

一种在 Fluent UDF 中使用 IMSL Fortran 数值库的方法*

胡文清, 詹杰民

(中山大学工学院应用力学与工程系, 广东 广州 510275)

摘要: UDF 能极大地延伸 Fluent 的功能, 被广泛应用于 Fluent 的各类计算中。IMSL 是一个集合数学与统计函数的程序库, 具有高效率、性能强大、应用简单等优点。研究并找到了一种方法, 通过将调用 IMSL 的 Fortran 程序编译为动态链接库, 并在 UDF 中调用该动态链接库, 实现在 UDF 中使用 IMSL 数值库; 同时给出了一个实例, 在数值水槽中生成椭圆余弦波。为结合 IMSL 的优点, 实现更简单、更快速、更自然的 UDF 程序编写提供了技术支持, 极大地提高了复杂 UDF 的编写能力, 增强 Fluent 的计算能力和应用范围。

关键词: Fluent; UDF; IMSL; Fortran; 椭圆余弦波

中图分类号: O353 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579(2017)03-0031-05

A method of using IMSL Fortran numerical libraries in Fluent UDF

HU Wenqing, ZHAN Jiemin

(Department of Applied Mechanics and Engineering, School of Engineering,
Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: UDF can greatly extend the functions of Fluent, is widely used in various types of Fluent calculation. IMSL is a set of mathematical and statistical libraries, with high efficiency, powerful performance, and simple application. A method is proposed to implement IMSL numerical libraries in UDF by compiling the Fortran program that calls IMSL as a dynamic link library and calling the dynamic link library in UDF. At the same time, an example is given to generate cnoidal wave in a numerical flume. It provides technical support for the realization of simpler, faster and more natural UDF programming with the advantages of IMSL, which greatly improves the compiling ability of complex UDF and enhances the computing power and application range of Fluent.

Key words: Fluent; UDF; IMSL; Fortran; cnoidal wave

在计算流体动力学领域的众多计算软件中, Fluent 是目前国内外使用最多、最流行的商业软件之一。对于复杂几何体的流体流动和传热的模拟问题, Fluent 更是达到世界顶尖的水平。Fluent 是用 C 语言编写而成的, 充分利用了 C 语言所提供的灵活性和强大的功能。在 Fluent 的众多功能中, 最能体现这一特点的, 是用户自定义函数, 即 UDF (User-Defined Function) 这一功能。UDF 为一段 C

语言函数程序, 可以被 Fluent 求解器动态加载, 用于增强 Fluent 的标准功能, 如自定义边界条件、自定义材料属性、为流域添加源项、自定义计算模型参数等^[1]。因此, UDF 在 Fluent 的各类计算中被广泛使用^[2]。

IMSL (International Mathematics and Statistics Library) 国际数学和统计程序库是在国内外广泛使用的集合数学与统计函数的综合性的程序库, 应用

* 收稿日期: 2016-12-20

基金项目: 广东省协同创新与平台环境建设专项项目 (2014B090904066)

作者简介: 胡文清 (1987 年生), 男; 研究方向: 流体力学; E-mail: emp_beren@163.com

通信作者: 詹杰民 (1963 年生), 男; 研究方向: 流体力学; E-mail: stszjm@mail.sysu.edu.cn

范围广泛,具有规模大、结果可靠、内容丰富、应用简单、程序运行效率高等优点。IMSL 拥有众多的发行版本,其中最悠久,也是应用最广泛的是 IMSL Fortran 数值库这一版本。最早的 IMSL Fortran 数值库于 1970 年发行,历经 40 余年的优化,使其拥有极高的计算精度和稳定性^[3]。这版本使用 Fortran 语言开发, Fortran 语法简明严谨,接近数学公式的自然描述,可以直接对矩阵和复数进行运算,在计算机里具有很高的执行效率。IMSL Fortran 数值库拥有超过 1000 种函数,能直接嵌入程序中使用,同时支持并行计算而且线程安全,为程序编写提供了更简单、更快、更自然的方法。

