

ИНТЕГРАЦИЯ РАЗЛИЧНЫХ ПЛАТФОРМ С ОТКРЫТЫМ КОДОМ ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ТУРБУЛЕНТНОГО ДИФфуЗИОННОГО ГОРЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Г. Морар^а, А. И. Карпов^б, А. А. Шаклеин^в

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1261-0370>, ✉ morar@udman.ru

^б ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8380-1599>, karpov@udman.ru

^в ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3603-4443>, shaklein@udman.ru

Аннотация: в данной работе представлен подход к численному моделированию горизонтального распространения пламени по поверхности полиметилметакрилата с учетом сопряженного тепло- и массопереноса между газовой и твердой фазами. Разработан собственный решатель на базе OpenFOAM, реализующий химическую кинетику пиролиза, теплоперенос в твердом теле и взаимодействие с газовой фазой, включая итерационный алгоритм PIMPLE. Для учета турбулентных пульсаций в факеле пламени применена программа Fire Dynamics Simulator (FDS), а также создан Python-скрипт для интерполяции данных между расчетными сетками FDS и OpenFOAM. Проведено моделирование ламинарного и турбулентного горения, определены зоны с различными режимами течения, уточнена высота области ламинарного горения (7.5 мм), и выполнено сопряжение расчетов. Результаты показали, что включение турбулентной информации из факела не оказывает влияния на скорость распространения фронта пламени, что подтверждает доминирование ламинарного механизма у поверхности полиметилметакрилата. Дополнительно реализован механизм автоматического обновления граничных условий, что позволяет проводить серию последовательных расчетов с высокой степенью адаптации. Полученные данные позволяют повысить точность моделирования процессов горения и могут быть использованы для анализа пожарной безопасности в сложных геометрических конфигурациях.

Ключевые слова: численное моделирование, турбулентное диффузионное пламя, горение полимерного материала, OpenFOAM, Fire Dynamics Simulator.

Благодарности: работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-29-00148).

Для цитирования: Морар Г., Карпов А. И., Шаклеин А. А. Интеграция различных платформ с открытым кодом для расчета параметров турбулентного диффузионного горения полимерных материалов. *Успехи кибернетики*. 2025;6(4):71–76.

Поступила в редакцию: 14.10.2025.

В окончательном варианте: 07.11.2025.

INTEGRATION OF OPEN-SOURCE PLATFORMS FOR MODELING TURBULENT DIFFUSION COMBUSTION OF POLYMERIC MATERIALS

G. Morar^а, A. I. Karpov^б, A. A. Shaklein^в

Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russian Federation

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1261-0370>, ✉ morar@udman.ru

^б ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8380-1599>, karpov@udman.ru

^в ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3603-4443>, shaklein@udman.ru

Abstract: we present a numerical approach to modeling horizontal flame spread over polymethylmethacrylate (PMMA) surfaces, accounting for coupled heat and mass transfer between gas and solid phases. We developed a custom solver in OpenFOAM that implements pyrolysis chemical kinetics, solid-phase heat transfer, and gas-phase interactions using the iterative PIMPLE algorithm. To capture turbulent fluctuations in the flame plume, we used Fire Dynamics Simulator (FDS) and created a Python script to interpolate data between FDS and OpenFOAM computational grids.

We conducted simulations of both laminar and turbulent combustion, identifying zones with distinct flow regimes and refining the laminar combustion zone height to 7.5 mm. Coupled simulations transferred temperature, velocity, and species concentration data from FDS to OpenFOAM. Results showed that including turbulent plume data does not affect the flame front propagation speed, confirming the dominance

of laminar mechanisms near the PMMA surface. Additionally, we implemented an automated boundary condition update mechanism, enabling sequential simulations with high adaptability.

These findings improve the accuracy of combustion modeling and provide a foundation for fire safety analysis in complex geometries.

Keywords: simulation, turbulent diffusion flame, polymer combustion, OpenFOAM, Fire Dynamics Simulator.

