

273564

传热传质和

流体流动、

燃烧过程的计算机模拟

国家自然科学基金资助课题

范维澄 主编

安徽科学技术出版社

流体流动、传热传质 和燃烧过程的计算机模拟

国家自然科学基金资助课题

范维澄 主编

霍 然 廖光煊 万跃鹏

安徽科学技术出版社

责任编辑：田 斌
封面设计：贺国健

**流体流动、传热传质
和燃烧过程的计算机模拟**

范维澄 主编

安徽科学技术出版社出版

(合肥市九州大厦八楼)

安徽新华印刷厂印刷

*

开本：850×1168 1/32 印张：9.875 字数：245,000

1990年8月第1版 1990年8月第1次印刷

印数：1,500

ISBN 7—5337—0357—X/0·12 定价：4.90元

内容简介

对流动、传热传质和燃烧过程进行计算机模拟是科学研究、工程设计和教学手段发展的必然趋势。本书阐述对上述过程进行计算机模拟的基础理论,介绍大型通用程序(凤凰程序)的结构、功能、使用方法及其实际应用,强调理论与实际密切结合。叙述力求简明扼要、重点突出。

本书可供在工程热物理、能源、航天、航空、化工、冶金、核电、兵工、环保、灾害防救等部门从事流体流动、传热传质和燃烧过程的研究、装置设计和教学工作的科技人员以及大学教师和研究生阅读参考。

前 言

这是一本阐述对流动、传热和燃烧过程进行计算机模拟的理论基础、典型程序及其应用的专著，书中介绍的计算机模拟的理论、方法和程序既分别适用于流动、传热传质和燃烧过程，又适用于三种现象共存的复杂过程。

流动、传热传质和燃烧过程广泛存在于自然界和人们制造的各种装备设施之中。人们需要研究和认识这些过程遵循的规律，以达到有效地适应和利用自然规律，设计制造出更好装置的目的。在这里，研究和设计的途径十分重要，它不但关系到研究的广泛性和有效性，而且直接关系到研究工作的成败。全尺寸试验、模拟实验和计算机模拟是三种研究途径。全尺寸试验是对研究成果的检验，但它不应当是研究的主要手段，因为它通常消耗大量人力、物力和时间，并且多种因素共存和相互影响，使人们难以洞察问题的关键。模拟实验是实际现象中关键过程的合理再现和深化，是研究机理和规律的主要手段，是检验和发展计算机模拟的基础，它无疑是重要的。然而从研究的物理和几何参数可变的范围与方便程度以及研究周期来看，它不如计算机模拟。

流动、传热传质和燃烧过程的计算机模拟是世界上近二十年发展起来的一门应用学科，它以计算机为桥梁，把基本理论、模拟实验和装置设计三者有机地结合起来，开辟了用理论直接指导实验和设计工作的途径，这不但有助于对客观规律认识的深化，而且使设计及其最佳化在更大程度上依赖于合理的计算，从而减

少实验工作的盲目性和工作量，其意义是不言而喻的。美国的航空航天局(NASA)1983年在一篇由权威性专家组编制的大型研究报告中预言：在航空航天装置的研制过程中，15年内计算机模拟将成为与模拟实验同样可靠，而且是更为有效的研究手段。我认为，这种预言同样适用于绝大多数其他的流动和热能动力装置的研制。

流动、传热传质和燃烧过程的计算机模拟的研究范围包括：基本方程(连续方程、动量方程、能量方程和组分方程)、理论模型(湍流输运和燃烧、辐射换热、多相问题等)、数值方法(研究体系和控制方程的离散化、求解方法)、计算程序及其在科研、设计和教学中的应用。其中前三部分常常是流体力学、计算传热学和计算燃烧学的主要内容，人们对此相当重视和有兴趣，然而却往往忽视计算程序的重要和低估编制程序的困难。