由于 Fluent 是 C 语言编写的,UDF 也只能用 C 语言编写。而 IMSL Fortran 数值库是 Fortran 编写的,因此也只能在 Fortran 程序中使用,但仍然有在其他环境中使用该库的方法^[4-5]。曾经有研究人员结合了 Fluent 和 IMSL 数值库进行研究,但其没有给出具体实现过程^[6]。C 和 Fortran 的混合编程方法已有多人进行研究^[7-8],在 C 里调用 Fortran IMSL 库也给出了实现方法^[5],但 UDF 有其特殊性,不能直接使用已有方法。为了实现在 UDF 中使用 IMSL Fortran 数值库,本文提出了一种方法,具体的实现流程为:将需要调用 IMSL Fortran 数值库的功能利用 Fortran 语言编写,将其编译成动态链接库(Dynamic Link Library),在 UDF 中采用静态调用该 DLL,以达到在 UDF 中使用 IMSL Fortran 数值库的效果。

本文研究的开发平台为 64 位 WIN7, Fortran 为 Intel (R) Visual Fortran Compiler Professional 11.1.038 + Microsoft Visual Studio 2008, IMSL 为 IMSL (R) Fortran Numerical Library Version 6.0.0 for Intel (R) 64, Fluent 为 ANSYS Fluent 15.0。

1 Fortran 调用 IMSL Fortran 的实现方法

IMSL Fortran 数值库安装后有 DLL 和 Static 两种版本,默认的配置是使用 DLL 的版本。为了能尽量简化操作,本文使用的是 DLL 的版本。在 Fortran 程序中调用 IMSL Fortran 数值库,需要在程序的开头添加以下代码段^[9]:

```
include link_fnl_shared. h'
```

这个头文件是使用 IMSL Fortran 库的 DLL 版本所必需的。之后,根据实际使用需求,利用 use 语句使用 IMSL Fortran 数值库里的各类模块。

Fortran 程序的默认调用约定与 UDF 所用的 C 语言的调用约定不同,因此需要在 Fortran 程序中

保证调用约定的匹配。Fortran 一共有三种调用约定, C、STDCALL、Default,其中 C 调用约定就是和 C 语言所匹配的调用约定。因此在 Fortran 处不采用默认调用约定,而是使用 C,与 C 语言相匹配,这需要在 Fortran 程序中声明^[10]。

为了在 UDF 中调用 Fortran 程序,需要将 Fortran 程序编译成 DLL 的形式。由于本文使用的 Fluent 为 64 位版本,因此需要使用 x64 平台来编译该 DLL。Fortran 编译 DLL 时,可以采用 function 或者 subroutine 形式。由于 subroutine 可以利用虚参实现多个返回值,因此一般采用 subroutine 形式。以下是本文实例的 Fortran 部分代码段,定义了一个名为“calscdn”的过程,该过程存储与名为“Dll1”的 DLL 文件中,用于计算雅可比椭圆函数:

```
subroutine scdn(x,t,k,sn,cn,dn)
!DEC$ATTRIBUTESC,DLLEXPORT::scdn
!DEC$ATTRIBUTES ALIAS:"calscdn"::scdn
!DEC$ATTRIBUTES VALUE::x,t,k
!DEC$ATTRIBUTES REFERENCE::sn,cn,dn
include link_fnl_shared. h'
use elk_int
use ejsn_int
use ejcn_int
use ejdn_int
implicit none
real(8)::x,t,k,sn,cn,dn,kk,tx
kk = elk(k**2)
tx = 2. d0 * kk *(x - t)
sn = ejsn(tx,k**2)
cn = ejcn(tx,k**2)
dn = ejdn(tx,k**2)
end subroutine scdn
```