Acknowledgements: this work is supported by the Russian Science Foundation (project No. 25-29-00148).

Cite this article: Morar G., Karpov A. I., Shaklein A. A. Integration of Open-Source Platforms for Modeling Turbulent Diffusion Combustion of Polymeric Materials. *Russian Journal of Cybernetics*. 2025;6(4):71–76.

Original article submitted: 14.10.2025.

Revision submitted: 07.11.2025.

Введение

Основным аспектом, связанным с развитием современных подходов к численному моделированию распространения пламени по поверхности горючего материала, является необходимость учета турбулентного режима течения в газофазном пламени. В [1] получено, что ламинарное приближение показывает адекватное описание процесса в кромке, но для расчета всей области пламени необходимо привлекать модель турбулентного переноса. Наиболее простыми из них (в рамках дифференциальной постановки) являются различные модификации двухпараметрических моделей, основанных на осредненных по времени уравнениях Навье–Стокса (RANS) [2], однако визуализация пламени показала наличие крупномасштабных пульсаций, что исключает применение RANS моделей, предполагающих мелкомасштабную изотропную турбулентность. Достаточно очевидно, что использование прямого численного моделирования (DNS) в рассматриваемой задаче неприменимо ввиду недопустимых затрат вычислительных ресурсов и единственным реализуемым подходом являются вихреразрешающие модели (LES) в виде их различных модификаций. Концепция LES моделей предполагает решение трехмерных уравнений для моделирования распространения пламени по поверхности горючего материала. В работе [3] показано, что для того, чтобы корректно рассчитать тепловой поток на поверхности горючего материала, размер ячейки сетки не должен превышать 0.1 мм. Поскольку проводить расчеты с таким шагом сетки во всей области не представляется возможным из-за ограниченных вычислительных ресурсов, то необходима разработка специальных комбинированных алгоритмов, использующих сетки с мелким шагом у поверхности горения и более крупным — во внешней области, что и является предметом настоящего исследования.

Исходные данные и алгоритм решения

Исследование процесса диффузионного горения полимерного материала проводится на примере полиметилметакрилата (ПММА), который широко используется как модельный материал [4–8]. В данной работе предлагается использование собственного алгоритма, который способен учесть как турбулентные пульсации, так и тепломассоперенос на границе твердое тело — газ. В прошлой работе [9] показано, что несмотря на наличие турбулентных пульсаций в факеле пламени, вблизи поверхности горения обнаруживается зона с ламинарным режимом горения. Исходя из этих данных, можно разделить газовую фазу на две зоны: пристеночную, в которой на сетке с достаточно мелким шагом решаются уравнения переноса ламинарного режима реагирующего течения в газовой фазе и теплопереноса в горючем материале, и внешнюю зону, в которой решаются уравнения, описывающие турбулентный перенос. Данная конфигурация представлена на рис. 1.

Сначала решается задача моделирования ламинарного горения с помощью модифицированного пакета OpenFOAM. Общий вид программного кода в стилевом формате OpenFOAM выглядит следующим образом:

```
while (runTime.loop())
{
    Info << "Time = " << runTime.timeName() << "\n";
    alpha0 = alpha;
    #include "calcBurnout.H"
    for (int pimple_it = 0; pimple_it < pimple_max_it; ++pimple_it)
```

```

{
  Info << "pimple iteration = " << pimple_it << "\n";
  #include "updateGasProperties.H"
  #include "updateSolidProperties.H"
  #include "calcSldChem.H"
  #include "calcUs.H"
  #include "UEqn.H"
  for (int pu_it = 0; pu_it < pu_max_it; ++pu_it)
  {
    #include "pEqn.H"
  }
  Info << "max(U): " << mag(gMax(U)) << "\n";
  #include "YEqn.H"
  #include "meshToMeshGS.H"
  #include "TgsEqn.H"
  #include "meshGSToMesh.H"
}
#include "calcUf.H"

