尔网格对齐，边界内切面可以有任意方向。 D_f^l 项的计算公式为

$$\begin{aligned} D_f^l &= \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_f) d\Omega \\ &= \int_{\delta\phi} \int_{\delta\theta} [\cos\phi \sin\theta \hat{x}_f + \sin\phi \sin\theta \hat{y}_f + \cos\theta \hat{z}_f] \sin\theta d\theta d\phi \\ &= D_x^l \hat{x}_f + D_y^l \hat{y}_f + D_z^l \hat{z}_f \end{aligned} \quad (7.32)$$

其中 D_x^l 、 D_y^l 和 D_z^l 的定义同上， $(\hat{x}_f, \hat{y}_f, \hat{z}_f)$ 是相关面的单位法向量。如果 $D_f^l > 0$ ，则在给定角度方向上各面为上风面，即 D_{fu}^l ，否则为下风面，即 D_{fd}^l 。因此方程(7.20)可以重写为

$$\sum_{fd} A_{fd} I_{ijk}^l D_{fd}^l = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l - \kappa_{ijk} I_{ijk}^l V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.33)$$

在这种情况下，上风切面强度 I_{nu}^l 来自气相切面的上风值（与直角坐标解法相同），边界条件来自边界内切面。下风切面强度 I_{nd}^l 使用单元值 I_{ijk}^l 。

采用前面的符号，强度方程变为

$$a_{ijk}^l I_{ijk}^l = \sum_{nu} a_{nu}^l I_{nu}^l + b_{ijk}^l \quad (7.34)$$

其中，

$$a_{ijk}^l = \sum_{nd} A_{nd} [D_x^l \hat{x}_{nd} + D_y^l \hat{y}_{nd} + D_z^l \hat{z}_{nd}] + \kappa_{ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.35)$$

$$a_{nu}^l = A_{nu} [D_x^l \hat{x}_{nu} + D_y^l \hat{y}_{nu} + D_z^l \hat{z}_{nu}] \quad (7.36)$$

$$b_{ijk}^l = \kappa_{ijk} I_{b,ijk} V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (7.37)$$

7.2.4 边界条件

离开灰色漫射墙的辐射强度的边界条件为

$$I_w(\mathbf{s}) = \frac{\varepsilon \sigma T_w^4}{\pi} + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \int_{\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_w < 0} I_w(\mathbf{s}) |\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_w| d\Omega \quad (7.38)$$

其中， $I_w(\mathbf{s})$ 是墙面强度， ε 是发射率， T_w 是墙面温度。在离散形式下，固体壁面的边界条件为

$$I_w^l = \frac{\varepsilon \sigma T_w^4}{\pi} + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \sum_{D_w^l < 0} I_w^l |D_w^l| \quad (7.39)$$

其中 $D_w^l = \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_w) d\Omega$ 。约束条件 $D_w^l < 0$ 意味着在计算反射时只考虑“入射”方向。墙壁上的净辐射热通量为

$$\dot{q}_r'' = \sum_{l=1}^{N_\Omega} I_w^l \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_w) d\Omega = \sum_{l=1}^{N_\Omega} I_w^l D_n^l \quad (7.40)$$

其中，系数 D_n^l 等于 $\pm D_x^l$ 、 $\pm D_y^l$ 或 $\pm D_z^l$ ，可在计算开始时为每个墙体元素计算。

开放边界被视为黑墙，传入强度是环境温度的黑体强度。在镜面边界上，利用预定义的连接矩阵，根据传入强度计算出离开墙壁的强度：

$$I_{w,ijk}^l = I^l \quad (7.41)$$

通过在 x 、 y 和 z 平面上保持实体角离散对称，避免了对所有入射方向进行计算密集型积分。连接矩阵将一个传入方向 l' 与每个壁单元上的每个镜像方向相关联。

7.3 小液滴和微粒的吸收与散射

液滴和小颗粒对热辐射的衰减是一个重要的考虑因素，尤其是对水雾系统而言[67]。液滴和颗粒通过散射和吸收相结合的方式衰减热辐射[68]。因此，为了准确预测辐射场和粒子能量平衡，必须解决辐射-喷雾相互作用问题。如果为了简单起见，暂时忽略公式(7.1)中的气相吸收和发射，则辐射输运方程变为

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\left[\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda)\right] I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\Omega \quad (7.42)$$

其中， κ_p 是粒子的吸收系数， σ_p 是粒子的散射系数， $I_{b,p}$ 是粒子的发射项。 $\Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ 是散射相位函数，表示从 \mathbf{s}' 方向到 \mathbf{s} 方向的散射强度分数。

7.3.1 吸收和散射系数

粒子对辐射的吸收和散射取决于粒子的横截面积和辐射材料特性。为简单起见，我们假设粒子为球形，在这种情况下，粒子的横截面积为 πr^2 ，其中 r 为粒子半径。如果用 $n(r(\mathbf{x}))$ 表示位置 \mathbf{x} 上颗粒的局部数量密度分布，则喷雾/颗粒云内的局部吸收和散射系数可通过以下公式计算得出：

$$\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) = \int_0^\infty n(r(\mathbf{x})) Q_a(r, \lambda) \pi r^2 dr \quad (7.43)$$

$$\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) = \int_0^\infty n(r(\mathbf{x})) Q_s(r, \lambda) \pi r^2 dr \quad (7.44)$$

其中 Q_a 和 Q_s 分别为吸收和散射效率。在计算喷雾/粒子云的辐射特性时，假定粒子为球形，并使用 Mie 理论计算单个粒子的辐射特性。

根据文献[69]和[70]，网格单元内的实际粒度分布被模拟为单分散悬浮液，其直径与多分散喷雾的 Sauter 平均直径 (d_{32}) 相对应。这一假设可简化辐射系数的表达式

$$\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) = A_p(\mathbf{x}) Q_a(r_{32}, \lambda) \quad (7.45)$$

$$\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) = A_p(\mathbf{x}) Q_s(r_{32}, \lambda) \quad (7.46)$$

这些表达式是液滴单位体积总横截面积 A_p 的函数， A_p 的计算方法很简单，就是将单元内所有液滴的横截面积相加，再除以单元体积。由于实际原因，使用了 0.5 的松弛因子来略微平滑 A_p 的时间变化。

7.3.2 近似内散射积分

精确计算式(7.42)右侧的内散射积分将非常耗时，而且由于必须存储每个位置的单个强度，所需的内存量也非常大。取而代之的是公式(7.42)的简化形式：

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_{\lambda}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\left[\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) + \bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)\right] I_{\lambda}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} U(\mathbf{x}, \lambda) \quad (7.47)$$

其中 $U(\mathbf{x})$ 是单位球面上的总强度积分， $\bar{\sigma}_p$ 是有效散射系数。公式(7.47)的推导见附录 J。这个简化方程可以对光谱进行积分，从而得到特定波段的 RTE。这一过程与气相 RTE 完全相同。波段积分后，波段 n 的喷雾 RTE 变为

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\left[\kappa_{p,n}(\mathbf{x}) + \bar{\sigma}_{p,n}(\mathbf{x})\right] I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_{p,n}(\mathbf{x}) I_{b,p,n}(\mathbf{x}) + \frac{\bar{\sigma}_{p,n}(\mathbf{x})}{4\pi} U_n(\mathbf{x}) \quad (7.48)$$

其中，源函数基于单元内粒子的平均温度。

7.3.3 前向散射分量

在公式(7.47)中定义了有效散射系数：

$$\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{4\pi}{4\pi - \delta\Omega^l} (1 - \chi_f(\mathbf{x}, \lambda)) \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) \quad (7.49)$$

其中， χ_f 是原本在实体角 $\delta\Omega^l$ 内的总强度散射到同一角度 $\delta\Omega^l$ 的部分。 χ_f 的计算已在文献[71]中得出。可以看出，这里的 χ_f 变成了

$$\chi_f(r, \lambda) = \frac{1}{\delta\Omega^l} \int_{\mu^l}^1 \int_{\mu^l}^1 \int_{\mu_{p,0}}^{\mu_{p,\pi}} \frac{P_0(\theta_p, \lambda)}{\left[(1 - \mu^2)(1 - \mu'^2) - (\mu_p - \mu\mu')^2\right]^{1/2}} d\mu_p d\mu d\mu' \quad (7.50)$$

其中， μ_p 是散射角 θ_p 的余弦， $P_0(\theta_p, \lambda)$ 是单液滴散射相位函数

$$P_0(\theta_p, \lambda) = \frac{\lambda^2 (|S_1(\theta_p)|^2 + |S_2(\theta_p)|^2)}{2Q_s(r, \lambda)\pi r^2} \quad (7.51)$$

$S_1(\theta_p)$ 和 $S_2(\theta_p)$ 是米氏理论给出的散射振幅。积分极限 μ^l 是定义对称控制角边界的极角的余弦，即 $\delta\Omega^l$

$$\mu^l = \cos(\theta^l) = 1 - \frac{2}{N_{\Omega}} \quad (7.52)$$

最内层积分的极限是

$$\mu_{p,0} = \mu\mu' + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2} \quad ; \quad \mu_{p,\pi} = \mu\mu' - \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \mu'^2} \quad (7.53)$$

7.3.4 求解程序

在模拟过程中，吸收和散射系数 κ_p 和 $\bar{\sigma}_p$ 不会重复计算。取而代之的是，在模拟开始时，针对每个波段和一系列不同的 Sauter 平均直径 (r_{32}) 将它们列表。平均量（现在只有 r_{32} 函数）存储在一维数组中。在模拟过程中，可以通过查表找到局部属性。

在 κ_p 和 $\bar{\sigma}_p$ 的波段积分中，使用一个恒定的“辐射”温度 T_{rad} 来提供波长加权（普朗克函数）。 T_{rad} 的选择应代表典型的辐射火焰温度。默认值为 1173 K。

吸收和散射效率 Q_a 和 Q_s 以及散射相位函数 $P_0(\theta_p, \lambda)$ 是利用威斯康星开发的 **MieV** 代码计算得出的[72]。粒子的光谱特性可以用随波长变化的复折射率来指定。预编译数据包括水和基于柴油和庚烷的一般碳氢化合物燃料。对于水，复折射率的虚部值（与吸收系数有关）取自参考文献[73]，

实部值为 1.33。对于燃料，液滴光谱特性取自参考文献[74]，其中包括柴油折射率的测量值以及与庚烷折射率的比较值。柴油的特性用于折射率的实部。对于复数部分，则使用庚烷特性，以避免不同类型柴油带来的不确定性。通常，颗粒云的辐射特性对颗粒大小和浓度比折射率值更为敏感。

7.3.5 液滴和小颗粒吸收的热量

液滴对辐射损耗项的贡献为

$$\dot{q}_r''' \equiv -\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}''(\mathbf{x})(\text{droplets}) = \kappa_p(\mathbf{x}) [U(\mathbf{x}) - 4\pi I_{b,p}(\mathbf{x})] \quad (7.54)$$

对于每个液滴，辐射加热/冷却功率的计算公式为

$$\dot{q}_r = \frac{m_p}{\rho_p(\mathbf{x})} \kappa_p(\mathbf{x}) [U(\mathbf{x}) - 4\pi I_{b,p}(\mathbf{x})] \quad (7.55)$$

其中， m_p 是液滴的质量， $\rho_p(\mathbf{x})$ 是单元中液滴的总密度。

7.4 非散射大颗粒的吸收

FDS 使用拉格朗日粒子来表示无法在数值网格上解析但与液滴相比仍然相对较大的物体。例如，植被被建模为不透明、不散射的大颗粒集合。有关大颗粒吸收辐射的更多讨论，请参见第 10.6 节。

8 固体相

FDS 假设固体表面由多层组成，每层由可发生多种热降解反应的多种材料成分组成。假设热传导只沿表面的法线方向进行。每个反应可产生多种气体和固体物质。本章介绍固体材料的热传导方程，以及各种系数、源项和边界条件，包括固体边界对流热通量 \dot{q}_c'' 的计算。

8.1 固体的热传导方程

固相温度 $T_s(x, t)$ 的一维热传导方程适用于指向固体内部的 x 方向（ $x = 0$ 点代表表面）⁵。

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \dot{q}_s''' \quad (8.1)$$

8.1.3 节描述了 k_s 和 $\rho_s c_s$ 的分量平均材料特性。源项 \dot{q}_s''' 包括化学反应和辐射吸收：

$$\dot{q}_s''' = \dot{q}_{s,c}''' + \dot{q}_{s,r}''' \quad (8.2)$$

第 8.2 节描述了 $\dot{q}_{s,c}'''$ ，主要是不同类型固体和液体燃料热解模型给出的产热（损失）率。第 8.1.1 节描述了 $\dot{q}_{s,r}'''$ ，即深度辐射吸收和辐射发射。

固体障碍物前表面的边界条件为

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial x}(0, t) = \dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' \quad (8.3)$$

式中 \dot{q}_c'' 为对流通量， \dot{q}_r'' 为辐射通量。如果假定辐射穿透深度，则表面辐射项 \dot{q}_r'' 设为 0。8.1.2 节描述了固体表面的对流传热。

在背面，有两种可能的边界条件：(1) 如果假定背面向环境空隙或计算域的其他部分开放，则背面的边界条件与正面类似；或 (2) 如果假定背面完全绝缘，则使用绝热条件。

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = 0 \quad (8.4)$$

固相热方程的数值解法详见附录 L。

8.1.1 固体辐射传热

如果假设来自周围气体的热辐射在固体障碍物表面的无限薄层内被吸收，那么净辐射热通量就是传入和传出分量之和，即 $\dot{q}_r'' = \dot{q}_{r,in}'' - \dot{q}_{r,out}''$ ：

$$\dot{q}_{r,in}'' = \varepsilon \int_{\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w < 0} I_w(\mathbf{s}') |\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w| d\Omega \quad (8.5)$$

$$\dot{q}_{r,out}'' = \varepsilon \sigma T_w^4 \quad (8.6)$$

然而，许多普通材料并不透明，因此辐射会穿透材料达到一定的深度。固体（或液体）内部的辐射传输可以用公式(8.1)中的一个源项来描述。基于舒斯特-施瓦兹柴尔德近似的“双通量”模型[57]假设“前向”和“后向”半球内的辐射强度是恒定的。“前向”辐射强度的传输方程为

$$\frac{1}{2} \frac{dI^+(x)}{dx} = \kappa_s (I_b - I^+(x)) \quad (8.7)$$

⁵ 在圆柱和球面坐标中，热传导方程的写法是

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \dot{q}_s''' \quad ; \quad \rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \dot{q}_s'''$$

当障碍物表面不是平面，而是圆柱形或球形时，FDS 可为用户提供这些选项。该选项在描述电缆或热探测装置等小型复杂“目标”的行为时非常有用。

其中, x 是与材料表面的距离, κ_s 是分量平均吸收系数:

$$\kappa_s = \sum_{\alpha=1}^{N_m} X_\alpha \kappa_{s,\alpha} \quad (8.8)$$

对于 “后向 ” 方向, 可以给出相应的公式。将公式(8.7)乘以 π 就得到了进入固体的 “前向 ” 辐射热流量

$$\frac{1}{2} \frac{d\dot{q}_r^+(x)}{dx} = \kappa_s (\sigma T_s^4 - \dot{q}_r^+(x)) \quad (8.9)$$

热传导方程中的辐射源项是 “前向 ” 和 “后向 ” 通量梯度之和

$$\dot{q}_{s,r}'''(x) = \frac{d\dot{q}_r^+(x)}{dx} + \frac{d\dot{q}_r^-(x)}{dx} \quad (8.10)$$

公式(8.9)在固体 (或液体) 表面的边界条件为

$$\dot{q}_r^+(0) = \dot{q}_{r,in}'' + (1 - \varepsilon) \dot{q}_r^-(0) \quad (8.11)$$

其中, $\dot{q}_r^-(0)$ 是表面的 “后向 ” 辐射热通量。在这个公式中, 表面发射率和内部吸收率被假定为常数。

双通量模型尚未适用于圆柱形或球形几何体。

8.1.2 固体的对流传热

对流热通量的计算取决于是进行直接数值模拟 (DNS) 还是大涡模拟 (LES)。对于 DNS, 对流传热是直接从解析的气相和固相变量中计算出来的。对于 LES, 有多种经验选项。

1. 直接数值模拟

在 DNS 计算中, 固体表面的对流热通量 \dot{q}_c'' 可直接从边界处的气体温度梯度中获得

$$\dot{q}_c'' = -k \frac{\partial T}{\partial n} = -k \frac{T_w - T_g}{\delta n / 2} \quad (8.12)$$

其中, k 是气体的热导率, n 是指向固体的空间坐标, ∂n 是法线网格间距, T_g 是第一气相单元中心的气体温度, T_w 是壁面温度。

2. 经验自然/强制对流模型

在 LES 计算中, 对流传热系数 h 取其自由 (自然) 和强制形式的最大值:

$$\dot{q}_c'' = h(T_g - T_w) \quad ; \quad h = \frac{k}{L} \max \left(\text{Nu}_{\text{free}}, \text{Nu}_{\text{forced}}, \frac{2L}{\delta n} \right) \quad (8.13)$$

其中, T_g 是表面附近气相池中的气体温度, T_w 是壁 (表面) 温度, L 是特征长度, k 是气体的热导率。对于平面, L 取 1 米; 对于球体和圆柱体, L 取直径 D 。右侧的最后一个参数对应于 DNS 情况下的极限。对于拉格朗日粒子, 假设 $D \ll \delta n$, 因此 h 的方程变为

$$h = \frac{k}{L} \max (\text{Nu}_{\text{free}}, \text{Nu}_{\text{forced}}) \quad (8.14)$$

对于自由 (自然) 对流, 努塞尔特数是瑞利数的函数:

$$\text{Ra} = \frac{2g|T_g - T_w|L^3}{(T_g + T_w)\nu\alpha} \quad ; \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} \quad ; \quad \alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad ; \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha} \quad (8.15)$$

以下表达式是参考文献[75]在 $\text{Pr}=0.7$ 的假设条件下给出的简化表达式。

$$\text{Nu}_{\text{free}} = \begin{cases} \left(0.825 + 0.324\text{Ra}^{1/6}\right)^2 & \text{Vertical plate or cylinder} \\ 0.54\text{Ra}^{1/4} & \text{Horizontal hot plate facing up or cold plate facing down, } \text{Ra} \leq 10^7 \\ 0.15\text{Ra}^{1/3} & \text{Horizontal hot plate facing up or cold plate facing down, } \text{Ra} > 10^7 \\ 0.52\text{Ra}^{1/5} & \text{Horizontal hooplate facing down or cold plate facing up} \\ \left(0.60 + 0.321\text{Ra}^{1/6}\right)^2 & \text{Horizontal cylinder} \\ 2 + 0.454\text{Ra}^{1/4} & \text{Sphere} \end{cases} \quad (8.16)$$

对于强制对流，努塞尔特数的形式为

$$\text{Nu}_{\text{forced}} = C_0 + (C_1 \text{Re}^n - C_2) \text{Pr}^m \quad ; \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| L}{\mu} \quad ; \quad m = 1/3 \quad (8.17)$$

系数值见表 8-1。

撞击射流传热模型使用停滞压力来定义雷诺数中的速度尺度 $U_{\text{imp}} = \sqrt{2H}$ ，但在其他方面使用强制对流努 塞尔特相关性，并对默认常数 $C_1 = 0.55$ 和 $n = 0.8$ 稍作修改。与强制对流模型一样，也可以使用自定义系数，详见《FDS 用户指南》[3]。如果用户使用了冲击射流模型， $\text{Nu}_{\text{impinge}}$ 将被添加到公式(8.13)的最大参数列表中。

$$\text{Nu}_{\text{impinge}} = C_0 + (C_1 \text{Re}_{\text{imp}}^n - C_2) \text{Pr}^m \quad ; \quad \text{Re}_{\text{imp}} = \frac{\rho U_{\text{imp}} L}{\mu} \quad ; \quad m = 1/3 \quad (8.18)$$

表 8-1 强制对流传热相关系数[75]

几何	C_0	C_1	C_2	n	Re
平板	0	0.0296	0	0.8	$\leq 10^8$
圆柱	0	0.989	0	0.330	0.4-4
圆柱	0	0.911	0	0.385	4-40
圆柱	0	0.683	0	0.466	40-4000
圆柱	0	0.193	0	0.618	4000-40000
圆柱	0	0.027	0	0.805	40000-400000
球	2	0.6	0	0.5	

3. 可选近墙模型

本节将介绍一种可选的传热系数模型，它可能更适合于分辨率较高的 LES 计算。该模型已在低雷诺数加热通道流中得到验证[76]，并已用于预测飞机货舱上层温度的模型中[77]。

壁面模型旨在利用代数公式模拟靠近壁面处从分子传输到湍流传输的突然变化，而不解决最小长度尺度的问题。该理论遵循基于壁面剪切力恒定这一观点的维度分析。因此，非维度速度可以定义为非维度长度尺度的函数。在 FDS 中，速度的壁面模型是根据连接粘性区域和对数区域极限的半对数拟合壁面定律实现的（见第 5.4 节）。

类比近壁速度模型，非维度温度定义为

$$T^+ = \frac{T_g - T_w}{T_\tau} \quad (8.19)$$

其中， T_g 是第一离壁气相池温度。模型曲线如下

$$T^+ = \text{Pr } y^+ \quad \text{for } y^+ \leq 11.81 \quad (8.20)$$

$$T^+ = \frac{\text{Pr}_t}{\kappa} \ln y^+ + B_T \quad \text{for } y^+ \geq 11.81 \quad (8.21)$$

其中 Pr 和 Pr_t 分别为分子和湍流普朗特数(FDS 默认 $\text{Pr}_t = 0.5$), $\kappa = 0.41$ 为冯卡尔曼常数。温标 T_τ 的定义是

$$T_\tau \equiv \frac{\dot{q}_c''}{\rho c_p u_\tau} \quad (8.22)$$

式中 \dot{q}_c'' 、 ρ 、 c_p 和 u_τ 分别为壁面对流热通量、气体密度、比热和摩擦速度。

公式(8.21)右侧的第二个项 B_T 是分子普朗特数的函数, 可以通过实验确定。在数学上, 该项是源于速度梯度和温度梯度之间关系的积分常数。在物理上, 它表示靠近壁面的热量和动量传输的阻力。FDS 使用 Kader 提出的实验相关性[78]。

$$B_T = (3.85 \text{Pr}^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln \text{Pr} \quad (8.23)$$

对流传热系数 (h) 由 h 和 T^+ 的定义得出:

$$h = \frac{\dot{q}_c''}{(T_g - T_w)} = \frac{\rho c_p u_\tau}{T^+} \quad (8.24)$$

8.1.3 成分平均热物性

固体的热导率和体积热容定义为

$$k_s = \sum_{\alpha=1}^{N_m} X_\alpha k_{s,\alpha} \quad ; \quad \rho_s c_s = \sum_{\alpha=1}^{N_m} \rho_{s,\alpha} c_{s,\alpha} \quad (8.25)$$

其中, N_m 是构成固体的材料成分数量, X_α 是成分 α 的体积分数, $\rho_{s,\alpha}$ 是成分密度:

$$\rho_{s,\alpha} = \rho_s Y_\alpha \quad (8.26)$$

其中, ρ_s 是复合材料的密度, Y_α 是成分 α 的质量分数。固体密度是各组分密度之和

$$\rho_s = \sum_{\alpha=1}^{N_m} \rho_{s,\alpha} \quad (8.27)$$

成分 α 的体积分数计算公式为

$$X_\alpha = \frac{\rho_{s,\alpha}}{\rho_\alpha} / \sum_{\beta=1}^{N_m} \frac{\rho_{s,\beta}}{\rho_\beta} \quad (8.28)$$

其中, ρ_α 是材料 α 的真实密度。多组分固体是通过指定复合材料各组分的质量分数 Y_α 和密度 ρ_α 来定义的。

8.2 热解模型

本节将介绍如何模拟固相反应和固相热传导方程中的化学源项 $\dot{q}_{s,c}'''$ (见公式(8.2))。这通常被称为“热解模型”, 但实际上它可以表示任何数量的反应过程, 包括蒸发、炭化和内部加热。附录 O 详细介绍了 FDS 在指定固相反应时确保能量守恒的过程 (确保材料形成热和反应热与温度相关的一致性)。

8.2.1 指定热释放率

通常情况下, 火灾模拟的目的只是预测特定火灾的烟雾和热量传播。换句话说, 热释放率是一个特定的输入值, 而不是模型的预测值。在这种情况下, 所需的热释放率会转化为给定固体表面 (可视为燃烧器表面) 上燃料的质量通量:

$$\dot{m}_f'' = \frac{f(t)\dot{q}_{\text{user}}''}{\Delta H_c} \quad (8.29)$$

通常情况下，用户指定所需的单位面积热释放率 (HRRPUA)、 \dot{q}_{user}'' 以及时间斜率 $f(t)$ 和气相燃烧热 ΔH_c 。然后就可以计算出燃料从表面到气体的质量通量 \dot{m}_f'' 。这种方法的一个特殊子集是用户还可以指定燃烧材料的燃烧热、密度和厚度。如果使用第 6.1.2 节中描述的具有单一燃烧反应的默认简单化学模型，并且有多种材料燃烧，则一种或多种材料的燃烧热 $\Delta H_{c,\text{solid}}$ 可能与气相燃烧反应不同。考虑到这一点，FDS 会调整 \dot{m}_f'' ，使固相具有适当的质量损失率 $\dot{m}_{f,\text{solid}}''$ 。

$$\dot{m}_{f,\text{solid}}'' = \dot{m}_f'' \frac{\Delta H_c}{\Delta H_{c,\text{solid}}} \quad (8.30)$$

8.2.2 通过热通量调节燃烧速率

这种方法称为 **Spyro**，是上一小节讨论的特定热释放率的改进版。**Spyro** 使用来自一个或多个锥形量热计或类似实验的数据，在这些实验中，样品暴露在固定的入射辐射通量下，同时测量质量损失和/或热释放率。数据可以来自惰性气化试验或允许热解材料燃烧的试验。这种方法的详细理由见附录 P。

Spyro 假设材料样品的质量损失率或热释放率曲线的一般形状是恒定的，曲线的大小和持续时间是样品入射热通量和样品厚度的函数。根据这一假设，锥形试验在一种暴露条件和测试厚度下的燃烧速率可按比例调整为不同的暴露条件和厚度，即 FDS 模拟期间预测的建模样品厚度和入射热通量。算法操作如下

1. 每组 i 提供的测试数据都需要锥体通量 $\dot{q}_{\text{cone}_i}''$ 、锥体中测试的厚度 Δx_i 以及应用于 \dot{q}_{user}'' 的时间斜坡 $f_i(t)$ 。请注意，每个 $f_i(t)$ 应从点火时的 $t = 0$ 开始，因为点火前的时间由一维传热模型处理。对于每组数据

- a) 确定数据集 i 的厚度比例系数 s_i ，即 $s_{t,i} = \frac{\Delta x_{\text{ref}}}{\Delta x_i}$ ，其中 Δx_{ref} 是 FDS 中建模的材料厚度， Δx_i 是测试的材料厚度。

- b) 确定随时间变化的入射通量 $\dot{q}_{\text{ref},i}''(t)$ 。对于惰性气化试验，这只是外加辐射通量：

$$\dot{q}_{\text{ref},i}''(t) = \dot{q}_{\text{cone}_i}'' \quad (8.31)$$

对于锥形量热计测试，这是外加辐射通量减去被火焰吸收的那部分外加通量 $\Gamma_i(t)$ ，再加上来自火焰的热反馈：

$$\dot{q}_{\text{ref},i}''(t) = \dot{q}_{\text{cone}_i}''(1 - \Gamma_i(t)) + \dot{q}_{\text{flame}_i}''(t) \quad (8.32)$$

$\dot{q}_{\text{flame}_i}''(t)$ 的值是通过附录 P 中讨论的经验方法确定的。

- c) 将入射通量随时间的变化进行积分，绘制出传递到表面的能量随时间变化的曲线，然后将曲线反转，得出时间与传递到表面的能量 ($t_i E_i''$) 的关系。

2. 在达到点火温度的情况下，使用 **Spyro** 方法对每个壁面单元进行处理：

- a) 对于输入数据中提供的每个厚度，使用缩放时间步长 $\Delta t_{\text{scaled}} = s_{t,i} \Delta t$ 对 FDS 预测的入射通量 \dot{q}_{inc}'' 进行积分。
- b) 对于每个提供的 $f_i(t)$ ，使用相应的厚度缩放入射通量来获得该测试数据的等效时间，即计算 $t_i E_i''$)。

- c) 对于每个提供的 $f_i(t)$ ，查找 $\dot{q}_{ref,i}''(t_i)$ 。
- d) 对于每个提供的 $f_i(t)$ ，确定 $\dot{q}_{user}'' f_i(t_i)$ 。如果 E_i 超过了 $f_i(t_i)$ 的范围，则按 $f_i(t) \frac{\dot{q}_{inc}''}{\dot{q}_{ref,i}''(t_i)}$ 来缩放 $f_i(t)$ 中最后提供的数据点，从而得到 $\dot{q}_{\Delta x_j}''$ 。
- e) 使用 Δx_j 将 $\dot{q}_{\Delta x_j}''$ 内插到 Δx_{ref} ，从而获得网格单元的 HRRPUA。

8.2.3 固体燃料

根据以下假设，固体可以同时发生反应：

- 瞬间释放气体物种
- 固态和气态成分之间的局部热平衡
- 气态产物无凝结
- 无孔效应⁶

每种物质成分都可能发生几种竞争反应，根据指定的产率系数，每种反应都可能产生其他固体成分（残留物）和气态物质。这些系数的总和应为 1，但总和小于 1 的产率可用于计算模拟中未明确包含的产物。

根据固相物种守恒方程，单位体积材料成分 α 的质量 $\rho_{s,\alpha}(\mathbf{x}, t)$ 随时间变化

$$\frac{\partial \rho_{s,\alpha}}{\partial t} = - \sum_{\beta=1}^{N_{r,\alpha}} r_{\alpha\beta} + S_{\alpha} \quad (8.33)$$

其中， $N_{r,\alpha}$ 是材料 α 的反应次数， $r_{\alpha\beta}$ 是反应 β 的速率（单位为 1/s）， S_{α} 是材料成分 α 与其他成分反应后的生成速率。反应速率是固相和气相条件的函数，通过阿伦尼乌斯函数和幂函数的组合计算得出：

$$r_{\alpha\beta} = \underbrace{\rho_{s,\alpha}^{n_{s,\alpha\beta}}}_{\text{Reactant dependency}} \underbrace{A_{\alpha\beta} \exp\left(-\frac{E_{\alpha\beta}}{RT_s}\right)}_{\text{Arrhenius function}} \underbrace{\left[X_{O_2}(x)\right]^{n_{O_2,\alpha\beta}}}_{\text{Oxidation function}} \underbrace{T_s^{n_{t,\alpha\beta}}}_{\text{Power function}} \quad (8.34)$$

第一项描述了反应速率与反应物本身浓度的关系， $n_{s,\alpha\beta}$ 是部分反应顺序。第二项是阿伦尼乌斯函数，通常用于描述反应动力学，即反应速率与材料温度的关系。《FDS 验证指南》中关于热解的章节介绍了使用台架测量技术确定动力学参数 $A_{\alpha\beta}$ 和 $E_{\alpha\beta}$ 的方法。

第三项可用于描述与局部氧气浓度 $X_{O_2}(x)$ 和异相反应顺序 $n_{O_2,\alpha\beta}$ 的关系。实际材料中的氧气浓度分布取决于扩散和反应消耗之间的竞争。由于 FDS 无法解决凝结相材料中气态物质的传输问题，因此假定了一个简单的指数曲线，并要求用户指定氧气存在的特征深度。深度 x 处的局部氧气体积分数由气相（第一个网格单元）氧气体积分数 $X_{O_2,g}$ 计算得出，即

$$X_{O_2}(x) = X_{O_2,g} \exp(-x / L_{g,\alpha\beta}) \quad (8.35)$$

其中 $L_{g,\alpha\beta}$ 是氧气扩散的特征深度。 $L_{g,\alpha\beta} = 0$ 表示反应只在材料表面进行。

第四项是温度的幂函数。

产生项 S_{α} 是所有反应的总和，其中固体残留物是物质 α 。

$$S_{\alpha} = \sum_{\alpha'=1}^{N_m} \sum_{\beta=1}^{N_{r,\alpha'}} \nu_{\alpha,\alpha'\beta} r_{\alpha'\beta} \quad (\text{where Residue}_{\alpha'\beta} = \text{Material}_{\alpha}) \quad (8.36)$$

⁶ 虽然模型中没有明确包括孔隙率，但由于公式(8.28)中定义的体积分数总和不必等于一，因此可以考虑孔隙率，在这种情况下，导热系数和吸收系数会有效降低。

其中, $\nu_{\alpha,\alpha'\beta}$ 是组分 α' 发生反应 β 生成组分 α 的产率。每种气体的体积产生率 γ 为

$$\dot{m}_\gamma''' = \sum_{\alpha=1}^{N_m} \sum_{\beta=1}^{N_{r,\alpha}} \nu_{\gamma,\alpha\beta} r_{\alpha\beta} \quad (8.37)$$

假设气体瞬时传输到表面, 其质量通量为⁷

$$\dot{m}_r'' = \int_0^L \dot{m}_\gamma'''(x) dx \quad (8.38)$$

其中 L 是固体的厚度。热传导方程中的化学源项为

$$\dot{q}_{s,c}'''(x) = - \sum_{\alpha=1}^{N_m} \sum_{\beta=1}^{N_{r,\alpha}} r_{\alpha\beta}(x) H_{r,\alpha\beta} \quad (8.39)$$

其中, $H_{r,\alpha\beta}$ 为反应热。

8.2.4 液体燃料

考虑由一种或多种成分组成的液体。每种蒸发液体成分的蒸发速率 α 受以下关系式控制:

$$\dot{m}_\alpha'' = h_m \rho_{\text{film}} \ln(1+B) \left(Y_{\alpha,\text{sv}} + \frac{Y_{\alpha,\text{sv}} - Y_{\alpha,\text{g}}}{B} \right) ; \quad B = \frac{\sum_{\alpha'} (Y_{\alpha',\text{sv}} - Y_{\alpha',\text{g}})}{1 - \sum_{\alpha'} Y_{\alpha',\text{sv}}} \quad (8.40)$$

h_m 是传质系数, ρ_{film} 是薄表层内的密度, B 是斯伯丁传质数, $Y_{\alpha,\text{sv}}$ 是液面上成分 α 的“表面蒸汽”质量分数, $Y_{\alpha,\text{g}}$ 是邻近液面的网格单元中心成分 α 的质量分数。表层的组成是利用 Raoult 定律和 Clausius-Clapeyron 平衡蒸汽压方程求得的。表面成分 α 的体积分数为

$$X_{\alpha,\text{sv}} = X_{\alpha,\ell} \exp \left[- \frac{h_{v,\alpha} W_\alpha}{R} \left(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_{b,\alpha}} \right) \right] ; \quad Y_{\alpha,\text{sv}} = \frac{X_{\alpha,\text{sv}} W_\alpha}{\sum_{\alpha'} X_{\alpha',\text{sv}} W_{\alpha'} + (1 - \sum_{\alpha'} X_{\alpha',\text{sv}}) W_{\text{air}}} \quad (8.41)$$

这里, $X_{\alpha,\ell}$ 是成分 α 在液体中的体积分数, $h_{v,\alpha}$ 是其汽化热, W_α 是其分子量, $T_{b,\alpha}$ 是其沸腾温度, T_s 是表面温度。传质系数的计算公式为

$$h_m = \frac{\text{Sh} D_{\text{film}}}{L} ; \quad \text{Sh} = 0.037 \text{Sc}^{\frac{1}{3}} \text{Re}^{\frac{4}{5}} ; \quad \text{Sc} = \frac{\mu_{\text{film}}}{\rho_{\text{film}} D_{\text{film}}} ; \quad \text{Re} = \frac{\rho_{\text{film}} \|\mathbf{u}\| L}{\mu_{\text{film}}} \quad (8.42)$$

Sh 是舍伍德数, D 是摩尔加权气相扩散率:

$$D_{\text{film}} = \frac{\sum_{\alpha} X_{\alpha,\text{sv}} D_\alpha}{\sum_{\alpha} X_{\alpha,\text{sv}}} \quad (8.43)$$

其中, D_α 是物种 α 在薄膜温度下对空气的扩散率。雷诺数基于表面附近气胞中的气体速度 $\|\mathbf{u}\|$ 、长度尺度 L 以及表面薄膜的密度和粘度。除非另有说明, 液池的长度尺度 L 为 1 米。薄膜密度为

$$\rho_{\text{film}} = \frac{p_0}{RT_{\text{film}} \left(\sum_{\alpha} Y_{\alpha,\text{sv}} / W_\alpha + (1 - \sum_{\alpha} Y_{\alpha,\text{sv}}) / W_{\text{air}} \right)} \quad (8.44)$$

假设膜层的成分由蒸发的液体和空气组成。

⁷ 在圆柱和球面坐标中, 质量通量为

$$\dot{m}_\gamma'' = \frac{1}{R_{\text{out}}} \int_{R_{\text{in}}}^{R_{\text{out}}} \dot{m}_\gamma'''(x) r dr ; \quad \dot{m}_\gamma'' = \frac{1}{R_{\text{out}}^2} \int_{R_{\text{in}}}^{R_{\text{out}}} \dot{m}_\gamma'''(x) r^2 dr$$

实际上，液体燃料可能有多种成分，如汽油或煤油，但为了减少 CPU 时间，可以假定所有液体成分都会蒸发，形成一个共同的整体气体种类，其质量分数用 Z_g 表示。在这种情况下，气体种类的有效质量分数 α 假设与其在液面上的值成正比：

$$Y_{\alpha,g} = Z_g \frac{Y_{\alpha,sv}}{\sum_{\alpha} Y_{\alpha,sv}} \quad (8.45)$$

假定集总气体种类并不是强制性的——可以蒸发每种液体成分，形成独特的气体种类。

为简单起见，在计算热传导时，液体燃料本身被视为热厚固体。没有计算池内液体的对流。显然，这一假设会产生后果。其中之一是蒸发率表达式(8.40)仅适用于表面液层。然而，内部液层的温度 T_ℓ 有可能超过单个液体成分的沸腾温度 $T_{b,\alpha}$ 。在这种情况下，表面会沸腾出更多的 α 组份，从而使液体温度回到 α 组份的沸点。表面质量通量的增加形式为

$$\dot{m}''_{\alpha} = \frac{\rho_{\ell,\alpha} (h(T_\ell) - h(T_{b,\alpha})) \delta}{h_{v,\alpha} \delta t} ; \quad h(T) = \int_0^T c_s(T') dT' \quad (8.46)$$

其中， $\rho_{\ell,\alpha}$ 是液体成分 α 的单位体积质量， $h(T)$ 是液体的焓， δ 是层厚度， $h_{v,\alpha}$ 是成分 α 的汽化热， δt 是时间步长。

8.2.5 收缩和膨胀材料

层厚度根据瞬时材料密度与纯材料密度之比进行更新。在有多种材料成分的情况下，膨胀和收缩量分别由这些比率的最大值和总和决定。在每个时间步中，每个凝聚相单元的大小乘以以下系数：

$$\delta = \begin{cases} \max_{\alpha} \left(\frac{\rho_{s,\alpha}}{\rho_{\alpha}} \right) & \text{if } \max_{\alpha} \left(\frac{\rho_{s,\alpha}}{\rho_{\alpha}} \right) \geq 1 \\ \sum_{\alpha} \left(\frac{\rho_{s,\alpha}}{\rho_{\alpha}} \right) & \text{if } \max_{\alpha} \left(\frac{\rho_{s,\alpha}}{\rho_{\alpha}} \right) < 1 \end{cases} \quad (8.47)$$