为了对一个流体流动、传热传质和燃烧过程进行计算机模拟，需具备以下条件：基本方程及其离散化形式、理论模型、有关的介质或燃料的物理化学性质、体系的几何参数和边界条件、求解方法、计算程序和计算机。其中，体系的几何和边界条件是给定的，计算机本身的性能提高很快，除计算程序之外的其他条件也已基本具备并在不断的改进之中，剩下的计算程序是最困难而又十分重要的一个条件。其困难的原因是：求解的方程复杂，难以确保收敛；易出差错，易损坏，需要持续不断地维护；难以广泛传播和相互借鉴。

计算程序是基本方程、理论模型、物性、几何和边界条件、数值方法等诸因素的综合体现，是实施计算机模拟的手段。为克服发展计算程序的困难，根据基本定律的普适性和控制方程在形式上的一致性，国际上80年代初出现了指导程序编制的“单一程序政策”，并在80年代中期诞生了大型通用程序PHOENICS (Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code

Series),它是在一系列专用程序和类型程序(如二维抛物型程序、三维椭圆型程序等)的基础上发展起来的,是著名的斯波尔汀(Spalding)学派近二十年研究成果和经验的集中体现,它能对一维、二维或三维,定常或非定常,可压或不可压,理想或粘性,层流或湍流,均相或多相(主要是两相)的流动、传热传质和燃烧过程进行计算机模拟。该程序已在北美、西欧、日本和澳大利亚的研究、设计和教学部门中广泛应用,显示了强大的生命力。

中国科技大学与中国科学院工程热物理所一起在吸收和分析PHOENICS程序的基础上,经过消化、改进和提高,成功地建立了我国的大型通用程序——凤凰程序,在科学研究和教学工作中发挥了重要作用,达到了国际同类程序的先进水平。凤凰程序的特点是:总体经济性好、灵活性强、不易损坏、发展潜力大、计算和绘图系统合一。凤凰程序的出现可以使各学科分支的科学家从繁琐的数值计算和程序编制中解脱出来、集中于本学科理论体系的研究;可以使工程师们摆脱计算数学和理论模型的困扰,方便地对自己感兴趣装置的内部或外部过程进行计算机模拟;还可以使从事技术科学的教师们增添一种比演示实验更详尽、更经济的教学手段。配套的绘图程序能适应现代科学研究数据量大、时间和空间分辨率高的要求,使数据处理计算机化,准确、迅速、直观和富有趣味。凤凰程序的广泛传播和应用必将促进科研、设计和教学工作与先进计算机技术的结合,推动科研、设计和教学的发展。

本书第一章系统地介绍对流动、传热和燃烧过程进行计算机模拟的理论基础;第二、三、四章以凤凰程序为例,详细介绍大型通用程序的结构、功能和使用方法;第五章介绍凤凰程序的若干应用;第六章介绍通用绘图程序;附录一至附录五可使读者更方便地理解和使用凤凰程序。

英国斯波尔汀教授(英国皇家学会会员,中国科技大学名誉

教授)和马世琦教授对本书素材的积累提供了方便;国家自然科学基金会、中国科技大学给予了经费和对外合作等方面的大力支持;我的学生和同事廖干力为在中国科技大学建立凤凰程序发挥了很重要的作用,周全、万跃鹏、张辉、郑丽丽、李康等也作出了自己的贡献,他们出色的研究成果为本书提供了宝贵的素材,在此一并表示衷心的感谢。

本书由范维澄担任主编,负责拟定编著大纲,综合和审定书稿,霍然和万跃鹏编写第一、二、三、四章;廖光焯等编写第五、六章。

由于我们水平有限,错漏在所难免,敬请读者批评指正。

范维澄

1988年3月

目 录

第一章 数学物理基础	1
1.1 引言	1
1.2 控制微分方程	1
1.3 理论模型	7
1.4 数值方法	24
参考文献	32
第二章 通用计算程序(凤凰程序)介绍	35
2.1 概述	35
2.2 凤凰程序的运行方式	38
2.3 凤凰程序的使用	49
2.4 小结	74
参考文献	74
第三章 凤凰程序的主要用户文件概述	77
3.1 引言	77
3.2 Q1文件及其相应的输出	78
3.3 HELP文件	84
3.4 SATELLITE文件的FORTRAN子程序: MAIN、 SAT 和SATLIT	87
3.5 EARTH文件MAIN、GROSTA和GROUND	90
3.6 FORTRAN文件GREX1	92
3.7 有关FORTRAN公共块文件	102
3.8 小结	109
第四章 使用凤凰程序的一般建议	110

