# FlameMaster(Windows)使用教程

## 软件简介

F1ameMaster软件包是一款优秀的数值燃烧模拟建模的综合软件，它也能够支持多种配置，包括像Chemkin一样使用复杂的化学反应动力学机制。它是由德国亚深工业大学的Pitsch教授在斯坦福大学任教时组建的工作团队编写的程序。

## 软件安装

在<https://www.itv.rwth-aachen.de/en/downloads/flamemaster/>上申请获得安装包。

注意在Windows上FlameMaster要安装在C:\FlameMaster下。

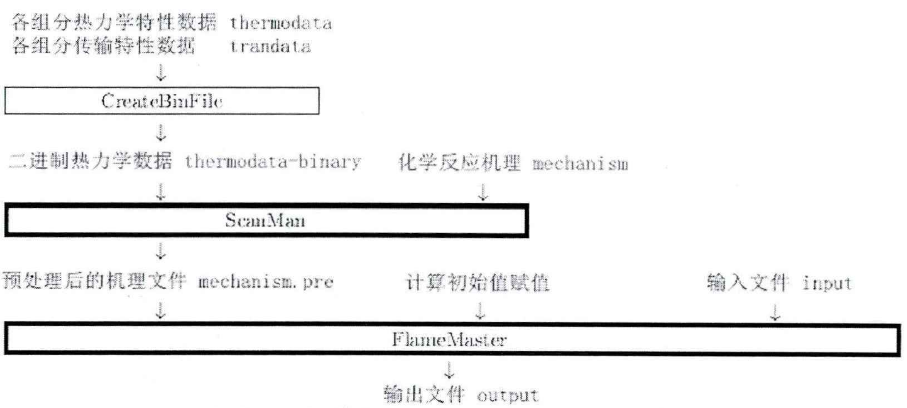
## 使用教程

### 3.1 简介

FlameMaster它分为两个主要部分:ScanMan子程序和FlameMan子程序。因为FlameMan软件包无法读取Chemkin的热力学数据库格式，因此需要由ScanMan子程序对化学动力学机理进行预处理，并且完成热力学数据与化学动力学机理的联接，除此以外，它还可以执行一些连续性检查。而FlameMan子程序的主要功能为对于选定的化学动力学机理选定守恒方程，然后用合适的求解算法进行求解。

除了上述两个主要部分，FlameMaster软件包还提供了子程序CreateBinFile子程序，CreateBinFile子程序用来把各化学组分的热力学特性数据和传输特性数据结合成可被程序识别的二进制代码。

FlameMaster的处理流程如下图：



在C:\FlameMaster\Run\ScanMan\目录下有H2、CH4、C3H8、nHeptane等燃料的教程案例。

### ScanMan

需要建立两个.bat处理文件。

第一个可以自定义命名，只要后缀为.bat，其内容为:

@ECHO off

@CD "%*~dp0*"

@CALL C:\FlameMaster\Bin\bin\Source.BAT 1

@ECHO.

@ECHO Processing species properties for the 'nHeptane\_ok' mechanism

@ECHO.

@CD "%*~dp0*\jili68"

"%FM\_BIN%\CreateBinFile.exe" -i nHeptane.allstarnew\_oks.therm -m nHeptane.allstarnew\_oks.trans -o nHeptane\_ok.bin

@MOVE nHeptane\_ok.bin "%FM\_DATA%\nHeptane\_ok.bin"

@CD "%*~dp0*"

SET d=%FM\_DATA%

setlocal enabledelayedexpansion

for %%d IN ("%FM\_DATA%\nHeptane\_ok.bin") do (

  set "d=%%d"

  set "d=!d:\=\\!"

)

@CALL RunScanMan.bat jili68\nHeptane.allstarnew\_oks.mech -t "!d!"

pause

第二行为定位到当前目录；

第三行为打开FlameMaster源程序；

第五到七行为DOS界面输出字符；

第八行为定位到机理文件目录下，jili68为文件名，实际使用时可自定义修改，文件内应有FlameMaster格式的mech机理文件、therm热力学参数文件、trans输运文件；