相应地，密度除以系数 δ 以保持质量。

9 气溶胶

FDS 中的气体种类可定义为气溶胶种类。这样就可以实现一系列气溶胶行为，包括沉积、沉降、喷雾洗涤和凝结（针对液态气溶胶）。本章将介绍 FDS 中的气溶胶行为。

9.1 气溶胶沉积

默认情况下，FDS 假设烟尘的传输方式与所有其他气体物种相同。也就是说，烟尘颗粒很小，与含有烟尘的气体的火流相比，其沉降速度很小。然而，在表面附近，其他机制会影响烟尘，导致其沉积在表面上。通过沉积去除烟尘会影响逃生的能见度和烟雾探测器的启动时间。在法医火灾重建中，沉积在表面上的烟尘量可与火灾后的观察结果相关联。微粒沉积对于计算灰烬、放射性核素或其他微粒物质等气溶胶毒物的扩散特性也很重要。

不过，也可以选择将任何气相物质视为可沉积在表面上的气溶胶。气溶胶沉积是通过对表面附近的气溶胶采用经验沉积速度来确定的。导致沉积的现象有很多：热泳（温度梯度将气溶胶推向或推离表面）、重力沉降、扩散沉积（气溶胶沿边界层浓度梯度移动）和湍流沉积（本质上是湍流边界层导致的冲击沉积）。电场等其他现象也会导致沉积，但由于其在车厢火灾情景中的作用相对较小，因此未在 FDS 中加以考虑。

气溶胶沉积到表面的总速度 u_{dep} 是通过假定沉积现象是独立的，计算每种机制的沉积速度，然后求和来确定的[79]。

$$u_{\text{dep}} = u_g + u_{\text{th}} + u_{\text{dt}} \quad (9.1)$$

其中， u_g 是重力沉降速度（对于靠近朝上表面的单元）， u_{th} 是热泳速度， u_{dt} 是扩散-湍流综合速度。如果气溶胶位于邻近墙壁的气相池中，则气溶胶（用下标 α 表示）会从气相中移出，并通过施加以下边界条件沉降到表面上

$$\dot{m}_{\text{dep},\alpha}'' = \rho Y_{\alpha} u_{\text{dep}} \quad (9.2)$$

利用这一边界条件，可以跟踪表面积聚的气溶胶表面密度，并从相邻气相单元中去除沉积在表面上的气溶胶量。请注意，下标 α 指的是含有烟尘或气溶胶的物种，而本节其余部分中的下标 “a” 指的是凝结相烟尘或气溶胶的特性，如质量或密度。

9.1.1 重力沉降

重力沉降速度由[80]得出

$$u_g = g m_a \frac{\text{Cn}}{6\pi\chi_d\mu r_a} \quad (9.3)$$

m_a 是粒子质量， χ_d 是形状因子， μ 是空气的动力粘度， r_a 是粒子半径，Cn 是坎宁安滑移修正系数，由[80]得出

$$\text{Cn} = 1 + 1.257 \text{Kn} + 0.4 \text{Kn} e^{-1.1/\text{Kn}} \quad (9.4)$$

Kn 是粒子的克努森（Knudsen）数，由气体的平均自由路径与粒子半径之比得出。Kn 的计算公式为[81]

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{r_a} \quad (9.5)$$

其中， λ 是气体分子的平均自由路径，计算公式为[82]。

$$\lambda = \mu_g \sqrt{\frac{\pi}{2\rho\rho_g}} \quad (9.6)$$

对于气相中的每种气溶胶，都要计算出重力沉降速度，并施加到气溶胶传输方程（公式(3.5)）中的对流项上。这种方法类似于 Hu 等人[83]描述的烟雾传输漂移通量模型。如上所述，重力沉降

速度也包含在总沉降速度中，以将气溶胶沉降到朝上的平面上。

9.1.2 热泳沉积

热泳速度可计算为

$$u_{th} = \frac{K_{th} \nu}{T_g} \frac{dT}{dx} \quad (9.7)$$

这就需要壁面温度梯度，而壁面温度梯度只有在 DNS 模拟中才能得到解决。在 LES 模拟中，温度梯度是根据壁面传热系数计算得出的。

$$\frac{dT}{dx} = \frac{h(T_g - T_w)}{k_g} \quad (9.8)$$

K_{th} 是热泳速度系数，通过以下相关关系计算得出[84]

$$K_{th} = \frac{2C_s(\alpha + C_t Kn) Cn}{(1 + 3C_m Kn)(1 + 2\alpha + 2C_t Kn)} \quad (9.9)$$

其中， $C_s = 1.17$ 为热迁移系数， α 为气体热导率与粒子热导率之比， $C_m = 1.146$ 为动量容纳系数， $C_t = 2.2$ 为热容纳系数。

对于气相中的每种气溶胶，都要计算出一个热速，并施加到气溶胶传输方程（公式(3.5)）中的对流项上。这种方法沿用了 Hu 等人[83]描述的烟雾传输漂移通量模型。

9.1.3 湍流沉积

扩散-湍流沉积速度取决于流态（扩散、扩散-撞击或惯性调节）。这些流态的沉积速度如下[85]。

$$u_{dt} = \begin{cases} 0.086 Sc^{-0.7} u_\tau & \tau^+ < 0.2 \\ 3.5 \times 10^{-4} \tau^{+2} u_\tau & 0.2 < \tau^+ < 22.9 \\ 0.17 u_\tau & \tau^+ > 22.9 \end{cases} \quad (9.10)$$

其中， Sc 是颗粒施密特数，或运动粘度与颗粒的布朗扩散系数之比（ ν / D_B ）； u_τ 是由壁面模型计算得出的壁面摩擦速度； τ^+ 是由[86]得出的无量纲停止距离。

$$\tau^+ = \frac{\rho_a (2r_a)^2}{18\mu^2} u_\tau^2 \rho_g \quad (9.11)$$

9.2 气溶胶凝聚

聚结是小气溶胶颗粒变成大气溶胶颗粒的过程，由于碰撞，小颗粒粘在一起，变成大颗粒。**FDS 对气溶胶聚结的实现基于 VICTORIA [87]中的聚结模型**，VICTORIA 是美国国家核管制委员会用于模拟严重事故期间放射性气溶胶迁移的软件包。FDS 中的聚结机制包括布朗机制、重力机制和湍流机制（剪切和惯性）。聚结受以下方程控制。

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^m \Phi(\omega, m - \omega) N(\omega) N(m - \omega) d\omega - N(m) \int_0^\infty \Phi(\omega, m) N(\omega) d\omega - R(m) + S(m) \quad (9.12)$$

在上式中， Φ 是聚结核， $N(m)$ 是大小为 m 的颗粒的数量密度， R 是去除项（如流出、氧化）， S 是来源项（如燃烧）。等式表明，大小为 m 的颗粒的形成速率是两个大小合计为 m 的颗粒碰撞的速率，减去大小为 m 的颗粒与其他颗粒碰撞并变大的速率，减去大小为 m 的颗粒的清除速率，再加上大小为 m 的颗粒的生成速率。解决聚结方程的选定方法是将颗粒大小分为多个分区，并将颗粒大小的积分转换为颗粒分区的求和。通过定义颗粒质量的最大值 m_{max} 和最小值 m_{min} 以及分仓数 M ，可以定义平均分仓质量（bin mass） x ，如下所示[88]。

$$s = \left(\frac{m_{\max}}{m_{\min}} \right)^{1/M}, m_i = sm_{i-1}, x_i = \frac{2m_i}{1+s} \quad (9.13)$$

通过这种分选，集聚方程变为

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{k=1}^M \sum_{j=k}^M \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k} \right) \eta \Phi(j, k) N_j N_k - N_i \sum_{k=1}^M \Phi(j, k) N_k - R_i + S_i \quad (9.14)$$

其中， η （如下图所示）是在相邻粒子仓之间分配质量的函数。

$$\eta = \begin{cases} \frac{x_{i+1} - m_i}{x_{i+1} - x_i} & x_i < m_i \leq x_{i+1} \\ \frac{m_i - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & x_{i-1} < m_i \leq x_i \end{cases} \quad (9.15)$$

聚结内核由布朗聚结项（Br）、重力聚结项（Gr）、剪切聚结项（Sh）和惯性聚结项（In）之和给出。

$$\Phi(m, \omega) = \Phi_{\text{Br}}(m, \omega) + \Phi_{\text{Gr}}(m, \omega) + \sqrt{\Phi_{\text{Sh}}(m, \omega)^2 + \Phi_{\text{In}}(m, \omega)^2} \quad (9.16)$$

当粒子的随机运动使它们相互接触时，就会发生布罗维聚结。计算公式为[87]：

$$\Phi_{\text{Br}} = 4\pi k_b T (B(m) + B(\omega)) (r_m + r_\omega) \text{Fu}(m, \omega) \quad (9.17)$$

其中，Fu 是 Fuchs 因子，B 是粒子流动性。

$$B(m) = \frac{\text{Cn}}{6\pi\mu r_m} \quad (9.18)$$

$$\frac{1}{\text{Fu}(m, \omega)} = \left(\varepsilon_s \frac{r_m + r_\omega}{k_b T (B(m) + B(\omega))} \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi} \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{\omega} \right)} \right)^{-1} + \left(1 + \frac{2\sqrt{(\tilde{a}_m^2 + \tilde{a}_\omega^2)}}{r_m + r_\omega} \right)^{-1} \quad (9.19)$$

$$\tilde{a}_m = \frac{(r_m + a_m)^3 - (r_m^2 + a_m^2)^{3/2}}{3r_m a_m} - r_m \quad (9.20)$$

$$a_m = B(m) \sqrt{\frac{2k_b T m}{\pi}} \quad (9.21)$$

重力聚结是由于较重的颗粒落到较大的颗粒上。这些碰撞的效率受粘滞因子 ε_s 假定为 1) 和碰撞效率 ε_{PK} [87] 的制约。

$$\Phi_{\text{Gr}}(m, \omega) = \varepsilon_s \varepsilon_{PK}(m, \omega) (r_m + r_\omega)^2 |u_g(m) - u_g(\omega)| \quad (9.22)$$

$$\varepsilon_{PK}(m, \omega) = \frac{\min(r_m, r_\omega)^2}{2(r_m + r_\omega)^2} \quad (9.23)$$

$$u_g(m) = g m B(m) \quad (9.24)$$

不同速度的颗粒沿流线运动时会相互接触，从而产生剪切团聚现象[87]。

$$\Phi_{\text{Sh}}(m, \omega) = \varepsilon_s \varepsilon_{PK}(m, \omega) \chi_C^3 (r_m + r_\omega)^3 \sqrt{\frac{8\rho\pi\varepsilon}{15\mu}} \quad (9.25)$$

其中， χ_C 是形状系数（假定为 1）， ε 是湍流动能耗散率。

惯性团聚是由于颗粒因惯性偏离流线并与其他颗粒接触而产生的[87]。

$$\Phi_{\ln}(m, \omega) = \varepsilon_s \varepsilon_{PK}(m, \omega) \chi_C^2(r_m + r_\omega)^2 \left(\frac{512 \rho \pi^3 \varepsilon^3}{15 \mu} \right)^{1/4} \frac{|u_g(m) - u_g(\omega)|}{g} \quad (9.26)$$

9.3 气溶胶擦洗

洗涤是从气相中去除气溶胶。在 FDS 中，气溶胶可以通过喷水进行洗涤。用于定义洗涤效率的相关性是基于 MELCOR 中的安全壳喷雾洗涤模型[89]。网格单元中的气溶胶洗刷率基于水滴在时间步长内扫过网格单元的体积以及该水滴的去除效率 ε 。在一个时间步长内，网格单元被扫过的体积分数 F 取决于液滴的投影表面积及其速度：

$$F = \frac{\min(C \pi r_p^2 (\delta x_i \delta y_j \delta z_k)^{2/3}) u_p \Delta t_p}{\delta x_i \delta y_j \delta z_k} \quad (9.27)$$

其中， r_p 是液滴半径， C 是液滴的加权系数， u_p 是液滴速度， Δt_p 是液滴当前路段的时间步长（如果液滴将在全局时间步长内穿过单元边界，则可使用比全局时间步长 Δt 更小的时间步长来评估液滴运动）。

去除效率由拦截效率 ε_{in} 和撞击效率 ε_{im} 的乘积总和得出。两者都是粘性流（vis）和势流（pot）行为之和的结果。

$$\varepsilon_{in,vis} = \left(1 + \frac{r_a}{r_p} \right)^2 \left(1 - \frac{3}{2 \left(1 + \frac{r_a}{r_p} \right)} + \frac{1}{2 \left(1 + \frac{r_a}{r_p} \right)^3} \right) \quad (9.28)$$

$$\varepsilon_{in,pot} = \left(1 + \frac{r_a}{r_p} \right)^2 - \left(1 + \frac{r_a}{r_p} \right) \quad (9.29)$$

$$\varepsilon_{im,vis} = \begin{cases} 0 & \text{Stk} \leq 1.214 \\ \left(1 + \frac{0.75 \ln(2\text{Stk})}{\text{Stk} - 1.214} \right)^{-2} & \text{Stk} > 1.214 \end{cases} \quad (9.30)$$

$$\varepsilon_{im,pot} = \begin{cases} 0 & \text{Stk} \leq 0.0834 \\ \left(\frac{\text{Stk}}{\text{Stk} + 0.5} \right)^2 & \text{Stk} > 0.2 \end{cases} \quad (9.31)$$

其中 Stk 是斯托克斯数。对于其他 Stk 值， $\varepsilon_{im,pot}$ 是内插值。粘性值和势能值的组合为

$$\varepsilon_x = \frac{\varepsilon_{x,vis} + \varepsilon_{x,pot} (\text{Re}_p / 60)}{1 + (\text{Re}_p / 60)} \quad (9.32)$$

总效率为

$$\varepsilon = 1 - (1 - \varepsilon_{in})(1 - \varepsilon_{im}) \quad (9.33)$$

因此，清除率的计算公式为

$$\lambda = \frac{F \varepsilon Y_a \rho}{\Delta t} \quad (9.34)$$

9.4 气溶胶凝结

如果将具有液体特性的气体物种定义为气溶胶，FDS 将计算该物种的凝结和蒸发。这是通过定义两个跟踪物种来实现的：一个是气相的非气溶胶物种，另一个是冷凝相的气溶胶物种。冷凝和蒸发将同时在气相和域中的任何固体表面进行计算。

9.4.1 气体凝结

如果气室中存在可冷凝的蒸汽种类，则应使用公式(10.30)检查气室的平衡蒸汽分数，其中 T_p 假设为气室温度。如果单元中的质量分数超过平衡分数，则会发生冷凝。如果单元中的质量分数小于平衡质量分数，则会发生蒸发。

蒸发率是通过公式(10.31)至公式(10.32)中定义的传质系数计算得出的。蒸发表面积由单元中的冷凝水滴总数决定，该总数根据存在的水蒸气质量和用户定义的气溶胶颗粒直径计算得出。

计算冷凝速率时，假定传质系数与蒸发相同。由于可能没有现成的液滴可以凝结，因此在没有现成凝结蒸汽的单元中使用的成核点浓度为每立方厘米，假定这些成核点的直径与凝结物质的直径相同。

蒸发或冷凝的总质量与冷凝和气相物质的体积质量源项 $\dot{m}_{b,\alpha}'''$ 相加。体积能量源项 \dot{q}_b''' 是质量源项乘以汽化热 h_v ，其中冷凝产生正能量源项，蒸发产生负能量源项。

对散度的贡献根据公式(10.36)加入 D_SOURCE 项。由于凝聚相和气相的分子量相同，方程中的第一项为零。

对于凝聚相，辐射吸收是按照第 7.3 节计算的。

9.4.2 壁面冷凝

壁单元的冷凝和蒸发过程与气体单元类似。该过程从平衡蒸汽检查开始，假定 T_b 为壁面温度。蒸发和冷凝速率基于壁面函数[90]。

$$Y_\alpha^+ = \frac{\rho u_\tau}{\dot{m}_{\text{dep},\alpha}''} (Y_\alpha - Y_{\alpha,\ell}) \quad (9.35)$$

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau \delta n / 2}{\mu} \quad (9.36)$$

$$Y_\alpha^+ = \text{Sc} y^+ e^{-\Gamma} + (2.12 \ln(y^+) + (3.85 \text{Sc}^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln(\text{Sc})) e^{-1/\Gamma} \quad (9.37)$$

$$\Gamma = \frac{0.01 (\text{Sc} y^+)^4}{1 + 5 \text{Sc}^3 y^+} \quad (9.38)$$

蒸发或冷凝的总质量加入沉积壁质量源项 $\dot{m}_{\text{dep},\alpha}''$ 。所需的能量被添加到壁面冷凝能量源项中，该项考虑了气化热和从气体温度到壁面温度的焓变。

$$\dot{q}_{\text{dep},\alpha}'' = \dot{m}_{\text{dep},\alpha}'' (h_v(T_w) + h_{s,\alpha}(T_g) - h_{s,\alpha}(T_w)) \quad (9.39)$$

对于 D_SOURCE 项，只有公式(10.36)中的第一项适用，因为所有相变能量都来自壁面单元。

10 拉格朗日粒子

拉格朗日粒子用于表示数值网格上无法解析的各种物体。液滴就是最常见的例子。本章概述了拉格朗日粒子之间的传输、尺寸分布以及质量、动量和能量传递的处理方法。本章的计算方法与[91]中的分散离散元计算方法非常接近。

10.1 气相中的粒子传输

在气相动量方程式(5.36)中，力项 \mathbf{f}_b 代表从粒子传递到气体的动量。将网格单元中每个粒子传递的力相加，除以单元体积 V 即可得到：

$$\mathbf{f}_b = \frac{1}{V} \sum \left[\frac{\rho}{2} C_d A_{p,c} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}| - \frac{dm_p}{dt} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \right] \quad (10.1)$$

其中， C_d 是阻力系数， $A_{p,c}$ 是粒子横截面积， r_p 是粒子半径， \mathbf{u}_p 是粒子速度， m_p 是粒子质量， \mathbf{u} 是气体速度， ρ 是气体密度。下标 “b” 代表 “体积”，即单元中的粒子代表拖曳在气体上的体积。

粒子加速度为

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{g} - \frac{1}{2} \frac{\rho C_d A_{p,c}}{m_p} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}| \quad (10.2)$$

粒子位置定义为如下表达形式

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p \quad (10.3)$$

上述模型的精确求解过程见附录 I。阻力系数（默认值基于球体）是基于粒子直径 $D(2r_p)$ 的局部雷诺数的函数

$$C_d = \begin{cases} 24 / \text{Re}_D & \text{Re}_D < 1 \\ 24(0.85 + 0.15 \text{Re}_D^{0.687}) / \text{Re}_D & 1 < \text{Re}_D < 1000 \\ 0.44 & 1000 < \text{Re}_D \end{cases} \quad (10.4)$$

$$\text{Re}_D = \frac{\rho |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}| 2r_p}{\mu(T)} \quad (10.5)$$

其中， $\mu(T)$ 是温度 T 时空气的动态粘度[91]⁸。对于圆柱形颗粒，根据 Schlichting[92]提供的数据得出以下相关关系：

$$C_d = \begin{cases} 10 / \text{Re}_D^{0.8} & \text{Re}_D < 1 \\ 10(0.6 + 0.4 \text{Re}_D^{0.8}) / \text{Re}_D & 1 < \text{Re}_D < 1000 \\ 1 & 1000 < \text{Re}_D \end{cases} \quad (10.6)$$

对于薄圆盘状颗粒，以下相关性是根据 Hoerner[93]中的数据得出的：

⁸ 请注意，公式(10.4)第二行中的 0.85 是为了确保 $\text{Re}_D = 1$ 时函数关系的连续性而插入的。

$$C_d = \frac{20.37}{\text{Re}_D} + \frac{1.17}{1+1/\text{Re}_D} \quad (10.7)$$

其中，正方形直角坐标系颗粒的直径 D 取为水力直径 $A_{p,c}^{1/2}$ 。

此外，还需要进行额外的修正，以考虑到尾流效应[94]和液滴变形[95]导致的阻力减小。

10.1.1 使用拉格朗日粒子表示植被

在某些应用中，使用拉格朗日粒子来表示静止植被（如草或树叶）或空中植被（如燃烧物）比较方便。通常情况下，这些不同类型的植被被分为不同类别的燃料“元素”，每个网格单元中的每个燃料“元素”都由一个代表性粒子来表示。每个代表性颗粒都对体积力项有贡献：

$$\mathbf{f}_b = \sum_e \mathbf{f}_{b,e} ; \quad \mathbf{f}_{b,e} = \frac{\rho}{2} C_d C_{s,e} \beta_e \sigma_e (\mathbf{u}_{p,e} - \mathbf{u}) |\mathbf{u}_{p,e} - \mathbf{u}| + \dot{m}_{p,e}''' (\mathbf{u}_{p,e} - \mathbf{u}) \quad (10.8)$$

带下标“e”的术语指的是某一类燃料元素，是根据几何或经验确定的。形状系数 $C_{s,e}$ 是粒子的投影截面积 $A_{p,c}$ 与表面积 $A_{p,s}$ 之比。完美球体的形状系数为 $\pi r^2 / 4\pi r^2 = 1/4$ ，但对于实际植被来说，形状系数是一个经验值，同时考虑到形状和方向。例如，松针的横截面积因其方向不同而不同。阻力系数 C_d 是根据经验得出的，它考虑到了密集物体的几何形状和阴影效应。它通常表示为一个常数，而不是雷诺数的函数。 β_e 是体积分数，即固体质量所占体积与植被总体积之比，有时也称为堆积比。 σ_e 是单个颗粒的表面体积比。 $\dot{m}_{p,e}'''$ 是该特定植被元素单位体积的质量生成率。

描述植被几何特性的便捷方法是指定表面体积比 σ_e 、体积（堆积）比 β_e 和假定形状（如球体或圆柱体）。体积分数有时用单位体积的质量或体积密度来表示，即 $m''' = \rho_e \beta_e$ ，其中 ρ_e 是固体的密度。根据这些信息和以下关系式

$$C_{s,e} = \frac{A_{p,c}}{A_{p,s}} ; \quad \beta_e = \frac{n_{p,e} V_p}{V} = \frac{m'''}{\rho_e} ; \quad \sigma_e = \frac{A_{p,s}}{V_p} \quad (10.9)$$

我们可以将式(10.8)中的阻力表达式转换为式(10.1)中的等效表达式，在式(10.1)中，单个颗粒元素表示为 $n_{p,e}$ 个球体或圆柱体，占据一个网格单元的体积 V 。在模型中，每个网格单元每个燃料元素只需有一个加权颗粒就足以代表该植被类别的所有实际颗粒。

公式(10.8)的另一个简化方法是将各个项合并为一个单一的正面面积密度

$$\kappa_e = C_{s,e} \beta_e \sigma_e = \frac{n_{p,e} A_{p,c}}{V} \quad (10.10)$$

κ_e 也可以看作是计算热辐射吸收时的吸收系数。实际上， κ_e 并不是根据公式(10.10)确定的。相反，它是通过测量穿透厚度为 L 的植被板的阳光相对量而得到的：

$$W = e^{-\kappa_e L} \quad (10.11)$$

这里， W 是指阳光穿过植被形成的阴影图中“白色”的相对面积。也可以认为是透过 L 厚度的树冠看到的蓝天部分。它通常被称为正面面积指数或正面面积分数，不要与正面面积密度 κ_e 混淆。

10.1.2 减少阻力

通常，拉格朗日粒子模型假定粒子之间是相互独立的。但是，如果喷雾的密度足够大，单个粒子会通过空气动力相互作用相互影响。目前的欧拉-拉格朗日模型无法捕捉到这些影响，原因有二。首先，拉格朗日粒子不占据欧拉空间的体积。其次，在大多数实际模拟中，分离长度都是亚网格尺度。当粒子平均间距小于 10 直径时，空气动力相互作用开始产生影响[96][97]。这相当于粒子体积分数 α 约为 0.01。水雾喷雾有时也能达到如此高的体积分数。如果喷雾的密度更大，则需要考虑粒子间的碰撞或四向耦合。

在两个直径相同的粒子直接排成一条直线的情况下，假设第二个粒子受到的阻力减小：[94]：

$$C_d = C_{d,0} \frac{F}{F_0} \quad (10.12)$$

其中， $C_{d,0}$ 是单颗粒阻力系数， F/F_0 是尾随颗粒与孤立颗粒的流体动力比：

$$\frac{F}{F_0} = W \left[1 + \frac{\text{Re}}{16} \frac{1}{(L/D - 1/2)^2} \exp\left(-\frac{\text{Re}}{16} \frac{1}{(L/D - 1/2)}\right) \right] \quad (10.13)$$

Re 是单粒子雷诺数， L 是粒子中心之间的距离， W 是尾随粒子中心处的非维、非扰动唤醒速度

$$W = 1 - \frac{C_{d,0}}{2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\text{Re}}{16} \frac{1}{(L/D - 1/2)}\right) \right] \quad (10.14)$$

颗粒中心之间的平均分离距离 L/D 是根据局部颗粒体积分数 α 计算得出的，计算公式如下：

$$L/D = (\pi/6\alpha)^{\frac{1}{3}} \quad (10.15)$$

这一简单近似假设粒子在每个计算单元中均匀分布[98]。实际上，喷雾并不是单分散的，相互作用的粒子之间的分离距离也各不相同。在模拟中，只有当局部液滴体积分数超过 1×10^{-5} 时，才会使用公式(10.12)中的阻力降低系数。

Prahl 等人[96]提供了另一种减少阻力的方法，他们通过详细的数值模拟研究了稳定流或脉动流中两个固体球体之间的相互作用。根据他们的研究，上述方程大大低估了小滴间距时的阻力减小效果。研究发现，流入的脉动降低了阻力减小的效果。在距离较大时，两个结果相似，Ramírez-Muñoz 相关性显示出更多的阻力减小。这并不奇怪，因为在公式(10.13)和(10.14)中，使用的是轴对称主体后完全发展的轴对称尾流的速度剖面图来进行阻力减小修正。在短距离内，尾流没有完全展开，因此该假设不成立。

10.2 液滴大小分布

液体喷雾的累积体积分布由对数正态分布和 Rosin-Rammler 分布组合表示[99]：

$$F_v(D) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^D \frac{1}{\sigma D'} \exp\left(-\frac{[\ln(D'/D_{v,0.5})]^2}{2\sigma^2}\right) dD' & (D \leq D_{v,0.5}) \\ 1 - \exp\left(-0.693 \left(\frac{D}{D_{v,0.5}}\right)^\gamma\right) & (D > D_{v,0.5}) \end{cases} \quad (10.16)$$

其中， $D_{v,0.5}$ 是液滴体积直径的中值（即一半的质量由直径为 $D_{v,0.5}$ 或更小的液滴承载）， γ 和 α 是经验常数，分别约等于 2.4 和 0.48⁹。另外，用户也可以使用表格输入数据指定任何形式的粒度分布。

水滴直径中值是洒水器喷口直径、工作压力和几何形状的函数。Factory Mutual 公司的研究得出了水滴直径中值的相关性[100]。

$$\frac{D_{v,0.5}}{d} \propto \text{We}^{-\frac{1}{3}} \quad (10.17)$$

其中， d 是喷嘴的孔径。孔口韦伯数（惯性力与表面张力之比）的计算公式为

⁹ 如果 $\sigma = 2/(\sqrt{2\pi}(\ln 2)\gamma) = 1.15/\gamma$ ，则 Rosin-Rammler 分布和对数正态分布平滑连接。

$$We = \frac{\rho_p u_p^2 d}{\sigma} \quad (10.18)$$

其中, ρ_p 是液体密度, u_p 是排放速度, σ 是液体表面张力(水在 20 °C 时为 72.8×10^{-3} N/m)。排出速度可通过质量流量计算得出, 质量流量是工作压力和称为 K 系数的孔口系数的函数。FM 报告称, 公式(10.17)中的比例常数似乎与流速和工作压力无关。他们在研究中测试了三种不同的喷头, 孔径分别为 16.3 毫米、13.5 毫米和 12.7 毫米, 常数分别约为 4.3、2.9 和 2.3。两个较小喷头的撞击板有缺口, 而最大喷头的撞击板没有缺口[100]。

在实际自动喷水灭火系统中, 工作压力受开放喷嘴数量的影响。通常情况下, 当第一个喷头启动时, 管道中的压力较高, 而当越来越多的喷头启动时, 管道中的压力就会降低。管道压力会对流速、液滴速度和液滴大小分布产生影响。FDS 无法预测管道压力的变化, 应由用户指定。以下依赖关系用于更新质量流量、液滴速度和中值直径的液滴边界条件:

$$\dot{m}_p \propto p^{1/2} ; u_p \propto p^{1/2} ; D_{v,0.5} \propto p^{-1/3} \quad (10.19)$$

液滴直径从给定的尺寸分布中随机选择。累积数量分数 (CNF) F_n 是根据累积体积分数 F_v 确定的, 计算公式如下

$$F_n(D) = \int_0^D \frac{F'_v(D')}{D'^3} dD' / \int_0^\infty \frac{F'_v(D')}{D'^3} dD' ; F'_v \equiv \frac{dF_v}{dD} \quad (10.20)$$

图 10-1 显示了 Rosin-Rammler/对数正态函数和由此得出的累积数字分数。

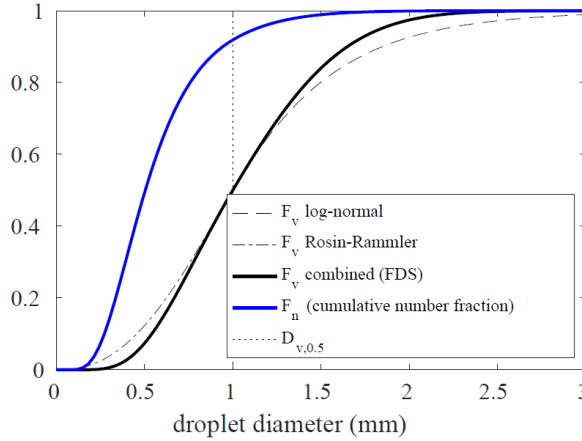


图 10-1 典型工业规模洒水器水滴大小分布的累积体积分数和累积数量分数函数。中位体积直径 $D_{v,0.5}$ 为 1 毫米, $\sigma = 0.48$, $\gamma = 2.4$ 。

液滴直径的选择使用了分层抽样技术, 以确保液滴跨越整个尺寸范围, 即使液滴的数量相对较少。如果不进行分层, 分布的尾部就很难体现。**选择液滴大小的程序如下:**

1. 假设液体的质量流量为 \dot{m} , 液滴插入的时间间隔为 δt , 每个时间间隔插入的液滴数量为 N 。
2. 将液滴直径范围划分为若干宽度相等的分区。
3. 随机选取 N 个整数 n_i , 范围从 1 到分仓总数。
4. 在 0 和 1 之间选择 N 个均匀分布的实数, 然后计算 N 个随机液滴直径:

$$D_i = F_n^{-1} \left[F_n(D_{n_i, \min}) + \mathcal{U}(0,1) (F_n(D_{n_i, \max}) - F_n(D_{n_i, \min})) \right] \quad (10.21)$$

其中, $\mathcal{U}(0,1)$ 是介于 0 和 1 之间的均匀分布实数, $D_{n_i, \min}$ 和 $D_{n_i, \max}$ 是第 n_i 仓的最小和最大直径。

5. 计算每个液滴的加权常数 $C_i = F_n(D_{n_i, \max}) - F_n(D_{n_i, \min})$ 。

6. 计算全局加权常数 C ，以保持总体质量平衡：

$$\dot{m}\delta t = C \sum_{i=1}^N C_i \frac{4}{3} \pi \rho_p \left(\frac{D_i}{2} \right)^3 \quad (10.22)$$

每个液滴传递的质量和热量将乘以权重系数 C 。

10.3 喷雾初始化

液滴沿着一个球形表面进入模拟，该表面的直径与喷嘴孔口的距离是指定的。假设液滴在此阶段已完全雾化。液滴初始位置的经度（ $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ）从均匀分布中随机选择。纬度， $0 \leq \phi \leq \pi$ ，从以下分布中随机选择：

$$f(\phi) = \exp \left[-\beta \left(\frac{\phi - \mu}{\phi_{\max} - \phi_{\min}} \right)^2 \right] \quad (10.23)$$

请注意， $\phi = 0$ 是球体的南极。默认情况下，参数 $\phi_{\min} = 0$ 。参数 μ 控制分布峰值的位置，可用于近似空心锥喷嘴。默认情况下， $\mu = \phi_{\min} = 0$ ，但如果 $\phi_{\min} > 0$ ，除非另有说明，否则 μ 将设置为 ϕ_{\min} 和 ϕ_{\max} 的平均值。传播参数 β 默认为 5。如果 $\beta = 0$ ，则分布均匀。当 β 变大时，在 μ 处的分布近似于三角函数。所有液滴在表面法线方向上的初始速度相同。

10.4 液滴的加热和蒸发

液滴既可以是离散的气载球体，也可以是在润湿固体上形成的薄液膜元素。这些薄膜“液滴”仍作为拉格朗日粒子单独跟踪，但传热和传质系数不同。在接下来的讨论中，“液滴”一词将用于描述这两种形式。

在气相求解器的一个时间步长内，特定网格单元中的液滴会蒸发形成气态物质 α 。蒸发率是液相平衡蒸汽质量分数 $Y_{\alpha,\ell}$ 、局部气相蒸汽质量分数 $Y_{\alpha,g}$ 、液滴温度（假定均匀） T_p 和局部气体温度 T_g 的函数。下标“g”指的是液滴所占单元的平均量；“p”指的是液滴；如果液滴附着在固体表面，“s”指的是温度为 T_s 的表面。气体、液体以及可能的固体表面之间的质量和能量传递可用以下方程组描述[101]

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p h_m \rho_f (Y_{\alpha,\ell} - Y_{\alpha,g}) \quad (10.24)$$

$$\rho_g V \frac{dY_{\alpha,g}}{dt} = -(1 - Y_{\alpha,g}) \frac{dm_p}{dt} \quad (10.25)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p c_p} \left[\dot{q}_r + A_p h_g (T_g - T_p) + A_p h_s (T_s - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_v \right] \quad (10.26)$$

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{1}{m_g c_g} \left[A_p h_g (T_p - T_g) - \frac{dm_p}{dt} (h_{\alpha,p} - h_{\alpha,g}) \right] \quad (10.27)$$

$$\frac{dT_s}{dt} = -\frac{A_p h_s}{m_s c_s} (T_p - T_g) \quad (10.28)$$

液滴被认为是物种 α 的纯液体（通常是水或燃料），具有汽化热 h_v 和质量 m_p 。 ρ_g 是气体密度； ρ_f 是颗粒膜密度； c_p 是液体比热； c_g 是气体比热； h_g 是液滴与气体之间的传热系数； h_s 是液滴与固体之间的传热系数； \dot{q}_r 是液滴的辐射加热速率（见公式(10.41)）； $h_{\alpha,p}$ 是颗粒温度下的蒸汽比焓； $h_{\alpha,g}$ 是气体温度下的蒸汽比焓。液滴的表面积取决于它是悬浮在空气中还是构成固体表面膜层

的一部分：

$$A_p = \begin{cases} 4\pi r_p^2 & \text{airborne droplet} \\ m_p / (\delta \rho_p) & \text{surface film} \end{cases} \quad (10.29)$$

其中 δ 是固体表面的液层厚度。公式(10.28)仅适用于液滴附着在固体表面的情况，在这种情况下，液滴构成薄膜层的一部分，暴露在气体中的面积如公式(10.29)所示，暴露在固体中的面积相同。公式(10.28)中的 m_s 是固体表面层的质量， c_s 是固体比热。

气体的蒸汽质量分数 $Y_{\alpha,g}$ 由气相质量输运方程求得，液体平衡蒸汽质量分数由 Clausius-Clapeyron 方程求得

$$X_{\alpha,\ell} = \exp \left[\frac{h_v W_\alpha}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_p} \right) \right] ; \quad Y_{\alpha,\ell} = \frac{X_{\alpha,\ell}}{X_{\alpha,\ell} (1 - W_a / W_\alpha) + W_a / W_\alpha} \quad (10.30)$$

$X_{\alpha,\ell}$ 是平衡蒸汽体积分数， W_α 是气态物质 α 的分子量， W_a 是空气的分子量， R 是通用气体常数， T_b 是标准大气压下液体的沸腾温度。

液体和气体之间的质量和热量传递是通过类似的经验关联来描述的。传质系数 h_m 由经验关系描述[75][102]：

$$h_m = \frac{Sh D_{\ell g}}{L} \frac{B_M}{Y_{\alpha,\ell} - Y_{\alpha,g}} ; \quad B_M = \frac{Y_{\alpha,\ell} - Y_{\alpha,g}}{1 - Y_{\alpha,\ell}} \quad (10.31)$$

$$Sh = \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} Sh_0 ; \quad Sh_0 = \begin{cases} 2 + 0.6 Re_D^{1/2} Sc^{1/3} & \text{airborne droplet} \\ 0.0296 Re_L^{4/5} Sc^{1/3} & \text{surface film} \end{cases} \quad (10.32)$$

B_M 是 Spalding 传质数[103]， Sh_0 是低质量通量舍伍德数， Sh 是吹气时的舍伍德数， $D_{\ell g}$ 是液体蒸汽与周围气体（通常假设为空气）之间的二元扩散系数， L 是长度尺度，等于液滴直径或表面薄膜的 1 米， Re_D 是液滴的雷诺数（基于直径 D 和空气-液滴相对速度）， Re_L 是基于长度尺度 L 的雷诺数， Sc 是施密特数（ $\nu / D_{\ell g}$ ，在所有情况下假设为 0.6）。请注意，质量传递系数 h_m 是为了使式(10.24)所给出的质量通量模型恢复 Sazhin[102]的式(108)，但仍在隐式时间更新范围内工作。

液滴与气体之间的传热系数也存在类似关系[102]：

$$h_m = \frac{Nu k_g}{L} ; \quad Nu = \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} Nu_0 ; \quad Nu_0 = \begin{cases} 2 + 0.6 Re_D^{1/2} Pr^{1/3} & \text{airborne droplet} \\ 0.0296 Re_L^{4/5} Pr^{1/3} & \text{surface film} \end{cases} \quad (10.33)$$

其中， Nu_0 是低质量通量的努塞尔特数， Nu 是吹气时的努塞尔特数， k_g 是气体的热导率， Pr 是分子的普朗特数， $Pr = \mu_f c_{p,f} / k_f$ ，其特性在薄膜温度 $T_f = T_s + \frac{1}{3}(T_g - T_s)$ 下进行评估。长度尺度 L 是液滴在空气中的直径 D ，如果液滴形成液面层，长度尺度为 1 米。

液滴与固体表面之间的传热系数 h_s 是用户指定的常数或经验函数[75]：

$$h_s = \max \left(100, 0.0296 Re_L^{4/5} Pr^{1/3} \frac{k_p}{L} \right) ; \quad Re_L = \frac{\rho_p \|\mathbf{u}_p\| L}{\mu_p} \quad (10.34)$$

表面液体速度 $\|\mathbf{u}_p\|$ 是用户指定的水平或垂直表面上的恒定液滴速度。长度 L 取为 1 米。 $100 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ 的最小值是一个数量级的估计值，适用于用户指定的固体表面液滴速度非常低的情况。

液滴与周围气体（或固体表面）之间的质量和能量交换是逐个液滴计算的。在计算出每个液滴

的温度后,适当数量的汽化液体被定义为给定网格单元的源项,任何传导至固体的热量被存储为对流项,热量传导和气体质量增加的净效应被定义为散度项。

质量项和散度项将在后面的章节中讨论。[方程\(10.24\)至方程\(10.27\)](#)作为一组耦合隐式方程在气相时间步长内求解。有关这一求解过程的详细信息,请参见附录 M。

10.4.1 过滤体积源项

质量输运方程(式(3.5))和散度表达式(式(3.10))中所需的质量和能量的滤波体积源项,是由给定单元的单个粒子源贡献除以 LES 时间步长 δt_{LES} 和局部单元体积 V_c 求和得到的。体积质量和能量源项分别为

$$\dot{m}_{b,\alpha}''' = -\frac{\sum_p \sum_n \delta m_p^n}{\delta t_{\text{LES}} V_c} ; \quad \dot{q}_b''' = -\frac{\sum_p \sum_n \delta q_p^n}{\delta t_{\text{LES}} V_c} \quad (10.35)$$