```

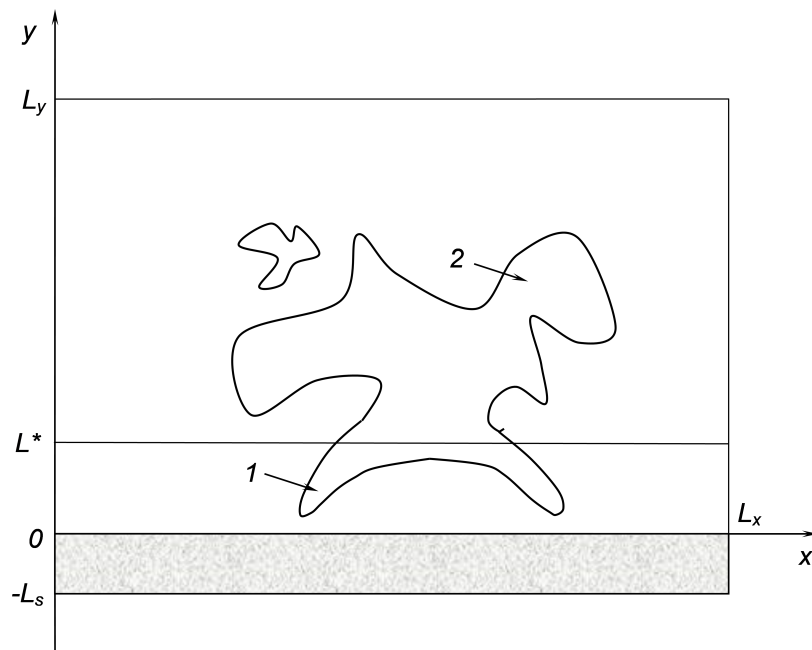


Рис. 1. Схема расчетной области. L_x , L_y – размеры по координатам, L_s – толщина горючего материала, L^* – граница разделения пламен: 1 – ламинарное пламя, 2 – турбулентное пламя

Наша модификация исходного решателя, описывающая пиролиз твердого материала, представлена в модуле "calcSldChem.H" и выглядит следующим образом:

```

for (const auto &i: indexes_s)
{
  if (flag_fuel[i]) { W_gs[i] = Foam::pow(1.0 - alpha[i], n_s) * k_s * Foam::exp(-
E_s/(R0v * T_gs[i])); }
  else { W_gs[i] = 0; }
  if (!ignition_flag)
  {
    alpha[i] = alpha0[i] + W_gs[i]*runTime.deltaT().value();
    if (alpha[i] > 1.0) { alpha[i] = 1.0; }
  }
}

```

Результатом выполнения расчетов в пакете OpenFOAM является решение задачи ламинарного горения в области $0 < x < L_x$, $-L_s < y < L_y$ показанной на рисунке 1. На рисунке 2 представлено поле температур, где, как можно заметить, размер горящей поверхности составляет 0.05 м, который определяется по протеканию химической реакции в ячейке сетки, что позволяет максимально точно определить размеры горящей поверхности. В данном случае задачу можно решать в двумерной постановке, размеры газовой области составляют 0.1 м по оси X и 0.025 м по оси Y. Видно, что уже на высоте в 0.025 м происходит значительное сужение, что делает нецелесообразным увеличение высоты рассматриваемой области.