第九行为用CreateBinFile创建二进制热力学数据.bin文件，-i + therm文件名 –m + trans文件名 –o + 自定义bin文件名；

第十行为将将生成的bin文件移动到C:\FlameMaster\Data 目录下；

第十一行将工作目录定位到当前目录；

第十四行%FM\_DATA%\ 后面应填刚刚生成的bin文件名；

倒数第三行调用RunScanMan.bat 生成pre预处理文件。

另一个名为RunScanMan.bat，内容为

*:: Do NOT modify this file because it is used by CreateAllMechanisms.bat*

*:: If you want to use commands from this script it is recommend to use a*

*:: copy of this script*

*:: This is a script to process a single mechanism*

*:: and move the resulting \*.pre file to the FM\_DATA path*

*:: usage RunScanMan.bat yourMechanism.mech -someOptions*

*:: @ECHO %1*

*:: @ECHO %2*

@ECHO off

@SET mechfile=%*1*

@FOR /f "tokens=1,\* delims= " %%a IN ("%*\**") DO (

*:: @ECHO b: %%b*

    SET options=%%b

)

setlocal enabledelayedexpansion

for %%A IN ("%options%") do (

  set "o=%%~A"

  set "o=!o:""="!"

)

*:: @ECHO options: %options%*

*:: @ECHO options: %o%*

@FOR %%A in ("%mechfile%") DO (

    @SET Folder=%%~dpA

    @SET Name=%%~nA

    @SET FullName=%%~nxA

    @SET Suffix=%%~xA

)

*:: @ECHO.Folder is: %Folder%*

*:: @ECHO.Name is: %Name%*

*:: @ECHO.Suffix is: %Suffix%*

@ECHO Running ScanMan with mechanism "%Name%" in "%Folder%"

IF "%mechfile%"=="" (

    @ECHO usage: "%*~df0*" "<inputfile>.mech" "<options>"

    @ECHO        moves outputfile to "%FM\_DATA%"

    EXIT 1

)

@SET TMP\_OPTS=%o:"=%

@SET TMP\_OPTS=%TMP\_OPTS: =%

@SET TMP\_OPTS=%TMP\_OPTS:'=%

@SET TMP\_OPTS=%TMP\_OPTS:(=%

@SET TMP\_OPTS=%TMP\_OPTS:)=%

@SET TMP\_OPTS=%TMP\_OPTS::=%

IF "%TMP\_OPTS%"=="" (

    @ECHO without additional options

    > "%Folder%\%Name%.log" 2>&1 "%FM\_BIN%\ScanMan.exe" -i "%mechfile%" -o "%Name%.pre" -3rs

) ELSE (

    @ECHO using additional options

    @SET MY\_CMD=CALLING: "%FM\_BIN%\ScanMan.exe" -i "%mechfile%" -o "%Name%.pre" -3rs %o%

    > "%Folder%\%Name%.log" 2>&1 "%FM\_BIN%\ScanMan.exe" -i "%mechfile%" -o "%Name%.pre" -3rs %o%

)

@ECHO copy "%Name%.pre" "%FM\_DATA%\%Name%.pre"

@COPY "%Name%.pre" "%FM\_DATA%\%Name%.pre"

@CD "%*~dp0*"

此bat文件用于被调用生成pre文件，为下一步计算做准备。

### FlameMan

FlameMan的计算需要三个文件：pre预处理文件、计算初始值文件、input文件。

Pre预处理文件由ScanMan生成，包含反应机理、物料热力学参数等数据；计算初始值文件用于初始化赋值，由FlameMan计算瞬态对冲火焰生成；input文件为计算相关设置。

计算初始文件来源于FlameMan的瞬态计算，FlameMan瞬态计算需要CA0.in、.input、.bat三个文件。CA0.in为瞬态条件设置：

RPM = -1

VarsIn = 6

Time(s) Pressure(Pa)    TOx(K)  TFuel(K)    Sci(1/s)    ZR

0   1.00E+05    1300    373 1   1

0.001   1.00E+05    1300    373 1   1

0.002   1.00E+05    330 373 1   1

0.003   1.00E+05    330 373 1   1

其中Time为瞬态时间，TOx和TFuel为氧气端和燃料端温度，Sci为耗散率，ZR为燃料端质量分数。

先给定高温或者高压点燃，然后将温度或压力降下来。比如上图所示，实际需要氧气端温度为330K，燃料端温度为373K的边界条件。正常情况下，这种边界条件是不会自燃的，因此先在0s时，给定一个氧气端温度为1300K，将其点燃，然后再在2ms给定需要的边界条件温度，使其慢慢将氧气端温度降下来。最后在3ms得到的数据就是我们所需要的。如果计算过程中不收敛，可增加步数进一步划分。

