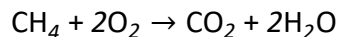


燃烧仿真.燃烧仿真软件：OpenFOAM：湍流燃烧仿真原理

1 燃烧仿真基础

1.1 燃烧化学反应基础

燃烧是一种化学反应过程，其中燃料与氧气反应生成热能和一系列化学产物。在燃烧仿真中，理解燃烧化学反应的基础至关重要。燃烧反应可以是简单的，如甲烷与氧气的反应：



也可以是复杂的，涉及多种燃料和产物的反应网络。在 OpenFOAM 中，可以使用 chemReactingFoam 求解器来模拟化学反应。下面是一个简单的示例，展示如何在 OpenFOAM 中定义化学反应：

```
# 在$FOAM_RUN/tutorials/combustion/chemReactingFoam/case1 中创建化学反应文件
$ cd $FOAM_RUN/tutorials/combustion/chemReactingFoam/case1
$ cp -r $FOAM_TUTORIALS/combustion/chemReactingFoam/case1/constant/chemistry
```

在 constant/chemistry 目录下，可以编辑 reactions 文件来定义化学反应：

```
# reactions 文件示例
type    reactions;
defaultReactionOrder 1;

reactions
(
    CH4 + 2O2 -> CO2 + 2H2O
);
```

1.2 燃烧热力学与动力学

燃烧过程不仅涉及化学反应，还涉及热力学和动力学。热力学描述了燃烧反应的能量转换，而动力学则关注反应速率。在 OpenFOAM 中，可以使用 thermophysicalProperties 文件来定义燃烧的热力学和动力学属性。

例如，定义一个简单的热力学模型：

```
# thermophysicalProperties 文件示例
thermoType
{
    type        hePsiThermo;
    mixture     mixture;
    transport   const;
    thermo      HConst;
    equationOfState perfectGas;
```

```

specie    specie;
energy    sensibleInternalEnergy;
}

mixture
{
  specie
  {
    nMoles    1;
    molWeight  16; // 甲烷的摩尔质量
  }

  // 定义燃料和氧化剂的热力学属性
  thermodynamics
  {
    fuel      CH4;
    oxidant   O2;
    products  CO2 H2O;
    Tstd      298.15;
    pstd      101325;
  }
}

```

1.3 湍流燃烧简介

湍流燃烧是在湍流环境中发生的燃烧过程，这种环境下的燃烧比层流燃烧更为复杂，因为湍流会加速燃料与氧化剂的混合，从而影响燃烧速率和火焰结构。在 OpenFOAM 中，模拟湍流燃烧通常使用 `turbulentReactingFoam` 求解器。

为了模拟湍流燃烧，需要定义湍流模型。OpenFOAM 提供了多种湍流模型，如 `k-epsilon` 模型和 `k-omega` 模型。下面是一个使用 `k-epsilon` 模型的湍流燃烧设置示例：

```

# turbulenceProperties 文件示例
simulationType laminar;

RAS
{
  RASModel    kEpsilon;
  turbulence   on;
  printCoeffs on;
}

// 定义湍流模型的初始条件和边界条件
boundaryField
{

```

```
inlet
{
    type      fixedValue;
    value     uniform (0.01 0.01 0.01); // k 的初始值
}

outlet
{
    type      zeroGradient;
}
}
```

在实际应用中，还需要定义燃料和氧化剂的初始浓度、温度和湍流强度。这些参数可以通过编辑 0 目录下的 `alpha`、`T` 和 `k` 文件来设置。

通过以上步骤，可以使用 OpenFOAM 进行基本的燃烧仿真，包括化学反应、热力学和动力学以及湍流燃烧的模拟。这为更深入地理解和分析燃烧过程提供了强大的工具。

2 燃烧仿真软件：OpenFOAM - 湍流燃烧仿真原理

2.1 OpenFOAM 软件概览

2.1.1 OpenFOAM 简介与安装

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) 是一个开源的 CFD (计算流体动力学) 软件包，由 OpenCFD 有限公司开发并维护，现由 SINTEF Digital 的 Foam Foundation 管理。OpenFOAM 提供了丰富的物理模型和数值方法，适用于各种流体动力学和传热问题，包括湍流燃烧仿真。

