

“金沙 1.0” 程序使用说明

目录

1. FGM 燃烧模型简介.....	1
2. 前处理程序准备数据库.....	4
3. FGM 计算主程序.....	6
4. 程序运行和后处理.....	7
附录.....	8

1. FGM 燃烧模型简介

FGM 燃烧模型为类火焰面 (flamelet-based) 燃烧模型, 一般定义为基于层流火焰面采用一系列的一维火焰面来表示高维湍流火焰, 通常利用假定概率密度函数来考虑湍流与化学的相互作用。FGM 燃烧模型是一种化学建表方法, 不仅可以对燃烧数据库进行前处理以增加计算效率的同时, 而且可以采用详细的化学反应机理对排放物和非稳定燃烧过程进行准确预测。

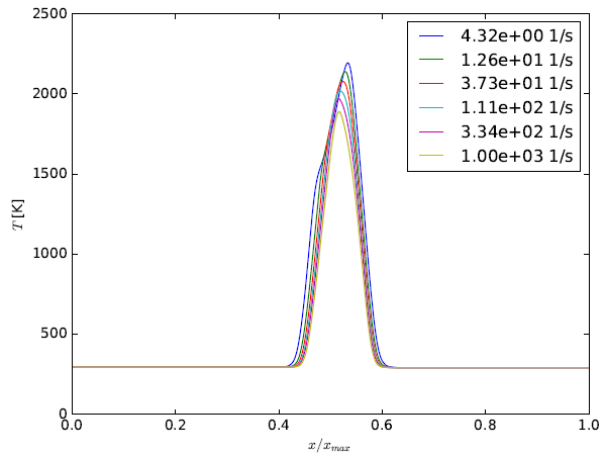


图 1. 部分不同拉伸率火焰温度的空间分布

本研究采用层流对冲扩散非稳态火焰面进行化学建表。首先, 在不同拉伸率的条件下计算出一系列一维层流稳态扩散火焰数据库, 不同拉伸率下火焰温度的空间分布如图 1 所示。然后, 在单一拉伸率 (熄火拉伸率) 条件下计算出一维层流非稳态扩散火焰数据库。详细化学反应涉及大量的物质组分, 如果对每种组分都采用输运方程进行求解势必明显降低计算效率, 为此本研究通过引入混合分数

Z 和化学反应过程变量 γ 的方法降低计算维度，将详细化学反应中的组分映射为混合分数 Z 和化学反应过程变量 γ 之间的函数 $\psi = F_\psi(Z, \gamma)$ 。混合分数是一个守恒标量，可通过具有喷雾源项的输运方程进行求解，本研究采用 Bilger 提出的定义：

$$Z = \frac{2 \frac{Z_C - Z_{C,2}}{M_C} + 0.5 \frac{Z_H - Z_{H,2}}{M_H} - \frac{Z_O - Z_{O,2}}{M_O}}{2 \frac{Z_{C,1} - Z_{C,2}}{M_C} + 0.5 \frac{Z_{H,1} - Z_{H,2}}{M_H} - \frac{Z_{O,1} - Z_{O,2}}{M_O}}$$

其中 Z_i 表示元素 i 的质量分数， M_i 表示元素 i 的摩尔质量，下标 1 和 2 分别表示燃料入口和氧化剂入口的参数。 γ 的定义一般采用如下形式：

$$\gamma = a_1 Y_1 + a_2 Y_2 + a_3 Y_3 \dots$$

式中 Y_i 表示组分 i 的质量分数， a_i 为相应的系数，具体采用的组分和相应系数值与反应机理和计算工况相关，需保证过程变量值分别随火焰拉伸率（稳态）和时间（非稳态）单调的。这种定义方式能有效的平衡非稳态和稳态两部分数据库。变量的映射结果如图 2 所示。