如图：

RPM = -1

VarsIn = 6

Time(s) Pressure(Pa)    TOx(K)  TFuel(K)    Sci(1/s)    ZR

0   1.00E+05    1300    373 1   1

0.0002  1.00E+05    1300    373 1   1

0.0004  1.00E+05    1250    373 1   1

0.0006  1.00E+05    1250    373 1   1

0.0008  1.00E+05    1200    373 1   1

0.001   1.00E+05    1200    373 1   1

0.0012  1.00E+05    1150    373 1   1

0.0014  1.00E+05    1150    373 1   1

0.0016  1.00E+05    1100    373 1   1

0.0018  1.00E+05    1100    373 1   1

0.002   1.00E+05    1050    373 1   1

0.0022  1.00E+05    1050    373 1   1

0.0024  1.00E+05    1000    373 1   1

0.0026  1.00E+05    1000    373 1   1

0.0028  1.00E+05    950 373 1   1

0.003   1.00E+05    950 373 1   1

0.0032  1.00E+05    900 373 1   1

0.0034  1.00E+05    900 373 1   1

0.0036  1.00E+05    850 373 1   1

0.0038  1.00E+05    850 373 1   1

0.004   1.00E+05    800 373 1   1

0.0042  1.00E+05    800 373 1   1

0.0044  1.00E+05    750 373 1   1

0.0046  1.00E+05    750 373 1   1

0.0048  1.00E+05    700 373 1   1

0.005   1.00E+05    700 373 1   1

0.0052  1.00E+05    650 373 1   1

0.0054  1.00E+05    650 373 1   1

0.0056  1.00E+05    600 373 1   1

0.0058  1.00E+05    600 373 1   1

0.006   1.00E+05    550 373 1   1

0.0062  1.00E+05    550 373 1   1

0.0064  1.00E+05    500 373 1   1

0.0066  1.00E+05    500 373 1   1

0.0068  1.00E+05    450 373 1   1

0.007   1.00E+05    450 373 1   1

0.0072  1.00E+05    400 373 1   1

0.0074  1.00E+05    400 373 1   1

0.0076  1.00E+05    380 373 1   1

0.0078  1.00E+05    380 373 1   1

0.008   1.00E+05    370 373 1   1

0.0082  1.00E+05    370 373 1   1

0.0084  1.00E+05    360 373 1   1

0.0086  1.00E+05    360 373 1   1

0.0088  1.00E+05    350 373 1   1

0.009   1.00E+05    350 373 1   1

0.0092  1.00E+05    340 373 1   1

0.0094  1.00E+05    340 373 1   1

0.0096  1.00E+05    330 373 1   1

0.0098  1.00E+05    330 373 1   1

0.01    1.00E+05    330 373 1   1

Input文件如下：

############

# Numerics #

############

InitialGridPoints = 101

DeltaTMax = 1.0e-6

RelTol = 1.0e-6

AbsTol = 1.0e-8

TStart = 0.0e-2

TEnd = 100.0e-3

UseNumericalDM = TRUE

#######

# I/O #

#######

NumberOfOutputs = 500

OutputPath is ini

#############

# Chemistry #

#############

globalReaction is NC7H16 + 11O2 == 8H2O + 7CO2;