其中 n 代表液滴质量和能量方程积分的子时间步长。对 p 的求和是对单元内所有粒子的求和。

10.4.2 拉格朗日对速度散度的贡献

在实践中,经过过滤的质量和能量源项对速度散度约束的贡献被收集到代码中的一个单一项中,用 D_{SOURCE} 表示

$$D_{\text{SOURCE}} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} \dot{m}_{b,\alpha}''' + \frac{1}{\rho c_p T} \left(\dot{q}_b''' - \sum_{\alpha} \dot{m}_{b,\alpha}''' \int_{T_b}^T c_{p,\alpha} dT' \right) \quad (10.36)$$

嵌入公式(4.26)中。

10.5 水灭火

前面几节介绍了从液滴到气体、固体或两者的热传递。虽然各传热系数的数值存在一定的不确定性,但基本的物理原理还是相当清楚的。然而,当液滴遇到燃烧表面时,简单的传热相关性就变得更加难以应用。原因在于水不仅冷却了表面和周围的气体,而且还改变了燃料的热解速率。如果燃料的表面是平面的,则可以将热分解速率的下降作为反馈到表面的总热量下降的函数来描述。遗憾的是,火灾应用中的大多数燃料都是多组分固体,几何形状复杂,计算网格无法解决。

10.5.1 液滴在表面的迁移

当液滴撞击到固体水平表面时,会被随机分配一个水平方向,并以固定速度移动,直到到达边缘,然后以相同的固定速度直落下来。据测量,水的这种“滴落”速度约为 0.5 米/秒 [104][105]。假定“液滴”附着在表面上时会形成一层液体薄膜,将热量传递给固体,并将热量和质量传递给气体。薄膜厚度 δ 的计算公式为

$$\delta = \max \left(\delta_{\min}, \sum \frac{4}{3} \frac{\pi r_p^3}{A} \right) \quad (10.37)$$

其中 A 是液滴附着的壁胞面积。假设最小薄膜厚度 δ_{\min} 为 1×10^{-5} 。这可以防止极少量的液体在整个壁室宽度上扩散。还假设液体对热辐射不透明。

10.5.2 水导致热解率降低

迄今为止,该领域的大部分工作都是在 Factory Mutual 公司完成的。[Yu 等人的论文\[106\]](#)是这方面的一篇重要文献。作者考虑了数十种不同几何形状和喷水率的货架存储商品火灾,并通过几个全局参数描述了灭火率的特征。他们的分析得出了喷淋器启动后货架存储火灾总热量释放率的表达式

$$\dot{Q} = \dot{Q}_0 e^{-k(t-t_0)} \quad (10.38)$$

其中, \dot{Q}_0 是在 t_0 时的总放热率, k 是与燃料有关的常数。该分析基于全局水流量和燃烧率。

公式(10.38)既考虑了非燃烧表面的冷却，也考虑了燃烧表面热释放率的降低。在 FDS 模型中，未燃烧表面的冷却和热释放率的降低都是局部计算的。因此，采用全局抑制规则并不合适。不过，从局部和全局都可以观察到水的指数抑制性质，因此假定单位面积的局部热释放率可以用以下形式表示[104][105]

$$\dot{q}''(t) = \dot{q}_0''(t) e^{-\int k(t) dt} \quad (10.39)$$

其中， $\dot{q}_0''(t)$ 是无水时单位面积燃料的燃烧率， $k(t)$ 是单位面积当地水质量 m_w'' 的线性函数，单位为 kg/m^2

$$k(t) = a m_w''(t) \text{ s}^{-1} \quad (10.40)$$

请注意， a 是一个经验常数，取决于固体燃料的材料特性及其几何构造。

10.6 使用拉格朗日粒子模拟复杂物体

有许多参与火灾的真实物体无法被简单地模拟为符合直线网格的实体障碍物。例如，电线、干燥的灌木丛、树枝等都是潜在的燃料，它们无法用实体立方体很好地表示，这不仅是因为几何形状不对，还因为实体限制了热气在复杂的物体集合中的流动。此外，窗纱等物体也会造成流动限制，但通常无法在工程计算中解决。作为解决这一问题的潜在方法，可以将这些物体建模为离散的颗粒（球形、圆柱形或小片状）。每个颗粒都可以分配一个表面类型，其方法与符合数值网格的固体障碍物的方法基本相同。粒子假定具有热厚度，但为简单起见，粒子内的热传导假定为圆柱、球面或笛卡尔坐标系中的一维热传导。

粒子通过辐射传递方程中的附加汇项与辐射场相互作用。对于指数为 ijk 的网格单元，综合辐射强度的降低率为

$$(-\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r'')_{ijk} = \sum \kappa_p (U_{ijk} - 4\sigma T_p^4) \quad (10.41)$$

这里的求和是对单元内所有粒子的求和。单个粒子的强度方程见公式(7.42)。

单个粒子的有效吸收系数为

$$\kappa_p = \frac{\varepsilon_p A_p}{4\delta x \delta y \delta z} \quad (10.42)$$

其中， ε_p 是粒子的发射率， A_p 是粒子的表面积， $\delta x \delta y \delta z$ 是单元的体积。粒子表面的净辐射热通量为

$$\dot{q}_{r,p}'' = \varepsilon_p \left(\frac{U_{ijk}}{4} - \sigma T_p^4 \right) \quad (10.43)$$

10.6.1 多孔介质（过滤器、筛网、金属网和类似材料）

空气过滤器、滤网、格栅和类似的流动障碍物都可视为多孔介质的一种。一般来说，形成多孔介质的材料尺寸将小于网格尺寸（例如，直径为 100 微米的过滤纤维在多厘米的网格上）。因此，没有简单的方法使用固体障碍物对这些材料进行建模。不过，拉格朗日粒子可以用来表示这些材料的阻力和质量。将粒子放置在一个平面或体积中，并赋予粒子一个多孔介质阻力定律，就可以模拟多孔介质的影响。通过多孔介质的长度 Δx 上的压降由[107]给出：

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{\mu}{K} u + \rho \frac{Y}{\sqrt{K}} u^2 \quad (10.44)$$

其中 K 是渗透常数， Y 是惯性常数， u 是滤网的法向速度， ρ 是密度， μ 是气体的粘度。在非各向同性介质的情况下，常数 K 和 Y 将随流动方向而变化。公式(5.36)中的力矢量 \mathbf{f}_b 代表从筛网传递到气体的动量：

$$\mathbf{f}_b = \left(\frac{\mu}{K} + \rho \frac{Y}{\sqrt{K}} |\mathbf{u}| \right) \mathbf{u} \quad (10.45)$$

对于滤网、光栅和类似的薄多孔材料的特殊情况，其渗透率和惯性常数与滤网孔隙率有实验关联。 K 和 Y 是筛网孔隙率（自由面积/总面积） ϕ 的函数：[108]：

$$K = 3.44 \times 10^{-9} \phi^{1.6} \text{m}^2 \quad ; \quad Y = 0.043 \phi^{2.13} \quad (10.46)$$

对于筛网，力矢量必须考虑实际筛网厚度 l 小于网格单元厚度的情况：

$$\mathbf{f}_b = l \left(\frac{\mu}{K} + \rho \frac{Y}{\sqrt{K}} |\mathbf{u}| \right) \left(\frac{u}{\delta x}, \frac{v}{\delta y}, \frac{w}{\delta z} \right) \quad (10.47)$$

这个力项实质上是将压降分散到网格单元的宽度上。

10.7 湍流扩散

10.7.1 无质量示踪器

亚网格尺度湍流运动对拉格朗日粒子速度和位置的影响可以用随机行走模型来解释[109]。示踪粒子的位置服从随机微分方程

$$d\mathbf{x}^* = \left[\tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{\bar{\rho}} \nabla(\bar{\rho} D_t) \right] dt + \sqrt{2D_t} d\mathbf{W} \quad (10.48)$$

其中， \mathbf{x}^* 表示粒子位置（星号表示粒子属性）， $\tilde{\mathbf{u}}$ 是解析的 LES 速度， D_t 是湍流扩散率（取自涡粘模型等）， \mathbf{W} 是独立的维纳过程。请注意，如果不存在湍流扩散，粒子就会跟随解析流。加在解析速度上的项表示确定性平均漂移，随机漫步项（Wiener 过程）表示未解析湍流运动的重定向效应。

对于那些不熟悉随机微分方程的人来说，维纳过程在数值上可以理解为 $d\mathbf{W}(t) = (\delta t)^{1/2} \boldsymbol{\zeta}(t)$ ，在极限 $\delta t \rightarrow 0$ ，其中 $\boldsymbol{\zeta}(t)$ 是一个独立的标准化高斯随机变量[15]。在 FDS 中， $\boldsymbol{\zeta}(t)$ 是由 Box-Muller 变换产生的[110]。

10.7.2 大质量粒子

对于大质量粒子，不使用随机行走模型。取而代之的是，在阻力计算中使用的流体速度会增加一个各向同性的速度波动，这个速度波动来自对子网格动能的估计。根据文献[111]，公式(10.1)和(10.2)中使用的气体速度为

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} + u' \boldsymbol{\zeta} \quad (10.49)$$

其中， $\tilde{\mathbf{u}}$ 是解析的 LES 速度， $u' = \sqrt{\frac{2}{3} k_{sgs}}$ ， $\boldsymbol{\zeta}$ 的分量是独立的标准化高斯随机变量（均值为零，方差为单位），由 Box-Muller 变换生成[110]。根据湍流粘度估算的子网格动能为 $k_{sgs} = (\mu_t / (\rho C_v \Delta))^2$ ； $C_v = 0.1$ 是 Deardorff 涡流粘度系数。

11 火灾探测设备

火灾探测系统可预测火灾造成的热环境，但它依赖于描述各种火灾探测设备启动情况的经验模型。本节将介绍这些模型。

11.1 喷洒器

自动消防水喷淋管道传感元件（或“连接件”）的温度是根据 Heskestad 和 Bill[112]提出的微分方程估算得出的，其中还加入了一个项，以考虑到连接件被先前启动的水喷淋管道气流中的水滴冷却的情况。

$$\frac{dT_l}{dt} = \frac{\sqrt{|\mathbf{u}|}}{RTI} (T_g - T_l) - \frac{C}{RTI} (T_l - T_m) - \frac{C_2}{RTI} \beta |\mathbf{u}| \quad (11.1)$$

其中， \mathbf{u} 为气体速度， RTI 为响应时间指数， T_l 为链接温度， T_g 为链接附近的气体温度， T_m 为喷淋器支架的温度（假设为环境温度）， β 为气流中（液态）水的体积分数。水喷淋器链路的灵敏度由其 RTI 值决定。安装件从连接件中传导出热量用“C 系数” C 表示。 RTI 和 C 系数是通过实验确定的。常数 C_2 由 DiMarzo 和同事 [113][114][115] 根据经验确定为 $6 \times 10^6 \text{ K}/(\text{m/s})^{1/2}$ ，其值对于不同类型的水喷淋器相对恒定。

热探测器启动的算法与洒水器启动的算法完全相同，只是没有考虑传导损失或液滴冷却。请注意，洒水器和热探测器模型都不考虑热辐射。

11.2 热探测器

就 FDS 而言，热探测器只是一个不喷水的洒水器。换句话说，热探测器的启动受式(11.1)控制，但右侧只有第一项：

$$\frac{dT_l}{dt} = \frac{\sqrt{|\mathbf{u}|}}{RTI} (T_g - T_l) \quad (11.2)$$

RTI 和激活温度都是根据经验确定的。

11.3 烟雾探测器

关于烟雾探测相关问题的翔实讨论可参见 Schifiliti、Meacham 和 Custer 合著的 SFPE 手册“探测系统设计”一章[116]。作者指出，烟雾探测器启动建模的困难源于以下几个问题：(1) 对火灾初期烟雾的产生和传输了解不多；(2) 探测器通常使用复杂的响应算法，而不是简单的阈值或变化率标准；(3) 探测器可能对烟雾颗粒的数量密度、大小分布、折射率、成分等很敏感；(4) 包括 FDS 在内的大多数计算机模型除了对烟雾的大量传输进行描述外，并没有对烟雾进行详细描述。最后一点是最重要的。在目前的形式下，FDS 最多只能计算流经探测器的天花板喷流的速度和烟雾浓度。无论设备内部的详细机制如何，FDS 中包含的任何激活模型都只能计算烟雾因探测器的几何形状而产生的进入阻力。FDS 无法解决与电离或光电探测器的有效性有关的问题。

考虑一下简单理想化的“点式”烟雾探测器。通常安装在天花板上的设备的外部是一个内衬细网的圆盘形盖子。在该装置的某处有一个相对较小的感应室，烟雾在这里以某种方式被实际检测到。Heskestad[116]提出了这种装置的一个简单模型。他认为，探测器 Y_c 感应室中的烟雾质量分数比外部自由流 Y_e 中的质量分数滞后一个时间段 $\delta t = L/u$ ，其中 u 是自由流速度， L 是探测器几何形状的长度特征。感应室内烟雾质量分数的变化可通过求解以下方程得出：

$$\frac{dY_c}{dt} = \frac{Y_e(t) - Y_c(t)}{L/u} \quad (11.3)$$

当 Y_c 升至检测器特定阈值以上时，检测器启动。

还有人提出了一个更详细的烟雾探测模型，涉及两次而不是一次填充时间。进入感应室的烟雾

必须首先通过外部外壳，然后在到达感应室之前必须通过一系列挡板。烟雾通过外壳和进入传感室之间存在时间差。设 δt_e 为外部外壳所包围的整个容积的特征填充时间。让 δt_c 成为传感腔的特征填充时间。Cleary 等人[117]认为，每个特征填充时间都是探测器外自由流速度 u 的函数

$$\delta t_e = \alpha_e u^{\beta_e} \quad ; \quad \delta t_c = \alpha_c u^{\beta_c} \quad (11.4)$$

α 和 β 参数是与特定探测器几何形状有关的经验常数。这些参数的建议值列于《FDS 用户指南》[3]。传感室内烟雾质量分数 Y_c 的变化可通过求解以下方程得出：

$$\frac{dY_c}{dt} = \frac{Y_e(t - \delta t_e) - Y_c(t)}{\delta t_c} \quad (11.5)$$

其中， Y_e 是探测器外自由流中烟雾的质量分数。对该方程的简单解释是，在 t 时刻进入传感室的烟雾浓度为 $t - \delta t_e$ 时刻的自由流浓度。

公式(11.5)的解析解可以求得，但更方便的方法是像洒水器和热探测器那样进行数值积分。然后，可以通过计算将预测的感应室内烟雾质量分数 $Y_c(t)$ 转换为单位长度上的遮蔽率表达式：

$$\text{Obscuration} = \left(1 - e^{-K_m \rho Y_c l}\right) \times 100 \% \text{ per length } l \quad (11.6)$$

其中， K_m 是质量消光系数， ρ 是顶棚喷射中外部气体的密度， l 是光衰减的长度单位¹⁰。对于大多数燃烧燃料，在波长为 633 纳米时， K_m 的建议值为 $8700 \text{ m}^2 / \text{kg} \pm 1100 \text{ m}^2 / \text{kg}$ [118]。

SFPE 手册[116]参考了有关烟雾探测的各种研究和特征长度 L 的建议值。FDS 包括单参数 Heskestad 模型，作为四参数 Cleary 模型的特例。对于 Cleary 模型，用户必须指定 α_e 、 β_e 、 α_c 和 β_c ，而对于 Heskestad 模型，只需指定 $L = \alpha_c$ 。方程(11.5)仍然使用， $\alpha_e = 0$ ， $\beta_e = \beta_c = -1$ 。四参数模型的支持者声称，需要两个填充时间来更好地捕捉探测器在非常缓慢的自由流 ($u < 0.5 \text{ m/s}$) 中的行为。FDS 中包含的算法允许用户选择这些不同的参数，而不是宣布一种模型比另一种模型更好，这样用户就可以选择自己认为合适的模型[119]。

此外，FDS 还能模拟光束和吸入式烟雾探测器的行为。对于光束探测器，用户可指定发射器和接收器的位置以及探测器报警时的总遮蔽率。然后，FDS 将使用路径上每个网格单元中的预测烟尘浓度，对路径长度上的遮蔽度进行积分：

$$\text{Obscuration} = \left(1 - e^{-K_m \int \rho Y_s dl}\right) \times 100 \% \quad (11.7)$$

其中，积分是在光束路径上进行的。

对于吸气式检测器，用户可指定采样位置、每个位置的流速、从每个采样点到检测器的传输时间、任何旁路流的流速以及检测器报警时的总遮蔽率。FDS 采用适当的时间延迟后，将取样点的预测烟尘浓度与流速加权，从而计算出检测器的烟尘浓度。详见《FDS 用户指南》[3]。

¹⁰ 通常，spot 类型烟雾探测器的启动标准是每英尺或每米的遮蔽率。前者为 $l = 0.3048 \text{ m}$ ，后者为 $l = 1 \text{ m}$ 。

12 Heating, Ventilation, and Air Conditioning (HVAC)

暖通空调系统遍布建筑环境的各个角落。火灾发生时，暖通空调管道可作为热量和燃烧产物在建筑物内移动的通道，同时管道还可作为火灾的新鲜空气供应。在数据中心和无尘室等一些设施中，暖通空调管道内会安装火灾探测装置。暖通空调系统在用于排烟或保持楼梯间压力时，也可作为建筑物消防系统的一部分。

虽然简单定义的速度、质量通量或压力边界条件可以代表暖通空调系统的流入和流出，但它们不能完全模拟暖通空调系统。构成暖通空调网络的多个入口和出口之间没有质量、动量和能量解决方案的耦合。为解决这一局限性，FDS 中添加了暖通空调网络求解器。

读者可以阅读有关火灾应用中耦合混合建模的文献综述[120]，以及将 CFD 与用于隧道火灾通风分析的一维节点模型耦合的类似工作综述[121][122]。

12.1 控制方程

整个暖通空调求解器基于 MELCOR[89]热液压求解器。**MELCOR 是模拟核电站安全壳建筑事故的计算机程序**。火灾和烟雾模拟器（FSSIM）[123]是一种网络火灾模型，它在使用 MELCOR 求解器模拟复杂通风系统中的火灾蔓延和烟雾移动方面取得了成功，而 MELCOR 求解器的 FDS 实现主要基于 FSSIM 中的实现。**暖通空调求解器与 FDS 计算其余部分的耦合部分是基于 GOTHIC [124]所采用的方法**，GOTHIC 是另一种安全壳分析代码，它将用于大型安全壳容积的类似 CFD 的功能与用于管道和通风的网络模型结合在一起。

MELCOR 求解器使用显式求解器求解质量和能量守恒方程，同时使用隐式求解器求解动量守恒方程。暖通空调系统是由节点和管道组成的网络。节点代表管道与 FDS 计算域的连接处，或多个管道的连接处，如三通接头处。网络中的管道段代表未被节点打断的任何连续流动路径，因此可能包括多个配件（弯头、膨胀或收缩等），并可能在其长度上具有不同的面积。**节点的质量、能量和动量守恒方程依次为：**

$$\sum_j \rho_j u_j A_j = 0 \quad (12.1)$$

$$\sum_j \rho_j u_j A_j h_j = 0 \quad (12.2)$$

$$\rho_j L_j \frac{du_j}{dt} = (p_i - p_k) + (\rho g \Delta z)_j + \Delta p_j - \frac{1}{2} K_j \rho_j |u_j| u_j \quad (12.3)$$

其中， u 是管道速度， A 是管道面积， h 是管道中流体的焓。下标 j 表示风道段，下标 i 和 k 表示节点（一个或多个风道的连接处，或一个风道在一个隔间的终点）。 Δp 是固定的动量源（风机或鼓风机）， L 是管道段的长度， K 是管道段的总无量纲损耗系数（包括管壁摩擦损耗和微小损耗）。

由于节点没有体积，因此质量和能量守恒方程要求流入节点的东西也必须流出。在动量方程中，右侧的项包括上游和下游节点之间的压力梯度、浮力头、外部来源（如风扇或鼓风机）引起的压力上升，以及由于管壁摩擦或管道配件的存在而造成的压力损失。在默认运行模式下，质量和能量沿管道长度方向的传输延迟没有考虑在内。第 12.6 节介绍了可选的延迟模型。

12.2 求解程序

由于损失项的存在，动量方程(12.3)与速度的关系是非线性的。此外，网络中两个节点之间的压力差还会受到与该管道直接耦合（同一管道网络的一部分）或间接耦合（与另一管道网络连接到同一隔间）的所有节点的压力变化的影响。在求解动量方程时，需要考虑这两个因素。具体做法如下：

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t^n}{\rho_j L_j} \left[(\tilde{p}_i^n - \tilde{p}_k^n) + (\rho g \Delta z)_j^n + \Delta p_j^n - \frac{1}{2} K_j \rho_j (|u_j^{n-} + u_j^{n+}| u_j^{n+1} - |u_j^{n+}| u_j^{n-}) \right] \quad (12.4)$$

速度上的上标 n^+ 和 n^- 用于将管道中的流量损失线性化，以避免速度的非线性微分方程。 n^+ 上

标是先前的迭代值，而 n^- 则是先前的迭代值，如果迭代之间发生了流动逆转，则上标为零。当管道流量接近于零时，采用这种方法可加快收敛速度，以避免在正向损失和反向损失明显不同的情况下 K 发生较大变化。请注意，节点压力不是以 P_i^n 表示，而是以 \tilde{p}_i^n 表示。这表示当前时间步长结束时的外推压力，而不是时间步长结束时的实际压力。隔室中的压力是流入和流出的质量和能量的函数。如果该隔间通过门或其他开口与其他隔间相连，那么压力也取决于进出这些其他隔间的流量。这些质量流和能量流既包括暖通空调模型预测的质量流和能量流，也包括 CFD 模型预测的质量流和能量流。例如，在图 12-1 中，无阴影隔间的压力解决方案取决于 HVAC 模型和 CFD 模型预测的流量，所有这些隔间都需要包含在这些隔间的外推压力中。由于两个模型并非完全耦合，因此外推压力是根据前一时间步长的压力上升估算出的时间步长结束时的压力。

使用公式(4.31)并校正速度上的积分，即可确定一个隔间的外推压力，该压力是所有进入或流出 FDS 压力区的相互依存的暖通空调流的当前解决方案：

$$\tilde{p}_i^n = p_i^{n-1} + \left(\frac{dp_i^{n-1}}{dt} + \frac{\sum_j u_j^n A_j^{n-1} - \sum_j u_j^{n+1} A_j^n}{\int_{\Omega_m} P dV} \right) \Delta t^n = \tilde{p}_i^{*n} - \frac{\Delta t^n \sum_j u_j^{n+1} A_j^n}{\int_{\Omega_m} P dV} \quad (12.5)$$

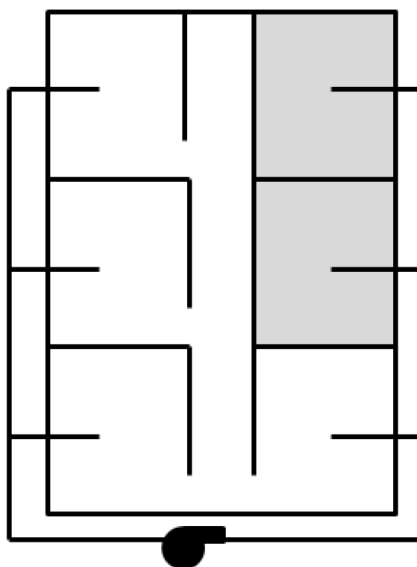


图 12-1 相互依存的压力解决方案示意图。所有非阴影部分的压力都是相互依存的。

如果从式(12.5)中移除该时间步预测速度的求和项，并将其置于式(12.4)的左侧，同时将式 (12.5) 的其余项置于右侧，则可得到以下结果：（下面是 Δt^{n-2} 还是 Δt^{n^2} ）

$$u_j^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t^n K_j}{2L_j} |u_j^{n-} + u_j^{n+}| \right) - \frac{\Delta t^{n-2} \sum_{j \in i} u_j^{n+1} A_j^n - \sum_{j \in k} u_j^{n+1} A_j^n}{\rho_j L_j \int_{\Omega_m} P dV} =$$

$$u_j^n + \frac{\Delta t^n}{\rho_j L_j} \left(\tilde{p}_i^{*n} - \tilde{p}_k^{*n} + (\rho g \Delta z)_j + \Delta p_j \right) + \frac{\Delta t^n K_j}{2L_j} |u_j^{n+}| |u_j^{n-}| \quad (12.6)$$

如果公式(12.6)中管道 j 的节点 i 或节点 k 是内部管道节点，则不计算外推压力，而是求解实际节点压力。将公式(12.6)应用于每个风道会得到一个线性方程组。为内部风道节点的质量守恒添加额外的方程，得到完整的方程组。求解方案如下：

1. 使用前一时间步数值，确定暖通空调网络与 FDS 计算域连接的所有点的边界条件。
2. 使用前一次迭代（如果是第一次迭代，则使用前一个时间步长）计算每个压力区的外推压力。

3. 组装动量守恒和质量守恒的线性方程组。
4. 求解方程并检查解法中的质量守恒误差、时间步长内的流量反转以及每个管道速度解法的变化幅度。如果收敛检查失败，则使用新的外推压力重新求解。密度和焓值作为每次迭代的上风值。每次迭代后，使用速度和压力解法更新每个节点的温度和密度。节点温度的计算方法是将流入节点的焓值相加，然后计算代表总焓值的平均温度。然后利用状态方程和新温度更新密度。

12.2.1 过滤

过滤器对暖通空调网络中的流量有两种影响。首先，过滤器会造成流量损失，其大小与过滤器的质量负荷有关。其次，过滤器会从流经过滤器的水流中去除一种或多种物质。去除率是该物质的过滤效率和通过过滤器的质量流量的函数。过滤器的损耗是根据每个时间步骤开始时的过滤器负荷来评估的。该损失适用于上游管道。过滤器损耗是通过线性斜坡或用户定义的表格作为过滤器总负载的函数计算出来的。过滤器的总负荷是通过将捕获的每个物种的质量乘以该物种的权重系数求和而确定的。

假定过滤器能去除被过滤器捕获的物种的固定部分（过滤器效率）。每种物质都有自己的去除效率。因此，过滤器的公式(12.1)为

$$u_{\text{out}} \rho_{\text{out}} A_{\text{out}} = u_{\text{in}} \rho_{\text{in}} A_{\text{in}} - \sum_{\alpha} u_{\text{in}} \rho_{\text{in}} A_{\text{in}} Y_{\alpha, \text{in}} E_{\alpha} = u_{\text{in}} \rho_{\text{in}} A_{\text{in}} \left(1 - \sum_{\alpha} Y_{\alpha, \text{in}} E_{\alpha} \right) \quad (12.7)$$

其中， α 是被过滤的物种， E_{α} 是其去除效率。

12.2.2 节点损耗

暖通空调系统中的节点包括入口和出口、三通和其他管道配件。每一个节点都会造成流量损失；但是，如公式(12.6)所示，流量损失项仅出现在管道方程中。这意味着与节点相关的物理损耗必须用数值表示为节点所连管道中的等效损耗。损耗的应用方式还必须能够体现节点内的流动条件。例如，如果一个三通有一条支管流入，两条支管流出，那么将损耗应用于上游支管是没有意义的，因为无法区分下游支管中的任何分流变化所造成的损耗。损耗项的应用如下：

1. 如果节点处没有流量，那么与节点相连的每个管道都会分配到从所有其他管道流向该管道的所有损耗的平均值。
2. 如果只有一个连接管道有水流进入，那么每个流出管道都会分配从入口管道流向该特定流出管道的流量损失。
3. 如果只有一个连接管道有流量流出，则每个流入管道都会分配从该入口管道流向出口管道的流量损失，并根据从入口到出口管道面积的任何变化进行修正（节点损失作为下游管道面积的函数输入）。
4. 如果有多条管道流入，又有多条管道流出，那么每条流出管道的平均损耗都是流入管道的损耗，再根据流经这些管道的流量加权得出的。

12.2.3 管道损耗

管道中的总流量损失 K_j 是管道中的配件损失（如弯头、膨胀/减速、孔板） K_{minor} 加上管壁摩擦损失 K_{wall} 的总和。次要损耗由用户输入。如果设置了管道粗糙度，则管壁摩擦损失的模型如下：

$$K_{\text{wall}} = \frac{fL}{D} \quad (12.8)$$

其中 D 是管道直径。 f 根据 Colebrook 方程确定。不过，由于该方程没有解析解，因此使用 Zigrang 和 Sylvester 的近似值[125]。

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log_{10} \left(\frac{\varepsilon / D}{3.7} - \frac{4.518}{\text{Re}_D} \log_{10} \left(\frac{6.9}{\text{Re}_D} + \left(\frac{\varepsilon / D}{3.7} \right)^{1.11} \right) \right) \quad (12.9)$$

其中， ε 是风道的绝对粗糙度。

12.2.4 加热和冷却盘管

管道中可以包含加热或冷却盘管。这些盘管可以增加或去除在管道中流动的物质的热量。在计算节点温度之前，这种焓变会被添加到下游节点的管道焓流中。有两种模式可供选择。第一个模型是，只要盘管在运行，就以指定的速率增加或减少热量。第二个模型使用热交换器效率模型，其中指定了四个参数：工作流体的比热 ($c_{p,fl}$)、工作流体的温度 (T_{fl})、工作流体的质量流量 (\dot{m}_{fl}) 和效率 (η)。盘管热流率 \dot{q}_{coil} 的计算公式如下：

$$T_{out} = \frac{\dot{m}_{duct} c_{p,duct,in} T_{duct,in} + \dot{m}_{fl} c_{p,fl} T_{fl}}{\dot{m}_{duct} c_{p,duct,in} + \dot{m}_{fl} c_{p,fl}} \quad (12.10)$$

$$\dot{q}_{coil} = \dot{m}_{fl} c_{p,fl} (T_{fl} - T_{out}) \eta \quad (12.11)$$

12.3 泄漏

除了极少数例外情况，墙壁、地板和天花板都不具备气密性。门窗周围的缝隙以及电气、机械和其他系统的开口都会通过障碍物提供小的流动路径。这些流动路径可以模拟为一个等效的暖通空调系统，其中每个泄漏路径都是一个单独的管道。泄漏建模有两种方法。

在第一种方法中，域中的一个或多个表面被定义为两个压力区之间泄漏路径的一部分。创建一个暖通空调管道，其面积即为泄漏区域，其节点为所有属于泄漏路径表面的壁单元。这种方法只使用每个区域的背景压力 \bar{p}_m 。管道的面积是总泄漏面积，管道的终端节点可视为参与该流动路径的表面的整个面积。由于只使用背景压力，这种方法只能用于压力区之间的泄漏。

第二种方法是将特定区域确定为泄漏路径的入口和出口。这种方法适用于表示已知位置的小开口，如典型的室内门下凹处。与第一种方法类似，我们创建了一个 HVAC 管道，其区域为泄漏区域，节点为属于已识别入口和出口区域的墙壁单元。这种方法使用的是总压力，因此可用于入口和出口位于同一压力区域的情况。

更多详情，请参阅《FDS 用户指南》[3]。

12.4 将暖通空调求解器与 FDS 连接起来

12.4.1 暖通空调求解器的边界条件

在更新暖通空调解决方案之前，通过对管道节点旁边气体单元的质量和能量求和，并对压力求平均值，来确定每个管道节点的入口条件。然后利用总质量和能量以及平均压力来确定平均温度。

$$\bar{\rho}_i = \frac{\sum_j \rho_j A_j}{\sum_j A_j} ; \quad \bar{Y}_{\alpha,i} = \frac{\sum_j Y_{\alpha,j} \rho_j A_j}{\sum_j \rho_j A_j} ; \quad \bar{P}_i = \frac{\sum_j P_j A_j}{\sum_j A_j} \quad (12.12)$$

$$\bar{h}_i = \frac{\sum_j \rho_j A_j c_p (T_j, Y_j)}{\sum_j \rho_j A_j} ; \quad \bar{T}_i = \frac{\bar{h}_i}{c_p(\bar{T}_i, \bar{Y}_i)} \quad (12.13)$$

其中， i 是管道节点， j 是与节点相邻的气体单元。

12.4.2 FDS 水动力学求解器的边界条件

对于包含非泄漏流暖通空调管道流入的壁面单元，表面温度 T_w 将设置为连接管道中的值。如

果是泄漏流，则根据分配给表面的热属性计算 T_w （见第 8 章）。其余壁面边界条件的计算方法如下：

$$\dot{m}''_{\alpha} = Y_{\alpha,d} \dot{m}'' \quad ; \quad \dot{m}'' = \frac{u_d \rho_d A_d}{A_v} \quad (12.14)$$

其中，下标 d 代表附属管道， A_v 代表通风口的总面积（在泄漏流的情况下， A_v 代表该泄漏路径所有表面的总面积）。

$$u_w = \frac{\dot{m}''}{\rho_w} \quad ; \quad \rho_w = \frac{p \bar{W}}{RT_w} \quad (12.15)$$

$$Y_{\alpha,w} = \frac{\dot{m}''_{\alpha} + \frac{2\rho_w D Y_{\alpha,gas}}{\delta n}}{\frac{2\rho_w D}{\delta n} + u_w \rho_w} \quad (12.16)$$

上述三个方程以 20 次迭代为限进行迭代求解（通常只需一到两次迭代）。

对于流向暖通空调管道的墙壁单元，墙壁边界条件设置为气体单元值，但泄漏流除外，其温度根据表面的热属性计算。

12.5 风扇曲线

风机产生的流量与包含风机的管道中风机对面的压力有关（风机背压越大，流量越小）。管道中的压力本身也是通过风机的流量的函数（流速越高，管道压降越大）。这两个函数的曲线图分别称为风机曲线和系统曲线。在给定条件下，风机流量将是这两条曲线的交点，也称为运行点，见图 12-2。

为 FDS 模拟指定风扇曲线时，FDS 必须确定正确的风扇压力（公式(12.3)中的 Δp_f ）。FDS 有两种方法可供选择。

第一种是快速估算法，它依赖于典型的建筑结构和暖通空调系统设计。一般来说，建筑物内的房间之间不会存在较大的压力差。此外，暖通空调系统在任何管道运行中通常只有一个风扇。在这种情况下，特定时间步长内的风扇压力可估算为包含风扇的管道中当前流速对应的压力。

如果管道中有多个风机，则不能依靠这种方法，因为这种方法无法正确计算综合效应。如果管道末端出现较大的压力差，也不能依靠这种方法。这种情况可能发生在密封性相对较好的空间内火势迅速蔓延的情况下。在这种情况下，我们需要定义一条系统曲线，并找到它与风机曲线的交点。这就是 FDS 的第二种方法。

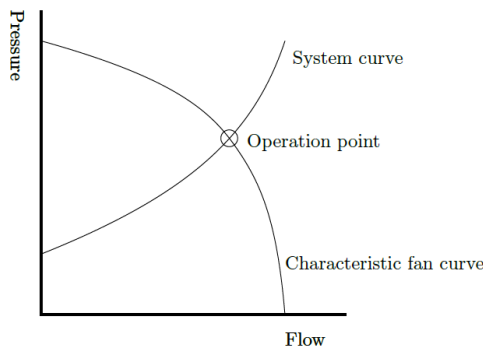


图 12-2 暖通空调风机的风机曲线、系统曲线和运行点示意图

火灾模拟中的一个难题是，系统曲线是管道末端压力和管道流量的函数。火灾规模会随时间发生变化，压力也会随之变化。因此，不能使用预先计算的系统曲线。取而代之的是另一种方法[126]。这种方法依赖于暖通空调系统中压力和流量的二次方关系。管道中的压降是管道速度平方的函数。在每个时间步采取以下步骤找到每个风机的运行点：

1. 确定所有包含风机的管道位置。管道运行是任何直接相互连接的暖通空调组件的集合。请参见图 12-3 中的两个示例。图中显示了由暖通空调系统连接的两组两个隔间。在每一组

中，每个隔间都有一个送风和排风管道。在左侧，两个排气管道连接到装有风扇的管道，而风扇则分成每个隔间的送风管道。在这种情况下，只有一个管道运行。每个暖通空调组件都通过一条仅包含暖通空调组件的路径与其他暖通空调组件相连。在右侧，每个隔间的排气口都与各自的风扇相连，而风扇则成为另一个隔间的供气管。在这种情况下，有两条管道。只有暖通空调组件连接两个管道，没有直接的路径。

2. 确定包含风机的每条风道的每个入口和出口的当前压力。
3. 对于每个风机，仅使用包含风机的管道，根据当前端点压力求解管道中的流量。
4. 对于每个风机，仅使用包含风机的管道，根据当前端点压力并假设风机对管道施加最大压力，求解管道中的流量。
5. 对于每个风扇，在该风扇的两个系统点之间拟合二次方。
6. 使用牛顿法找到用户指定的风扇曲线与系统曲线之间的交点。时间步长内的风扇压力 Δp_j 设置为交点处的压力。如果没有交点，则将风扇压力设置为风扇的最大压力或零压力。如果风扇压力为零时的系统曲线流量超过风扇曲线中定义的最大流量，则设置为零压力。如果在最大压力下系统曲线中存在反向流量，则设置为最大压力。

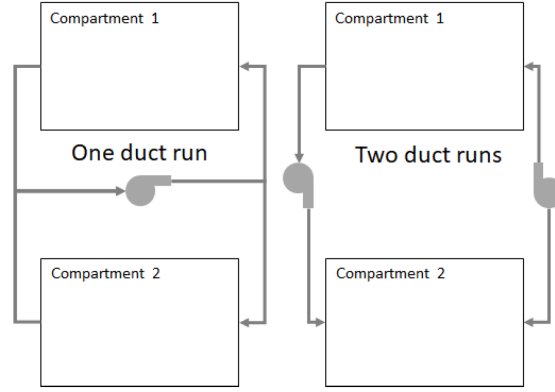


图 12-3 确定管道走向的插图。左侧有一条管道。右侧有两条管道

12.6 管道输送延迟

在默认运行模式下，暖通空调求解器不考虑管道中的质量存储。也就是说，在一个时间步长内，任何进入管道的质量和能量都会离开管道。可以调用一个可选的子模型来计算这种传输延迟。该子模型将管道划分为长度相等的单元 Δx ，并求解管道中质量和能量传输的一维平流方程[127]。在离散化过程中，温度、比热、物种质量分数和密度存储在单元中心。管道中的速度取自公式(12.1)通过公式(12.3)求解得到的值。采用戈杜诺夫上卷方案的显式 **Runge-Kutta** 方法。由于扩散传输在暖通空调系统中通常影响较小，因此忽略不计。从时间步 n 到 $n+1$ 更新管道 j 中单元 c 的物种质量和能量守恒方程为

$$(\rho Y_\alpha)_c^{n+1} = \rho_j u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\rho u)_j^n \text{left} (Y_{\alpha,c}^n - Y_{\alpha,c-1}^n) \quad (12.17)$$

$$(\rho h)_c^{n+1} = \rho_j u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\rho u)_j^n \text{left} (h_c^n - h_{c-1}^n) \quad (12.18)$$

更新风道条件从上风风道节点开始，沿风道长度行进到下风风道节点。单元温度从单元焓 h_c 中提取。这种解法是在构成风道网络基础的风道组上进行的。风道网络是一组通过暖通空调组件的流动路径相互连接的风道和节点。时间步长 Δt 取为当前模拟时间步长的最小值，以及网络中所有管道的 $\frac{\Delta x_j}{2u_j}$ 的最小值。在公式(12.1)和公式(12.2)的求和项中，通过使用每个时间步长内最后一个单元

的值对这些流量进行积分，就可以得到从离散管道进入节点的质量流量和焓流量。

13 非结构几何 (Beta)