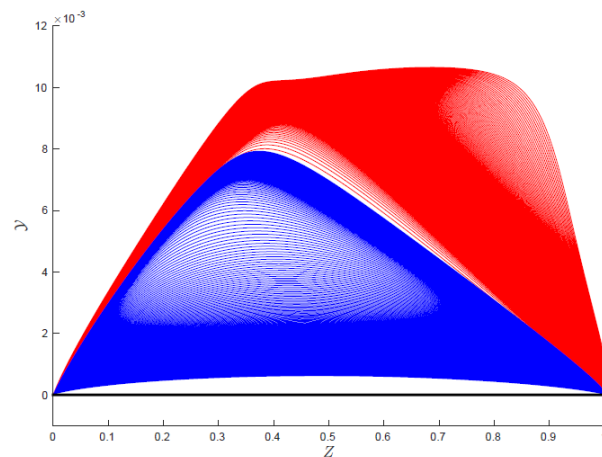


图 2. 一维火焰数据在 $[Z - \gamma]$ 空间的映射图。红色曲线代表不同火焰拉伸率的稳态火焰，蓝色代表熄火火焰，黑色代表纯混合过程。

湍流脉动对当地火焰结构的影响可以通过独立变量的联合概率密度函数实现。标量 ψ （如 T, Y_i ）的 Favre 滤波操作为：

$$\tilde{\psi} = \iint F_\psi(Z, \gamma) \tilde{P}(Z, \gamma) dzd\gamma$$

Ψ 的滤波操作为：

$$\bar{\psi} = \bar{\rho} \iint \frac{F_{\psi}(Z, \gamma)}{F_{\rho}(Z, \gamma)} \tilde{P}(Z, \gamma) dzd\gamma$$

式中密度可表示为:

$$\bar{\rho} = \left[\iint \frac{\tilde{P}(Z, \gamma)}{F_{\rho}(Z, \gamma)} dzd\gamma \right]^{-1}$$

其中 \tilde{P} 代表密度加权的联合概率密度函数。由于 γ 依赖于 Z , 因此定义归一化的过程变量:

$$C = \frac{\gamma - \gamma_{min}(Z)}{\gamma_{max}(Z) - \gamma_{min}(Z)}$$

其中 $\gamma_{max}(Z)$ 和 $\gamma_{min}(Z)$ 分别表示给定混合分数的过程变量极值。可以认为 Z 和 γ 之间满足统计独立假设, 同时假定 Z 和 γ 分别服从 β 和 δ 函数分布, 则 Z 和 γ 的联合概率密度函数满为:

$$\tilde{P}(Z, \gamma) = \tilde{P}(Z)\tilde{P}(\gamma) = \beta(Z; \tilde{Z}, \tilde{Z}''^2)\delta(\tilde{C} - C)$$

式中, β 函数为: $P(Z) = \beta(Z) = Z^{\alpha-1}(1-Z)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}$

其中, $\alpha = \tilde{Z} \left(\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right)$, $\beta = (1-\tilde{Z}) \left(\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right)$

大涡模拟中的经滤波的混合分数和过程变量可通过下面的输运方程求解:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{Z})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left((\bar{\rho}D_Z + D_t) \frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_k} \right) + \bar{S}_Z$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\gamma})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{\gamma})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left((\bar{\rho}D_{\gamma} + D_t) \frac{\partial\tilde{\gamma}}{\partial x_k} \right) + \bar{\omega}_{\gamma}$$

其中 $\bar{S}_Z = \bar{S}_{\rho}$, 表示喷雾蒸发源项, $\bar{\omega}_{\gamma}$ 可通过查表得到。 D_Z 和 D_{γ} 分别代表分子扩散系数, 湍流耗散系数 D_t 根据计算公式 $D_t = \frac{\mu_t}{Sc_t}$ 得出。 Sc_t 为Schmidt数取定值0.4。

亚网格混合分数脉动值由代数模型确定:

$$\tilde{Z}''^2 = \tilde{Z}^2 - \tilde{Z}^2 = C_v \Delta^2 \left| \frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_k} \right|^2$$