其中,!DEC\$ATTRIBUTES 语句用于定义该 DLL 工程的属性。C 定义了孩子过程使用 C 调用约定, DLLEXPORT 表明孩子过程能被外部其他程序或 DLL 调用。ALIAS 属性定义了孩子过程的别名,将编译产生的目标例程名限定为引号内的名称,以保持大、小写混合。使用 ALIAS 属性避免了在 UDF 的部分必须使用符合 C 调用约定的例程名称,而是能按程序员个人的意愿决定孩子过程的例程名。VALUE 和 REFERENCE 定义了孩子过程的参数是按值传递还是按地址传递。C 调用约定的默认参数传递约定是按值传递,而 VALUE 和 REFERENCE 属性的定义会覆盖调用约定对参数传递产生的影响,因此推荐将全部参数都显式定义其参数传

递方式。

这段代码利用 use 语句使用了 IMSL Fortran 数值库的四个模块，分别用于计算第一类完全椭圆积分、雅可比椭圆函数 sn、cn、dn。这段代码清楚地显示了使用 IMSL Fortran 数值库所带来的优势，让程序编写更简单、更快、更自然。

2 UDF 调用 Fortran DLL 的实现方法

UDF 是用 C 语言编写的一段代码，与一般的 C 程序相比，UDF 具有自己的特点：必须包含“udf.h”头文件；必须使用 Fluent 提供的 DEFINE 宏来进行定义；通过 Fluent 预定义的宏和方程获取 Fluent 求解器的数据等^[1]。对于一般的 C 程序，其调用 DLL 有动态链接和静态链接两种方法^[11]。其中动态链接需要使用 Windows 的 API，而鉴于 UDF 的特点，这点并不能实现。因此本文采用静态链接的方法实现对 Fortran DLL 的调用。在 Fluent 中，使用 UDF 有两种方式，分别为解释型和编译型。为实现调用 DLL，必须使用编译的方法使用 UDF。

在 UDF 中调用 DLL，需要将调用的 DLL 文件本身和对应的 Lib 文件，分别复制到指定的文件夹中，包括 Fluent 项目的工作目录，和此工作目录下 UDF 编译后产生的 UDF 文件夹中。以一个二维双精度的 Fluent 项目为例，编译出的 UDF 默认名字为 libudf，在工作目录下会有以此名字命名的文件夹，内有 src 和 win64 两子文件夹，在 win64 文件夹内有 1 到 3 个文件夹，包括单线程使用的 2ddp 文件夹和多线程使用的 2ddp_host 和 2ddp_node 文件夹。如果是三维 Fluent 项目，则上述文件夹名称里的 2d 改为 3d，单精度项目则是将上述文件夹名称里的 dp 去掉。为成功编译 UDF，需要将 DLL 文件和对应的库搜索记录 Lib 文件，分别复制一份到 Fluent 项目的工作目录，和上述的单线程时 2ddp 文件夹，多线程时 2ddp_host 文件夹和 2ddp_node 文件夹中。

以下为本文实例的 UDF 部分代码段，调用了本文第二部分实例给出的 Fortran 过程，用于给定数值水槽入口处的水相的体积分数：

```
#include "udf.h"
#pragma comment(lib, "Dll1.lib")
extern voidcalscdn( double x, double t, double k, double *sn, double *cn, double *dn);
DEFINE_PROFILE( inlet_w_vof, thread, index)
{
    double x[ND_ND];
```

```
double zs, z;
double ct, sn, cn, dn;
face_t f;
ct = CURRENT_TIME;
sn = 0;
cn = 0;
dn = 0;
calscdn(0. /L, ct/T, K, &sn, &cn, &dn);
zs = Zt + H * cn * cn;
begin_f_loop(f, thread)
{
    F_CENTROID(x, f, thread);
    z = x[1];
    if( z <= zs)
        F_PROFILE(f, thread, index) = 1.;
else
    F_PROFILE(f, thread, index) = 0.;
}
end_f_loop(f, thread)
}
```

其中，#pragma 是一种预处理指令，起到设定编译器的状态或指示编译器完成特定动作的作用。#pragma comment(lib, "Dll1.lib") 命令使对象工程链接 Dll1.lib 这个库搜索记录，该命令的作用与在工程设置里修改设置是相同的，使用该命令，就不需要修改 UDF 的编译文件，能有效地简化操作。extern 语句声明了 calscdn 过程是外部过程，后面的参数定义和顺序需要跟 Fortran 程序中的完全一致。