4.1	基本思想	110
4.2	使用起步	114
4.3	网格大小与时间步	117
4.4	求解方法的选择	120
4.5	扫描与迭代终止判断准则的选择	123
4.6	加速收敛	126
4.7	一些常见错误及其避免方法	131
4.8	小结	135
第五章	凤凰程序应用举例	136
5.1	引言	136
5.2	湍流双流体模型的应用	136
5.3	在航天飞机研究上的应用	141
5.4	建筑物内火灾烟气运动的数值模拟	149
	参考文献	154
第六章	通用绘图程序的使用	156
6.1	引言	156
6.2	绘图程序简介	157
6.3	运行绘图程序的准备	163
6.4	如何画图	165
6.5	绘图程序应用举例	178
	参考文献	183
附录1	Q1文件及其相应的输出	185
附录2	标准形式的GROUND文件	208
附录3	示范 GROUND文件——GREX1	231
附录4	FORTRAN公共块文件	280
附录5	自编的凤凰程序文件举例	
	——室内火灾发展过程	287

第一章 数学物理基础

1.1 引言

在工程设备、自然环境和生物机体中，大量存在流体流动、传热传质、化学反应及其它过程。为了对这些过程进行计算机模拟，首先要把控制流体流动、传热传质和其它过程的规律表达成数学形式，一般表达成微分方程的形式。

许多教科书已对控制微分方程作了详细完整的推导，本书不再对此过多复述，只是为了内容的连续和使用的方便，将有关内容在本章中以详细提纲形式予以阐述。有兴趣的读者可以阅读文献中推荐的材料，例如文献32和33中的若干章节与数值计算密切相关，对于进一步学习计算机模拟很有帮助。

另外，在本章中还根据后面所介绍的计算机程序的特点，对某些内容作了必要的补充。

1.2 控制微分方程

1.2.1 控制方程的理论基础

- (1)守恒和平衡定律：质量、动量、能量及各种化学组分；
- (2)输运定律：粘性、导热及扩散；
- (3)源律：化学反应速率、体积力、辐射换热等；
- (4)热力学性质：比热随体系状态的变化等；

(5) 状态方程。

守恒和平衡定律是普遍适用的，其它公式有一定的局限性和选择性，选择的原则是可靠，并兼顾准确性和经济性。

1.2.2 控制微分方程组

1. 连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0$$

2. 动量方程(以*i*方向为例)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial P}{\partial x_i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \\ &+ \rho g_i - F_i \end{aligned}$$

3. 能量方程

$$\begin{aligned} &\frac{\partial(\rho \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \tilde{h}) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_h \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sum_i (\Gamma_i \right. \\ &\quad \left. - \Gamma_h) h_i \frac{\partial m_i}{\partial x_j} + (\mu - \Gamma_h) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_i u_i}{2} \right) \right] + S_R \end{aligned}$$

4. 组分方程

$$\frac{\partial(\rho m_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j m_l)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_l \frac{\partial m_l}{\partial x_j} \right) + R_l$$

$$l=1, 2, \dots, n.$$

在上述方程中， \tilde{h} 表示总焓， m_l 表示第*l*种组分的质量分数， F_i 表示内部阻力， S_R 表示辐射换热， R_l 表示第*l*种组分的生成速

率, μ 表示粘性, Γ_l 表示组分 l 的交换系数, Γ_h 表示总焓交换系数, 其定义式为:

$$\Gamma_l \equiv \rho D_l, \quad \Gamma_h \equiv \lambda/c$$

实际计算时常取:

$$\Gamma_l = \frac{\mu}{S_c}, \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{P_r}$$