根据 Michael Aftosmis 和 Marsha Berger 的开创性工作[128][129][130], 使用“切割单元”(CC)方法处理非结构化几何。切割单元指的是笛卡尔网格单元的气相区域, 该区域被非结构化几何体“切割”成气相和固相子体积。从笛卡尔面上切割并与其他切割单元相连的切割单元面称为气相切割面(即气-气界面)。切割单元中固体边界上的面为边界内切割面(这些面为气固界面)。切割单元中还有一些未被切割的面, 这些面将单元与相邻的正方形气相单元连接起来; 这些面被称为正方形面(也是气-气界面)。

在嵌入式边界周围引入切割单元, 需要一种非结构化的求解算法。特别是, 压力方程是非结构方程, 因此快速三角求解器(即 FFT 泊松求解器)不可行。因此, 我们使用英特尔数学内核库(MKL)中的 Pardiso 和 Sparse Cluster 求解器开发了一种非结构化局部矩阵(ULMAT)求解器。

下文将介绍在嵌入式边界周围的非结构化切割单元中用于离散控制方程的有限体积方法。

13.1 复杂几何的标量传输离散化

13.1.1 多物种质量平衡方程

考虑一组气态反应化学物种 $\alpha = 1, \dots, N$ 在给定的空间域 $\Omega \in \mathbb{R}^n$ ($n = 2, 3$, 边界为 $\partial\Omega$) 上流动, 以欧拉参考框架 N 为参数。这些物种以相对于 N 的速度 $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 和质量加权平均速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 传播到空间中的给定点 \mathbf{x} 上。

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{\rho}, \quad \rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha \quad (13.1)$$

其中, 为简化起见, 不显示空间和时间相关性, $\rho_\alpha(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) Y_\alpha(\mathbf{x}, t)$, ρ 是混合物密度, $Y_\alpha = \rho_\alpha / \rho$ 是物种 α 的质量分数。定义: $\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 是以 \mathbf{x} 为中心的给定微分体积 $d\Omega$ 上物种 α 的质量, 而 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 是 $d\Omega$ 中所有物种的质量。

根据定义, 每个物种 α 的速度 $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 都不同于混合物的平均速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 。这个差值被称为物种 α 的扩散速度, 即 \mathbf{V}_α

$$\mathbf{V}_\alpha(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (13.2)$$

每个物种 α 的迁移反应质量平衡方程在 Ω 为

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \dot{m}_\alpha''', \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (13.3)$$

其中, $\dot{m}_\alpha'''(\mathbf{x}, t)$ 是物种 α 的化学反应体积源 ($n = 2$ 时为面积源, 负值时为吸收汇)。问题的完整定义包括 $\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 的初始条件和边界条件, 以及与时间相关的场 $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 、 $\dot{m}_\alpha'''(\mathbf{x}, t)$ 。

注意到 $\rho_\alpha = \rho Y_\alpha$, 并利用前面的公式(13.2)

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_\alpha (\mathbf{u} + \mathbf{V}_\alpha)) = \dot{m}_\alpha''', \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (13.4)$$

从这些方程中我们可以看出, 这些物种的演化可以看作是混合物 ρ 和平均值 \mathbf{u} 的函数, 并通过公式(13.1)以及反应源的质量守恒声明, 将其写成与其他物种相关的形式

$$\sum_{\alpha=1}^N \dot{m}_\alpha'''(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (13.5)$$

根据公式(13.4), 可以得出单位时间和单位面积的对流通量和扩散通量如下:

$$\mathbf{J}_{c\alpha} = \rho Y_\alpha \mathbf{u} \quad (13.6)$$

$$\mathbf{J}_{d\alpha} = \rho Y_\alpha \mathbf{V}_\alpha \quad (13.7)$$

扩散速度 \mathbf{V}_α 的定义是多物种质量迁移的核心组成部分。对于大气燃烧，我们考虑所有物种的二元扩散，氮是最丰富的（背景）物种。通过这种简化，我们可以利用费克斯扩散定律来解除扩散通量的耦合。

$$\mathbf{J}_{d\alpha} = \rho Y_\alpha \mathbf{V}_\alpha = -\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha \quad (13.8)$$

其中 D_α 是相对于背景物种的二元扩散系数。

利用公式(13.4)中的最后一个表达式，我们可以得出基于质量分数的物种平衡方程的基本形式，并在 FDS 中使用

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_\alpha \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha) + \dot{m}_\alpha''', \alpha = 1, \dots, N \quad (13.9)$$

正如下一节所述，在划分为 $ii = 1, \dots, n_{tot}$ 个计算单元的域中，前述方程的空间离散化版本为

$$\frac{\partial (\rho Y_\alpha)_{ii}}{\partial t} V_{ii} = F_{\alpha,ii}^{adv} + F_{\alpha,ii}^{diff} + \dot{m}_{\alpha,ii}''' + F_{\alpha,ii}^{BC}, \alpha = 1, \dots, N \quad (13.10)$$

其中， V_{ii} 是单元体积， $(\rho Y_\alpha)_{ii}$ 是单元未知部分密度， $F_{\alpha,ii}^{adv}$ ， $F_{\alpha,ii}^{diff}$ ， $\dot{m}_{\alpha,ii}'''$ ， $F_{\alpha,ii}^{BC}$ 是平流、扩散、反应和边界条件引起的项。鉴于我们使用的时间积分法是显式的，这些矢量利用了前一时间步或子步中 $(\rho Y_\alpha)_{ii}$ 的可用值。

13.1.2 二维交错网格有限体积法

有限体积离散化 (FV) 首先考虑公式(13.9)在单元控制体积 Ω_{ii} 上的积分形式。对于由索引对 (i, j) 个性化的切割单元 ii ，我们可以得到

$$\int_{\Omega_{ii}} \frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (\rho Y_\alpha \mathbf{u}) d\Omega = - \int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (\mathbf{J}_{d\alpha}) d\Omega + \int_{\Omega_{ii}} \dot{m}_\alpha''' d\Omega \quad (13.11)$$

假设控制量与时间无关，则时间导数和源项近似为

$$\int_{\Omega_{ii}} \frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} d\Omega = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{ii}} \rho Y_\alpha d\Omega = \frac{\partial \overline{\rho Y_{\alpha i,j}}}{\partial t} V_{i,j} \quad (13.12)$$

$$\int_{\Omega_{ii}} \dot{m}_\alpha''' d\Omega = \overline{\dot{m}_{\alpha i,j}'''} V_{i,j} \quad (13.13)$$

其中， $V_{i,j}$ 是单元 (i, j) 的体积。这些单元平均量（用斜线表示）与相应标量场的单元中心点值相匹配，达到二阶空间精度。这一已知事实的结果是，使用二阶有限差分法 (FD) 或差分有限体积法（其扩散通量空间导数和平流项插值的定义相同），将在均匀的笛卡尔网格上得到相同的离散化矩阵（它们的变化不超过体积因子）。这两种数值离散化方法的区别在于源 \dot{m}_α''' ，在 FD 中，源 $\dot{m}_{\alpha(i,j)}'''$ 是给定单元的单元中心点值，而在 FV 中，源 $\overline{\dot{m}_{i,j}'''}$ 是单元平均值。为了将方程(13.12)中的扩散项和平流项离散化，我们使用了散度定理。在下文中，我们去掉斜线以简化符号，同时牢记在使用 FV 时，量总是在相应的地方进行单元或面平均。

13.1.3 切割单元中的有限体积离散化

本节将介绍如何处理不规则气相欧拉网格面和加入浸没体后剩余的单元格。我们假设（见图 13-1a）切割单元定义算法成功定义了以下内容：

- 在 x 和 y 方向上的所有 GASPHASE 面，这些面被标记为规则面或切割面。我们还知道这些面的顶点、面积（二维长度）和面的中心点位置。对于 GASPHASE 切割面，我们知道它们所属面的 i, j 坐标。

- 所有 INBOUNDARY 面，由沉浸体表面元素与欧拉网格单元的交点产生。我们知道这些面的顶点、面积（二维长度）和面的中心点位置。
- 所有 GASPHASE 切割单元格和常规单元格。我们知道哪些面定义了它们的边界。对于切割单元格，我们提供了切割面列表（类型为 GASPHASE 和 INBOUNDARY）。此外，我们还知道它们的体积和面的中心点位置。

13.1.4 扩散项的切分单元离散化

考虑对图 13-1b 中的切面单元 ii 上的扩散项（方程(13.12)）进行 FV 离散化。我们有

$$\int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (\mathbf{J}_{d\alpha}) d\Omega = \int_{\partial\Omega_{ii}} (-\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii} d\partial\Omega = \sum_{k=1}^{nf_c=6} (-\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha)_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k \quad (13.14)$$

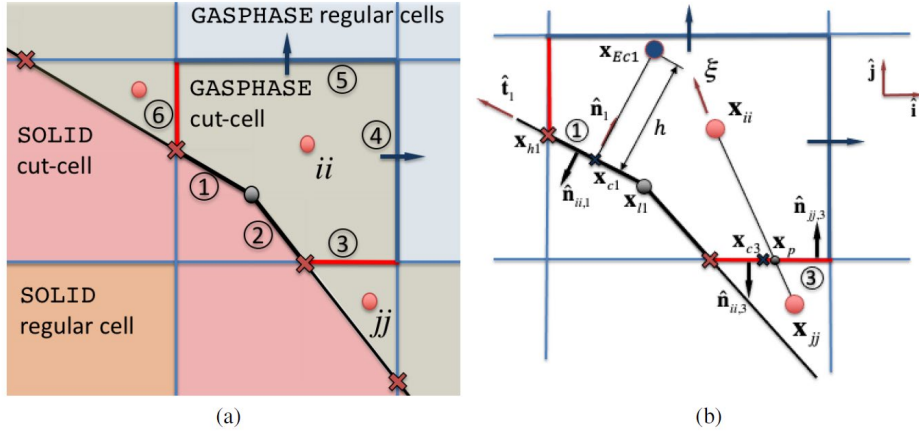


图 13-1 二维切割单元 FV 离散化：(a) GASPHASE 切割单元 ii 的边界为 1,2 INBOUNDARY 面，3,6 GASPHASE 切割面和 4,5 GASPHASE 规则面。(b) 用于 GASPHASE 切面 3 和 INBOUNDARY 切面 1 的扩散项离散化的几何元素。

构成切割单元边界的 $nf_c = 6$ 个面可分为

A. 面 $k = 4, 5$ 是连接切割单元格和常规单元格的常规 GASPHASE 平面：

这些处理方法与常规卡方面的处理方法相同，但需要注意的是，扩散通量计算现在涉及切面中心点位置（即计算 Y_α 的空间导数和方程(13.14)中 ρD_α 的插值）。

B. 面 $k = 3, 6$ 为 GASPHASE 切割面：

为了在这些面上计算式(13.14)的离散项，需要将因子 ρD_α 从单元中心点插值到面中心点，并在面中心点计算 Y_α 的空间导数。在差分 FV 方法中，从公式(13.14)的左侧到右侧需要使用面中心点来保持空间精度。为了保持整个切割单元法的精度，对切割面中心点的插值和微分也必须足够精确。

下面的讨论相当宽泛，与所采用的插值方法（拉格朗日多项式、等参数、最小二乘法等）无关。考虑由点 $e = 1, \dots, ne$ 组成的模版，假定标量 Y_α 已定义（即单元中心点）。那么，对于感兴趣的位置 ck （即 GASPHASE 切面 $k = 3, 6$ 的中心点）， ck 处 Y_α 的插值和导数可求得

$$Y_\alpha(\mathbf{x}_{ck}) = \sum_{e=1}^{ne} \phi_e(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_e) Y_{\alpha e} \quad (13.15)$$

$$\frac{\partial Y_\alpha(\mathbf{x}_{ck})}{\partial x_i} = \sum_{e=1}^{ne} \frac{\partial \phi_e(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_e)}{\partial x_i} Y_{\alpha e} \quad (13.16)$$

其中， \mathbf{x}_e 是模板点 e 的位置， $Y_{\alpha e} = Y_\alpha(\mathbf{x}_e)$ 和 $\phi_e(\mathbf{x} - \mathbf{x}_e)$ ， $e = 1, \dots, ne$ 是一组合适的插值函

数。在讨论中，我们假设插值不涉及 Y_α 的边界值。对于这些面，扩散通量为

$$\begin{aligned} (-\rho D_q \nabla Y_\alpha)_k &= -\sum_{m=1}^{ne} \phi_m(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_m) [\rho D_\alpha]_m \times \sum_{e=1}^{ne} \nabla \phi_e(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_e) Y_{\alpha e} \\ &= -[\rho D_\alpha]_k \sum_{e=1}^{ne} \nabla \phi_e(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_e) Y_{\alpha e} \end{aligned} \quad (13.17)$$

其中，

$$[\rho D_\alpha]_k = \left[\sum_{m=1}^{ne} \phi_m(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_m) [\rho D_\alpha]_m \right] \quad (13.18)$$

1. 一维线性等参数多项式插值：

如图 13-1b 所示，考虑一个具有 jj 和 ii 单元的模板。它们的中心点分别位于 \mathbf{x}_{jj} 和 \mathbf{x}_{ii} 。将连接 \mathbf{x}_{jj} 和 \mathbf{x}_{ii} 的线段上的点位置参数化为 $-1 \leq \xi \leq 1$ ，我们得到

$$\mathbf{x}(\xi) = \phi_1(\xi) \mathbf{x}_{jj} + \phi_2(\xi) \mathbf{x}_{ii} \quad (13.19)$$

$$Y_\alpha(\xi) = \phi_1(\xi) Y_{\alpha jj} + \phi_2(\xi) Y_{\alpha ii} \quad (13.20)$$

$$[\rho D_\alpha](\xi) = \phi_1(\xi) [\rho D_\alpha]_{jj} + \phi_2(\xi) [\rho D_\alpha]_{ii} \quad (13.21)$$

其中，

$$\phi_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi); \phi_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) \quad (13.22)$$

我们假设切面所在的参数值已知为 ξ_p ，对应于面和中心点线段交点 \mathbf{x}_p 。根据公式(13.19) $\mathbf{x} = x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}}$ ，我们可以得出

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{2}{(x_{ii} - x_{jj})}; \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{2}{(y_{ii} - y_{jj})} \quad (13.23)$$

而插值函数梯度分量为

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = \frac{\partial \phi_1}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = -\frac{1}{(x_{ii} - x_{jj})} \quad (13.24)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial y} = \frac{\partial \phi_1}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = -\frac{1}{(y_{ii} - y_{jj})} \quad (13.25)$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial x} = \frac{\partial \phi_2}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{(x_{ii} - x_{jj})} \quad (13.26)$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial y} = \frac{\partial \phi_2}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{1}{(y_{ii} - y_{jj})} \quad (13.27)$$

是常数。最后，由于 $k=3$ ，对于切割单元 jj ，法线为 $\hat{\mathbf{n}}_{jj,k} = \hat{\mathbf{j}}$ ，表达式(13.17)简化为

$$(-\rho D_\alpha \Delta Y_\alpha)_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{jj,k} A_k = -[\rho D_\alpha]_p \frac{(Y_{\alpha ii} - Y_{\alpha jj})}{(y_{ii} - y_{jj})} A_k \quad (13.28)$$

需要注意的是，假设切面中心点位置近似于 p 点。对于切面 $k=3$ 高侧的切面单元 ii 的表达式为

$$(-\rho D_\alpha \Delta Y_\alpha)_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k = [\rho D_\alpha]_p \frac{(Y_{\alpha ii} - Y_{\alpha jj})}{(y_{ii} - y_{jj})} A_k \quad (13.29)$$

类似的表达式也适用于 GASPHASE 切面的 x 轴法线方向。

C. 面 1、2 为 INBOUNDARY 切面:

考虑图 13-1b 中的 INBOUNDARY 切面 $k=1$ 。如果在这样的切面上指定 Neumann 边界条件, 则项

$$(-\rho D_\alpha \Delta Y_\alpha)_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k = [\rho D_\alpha]_k \partial \gamma_{ii,k} A_k \quad (13.30)$$

和之前一样, Y_α 在这个面上的规定法导数 $\partial Y_\alpha / \partial n|_k = \partial \gamma_{ii,k}$ 定义在 $\hat{\mathbf{n}}_1$ 的方向上。这个项增加了单元格 ii 所在位置的 $\mathbf{F}_{BC\alpha}$ 。对于 SOLID_BOUNDARIES (固体边界), 零扩散质量通量意味着物种 α 的质量分数场的均质 $\partial Y_\alpha / \partial n|_k = 0$ 。如果在边界 $k=1$ 处指定了 Dirichlet 边界条件, 则法线质量分数导数取为:

$$\frac{\partial Y_\alpha}{\partial n}|_{k=1} = \frac{Y_{Ec1} - Y_{ac1}}{h} \quad (13.31)$$

其中, Y_{Ec1} 的值为单元格值, h 为单元格体积的一半除以单元格表面边界面积。请注意, 如第 13.1.6 节后面所述, 当小单元与相邻单元相连时, 这些量指的是相连单元的控制体积。

13.1.5 平流项的切分单元离散化

我们将研究图 13-1b 中单元 ii 六个面的平流项离散化:

$$\int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (\rho Y_\alpha \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega_{ii}} (\rho Y_\alpha \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii} d\Omega = \sum_{k=1}^{nf_c} ([\rho Y_\alpha] \mathbf{u})_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k \quad (13.32)$$

其中, 为保证平流项处理的稳定性, $[\rho Y_\alpha]_k$ 表示对面的通量限制插值。见第 4.2.1 节。为完整起见, 在面的插值过程中使用插值函数也可以扩展到通量有限插值。对于一般面 k , 考虑单元 ii 外守恒量 ρY_α 的平流通量:

$$([\rho Y_\alpha] \mathbf{u})_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} = [\rho Y_\alpha]_k (\mathbf{u}_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k}) \quad (13.33)$$

那么, $[\rho Y_\alpha]$ 到面中心点 ck 的通量有限空间插值形式(13.15)为

$$[\rho Y_\alpha]_k = \sum_{e=1}^{ne} \bar{\phi}_e(\mathbf{x}_{ck} - \mathbf{x}_e, \mathbf{u}_k) (\rho Y_\alpha)_e \quad (13.34)$$

其中, $e=1, \dots, ne$ 指的是 GASPHASE 单元中心点的合适通量限制模板。 $\bar{\phi}_e$ 是与上述中心点相关的通量有限插值函数。

A. 面 $k=4, 5$ 是连接切割单元格和常规单元格的常规 GASPHASE 平面:

处理方法与上一节所述相同, 但需要注意的是, ρY_α 的平流通量计算现在可能需要对面进行四点模版 ($e=1, \dots, 4$) 空间通量匹配插值。考虑图 13-2 中描述的连接常规单元和切割单元的常规面 RC 的情况。在左图中, 模板的两个极端插值点都有相关的物种密度 $\rho Y_{\alpha 1}$ 和 $\rho Y_{\alpha 4}$, 因为在这些位置至少定义了一个切割单元或规则单元。在右图中, 模板的下极点位置(单元格 S)完全位于 SOLID 阶段内, 它取内层单元格 $\rho Y_{\alpha 2}$ 的值, 使插值变成 Godunov 类型的 RC 。还请注意第 4.2.1 节中描述的通量受限插值的精度损失, 这是由于切割单元中心点使得模版间距不均匀造成的。

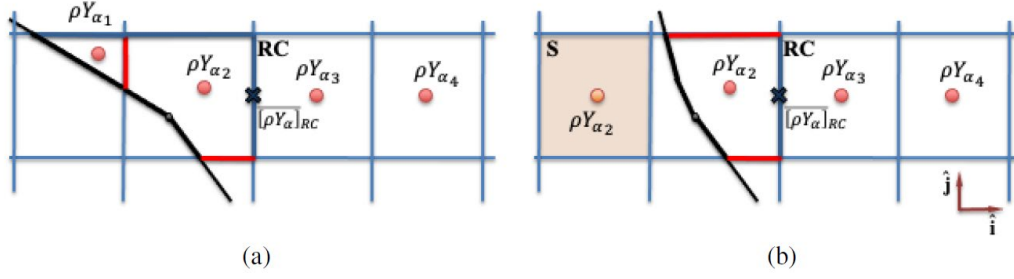


图 13-2 通量有限插值：(a) 4 点模板通量有限插值到面 RC 的常规和切割单元物种密度。(b) 模板中较低的单元位于实心区域（单元 S）内，因此该极值点使用了内部单元值 ρY_2 。

B. 面 $k=3, 6$ 为 GASPHASE 切割面：

对于图 13-1b 中的 GASPHASE 切面 $k=3$ ，单元 jj 对应的平流项为

$$(\rho Y_{\alpha} \mathbf{u})_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{jj,k} A_k = \overline{[\rho Y_{\alpha}]}_k (\mathbf{u}_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{jj,k}) A_k \quad (13.35)$$

其中，面平均法向速度 $\mathbf{u}_k \cdot \hat{\mathbf{n}}_{jj,k}$ （即近似于面中心值）假定为已知。 $\overline{[\rho Y_{\alpha}]}_k$ 是通过对面的通量限制插值得到的，方法与前述类似。切面单元 ii 的通量分量自然与单元 jj 的通量分量符号相反。

C. 面 1、2 为 INBOUNDARY 切面：

边界切面中平流项的处理方法与前述相似。考虑在图 13-1b 的 INBOUNDARY 切面 $k=1$ 的边界上施加的法向速度 $\mathbf{u}_1 = v_n \hat{\mathbf{n}}_{ii,1}$ （进入实心区域）。在这种情况下，平流分量为

$$(\rho Y_{\alpha} \mathbf{u})_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,1} A_k = \overline{[\rho Y_{\alpha}]}_1 v_n A_k \quad (13.36)$$

如果 $v_n > 0$ ，则 $\overline{[\rho Y_{\alpha}]}_1 = \rho Y_{\alpha ii}$ ，否则规定 $\overline{[\rho Y_{\alpha}]}_1 = \rho Y_{\alpha ii,1}$

13.1.6 非稳态演化：标量的显式时间积分

众所周知，切单元法与显式时间积分法配合使用时，会带来很大的时间限制。一般来说，GASPHASE 切单元的尺寸较小，会严重影响时间步长。我们记得，气相上的每个单元（包括切割单元）都需要满足 CFL 和 Von Neuman 稳定性约束。文献中提出了几种不同的方法来解决这个问题，即单元合并、混合或链接方法。一般来说，这些方法会导致周围单元的临时选择程序，必须处理许多特殊情况，在某些情况下，靠近边界的解可能会恶化。

我们使用一个简单而稳健的程序来解决这个问题。在标量单元未知数的计算方案中，我们会对切割单元进行测试。如果切割单元格的体积小于阈值体积 $V_{thr} = \text{CCVOL_LINK } V_{cart}$ ，其中 V_{cart} 是本地笛卡尔单元格的体积， $\text{CCVOL_LINK} < 1$ 是阈值系数（默认值 0.5），则该单元格的未知数是体积大于 V_{thr} 的相邻单元格的未知数。这在数学上定义了两个相连单元格的单一控制体积。在建立 FV 离散化的质量矩阵时，会添加单元体积，并添加相应符号的通量和矩阵项。需要注意的是，与这两个单元的共同面对应的通量在这组单元的单一方程中有效抵消。另外，如果经过多次单元格编号迭代（默认值为 2）后，网格中仍存在未链接的小单元格，则该小单元格将被屏蔽，其对应的直角坐标单元格将被标记为实心。

13.2 动量时间行进和沉浸式边界

13.2.1 动量-压力耦合

作为第一近似值，考虑由以下偏微分方程组定义的牛顿流问题：

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -[\mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) + \nabla H(\mathbf{x}, t)], \mathbf{x} \in \Omega - \sum \Omega_i, t \in \mathbb{R}_+ \quad (13.37)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (\nabla \cdot \mathbf{u})^{th} \quad (13.38)$$

其中方程(13.37)是动量方程， $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 是空间速度场， $\mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t)$ 是包含对流、扩散和可能的其他力项的矢量， $H(\mathbf{x}, t)$ 是势标量场（在本例中为物理顶场，通常称为压力）。为了便于论证，在 FDS 中采用低马赫数近似，只需考虑指定的散度场 $(\nabla \cdot \mathbf{u})^{th}(\mathbf{x}, t)$ （热力学散度）即可。在 FDS 中使用的热浮力流模型中，该散度场是能量方程的替代。域 $\Omega - \sum \Omega_i$ 代表流体区域， $\partial\Omega, \partial\Omega_1, \dots, \Omega_{nbods}$ 上的 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 规定了边界条件。

对不可压缩或低马赫数流动进行时间积分的经典分数步法基于两种操作：首先是动量传输以获得中间速度，其次是将速度投影到目标散度场。考虑从 t_n 到 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 的控制方程的前向欧拉更新形式：给定 $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ ， $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})^{th}$ ，已知

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -[\mathbf{F}^n + \nabla H^n] \quad (13.39)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})^{th} \quad (13.40)$$

其中，由于时间已经离散化， \mathbf{u}^{n+1} 表示式(13.37)-(13.38)在 t_{n+1} 时刻的数值近似解。由于势场 $H(\mathbf{x}, t)$ 没有时间演化方程，因此假定它负责执行散度条件并用于投影步骤。利用方程(13.39)的散度性并考虑约束条件式(13.40)，该方法的两个步骤为

1. 求 H^n 解的泊松方程：

$$\nabla \cdot \nabla H^n = -\left[\frac{(\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})^{th} - \nabla \cdot \mathbf{u}^n}{\Delta t} \right] - \nabla \cdot \mathbf{F}^n \quad (13.41)$$

2. 获得步进的最终速度：

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n - \Delta t [\mathbf{F}^n + \nabla H^n] \quad (13.42)$$

$\hat{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u}^n - \Delta t \mathbf{F}^n$ 称为中间速度，是 \mathbf{u}^{n+1} 的非匹配散度近似值（即 $\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}^{n+1} \neq (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1})^{th}$ ）。

虽然在原始问题，即公式(13.37)-(13.38)中， $H(\mathbf{x}, t)$ 不需要边界条件，但投影方案的结果是步骤公式(13.41)的泊松方程需要边界条件。对于显式方法和静止实体边界，相应的边界条件是 H^n 的同质 Neumann 条件，在 $\partial\Omega, \partial\Omega_1, \dots, \Omega_{nbods}$ 中， $\partial H^n / \partial x_n$ （即[131]）。

该方案的下一个部分涉及浸入固体边界的近似速度边界条件。在 FDS 中，速度场分量在直角坐标面或切割面上交错分布。对于复杂几何体，上述投影方案适用于由切割单元和规则气体单元组成的非结构网格。因此，泊松方程在非结构网格中离散化，并通过矩阵直接求解器求解，求解方式可以是 FDS 网格（ULMAT）或全局（UGLMAT）。目前，由于需要为每一个切面单元定义一个背景压力，因此数值方案只允许每个单元/面有一个切面单元。分割单元的阻塞处理方法在用户指南中有所描述。获得最终速度的投影步骤涉及规则面的网格单元大小和切割面的中心点到中心点距离。

从浸没边界发出的横向速度、切线应力和涡度被定义在与几何表面相交的笛卡尔面和周围的笛卡尔边缘上。为此，我们采用了壁面模型应力施加法（STM），具体如下。

13.2.2 应力法：通过直角坐标应力估算切向速度

在离散动量方程式(13.39)中， \mathbf{F}^n 的表达式为

$$\mathbf{F}^n = -\left[\mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} + \tilde{p} \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_0) \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] \right]^n \quad (13.43)$$

在本节中，我们关注的是偏离应力 $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ 项的散度、离散化和边界上的剪应力值。

1. 网格对齐实体的壁面模型剪应力

考虑图 13-3 中网格对齐的情况。在与固体边界相邻的面上定义了一个速度分量 u_e^n 。该面的壁面顶点为 B 点。在边界点 B 上有一个已知的剪应力 τ_w 。在二维空间中，e 点的 x 源分量 $\nabla \cdot \tau$ 可按以下方式计算：

$$\left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right]^n \simeq \left[\frac{\tau_{xx,E} - \tau_{xx,W}}{\Delta x} + \frac{\tau_{xy,N} - \tau_w}{\Delta y} \right]^n \quad (13.44)$$

因此，在显式时间积分方案中，必须估算剪应力 τ_w 的边界值，并将其作为动量方程的源。在 FDS 中，这一过程是通过壁模型完成的。在这种情况下，一个简单的壁面模型由函数 $u^+ = f(y^+)$ 和近壁缩放关系给出：

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}; \quad y^+ = \frac{y}{\delta_v}; \quad \delta_v = \frac{\nu}{u_\tau}; \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (13.45)$$

这里， τ_w 是壁面 B 点的应力； ρ 和 ν 是密度和分子运动粘度。 δ_v 是近壁粘性长度尺度。所使用的函数模型已在第 5.4 节中描述，它对应于零压力梯度平衡湍流边界层（对数定律）。由于该函数是非线性的，因此 y^+ 、 τ_w 、 u_τ 和 δ_v 是通过定点迭代计算收敛的。

参照图 13-3，考虑到壁面应力表达式 $\tau_w = \rho \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0}$ 和已知速度值 u_e^n ，进行初始化：

- 计算 $\tau_w^0 = \rho \nu \frac{2|u_e^n|}{\Delta y}$
- 计算 $u_\tau^0 = \sqrt{\tau_w^0 / \rho}$
- 计算 $\delta_v^0 = \nu / u_\tau^0$
- 计算 $y^{+,0} = \frac{\Delta y}{2\delta_v^0}$

如果进行的是直接数值模拟 (DNS)，则只需计算壁面应力（其定义）。对于壁面建模的大涡流模拟 (LES)， $k = 1, 2, \dots$ 直到所需的收敛：

- a) 计算 $y^{+,k} = \frac{\Delta y}{2\delta_v^{k-1}}$
- b) 如果 $y^{+,k} < 12$ ，则计算 $\tau_w^k = \rho (u_e^n / y^{+,k})^2$ ，否则使用 $\tau_w^k = \rho \left(\frac{u_e^n}{\ln(y^{+,k}) / \kappa + Br} \right)^2$
- c) 计算 $u_\tau^k = \sqrt{\tau_w^k / \rho}$
- d) 计算 $\delta_v^k = \nu / u_\tau^k$

其中 $\kappa \simeq 0.41$ 和 $Br \simeq 5.2$ 为对数定律常数。计算出壁应力 τ_w 后，将其用于动量方程的右侧定义，以演化速度流变量 $u_e^n \rightarrow u_e^{n+1}$ 。壁面外的这一速度分量与其他离散速度的时间积分方式相同，但必须遵守 CFL 和粘性约束，以确保稳定性。

$\partial v / \partial x \simeq \frac{v_{i+1,j,k} - v_{i,j,k}}{\Delta_x}$ 。请注意，与墙壁的距离 Δ_{RC} 用于计算切面和 y 方向的有限差分。

同时，将动态粘度内插到 RC 边缘，估算 $\mu_{RC} \frac{\partial v}{\partial x}$ 和 $\mu_{RC} \frac{\partial u}{\partial y}$ 。

- b) 以包含 IB 和 RC 边缘的面为中心，在距离边界 $B \Delta_y / 2$ 处定义点 UB。通过沿 y 方向对 u_E 和 u_F 进行线性插值，获得 UB 处的速度分量 u_{UB} 。
- c) 使用壁函数计算边界点 B 处的 $\partial u / \partial y$ 和 $\mu_w \partial u / \partial y$ 。请注意，壁面函数例程的输入是沿 y 轴向距离 $\Delta_y / 2$ 的速度分量 u_{UB} 。我们正在墙面法线方向以外的方向使用墙面模型。
- d) 外部边 EP 的定义如下：如果 $\Delta_{IB} \leq \Delta_y / 2$ ，则 EP 为 RC 边；否则，在车轴方向 $(i, j+1, k)$ 使用外边。计算 EP 的 $\partial u / \partial y$ 和 $\mu \partial u / \partial y$ 。
- e) 从边界 B 和 EP 值线性外推 $\partial u / \partial y$ 和 $\mu \partial u / \partial y$ 至 IB 边缘。
- f) 如果 EP 是 RC 的外缘，则根据 EP 和 B 值线性插值 RC 的 $\partial u / \partial y$ 和 $\mu \partial u / \partial y$ 。为使 u_F 对该量的计算有反馈，我们将内插的 $\partial u / \partial y$ 和 $\mu \partial u / \partial y$ 与第 a) 点计算的值平均。

最后，使用计算得到的梯度 $\partial u_i / \partial x_j$ 和分量 $\mu \partial u_i / \partial x_j$ 为所有 RC 和 IB 边缘分配涡度和剪应力。计算出的涡度和应力用于构建方程(13.43)的力矢量 \mathbf{F}_n ，并用于投影方程(13.41)-(13.42)。

与标量传输类似，小切面及其相关体积将限制动量的显式时间积分步骤，以确保稳定性。采用与标量类似的链接程序，将小切面与周围面链接起来，并为链接集定义一个 $\bar{\mathbf{F}}_n$ 平均值。这些面上的压力梯度值并不链接，这是正确执行逐个单元离散散度约束和质量守恒所必需的。

13.3 能量方程、热力学散度

13.3.1 散度约束

从显焓演化方程出发，式(13.38)中施加的速度场散度可分解为

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \mathbf{u})^{th} = & \left[\frac{1}{\rho c_p T} - \frac{1}{\bar{p}} \right] \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{w \rho_0 g_z}{\rho c_p T} \\
 & + \frac{1}{\rho c_p T} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\
 & + \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\dot{m}_{\alpha}''' - \nabla \cdot \mathbf{J}_{\alpha} - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) \right]
 \end{aligned} \tag{13.46}$$

我们称这种散度表达式为热力学散度 $(\nabla \cdot \mathbf{u})^{th}$ 。速度投影方案在空间离散化的每个单元中对离散速度场强制执行这一最终散度。接下来，我们来看看公式(13.46)右侧涉及速度 \mathbf{u} 的非守恒平流项的有限体积离散化。

我们将使用前述方程的有限体积版本来获得每个切割单元体积上的体积积分目标热力学散度，并重新计算切割单元邻近的常规气相单元上的热力学散度。

13.3.2 标量平流项的有限体积离散化

考虑等式

$$\nabla \cdot \phi \mathbf{u} = \mathbf{u} \cdot \nabla (\phi) + \phi \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{13.47}$$

对单元体积 ii 进行积分

$$\int_{\Omega_{ii}} \mathbf{u} \cdot \nabla(\phi) d\Omega = \int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) d\Omega - \int_{\Omega_{ii}} \phi \nabla \cdot \mathbf{u} d\Omega \quad (13.48)$$

假定在单元边界对标量 ϕ 进行通量有限的插值，则离散对应方程为

$$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla(\phi)} V_{ii} = \sum_{k=1}^{nf_c} (\bar{\phi} \mathbf{u})_{ii,k} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k - [\phi]_{ii} \sum_{k=1}^{nf_c} \mathbf{u}_{ii,k} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k \quad (13.49)$$

这里的上划线表明，以单元为中心的标量 $\phi \in \{\rho h_s, \rho Y_\alpha\}$ 是通过通量限制插值方案插值到单元面上的。 $\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla(\phi)}$ 中的加线表示该项的计算与所采用的通量限制插值法一致。此外， V_{ii} 是单元 ii 的体积， A_k 是给定单元的面 $k = 1, \dots, nf_c$ 的面积。最后一个等式是公式(B.12)的有限体积对应式。

13.3.3 离散热力学散度表达式

对于切割单元 ii ，相应的离散体积积分表达式为

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \mathbf{u})_{ii}^h V_{ii} = & \left[\frac{1}{(\rho c_p T)_{ii}} - \frac{1}{\bar{p}_{ii}} \right] \frac{\partial \bar{p}_{ii}}{\partial t} V_{ii} + \frac{w_{ii} \rho_0 \mathbf{g}_z}{(\rho c_p T)_{ii}} V_{ii} \\ & + \frac{1}{(\rho c_p T)_{ii}} \left[\dot{q}''' V_{ii} - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r'' V_{ii} - \sum_{k=1}^{nf_c} \dot{\mathbf{q}}_{ii,k}'' \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k - \overline{\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho h_s)} V_{ii} \right] \\ & + \frac{1}{\rho_{ii}} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\dot{m}_{\alpha}''' V_{ii} - \sum_{k=1}^{nf_c} \mathbf{J}_{\alpha,ii,k} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k - \overline{\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho Y_{\alpha})} V_{ii} \right] \end{aligned} \quad (13.50)$$

其中加线项指的是相应标量的通量限制插值，带下标 ii 的项指的是单元定义的量，标量扩散通量 $\mathbf{J}_{\alpha} = -\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}$ 。辐射热通量 $\nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}_r''$ 的散度由辐射传输方程（第 7.2 节）提供。此外，垂直速度 w_{ii} 是根据切割单元中心点进行内插的。通量矢量 $\dot{\mathbf{q}}_{ii,k}''$ 指的是扩散热通量和传导热通量。

13.3.4 以有限体积形式计算扩散热通量

根据所采用的物种扩散模型，扩散热通量矢量场为 $\dot{\mathbf{q}}_{d,\alpha}'' = h_{s,\alpha} \rho D_{\alpha} \nabla(Y_{\alpha})$ 。其在单元 ii 上的散度积分为

$$\int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (-h_{s,\alpha} \rho D_{\alpha} \nabla(Y_{\alpha})) d\Omega = \sum_{k=1}^{nf_c} (-h_{s,\alpha} \rho D_{\alpha} \nabla(Y_{\alpha}))_{ii,k} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k \quad (13.51)$$

其中， $(-h_{s,\alpha} \rho D_{\alpha} \nabla(Y_{\alpha}))_{ii,k}$ 是定义在单元 ii 边界表面 k 上的平均热通量。

13.3.5 以有限体积形式计算热传导通量

混合物的热传导通量矢量定义为 $\dot{\mathbf{q}}_{kT}'' = -k \nabla(T)$ ，其中 k 是混合物的传导率。其在单元 ii 上的散度积分计算方法与上一节类似：

$$\int_{\Omega_{ii}} \nabla \cdot (-k \nabla(T)) d\Omega = \sum_{k=1}^{nf_c} (-k \nabla(T))_{ii,k} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ii,k} A_k \quad (13.52)$$

其中， $(-k \nabla(T))_{ii,k}$ 是定义在单元 ii 边界表面 k 上的平均热通量。

参考文献

- [1] American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, Pennsylvania. ASTM E1355-12, Standard Guide for Evaluating the Predictive Capabilities of Deterministic Fire Models, 2012. V
- [2] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk, and K. Overholt. Fire Dynamics Simulator, Technical Reference Guide. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, USA, and VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, sixth edition, September 2013. Vol. 1: Mathematical Model; Vol. 2: Verification Guide; Vol. 3: Validation Guide; Vol. 4: Software Quality Assurance. V
- [3] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk, and K. Overholt. Fire Dynamics Simulator, User's Guide. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, USA, and VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, sixth edition, September 2013. v, 46, 57, 77, 106, 107, 113
- [4] H.C. Hottel. Stimulation of Fire Research in the United States After 1940 (A Historical Account). Combustion Science and Technology, 39:1–10, 1984. 1
- [5] W.W. Jones. A Review of Compartment Fire Models. NBSIR 83-2684, National Bureau of Standards (now NIST), Gaithersburg, Maryland, 1983. 1
- [6] J. Quintiere. A Perspective on Compartment Fire Growth. Combustion Science and Technology, 39:11–54, 1984. 1
- [7] G.P. Forney and W.F. Moss. Analyzing and Exploiting Numerical Characteristics of Zone Fire Models. Fire Science and Technology, 14:49–60, 1994. 1
- [8] S.V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing, New York, 1980. 2
- [9] R.G. Rehm and H.R. Baum. The Equations of Motion for Thermally Driven, Buoyant Flows. Journal of Research of the NBS, 83:297–308, 1978. 2, 10, 15, 149
- [10] E.S. Oran and J.P. Boris. Numerical Simulation of Reactive Flow. Elsevier Science Publishing Company, New York, 1987. 2
- [11] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk, and K. Overholt. Fire Dynamics Simulator, Technical Reference Guide, Volume 3: Validation. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, USA, and VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, sixth edition, September 2013. 5, 51
- [12] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. Phys. Fluids, 8:2182, 1965. 6
- [13] Y. Morinishi, T. S. Lund, O. V. Vasilyev, and P. Moin. Fully conservative high order finite difference schemes for incompressible flow. Journal of Computational Physics, 143:90–124, 1998. 6
- [14] J.W. Deardorff. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. Boundary-Layer Meteorol., 18:495–527, 1980. 11, 29
- [15] Stephen B. Pope. Turbulent Flows. Cambridge University Press, 2000. 11, 25, 27, 28, 29, 42, 50, 103, 169, 170, 179
- [16] R.A. Sweet. Direct Methods for the Solution of Poisson's Equation on a Staggered Grid. Journal of Computational Physics, 12:422–428, 1973. 11, 36
- [17] W. Grosshandler. RadCal: A Narrow Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment. NIST Technical Note 1402, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 1993. 12, 155, 157
- [18] H.R. Baum and K.B. McGrattan. Simulation of Large Industrial Outdoor Fires. In Fire Safety Science – Proceedings of the Sixth International Symposium. International Association for Fire Safety Science, 2000. 15
- [19] P.L. Roe. Characteristics-based schemes for the euler equations. Ann. Rev. Fluid Mech., 18:337, 1986.