其中 C_v 为模型系数， Δ 表示滤波尺度。

FGM 数据库和 LES 流体求解器的耦合通过组分质量分数实现。在 FGM 数据库中，组分质量分数存储为 Z ， Z''^2 和 C 的函数。在 LES 求解器中，各组分质量分数通过查表从 FGM 数据库中获得，因此不要求解组分的输运方程。得到组分信息后，再计算热力学系数和输运系数。温度的计算通过求解总焓输运方程得到，这种方法可以考虑由于喷雾蒸发造成的能量损失效果。整个求解过程示意图如图 3 所示。

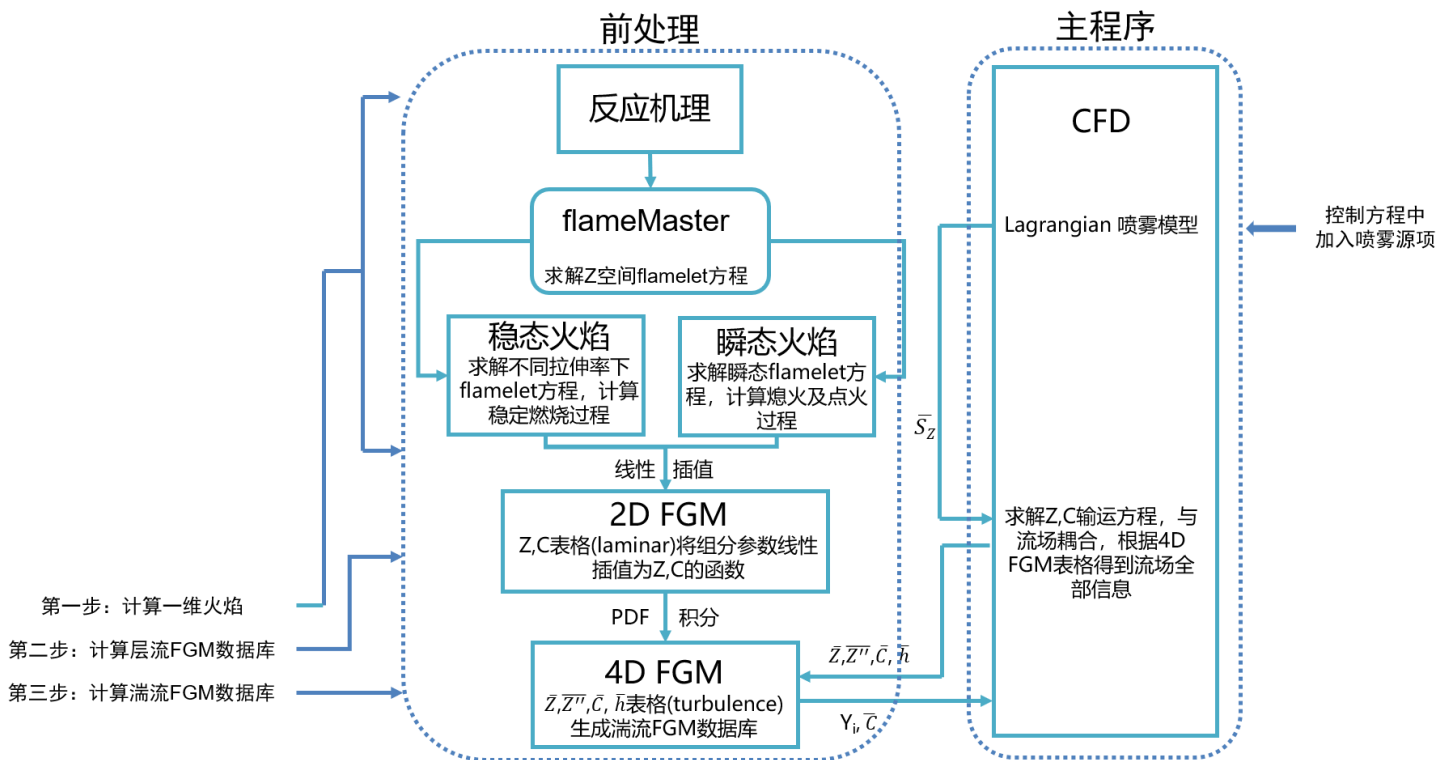


图 3. 求解策略示意图

2. 前处理程序准备数据库

2.1 层流火焰数据库生成

数据库的生成首先需要生成不同拉伸率的稳态一维对冲火焰和熄火过程的一维对冲火焰。为获得数据库处理所需的各组分质量分数和精确的热释放率值，在 flameMaster-4.2.1 的基础上进行扩展，计算混合分数空间一维火焰，稳态一维火焰计算脚本参考附件 1。非稳态火焰生成脚本参考附件 2。