2.1.1.1 安装 OpenFOAM

安装 OpenFOAM 通常涉及以下步骤：

1. **下载源代码**：从官方网站下载最新版本的 OpenFOAM 源代码。
2. **配置环境**：设置必要的环境变量，如 `WMAKE_INCLUDE_DIR` 和 `WMAKE_LIB_DIR`。
3. **编译**：使用 `wmake` 工具编译源代码。
4. **验证安装**：运行一些内置的测试案例，确保安装正确。

2.1.2 OpenFOAM 基本操作

OpenFOAM 的基本操作包括案例设置、网格生成、求解器选择和后处理。以下是一个简单的案例设置流程：

1. **案例目录结构**：OpenFOAM 案例通常包含 0 目录 (初始条件)、

constant 目录（网格和物理属性）、system 目录（求解器设置）。

2. 网格生成：使用 blockMesh 或 snappyHexMesh 生成网格。

3. 求解器选择：根据问题类型选择合适的求解器，如 simpleFoam 用于稳态流体流动，rhoCentralFoam 用于非稳态燃烧问题。

4. 运行求解器：在案例目录下运行求解器，如./Allrun。

5. 后处理：使用 paraFoam 或 foamToVTK 将结果转换为可视化软件（如 ParaView）可读的格式。

2.1.3 OpenFOAM 湍流模型

OpenFOAM 提供了多种湍流模型，包括 RANS（雷诺平均纳维-斯托克斯方程）模型和 LES（大涡模拟）模型。RANS 模型中最常用的是 k- ϵ 模型和 k- ω 模型，而 LES 模型则适用于更复杂的湍流流动。

2.1.3.1 k- ϵ 模型示例

在 system/fvSolution 文件中，可以设置 k- ϵ 模型：

```
# system/fvSolution
solvers
{
  p
  {
    solver pBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance 1e-06;
    relTol 0;
  }
  U
  {
    solver smoothSolver;
    smoother GaussSeidel;
    nSweeps 2;
    tolerance 1e-05;
    relTol 0;
  }
  k
  {
    solver smoothSolver;
    smoother GaussSeidel;
    nSweeps 2;
    tolerance 1e-05;
    relTol 0;
  }
  epsilon
```

```

{
  solver      smoothSolver;
  smoother    GaussSeidel;
  nSweeps     2;
  tolerance   1e-05;
  relTol      0;
}
}

```

2.1.3.2 k- ω 模型示例

在 `system/fvSolution` 文件中，设置 k- ω 模型：

```

# system/fvSolution
solvers
{
  p
  {
    solver pBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance 1e-06;
    relTol 0;
  }
  U
  {
    solver      smoothSolver;
    smoother    GaussSeidel;
    nSweeps     2;
    tolerance   1e-05;
    relTol      0;
  }
  k
  {
    solver      smoothSolver;
    smoother    GaussSeidel;
    nSweeps     2;
    tolerance   1e-05;
    relTol      0;
  }
  omega
  {
    solver      smoothSolver;
    smoother    GaussSeidel;
    nSweeps     2;
    tolerance   1e-05;
  }
}

```

```
relTol    0;
}
}
```

2.2 湍流燃烧仿真原理

湍流燃烧仿真涉及到流体动力学、化学反应动力学和传热学的综合应用。在 OpenFOAM 中，湍流燃烧通常使用 RANS 或 LES 模型结合化学反应模型来模拟。

2.2.1 RANS 模型与化学反应

RANS 模型通过平均纳维-斯托克斯方程来描述湍流流动，而化学反应则通过一组反应速率方程来模拟。在 OpenFOAM 中，可以使用 rhoTurbFoam 求解器结合 chemReactFoam 来模拟湍流燃烧。

2.2.1.1 示例：使用 rhoTurbFoam 和 chemReactFoam

在 system/controlDict 文件中，设置求解器为 rhoTurbFoam:

```
# system/controlDict
application  rhoTurbFoam;

startFrom    startTime;

startTime    0;

stopAt       endTime;

endTime      100;

deltaT       0.01;

writeControl timeStep;

writeInterval 10;

purgeWrite   0;

writeFormat  ascii;

writePrecision 6;

writeCompression off;
```

```
timeFormat general;
```

```
timePrecision 6;
```

```
runTimeModifiable true;
```