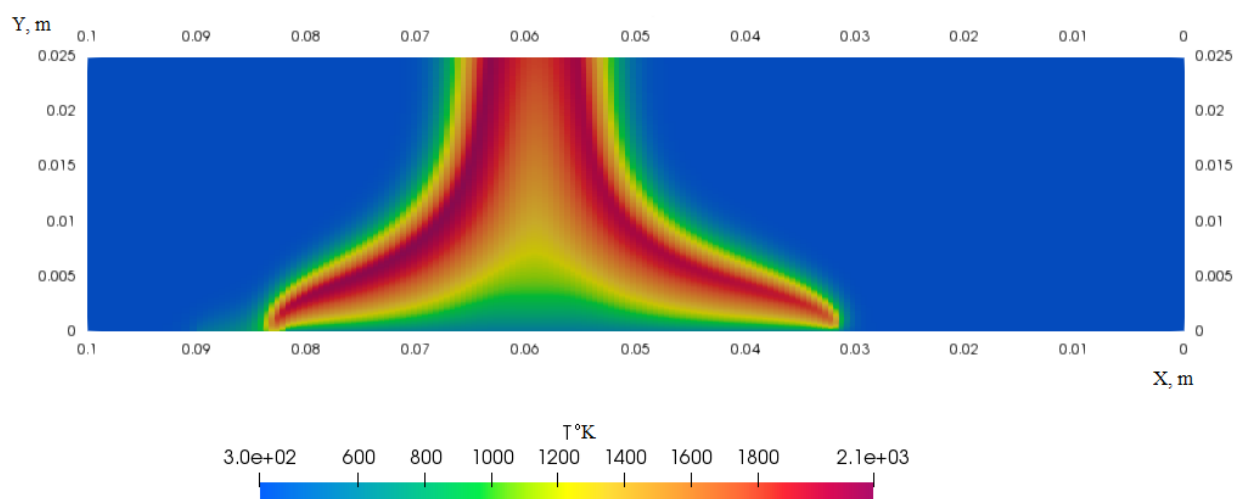


Рис. 2. Температурное поле, полученное при моделировании ламинарного горения в OpenFOAM

Турбулентное горение рассчитывается в программе FDS (Fire Dynamics Simulator) [10] с использованием настроек, указанных в работе [9]. Задаются размеры области и модель турбулентности LES:

```
&HEAD CHID='burner', TITLE='burner' /
&MESH IJK=200,1,200, XB=0.0,0.50,0.0,0.01,0.0,0.50 /
&TIME T_END=10. /
&MISC SIMULATION_MODE='LES' /
```

Записывается химическая формула ПММА и условия протекания химической реакции:

```
&SPEC ID = 'PMMA', FORMULA='C5.0H8.0O2.0' /
&SPEC ID = 'OXYGEN', MASS_FRACTION_0=0.232/
&SPEC ID = 'CARBON DIOXIDE' /
&SPEC ID = 'WATER VAPOR' /
&SPEC ID = 'NITROGEN', MASS_FRACTION_0=0.768/
&REAC ID = 'pmma'
  FUEL='PMMA'
  A = 8.6E12
  E = 9E4
  HEAT_OF_COMBUSTION=25200.
  SPEC_ID_NU='PMMA', 'OXYGEN', 'CARBON DIOXIDE', 'WATER VAPOR'
  NU=-1, -6, 5, 4
  SPEC_ID_N_S = 'PMMA', 'OXYGEN'
  N_S = 0.25, 1/
```

Создается горелка размером 5 см по осям OX и OY, что соответствует размеру горящей поверхности при решении задачи в OpenFOAM. Задаются начальные условия температуры и расхода на горелке и граничные условия по области, которые также взяты из полученных в ходе решения задачи ламинарного горения своим решателем:

```

&SURF ID='BURNER', MASS_FLUX(1)=0.01, SPEC_ID(1)='PMMA', TAU_MF(1)=0.01,
TMP_FRONT=450. /
&VENT XB=0.225,0.275,0,0.01,0,0, COLOR='BLUE', SURF_ID='BURNER' /
&VENT MB='ZMAX', SURF_ID='OPEN' /
&VENT MB='XMIN', SURF_ID='OPEN' /
&VENT MB='XMAX', SURF_ID='OPEN' /

```

На рисунке 3 представлено температурное поле, полученное в результате расчета турбулентного горения при помощи FDS.