当使用多线程的 Fluent 时，以上的 UDF 使用 Fortran DLL 的方法仍然适用，唯一需要修改的是 Fluent 多线程使用的 MPI 类型。Fluent 默认使用的 MPI 是 PCMPI，由于 IMSL Fortran 数值库内部也调用了相同的 MPI，若不作修改编译 UDF，则会在 Fluent 计算时产生错误。因此使用多线程的 Fluent 时，为了防止计算时产生错误，需要将 Fluent 使用的 MPI 类型做出修改，例如改为 Intel MPI。

3 在数值水槽中生成椭圆余弦波

波浪进入近岸浅水区后，海底边界的摩阻力迅速增加，波高和波形将不断变化，波面在波峰附近变得很陡，而两个波峰之间却相隔很长但又较为平坦的水面，波的运动特性与相对波长 L/d 的关系减弱，而与相对波高 H/d 的关系增强，即 L/d 和 H/d 都成为决定波动性质的主要因素。在这种浅水情

况下,使用椭圆余弦波理论来描述波浪运动,可以取得较满意的结果。椭圆余弦波理论最早是在 1895 年由 Korteweg 与 De Vries 提出的,其后由 Keulegan 及 Patterson, Keller, Littman, Wiegel 等人进一步加以研究并使之适用于工程实践。椭圆余弦波的二阶近似波面方程为^[12]:

$$\begin{cases} z_s = z_i + H \operatorname{cn}^2 \left[2K(k^2) \left(\frac{x}{L} - \frac{t}{T} \right), k^2 \right] \\ z_i = d - H + \frac{16d^3}{3L^2} K(k^2) [K(k^2) - E(k^2)] \end{cases} \quad (1)$$

其中, z_i 为波谷底与离水底的高度, d 为水深, H 为波高, L 为波长, T 为周期, k 为波数, K 为第一类完全椭圆积分, E 为第二类完全椭圆积分, cn 为雅可比椭圆余弦函数。由于在波面方程中出现了椭圆函数 cn , 故这种波浪被称为椭圆余弦波。波数 k 由以下公式决定:

$$k = \frac{L}{K(k^2)} \sqrt{\frac{3H}{16d^3}} \quad (2)$$

波速 c 由以下公式决定:

$$c = \sqrt{gd} \left\{ 1 + \frac{H}{d} \left[-1 + \frac{1}{k^2} \left(2 - 3 \frac{E(k^2)}{K(k^2)} \right) \right] \right\} \quad (3)$$

水质点的运动速度分布为:

$$\begin{aligned} u = & \left[-\frac{5}{4} + 1.5 \frac{z_i}{d} - \frac{z_i^2}{4d^2} + 1.5 \frac{H}{d} \left(1 - \frac{z_i}{3d} \right) \operatorname{cn}^2 \right. \\ & \left. - \frac{H^2}{4d^2} \operatorname{cn}^4 - \frac{H^2}{2k^2 d^2} \left(1 - 1.5 \frac{z_i}{d} \right) \cdot \right. \\ & \left. (-k^2 \operatorname{sn}^2 \operatorname{cn}^2 + \operatorname{cn}^2 \operatorname{dn}^2 - \operatorname{sn}^2 \operatorname{dn}^2) \right] \sqrt{gd} \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v = & \sqrt{gd} \times \frac{\sqrt{3z}}{2d} \times \left(\frac{H}{d} \right)^{\frac{3}{2}} \times \left[3 - \frac{z_i}{d} - \frac{H}{d} \operatorname{cn}^2 + \right. \\ & \left. \frac{2H}{k^2 d} \left(1 - \frac{z_i}{2d} \right) (k^2 \operatorname{sn}^2 - k^2 \operatorname{cn}^2 - \operatorname{dn}^2) \right] \\ & \operatorname{sn} \cdot \operatorname{cn} \cdot \operatorname{dn} \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} \operatorname{cn} &= \operatorname{cn} \left[2K(k^2) \left(\frac{x}{L} - \frac{t}{T} \right), k^2 \right] \\ \operatorname{sn} &= \operatorname{sn} \left[2K(k^2) \left(\frac{x}{L} - \frac{t}{T} \right), k^2 \right] \\ \operatorname{dn} &= \operatorname{dn} \left[2K(k^2) \left(\frac{x}{L} - \frac{t}{T} \right), k^2 \right] \end{aligned}$$