然后，在 `system/reactingProperties` 文件中，定义化学反应模型：

```
# system/reactingProperties
```

```
thermodynamics
```

```
{
```

```
thermoType
```

```
{
```

```
type reactingIncompressible;
```

```
mixture mixture;
```

```
transport laminar;
```

```
equationOfState perfectGas;
```

```
energy sensibleInternalEnergy;
```

```
turbulence RAS;
```

```
}
```

```
mixture
```

```
{
```

```
type multiComponentMixture;
```

```
species (O2 N2 H2O CO2 CH4);
```

```
equationOfState
```

```
{
```

```
type perfectGas;
```

```
}
```

```
transport
```

```
{
```

```
type laminar;
```

```
}
```

```
thermodynamics
```

```
{
```

```
type hePsiThermo;
```

```
mixture species;
```

```
thermoData
```

```
{
```

```
(O2 N2 H2O CO2 CH4)
```

```
{
```

```
(specie)
```

```
{
```

```
molWeight 32;
```

```
CpCoeffs (3.9165 0.0012041 0.0000013811 -0.000000000011367);
```

```
Hf -300000;
```

```
}
```

```
}
```

```
...
}
}
}
equationOfStateCoeffs
{
  R      287.14;
}
}
}
```

2.2.2 LES 模型与化学反应

LES 模型通过直接求解大尺度涡流，而小尺度涡流则通过亚网格模型来模拟。在 OpenFOAM 中，可以使用 rhoCentralFoam 求解器结合化学反应模型来模拟湍流燃烧。

2.2.2.1 示例：使用 rhoCentralFoam

在 system/controlDict 文件中，设置求解器为 rhoCentralFoam:

```
# system/controlDict
application  rhoCentralFoam;

startFrom    startTime;

startTime    0;

stopAt       endTime;

endTime      100;

deltaT       0.01;

writeControl  timeStep;

writeInterval 10;

purgeWrite   0;

writeFormat  ascii;

writePrecision 6;

writeCompression off;
```



```
timeFormat    general;

timePrecision 6;

runTimeModifiable true;
```

在 `system/fvSolution` 文件中，设置 LES 湍流模型：

```
# system/fvSolution
LESModel      dynamicKEpsilon;

turbulence    on;

alpha         0.9;

delta         (cDelta*sqrt((2.0/3.0)*k) + deltaMin);

cDelta        0.0707;

deltaMin      0.001;
```

2.3 结论

OpenFOAM 是一个强大的工具，用于模拟包括湍流燃烧在内的复杂流体动力学问题。通过选择合适的湍流模型和化学反应模型，可以精确地模拟燃烧过程中的流体流动和化学反应。上述示例展示了如何在 OpenFOAM 中设置 $k-\varepsilon$ 模型、 $k-\omega$ 模型以及 LES 模型，为湍流燃烧仿真提供了基础。

3 湍流燃烧模型选择

在燃烧仿真中，选择合适的湍流燃烧模型至关重要，它直接影响到仿真结果的准确性和计算效率。OpenFOAM 提供了多种模型，包括：

- **层流模型**：适用于低湍流强度的燃烧过程。
- **湍流模型**：如 $k-\varepsilon$ 模型、 $k-\omega$ 模型、雷诺应力模型（RSM）等，用于描述高湍流强度下的流体动力学行为。
- **湍流燃烧模型**：如 EDC（Eddy Dissipation Concept）、PDF（Probability Density Function）、LES（Large Eddy Simulation）等，专门用于湍流燃烧的仿真。

3.1 示例：使用 $k-\varepsilon$ 模型进行湍流燃烧仿真

在 OpenFOAM 中，可以通过编辑 `constant/turbulenceProperties` 文件来选择 $k-\varepsilon$ 模型。以下是一个示例配置：

```
simulationType RAS;
RAS
{
  RASModel kEpsilon;
  turbulence on;
  printCoeffs on;
}
```

4 湍流与化学反应的耦合

湍流与化学反应的耦合是湍流燃烧仿真的核心。在 OpenFOAM 中，这通常通过以下几种方式实现：

- **混合分数法**：使用混合分数来描述湍流与化学反应的耦合，适用于预混燃烧。
- **PDF 法**：通过概率密度函数来描述非预混燃烧中燃料与氧化剂的混合状态。
- **EDC 法**：基于湍流耗散率的概念，适用于非预混和部分预混燃烧。