17, 18, 175

- [20] G. Zhou. Numerical simulations of physical discontinuities in single and multi-fluid flows for arbitrary Mach numbers. PhD thesis, Chalmers Univ. of Tech., Goteborg, Sweden, 1995. 17, 18, 175
- [21] E.F. Toro. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction. Springer, 2nd edition, 1999. 17, 175, 193
- [22] A. Suresh and H.T. Huynh. Accurate Monotonicity-Preserving Schemes with Runge-Kutta Time Stepping. *Journal of Computational Physics*, 136:83–99, 1997. 18
- [23] A. Kempf. Large-Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Flames. PhD thesis, Technischen Universität Darmstadt, 2003. 18
- [24] S. Gottlieb, C.-W. Shu, and E. Tadmor. Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods. *SIAM Review*, 43(1):89–112, 2001. 18
- [25] B. McBride, M. Zehe, and S. Gordon. NASA Glenn Coefficients for Calculating Thermodynamic Properties of Individual Species. NASA/TP 2002-211556, National Aeronautics and Space Administration, Cleveland, OH, September 2002. 23
- [26] M.W. Chase. NIST-JANAF Thermochemical Tables. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Monograph No. 9. American Chemical Society, Woodbury, New York, 4th edition, 1998. 23, 202
- [27] R. McDermott, A. Kerstein, R. Schmidt, and P. Smith. Characteristics of 1D spectra in finite-volume large-eddy simulations with one-dimensional turbulence subgrid closure. In 58th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics, Chicago, Illinois, November 2005. 25, 29
- [28] U. Piomelli, W.H. Cabot, P. Moin, and S. Lee. Subgrid-scale backscatter in turbulent and transitional flows. *Physics of Fluids A*, 3(7):1766–1771, 1991. 28
- [29] J. Smagorinsky. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3):99–164, March 1963. 29
- [30] D.K. Lilly. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences*, Yorktown Heights, USA, 1967. 29, 179
- [31] K. McGrattan, S. Hostikka, R. McDermott, J. Floyd, C. Weinschenk, and K. Overholt. Fire Dynamics Simulator, Technical Reference Guide, Volume 2: Verification. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, USA, and VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, sixth edition, September 2013. 29, 30
- [32] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Physics of Fluids A*, 3(7):1760–1765, 1991. 29
- [33] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A*, 3(11):2746–2757, 1991. 29
- [34] J. Bardina, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Improved Subgrid Scale Models for Large Eddy Simulation. In AIAA 13th Fluid & Plasma Dynamics Conference, AIAA-80-1357, Snowmass, Colorado, July 1980. American Institute of Aeronautics and Astronautics. 29
- [35] B. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Physics of Fluids*, 16(10):3670–3681, 2004. 30
- [36] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor. *Flow, Turbulence, and Combustion*, 62:183–200, 1999. 30
- [37] W. Zhang, N. Ryder, R.J. Roby, and D. Carpenter. Modeling of the Combustion in Compartment Fires Using Large Eddy Simulation Approach. In *Proceedings of the 2001 Fall Technical Meeting*, Eastern States Section. Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvania, December 2001. 31
- [38] T. Davidson. A Simple and Accurate Method for Calculating Viscosity of Gas Mixtures. RI 9456, US Bureau of Mines, 1993. 31
- [39] B.E. Poling, J.M. Prausnitz, and J.P. O’Connell. *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill,

- New York, 5th edition, 2000. 32
- [40] E.A. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, and J. Mohd-Yusof. Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations. *Journal of Computational Physics*, 161:35–60, 2000. 38
 - [41] H. Werner and H. Wengle. Large-eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. In *8th Symposium on Turbulent Shear Flows*, pages 155–168, Munich, Germany, 1991. Technische University Munich. 42
 - [42] D.C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc., 2nd edition, 1998. 43
 - [43] B.F. Magnussen and B.H. Hjertager. On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In *Proceedings of the Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 719–729. Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvania, 1977. 47, 50, 54
 - [44] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, Pennsylvania, 2nd edition, 2005. 47, 50, 53, 54, 173
 - [45] R.O. Fox. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. Cambridge Univ Pr, 2003. 47
 - [46] R. McDermott, K. McGrattan, and J. Floyd. A simple reaction time scale for under-resolved fire dynamics. In *Fire Safety Science – Proceedings of the 10th International Symposium*, pages 809–820, University of Maryland, College Park, Maryland, USA, 2011. 50
 - [47] Z. Chen, J. Wen, B. Xu, and S. Dembele. Extension of the eddy dissipation concept and smoke point soot model to the LES frame for fire simulations. *Fire Safety Journal*, 64:12–26, February 2014. 52, 173
 - [48] B. Panjwani, I. Ertesvåg, K. E. Rian, and A. Gruber. Subgrid Combustion modeling for large eddy simulation (LES) of turbulent combustion using eddy dissipation concept. In J. C. F. Pereira and A. Sequeira, editors, *V European Conference on Computational Fluid Dynamics*, Lisbon, Portugal, 14-17 June 2010. ECCOMAS. 52, 173, 174
 - [49] C. Dopazo and E. E. O’Brien. Approach to autoignition of turbulent mixture. *Acta Astronaut.*, 1:1239–1266, 1974. 52, 169
 - [50] S.R. Turns. *An Introduction to Combustion*. McGraw-Hill, New York, 2nd edition, 1996. 55, 173
 - [51] C. Beyler. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, chapter Flammability Limits of Premixed and Diffusion Flames. Springer, New York, 5th edition, 2016. 57
 - [52] C. Huggett. Estimation of Rate of Heat Release by Means of Oxygen Consumption Measurements. *Fire and Materials*, 4(2):61–65, 1980. 57
 - [53] J. Morehart, E. Zukoski, and T. Kubota. Characteristics of large diffusion flames burning in a vitiated atmosphere. In *Proceedings of the Third International Symposium on Fire Safety Science*, pages 575–583, 1991. 58
 - [54] W.M. Pitts. The Global Equivalence Ratio Concept and the Formation Mechanisms of Carbon Monoxide in Enclosure Fires. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21:197–237, 1995. 58
 - [55] M. Bundy, A. Hamins, E.L. Johnsson, S.C. Kim, G.H. Ko, and D.B. Lenhert. Measurements of Heat and Combustion Products in Reduced-Scale Ventilation-Limited Compartment Fires. NIST Technical Note 1483, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 2007. 58
 - [56] R Viskanta and M P Menguc. Radiation Heat Transfer in Combustion Systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 13:97–160, 1987. 61
 - [57] R. Siegel and J. R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor & Francis, New York, 4th edition, 2002. 62, 76
 - [58] C.B. Ludwig, W. Malkmus, J.E. Reardon, and J.A.L. Thomson. *Handbook of Infrared Radiation From Combustion Gases*. Nasa sp-3080, National Aeronautics and Space Administration, Office of Management, Scientific and Technical Information Program, 1973. 62, 158

- [59] S. Hostikka, K.B. McGrattan, and A. Hamins. Numerical Modeling of Pool Fires using Large Eddy Simulation and Finite Volume Method for Radiation. In *Fire Safety Science – Proceedings of the Seventh International Symposium*, pages 383–394. International Association for Fire Safety Science, 2002. 62
- [60] C.L. Beyler. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, chapter Fire Hazard Calculations for Large Open Hydrocarbon Fires. Springer, New York, 5th edition, 2016. 65
- [61] N. Takahashi, H. Koseki, and T. Hirano. Temporal and Spatial Characteristics of Radiation from Large Pool Fires. *Bulletin of Japanese Association of Fire Science and Engineering*, 49(1):27–33, 1999. 65
- [62] A. Gupta, K. Meredith, G. Agarwal, S. Thumulu, Y. Xin, M. Chaos, and Y. Wang. CFD Modeling of Fire Growth in Rack-Storages of Cartoned Unexpanded Plastic (CUP) Commodity. *FM Global Open Source CFD Fire Modeling Workshop*, 2015. 65
- [63] J.Y. Murthy and S.R. Mathur. Radiative Heat Transfer in Axisymmetric Geometries Using an Unstructured Finite-Volume Method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 33:397–416, 1998. 66
- [64] G.D. Raithby and E.H. Chui. A Finite-Volume Method for Predicting Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media. *Journal of Heat Transfer*, 112(2):415–423, 1990. 66
- [65] S. Hostikka. Development of fire simulation models for radiative heat transfer and probabilistic risk assessment. VTT Publications 683, VTT Technical Research Centre of Finland, Espoo, Finland, 2008. 66
- [66] S.H. Kim and K.Y. Huh. Assessment of The Finite-Volume Method and The Discrete Ordinate Method for Radiative Heat Transfer In a Three-Dimensional Rectangular Enclosure. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 35:85–112, 1999. 68
- [67] T. Ravigururajan and M. Beltran. A Model for Attenuation of Fire Radiation Through Water Droplets. *Fire Safety Journal*, 15:171–181, 1989. 71
- [68] A. Tuntomo, C. Tien, and S. Park. Optical Constants of Liquid Hydrocarbon Fuels. *Combustion Science and Technology*, 84:133–140, 1992. 71
- [69] A. Collin, P. Boulet, G. Parent, and D. Lacroix. Numerical simulation of a water spray – Radiation attenuation related to spray dynamics. *International Journal of Thermal Sciences*, 46:856–868, September 2007. 71
- [70] S. Maruyama, H. Nakai, A. Sakurai, and A. Komiya. Evaluation method for radiative heat transfer in polydisperse water droplets. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109:1–15, January 2008. 71
- [71] W. Yang, T. Parker, H.D. Ladouceur, and R.J. Kee. The Interaction of Thermal Radiation and Water Mist in Fire Suppression. *Fire Safety Journal*, 39:41–66, 2004. 72
- [72] W.J. Wiscombe. Improved Mie Scattering Algorithms. *Applied Optics*, 19(9):1505–1509, 1980. 72
- [73] G.M. Hale and M.R. Querry. Optical constants of water in the 200 nm to 200 μ m wavelength region. *Applied Optics*, 12(3):555–563, 1973. 72
- [74] L.A. Dombrovsky, S.S. Sazhin, S.V. Mikhalovsky, R. Wood, and M.R. Heikal. Spectral properties of diesel fuel droplets. *Fuel*, 82:15–22, 2003. 73
- [75] T.L. Bergman, A.S. Lavine, F.P. Incropera, and D.P. DeWitt. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley and Sons, New York, 7th edition, 2011. 77, 78, 99, 100, 206, 207
- [76] H.W. Park, K. Moon, E. Oztekin, R. McDermott, C. Lee, and J.-I. Choi. Near-Wall Modeling for Large Eddy Simulation of Convective Heat Transfer in Turbulent Boundary Layers. In *65th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics*, San Diego, CA, November 18-20 2012. American Physical Society. 78
- [77] E.S. Oztekin, D. Blake, and R. Lyon. Numerical simulations of a small fire in an aircraft cargo compartment. In *FM Global Open Source CFD Fire Modeling Workshop*, Norwood, MA, May 10 2012. 78

- [78] B.A. Kader. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24:1541–1544, 1981. 78
- [79] N. Bixler. VICTORIA 2.0: A Mechanistic Model for Radionuclide Behavior in a Reactor Coolant System Under Severe Accident Conditions. NUREG/CR 6131, US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC, 1998. 85
- [80] C. Davies. *Aerosol Science*. Academic Press, London, 1966. 86
- [81] M. Sippola and W. Nazaroff. Particle Deposition from Turbulent Flow: Review of Published Research and Its Applicability to Ventilation Ducts in Commercial Buildings. LBNL Report 51432, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, 2002. 86
- [82] S. G. Jennings. The Mean Free Path in Air. *J. Aerosol Sci.*, 19(2):159–166, 1988. 86
- [83] X. Hu, Z. Wang, F. Jia, E.R. Galea, and M.K. Patel. Simulating Smoke Transport in Large Scale Enclosure Fires Using a Multi-Particle-Size Model. In *Fire Safety Science – Proceedings of the 10th International Symposium*, pages 445–458, University of Maryland, College Park, Maryland, USA, 2011. 86
- [84] J. Brock. On the Theory of Thermal Forces Acting on Aerosol Particles. *J. Coll. Sci.*, 17:768–780, 1962. 86
- [85] D. McCoy and T. Hanratty. Rate of Deposition of Droplets in Annular Two-Phase Flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 3:319–331, 1977. 87
- [86] W. Ludwig, K. Lehtinen, J. Pyykonen, D. Brown, J. Paralel, J. Jokiniemi, and R. Gamble. CFD Simulation on Aerosol Impaction and Deposition Analysis in a Passive Containment Condenser. In *8th International Conference on Nuclear Engineering*. American Society of Mechanical Engineers, 2000. 87
- [87] N.E. Bixler. VICTORIA 2.0: A Mechanistic Model for Radionuclide Behavior in a Nuclear Reactor Coolant System Under Severe Accident Conditions. NUREG/CR-6131, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, December 1998. Work performed under contract to the US Nuclear Regulatory Agency, Washington DC. 88, 89
- [88] D. Higgins and M. Davidson. An Isothermal Model of Agglomeration in a Flash Smelting Reaction Shaft. In *Fifth International Conference on CFD in the Process Industries*. CSIRO Minerals, Melbourne, Australia, 2006. 88
- [89] R. Gaunt et al. MELCOR Computer Code Manuals: Reference Manuals Version 1.8.5, Volume 2, Rev. 2. NUREG/CR-6119, US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC, 2000. 90, 109
- [90] H. Müller, J. Lehmkuhl, A. Hundhausen, A. Belt, and H.-J. Allelein. Development of a wall condensation model for coarse mesh containment scale applications. In *CFD for Nuclear Reactor Safety Applications (CFD4NRS-6)*, Cambridge, Massachusetts, 2016. 91
- [91] C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, Boca Raton, Florida, 1998. 93, 94
- [92] H. Schlichting. *Boundary Layer Theory*. McGraw-Hill, New York, 7th edition, 1979. 94
- [93] S.F. Hoerner. *Fluid-dynamic drag: practical information on aerodynamic drag and hydrodynamic resistance*. Hoerner Fluid Dynamics, Bakersfield, CA, 2nd edition, 1965. 94
- [94] J. Ramírez-Muñoz, A. Soria, and E. Salinas-Rodríguez. Hydrodynamic force on interactive spherical particles due to the wake effect. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(7):802–807, 2007. 94, 95
- [95] E. Loth. Quasi-steady shape and drag of deformable bubbles and drops. *International Journal of Multiphase Flow*, 34(6):523–546, June 2008. 94
- [96] L. Prahl, A. Holzer, D. Arlov, J. Revstedt, M. Sommerfeld, and L. Fuchs. On the interaction between two fixed spherical particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(7):707–725, 2007. 95, 96
- [97] L. Prahl, A. Jadoon, and J. Revstedt. Interaction between two spheres placed in tandem arrangement

- in steady and pulsating flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(10):963–969, 2009. 95
- [98] Pratip Bhattacharyya and Bikas K. Chakrabarti. The mean distance to the n th neighbour in a uniform distribution of random points: an application of probability theory. *European Journal of Physics*, 29(3):639–645, 2008. 95
- [99] T.S. Chan. Measurements of Water Density and Droplet Size Distributions of Selected ESFR Sprinklers. *Journal of Fire Protection Engineering*, 6(2):79–87, 1994. 96
- [100] H.Z. Yu. Investigation of Spray Patterns of Selected Sprinklers with the FMRC Drop Size Measuring System. In *Fire Safety Science – Proceedings of the First International Symposium*, pages 1165–1176. International Association For Fire Safety Science, 1986. 96
- [101] N. Cheremisinoff. *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, Volume 3: Gas-Liquid Flows. Gulf Publishing Company, Houston, Texas, 1986. 98, 195
- [102] S.S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32:162–214, 2006. 99
- [103] D.B. Spalding. *Convective Mass Transfer: An Introduction*. Edward Arnold, London, 1963. 99
- [104] A. Hamins and K.B. McGrattan. Reduced-Scale Experiments to Characterize the Suppression of Rack Storage Commodity Fires. NISTIR 6439, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 1999. 101
- [105] A. Hamins and K.B. McGrattan. Reduced-Scale Experiments on the Water Suppression of a Rack-Storage Commodity Fire for Calibration of a CFD Fire Model. In *Fire Safety Science – Proceedings of the Seventh International Symposium*, pages 457–468. International Association for Fire Safety Science, 2002. 101
- [106] H.Z. Yu, J.L. Lee, and H.C. Kung. Suppression of Rack-Storage Fires by Water. In *Fire Safety Science – Proceedings of the Fourth International Symposium*, pages 901–912. International Association For Fire Safety Science, 1994. 101
- [107] K. Vafai and C. Tien. Boundary and Inertia Effects on Flow and Heat Transfer in Porous Media. *Int J Heat Mass Transfer*, 24:195–203, 1981. 102
- [108] T. Bartzanas, T. Boulard, and C. Kittas. Numerical simulation of the airflow and temperature distribution in a tunnel greenhouse equipped with insect-proof screens in the openings. *Computers and Electronics in Agriculture*, 34:207–221, 2002. 102
- [109] V. Raman, H. Pitsch, and R.O. Fox. Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-densityfunction approach for simulating turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143:56–78, 2005. 103
- [110] G.E.P. Box and M.E. Muller. A Note on the Generation of Random Normal Deviates. *The Annals of Mathematical Statistics*, 29(2):610–611, 1958. 103
- [111] M. Breuer and M. Alletto. Efficient simulation of particle-laden turbulent flows with high mass loadings using LES. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 35:2–12, 2012. 103
- [112] G. Heskestad and R.G. Bill. Quantification of Thermal Responsiveness of Automatic Sprinklers Including Conduction Effects. *Fire Safety Journal*, 14:113–125, 1988. 105
- [113] P. Ruffino and M. di Marzo. Temperature and Volumetric Fraction Measurements in a Hot Gas Laden with Water Droplets. *Journal of Heat Transfer*, 125(2):356–364, April 2003. 105
- [114] P. Ruffino and M. di Marzo. The Effect of Evaporative Cooling on the Activation Time of Fire Sprinklers. In *Fire Safety Science – Proceedings of the Seventh International Symposium*, pages 481–492. International Association for Fire Safety Science, 2002. 105
- [115] F. Gavelli, P. Ruffino, G. Anderson, and M. di Marzo. Effect of Minute Water Droplets on a Simulated Sprinkler Link Thermal Response. NIST GCR 99-776, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, July 1999. 105
- [116] M.J. Hurley, editor. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*. Springer, New York, 5th edition, 2016. 106, 107

- [117] T. Cleary, A. Chernovsky, W. Grosshandler, and M. Anderson. Particulate Entry Lag in Spot-Type Smoke Detectors. In *Fire Safety Science – Proceedings of the Sixth International Symposium*, pages 779–790. International Association for Fire Safety Science, 1999. 106
- [118] G.W. Mulholland and C. Croarkin. Specific Extinction Coefficient of Flame Generated Smoke. *Fire and Materials*, 24:227–230, 2000. 107
- [119] R.J. Roby, S.J. Olenick, W. Zhang, D.J. Carpenter, M.S. Klassen, and J.L. Torero. A Smoke Detector Algorithm for Large Eddy Simulation Modeling. NIST GCR 07-911, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 2007. 107
- [120] B. Ralph and R. Carvel. Coupled hybrid modelling in fire safety engineering; a literature review. *Fire Safety Journal*, 100:157 – 170, 2018. 109
- [121] F. Colella, G. Rein, J. Torero, and R. Borchellini. A novel multiscale methodology for simulating tunnel ventilation flows during fires. *Fire Technology*, 2010. 109
- [122] F. Colella, G. Rein, V. Verda, and R. Borchellini. Multiscale modeling of transient flows from fire and ventilation in long tunnels. *Computers and Fluids*, 51:16–29, 2011. 109
- [123] J. Floyd, S. Hunt, F. Williams, and P. Tatem. *Fire and Smoke Simulator (FSSIM) Version 1: Theory Manual*. NRL/MR/6180-04-8765, U.S. Naval Research Laboratory, Washington, DC, 2004. 109
- [124] T. George et al. *GOTHIC Containment Analysis Package Users Manual*. NAI 8907-02, Numerical Applications, Inc., Richland, WA, 2006. 109
- [125] D. Zigrang and N. Sylvester. A Review of Explicit Friction Factor Equations. *Transactions of the ASME*, 107:280–283, 1985. 113
- [126] B. Ralph and N. Mofidi. Operation point fan model - a new evaluated approach for atypical pressure conditions in buildings. *Building and Environment*, 186, 2020. 115
- [127] B. Ralph, R. Carvel, and J. Floyd. Coupled hybrid modelling within the fire dynamics simulator: transient transport and mass storage. *Journal of Building Performance Simulation*, 12:685–699, 2019. 116
- [128] M. Berger and M. Aftosmis. Progress Towards a Cartesian Cut-Cell Method for Viscous Compressible Flow. In *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, AIAA 2012-1301, Nashville, TN, 2012. AIAA. 119
- [129] M. Berger. Chapter 1 - cut cells: Meshes and solvers. In Rémi Abgrall and Chi-Wang Shu, editors, *Handbook of Numerical Methods for Hyperbolic Problems*, volume 18 of *Handbook of Numerical Analysis*, pages 1–22. Elsevier, 2017. 119
- [130] Sandra May and Marsha Berger. An explicit implicit scheme for cut cells in embedded boundary meshes. *Journal of Scientific Computing*, 71(3):919–943, Jun 2017. 119
- [131] J. Blair Perot. An analysis of the fractional step method. *Journal of Computational Physics*, 108(1):51 – 58, 1993. 127
- [132] K A Lundquist. Immersed Boundary Methods for High-Resolution Simulation of Atmospheric Boundary-Layer Flow Over Complex Terrain. LLNL Technical Report LLNL-TH-431627, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California, 2010. 128
- [133] Y. Ma and H. Liu. Large-Eddy Simulations of Atmospheric Flows Over Complex Terrain Using the Immersed-Boundary Method in the Weather Research and Forecasting Model. *Boundary-Layer Meteorology*, 165:421–445, 2017. 128
- [134] C.L. Tien. Thermal Radiation Properties of Gases. In J.P. Hartnett and T.F. Irvine, editors, *Advances in Heat Transfer*, volume 5, pages 253–324. Academic Press, New York, 1968. 155, 156
- [135] S.S. Penner. *Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivities*. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, USA, 1959. 155, 156
- [136] Peter J. Mohr, Barry N. Taylor, and David B. Newell. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010. *Reviews of Modern Physics*, 84:1527–1605, 2012. 155

- [137]K. Wakatsuki. High Temperature Radiation Absorption of Fuel Molecules And An Evaluation of Its Influence on Pool Fire Modeling . PhD thesis, University of Maryland, College Park, Maryland, 2005. 157, 159, 160, 161, 162
- [138]LA Lorne Matheson. The intensity of infrared absorption bands. *Physical Review*, 40(5):813–828, June 1932. 157
- [139]Gerhard Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure: II, Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*. D. Van Nostrand Company, Inc., New York, fourth pri edition, 1949. 158, 159, 160, 161
- [140]Editor: Russell D. Johnson III. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, 2011. 160, 161, 162
- [141]Michael F. Modest. *Radiative Heat Transfer*, Second Edition. Academic Press, 2003. 163
- [142]David R Mott and Elaine S Oran. Chemeq2: A solver for the stiff ordinary differential equations of chemical kinetics. Technical report, DTIC Document, 2001. 165
- [143]P. Moin. *Fundamentals of Engineering Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 2001. 166
- [144]D.K. Kahaner, W.F. Lawkins, and S. Thompson. On the use of rootfinding ODE software for the solution of a common problem in nonlinear dynamical systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 28:219–230, 1989. 166
- [145]B. Lilleberg, B. Panjwani, and I. S. Ertesvag. Large Eddy Simulation of Methane Diffusion Flame: Comparison of Chemical Kinetics Mechanisms. In *ICNAAM, Numerical Analysis and Applied Mathematics, International Conference*, volume III, pages 2158–2161. American Institute of Physics, 2010. 173
- [146]M. Herrmann, G. Blanquart, and V. Raman. Flux corrected finite-volume scheme for preserving boundedness in large-eddy simulations. *AIAA Paper 2005-25009*, 2005. 175
- [147]Pierre Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, 2001. 179
- [148]J.M. Suo-Anttila, T.K. Blanchat, A.J. Ricks, and A.L. Brown. Characterization of thermal radiation spectra in 2 m pool fires. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2):2567–2574, 2009. 187, 188
- [149]K. Wakatsuki, G. Jackson, J. Kim, A. Hamins, M. Nyden, and S. Fuss. Determination of planck mean absorption coefficients for hydrocarbon fuels. *Combustion Science and Technology*, 180:616–630, 2008. 187
- [150]S.I. Stoliarov, S. Crowley, R.E. Lyon, and G.T. Linteris. Prediction of the burning rates of noncharring polymers. *Combustion and Flame*, 156:1068–1083, 2009. 187
- [151]P.T. Tsilingiris. Comparative evaluation of the infrared transmission of polymer films. *Energy Conversion and Management*, 44:2839–2856, 2003. 187
- [152]B. Broeckmann and H Schecker. Heat transfer mechanisms and boilover in burning oil-water systems. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 8(3):137–147, 1995. 187
- [153]S.S. Sazhin, P.A. Krutitskii, W.A. Abdelghaffar, E.M. Sazhina, S.V. Mikhlovsky, S.T. Meikle, and M.R. Heikal. Transient heating of diesel fuel droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(14-16):3327–3340, 2004. 187
- [154]G.V. Madhav and R.P. Chhabra. Drag on non-spherical particles in viscous fluids. *International Journal of Mineral Processing*, 43(1-2):15–29, 1994. 187
- [155]S.S. Manohar, A.K. Kulkarni, and S.T. Thynell. In-depth absorption of externally incident radiation in nongray media. *Journal of Heat Transfer*, 117:146–151, February 1995. 187
- [156]P.J. Linstrom and W.G. Mallard. *Evaluated Infrared Reference Spectra*. WebBook. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. 187
- [157]J.E. Bertie, R.N. Jones, Y. Apelblat, and C.D Keefe. Infrared intensities of liquids XXV: Dielectric constants, molar polarizabilities and integrated intensities of liquid toluene at 25 °C between 4800 and 400 cm⁻¹. *Journal of Molecular Structure*, 750(1-3):78–93, 2005. 187

- [158] J.E. Bertie, R.N. Jones, Y. Apelblat, and C.D. Keefe. Infrared Intensities of Liquids XIII: Accurate Optical Constants and Molar Absorption Coefficients Between 6500 and 435 cm^{-1} of Toluene at 25 $^{\circ}\text{C}$, from Spectra Recorded in Several Laboratories. *Applied Spectroscopy*, 48:127–143, January 1994. 187, 188
- [159] J.E. Bertie, S.L. Zhang, H.H. Eysel, S. Baluja, and M.K. Ahmed. Infrared Intensities of Liquids XI: Infrared Refractive Indices from 8000 to 2 cm^{-1} , Absolute Integrated Intensities, and Dipole Moment Derivatives of Methanol at 25 $^{\circ}\text{C}$. *Applied Spectroscopy*, 47:1100–1115, August 1993. 187, 188
- [160] J.E. Bertie, R.N. Jones, and C.D. Keefe. Infrared Intensities of Liquids XII: Accurate Optical Constants and Molar Absorption Coefficients Between 6225 and 500 cm^{-1} of Benzene at 25 $^{\circ}\text{C}$, from Spectra Recorded in Several Laboratories. *Applied Spectroscopy*, 47(7):891–911, 1993. 187, 188
- [161] J.E. Bertie and Z. Lan. Infrared Intensities of Liquids XX: The Intensity of the OH Stretching Band of Liquid Water Revisited, and the Best Current Values of the Optical Constants of H_2O (l) at 25 $^{\circ}\text{C}$ between 15,000 and 1 cm^{-1} . *Applied Spectroscopy*, 50(8):1047–1057, 1996. 187, 188
- [162] Jonathan L. Hodges, Brian Y. Lattimer, Anil Kapahi, and Jason E. Floyd. An Engineering Model for the Pyrolysis of Materials. *Fire Safety Journal*, 141(September):103980, 2023. 205
- [163] Stanislav I. Stoliarov and Yan Ding. Pyrolysis Model Parameterization and Fire Growth Prediction: The State of the Art. *Fire Safety Journal*, 140:103905, 2023. 206

附录A 术语

$A_{p,c}$	液滴/颗粒横截面积
$A_{p,s}$	液滴/颗粒表面积
$A_{\alpha\beta}$	固相阿伦尼乌斯反应的预指数
B	排放源术语；颗粒流动性
C	喷洒器 C 系数；自然对流系数
C_d	曳力系数
C_m	动量容纳系数
Cn	Cunningham 滑移修正系数
C_s	Smagorinsky 常数 (LES)；热滑移系数
C_t	热容系数
c	固体材料比热；真空中的光速
c_p	恒压比热
D	液滴/颗粒直径
D_α	扩散系数
$D_{v,0.5}$	液滴体积中值直径
E	活化能
Fu	Fuchs 因子
\mathbf{f}_b	外力矢量
g	重力加速度
\mathbf{g}	重力矢量，通常为 (0,0,-g)
H	总压力除以密度 (伯努利积分)
$H_{r,\alpha\beta}$	固相反应的反应热
h	传热系数；传质系数；焓；普朗克常数
$h_{s,\alpha}$	物种 α 的显焓
I	单位立体角的辐射强度
I_b	单位立体角的黑体辐射强度
$I_{b,\lambda}$	黑体光谱辐射强度与单位固角波长的函数关系
$I_{b,\omega}$	黑体光谱辐射强度与单位固角波数的函数关系
k	导热系数；抑制衰减因子
k_B	玻尔兹曼常数
Kn	Knudsen 数
K_{th}	热泳速度系数
L	特征长度；表面厚度
$\dot{m}'''_{b,\alpha}$	蒸发液滴/颗粒单位体积内物种 α 的质量生产率
\dot{m}'''_α	通过化学反应单位体积内物种 α 的质量生产率
\dot{m}''_w	水质量通量

m_w''	单位面积的水质量
n_s	固体部分反应顺序
n_{O_2}	氧的部分反应顺序
Nu	努塞尔特数
Pr	普朗特数
p	压力
\bar{p}_0	大气压力面
\bar{p}_m	第 m 个压力区的背景压力
\tilde{p}	压力波动
\dot{q}''	热通量矢量
\dot{q}'''	单位体积释热率
\dot{q}_r''	辐射热通量
\dot{q}_c''	对流热通量
\dot{Q}	总释热率
\dot{Q}^*	火灾 Froude 数
R	通用气体常数
Re	雷诺数
r_p	粒子/液滴半径
$r_{\alpha\beta}$	固相反应率
RTI	喷洒器的响应时间指数
\mathbf{s}	辐射强度方向的单位矢量
Sc	施密特数
Sh	舍伍德数
S_α	固体成分产生率
T	温度
t	时间
U	综合辐射强度；光学路径长度
$\mathbf{u} = (u, v, w)$	速度矢量
W_α	气体物种 α 的摩尔质量
\bar{W}	气体混合物的摩尔质量
We	韦伯数
$\mathbf{x} = (x, y, z)$	位置矢量
X_α	物种 α 的体积分数
Y_α	物种 α 的质量分数
\bar{Y}_α	物种 α 的平均质量分数
\hat{Y}_α	计算单元混合区中物种 α 的质量分数
$Y_{O_2}^\infty$	环境中氧气的质量分数
Y_F	燃料质量分数

y_s	烟气产量
Z_α	物种混合物 α

Greek Letters

α	气体热导率与粒子热导率之比；综合波段强度
γ	比热比；Rosin-Rammler 指数；窄带光谱精细结构参数
Δ	LES 滤波器宽度
Δh	燃烧热
Δh_{O_2}	单位质量氧气消耗释放的能量
$\Delta h_{f,\alpha}^0$	物种 α 形成热
Δh_g	气化热
δ	薄膜厚度；厚度和密度的比例因子
ε	耗散率；发射率；聚集因子
η	集聚分摊系数
κ	吸收系数；冯-卡曼常数
λ	气体分子的平均自由路径；热辐射波长
μ	动力粘度
ν	热辐射频率
ν_α	化学计量系数，物种 α
ν_s	固相反应的固体残渣产量
$\nu_{g,\gamma}$	固相反应中气态物质 γ 的产量
ρ	密度
$\bar{\tau}_\omega$	以 ω 为中心的窄带的平均光谱透射率
τ_{ij}	粘性应力张量
Φ	集聚内核
ϕ	孔隙率
χ, C_s	形状因子
χ_r	辐射损失分数
σ	斯特凡-波兹曼常数；液滴粒度分布常数；表面张力
σ_p	颗粒散射系数
σ_s	散射系数
τ^+	无量纲制动距离
ω	热辐射波数
$\omega = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$	涡度矢量
Ω	固体角

Subscripts

0	初始值
a	空气
b	体相特性; 沸腾
B	Brownian
c	对流
d	拖曳
e	有效特性
g	气体
<i>ijk</i>	气相单元索引
n	条带特性
p	粒子/液滴
PK	碰撞效率
<i>p</i>	压力
r	辐射
s	solid; sensible; soot
S	sticking factor
w	壁面
α	气体物种索引
β	反应索引
λ	波长
ω	波数

附录B 低流速大涡模拟的速度散度约束条件

Rehm 和 Baum 于 1978 年首次提出了控制低马赫数、变密度流体演变的方程[9]，即连续性、物种浓度（质量分数）、动量、能量（显焓）和理想气体状态方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{m}_b''' \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_\alpha \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha) + \dot{m}_\alpha''' + \dot{m}_{b,\alpha}''' \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + (\rho - \rho_0) \mathbf{g} \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h_s \mathbf{u}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \quad (\text{B.4})$$

$$\rho = \frac{\bar{p}\bar{W}}{RT} \quad (\text{B.5})$$

在本附录中，我们从显焓输运方程的保守形式出发，推导出一种数值上一致的速度散度约束，可用于低马赫流的大涡模拟（LES）。该结果考虑了质量和能量的数值传输，而在采用总变差不增（TVD）标量传输方案时，在相对粗糙的工程 LES 计算中很难消除质量和能量的数值传输。如果没有此处得出的修正项，热容量和分子量不同的气体种类的未解决（数值）混合可能会导致错误的混合温度，并最终导致能量预算失衡。

附录B.1 散度限制

如前所述，目前的工作源于试图理解和纠正能量预算失衡的尝试，这种失衡在实施温度相关比热和 TVD 标量传输后变得显而易见。这项工作的启示之一是，推导散度约束的起点选择自然会导致两种不同形式的散度表达式。虽然这些形式在数学上是等价的，但它们却导致了两种完全不同--但却完全合理--的数值公式。

附录B.1.1 来自连续性

从连续性方程出发，我们可以将速度散度系数除以密度的物质导数：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{1}{\rho} \dot{m}_b''' \quad (\text{B.6})$$

利用理想气体定律和微分状态方程可以得出

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} = & \left(\frac{1}{\rho c_p T} - \frac{1}{\bar{p}} \right) \frac{D\bar{p}}{Dt} \\ & + \frac{1}{\rho c_p T} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_\alpha \left(\frac{\bar{W}}{W_\alpha} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha) + \dot{m}_\alpha''' \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_\alpha \left(\frac{\bar{W}}{W_\alpha} - \frac{\int_{T_b}^T c_{p,\alpha}(T') dT'}{c_p T} \right) \dot{m}_{b,\alpha}''' \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

附录B.1.2 来自显焓

或者，我们也可以将显热焓传输方程中的速度散度系数考虑在内：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho h_s} \left[\frac{D}{Dt} (\bar{p} - \rho h_s) + \dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \right] \quad (\text{B.8})$$

从这个出发点出发，（可以说）散度表达式的自然结果是

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} = & \frac{1}{\rho c_p T} \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \\ & + \frac{1}{\rho c_p T} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' \right] \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{\int_{T_b}^T c_{p,\alpha}(T') dT'}{c_p T} \right) \dot{m}_{b,\alpha}''' \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

附录B.1.3 比较

请注意(B.7)和(B.9)的第一、第二和第三行之间的细微差别。第一行的差别是 $(\mathbf{u} \cdot \nabla \bar{p}) / \bar{p}$ 。在(B.9)中，第二行和第三行各包含一个额外项，分别是 $\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s)$ 和 $\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha})$ ，用于计算焓和质量的平流。利用(B.1)-(B.5)可以证明(B.7)和(B.9)在数学上是等价的（见第 附录 B.4 节）。

附录B.2 散度离散

显焓传输方程的守恒形式——其名称来源于左侧平均传输项的通量散度形式——是

$$\frac{\partial(\rho h_s)}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho h_s \mathbf{u})}_{\text{mean transport}} = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \quad (\text{B.10})$$

这种形式被称为守恒形式，因为根据高斯定理，域上离散通量散度的积分等同于域边界上通量的表面积分。对于周期域，该积分为零——流入的流量必须等于流出的流量。保证显焓离散守恒的关键是首先离散化平均输运项。下划线表示斜率限制插值算子。如第附录 B.2.1 节所述，该算子是专门设计的，以符合平均输运项保守形式的通量限制、总变差不增（TVD）输运。

展开平均输运项并根据离散散度重新排列（B.10），得到

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{\rho h_s} \left[- \left(\frac{\partial(\rho h_s)}{\partial t} + \overline{\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s)} \right) + \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' \right] \quad (\text{B.11})$$

$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s)}$ 的数值细节是确保离散守恒的关键（见第附录 B.2.1 节）。在数学上，(B.11)等同于(B.8)。然而，在数值上，(B.11)考虑了 TVD 传输方案的关键细节。

散度表达式的大部分复杂性都隐藏在时间导数项 $\frac{\partial(\rho h_s)}{\partial t}$ 中。利用(B.1)-(B.5)可以证明(B.11)展开后得到(B.9)（见 附录 B.3 节）。

附录B.2.1 离散通量散度的因式分解

下面我们将展示一维单元 i 的焓通量散度的数值分解。算子 $\delta() / \delta x$ 表示中心差。密度 ρ 和显

焓 h_s 分别存储在以 i 、 $i+1$ 等为索引的单元中心。速度 u 保存在单元面上，索引为 $i+\frac{1}{2}$ 等。这里，面值上的加线（后缀 $i\pm\frac{1}{2}$ ）表示通量限制器，基本上是对单元面标量场的特殊插值。通量限制器的作用是防止标量解中出现虚假振荡。必须避免这种振荡，因为它们可能导致有界性违规和不稳定性。

在分解通量散度时，我们的目标是将该项分解为以下两个部分：

$$\begin{aligned} \left[\frac{\delta(\rho h_s u)}{\delta x} \right] &= \frac{(\overline{\rho h_s})_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} - (\overline{\rho h_s})_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x} \\ &= (\rho h_s)_i \underbrace{\frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x}}_{\nabla \cdot \mathbf{u}} + \underbrace{\frac{\Delta_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} + \Delta_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x}}_{\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho h_s)} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