cn 、 sn 和 dn 均为雅可比椭圆函数。

数值水槽的设计如图 1 所示。数值水槽长 30 m, 高 1 m, 水深 0.4 m。左侧是速度入口, 上方是空气的压力入口, 右侧是压力出口下方是水槽

底墙壁。水槽最后 8 m 为消波段, 采用添加源项的方法消波^[13]。采用 VOF 方法实现数值造波, 在速度入口处分别给定流体的 x 方向速度、 y 方向速度和水的体积分数。

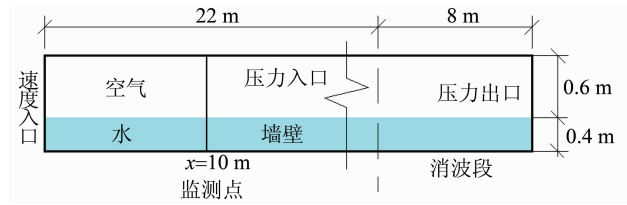


图 1 数值水槽示意图

Fig. 1 Diagram of numerical flume

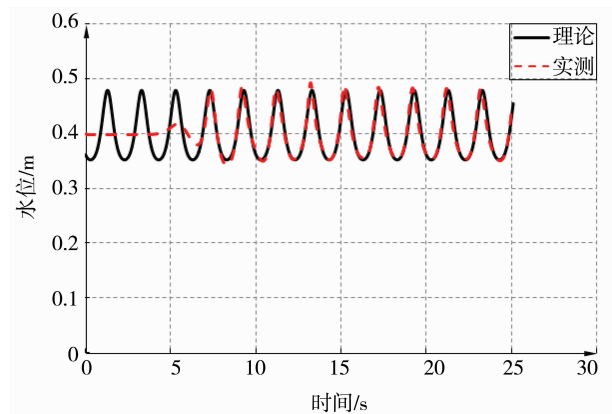


图 2 测点 $x = 10$ m 处水位变化对比图

Fig. 2 Comparison of water level change at measuring point $x = 10$ m

本实例所造椭圆余弦波的参数为: 周期 T 为 2 s, 波高 H 为 0.127 m。具体的实现方法如下:

1) 通过给定的椭圆余弦波参数周期 T , 利用公式(2)和(3), 根据波长 $L = cT$, 使用松弛迭代法计算波长 L , 波数 k 和 z_i 。这部分使用 Fortran 编译为过程 1, 调用 IMSL Fortran 数值库以求解椭圆积分。

2) 使用 Fortran 编写过程 2, 调用 IMSL Fortran 数值库, 根据输入的参数, 计算雅可比椭圆函数。该部分代码在本文第二部分的实例中给出。

3) 编写 UDF 程序, 在 DEFINE_INIT 宏中调用过程 1 以计算椭圆余弦波参数, 使用 DEFINE_PROFILE 宏, 调用过程 2 利用公式(1)和(4), 分别给定速度入口处的 x 方向速度、 y 方向速度和水的体积分数。其中调用 Fortran 过程的方法和给定水的体积分数部分的代码在本文第三部分的实例中给出。