考虑到非绝热过程，需要计算不同空气温度下的火焰，因此，上面计算程序

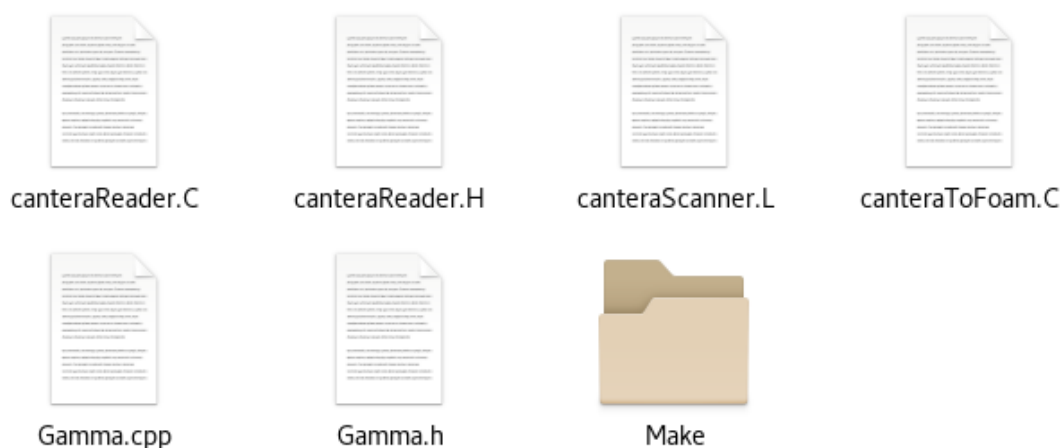
对氧化剂温度修改后需再运行两次，三组算例氧化剂温度分别对应 T_{Max} 、 T_{Min} 、 $(T_{Max}+T_{Min})/2$ 。

得到一系列原始数据后，使用 flameMaster 的 LT 程序对数据进行处理，得到便于提取所需参数的数据存储格式，在用 python 脚本处理混合分数、过程变量等有关的项(对三组算例分别处理)，以便后续处理，python 脚本参考附件 3。

Python 后处理结束后，使用 matlab 脚本将原始数据做插值归一化处理，得到最终的二维 FGM 数据库(对三组算例分别处理)，matlab 脚本参考附件 4。