这里， $\Delta_{i+\frac{1}{2}}$ 代表 $i+\frac{1}{2}$ 面的标量数据（本例中为 ρh_s ）的有限斜率。单元 i 的斜率限制器定义如下

$$(\rho h_s)_i + \Delta_{i+\frac{1}{2}} = \overline{(\rho h_s)}_{i+\frac{1}{2}} \quad (\text{B.13})$$

$$(\rho h_s)_i - \Delta_{i-\frac{1}{2}} = \overline{(\rho h_s)}_{i-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.14})$$

请注意，虽然标量面值对于面 $\left[\overline{(\rho h_s)}_{i+\frac{1}{2}} - \overline{(\rho h_s)}_{i-\frac{1}{2}} \right]$ 是唯一的，但有限斜率却不是（ $\Delta_{i+\frac{1}{2}} \neq \Delta_{i-\frac{1}{2}}$ ）。

附录B.2.2 实例：纯迎风

假设在一维中所有 $u > 0$ 都是自左向右的风。对于 Godunov 方案（一阶迎风），有限斜率的计算方法如下：

$$\begin{aligned} \Delta_{i+\frac{1}{2}} &= \overline{(\rho h_s)}_{i+\frac{1}{2}} - (\rho h_s)_i \\ &= (\rho h_s)_i - (\rho h_s)_i \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned} \Delta_{i-\frac{1}{2}} &= (\rho h_s)_i - \overline{(\rho h_s)}_{i-\frac{1}{2}} \\ &= (\rho h_s)_i - (\rho h_s)_{i-1} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

因此，单元平均平流项变为

$$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho h_s)} = u_{i-\frac{1}{2}} \left[\frac{(\rho h_s)_i - (\rho h_s)_{i-1}}{\delta x} \right] \quad (\text{B.17})$$

附录B.2.3 实例：中心差分

对于中心差法，有限斜率的计算方法如下：

$$\begin{aligned}
\Delta_{i+\frac{1}{2}} &= \overline{(\rho h_s)}_{i+\frac{1}{2}} - (\rho h_s)_i \\
&= \frac{1}{2} [(\rho h_s)_i + (\rho h_s)_{i+1}] - (\rho h_s)_i
\end{aligned} \tag{B.18}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} [(\rho h_s)_{i+1} - (\rho h_s)_i] \\
\Delta_{i-\frac{1}{2}} &= (\rho h_s)_i - \overline{(\rho h_s)}_{i-\frac{1}{2}} \\
&= (\rho h_s)_i - \frac{1}{2} [(\rho h_s)_{i-1} + (\rho h_s)_i] \\
&= \frac{1}{2} [(\rho h_s)_i - (\rho h_s)_{i-1}]
\end{aligned} \tag{B.19}$$

因此，单元平均平流项变为

$$\overline{\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s)} = \frac{1}{2} u_{i+\frac{1}{2}} \left[\frac{(\rho h_s)_{i+1} - (\rho h_s)_i}{\delta x} \right] + \frac{1}{2} u_{i-\frac{1}{2}} \left[\frac{(\rho h_s)_i - (\rho h_s)_{i-1}}{\delta x} \right] \tag{B.20}$$

附录B.2.4 通用实现： 使用通量限制器

以上示例仅供参考。一般来说，我们首先计算通量限制面值，并从(B.13)和(B.14)中得到限制斜率。然后根据(B.12)中的第二个底面计算单元平均平流项。

附录B.3 分解时间导数

利用理想气体定律，焓的时间导数可以分解如下：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\rho h_s)}{\partial t} &= \rho \frac{\partial h_s}{\partial t} + h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&= \rho \sum_{\alpha} \left(Y_{\alpha} c_{p,\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + h_{s,\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} \right) + h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&= \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \sum_{\alpha} h_{s,\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} + h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&= \rho c_p T \left[\frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{1}{\bar{W}} \frac{\partial \bar{W}}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right] + \rho \sum_{\alpha} h_{s,\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} + h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&= \rho c_p T \left[\frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \sum_{\alpha} \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \right] + \rho \sum_{\alpha} h_{s,\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} + h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&= \frac{\rho c_p T}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \rho \sum_{\alpha} \left(h_{s,\alpha} - c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} \right) \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} + (h_s - c_p T) \frac{\partial \rho}{\partial t}
\end{aligned} \tag{B.21}$$

质量分数的时间导数源于物种迁移方程，即

$$\frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' - Y_{\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho Y_{\alpha} \mathbf{u}) \right] \tag{B.22}$$

在 (B.21) 中使用 (B.22)，并对物种求和以消除密度时间导数，我们得到

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\rho h_s)}{\partial t} &= \frac{\rho c_p T}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \sum_{\alpha} \left(h_{s,\alpha} - c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) - \rho Y_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u} \right]
\end{aligned} \tag{B.23}$$

将 (B.23) 插入 (B.8) 得出 (基本完成)

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho h_s} \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{c_p T}{h_s} \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \sum_{\alpha} \left(c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - h_{s,\alpha} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) - \rho Y_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u} \right] \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \sum_{\alpha} \left(c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - h_{s,\alpha} \right) \dot{m}_{\alpha}'''
\end{aligned} \tag{B.24}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{\rho h_s} \sum_{\alpha} \left(c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - h_{s,\alpha} \right) \rho Y_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho h_s} \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{c_p T}{h_s} \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \sum_{\alpha} \left(c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - h_{s,\alpha} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' \right]
\end{aligned} \tag{B.25}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{u} + \left(\frac{c_p T}{h_s} - 1 \right) \nabla \cdot \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho h_s} \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{c_p T}{h_s} \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\
&+ \frac{1}{\rho h_s} \sum_{\alpha} \left(c_p T \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - h_{s,\alpha} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' \right]
\end{aligned} \tag{B.26}$$

最后..... (比较 (B.9))

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho c_p T} \frac{D\bar{p}}{Dt} - \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \\
&+ \frac{1}{\rho c_p T} \left[\dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{\mathbf{q}}'' - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) \right] \\
&+ \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \left[\nabla \cdot (\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) - \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) + \dot{m}_{\alpha}''' \right]
\end{aligned} \tag{B.27}$$

附录B.4 散度表达式之间的等价关系

根据下文, (B.7)和(B.9)之间的等价关系显而易见:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\rho c_p T} \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho h_s) - \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho Y_{\alpha}) \\
& = -\frac{1}{\rho c_p T} [\rho \mathbf{u} \cdot \nabla h_s + h_s \mathbf{u} \cdot \nabla \rho] - \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) [\rho \mathbf{u} \cdot \nabla Y_{\alpha} + Y_{\alpha} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho] \\
& = -\frac{1}{c_p T} \mathbf{u} \cdot \sum_{\alpha} [Y_{\alpha} \nabla h_{s,\alpha} + h_{s,\alpha} \nabla Y_{\alpha}] - \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho - \sum_{\alpha} \left(\frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} - \frac{h_{s,\alpha}}{c_p T} \right) \mathbf{u} \cdot \nabla Y_{\alpha} \\
& = -\frac{1}{c_p T} \mathbf{u} \cdot \sum_{\alpha} Y_{\alpha} \nabla h_{s,\alpha} - \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho - \sum_{\alpha} \frac{\bar{W}}{W_{\alpha}} \mathbf{u} \cdot \nabla Y_{\alpha} \\
& = -\frac{1}{c_p T} \mathbf{u} \cdot \sum_{\alpha} Y_{\alpha} c_{p,\alpha} \nabla T - \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho - \mathbf{u} \cdot \sum_{\alpha} \bar{W} \nabla (Y_{\alpha} / W_{\alpha}) \\
& = -\mathbf{u} \cdot \left[\frac{1}{T} \nabla T + \frac{1}{\rho} \nabla \rho + \bar{W} \nabla (1 / \bar{W}) \right] \\
& = -\frac{1}{\bar{p}} \mathbf{u} \cdot \nabla \bar{p}
\end{aligned} \tag{B.28}$$

附录B.5 恒定比热的简化

回顾一下，对于理想气体，我们可以写出

$$c_{p,\alpha} = c_{v,\alpha} + R / W_{\alpha} = \frac{R}{W_{\alpha}} \left(\frac{\gamma_{\alpha}}{\gamma_{\alpha} - 1} \right) \tag{B.29}$$

其中， $c_{p,\alpha}$ 是恒定压力下 α 的比热， $c_{v,\alpha}$ 是恒定体积下的比热， $\gamma_{\alpha} = c_{p,\alpha} / c_{v,\alpha}$ 。通常，比热之比近似为常数，在火灾计算中，通常选择空气的比热值 $\gamma \approx 1.4$ 。如果我们将参考温度设为零，在这种情况下，显焓变为

$$\rho h_s = \rho c_p T = \rho T \sum_{\alpha} Y_{\alpha} c_{p,\alpha} = \rho R T \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) \sum_{\alpha} \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}} = \rho \frac{R T}{\bar{W}} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) = \bar{p} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) \tag{B.30}$$

因此，如果 \bar{p} 是恒定且均匀的，那么 ρh_s 也是恒定且均匀的。因此， $\partial(\rho h_s) / \partial t = 0$ ， $\nabla(\rho h_s) = 0$ 所以我们不需要对散度表达式进行修正。这就提高了代码的运行速度，因为这些散度修正相当昂贵。要使用这种简化方法，用户需要在输入文件的 MISC 行输入 `CONSTANT_SPECIFIC_HEAT_RATIO=.TRUE` 和 `STRATIFICATION=.FALSE`。

附录C 气相吸收系数

\mathbf{x} 处气体混合物的瞬时吸收系数 κ_n 是由单个气体的灰度或带均吸收系数 $\kappa_{n,i}$ 相加（叠加）计算得出的。

$$\kappa_n(\mathbf{x}) = \sum_i \kappa_{n,i}(Y_i(\mathbf{x}), T(\mathbf{x})) \quad (\text{C.1})$$

为了计算 $\kappa_{n,i}(Y_i, T)$ ，FDS 中采用了窄带模型 RADCAL[17]。在初始化阶段，RADCAL 用于生成质量分数范围 $0 \leq Y_i \leq 1$ 和温度范围 $270 \text{ K} \leq T \leq 2470 \text{ K}$ 的各物种平均吸收系数表。在模拟过程中， κ_n 的局部值是通过最近的温度值（查找）和内插浓度值找到的。

RADCAL 计算参与辐射的物种在离散光谱值（用波长 λ 或波长数 ω 表示）和温度下的光谱特性，并返回每个光谱带的两个可选平均吸收系数 n 。第一个系数是普朗克平均系数[134]。

$$\kappa_{n,i,P}(Y_i, T) = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} I_{b,\lambda}(T) 100 \bar{\kappa}_i(\lambda, T) P_i d\lambda \quad (\text{C.2})$$

其中， λ 是波长，单位为 μm ； $P_i = Y_i / (Y_i + (1 - Y_i) W_i / W_{N_2})$ 是参与物种 i 的分压，单位为 atm； $\bar{\kappa}_i$ 是参与物种 i 的光谱吸收系数，单位为 $\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-1}$ 。请注意，计算 κ_n 时使用的温度是当地气体温度；因此， $\kappa_{n,i,P}(P, T)$ 是气相温度和分压的函数，与路径长度无关。其单位为 $1/\text{m}$ 。引入因子 100 是为了将 $\bar{\kappa}_i$ 从 $\text{atm}^{-1} \text{cm}^{-1}$ 转换为 $\text{atm}^{-1} \text{m}^{-1}$ 。RADCAL 可以对多种物质的混合物进行这些计算，但在 FDS 中，每次只对单一物质进行计算。

源项 $I_{b,\lambda}(T)$ 是普朗克黑体分布定律，它表示黑体在温度 T 下发射辐射能的平衡率，是波长 λ 的函数。形式上，波长 λ 处发射的单色黑体辐射能由以下公式给出[135]

$$I_{b,\lambda}(T) d\lambda = \frac{2hc^2 \lambda^{-5}}{\exp\left(\frac{hc}{k_B \lambda T}\right) - 1} d\lambda \quad (\text{C.3})$$

这里， h 是普朗克常数 ($6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$)， c 是真空中光速 ($2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$)， k_B 是波尔兹曼常数 ($1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$) [136]。 $I_{b,\lambda}(T)$ 的单位是 $\text{W/m}^2/\text{str/m}$ ；波长从 μm 转换为 m 。

第二个系数是所谓的路径平均或有效吸收系数 $\kappa_{n,i,e}(Y_i, T, L)$ ，其定义公式如下

$$\underbrace{\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} I(\lambda, L, Y_i, T, T_{\text{rad}}) d\lambda}_{I_{\text{tot}}} = \frac{\sigma}{\pi} \left[\left(1 - e^{-\kappa_{n,i,e} L}\right) T^4 + e^{-\kappa_{n,i,e} L} T_{\text{rad}}^4 \right] \quad (\text{C.4})$$

其中， L 是路径长度， T_{rad} 是火焰辐射的有效温度。RADCAL 通过计算离开等效厚度为 L 的均匀气层的强度来计算左侧积分，该气层以温度为 T_{rad} 的黑墙为界，具有大量窄光谱带。根据公式 (C.4) 求解可得

$$\kappa_{n,i,e}(Y_i, T, L) = -\frac{1}{L} \ln \left(\frac{I_{\text{tot}} - I_b(T)}{I_b(T_{\text{rad}}) - I_b(T)} \right) \quad (\text{C.5})$$

其中， $I_b(T) = \sigma T^4 / \pi$ 。

在 FDS 中，路径长度 L 默认为 10 厘米。用户也可以指定路径长度。如果 $T = T_{\text{rad}}$ ，则强度与 $\kappa_{n,i,e}$ 无关，因此 $\kappa_{n,i,e}(T_{\text{rad}})$ 值是根据邻近温度内插得到的。

如果只有一个波段 ($N=1$)，则使用两个吸收系数中较小的一个：

$$\kappa_{n,i} = \min(\kappa_{n,i,p}(Y_i, T), \kappa_{n,i,e}(Y_i, T, L)) \quad (C.6)$$

如果 $N > 1$ 或 $L = 0$ ，则 $\kappa_{n,i} = \kappa_{n,i,p}$ 。请注意，只要气体混合物中含有水蒸气、燃料或燃烧产物，无论辐射波段数为 N ，都会使用 RADCAL 中的光谱数据。

关于波数、波长和频率的说明：在处理描述辐射波性质的各种量时，可能会产生一些混淆。这些量是波数 ω 、波长 λ 和频率 ν 。大多数用户可能对频率 ν 并不陌生，它的单位是赫兹 (Hz)，代表每秒的周期数。对于低能量的辐射波（如无线电波），人们更倾向于使用这种单位，而对于高能量的辐射波，人们则更倾向于使用波长和波数。波长和波数通过[135]与频率相关。

$$\lambda = c / \nu \text{ and } \omega = \nu / c \quad (C.7)$$

其中， c 是真空中光速。波长 λ 表示假设波在真空中以光速传播，波在一个周期内传播的距离。其单位通常用 μm 表示。波数 ω 是波长的倒数。它表示每单位长度的周期数。在大多数红外光谱分析工作中，它的单位是 cm^{-1} 。这也是下文中使用的单位。使用关系式可以很容易地将以 cm^{-1} 为单位的波长转换为以 μm 为单位的波长。

$$\lambda \mu\text{m} = 10000 / \omega \text{cm}^{-1} \quad (C.8)$$

最后，如果用户希望将普朗克黑体分布定律表示为波长的函数，那么在进行变量变换时应小心谨慎。首先应该表示波长 λ 处发射的辐射能与相应波数 ω 处发射的辐射能相同[134]。

$$I_{b,\lambda}(T) d\lambda = -I_{b,\omega}(T) d\omega \quad (C.9)$$

引入负号是因为 ω 是 λ 的倒数。

$$\frac{d\lambda}{d\omega} = -\frac{1}{\omega^2} \quad (C.10)$$

公式(C.9)可以用公式(C.3)重写为

$$I_{b,\omega}(T) d\omega = \frac{2hc^2 \omega^3}{\exp\left(\frac{hc\omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega \quad (C.11)$$

$I_{b,\omega}(T)$ 的单位是 $\text{W/m}^2/\text{str}/\text{m}^{-1}$ ；波数从 cm^{-1} 转换为 m^{-1} 。如果用户希望用普朗克黑体分布定律分析下面的燃料带（以波长表示），则应使用公式(C.11)，但不应使用公式(C.3)（ $\lambda = 1/\omega$ ）。

结合分子模型和数据表来计算参与辐射的物种的光谱辐射特性。RADCAL 的原始版本包括 CO_2 、 H_2O 、 CO 和 CH_4 的光谱特性，这些特性要么是通过定量分子光谱推导建立的模型，要么是通过将实验数据拟合到适当的统计窄带模型而制成的表格[17]。在 RADCAL 原始数据的基础上，增加了以下燃料的新实验数据：

- 乙烯： C_2H_4
- 乙烷： C_2H_6
- 丙烯： C_3H_6
- 丙烷： C_3H_8
- 甲苯： C_7H_8
- 正庚烷： C_7H_{16}
- 甲醇： CH_3OH
- 甲基丙烯酸甲酯： $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$

这些新数据是通过傅立叶变换红外光谱测量 700 cm^{-1} 到 4000 cm^{-1} 之间的波长获得的[137]。综合波段强度 α_i 是比较不同红外波段相对重要性的一个有用量，它对第 i 个参与物种的定义为[138]：

$$\alpha_i(T) = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \bar{\kappa}_i(\omega', T) d\omega' \quad (C.12)$$

其单位为 $\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 。光谱吸收系数 $\bar{\kappa}_l$ 的值是一个窄带的平均值，其光谱宽度 $\Delta\omega$ 在 $\omega < 1100\text{cm}^{-1}$ 时为 5cm^{-1} ，在 $1100\text{cm}^{-1} \leq \omega < 5000\text{cm}^{-1}$ 时为 25cm^{-1} ，在 $5000\text{cm}^{-1} \leq \omega$ 时为 50cm^{-1} 。

下面的小节简要介绍了每种气相辐射物种活跃的分子波段，并提供了其中大多数物种在指定温度下最重要波段的综合波段强度。在这些波段之外，物种是透明的。在模拟开始时，使用 RADCAL 计算吸收系数，然后将其作为物种浓度和温度的函数列表。在模拟过程中，从数值表中插值出局部吸收系数。各个物种的吸收系数相加得出总吸收系数。

二氧化碳：

二氧化碳是线性分子，有四种振动模式，但只有两种基本红外振动频率[139]。RADCAL 中包含五个不同的频带，见表 13-1。二氧化碳光谱中最强的波段是波段 3。在 300 K 时，它的综合波段强度为 $2963\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 。表中的数据是使用古迪统计窄带模型在 300 K 到 2400 K 温度范围内进行实验得到的。

表 13-1 RADCAL 中包含的 CO_2 光谱带。

带 #	边界 (cm^{-1})		方法
1	500	880	表格
2	880	1100	模化
3	1975	2475	模化
4	3050	3800	模化
5	4550	5275	模化

一氧化碳：

一氧化碳是一种二原子分子，因此只有一种振动模式[139]。RADCAL 包含一个明显的频带，见表 13-2。它对应于 $\text{C} \equiv \text{O}$ 三键的伸展。第一个泛音（以 $\omega \approx 4260\text{cm}^{-1}$ 为中心）没有计算在内；在标准温度和压力下，其综合波段强度可以忽略不计。在 295 K 时，带 1 的综合带强度为 $260\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 。与 CO 相关的统计窄带模型是 Goody 模型。建议使用温度范围为 295 K 至 2500 K。

表 13-2 RADCAL 中包含的 CO 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法
1	1600	2400	模化

水蒸气：

由于其分子结构的非线性，水蒸气的红外光谱复杂而宽广[139]。在 RADCAL 中，考虑了从 50cm^{-1} 到 9300cm^{-1} 的水蒸气光谱。RADCAL 中的数据由 Ludwig 等人提供[58]。实验数据采用统计 Goody 窄带模型进行拟合。在标准温度和压力下，最强的频带位于 $[50-2100]\text{cm}^{-1}$ ： $\alpha = 300\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 和 $[3000-4000]\text{cm}^{-1}$ ： $\alpha = 220\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 范围内。

甲烷：

甲烷是四面体形状的球顶分子，碳原子位于四面体的中心[139]。它属于点族 T_d 。甲烷的红外光谱是 C-H 基团振动旋转模式的结果。它有九种振动模式，但由于其对称性，这只转化为两种不同的红外主动基振频率。在 RADCAL 中，甲烷的红外光谱被分为三个不同的频带（基本频带 + 退化频带），见表 13-3。最强的波段是波段 1 和波段 2，在标准温度和压力下的综合波段强度分别为 $237\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 和 $212\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 。表中数据来自温度从 300 K 到 1400 K 的高分辨率傅立叶变换红外实验[137]。光谱吸收系数是在假定傅立叶变换红外光谱测量结果为弱线并对实验光谱透射率应用 Beer-Lambert 定律的情况下获得的。

表 13-3 RADCAL 中包含的 CH_4 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 296\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	1150	1600	表格	C-H 弯曲	237
2	2700	3250	表格	C-H 延申	212
3	3400	5000	模化	C-H 延申	

乙烯:

乙烯是一种平面对称的分子, 属于 D_{2h} 点族[139]。乙烯的红外光谱是 $\text{C}=\text{C}$ 、 CH 和 CH_2 基团振动旋转模式的结果。它有 12 种振动模式。在 RADCAL 中, 其红外光谱被分为四个不同的波段, 见表 13-4。波段 1 是吸收最强的波段。所有乙烯的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的, 实验温度从 296 K 到 801 K 不等[137]。光谱吸收系数是通过古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温乙烯柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-4 RADCAL 中包含的 C_2H_4 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 296\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	780	1250	表格	CH_2 弯曲	366
2	1300	1600	表格	CH_2 弯曲	43
3	1750	2075	表格	$\text{C}=\text{C}$ 延申	20
4	2800	3400	表格	C-H 延申	183

乙烷:

乙烷有三个对称轴, 属于 D_{3d} 点群[139]。乙烷的红外光谱是 $\text{C}-\text{C}$ 、 CH 和 CH_2 基团振动旋转模式的结果。它有 18 种振动模式; 其红外光谱分为三个不同的带, 见表 13-5。波段 3 对应于 CH 的伸展, 是吸收最强的波段。在标准温度和压力下, 其综合波段强度是波段 2 的 10 倍以上, 是波段 1 的 20 倍以上。所有乙烷的红外光谱吸收数据都是在 296 K 到 1000 K 的温度范围内通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的[137]。光谱吸收系数是通过使用 Elsasser 模型拟合总压为 1 atm 的均质等温乙烷柱的实验光谱透射率获得的。

表 13-5 RADCAL 中包含的 C_2H_6 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 296\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	730	1095	表格	CH_3 Rock	29
2	1250	1700	表格	CH 弯曲	64
3	2550	3375	表格	CH 延申	761

丙烯:

丙烯只有一个对称面, 属于 C_s 点群[139]。丙烯的红外光谱是 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{C}=\text{C}$ 、 CH 、 CH_2 和 CH_3 基团振动旋转模式的结果。它有 21 种振动模式; 其红外光谱分为三个不同的带, 见表 13-6。波段 3 对应于 CH 的伸展, 是所有丙烯吸收波段中最强的波段。所有丙烯的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的, 实验温度从 296 K 到 1003 K 不等[137]。光谱吸收系数是通过使用古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温丙烯柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-6 RADCAL 中包含的 C_3H_6 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 296\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	775	1150	表格	$\text{C}-\text{C}$ 延申, CH_3 Rock	296
2	1225	1975	表格	$\text{C}=\text{C}$ 延申, CH 弯曲	271
3	2650	3275	表格	CH 延申	509

丙烷:

丙烷有两个对称面和两条旋转轴。它属于点群 C_{2v} [139]。丙烷的红外光谱是 $\text{C}-\text{C}$ 、 CH_2 、 CH_3 基团振动-旋转模式的结果。它有 27 种振动模式; 其红外光谱分为两个不同的波段, 见表 13-7。

波段 2 对应于 CH_3 和 CH_2 的伸展,是所有丙烷吸收波段中最强的波段。在类似条件下,频带 1 的综合频带强度要低得多。所有丙烷的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的,实验温度从 295 K 到 1009 K 不等[137]。光谱吸收系数是利用古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温丙烷柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-7 RADCAL 中包含的 C_3H_8 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 295\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	1175	1675	表格	CH_3 弯曲	121
2	2550	3375	表格	CH_3, CH_2 延伸	1186

甲苯: C_7H_8

甲苯只有一个对称面。它属于 C_s 点族[140]。甲苯的红外光谱是 $\text{C}=\text{C}$ 、 CH 和 CH_3 基团振动旋转模式的结果。它有 39 种振动模式。为便于使用统计窄带模型建模,其红外光谱被分为五个不同的频带,见表 13-8。波段 5 对应于 CH_3 和 CH 的伸展,是吸收最强的波段。所有甲苯的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的,实验温度从 300 K 到 795 K 不等[137]。光谱吸收系数是通过使用 Goody 模型拟合总压为 1 atm 的均质等温甲苯柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-8 RADCAL 中包含的 C_7H_8 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 300\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	700	805	表格	CH 弯曲	237
2	975	1175	表格	CH 弯曲	40
3	1275	1650	表格	CH_3 弯曲	166
4	1650	2075	表格	$\text{C}=\text{C}$ 延伸	101
5	2675	3225	表格	CH_3, CH 延伸	510

正庚烷: C_7H_{16}

正庚烷有两个对称面和两条旋转轴。它属于点基团 C_{2v} [140]。正庚烷的红外光谱来自 $\text{C}-\text{C}$ 、 CH_2 和 CH_3 基团的振动-旋转模式。它有 63 种振动模式。为便于使用统计窄带模型建模,其红外光谱被分为两个不同的带,见表 13-9。波段 2 对应于 CH_3 和 CH_2 基团的伸展,是吸收最强的波段。所有正庚烷的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的,实验温度范围为 293 K 到 794 K[137]。光谱吸收系数是通过使用古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温正庚烷柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-9 RADCAL 中包含的 C_7H_{16} 光谱带

带 #	边界 (cm^{-1})		方法	Assignment	$\alpha(T = 293\text{K})(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	1100	1800	表格	CH_2, CH_3 弯曲	298
2	2250	3275	表格	CH_3, CH_2 延伸	3055

甲醇:

甲醇只有一个对称面。它属于点群 C_s [139]。甲醇的红外光谱来自 $\text{C}-\text{O}$ 、 OH 和 CH_3 基团的振动旋转模式。它有 12 种振动模式。为便于使用统计窄带模型建模,其红外光谱被划分为四个不同的带,见表 13-10。波段 3 对应于 CH_3 基团的伸展,是吸收最强的波段。所有甲醇的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的,实验温度从 293 K 到 804 K 不等[137]。光谱吸收系数是利用古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温甲醇柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-10 RADCAL 中包含的 CH_3OH 光谱带

带 #	边界 (cm ⁻¹)		方法	Assignment	$\alpha(T = 293K)(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	825	1125	表格	C-O 延伸	593
2	1125	1700	表格	CH ₃ , OH 延伸	197
3	2600	3225	表格	CH ₃ 延伸	684
4	3525	3850	表格	OH 延伸	112

甲基丙烯酸甲酯: C₅H₈O₂

在上述所有燃料中, 甲基丙烯酸甲酯或 MMA 的红外光谱最为复杂。它有 15 个原子, 共有 39 种振动模式[140]。MMA 的红外光谱来自 C-O、C=O、C=C、CH₂ 和 CH₃ 基团的振动旋转模式。为了便于使用统计窄带模型建模, 其红外光谱被分为六个不同的带, 见表 13-11。波段 3 与 C-O 基团的伸展相对应, 具有最高的综合波段强度。所有 MMA 的红外光谱吸收数据都是通过高分辨率傅立叶变换红外实验获得的, 实验温度从 396 K 到 803 K 不等[137]。光谱吸收系数是通过使用古迪模型拟合总压为 1 atm 的均质等温 MMA 柱的实验光谱透射率得到的。

表 13-11 RADCAL 中包含的 C₅H₈O₂ 光谱带

带 #	边界 (cm ⁻¹)		方法	Assignment	$\alpha(T = 396K)(\text{atm}^{-1}\text{cm}^{-2})$
1	750	875	表格	CH ₂ 弯曲	42
2	875	1050	表格	CH ₂ 弯曲	131
3	1050	1250	表格	C-O 延伸	800
4	1250	1550	表格	CH ₃ 弯曲	490
5	1550	1975	表格	C=C, C=O 延伸	538
6	2650	3275	表格	CH ₂ , CH ₃ , 延伸	294

1. 统计窄带模型

本节简要介绍了用于获得表中大多数物种在不同温度下的红外光谱吸收系数 $\bar{\kappa}_i(\omega, T)$ 的统计模型。在工程应用中, 使用窄带模型代替线-线模型来表示辐射物种的红外光谱。在窄带方法中, 整个光谱被划分成小的光谱带 (通常为几个 cm⁻¹), 并使用不同的统计方法来计算这些窄带的平均辐射特性。下面介绍两种主要模型: Elsasser 模型和 Goody 模型。这两个模型都假定有洛伦兹线。

Elsasser 模型假定所有光谱线具有相同的形状和强度, 并且相互之间的间距相等。在该模型中, 在总压 P_T 和光路长度 $U = P_i L$ (L 为光柱物理长度, P_i 为参与辐射的第 i 种气体分压) 条件下, 仅充满第 i 种气体的均质等温光柱的光谱透射率 $\bar{\tau}_\omega$ 由表达式[141]给出:

$$\bar{\tau}_\omega = 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\pi \bar{\kappa}_i U}}{\sqrt{1 + \frac{\pi \bar{\kappa}_i U}{4 \bar{\gamma}_i P_T}}} \right) \quad (\text{C.13})$$

其中, $\bar{\gamma}_i$ 是窄带的光谱精细结构参数。单位为 atm⁻¹。 $\bar{\kappa}_i$ 是窄带的光谱吸收系数。单位为 atm⁻¹cm⁻¹。Goody 模型假定所有光谱线的形状相同, 但在窄带内随机分布, 且光谱线强度呈指数分布。对于该模型, 光谱透射率的表达式为[141]:

$$\bar{\tau}_\omega = \exp \left(- \frac{\bar{\kappa}_i U}{\sqrt{1 + \frac{\bar{\kappa}_i U}{4 \bar{\gamma}_i P_T}}} \right) \quad (\text{C.14})$$

对于这两个模型，第 i 个物种的两个窄带光谱量（ $\bar{\kappa}_i$ 和 $\bar{\gamma}_i$ ）都是通过逐行计算或拟合实验数据得到的。

注：对于表格中的所有数据，RADCAL 在必要时会对温度和/或波长中的 $\bar{\kappa}_i$ 和 $\bar{\gamma}_i$ 进行线性插值。如果寻找的温度超出了表中数据的范围，则使用最接近温度的数据。

附录D 复杂化学积分的数值方法

为了求解复杂化学反应（如多步反应、可逆反应）所用的常微分方程系统，FDS 使用二阶 Runge-Kutta (RK2) 方案作为其数值积分器的基础。如下文所述，该方案采用理查德森外推法，将精度提高到四阶，并提供了误差控制手段。使用带有误差控制器的显式积分方案来保持稳定性和速度的一般程序与 Mott 和 Oran[142]的程序类似。

我们的目标是对 ODE 积分

$$\frac{dY}{dt} = f(Y) \quad (D.1)$$

其中， $f(Y)$ 表示反应速率定律， Y 表示物种质量分数（速率定律的温度依赖性在初始条件下被冻结）。总时间间隔为 FDS 时间步长 δt ，迭代子步长为 Δt 。该方案的计算公式为

$$Y^* = Y^k + \Delta t^k f(Y^k) \quad (D.2)$$

$$Y^{k+1} = \frac{1}{2}(Y^k + Y^* + \Delta t^k f(Y^k)) \quad (D.3)$$

这里 k 是迭代指数。子时间间隔的数量由误差控制器决定，如下所述。这种二阶方案是对用于简单化学问题的一阶显式方案的改进。然而，为了保持刚性问题的稳定性，可能需要大量的时间步。

1. Richardson 外推

为了解决这个问题，我们采用了理查德森外推法。理查德森外推法提高了精度等级，并提供了一种误差控制方法。假设有一个精确解 A ，用数值近似表示，使用区间 h ，这样误差 $A - A(h)$ 就可以用 h 的多项式展开来表示。对于两个不同的区间 h 和 $h/2$ ，我们可以写成

$$A_1 = A(h) + \underbrace{a_1(h) + a_2(h)^2 + O(h^3)}_{O(h)} \quad (D.4)$$

$$A_2 = A\left(\frac{h}{2}\right) + \underbrace{a_1\left(\frac{h}{2}\right) + a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + O(h^3)}_{O(h)} \quad (D.5)$$

这里 A 的下标代表时间步长 h 的分段，其中 A_1 为 $h/1$ 步， A_2 为 $h/2$ 步，以此类推。将公式(D.4)减去公式(D.5)的两倍，即可消除 a_1 项：

$$A = 2A_2 - A_1 = 2A\left(\frac{h}{2}\right) - A(h) + \underbrace{a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + O(h^3)}_{O(h^2)} \quad (D.6)$$

会导致解的误差阶数增大。

同样的技术也适用于二阶 Runge-Kutta 方案，该方案有三个子区间： h 、 $h/2$ 和 $h/4$ 。由于 RK2 方案最初是二阶的，三步理查德森外推法给出了四阶解[143]：

$$A = \frac{4A_4 - A_2}{3} + O(h^4) \quad (D.7)$$

在公式(D.7)中， A 代表混合反应器区域内物种浓度的时间更新值 \hat{Y}_α ，如公式(6.28)所示。

2. 误差控制

除了增加数值方案中的误差阶数外，理查德森外推法还提供了误差值的估计值。该估计值通过泰勒展开计算得出：

$$error \approx \frac{1}{15} \left(\frac{4A_4 - A_2}{3} - \frac{4A_2 - A_1}{3} \right) \quad (D.8)$$

保持指定/可接受误差 (err_tol) 所需的时间步长 (Δt_{new}), 可通过使用局部误差 ($error$)、当前时间步长 (Δt), 以及数值积分方案中的误差阶数 (在本例中为四阶) 计算得出:

$$\Delta t_{new} = \Delta t \left(\frac{err_tol}{error} \right)^{1/4} \quad (D.9)$$

等式(D.9)表明, 如果误差估计值相对于误差容限较大, 则新的时间步长会减小; 而如果误差较小, 则新的时间步长会增大。这种动态时间步长方案提高了计算效率, 因为它允许积分器在误差容限或全局仿真时间步长的约束下, 采取尽可能大的时间步长, 从而最大限度地减少所需的积分总步数。

3. 保持有界性

对于任意反应速率和时间步长, 正向积分可能会导致物种质量分数不受限制。为了避免这个问题, 我们采用了一种方法, 即根据极限物种超出边界所需的时间来限制一个子时间步 (见 Kahaner 等人[144])。采取该子步骤后, 用新浓度重新计算 ODEs 的右侧。这一过程不断重复, 直到所有反应速率为零或时间达到 LES 的总时间步长。所谓的“无限快”反应被视为二阶反应 (假设有两个反应物), 活化能为零, 阿伦尼斯常数较大。这种方法可以在多个无限快反应的情况下保持适当的反应物比例。

4. 检测平衡的总体变化方案

上文讨论的误差控制器和可变时间步进处理了与火焰前沿相关的刚性问题。本节讨论的方案可自动检测化学平衡, 其显式积分也是一个刚性问题。即使进行了误差控制, 数值解也可能在误差容限范围之间出现数值波动。这是一种不理想的情况, 经常发生在有竞争反应或可逆反应的情况下。

如果数值围绕一个以误差容限为边界的固定值波动, 积分器就会在一个时间步长内继续计算每个波动值, 从而产生额外的工作。为了尽量减少计算费用, 我们开发了一种总变化 (TV) 方案。该方案在四个连续的子时间步长内检查物种质量分数的差异。在这四点模板内, 每个物种的质量分数有三个差异。TV 方案将差值之和的绝对值与差值之和的绝对值进行比较。对于单调函数, 必须满足以下条件:

$$\sum_{i=1}^4 |Y(i+1) - Y(i)| = \left| \sum_{i=1}^4 (Y(i+1) - Y(i)) \right| \quad (D.10)$$

不熟悉“数据变化”概念的读者应该停下来想一想。它说明, 无论其他复杂性如何, 单调性约束 (无波动) 足以保证式(D.10)中所述的条件。推论是, 如果式(D.10)不成立, 那么我们就一定会有一定程度的波动。

对于我们的四点模版, 与误差容限之间重复波动的极端情况相对应的条件是

$$\sum_{i=1}^4 |Y(i+1) - Y(i)| = 3 \left| \sum_{i=1}^4 (Y(i+1) - Y(i)) \right| \quad (D.11)$$

图 13-5 举例说明了这一点, 该图显示了一个围绕固定点在 0 和 1 之间波动的量。我们可以将四个点之间差值的绝对值之和

$$\sum_{i=1}^4 |Y(i+1) - Y(i)| = |1-0| + |0-1| + |1-0| = 3 \quad (D.12)$$

与差值之和的绝对值进行比较

$$\left| \sum_{i=1}^4 (Y(i+1) - Y(i)) \right| = |(1-0) + (0-1) + (1-0)| = 1 \quad (D.13)$$

公式(D.12)和公式(D.13)的比值为 3, 表明该数据是波动的。在 FDS 中实施这一方案时, 我们没有直接与 3 比较, 而是使用了 2.9, 因为浮点除法可能不会返回精确的 3 值。如果波动已被识别, 那么模板中第四点的值将被冻结, 并成为积分时间步结束时的最终值。这可以防止积分器执行

不必要的子时间步骤。由于误差控制器对解法进行了约束，模版内的任何一个值都在误差容限之内，因此都是可以接受的。

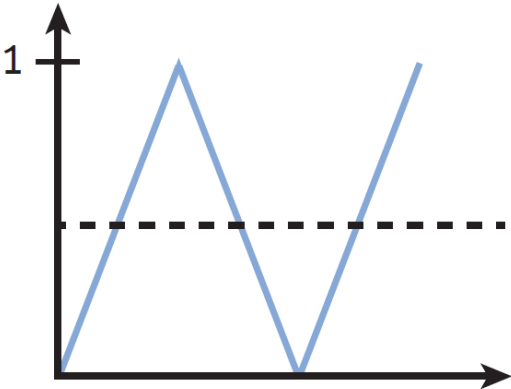


图 13-5 一个量围绕一个固定值在 0 和 1 之间波动的示例

附录E 未混合分数

在第 6.2.2 节中，我们介绍了间歇式反应器湍流燃烧模型中一个重要变量——未混合分数 ζ 的演变方程。本附录解释了该方程的发展过程。

1. PDF 传输方程的矩

单元中物种 α 的平均质量分数用 $\tilde{Y}_\alpha(t)$ 表示。单元内任意一点的流体包裹存在两种状态：完全未混合或完全混合。让 $\hat{Y}_\alpha(t)$ 表示混合反应区中 α 的质量分数，初始值等于单元平均值， $\hat{Y}_\alpha(0) = \tilde{Y}_\alpha^0 \equiv \tilde{Y}_\alpha(0)$ 。 $\psi_\alpha \in [0,1]$ 代表构成的样本空间，子网格概率密度函数（PDF）可写为

$$f(\psi_\alpha; t) = w_1 \delta(0 - \psi_\alpha) + w_2 \delta(1 - \psi_\alpha) + w_3 \delta(\hat{Y}_\alpha[t] - \psi_\alpha) \quad (\text{E.1})$$

其中， $\delta(x)$ 是狄拉克三角函数。换句话说，如果我们观察一个特定点，物种 α 的质量分数可能只有 0、1 或等于混合区值 \hat{Y}_α （见图 13-6）。权值 w_i 必须满足单元格的积分约束： $\int f(\psi_\alpha; t) d\psi_\alpha = 1$ ， $\int f(\psi_\alpha; t) \psi_\alpha d\psi_\alpha = \tilde{Y}_\alpha(t)$ 。