MechanismFile is nHeptane\_68.pre

fuel is NC7H16

oxidizer is O2

#########

# Flame #

#########

Flame is Transient Flamelet

CAinFile is ./CA0.in

Scalar DissRate = 1

#ComputeWithRadiation is TRUE

LewisNumberFile is LewisNumbers

Pressure = 1e5

#######################

# Boundary conditions #

#######################

Fuel Side {

    dirichlet {

        t = 373

        y->NC7H16 = 1.0

    }

}

Oxidizer Side {

    dirichlet {

        t = 330

        x->co2 = 0.115972306

        x->o2 = 0.153459965

        x->n2 = 0.730567729

    }

}

其中#号为注释；

InitialGridPoints为初始化结点数；

DeltaTMax 、RelTol 、AbsTol为残差设置，保持默认；

TStart = 0，TEnd应为CA0.in中的最终时间；

NumberOfOutputs 为最大文件输出数量；

OutputPath is 后面加要将结果保存到的文件夹名称；

globalReaction 填写总包机理反应式；

MechanismFile 填写ScanMan生成的pre文件；

fuel 填写燃料；

oxidizer 填写氧化剂；

Flame is Transient Flamelet 表示使用瞬态计算；

CAinFile 填写前面创建的CA0.in文件名

Scalar DissRate = 1 耗散率，应和CA0.in中耗散率相同，优先使用CA0.in中填写的耗散率；

#ComputeWithRadiation is TRUE 是否考虑辐射，注释掉代表不考虑；

LewisNumberFile is LewisNumbers不填默认所有LewisNumber为1；

Fuel Side 燃料端温度和组分摩尔分数；

Oxidizer Side 空气端温度和组分摩尔分数；

附FlameMaster自带LewisNumbers文件：

N2  0.945629

O2  1.01086

H   0.167802

OH  0.669562

O   0.65686

H2  0.280137

H2O 0.752623

HO2 1.01753

H2O2    1.02465

CO  1.02325

CO2 1.30873

CH  0.613389

HCO 1.15955

CH2OH   1.19912

CH3 0.90353

CH4 0.922724

CH2O    1.16939

3-CH2   0.882989

C2H2    1.20568

C2H4    1.22794

1-CH2   0.882989

CH3O    1.19415

C2H6    1.34111

CH3OH   1.22353

C2H 1.19313

HCCO    1.37672

C2H3    1.21766

CH2CO   1.38361

CH3CO   1.39011

CH3CHO  1.39657

CH2CHO  1.46882

C2H5    1.32987

C3H6    1.7111

C3H3    1.51255

C3H4    1.52072

P-C3H4  1.40543

C3H5    1.52861

N-C3H7  1.46949

C4H 1.89044

C4H2    1.89756

C3H2    1.32009

U-C4H3  1.90448

S-C4H3  1.90448

C4H4    1.91121

U-C4H5  1.91775

S-C4H5  1.6665

C4H6    1.9241

C4H7    1.70397

1-C4H8  1.72244

P-C4H9  1.74075

C5H9    1.94742

1-C5H10 1.96393

1-C5H11 2.00851

1-C6H12 2.18227

1-C7H14 2.38321

1-C7H15 2.09692

2-C7H15 2.09692

3-C7H15 2.3971

4-C7H15 2.3971

N-C7H16 1.0

1C7H15O2-C7H15O2    2.15803

1HEOOH-2-C7H15O2    2.15803

OOC7OOH-O2C7H14OOH  2.19798

HOOC7OOH-HOOC7H13OOH    2.19798

OC7OOH-OC7H13OOH    2.17864

OC7H13O 2.15494

C6H2    2.02206

U-C6H5  2.03338

C6H6    2.03701

U-C6H7  2.04056

A1-C6H6 2.0914

A1--C6H5    2.07576

C6H5OH  2.32649

C6H5O   2.31224

A1C2H-C8H6  2.10577

A1C2H--C8H5 2.10342

A1C2H\*-C8H5 2.10342

A1C2HAC-C10H7   2.15373

A2-X-C10H7  2.15373

A2-C10H8    2.77135

A2R5-C12H8  2.18789

A2R5--C12H7 2.1867

A2R5C2H-C14H8   2.21256

A2R5C2H\*-C14H7  2.21164

ANC2HAC-C16H9   2.23262

A3R5--C16H9 2.23262

A3R5-C16H10 2.23333

A3R5AC-C18H11   2.24921

.bat文件为执行文件。

@CD "%*~dp0*"

@CALL C:\FlameMaster\Bin\bin\Source.BAT 1

@ECHO.

@ECHO.

@ECHO Run unsteady diffusion flames...

@ECHO.

@ECHO.

@ECHO.

@ECHO #####################################

@ECHO #    Build initialization file      #

@ECHO #####################################

@ECHO.

@ECHO.

@ECHO.