4.1 示例：使用混合分数法进行预混燃烧仿真

在 OpenFOAM 中，预混燃烧可以通过 `constant/thermophysicalProperties` 文件中的 `transportModel` 和 `thermodynamicsModel` 来配置。以下是一个使用混合分数法的示例：

```
transportModel laminar;
thermodynamicsModel
{
  thermoType
  {
    type hePsiThermo;
    mixture mixture;
    transport const;
    thermo hConst;
    equationOfState perfectGas;
    specie specie;
    energy sensibleInternalEnergy;
  }
  mixture
  {
    type reactingMixture;
    transportModel const;
    thermoModel hConst;
    equationOfState perfectGas;
    specieModel specie;
    reactionModel finiteRate;
  }
}
```

```
mixture    speciesTable;
}
}
```

5 湍流燃烧数值方法

数值方法是实现湍流燃烧仿真的关键。OpenFOAM 支持多种数值方法，包括：

- **有限体积法**：基于控制体积理论，适用于复杂几何和多物理场问题。
- **时间积分方法**：如隐式和显式方法，用于解决时间依赖性问题。
- **空间离散化方法**：如中心差分、上风差分等，用于处理对流项。

5.1 示例：使用有限体积法进行湍流燃烧仿真

在 OpenFOAM 中，有限体积法是默认的数值方法。通过编辑 `system/fvSchemes` 文件，可以配置数值离散化方案。以下是一个示例配置：

```
ddtSchemes
{
    default    steadyState;
}

gradSchemes
{
    default    Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default    none;
    div(phi,U)    Gauss linear;
    div(phi,k)    Gauss linear;
    div(phi,epsilon) Gauss linear;
    div(phi,R)    Gauss linear;
    div(R)        none;
    div(phi,nuTilda) Gauss linear;
}

laplacianSchemes
{
    default    Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
```

```

{
  default    linear;
}

snGradSchemes
{
  default    corrected;
}

fluxRequired
{
  default    no;
  p          ;
}

```

在 `system/fvSchemes` 文件中，`divSchemes` 部分配置了对流项的离散化方案，`laplacianSchemes` 部分配置了扩散项的离散化方案。这些设置对于湍流燃烧仿真的准确性至关重要。

以上内容详细介绍了在 OpenFOAM 中进行湍流燃烧仿真时，如何选择模型、实现湍流与化学反应的耦合，以及配置数值方法。通过这些示例，用户可以更好地理解如何在 OpenFOAM 中设置和运行湍流燃烧仿真。

6 OpenFOAM 湍流燃烧仿真设置

6.1 仿真案例选择与准备

在进行 OpenFOAM 湍流燃烧仿真前，选择一个合适的案例至关重要。案例的选择应基于仿真目标，例如，研究燃烧效率、污染物生成或火焰传播速度。准备阶段包括收集必要的物理参数，如燃料和氧化剂的化学性质、燃烧反应机理、操作条件（温度、压力）等。

6.1.1 选择案例

假设我们选择一个典型的柴油喷射燃烧案例，目标是分析不同喷射压力下燃烧效率的变化。此案例涉及柴油喷雾的形成、蒸发和燃烧过程，需要一个详细的化学反应机理，如 `Diesel.nrg`。

6.1.2 准备物理参数

- **燃料化学性质：**柴油的化学式、分子量、热容等。
- **燃烧反应机理：**使用 [`Diesel.nrg`] 文件，包含柴油燃烧的化学反应路径。
- **操作条件：**环境温度、压力，喷射压力等。

6.2 网格生成与优化

网格的质量直接影响仿真的准确性和计算效率。OpenFOAM 使用六面体网格，可以通过 `blockMesh` 工具生成。网格优化包括调整网格密度、确保网格质量（如正交性、扭曲度）和边界层的设置。

6.2.1 生成网格

在案例目录中，编辑 `constant/polyMesh/blockMeshDict` 文件，定义网格的几何形状和单元划分。以下是一个简单的 `blockMeshDict` 示例：

```
/*-----*- C++ -*/\n|====| | |\n|\\ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox | |\n|\\ / Operation | Version: 4.x | |\n|\\ / And | Web: www.OpenFOAM.org | |\n| \\\\ Manipulation | | |\n\\*-----*/\nFoamFile\n{\n  version 2.0;\n  format ascii;\n  class dictionary;\n  object blockMeshDict;\n}\n// *****\n\nconvertToMeters 1;\n\nvertices\n(\n  (0 0 0)\n  (0.1 0 0)\n  (0.1 0.1 0)\n  (0 0.1 0)\n  (0 0 0.01)\n  (0.1 0 0.01)\n  (0.1 0.1 0.01)\n  (0 0.1 0.01)\n);\n\nblocks\n(\n  hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (10 10 1) simpleGrading (1 1 1)
```

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/658064051071006133>