2.2 湍流数据库的生成

得到上述数据后，采用 canteraToFoam 程序对二维数据库进行 β -PDF 积分，包括以下程序文件：



源程序文件说明如下：

CanteraToFoam.C：为主程序；

CanteraReader.H：为积分程序头文件；

CanteraReader.C：为积分实现文件；

CanteraScanner.L：为 FLex 解析层流数据库文件；

Gamma.h：为调用的数学库头文件；

Gamma.cpp：为调用的数学库实现文件；

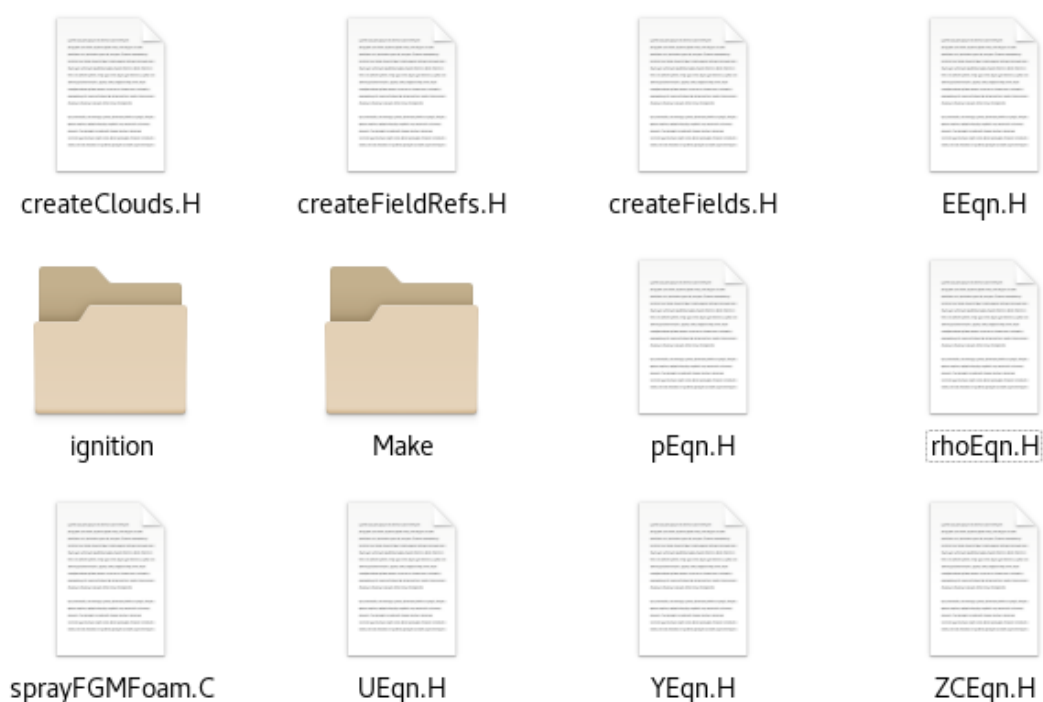
Make：包含编译所需的库文件、头文件路径及输出程序路径。

目前的数据库积分程序并不支持并行计算，但可以通过修改 CanteraReader.C 中 `if(tableNames_[k]==" H2O")` 语句控制计算指定的组分，提交多个积分任务实现湍流火焰数据库的快速生成。

与所有 OpenFoam 算例类似，数据库生成算例同样包含 0 文件夹，constant 文件夹，system 文件夹，此外它还包含化学反应文件夹 chemkin 和数据库文件夹 table，table 文件夹包含 Table0.csv，Table0.5.csv 和 Table1.csv 文件，由上一步中 matlab 插值程序生成，分别对应氧化剂温度 TMin， $(TMax+TMin)/2$ 和 TMax。

3. FGM 计算主程序

“金沙 1.0”求解器包括以下源程序文件：



FGM 程序文件说明如下：

sprayFGMFoam.C：为主程序；

creatFields.H：为主程序中调用的头文件，其中定义气相求解器所需的各种变量；

creatFieldRefs.H：其中定义气相求解器所需的参考变量；

creatClouds.H：为主程序中调用的头文件，其中定义喷雾求解器所需的各

种变量；

rhoEqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解质量方程；

YEqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解各组分方程；

UEqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解动量方程；

EEqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解能量方程；

pEqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解压力方程；

ZCqn. H: 为主程序中调用的头文件，求解组分及过程变量；

ignition: 包含点火程序文件；

Make : 包含编译所需的库文件、头文件路径及输出程序路径。

算例文件夹结构与 canteraToFoam 相同，但 table 文件夹内放入上一步中生成的一系列数据库文件。

4. 程序运行和后处理

与所有 OpenFOAM 算例一样，初始及计算文件设定好后，首先在 CASE 目录下运行命令 `decomposePar` 将计算区域进行分解，通过执行命令 `mpirun -np 36 sprayFGMFoam -parallel` 计算流体燃烧场，在程序运行过程中或结束时，通过运行 `reconstructPar` 命令将单个处理器的计算结果重建成整个计算区域内的结果。最后，使用专门的后处理软件对计算结果进行分析处理，如 `paraFoam` 或通过运行 `foamToTecplot360` 将计算结果转换成 `Tecplot` 格式进行计算结果的后处理。