"%FM\_BIN%\FlameMan.exe" -i build\_ini.input

pause

第一行定位到当前目录；

第二行打开FlameMaster源程序；

“%FM\_BIN%\FlameMan.exe” – i + input文件名；

双击bat文件开始计算，最后在输出文件夹内最后时间步的文件可以用于稳态计算的初始文件，其头部如下：

header

title = "transient flamelet"

mechanism = "nHeptane\_68.pre"

author = "(null)"

date = "Sun Aug  2 14:05:59 2020"

fuel = "NC7H16"

time = 10 [ms]

pressure = 1 [bar]

chi\_ref = 1 [1/s]

Tmax = 1539.5 [K]

ZofTmax = 0.054 [K]

ZR = 1

LocTmax = 373 [K]

EmissionIndexFuel = -0.642938 [kg/m^3s]

CurrTimeStep = 1e-06 [s]

FuelSide

begin

    Temperature = 373 [K]

    Massfraction-NC7H16 = 1

end

OxidizerSide

begin

    Temperature = 330 [K]

    Massfraction-O2 = 0.161086

    Massfraction-CO2 = 0.167424

    Massfraction-N2 = 0.671491

end

numOfSpecies = 68

gridPoints = 101

接下来是求解S型曲线的稳态计算。

稳态计算需要.bat执行文件、input设置文件和初始化文件。初始化文件已在瞬态计算中生成，input文件如下所示：

############

# Numerics #

############

#### Newton solver ####

#TimeDepFlag = TRUE

DeltaTStart = 1.0e-4

DampFlag = TRUE

LambdaMin = 1.0e-2

UseNumericalJac is TRUE

#UseSecOrdJac is TRUE

UseModifiedNewton = TRUE

MaxIter = 50

TolRes = 1.0e-12

TolDy = 1.0e-8

#### grid ####

DeltaNewGrid = 50

#OneSoluOneGrid is TRUE

initialgridpoints = 99

maxgridpoints = 99

q = -0.25

R = 60

########################

# Sensitivity Analysis #

########################

#ReactionFluxAnal is TRUE

#######

# I/O #

#######

OutputPath is ./Out

#WriteRes is TRUE

#WriteFullRes is TRUE

#WriteEverySolution is TRUE

StartProfilesFile is ./NC7H16\_p01t1.000e+01ms.tout

#############

# Chemistry #

#############

globalReaction is NC7H16 + 11O2 == 8H2O + 7CO2;

MechanismFile is nHeptane\_68.pre

fuel is NC7H16

oxidizer is O2

#########

# Flame #

#########

Flame is CounterFlowDiffusion

#StrainRate = 100

#ArclengthCont = TRUE

ConstLewisNumber is TRUE

LewisNumberFile is LewisNumbers

Flame is Counterflow Diffusion in Mixture Fraction Space

Scalar DissipationRate = 1

Scalar DissipationRate = 2

Scalar DissipationRate = 3

Scalar DissipationRate = 4

Scalar DissipationRate = 5

#ComputeWithRadiation is TRUE

pressure = 101325

#######################

# Boundary conditions #

#######################

#ToSpecies N2

#FromSpecies NC7H16

#ContType is Temperature

#ContInc = -10

#ContSide is left

#ContBound = 330

Fuel Side {

    dirichlet {

        t = 373

        y->NC7H16 = 1

    }

}

Oxidizer Side {

    dirichlet {

        t = 330

        x->co2 = 0.115972306

        x->o2 = 0.153459965

        x->n2 = 0.730567729

    }

}

MaxIter 为最多步数，如果超过还不收敛则跳过当前耗散率；

TolRes 、TolDy 为收敛条件；

DeltaNewGrid 为计算多少步后不收敛便启动新的网格节点，要保证网格节点相同，应使DeltaNewGrid 大于 MaxIter；

OneSoluOneGrid is TRUE 代表每次求解使用不同的网格，为了方便后面建立fla火焰面，将其注释掉，表示使用相同结点的网格；

Initialgridpoints 、maxgridpoints初始网格数和最大网格数；

OutputPath 结果保存的文件目录；

StartProfilesFile 初始化文件，填写之前瞬态计算出的最后时间的文件名，注意路径；

【重要】ArclengthCont = TRUE 是否使用弧长延拓法，注释掉代表不使用，FlameMan将按照接下来给定的耗散率进行计算，无法自动算出S型曲线的中间段。启动将自动开启计算，如果给定的耗散率逐渐增大，则选择向耗散率更大的地方计算，有概率算到拐点后进入S型曲线的中间解。如果给定的耗散率逐渐减小，将向耗散率减小的方向计算。

Scalar DissipationRate 未开启弧长延拓法时，给定几个耗散率，FlameMan就会计算几个结果，开启后，只需要给定两个耗散率，第二大大于第一个自动向耗散率更大的地方计算，小于将向更小的地方计算。