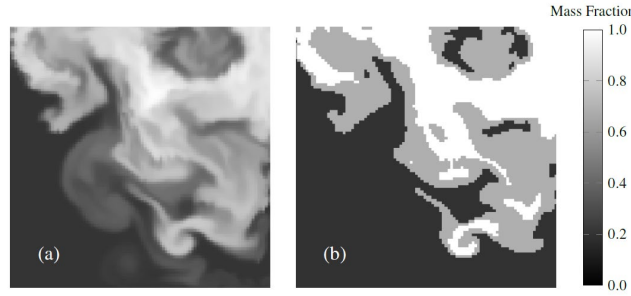


图 13-6 假设计算单元（间歇式反应器）中某一时刻的子网格环境。(a) 湍流传输后高度非混合的解析标量场。(b) 理想化的子网格环境：局部质量分数为 0、1 或等于混合平均值。在本模型中，灰色区域称为“混合反应器区”，在间歇式反应器的整合过程中随时间（体积和成分）而变化。

为方便起见，我们将未混合分数 $\zeta(t)$ 定义为单元内存在的质量分数，即 0 或 1。为满足积分约束，PDF 权重设置为

$$w_1 = \zeta(1 - \tilde{Y}_\alpha^0) \quad (\text{E.2})$$

$$w_2 = \zeta \tilde{Y}_\alpha^0 \quad (\text{E.3})$$

$$w_3 = 1 - \zeta \quad (\text{E.4})$$

正如 Pope[15]所讨论的，PDF(E.1)是通过 Fokker-Planck 方程演化的：

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(f \left\langle \frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} \middle| \psi_\alpha \right\rangle \right) \quad (\text{E.5})$$

右侧带角括号的项是条件均值。这里使用 IEM[49]的一种变体对其进行建模，我们称之为混合均值交换交互作用或 IEMM。当包括化学反应时，条件均值的模型为

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \middle| \psi_\alpha \right\rangle = \frac{1}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_\alpha - \psi_\alpha) + \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \quad (\text{E.6})$$

利用(E.6)，(E.5)的第零矩得出(6.19)。将(E.5)的零点矩和第一矩与密度相乘，即可得到化学源项模型(6.20)。

2. 第一矩方程的推导

$$\int \psi_\beta \left[\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(f \left\langle \frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} | \psi_\alpha \right\rangle \right) \right] d\psi_\beta \quad (\text{E.7})$$

LHS:

$$\int \left[\frac{\partial f \psi_\beta}{\partial t} - f \underbrace{\frac{\partial \psi_\beta}{\partial t}}_0 \right] d\psi_\beta = \frac{d\tilde{Y}_\beta}{dt} \quad (\text{E.8})$$

RHS:

$$\begin{aligned} \int -\psi_\beta \frac{\partial}{\partial \psi_\beta} \left(f \left\{ \frac{1}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_\alpha - \psi_\alpha) + \frac{d\tilde{Y}_\alpha}{dt} \right\} \right) d\psi_\beta = \\ - \int \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\psi_\beta f \{ \}]}_{0 \text{ by Pope Exercise 12.1[15]}} d\psi_\beta + \int f \{ \} \underbrace{\frac{\partial \psi_\beta}{\partial \psi_\alpha}}_{\delta_{\alpha\beta}} d\psi_\beta \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_\beta - \tilde{Y}_\beta) + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\beta}{dt} \\ &= \frac{1}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_\beta - [\zeta \tilde{Y}_\beta^0 + (1 - \zeta) \hat{Y}_\beta]) + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\beta}{dt} \\ &= \frac{\zeta}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_\beta - \tilde{Y}_\beta^0) + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\beta}{dt} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

3. 未混合组分的演变

公式(6.17)的推导过程如下。对(6.19)进行时间微分，可得

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{Y}_\alpha}{dt} &= \tilde{Y}_\alpha^0 \frac{d\zeta}{dt} + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} - \hat{Y}_\alpha \frac{d\zeta}{dt} \\ &= - \frac{d\zeta}{dt} (\hat{Y}_\alpha - \tilde{Y}_\alpha^0) + (1 - \zeta) \frac{d\hat{Y}_\alpha}{dt} \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

比较(E.11)和(E.10)可以看出，在反应器步骤中，未混合部分的变化情况为

$$\frac{d\zeta}{dt} = - \frac{\zeta}{\tau_{mix}} \quad (\text{E.12})$$

请注意，(6.20)在推导过程中引用了(E.12)，而(E.10)却没有——它是一个独立的推导，依赖于混合模型的选择，在本例中是 IEM 的变种，如(E.6)所示。

附录F 湍流批式反应器模型的极限行为

在某些限制条件下，公式(6.20)所示的湍流分批式反应器模型等同于其他湍流燃烧建模方法。下面将讨论这些限制条件。

附录F.1 Burke-Schumann 解决方案

当反应物最初完全混合时（ $\zeta_0 = 0$ ），且单步反应（**Fuel+Air** \rightarrow **Products**）的化学动力学无限快时，本模型简化为 Burke-Schumann 解决方案（见，例如，[50]），其中单元平均混合分数为

$$\tilde{Z} = \tilde{Y}_F + \left(\frac{1}{1+s} \right) \tilde{Y}_P \quad (\text{F.1})$$

附录F.2 EDC 基础

当反应物最初未混合（ $\zeta_0 = 1$ ）且动力学速度无限快时，我们的模型可还原为[44]中描述的涡流耗散概念（EDC）。首先，写出 $\zeta = 1$ 时燃料（F）的(6.20)：

$$\dot{m}_F''' = \rho \frac{1}{\tau_{mix}} (\hat{Y}_F - \hat{Y}_F^0) \quad (\text{F.2})$$

在无限快的动力学条件下，混合区的燃料成分为

$$\hat{Y}_F = \begin{cases} 0 & \text{if } \tilde{Y}_F^0 \leq \tilde{Y}_A^0 / s \quad (\text{excess Air}) \\ \tilde{Y}_F^0 - \tilde{Y}_A^0 / s & \text{if } \tilde{Y}_F^0 > \tilde{Y}_A^0 / s \quad (\text{excess Fuel}) \end{cases} \quad (\text{F.3})$$

利用(6.30)中的(F.3)，我们可以得到基本的 EDC 模型：

$$\dot{m}_F''' = -\rho \frac{\min(\tilde{Y}_F^0, \tilde{Y}_A^0 / s)}{\tau_{mix}} \quad (\text{F.4})$$

附录F.3 扩展 EDC

当未混合部分保持不变（ $\zeta = \zeta_0$ ）时，我们的公式可被视为一个扩展的 EDC 模型，混合反应器区被视为一个完全搅拌反应器（PSR）。前人[47][48][145]将混合反应器区称为“精细结构区”。用[48]的符号表示，与本文(6.20)相似的扩展 EDC 反应速率模型为

$$\rho \frac{d\tilde{Y}_\alpha}{dt} = \rho \frac{\gamma_\lambda^2 \chi}{\tau^*} (Y_\alpha^0 - Y_\alpha^*) \quad (\text{F.5})$$

其中， γ_λ 是“精细结构质量与子网格结构总质量之比”， χ 是精细结构燃烧的概率[48]；实际上，这两个量都介于 0 和 1 之间。反应器停留时间表示为 τ^* ，显然与我们的混合时间尺度相当；细结构质量分数表示为 Y_α^* ，显然与我们的混合区质量分数 \hat{Y}_α 相当。Panjwani 等人[48]将 Y_α^0 称为“周围状态”的质量分数，因此相当于我们的初始单元平均值 \tilde{Y}_α^0 。

附录G 标量边界校正

标量输运方程中平流项的二阶中心差分会导致分散误差(虚假跨踏),这些误差如果不加处理,会导致物理上无法实现的标量场,如负密度。为了避免这种情况,FDS 在显式传输步骤之后对标量场进行了有界性修正。我们将在下文介绍这种校正,它在局部起作用,并有效地增加了防止有界性违反所需的最小扩散量。这种校正并不会使标量传输方案总变差不变(TVD);它只是起到校正有界性的作用。其他人也采用了类似的方案(如[146])。

默认情况下,FDS 采用 TVD 传输方案(VLES 采用 Superbee[19],DNS 和 LES 采用 CHARM[20])。这些 TVD 方案在传输步骤中应用,每种方案都可以证明在特定 CFL 约束条件下在一维上是 TVD 的。然而,除了戈杜诺夫方案,其他 TVD 证明都不能扩展到三维[21]。尽管如此,这些方案在减小离散误差方面比纯中心差法做得更好。需要注意的是,即使应用了 TVD 方案,FDS 仍会检查有界性,以防通量限制器无法阻止任何微小的违反。

1. 一个简单的例子

为简单起见,我们首先考虑一维密度的最小有界违反。也就是说, $\rho < \rho_{min}$ 。让 ρ_i^* 表示体积为 V_i 的单元 i 的显式传输步骤产生的密度。我们的目标是找到一个修正值 $\delta\rho_i$, 它能

- a) 满足有界性。对所有 i , 都有 $\rho_i = \rho_i^* + \delta\rho_i \geq \rho_{min}$ 。
- b) 质量守恒: $\sum_i \delta\rho_i V_i = 0$ 。
- c) 最小化数据变化, $\sum_i |\delta\rho_i|$ (即我们尽可能少地改变场)。

其基本思想是在出现有界性违规的区域对密度场应用线性平滑算子 L 。因此,可以将校正视为一个显式扩散步骤,应用于扩散系数为 c 的未校正场:

$$\rho = \rho^* + c\mathcal{L}(\rho^*) \quad (G.1)$$

为了使问题简单化,让我们先设想一下,单元 i 中的密度为负值,但单元 $i-1$ 和 $i+1$ 中的密度都安全地处于界限之内(这实际上是分散误差的大多数情况)。因此,我们需要一种校正方法,将 $i-1$ 和 $i+1$ 中的质量转移到 i 中,以弥补不足。我们知道,对于单元 i 来说,质量变化的最小值为 $\delta\rho_i = \rho_{min} - \rho_i^*$, 因此满足有界性的最小修正值为 $\delta\rho_i = \rho_{min} - \rho_i^*$ 。算子 L 采用标准离散拉普拉卡方的形式。单元 i 的修正简单来说就是

$$\begin{aligned} \rho_i &= \rho_i^* + \delta\rho_i \\ &= \rho_i^* + \rho_{min} - \rho_i^* \\ &= \rho_i^* + c_i (\rho_{i-1}^* - 2\rho_i^* + \rho_{i+1}^*) \end{aligned} \quad (G.2)$$

比较第二行和第三行,我们发现扩散系数为

$$c_i = \frac{\rho_{min} - \rho_i^*}{\rho_{i-1}^* - 2\rho_i^* + \rho_{i+1}^*} \quad (G.3)$$

根据 (G.2) 的第三行,单元 i 的修正可视为其邻近单元的两个质量通量之和。单元 i 的质量变化为 $\delta m_i = \delta\rho_i V_i$, 并与单元 $i-1$ 和 $i+1$ 的质量变化相平衡:

$$\begin{aligned} \delta m_{i-1} &= -c_i (\rho_{i-1}^* - \rho_i^*) V_i \\ \delta m_{i+1} &= -c_i (\rho_{i+1}^* - \rho_i^*) V_i \end{aligned}$$

在这种情况下,质量修正的总和为零,正如所期望的那样:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=i-1}^{i+1} \delta m_j &= \delta \rho_{i-1} V_{i-1} + \delta \rho_i V_i + \delta \rho_{i+1} V_{i+1} \\
&= -c_i (\rho_{i-1}^* - \rho_i^*) V_i + c_i (\rho_{i-1}^* - 2\rho_i^* + \rho_{i+1}^*) V_i - c_i (\rho_{i+1}^* - \rho_i^*) V_i \\
&= 0
\end{aligned}$$

2. 实际情况

上述讨论旨在提供一个简单的案例，以便理解修正方法背后的基本思想。在实际情况中，我们必须考虑问题的多维方面，以及相邻单元格都可能超出范围的情况。考虑一个密度超出指定范围的网格单元。用“ c ”表示该单元格的中心。其体积为 V_c ，密度为 ρ_c^* ，由传输方案获得。让下标“ n ”表示六个相邻单元中的任何一个（换句话说，只包括与单元 c 共享一个面的单元）。我们希望通过将质量转移到邻近的单元格 n 或从邻近的单元格 n 转移质量，来纠正单元格 c 的有界性问题：

$$\rho_c = \rho_c^* + \delta \rho_c \quad ; \quad \rho_n = \rho_n^* + \delta \rho_n \quad (\text{G.4})$$

我们首先定义我们希望转移的质量总量：

$$m_c = |\rho_c^* - \rho_{cut}| V_c \quad (\text{G.5})$$

其中， ρ_{cut} 是适当的密度上限或下限。每个相邻单元在不超出该范围的情况下可容纳的质量为：

$$m_n = \left| \min[\rho_{max}, \max[\rho_{min}, \rho_n^*]] - \rho_{cut} \right| V_n \quad (\text{G.6})$$

保证质量守恒（ $V_c \delta \rho_c = -\sum V_n \delta \rho_n$ ）的修正项是

$$\delta \rho_c = \pm \min[m_c, \sum m_n] / V_c \quad ; \quad \delta \rho_n = \mp \min\left[\frac{m_c}{\sum m_n}, 1\right] m_n / V_n \quad (\text{G.7})$$

接下来，为了修正超出范围的物种质量分数，我们遵循完全相同的程序。

$$Z_c = Z_c^* + \delta Z_c \quad ; \quad Z_n = Z_n^* + \delta Z_n \quad (\text{G.8})$$

我们确定希望转移的物种质量：

$$m_c = |Z_c^* - Z_{cut}| \rho_c V_c \quad (\text{G.9})$$

其中 Z_{cut} 为 0 或 1。每个相邻单元可容纳而不超出该范围的物种质量为：

$$m_n = \left| \min[1, \max[0, Z_n^*]] - Z_{cut} \right| \rho_n V_n \quad (\text{G.10})$$

保证质量守恒（ $V_c \rho_c \delta Z_c = -\sum V_n \rho_n \delta Z_n$ ）的修正项是

$$\delta Z_c = \pm \min[m_c, \sum m_n] / (\rho_c V_c) \quad ; \quad \delta Z_n = \mp \min\left[\frac{m_c}{\sum m_n}, 1\right] m_n / (\rho_n V_n) \quad (\text{G.11})$$

附录H Lilly 湍流分析法

Smagorinsky 和 Deardorff 湍流模型的常数并不完全是经验值。它们可以通过假设惯性范围的 Kolmogorov 频谱和“产生等于耗散”来推导。对 Smagorinsky 的这一分析归功于 D. K. Lilly [30]，也可在 Sagaut[147]中找到。对 Deardorff 而言，这一分析是 Pope [15]中习题 13.45 的解答。

1. Smagorinsky

假设亚网格尺度动能的平均产生量 (\mathcal{P}_{sgs}) 等于平均耗散率 (ε)，这意味着（在此我对我的平均量不做过多解释）

$$\mathcal{P}_{sgs} = \varepsilon \quad (\text{H.1})$$

对于不可压缩流 ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$)，在高雷诺数 ($\mu_t \gg \mu$) 下使用(5.15)，可得出(H.1)

$$2\nu_t \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} = 2\nu S_{ij} S_{ij} \quad (\text{H.2})$$

应变张量 S_{ij} 的分量大于滤波应变分量 \tilde{S}_{ij} ，因此湍流粘度 ν_t 必须大于分子粘度 ν ，这是预料之中的。

我们假设滤波器宽度 Δ 处于高雷诺数流动的惯性子范围内。在这种情况下，Kolmogorov 动能谱可以写成

$$E(k) = C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} \quad (\text{H.3})$$

显示出著名的 “ $-5/3$ ” 缩放。Kolmogorov 常数通常取为 $C_K \approx 1.5$ 。

利用滤波耗散谱（见 Pope[15]）、Kolmogorov 谱(H.3)，并假设有一个谱截止滤波器，我们可以写出

$$2\nu \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} = 2\nu \int_0^{\pi/\Delta} k^2 E(k) dk \quad (\text{H.4})$$

$$= 2\nu C_K \varepsilon^{2/3} \int_0^{\pi/\Delta} k^{1/3} dk \quad (\text{H.5})$$

除以 ν 即可得出

$$2\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} = 2C_K \varepsilon^{2/3} \frac{3}{4} \left[k^{4/3} \right]_0^{\pi/\Delta} \quad (\text{H.6})$$

$$|\tilde{S}|^2 = C_K \varepsilon^{2/3} \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^{4/3} \quad (\text{H.7})$$

其中 $|\tilde{S}| = (2\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{1/2}$ 。这样，我们就可以用滤波应变的大小来表示耗散率：

$$\varepsilon = \left(\frac{2}{3C_K} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^2 |\tilde{S}|^3 \quad (\text{H.8})$$

现在，我们假设生产等于耗散。下面，左侧是 SGS 动能的产生。右边是根据(H.8)中的过滤应变计算的耗散率：

$$2\nu_t \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} = \varepsilon \quad (\text{H.9})$$

$$\nu_t |\tilde{S}|^2 = \left(\frac{2}{3C_K} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^2 |\tilde{S}|^3 \quad (\text{H.10})$$

插入湍流粘度的恒定系数 Smagorinsky 模型 $\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}|$ 得出

$$(C_s \Delta)^2 |\tilde{S}|^3 = \left(\frac{2}{3C_K} \right)^{3/2} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^2 |\tilde{S}|^3 \quad (\text{H.11})$$

最后，使用 $C_K = 1.5$ 并求解 C_s ，得出

$$C_s = \left[\frac{2}{(3)(1.5)} \right]^{3/4} \frac{1}{\pi} = 0.17 \quad (\text{H.12})$$

2. Deardorff

各向同性涡流粘度的 Deardorff 形式的湍流粘度为 $\nu_t = C_v \Delta k_{sgs}^{1/2}$ 。在本节中，我们将利用 Lilly 的分析推导出该常数的值。首先，我们需要耗散率与子网格动能 k_{sgs} 之间的关系。这种关系并不取决于 k_{sgs} 的计算方法——它取决于能谱的形状以及滤波器宽度截止点与能谱的关系。在这里，我们假设在高 Re 时有一个 Kolmogorov 能谱，滤波宽度落在惯性子范围内。然后，通过对从截止波数到无穷大的频谱进行积分，可以很好地近似子网动能：

$$k_{sgs} = \int_{\frac{\pi}{\Delta}}^{\infty} E(k) dk \quad (\text{H.13})$$

$$= C_K \varepsilon^{2/3} \int_{\frac{\pi}{\Delta}}^{\infty} k^{-5/3} dk \quad (\text{H.14})$$

$$= \frac{3}{2} C_K \varepsilon^{2/3} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^{2/3} \quad (\text{H.15})$$

重排为

$$\varepsilon = \left(\frac{2}{3C_K} \right)^{3/2} \frac{\pi}{\Delta} k_{sgs}^{3/2} \quad (\text{H.16})$$

将 Smagorinsky(H.8)和 Deardorff(H.16)的耗散率关系相等，得出

$$\left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^2 |\tilde{S}|^3 = \frac{\pi}{\Delta} k_{sgs}^{3/2} \quad (\text{H.17})$$

$$|\tilde{S}|^2 = \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^2 k_{sgs} \quad (\text{H.18})$$

现在，我们再次使用 Deardorff 作为涡流粘度模型，并用(H.16)表示耗散率，将生成量等同于耗散量：

$$\nu_t |\tilde{S}|^2 = \varepsilon \quad (\text{H.19})$$

$$C_v \Delta k_{sgs}^{1/2} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^2 k_{sgs} = \left(\frac{2}{3C_K} \right)^{3/2} \frac{\pi}{\Delta} k_{sgs}^{3/2} \quad (\text{H.20})$$

使用 $C_K = 1.5$ 并求解 C_v 即可得出

$$C_v = \left[\frac{2}{(3)(1.5)} \right]^{3/2} \frac{1}{\pi} = 0.094 \quad (\text{H.21})$$

FDS 使用 $C_v = 0.1$ 作为 Deardorff 模型常数。

附录I 流体-粒子动量传递

拉格朗日粒子的运动轨迹受动量守恒方程控制：

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = -\frac{1}{2} \rho C_d A_{p,c} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\| + m_p \mathbf{g} \quad (\text{I.1})$$

其中， m_p 是粒子质量， $\mathbf{u}_p(t)$ 是粒子速度， $A_{p,c}$ 是粒子横截面积， C_d 是阻力系数， ρ 是气体密度， \mathbf{u} 是粒子附近的气体速度， \mathbf{g} 是重力矢量。该方程没有解析解，只有线性化形式：

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = -\beta(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) + \mathbf{g} \quad \beta = \frac{1}{2m_p} \rho C_d A_{p,c} \|\mathbf{u}_p(0) - \mathbf{u}\| \quad (\text{I.2})$$

有如下的解：

$$\mathbf{u}_p(t) = \mathbf{u} + \left(\mathbf{u}_p(0) - \mathbf{u} - \frac{\mathbf{g}}{\beta} \right) e^{-\beta t} + \frac{\mathbf{g}}{\beta} \quad (\text{I.3})$$

假定气体速度 \mathbf{u} 在该解法有效的短时间内保持不变。

在 FDS 中，粒子位置在一个气相时间步长 δt 的过程中通过一系列子时间步长 δt_p 向前推进，确定子时间步长 δt_p 的目的是确保粒子在一个子时间步长内不会穿越一个网格单元的宽度：

$$\delta t_p = \frac{\delta t}{\lceil 0.9 \text{CFL} \rceil} \quad ; \quad \text{CFL} = \delta t \max \left(\frac{|u_p^n|}{\delta x}, \frac{|v_p^n|}{\delta y}, \frac{|w_p^n|}{\delta z} \right) \quad (\text{I.4})$$

注意，上限函数 $\lceil \text{CFL} \rceil$ 表示大于 CFL 的最小整数。对于一个给定的时间步长（用 n 表示），粒子的位置按照以下方式前进：

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \frac{\delta t_p}{2} (\mathbf{u}_p^{n+1} + \mathbf{u}_p^n) \quad (\text{I.5})$$

其中 \mathbf{u}_p^{n+1} 由公式(I.3)得出。粒子向气体的动量传递由动量方程中的力项表示，该力项通过对体积为 V 的每个网格单元中的所有粒子求和计算得出：

$$\mathbf{f}_b = \frac{1}{V} \sum_i \left[m_{p,i} \left(\mathbf{g} - \frac{\mathbf{u}_{p,i}^{n+1} - \mathbf{u}_{p,i}^n}{dt} \right) + \dot{m}_{p,i} (\mathbf{u}_p^{n+1} - \mathbf{u}^n) \right] \quad (\text{I.6})$$

附录J 辐射传输方程的简化

1. Antti Paajanen, VTT, Finland

粒子的辐射传输方程 (RTE) 如公式(7.42)所示, 在此重复:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\left[\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda)\right] I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}' \quad (\text{J.1})$$

要精确计算式(J.1)右侧的内散射积分将非常耗时, 而且由于必须存储每个位置的单个强度, 所需的内存量也大得惊人。内部散射积分可以通过将总的 4π 实体角分为 “前向角” $\delta\Omega'$ 和 “环境角” $\delta\Omega^* = 4\pi - \delta\Omega'$ 来近似计算。为了与 FVM 求解器兼容, $\delta\Omega'$ 设置为等于角度离散化给出的控制角。不过, 假定它围绕控制角中心对称。在 $\delta\Omega'$ 范围内, 强度为 $I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})$, 其他地方的强度近似为

$$U^*(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{U(\mathbf{x}, \lambda) - \delta\Omega' I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{\delta\Omega^*} \quad (\text{J.2})$$

其中 $U(\mathbf{x})$ 是单位球面上的总强度积分。式(J.1)中的内散射积分现在可以近似为

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{s}') I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}' &\approx \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) \left(\chi_f I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \frac{1}{\delta\Omega^*} (1 - \chi_f) \int_{\delta\Omega^*} I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}') d\mathbf{s}' \right) \\ &= \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) \left(\chi_f I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + (1 - \chi_f) U^*(\mathbf{x}, \lambda) \right) \end{aligned} \quad (\text{J.3})$$

其中, $\chi_f = \chi_f(r, \lambda) = \chi_f(\mathbf{x}, \lambda)$ 是散射到相同角度 $\delta\Omega'$ 内的原在实体角 $\delta\Omega'$ 内的总强度的一部分。 χ_f 的计算方法将在 7.3.3 节中讨论。根据公式(J.2)中 U^* 的定义, RTE 现在为

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) (1 - \chi_f) \left(\frac{U(\mathbf{x}, \lambda) - \delta\Omega' I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{\delta\Omega^*} - I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \right) \quad (\text{J.4})$$

接下来定义有效散射系数

$$\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{4\pi}{4\pi - \delta\Omega'} (1 - \chi_f(\mathbf{x}, \lambda)) \sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) \quad (\text{J.5})$$

利用公式(J.5)和 $\delta\Omega^* = 4\pi - \delta\Omega'$, 散射系数可写成

$$\sigma_p(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \frac{\delta\Omega^*}{(1 - \chi_f)} \quad (\text{J.6})$$

将其代入之前的 RTE 公式, 即可得出结果:

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} \left(U(\mathbf{x}, \lambda) - (\delta\Omega' + \delta\Omega^*) I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \right) \quad (\text{J.7})$$

使用 $\delta\Omega' + \delta\Omega^* = 4\pi$, RTE 简化为

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\left[\kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) + \bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)\right] I_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa_p(\mathbf{x}, \lambda) I_{b,p}(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\bar{\sigma}_p(\mathbf{x}, \lambda)}{4\pi} U(\mathbf{x}, \lambda) \quad (\text{J.8})$$

附录K 液体燃料吸收系数

液体池火灾的燃烧速度部分取决于从火焰到燃料表面的对流和辐射热反馈。对于大型池火，辐射传热占主导地位。已经开展了一些研究，以确定发射辐射的光谱[148]，以及火焰内气体吸收辐射的特征[149]。根据燃料的不同，热辐射可以在表面或深处被吸收。对于木材等燃料，大部分入射辐射都会被表面附近的薄层吸收。对于塑料或液体燃料等半透明材料，热辐射可能会渗透到更深的地方。已对 PMMA[150]、聚合物薄膜[151]和液体池火[148]等半透明燃料的深度辐射吸收进行了研究。大多数与液体深度辐射吸收有关的研究都考虑了液体池火灾对水的沸腾影响[152]。深度辐射吸收对燃料液滴蒸发的影响也受到了一定的关注[153]。大多数液体都是高度选择性吸收体，在某些波长区域吸收很强，而在其他波长区域则是透明的。这就导致辐射传输模型的计算成本很高，而实验数据却很少。在本附录中，我们尝试使用与参考文献[154]和[155]类似的有效吸收系数来描述液体燃料对辐射的吸收。

公开文献中有关于液体吸收系数的数据，如 NIST 化学网络书籍[156]中的科布伦茨协会数据，通常只包含波长约为 $2.5\mu\text{m}$ 以上的数据。火焰发射光谱中总能量的很大一部分很容易就包含在短于 $2.5\mu\text{m}$ 的波长中。然而，少数液体存在从 $1\mu\text{m}$ 开始的吸收光谱，包括甲苯（[157][158]）、甲醇[159]、苯[160]和水[161]。此外，参考文献[148]还收录了乙醇、庚烷、JP-8 和乙醇-甲苯混合物的光谱分辨透射光谱。参考文献[153]报道了一些柴油燃料的复折射率光谱。由于添加剂不同，不同柴油的吸收光谱也略有不同。不过，参考文献[153]中报告的数据也许可以用来估算柴油的吸收系数。

通常情况下，我们对解析透射辐射的光谱并不感兴趣；相反，我们感兴趣的是对总的透射辐射进行建模。在这种情况下，用平均吸收系数来编写辐射传输方程是很方便的。这样做是为了避免对所有波长进行耗时的积分。为此，我们引入了一些平均吸收系数，如 Rosselland 平均吸收系数和普朗克平均吸收系数。这些系数对应于辐射传输的光学稀薄近似和 Rosselland 扩散近似。液体的吸收系数与波长高度相关，在某些区域甚至是透明的。在这种情况下，普朗克均值吸收系数过大，超出了几个数量级。最好的办法是确定一个有效吸收系数，试图在一定的路径长度上复制辐射的吸收，在这个路径长度上，大部分辐射都被吸收了。

表 13-12 列出了几种选定液体的有效吸收系数。其中包含两种类型的吸收系数。一种是假设进入的辐射是黑体辐射，温度为 1450 K。如果列出了波长范围，则在计算透射率时假定黑体温度为 1450 K。如果未列出波长范围，则使用参考文献[148]中的透射数据。在所有情况下，路径长度均为 3 毫米。

黑体辐射假设适用于烟尘火焰，在这种火焰中，烟尘辐射在火焰辐射光谱中占主导地位。然而，对于低烟尘火焰的燃料来说，进入的辐射光谱与黑体光谱有很大不同。这就是乙醇和甲醇的吸收系数差别很大的原因。乙醇的吸收系数是根据乙醇火焰的实际发射光谱计算出来的，而甲醇的吸收系数是根据黑体光谱计算出来的。甲醇的正确值可能更接近乙醇的值。

表 13-12 选定液体的有效吸收系数。

液体	波数范围 (1/ cm)	有效吸收系数, κ
JP-8 [148]	-	301.4
Ethanol-Toluene blend [148]	-	680.1
Ethanol [148]	-	1534.3
Heptane[148]	-	187.5
Toluene [158]	436-6500	160.8
Methanol[159]	2-8000	52
Water [161]	1-15000	1578
Benzene[160]	11.5-6200	123

附录L 导热方程求解

默认情况下，FDS 在固体表面的法线方向上求解一维热传导方程。还有一个可选的三维求解器，可在交替方向隐式（ADI）方案中使用一维求解器。

附录L.1 一维固体导热

直角坐标下的一维热传导方程为

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \dot{q}_s''' \quad (\text{L.1})$$

在圆柱和球面坐标中，方程变为

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r^I} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^I k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \dot{q}_s''' \quad (\text{L.2})$$

其中 I 对圆柱坐标为 1，对球面坐标为 2。由于 $I=0$ 时恢复了笛卡尔形式，因此我们将考虑方程(L.2)的一般形式。用于方程离散化的索引系统如图 13-7 所示。无论坐标系是直角坐标系、圆柱坐标系还是球面坐标系，离散化方案都是相同的。离边界最近的单元的大小默认设置为

$$x_1 - x_0 = \sqrt{\frac{\delta t_0 k_s}{\rho_s c_s}} \quad (\text{L.3})$$

其中， δt_0 是一个任意设定为 1 的时间刻度。换句话说，基于单元尺寸的傅立叶数被假定为一阶。用户可以灵活改变初始单元尺寸和拉伸程度。

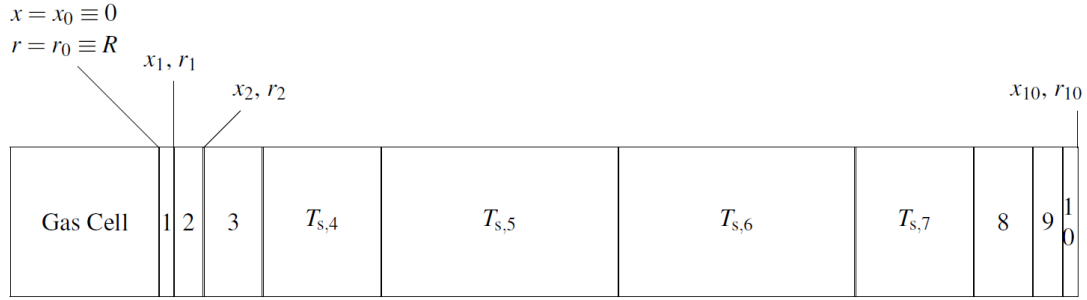


图 13-7 固相单元的布局。在此示例中，每个固相单元拉伸 2 倍，直到达到固相的一半，然后单元收缩 2 倍。气相和固相的界面位于 $x_0 = R - r_0$ ，其中 R 是圆柱体或球体的半径。背面边界条件应用于 $x_{10} = R - r_{10}$ 。“虚拟”单元 0 和 $N+1=11$ 位于固相的左右两侧，与单元 1 和 $N=10$ 大小相同。

每个固体单元中心的温度 $T_{s,i}$ 采用 Crank-Nicolson 方案及时更新：

$$\begin{aligned} (\rho_s c_s)_i \frac{T_{s,i}^{n+1} - T_{s,i}^n}{\delta t} = & \frac{1}{2r_{c,i}^I \delta r_i} \left(r_i^I k_{s,i+\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i+1}^n - T_{s,i}^n}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} - r_{i-1}^I k_{s,i-\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i}^n - T_{s,i-1}^n}{\delta r_{i-\frac{1}{2}}} \right) \\ & + \frac{1}{2r_{c,i}^I \delta r_i} \left(r_i^I k_{s,i+\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i+1}^{n+1} - T_{s,i}^{n+1}}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} - r_{i-1}^I k_{s,i-\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i}^{n+1} - T_{s,i-1}^{n+1}}{\delta r_{i-\frac{1}{2}}} \right) + \dot{q}_{s,i}''' \end{aligned} \quad (\text{L.4})$$

$k_{s,i+\frac{1}{2}}$ 是单元 i 和单元 $i+1$ 边界的导热系数， δr_i 是单元 i 的宽度， $\delta r_{i+\frac{1}{2}}$ 是单元 i 中心到单元 $i+1$ 中心的距离。径向坐标 $r_{c,i}$ 表示单元格中心：

$$r_{c,i}^I = \begin{cases} (r_i^2 - r_{i-1}^2) / (2\delta r_i) & I = 1 \quad (\text{cylindrical}) \\ \sqrt{(r_i^3 - r_{i-1}^3) / (3\delta r_i)} & I = 2 \quad (\text{spherical}) \end{cases} \quad (\text{L.5})$$

直角坐标板（或圆柱体或球体中心）前后表面的温度由边界条件确定。在任何坐标系中，使用 Crank-Nicolson 方案，前表面的边界条件为

$$\frac{-k_{s,1}}{2} \left(\frac{T_{s,1}^{n+1} - T_{s,0}^{n+1}}{\delta r_{\frac{1}{2}}} + \frac{T_{s,1}^n - T_{s,0}^n}{\delta r_{\frac{1}{2}}} \right) = (\dot{q}_c'' + \dot{q}_r'')^{n+\frac{1}{2}} \quad (\text{L.6})$$

请注意， $T_{s,0}$ 并不代表气体温度，而是用来确定表面的温度梯度。还请注意，导热系数 $k_{s,1}$ 是第一个固体单元的导热系数。时间步长中点的对流热通量为

$$(\dot{q}_c'')^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(h^n \left(T_g^n - T_{s,\frac{1}{2}}^n \right) + h^{n+1} \left(T_g^{n+1} - T_{s,\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \right) \quad (\text{L.7})$$

其中， T_g^n 和 T_g^{n+1} 是时间步开始和结束时与表面相邻的第一个网格单元中的气体温度； $T_{s,\frac{1}{2}}$ 是表面温度，定义为 $T_{s,0}$ 和 $T_{s,1}$ 的平均值； h^n 和 h^{n+1} 是时间步开始和结束时的对流换热系数。辐射热通量可在时间步长的中间点估算：

$$(\dot{q}_r'')^{n+\frac{1}{2}} = \dot{q}_{r,in}'' - \varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right)^4 \approx \dot{q}_{r,in}'' - \varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^4 - 2\varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 \left(T_{s,\frac{1}{2}}^{n+1} - T_{s,\frac{1}{2}}^n \right) \quad (\text{L.8})$$

注意泰勒级数展开的使用：

$$(T^{n+1/2})^4 \approx (T^n)^4 + 2(T^n)^3 (T^{n+1} - T^n) \quad (\text{L.9})$$

现在前边界条件为

$$\begin{aligned} -k_{s,1} \frac{T_{s,1}^{n+1} - T_{s,0}^{n+1} + T_{s,1}^n - T_{s,0}^n}{2\delta r_{\frac{1}{2}}} &\approx \frac{1}{2} \left(h^n \left(T_g^n - T_{s,\frac{1}{2}}^n \right) + h^{n+1} \left(T_g^{n+1} - T_{s,\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \right) \\ &+ \dot{q}_{r,in}'' - 2\varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 T_{s,\frac{1}{2}}^{n+1} + \varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^4 \end{aligned} \quad (\text{L.10})$$

墙壁表面温度的定义

$$T_{s,\frac{1}{2}} = \frac{T_{s,1} + T_{s,0}}{2} \quad (\text{L.11})$$

而时间步开始时的温度梯度为

$$k_{s,1} \frac{T_{s,1}^n - T_{s,0}^n}{2\delta r_{\frac{1}{2}}} = -\frac{h^n}{2} \left(T_g^n - T_{s,\frac{1}{2}}^n \right) - \frac{1}{2} \left(\dot{q}_{r,in}'' - \varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^4 \right) \quad (\text{L.12})$$

因此边界条件变为

$$-k_{s,1} \frac{T_{s,1}^{n+1} - T_{s,0}^{n+1}}{2\delta r_{\frac{1}{2}}} + \left(\frac{h^{n+1}}{2} + 2\varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 \right) \frac{T_{s,1}^{n+1} + T_{s,0}^{n+1}}{2} \approx \frac{1}{2} \left(h^{n+1} T_g^{n+1} + \dot{q}_{r,in}'' \right) + \frac{3}{2} \varepsilon \sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^4 \quad (\text{L.13})$$

重新排列后，节点 0 的温度变为

$$T_{s,0}^{n+1} = \underbrace{\frac{\frac{k_{s,1}}{\delta r_1} - \left(\frac{h^{n+1}}{2} + 2\varepsilon\sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 \right)}{\frac{k_{s,1}}{\delta r_1} + \left(\frac{h^{n+1}}{2} + 2\varepsilon\sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 \right)}}_{\text{RFACF2}} T_{s,1}^{n+1} + \underbrace{\frac{h^{n+1}T_g^{n+1} + \dot{q}_{r,\text{in}}'' + 3\varepsilon\sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^4}{\frac{k_{s,1}}{\delta r_{\frac{1}{2}}} + \left(\frac{h^{n+1}}{2} + 2\varepsilon\sigma \left(T_{s,\frac{1}{2}}^n \right)^3 \right)}}_{\text{QDXKF}} \quad (\text{L.14})$$

请注意，实际源代码中使用 `RFACF2` 和类似名称来表示这些量。在笛卡尔几何图形中无隔热衬底的情况下，虚拟节点 $N+1$ 的温度计算方法相同。对于带有隔热衬垫的笛卡尔几何图形或圆柱形和球形几何图形， ε 、 $\dot{q}_{r,\text{in}}''$ 和 h 设置为 0。

重新排列项后，公式(L.4)变为（使用源代码的命名法）对每个壁面单元 i ：

$$B_i T_{i-1}^{n+1} + D_i T_i^{n+1} + A_i T_{i+1}^{n+1} = C_i \quad i=1,...,N \quad (\text{L.15})$$

其中，

$$\begin{aligned} A_i &= -\frac{k_{i+\frac{1}{2}} \delta t}{2(\rho_s c_s)_i} \frac{1}{r_{c,i}^I \delta r_i} \frac{r_i^I}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} \\ B_i &= -\frac{k_{i-\frac{1}{2}} \delta t}{2(\rho_s c_s)_i} \frac{1}{r_{c,i}^I \delta r_i} \frac{r_{i-1}^I}{\delta r_{i-\frac{1}{2}}} \\ C_i &= T_{s,i}^n - A_i (T_{i+1}^n - T_i^n) + B_i (T_i^n - T_{i-1}^n) + \delta t \dot{q}_{s,i}''' / (\rho_s c_s)_i \\ D_i &= 1 - A_i - B_i \end{aligned} \quad (\text{L.16})$$