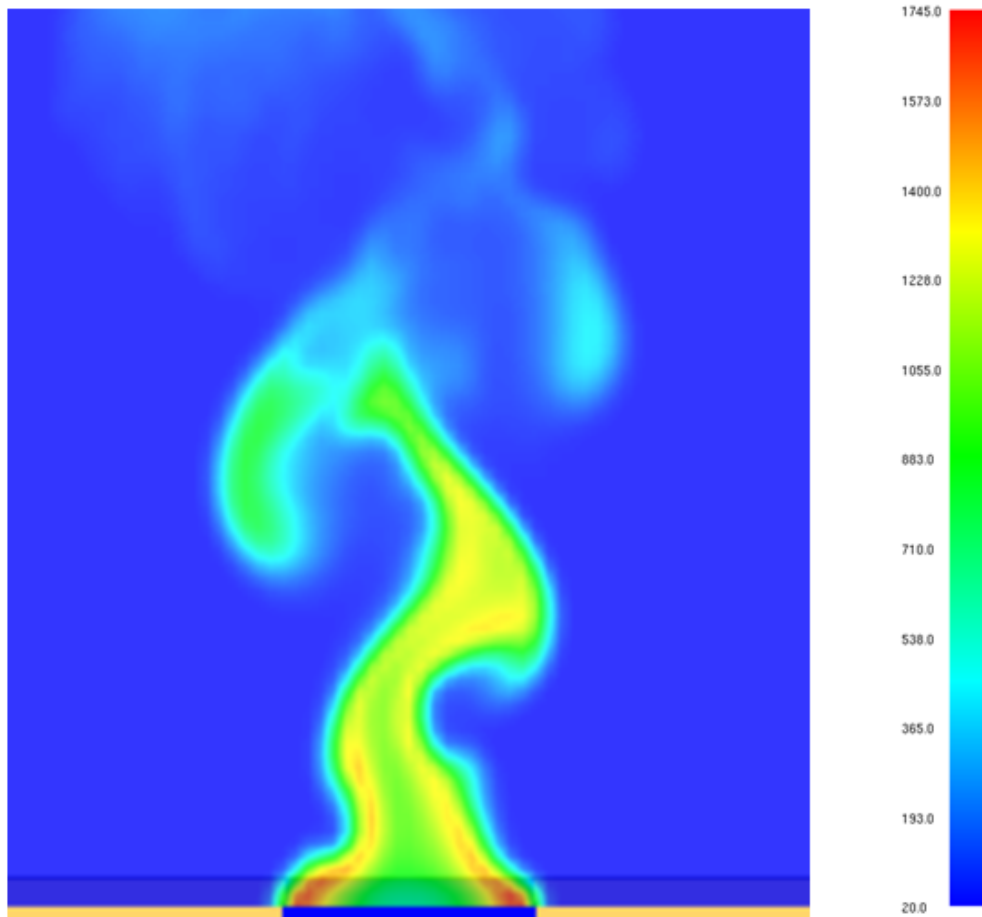


Рис. 3. Температурное поле, полученное в результате моделирования турбулентного горения в FDS

По результатам расчета турбулентного горения была уточнена высота области L^* , в которой еще наблюдается ламинарный характер горения, — 7.5 мм. Чтобы объединить оба расчета и таким образом одновременно рассчитывать тепловой поток на границе твердого тела и учитывать турбулентные пульсации, возникающие в газе, необходимо перенести данные из FDS со среза на высоте 7.5 мм в OpenFOAM. Для этого был написан скрипт с использованием языка программирования Python, который позволяет интерполировать данные с одной сетки на другую и создать файлы с новыми граничными условиями для OpenFOAM в области $-L_s < y < L^*$ (рис. 1). Далее расчетная область обрезается и подставляются интерполированные данные температуры, скоростей и концентраций химических компонентов. После чего снова запускается ламинарный расчет, но уже с новыми данными на верхней границе L^* . Такой перенос данных между модулями OpenFOAM и FDS проводился несколько раз с учетом увеличения ширины горячей поверхности. Детальные результаты расчетов представлены в [9].