在数值水槽中 $x = 10$ m 的位置设置了监测点。图 2 为在 $x = 10$ m 处的监测点上水位随时间变化的

示意图。可以看到,所造出来的椭圆余弦波与理论值十分接近,可以认为这种方法是成功有效的。

4 总 结

本文详细介绍了一种在 Fluent UDF 中使用 IMSL Fortran 数值库的方法,并通过在数值水槽中生成椭圆余弦波的实例,给出了详细的实现过程。通过对 Fortran 调用 IMSL Fortran 数值库和 UDF 调用 Fortran DLL 的实现方法的研究,基本解决了在 UDF 中使用 IMSL Fortran 数据库可能出现的各种问题,从而为在 64 位平台上,利用 IMSL Fortran 的强大能力,增强和简化 UDF 的编写过程,有效地减低了 UDF 的编写难度,实现更简单、更快速、更自然的 UDF 程序编写,极大地提高了复杂 UDF 的编写能力,增强 Fluent 的计算能力和应用范围。

参考文献:

- [1] ANSYS INC. Ansys 15.0 fluent UDF manual[M]. USA: Ansys Incorporated, 2013.
- [2] 辛颖. Fluent UDF 方法在数值波浪水槽中的应用研究[D]. 大连:大连理工大学, 2013.
XIN Ying. Application of fluent UDF method in the study of numerical wave tank[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2013.
- [3] 董桂洪,王胜年,范志宏,等. IMSL C#数值分析函数库在混凝土技术中的应用[J]. 水运工程, 2010(5): 61-64.
DONG Guihong, WANG Shengnian, FAN Zhihong, et al. Application of IMSL C# numerical library to concrete technology[J]. Port & Waterway Engineering, 2010(5): 61-64.
- [4] STEWART E. Distributed IMSL with 3rd party solutions in C, Java and .NET[C] // Proceedings of the 2006 ACM/IEEE Conference on Supercomputing. USA: ACM, 2006: 277.
- [5] KIM J, ROBERTSON L M. How to call the IMSL Fortran libraries from C[R]. IMSL Technical Report Series, No. 8902. USA: Visual Numerics Incorporated, 2000.
- [6] MUNTEAN S, SUSAN-RESIGA R F, ANTON I. Mixing interface algorithm for 3D turbulent flow analysis of the GAMM Francis turbine[C] // VAD J, et al. Modeling Fluid Flow: The State of the Art. Berlin Heidelberg, Germany: Springer-Verlag 2004: 359-372.
- [7] 任慧,周振红,张成才. Fortran 与 C/C++ 的混合编译[J]. 计算机工程与设计, 2007(17): 4096-4098.
REN Hui, ZHOU Zhenhong, ZHANG Chengcai. Mixed-language compiling between Fortran and C/C++ [J]. Computer Engineering and Design, 2007(17): 4096-4098.
- [8] 周振红,宋宇伟,郭恒亮,等. Visual Fortran 基于 Win32 DLL 的混合编程技术[J]. 郑州大学学报(工学版), 2003(3): 10-13.
ZHOU Zhenhong, SONG Yuwei, GUO Hengliang, et al. Mixed-language programming of Visual Fortran based on win32 DLL[J]. Journal of Zhengzhou University (Engineering Science), 2003(3): 10-13.
- [9] Visual Numerics Inc. IMSL Fortran numerical library version 6.0 user's guide[M]. USA: Visual Numerics Incorporated, 2006.
- [10] Intel Corp. Intel Fortran compiler 11.1 user and reference guides[M]. USA: Intel Corporation, 2009
- [11] Microsoft Corp. Visual C++, Microsoft visual studio 2008 documentation[M]. USA: Microsoft Corporation, 2008.
- [12] 邱大洪. 波浪理论及其在工程中的应用[M]. 北京:高等教育出版社, 1985: 83-114.
QIU Dahong. Wave theory and its application in engineering[M]. Beijing: Higher Education Press, 1985: 83-114.
- [13] 陈学彬,詹杰民,苏炜. 相邻多浮体与波浪作用的共振物理现象数值模拟[J]. 中山大学学报(自然科学版), 2016, 55(1): 54-62.
CHEN Xuebin, ZHAN Jiemin, SU Wei. Numerical simulation of resonance between adjacent multi-floating bodies and waves [J]. Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Sunyatseni, 2016, 55(1): 54-62.