式中, S_c 和 P_r 分别为施密特数和普朗特数。

1.2.3 控制方程组的特点

1. 封闭性

一个多组分热力学体系的独立变量数为 $n - P + 2$, 单相多组分流动体系的独立变量数为 $n + 4$, 这恰好等于控制方程的数目, 即: 一个连续方程、三个动量方程、一个能量方程和 $(n - 1)$ 个独立的组分方程。该数学问题是封闭的。

2. 形式上的一致性

控制方程组可以写成以下的统一形式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\vec{u}\phi) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad}\phi) + S_\phi$$

时间导数项 对流项 扩散项 源项

式中, ϕ 表示待求的未知量, Γ_ϕ 为相应于 ϕ 的交换系数, S_ϕ 是相应的源项。把方程写成统一形式带有人为的性质, 但这有利于在构造方程时集中精力于源项及在求解方程时使用通用的计算方法和编制通用程序。

3. 耦合性

各方程不互相独立。

4. 非线性

存在因变量或其导数的非一次项, 主要表现在对流项和组分方程的源项, 这是反应流数学问题与固体力学的根本区别。

上述特点意味着：方程组可解；一般情况下无法用解析法求解，必须用数值法求解；不能一次求解，需要迭代求解；可以编制通用计算程序（即可以计算流动、传热传质和燃烧）。

1.2.4 若干简化处理

1. 元素质量分数方程

设含有元素 a 的各组分的交换系数均为 Γ_a ，则由组分方程可推出：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_a) + \text{div}(\rho \vec{u} m_a - \Gamma_a \text{grad} m_a) = 0$$

式中， $m_a = \sum_l m_{a,l} \cdot m_l$ ， $m_{a,l}$ 表示元素 a 在组分 l 中的质量分数。

该方程回避了化学反应源项，在一定条件下可简化方程组的求解。

2. 简单化学反应系统(SCRS)

要点：化学反应可用单步不可逆反应来表征，即：

1公斤燃料 + s 公斤氧化剂 = $(1+s)$ 公斤产物

各组分的交换系数彼此相等，并等于总焓交换系数，各组分的比热彼此相等，且与温度无关。因此，在SCRS中有

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(m_{fu} - \frac{m_{ox}}{s} \right) \right] + \text{div} \left[\rho \vec{u} \left(m_{fu} - \frac{m_{ox}}{s} \right) - \Gamma_l \text{grad} \left(m_{fu} - \frac{m_{ox}}{s} \right) \right] = 0$$

效益：在有限化学反应速率系统中，可用该方程取代一个有源方程；在快速反应系统中，求解了该方程便可确定 m_{fu} 和 m_{ox} 。

评价：可用于工程上分析燃烧的热效应；无法分析化学反应详细机理和燃烧非稳定性的影响。

3. 混合物分数

$$f \equiv \frac{(m_{fu} - m_{ox}/s) - (m_{fu} - m_{ox}/s)_A}{(m_{fu} - m_{ox}/s)_B - (m_{fu} - m_{ox}/s)_A}$$

式中A和B表示两个参考状态。在简单化学反应系统中， f 与 $(m_{fu} - m_{ox}/s)$ 具有同等效益，不同点是 f 是归一化的。

4. 总焓方程的简化

在简单化学反应系统中，若辐射换热和由 $\partial P/\partial t$ 代表的功可以忽略不计，则总焓方程 \tilde{h} 满足同样形式的无源方程。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{h}) + \text{div}(\rho\vec{u}\tilde{h} - \Gamma_h \text{grad}\tilde{h}) = 0$$

5. 线性关系

设守恒量 ϕ_1 和 ϕ_2 满足无源守恒型方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\vec{u}\phi - \Gamma_\phi \text{grad}\phi) = 0$$

并且它们在进入体系的A流和B流中的值已知，在所有其它需要边界条件的边界上，它们的梯度值为零，若 ϕ_1 和 ϕ_2 的交换系数相等，则 ϕ_3 必然满足同样的方程。这里

$$\phi_3 \equiv \frac{\phi_1 - \phi_{1A}}{\phi_{1B} - \phi_{1A}} = \frac{\phi_2 - \phi_{2A}}{\phi_{2B} - \phi_{2A}}$$