Заключение

Разработан собственный сопряженный решатель OpenFOAM для моделирования горения ПММА, учитывающий химическую кинетику пиролиза в твердом теле, газофазное горение в пламени и тепломассоперенос между фазами. Создан Python-инструмент для обмена полями между FDS

и OpenFOAM, включая валидацию единиц, выбор слоя по Z, интерполяцию по X, формирование смешанных граничных условий. Комплексная апробация показала: при горизонтальном распространении пламени у поверхности ПММА доминирует ламинарный механизм вблизи фронта, а включение турбулентной информации из факела не меняет скорость распространения фронта. Данная работа расширяет возможности численного анализа задач пожарной безопасности и создает основу для исследований вертикальных и геометрически сложных конфигураций с полностью автоматизированным сопряжением «газ–твердое тело».

ЛИТЕРАТУРА

1. Karpov A. I., Korobeinichev O. P., Shaklein A. A., Bolkisev A. A., Kumar A., Shmakov A. G. Numerical Study of Horizontal Flame Spread over PMMA Surface in Still Air. *Applied Thermal Engineering*. 2018;144:937–944. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2018.08.106.
2. Kacem A., Mense M., Pizzo Y., Boyer G., Suard S., Boulet P., Parent G., Porterie B. A Fully Coupled Fluid/Solid Model for Open Air Combustion of Horizontally-Oriented PMMA Samples. *Combustion and Flame*. 2016;170:135-147. DOI: 10.1016/j.combustflame.2016.04.009.
3. Snegirev A. Y., Kuznetsov E. A., Korobeinichev O. P., Shmakov A. G., Trubachev S. A. Ignition and Burning of the Composite Sample Impacted by the Bunsen Burner Flame: a Fully Coupled Simulation. *Fire Safety Journal*. 2021;127:103507. DOI: doi.org/10.1016/j.firesaf.2021.103507.
4. Wu K. K., Fan W. F., Chen C. H., Liou T. M., Pan I. J. Downward Flame Spread over a Thick PMMA Slab in an Opposed Flow Environment: Experiment and Modeling. *Combustion and Flame*. 2003;132:697-707. DOI: doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00520-5.
5. Zhao K., Zhou X., Yang L., Gong J., Wu Z., Huan Z., Liu X. Width Effects on Downward Flame Spread over Poly(Methylmethacrylate) Sheets. *Journal of Fire Sciences*. 2015;33:69-84. DOI: doi.org/10.1177/0734904114554559.
6. Jiang L., Miller C. H., Gollner M. J., Sun J.-H. Sample Width and Thickness Effects on Horizontal Flame Spread over a Thin PMMA Surface. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2017;36(2):2987-2994. DOI: doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.157.
7. Bolshova T. A., Gerasimov I. E., Shmakov A. G., Korobeinichev O. P. Combustion of Spherical PMMA Samples in Still Air Simulated Using a Skeletal Chemical Kinetic Mechanism. *Fire Safety Journal*. 2023;138:103807. DOI: doi.org/10.1016/j.firesaf.2023.103807.
8. Fukumoto K., Wang C., Wen J. Large Eddy Simulation of Upward Flame Spread on PMMA Walls with A Fully Coupled Fluid–Solid Approach. *Combustion and Flame*. 2018;190:365–387. DOI: doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.11.012.
9. Морар Г., Карпов А. И., Шаклеин А. А., Клейменов Е. В. Численное исследование распространения турбулентного диффузионного пламени по горизонтальной поверхности ПММА. *Химическая физика и мезоскопия*. 2025;27(23):382–389. DOI: doi.org/10.62669/17270227.2025.3.36.
10. McGrattan K., Hostikka S., Floyd J., McDermott R., Vanella M. Fire Dynamics Simulator. Technical Reference Guide. Volume 1: Mathematical Model. NIST Special Publication 1018, Sixth Edition. 2013. Режим доступа: <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/SpecialPublications/NIST.SP.1018e6.pdf>.