为了求解公式(L.15)，我们使用了三对角线性求解器：

$$\begin{aligned} C_1 &= C_1 - B_1 \cdot \text{QDXKF} \\ C_N &= C_N - A_N \cdot \text{QDXKB} \\ D_1 &= D_1 + B_1 \cdot \text{RFACF2} \\ D_N &= D_N + A_N \cdot \text{RFACB2} \\ D_i &= D_i - \frac{B_i A_{i-1}}{D_{i-1}} \quad i=2,...,N-1 \\ C_i &= C_i - \frac{B_i C_{i-1}}{D_{i-1}} \quad i=2,...,N-1 \\ C_N &= \frac{C_N}{D_N} \\ T_{s,N}^{n+1} &= C_N \\ T_{s,i}^{n+1} &= \frac{C_i - A_i C_{i+1}}{D_i} \quad i=N-1,...,1 \end{aligned} \quad (\text{L.17})$$

通常情况下，固相求解器使用的时间步长 δt 是气相求解器使用的时间步长的某个倍数。默认情况下，倍数为 2，但用户可以根据需要选择不同的值。不过，在模拟过程中，有时固相时间步长必须小于气相时间步长，这是因为内热源项 \dot{q}_s''' 可能会出现较大的短时偏移，而隐式 Crank-Nicolson 方案中并不包含内热源项。只需在时间步开始时对其进行计算即可。为了解决这个问题，在对热源项进行评估后，使用显式一阶更新估算最大温度变化：

$$\Delta T_s^* \equiv \max_{i=1,N} \left| \frac{\delta t}{(\rho_s c_s)_i} \left[\frac{1}{r_{c,i}^I \delta r_i} \left(r_i^I k_{i+\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i+1}^n - T_{s,i}^n}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} - r_{i-1}^I k_{s,i+\frac{1}{2}} \frac{T_{s,i}^n - T_{s,i-1}^n}{\delta r_{i-\frac{1}{2}}} \right) + \dot{q}_{s,i}''' \right] \right| \quad (\text{L.18})$$

如果 ΔT_s^* 超过用户指定的阈值 ΔT_{\max} ，时间步长就会减小到气相时间步长 δt_{gas} 以下：

$$\delta t = \delta t_{\text{gas}} 2^{-\lceil \ln \eta / \ln 2 \rceil} ; \quad \eta = \Delta T_s^* / \Delta T_{\max} \quad (\text{L.19})$$

注意， $\lceil x \rceil$ 表示大于 x 的最小整数。为防止固相时间步数无休止地螺旋递减，用户可指定气相时间步数的细分限制。默认值为 $2^2 = 4$ 。

2. Dirichlet 温度边界条件

为了验证，有时需要固定固体的表面温度。在这种情况下，边界条件为 Dirichlet 类型，公式 (L.6) 定义了恒定的壁温 T_w

$$T_{s,\frac{1}{2}} = \frac{T_{s,1} + T_{s,0}}{2} = T_w \quad (\text{L.20})$$

然后， $n+1$ 处的幽灵单元值可以用壁温和第一个单元的温度来表示

$$T_{s,0}^{n+1} = -T_{s,1}^{n+1} + 2T_w \quad (\text{L.21})$$

比较公式 (L.21) 和公式 (L.14)，可以看出

$$\text{RFACF2} = -1 \quad (\text{L.22})$$

$$\text{QDXKF} = 2T_w \quad (\text{L.23})$$

附录 L.2 可选择的三维固体传热

三个方向上的固相热传导方程为

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + \dot{q}_s''' \quad (\text{L.24})$$

求解方法是使用以下交替方向隐式 (ADI) 方案分割该方程：

$$\frac{\rho_s c_s}{3} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \frac{\dot{q}_s'''}{3} \quad (\text{L.25})$$

$$\frac{\rho_s c_s}{3} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + \frac{\dot{q}_s'''}{3} \quad (\text{L.26})$$

$$\frac{\rho_s c_s}{3} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + \frac{\dot{q}_s'''}{3} \quad (\text{L.27})$$

方程的解法在三个大小为 δt 的气相时间步长中不断更新。对于每个坐标方向，温度场通常在表面附近细网格化，在内部粗网格化。因此，温度场 $T_s(x, y, z, t)$ 在每个方向上的离散程度不同。例如，对于 x 方向法线上的每个表面单元，深度上的一维温度阵列为 $T_{s,x,i}$ ，其中 $1 \leq i \leq N_x$ ， N_x 是在 x 方向上横跨整个实体宽度的非均匀间隔内部单元的数量。这与上文“暴露”背面的固体中的一维热传导方法完全相同。同样， $T_s(x, y, z, t)$ 在 y 和 z 方向分别离散为 $T_{s,y,j}$ 和 $T_{s,z,k}$ 。

在这三个步骤中的每一个步骤中，一维热传导方程都是在三个坐标方向中的一个坐标方向上使用上述 Crank-Nicolson (C-N) 方案求解的，只不过现在的隐式更新跨越了三个气相时间步长，即 $3\delta t$ 。其他两个坐标方向上的温度场是显式更新的。隐式 C-N 更新引起的温度变化表示为 $\Delta T_{s,x,i}$ ， y 和 z 更新的表达式类似。在没有对 $T_{s,x,i}$ 进行隐式更新的两个步骤中，显式更新将焓传递到 y 和 z

方向:

$$\rho_{s,i} c_{s,i} T_{s,x,i}^{n+1} = \rho_{s,i} c_{s,i} T_{s,x,i}^n + \frac{1}{2} \left[\sum_j w_j \rho_{s,j} c_{s,j} \Delta T_{s,y,j} + \sum_k w_k \rho_{s,k} c_{s,k} \Delta T_{s,z,k} \right] \quad (\text{L.28})$$

系数 w_j 和 w_k 分别是 x 方向离散单元 i 与 y 和 z 方向离散单元 j 和 k 重叠的部分。

Toro[21]在第 16 章 “多维 PDE 方法 ” 中讨论了这种分割方案。

附录M 开发液滴蒸发的隐式求解方案

在本附录中，我们考虑了单个液滴在计算池中的蒸发，液滴可能在气体中，也可能附着在固体表面。因此，我们的目标是求解：(a) 单元水蒸气质量分数 $Y_{\alpha,g}$ ；(b) 单元气相温度 T_g ；(c) 液滴温度 T_p ；(d) 固体表面第一节点 T_w 的估计值。

需要积分的 ODE 分别是液滴质量、单元水蒸气质量分数的变化、液滴温度的变化、单元气相温度的变化以及单元壁温度[101]：

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_{p,s} h_m \rho_f (Y_{\alpha,\ell} - Y_{\alpha,g}) \quad (M.1)$$

$$\rho_g V \frac{dY_{\alpha,g}}{dt} = -(1 - Y_{\alpha,g}) \frac{dm_p}{dt} \quad (M.2)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p c_p} \left[\dot{q}_r + A_{p,s} h_g (T_g - T_p) + A_{p,s} h_w (T_w - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_v \right] \quad (M.3)$$

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{1}{m_g c_g} \left[A_{p,s} h_g (T_p - T_g) - \frac{dm_p}{dt} (h_{\alpha,p} - h_{\alpha,g}) \right] \quad (M.4)$$

$$\frac{dT_w}{dt} = -\frac{A_{p,s} h_w}{m_w c_w} (T_w - T_p) \quad (M.5)$$

下面我们将考虑蒸发例程中单个子步骤的时间积分，即从时间 t^n 到 $t^n + \Delta t^n$ 更新局部计算单元。通常， $\Delta t^n = \Delta t_{LES}$ 。不过，为了防止出现质量和温度过冲的假象，有可能需要分步。在下文中，除非另有说明，否则 RHS 量在子步骤 t^n 开始时进行评估（因此称为“半隐式”方法）。这限制了该方法的稳定性范围（因为该方法不是全隐式的，所以不是无条件稳定的），但它大大简化了求解过程。

开始计算时，我们将公式(M.2)以时间间隔中点的质量损失率（待定）进行扩展：

$$Y_{\alpha,g}^{n+1} = Y_{\alpha,g}^n - \frac{\Delta t^n}{\rho_g V} (1 - Y_{\alpha,g}) \left(\frac{dm_p}{dt} \right)^{n+\frac{1}{2}} \quad (M.6)$$

将公式(M.6)代入公式(M.1) 的 Crank-Nicolson 扩展，我们得到

$$\begin{aligned} \left(\frac{dm_p}{dt} \right)^{n+\frac{1}{2}} &= -\frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} (Y_{\alpha,\ell}^{n+1} + Y_{\alpha,\ell}^n - Y_{\alpha,g}^{n+1} - Y_{\alpha,g}^n) \\ &= -\frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} \left(Y_{\alpha,\ell}^{n+1} + Y_{\alpha,\ell}^n + \frac{\Delta t^n}{\rho_g V} (1 - Y_{\alpha,g}) \left(\frac{dm_p}{dt} \right)^{n+\frac{1}{2}} - 2Y_{\alpha,g}^n \right) \\ &= -\frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} \left[\frac{Y_{\alpha,\ell}^{n+1} + Y_{\alpha,\ell}^n - 2Y_{\alpha,g}^n}{1 + \frac{\Delta t^n A_{p,s} h_m (1 - Y_{\alpha,g})}{2\rho_g V}} \right] \end{aligned} \quad (M.7)$$

接下来，我们通过扩展找到液滴表面平衡质量分数 $Y_{\alpha,\ell}^{n+1}$ 的近似值

$$Y_{\alpha,\ell}^{n+1} = Y_{\alpha,\ell}^n + \left(\frac{dY_{\alpha,\ell}}{dT} \right) (T_p^{n+1} - T_p^n) \quad (\text{M.8})$$

导数由链式规则展开确定：

$$\left(\frac{dY_{\alpha,\ell}}{dT} \right) = \left(\frac{dY_{\alpha,\ell}}{dX_{\alpha,\ell}} \right) \left(\frac{dX_{\alpha,\ell}}{dT} \right) \quad (\text{M.9})$$

液滴表面的水蒸气摩尔分数由 Clausius-Clapeyron 方程确定：

$$X_{\alpha,\ell} = \exp \left[\frac{h_v W_\alpha}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_p} \right) \right] \quad (\text{M.10})$$

对于空气中的二元混合物，蒸气质量和摩尔分数之间的关系为

$$Y_{\alpha,\ell} = \frac{X_{\alpha,\ell}}{X_{\alpha,\ell}(1 - W_a / W_\alpha) + W_a / W_\alpha} \quad (\text{M.11})$$

微分公式(M.10)和(M.11)并代入公式(M.9)得出

$$\left(\frac{dY_{\alpha,\ell}}{dT} \right) = \frac{W_a / W_\alpha}{(X_{\alpha,\ell}(1 - W_a / W_\alpha) + (W_a / W_\alpha))^2} \frac{h_v W_\alpha}{RT_p^2} \exp \left[\frac{h_v W_\alpha}{R} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_p} \right) \right] \quad (\text{M.12})$$

在(M.8)中使用(M.12)，随后在(M.7)中使用(M.8)，然后在(M.3)和(M.4)中使用(M.7)，这样就可以同时求解包含三个未知数的三个方程 T_p^{n+1} 、 T_g^{n+1} 和 T_w^{n+1} 。如前所述，除非另有说明，所有 RHS 量都在子步骤 t^n 开始时求值。

$$T_p^{n+1} = T_p^n + \frac{\Delta t^n}{m_p c_p} \left[\dot{q}_r + \frac{A_{p,s} h_g}{2} (T_g^{n+1} + T_g^n - T_p^{n+1} - T_p^n) + \frac{A_{p,s} h_w}{2} (T_w^{n+1} + T_w^n - T_p^{n+1} - T_p^n) - \frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} \left[\frac{Y_{\alpha,\ell}^{n+1} + Y_{\alpha,\ell}^n - 2Y_{\alpha,g}^n}{1 + \frac{\Delta t^n A_{p,s} h_m (1 - Y_{\alpha,g})}{2\rho_g V}} \right] h_v \right] \quad (\text{M.13})$$

$$T_g^{n+1} = T_g^n + \frac{\Delta t^n}{m_g c_g} \left[\frac{A_{p,s} h_g}{2} (T_p^{n+1} + T_p^n - T_g^{n+1} - T_g^n) \right] + \frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} \left[\frac{Y_{\alpha,\ell}^{n+1} + Y_{\alpha,\ell}^n - 2Y_{\alpha,g}^n}{1 + \frac{\Delta t^n A_{p,s} h_m (1 - Y_{\alpha,g})}{2\rho_g V}} \right] (h_{\alpha,p} - h_{\alpha,g}) \quad (\text{M.14})$$

$$T_w^{n+1} = T_w^n - \frac{\Delta t^n A_{p,s} h_w}{2m_w c_w} [T_w^{n+1} + T_w^n - T_p^{n+1} - T_p^n] \quad (\text{M.15})$$

最后，可以利用(M.7)中的(M.8)和(M.6)中的(M.7)求出更新的单元水蒸气质量分数 $Y_{\alpha,g}^{n+1}$ 。

$$Y_{\alpha,g}^{n+1} = Y_{\alpha,g}^n + \frac{\Delta t^n}{\rho V} \frac{A_{p,s} h_m \rho_f}{2} \left[\frac{2Y_{\alpha,\ell}^n + \left(\frac{dY_{\alpha,\ell}}{dT} \right) (T_p^{n+1} - T_p^n) - 2Y_{\alpha,g}^n}{1 + \frac{\Delta t^n A_g h_m (1 - Y_{\alpha,g})}{2\rho_g V}} \right] \quad (\text{M.16})$$

附录N 解决隧道中泊松比方程的特殊预处理方案

考虑隧道几何中的泊松方程，在隧道中，多个网格在 x 方向上首尾相接。从压力项 $H(\mathbf{x})$ 的常规方程开始：

$$\nabla^2 H = -\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{F} \equiv f(\mathbf{x}) \quad (\text{N.1})$$

包含以下边界条件

$$\frac{\partial H}{\partial n} = b_{n,m} \quad \text{or} \quad H = b_{n,m} \quad ; \quad n \in (x, y, z) \quad m \in (1, 2) \quad (\text{N.2})$$

分别位于矩形域的六个边界面上。现在假设 H 可以分解：

$$H(\mathbf{x}) = \bar{H}(x) + H'(\mathbf{x}) \quad (\text{N.3})$$

其中 x 是隧道的纵向空间坐标。求解 \bar{H} 的下列方程：

$$\frac{d^2 \bar{H}}{dx^2} = \bar{f}(x) \quad ; \quad \bar{f}(x) = \frac{1}{\bar{Y}\bar{Z}} \int_0^{\bar{Y}} \int_0^{\bar{Z}} f(\mathbf{x}) dz dy \quad (\text{N.4})$$

隧道两端的边界条件：

$$\frac{d\bar{H}}{dx} = \bar{b}_{x,m} \quad \text{or} \quad \bar{H} = \bar{b}_{x,m} \quad ; \quad \bar{b}_{x,m} = \frac{1}{\bar{Y}\bar{Z}} \int_0^{\bar{Y}} \int_0^{\bar{Z}} b_{x,m}(y, z) dz dy \quad (\text{N.5})$$

现在使用 3-D 泊松求解器在每个网格中求解：

$$\nabla^2 H' = f(\mathbf{x}) - \bar{f}(x) \quad (\text{N.6})$$

每个网格的左右两侧（包括隧道两端）都有边界条件：

$$\frac{\partial H'}{\partial x} = b_{x,m}(y, z) - \bar{b}_{x,m} \quad \text{or} \quad H' = b_{x,m}(y, z) - \bar{b}_{x,m} \quad (\text{N.7})$$

平均项 \bar{H} 处理火灾热释放率波动引起的压力大幅波动。 H' 的求解要容易得多，因为它不包括较大的压力波动。

为了在 FDS 中实现这一点，项 \bar{f} 和 $\bar{b}_{x,m}$ 被收集到根 MPI 进程中，该进程负责求解由公式 (N.4) 离散化产生的三对角线性系统。然后，生成的解被广播给其他 MPI 进程，并添加到式 (N.6) 的解中，而式 (N.6) 的解是在每个网格上独立计算的。 H 的分解和重构都是在压力求解步骤中完成的，从而将内存需求减少到只有 \bar{H} 的一维数组。

附录O 固相反应的能量和质量守恒

FDS 中的固体材料可以发生一种或多种反应（见第 8.2 节），产生新的固体材料、气体或拉格朗日粒子（例如熔化或形成烙印）。这些反应应同时保持质量和能量。

附录O.1 质量守恒

固体材料 α 的反应 β 的质量守恒式为

$$\sum_{\alpha'=1}^{N_m} \nu_{\alpha',\alpha\beta} = 0 \quad (O.1)$$

其中， N_m 是反应生成的 FDS 中所有类型物质（固体、气体或粒子）的数量， $\nu_{\alpha',\alpha\beta}$ 是反应中 α' 的产率，其中 α' 可以是一种新材料、气体或一种拉格朗日粒子。在 FDS 输入处理过程中，原始材料的产率 $\nu_{\alpha,\alpha\beta}$ 取为-1，以输入文件中指定的产率写成的先验方程变为

$$\sum_{\alpha' \neq 1, \alpha' \neq \alpha}^{N_m} \nu_{\alpha',\alpha\beta} = 1 \quad (O.2)$$

如果左侧的总和大于 1，就意味着质量被创造出来了。这是不允许的，并将导致错误信息。如果左侧的总和小于 1，则意味着质量被破坏。然而，这只会导致一条警告信息。允许使用“质量丢失”来表示固体质量丢失的现象，但用户并不希望跟踪该质量在域中的变化情况。

附录O.2 能量守恒

为了能量守恒，反应前的焓必须等于反应后的焓加上反应热 $H_{r,\alpha\beta}$ 。这实际上将某一温度下的反应热定义为生成物和反应物之间的焓差：

$$\sum_{\alpha'=1, \nu_{\alpha',\alpha\beta} < 0}^{N_m} -\nu_{\alpha',\alpha\beta} h_{\alpha'}(T) = \sum_{\alpha'=1, \nu_{\alpha',\alpha\beta} > 0}^{N_m} \nu_{\alpha',\alpha\beta} h_{\alpha'}(T) + H_{r,\alpha\beta}(T) \quad (O.3)$$

要确保能量守恒，在处理固相反应时需要做两件事。首先，必须确定反应热的温度依赖性。其次，在结合气体和固体（包括颗粒）的反应中，必须正确评估温度差引起的焓差，并将其分摊到气相和固相中。第一项所面临的挑战是，现实世界中许多材料的详细焓数据并不为人所知。许多纯固体物质（如 NaCl 或 SiO₂）的焓是已知的，但其他类型的固体物质（如木材或许多聚合物（塑料和泡沫））的焓却不知道。如果已知反应中所有成分的焓和比热，那么就可以很容易地得出随温度变化的反应热，即生成物和反应物之间随温度变化的焓差。

值得注意的是，反应热与温度的关系通常影响不大。对于许多与火灾有关的热解反应，反应热高达数百 kJ/kg ，而生成物和反应物的比热差异通常小于 1 kJ/(kgK) 。在许多情况下，特定反应发生在几十 K 的狭窄温度范围内。以反应速率峰值的温度为中心划分温度范围意味着，在发生反应的温度范围内，反应热的调整率通常低于 10%。

附录O.2.1 固相反应热

第一步，必须确定反应中所有成分的参考焓。FDS 拥有许多常见气体的数据库，其中包括预定义的参考焓。在典型的模拟中，任何不在数据库中的气体都可能是参与燃烧反应的燃料，其参考焓可以通过燃烧热和燃烧产物的参考焓来确定。因此，气体参考焓被视为固相的已知量。类似的原理也适用于固相反应产生的液态颗粒。液态颗粒的定义包括指定其蒸发成的气体和汽化热，这意味着可以确定液体的参考焓。除某些纯净物质外，固体材料的参考焓通常是未知的。即使有公布的值，将其放入公式(O.3)中也不一定能准确得出指定的反应热。必须确定在固相反应中作为反应物或生成物的任何固体物质的参考焓。对于不参与反应的固体材料，假设 0 K 时的参考焓为 0 kJ/kg，就足够了，因为与气相之间不存在质量（及其相关焓）交换。固相反应的固相产物包括保留在反应表面的固体物质和以颗粒形式离开表面的固体物质（如火种）。寻找这些焓值的方法是求解线性方程

组，其中每个物质反应都有一个方程，每个作为反应物或产物参与物质反应的固体物质的参考焓值都有一个未知数。为了建立矩阵，公式(O.3)适用于每个物质反应。材料 α 的焓 h_α 由[26]给出：

$$h_\alpha(T) = h_{\alpha,ref} + \int_{T_{ref}}^{T_R} c_{p,\alpha}(T) dT \quad (O.4)$$

在这个等式中， $h_{\alpha,ref}$ 是温度为 T_{ref} 时的焓值。这就是要求解的值。在许多固体焓的表格中， T_{ref} 的值是 298.15 K；但是，由于它可以在任何参考温度下确定，为了方便起见，我们选择 0 K 的温度。输入文件中定义了材料的比热 $c_{p,\alpha}(T)$ 。计算积分时需要选择上限温度 T_R 。这将作为反应的参考温度。用户可将其定义为输入文件的一部分。如果没有，则可以通过对材料 α 和反应 β 进行 TGA 模拟，根据反应 $A_{\alpha\beta}$ 和 $E_{\alpha\beta}$ 确定。 T_R 值设定为峰值反应速率的温度。定义了 T_R 后，就可以在左侧收集各种 $\nu_{\alpha',\alpha\beta} h_{\alpha,ref}$ 项，并在右侧收集反应热和各种 $\nu_{\alpha',\alpha\beta} \int_{T_{ref}}^{T_R} c_{p,\alpha}(T) dT$ 项。结果是一个线性方程组 $A\bar{x} = \bar{b}$ ，其中未知数 \bar{x} 是 $h_{\alpha,ref}$ 的值；然而，并不能保证有相同数量的反应和未知材料参考焓。方程组的求解取决于方程和未知数的相对数量，如下所示：

反应数=未知数：可以通过线性系统的简单求解找到解决方案 $\bar{x} = A^{-1}\bar{b}$ 。

反应数<未知数：在这种情况下，有无数个解；不过，任何一个解都足够了。给出 \bar{x} 的最小矢量大小的解是 $\bar{x} = A^T(AA^T)^{-1}\bar{b}$ 。

反应数>未知数：在这种情况下，系统是过度确定的，可能不存在一个能完美保存能量的解矢量 \bar{x} 。最小二乘解为 $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T \bar{b}$ 。

通常会出现前两种情况。第一种情况是所有材料都分解成一种或多种气体，没有材料残留。第二种情况是一种或多种材料产生一种或多种残留物，包括残留物可能发生反应。例如，木材热解成燃料气体和木炭，木炭与氧气重新接触，产生灰烬残留物和二氧化碳。第三种情况是多种固体物质在同一反应中发生反应。这种情况虽然有可能发生，但在热解反应中并不常见。

如果存在质量被破坏的反应（公式(O.2)的 LHS 小于 1），则必须修改这种方法。必须对被破坏的质量做出假设，以使反应 ν 值保持平衡。在这种情况下，如果反应损失了质量，FDS 假设损失的质量具有与原始材料相同的随温度变化的比热。然后，FDS 为该产物添加一个虚拟材料，并将其包含在求解矢量中。在确定参考焓值之外，不跟踪虚拟物质。

一旦知道了参考焓，就可以通过在特定温度下应用公式(O.3)并求解反应热来确定该温度下的反应热。

附录O.2.2 计算固体单元和气体单元的温度差

固相反应中能量守恒的第二个方面是考虑反应物和生成物可能存在的不同温度。在 FDS 中，固相反应是在被评估的固体单元的温度下发生的。因此，如果反应消耗气体，则必须首先将气体带到固相温度。如果气体温度较高或较低，固相中就会存在能量源或能量汇。反应产物在固体温度下生成。对于其他固态材料的产物，由于其固态温度保持不变，因此无需采取任何措施。对于拉格朗日粒子，粒子也是在固体温度下产生的。同样，不需要进一步调整。需要注意的是，由于粒子可能不会在每个时间步长内产生，因此 FDS 会记录粒子的质量和由物质反应产生的粒子焓。在下一个粒子注入时间，粒子会在一个能保存累积焓的温度下生成。对于气体产物，反应在固体温度下产生气体。在 FDS 中，气体的注入温度与当前气室温度相同。因此，必须对生成的气体进行与消耗的气体相反的调整。在气相中，如果当前气室温度高于固体温度，则必须生成一个能量汇项。在这两种情况下，该项都是以千克/秒为单位的质量流量乘以气体温度和固体温度之间产生或消耗的材料焓差（kJ/kg）。

$$\dot{q}_{\alpha'}''' = r_{\alpha\beta} \nu_{\alpha',\alpha\beta} (h_{\alpha'}(T_g) - h_{\alpha'}(T_s)) \quad (O.5)$$

对于消耗掉的气体（当 α' 为气体时， $\nu_{\alpha',\alpha\beta} < 0$ ），这个项会加到固体单元焓中。对于产生的气体（当 α' 为气体时， $\nu_{\alpha',\alpha\beta} > 0$ ），则从气室焓中减去该项。当为物质反应指定了一个集合物种时，

FDS 将尝试确定反应中实际涉及的原始亚物种。例如，考虑一个固相燃烧反应，在该反应中，空气中的氧气叠加物种加上一种物质转化为产物。假定产物种类定义得当，FDS 可以检查原始种类的质量差异，以确定氧气从空气中消耗，但其他成分（如环境中的 N_2 、 CO_2 和 H_2O ）只是传递到了产物一侧。在这种情况下，固体的焓修正项将只包括氧气的消耗，而气体的焓修正项将只包括超过原始空气减去氧气后的产物。

附录P 比例热解（Spyro）法

这种方法保留了锥形量热计实验所测得的热释放率随时间变化的形状（即燃烧行为），但会根据表面入射热量的大小和持续时间进行缩放。该模型能够根据不同的热暴露和材料厚度对单一参考曲线进行缩放。对火焰热通量的经验估计用于计算锥形量热计中的总入射热通量，以用于缩放。通过采用不同热暴露和/或材料厚度下的多个锥形量热计实验数据，可以提高一致性。以下各小节介绍了每个模块的技术基础。

附录P.1 固定厚度缩放模型

文献[162]介绍了基于固定厚度缩放的热解模型。进入材料的净热通量通过有效气化热与热解速率相关，公式为

$$\dot{q}_{\text{net}}'' = \dot{m}_f'' \Delta h_g \quad (\text{P.1})$$

其中， \dot{q}_{net}'' 是进入表面的净热通量， Δh_g 是气化热。同样，单位面积材料的热释放率 \dot{Q}'' 通过有效燃烧热 Δh 与材料的热解率相关联，即

$$\dot{Q}'' = \dot{m}_f'' \Delta h \quad (\text{P.2})$$

式(P.1)和式(P.2)的比值与 \dot{q}_{net}'' 和 \dot{Q}'' 的关系为

$$\frac{\dot{Q}''}{\dot{q}_{\text{net}}''} = \frac{\Delta h}{\Delta h_g} \quad (\text{P.3})$$

假设 Δh_g 和 Δh 与 \dot{q}_{net}'' 不变，则公式(P.3)可用于预测热暴露变化引起的 \dot{Q}'' 的大小变化，即

$$\dot{Q}_1'' = \frac{\dot{q}_{\text{net},1}''}{\dot{q}_{\text{net},2}''} \dot{Q}_2'' \quad (\text{P.4})$$

其中下标 1 和 2 表示不同的热暴露水平。燃烧的加速度或减速度可以通过评估在一个离散的时间间隔 Δt 内，两个 \dot{Q} 释放相同数量的能量所需的时间差来计算、

$$E_{\Delta t}'' = \dot{q}_{\text{net}}'' \frac{\Delta h}{\Delta h_g} \Delta t \quad (\text{P.5})$$

其中， $E_{\Delta t}$ 是在 Δt 期间释放的总能量。将公式(P.5)与两个热暴露水平相关联，可得出

$$\Delta t_1 = \frac{\dot{q}_{\text{net},2}''}{\dot{q}_{\text{net},1}''} \Delta t_2 \quad (\text{P.6})$$

由于 \dot{q}_{net}'' 在燃烧过程中很难测量，因此引入一个近似的参考热通量 \dot{q}_{ref}'' ，即

$$\dot{q}_{\text{ref}}'' = \dot{q}_{\text{cone}}'' (1 - \Gamma) + \dot{q}_{\text{flame}}'' \quad (\text{P.7})$$

其中， \dot{q}_{cone}'' 是锥体量热仪测试中冷面的设定暴露通量， Γ 是火焰吸收的通量分数， \dot{q}_{flame}'' 是火焰对表面的热反馈。对于锥形试验的输入数据， Γ 和 \dot{q}_{ref}'' 的值不容易获得，在确定公式(P.4)中的 $\dot{q}_{\text{net},2}''$ 时，使用附录 P.3 节中讨论的经验方法来估计它们。对于 $\dot{q}_{\text{net},1}''$ ，FDS 在每个时间步计算中使用入射辐射和净对流热通量之和。

附录P.2 适应多种厚度

详细的热解模型通常基于阿伦尼斯动力学公式[163]：

$$r = A e^{-E/(RT_s)} \zeta_1 \zeta_2 \dots \zeta_N \quad (\text{P.8})$$

其中, r 是反应速率, A 和 E 是阿伦尼乌斯预指数和活化能, T_s 是固体温度, R 是摩尔气体常数, ζ_j 是第 j 种反应物浓度对燃烧的影响。材料厚度对材料的燃烧行为有两个主要影响。最大的影响是可燃物质量的不同对燃烧持续时间的影响。第二个影响是热薄材料和热厚材料之间的过渡。根据不同材料厚度进行缩放的模型从这一表述中得到启发; 不过, 该模型假定这两种影响可以通过测量燃烧曲线的非尺寸缩放来表示。

固体材料内部的非尺寸温度曲线与傅里叶数 Fo 和毕渥数 Bi 成比例。 Fo 是固体中热传导率与热能储存率的比值, 可视为无量纲时间[75]。其定义为

$$Fo = \frac{\alpha}{\Delta^2} t = \frac{k}{\rho c_p \Delta^2} t \quad (P.9)$$

其中, α 是热扩散率, ρ 是密度, c_p 是比热容, k 是热导率, Δ 是厚度, t 是时间。 Bi 是固体内部热阻与表面边界层外部热阻之比[75]:

$$Bi = \frac{h}{k / \Delta} \quad (P.10)$$

其中 h 为传热系数。传统的 Bi 公式假定固体的外部暴露主要与表面对流有关, 因此使用对流传热系数 h_c 来表示 h 。然而, 在固体燃料燃烧的情况下, 外部辐射 (如锥体量热计实验中的外加表面热通量) 和表面上方热解酸盐燃烧产生的火焰辐射会推动热量传递到表面, 因此这一假设并不成立。这可以用另一个毕渥数 Bi^* 来解释, 它结合了表面对流和辐射的影响:

$$Bi^* = \frac{h_c + h_r}{k / \Delta} \quad (P.11)$$

其中, h 已分为对流 h_c 和辐射 h_r 两部分。辐射传热系数是根据线性化公式计算得出的[75]:

$$h_r = \varepsilon \sigma (T_r + T_s) (T_r^2 + T_s^2) \quad (P.12)$$

其中, ε 是表面发射率, σ 是斯蒂芬-玻尔兹曼常数, T_r 是辐射温度, T_s 是表面温度。辐射温度是代表表面吸收能量的有效温度, 假设视角系数为 1:

$$T_r = \left[\frac{\dot{q}_r''}{\varepsilon \sigma} \right]^{1/4} \quad (P.13)$$

其中, \dot{q}_r'' 是表面的入射辐射。

如附录 P.1 节所述, 先验方法假定 Δh_g 为常数。然而, 根据公式(P.3), 利用 \dot{Q}'' 的时变测量值并估计时变的 \dot{q}_{flame}'' , 可以计算出时变的有效 Δh_g 。该模型假定, 实验中观察到的燃烧强度和持续时间的变化与材料厚度和热暴露对这些非尺寸组的影响有关, 即 $\Delta h_g = f(Bi^*, Fo)$ 。研究发现, Δh_g 在非维度时间尺度 $FoBi^*$ 时崩溃。将这一非维时间等同于两个辐照水平, 可以建立 $FoBi^*$ 的比例关系、

$$FoBi^* = \frac{h_1 t_1}{\rho_1 c_{p,1} \Delta_1} = \frac{h_2 t_2}{\rho_2 c_{p,2} \Delta_2} \quad (P.14)$$

其中下标表示不同的暴露水平。公式(P.14)表明, 非维度时间与 ρ 、 c_p 、 Δ 和 h 有关。

假定材料特性 (即 k 、 ρ 、 c_p) 的变化与非尺寸时间相关, 则可获得非尺寸时间缩放的简化表示。根据这一假设, 公式(P.14)简化为

$$t_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \frac{h_1}{h_2} t_1 \quad (P.15)$$

在厚度不变的情况下 (即 $\Delta_1 = \Delta_2$), 公式(P.15)与公式(P.6)在不连续的时间间隔内是一致的。因此, h 的比值与 \dot{q}'' 的比值类似, 得出

$$\Delta t = \frac{\Delta}{\Delta_{ref}} \frac{\dot{q}_{ref}''}{\dot{q}''} \Delta t_{ref} \quad (P.16)$$

附录P.3 锥面参考热通量

当使用公式(P.7)获得公式(P.4)中的 $\dot{q}_{net,2}''$ 时，需要一种方法来确定 Γ 和 \dot{q}_{flame}'' 。在实际的锥形试验中，这将取决于燃烧的材料，因为燃烧热、燃烧速率和烟尘产量都会影响火焰热通量和锥形辐射的吸收。由于没有简单的分析模型来预测这些参数，因此使用 FDS 模拟锥形量热仪开发了一种经验方法。

模拟几何图形如图 13-8 所示，包括辐射锥、样品支架和辐射锥上方的容积，以捕捉火焰高度对热反馈的贡献。共进行了 30 次模拟，其中燃烧热（10、20、30、40 和 50 MJ/kg）和烟尘产率（0、1、2、5、10 和 20%）各不相同（假定一氧化碳产率等于烟尘产率）。每次模拟包括三个阶段：关闭锥体时样品以规定速率燃烧，打开锥体时样品以规定速率燃烧，打开锥体时不燃烧（ $\dot{q}_{cone}'' = 50 \text{ kW/m}^2$ ）。规定燃烧在一定的 HRRPUA 范围内变化（100、200、400、800、1200、1600 和 2000 kW/m^2 ）。样品的固定温度为 300 °C，代表名义点火温度。锥体关闭阶段得出 \dot{q}_{flame}'' ，锥体开启时的燃烧与锥体关闭和开启时的燃烧之间的差值得出到达样品的锥体通量，锥体无燃烧阶段得出 \dot{q}_{cone}'' 。到达样品的锥通量与 \dot{q}_{cone}'' 的差值为 Γ 。

为每种燃烧热和烟尘产率创建了一个名义燃料分子，其氧燃烧热(EPUMO2)为 13,100 kJ/kg。对于 0% 的烟尘产率，可通过以下方法获得燃料化学成分。50 兆焦/千克的燃烧热意味着甲烷之类的燃料和 $\text{CH}_{3.333}$ 的化学式可在烟尘产率为 0% 时提供所需的 EPUMO2。燃烧热为 40 兆焦/千克时，燃料为碳氢化合物，计算公式为 $\text{CH}_{0.959}$ 。对于 10、20 和 30 MJ/kg，在保持 C:H 比例为 1:2 的情况下添加氧气，得出的公式为 $\text{CH}_2\text{O}_{0.302}$ 、 $\text{CH}_2\text{O}_{0.658}$ 和 $\text{CH}_2\text{O}_{1.322}$ 。根据不同烟尘产量的需要，改变 H 或 O 的值，以保持 13,100 千焦/千克的 EPUMO2。

如果用所有 HRRPUA 的最大值对每种燃烧热的 \dot{q}_{flame}'' 进行归一化，结果如图 13-9 左所示。然后，我们可以确定最大 \dot{q}_{flame}'' 与燃烧热函数的二次拟合，如图 13-9 右侧所示。

对燃烧热、烟尘产率和 HRRPUA 的各种简单组合进行了评估，以确定 Γ 的关系。 $A + B \times \text{HRRPUA} / \Delta h + C \times \text{soot yield}$ 的函数形式拟合的均方根值最低。要确定锥形试验的随时间变化的 \dot{q}_{ref}'' ，首先要利用图 13-9 所示拟合处的 Δh 确定最大 \dot{q}_{flame}'' ；其次，通过插值图 13-9 中的平均归一化曲线来调整当前 HRRPUA 的 \dot{q}_{flame}'' ；第三，确定 Γ 并用于调整 \dot{q}_{cone}'' ；最后，通过公式(P.7)确定 \dot{q}_{ref}'' 。与 FDS 预测相比，拟合结果误差为 2%，见图 13-10。

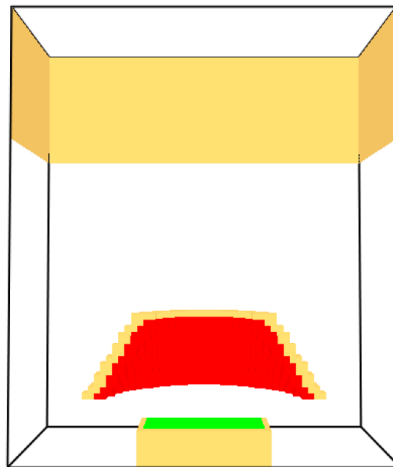


图 13-8 用于开发锥体参考通量的 FDS 几何图形。红色为锥形加热器，绿色为样品表面。该域在平面 $y=0 \text{ m}$ 处剪切。

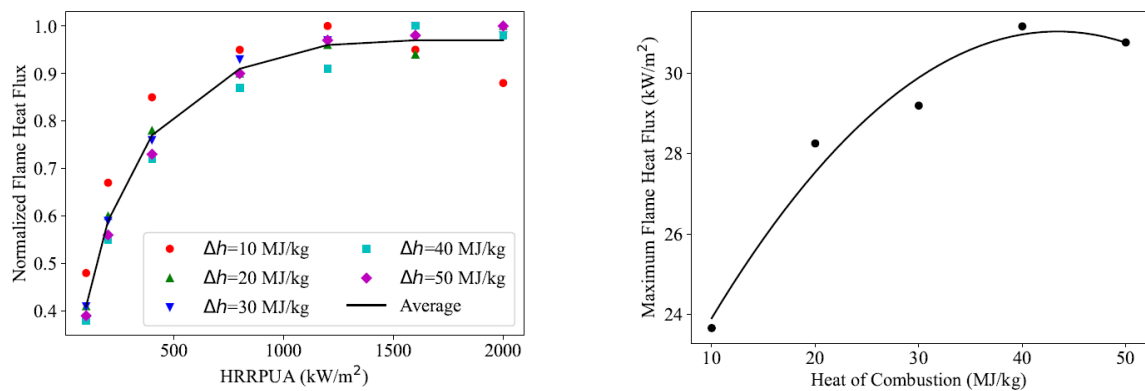


图 13-9 (左图) 归一化火焰热通量与 HRRPUA 的函数关系。(右图) 最大火焰热通量与 Δh 的函数关系。

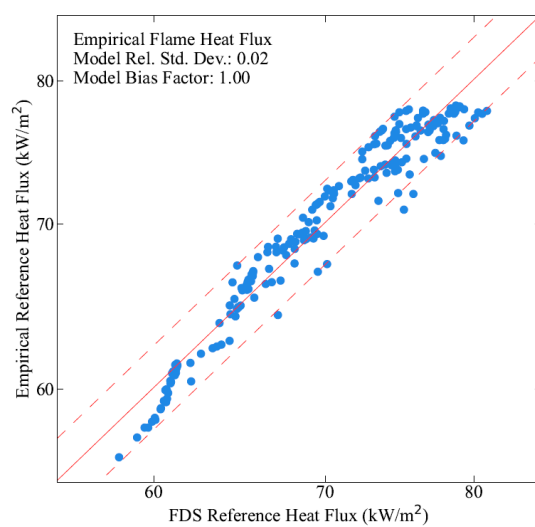


图 13-10 预测热通量与经验参考热通量的散点图。