而且

$$\phi_{3A} = \phi_{3B} = 0$$

在其它边界， $\frac{\partial\phi_3}{\partial n} = 0$ 。 n 为该边界的法线。

因此对于稳态问题， ϕ_3 在体系内部必然处处为零；对于非稳态问题，若 ϕ_3 初值为零，则在体系内部 ϕ_3 处处保持零值。这表明下式处处成立

$$\frac{\phi_1 - \phi_{1A}}{\phi_{1B} - \phi_{1A}} = \frac{\phi_2 - \phi_{2A}}{\phi_{2B} - \phi_{2A}}$$

这就是在一定条件下成立的守恒量之间的线性关系。它使我

们在通过解微分方程得到一个量(如 ϕ_2)的分布之后, 只要用另一个量(ϕ_1)的边界值(ϕ_{1A} 和 ϕ_{1B})便可求出该量在体系内部的分布。

图1.1表示一个满足上述条件的快速简单化学反应系统, 其中, 各种组分和温度的分布如图1.2所示。图1.2中, m_{fu} 、 m_{ox} 、 m_d 和 m_p 分别表示燃料、氧气、稀释剂和燃烧产物的质量分数, 下标s表示化学当量比状态。

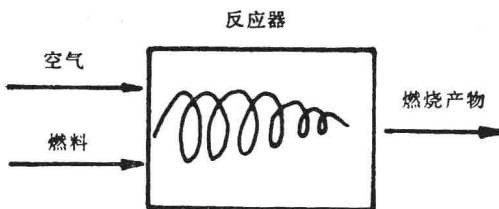


图1.1 快速简单化学反应系统示意图

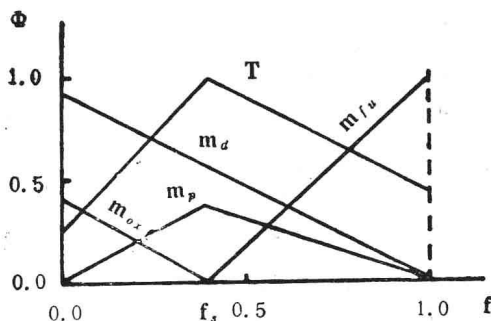


图1.2 简单反应系统中组分与温度分布

1.2.5 小结

封闭的控制方程组加上适当的定解条件构成定解问题, 原则上是可以求解的, 工程上感兴趣的几乎全部是湍流过程, 湍流输运、湍流和化学反应的相互作用及火焰辐射的存在极大地增加了问题的复杂性; 近二十年来, 这三个方面的研究成果构成了工程

热物理过程计算机模拟的理论支柱。

1.3 理论模型

1.3.1 要点

(1)控制方程组可以描述湍流过程,于是因变量代表该量的瞬时值;

(2)在实际系统中直接求解以湍流瞬时值为因变量的方程组面临巨大困难,目前仅在边界条件简单、低雷诺数湍流系统中进行研究,直接求解工程湍流问题所需要的计算机储存量和机时无法满足,给出瞬变的边界条件和初值也相当困难;

(3)工程上感兴趣的主要是平均量;

(4)鉴于脉动量的分布函数是未知的,对控制方程的平均(雷诺平均或质量平均)导致了方程组的不封闭。不封闭性来源于对非线性项的分解和平均;

(5)不可能用严格的数学演绎克服不封闭性,需要用近似的但封闭的方程组取代严格的但不封闭的方程组,这就是“模化”。模化的不同方式就构成了各种“模型”;

(6)模型是多种多样的。评价的原则是它的可靠性、经济性、通用性和灵活性;

(7)提出模型的基础是已有的理论和实验,检验模型的方法是把基于该模型的数值解与相应的实验数据进行分析比较。

1.3.2 湍流流动模型

它的任务是模拟湍流输运通量($-\overline{\rho u'_{i}u'_{j}}$ 或 $-\overline{\rho u'_{i}\phi'_{j}}$);湍流输运通量产生于对非线性的对流项的分解和平均,它体现了湍流涡团对平均量的输运作用,是扩散项的主要组成部分;研究较多的