附录

附录 A. case 文件夹组成

case 文件夹包含层流火焰数据库算例(laminarDatabase)、PDF 积分构建的湍流数据库算例 (canteraToFoamCase) 和 sprayFGMFoam 主程序算例 (sprayFGMFoamCase)。

附录 B. 层流火焰数据库的生成

- (1) 层流火焰数据库包含三个文件夹, PV0、PV0.5、PV1, 分别对应氧化剂温度为 T_{Min} 、 $(T_{Max}+T_{Min})/2$ 和 T_{Max} , 以 PV1 为例进行说明, 其他两组算例与之相同。PV1 内包含四个文件夹, 分别是 Matlab、plot、steady 和 unsteady, 后两者为 flameMaster 稳态混合分数空间稳态算例和熄火算例, 目前初始条件及边界条件已经设置好, 只需进入稳态/熄火文件夹后输入 FlameMan -i Steady.input 或 Unsteady.input 即可运行(需要安装并配置 flameMaster, 后面描述)。运行结束后在 Output 生成一系列以 tout 结尾的数据, 运行 LT(flameMaster 数据后处理程序)将文件转换为后缀为 .kg 的文件。
- (2) 将上述生成的 .kg 文件移动至 plot/steady/data 或 plot/unsteady/data 文件夹内(当前算例数据已准备好, 不需要再复制), 在相应文件夹下运行 python3 plotZ_Y-batch.py 命令。运行结束会生成 steady 或 unsteady 文件夹和 title.txt 文件。
- (3) 打开 matlab 脚本并允许, 根据第二步生成的 steady 和 unsteady 文件夹内的数据进行插值, 生成 Table.dat2 数据文件, 将第二步 title.txt 中的内容插入到该数据文件第一行(cat title.txt Table.dat2 > Table1.csv)。PV0 与 PV0.5 与之相同, 但最后输出的文件分别命名为 Table0.csv 和 Table0.5.csv。

附录 C. 湍流火焰数据库的生成

层流火焰数据库准备好后将 Table0.csv, Table0.5.csv, Table1.csv 放入 canteraToFoamCase/table 文件夹内, 配置好相关环境变量后输入 canteraToFoam-ED-1PDF 即可允许。

附录 D. 主程序计算

湍流火焰数据库准备好后(需要运行十小时左右, 与计算机性能有关)会在 constant 文件夹内生成一系列 *_table 文件, 将他们复制到 sprayFGMFoamCase/table 文件夹内, 输入 sprayFGMFoam-7 即可运行(但需注意串行计算时 constant/tableProperties 中 tablePath 值为 “./table/”, 并行时为 “../table/”)。

注意: 上述所有操作数据已准备好, 不需要对数据再进行操作

附录 E. flameMaster 的安装

依赖库 sundials 的安装

解压 flameMaster 安装包，在安装包内创建 ThirdParty/sundials 文件夹；
解压 sundials-5.0.0 安装包，复制到 ThirdParty/sundials；
在 ThirdParty/sundials 内创建 build, install 文件夹；
cd build
cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=flameMaster 路径/ThirdParty/sundials/install ../
make
make install
安装完成

flameMaster 程序的安装

进入 flameMaster 安装包，mkdir -p Build && cd Build
Export PATH_SUNDIALS_ROOT= flameMaster 路径/ThirdParty/sundials/install
cmake ../Repository -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release
cmake --build . --target install
安装完成。

附录 F. OpenFOAM 的安装

开源 gsl 库的安装

解压 gsl-2.1 安装包
./configure --prefix=安装路径
make
make install
安装完成(绝对标准的 gnu 软件安装过程)

OpenFoam 程序的安装

参考 [Installation/Linux/OpenFOAM-6/CentOS SL RHEL - OpenFOAMWiki](#) 安装过程，
但需注意 canteraToFoam-ED-1PDF 依赖 gsl 库，编译时将该程序 Make/options 中
头文件和库文件路径设置为 gsl 的安装路径