

Flowsquare 3.1 ユーザーガイド（一部日本語版）

Yuki Minamoto (<http://www.FLOWSQUARE.com>)

18th January 2012

Introduction to flowsquare 3.1

Flowsquare は 2 次元流体シミュレーションソフトウェアです。反応性流体を取り扱うこともでき、化学反応による熱発生 of 流体への影響は低マッハ数近似にて考慮されています。ユーザーガイドの前半は支配方程式やモデリングなどの数学的な背景について述べていますが、これらを理解しなくても後半にあるソフトウェアの使い方を読むだけでも十分です。このユーザーガイドは、後半部分のソフトウェアの使い方に関する部分のみ日本語訳しています。ウェブサイト (<http://www.flowsquare.com>) にて様々なサンプルシミュレーション、及び入力ファイルが公開されていますので、シミュレーションしたいケースと似たサンプルケースの入力ファイルを変更する事で、どなたでも簡単に流体シミュレーションを実行できます。

1 Governing equations

In *flowsquare*, the incompressible governing equations are solved based on the low-Mach number assumption. Under the assumption, the mixture density changes due to the heat release (temperature rise), while the fluid effect on the density is assumed as negligible. Therefore, the continuity equation is written in terms of conservative form as:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0, \quad (1)$$

where ρ and u_i are respectively the mixture density and i -component of velocity. The temporal change of density is neglected due to the above assumption. The governing equation for momentum is:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + (\rho - \rho_\infty) g_j, \quad (2)$$

where p is pressure, and g_j is the acceleration of gravity. The term, $(\rho - \rho_\infty) g_j$, represents the external force due to the buoyancy and ρ_∞ is the reference density. τ_{ij} is the viscous-strain given by:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3)$$

where μ is the dynamic viscosity and δ_{ij} is the Kronecker delta. Equation (2) is solved in two steps. For first step, the equation is solved without pressure term as:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j)^* = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + (\rho - \rho_\infty) g_j. \quad (4)$$

Then, the pressure term is included so that the mass conservation is taken into account in the second time integration:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) = -\frac{\partial p^*}{\partial x_j}. \quad (5)$$

Equation (5) is solved using the Poisson's equation in terms of ρu_i^* and the correction of pressure, p^* , as:

$$\frac{\partial^2 p^*}{\partial x_i^2} = \left(\frac{\partial (\rho u_i)^*}{\partial x_j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} * w_d \right) \frac{1}{\Delta t}, \quad (6)$$

where, Δt is the time step and w_d is user defined parameter typically unity. Once the corrected pressure field is obtained, the corrected velocity in the next time step is written as:

$$\rho u_i = (\rho u_i)^* - \frac{\partial p^*}{\partial x_j} \Delta t. \quad (7)$$

Now the velocity field satisfies the continuity equation (Eq. 1) is obtained from Eq. (7) in the conservative form.

1.1 Governing equations for scalars

For reactive flow field, the conservation equations for species mass fraction, Y_i , and energy need to be solved, and maybe written with appropriate assumptions as:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \omega_i, \quad (8)$$

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j T) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\omega_T}{c_p}, \quad (9)$$

where the energy equation is written in terms of temperature, T . D_i , λ and c_p denote the molecular diffusivity of species i , thermal conductivity and specific heat capacity of the mixture. Species and heat source are denoted as ω_i and ω_T .

Therefore, for the simplest reaction systems, in which the fuel, F , and oxidizer, O , react to produce products, P , as:



the total number of equations for Eqs. (8) and (9) is four.

In *flowsquare*, in order to reduce the number of equations to be solved, the progress variable and the mixture fraction are introduced. The progress variable is used for premixed reaction, while mixture fraction is used in non-premixed reaction. These two modes of reaction and the reduced equation are explained next subsections.

1.1.1 Premixed reacting flow

Reaction is called premixed reaction when all species are fully mixed before the reaction takes place. For example, premixed reaction (combustion) can be observed in traditional gas stove and heater burners. In the case of premixed combustion, fuel and oxidizer are well mixed so the unburnt mixture is uniform and homogeneous.

One of important features of this premixed combustion is that flame (reaction front) can freely propagate toward unburnt mixture (Fig. 1 a), or mixture can ignite at any locations if there is enough activation energy. This is not the case in non-premixed mode as explained in the next subsection.

For premixed mixture, reaction can be expressed by using reaction progress variables. The progress variable, c , is a normalized scalar which shows the extent of reaction progress in premixed combustion systems. Although there are several definition for the progress variables, in *flowsquare*, following definitions are used:

$$c_{Y_{F/O}} = 1 - \frac{Y_{F/O}}{Y_{F/O,u}} \quad \text{or} \quad c_{Y_P} = \frac{Y_P}{Y_{P,b}} \quad (11)$$

$$c_T = \frac{T - T_u}{T_b - T_u}, \quad (12)$$

where the subscripts, u and b denote unburnt and burnt mixture, and F , O and P denote fuel, oxidiser and product, respectively. Therefore, progress variable is 0 in the unburnt mixture and 1 in the fully burnt mixture. Figure 1 (b) shows the progress variable variation of one-dimensional premixed flame. Flame front is often defined as the iso-surface of $c = 0.3 - 0.6$.

Lewis number, Le , is defined as the ratio of thermal diffusivity to mass diffusivity. If unity Lewis numbers, constant pressure, adiabatic conditions and $c = c_{Y_{F/O}} = c_{Y_P} = c_T$ are assumed, Eqs. (8) and (9) are reduced to one equation of progress variable conservation as:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \omega_c, \quad (13)$$

where ω_c is the reaction rate of c , and D is the diffusivity of progress variable (with above assumption, it can be either diffusivity of temperature or mixture). Therefore, once progress variable field is obtained, temperature field and species mass fraction fields can be obtained using Eqs. (11) and (12). The rate of reaction of c is modelled as follows:

$$\omega_c = \rho k \exp \left(-\frac{T_a}{T} \right) T^n \xi_c R(c), \quad (14)$$

where k , T_a and n are all constant for the single step reaction explained in Eq. (10). The function $R(c)$ modifies the reaction rate such that the reaction rate at $c = 0$ and $c = 1$ becomes small. The function is defined as:

$$R(c) = (1 - w_r) + w_r(1 - \cos(2\pi c))/2, \quad (15)$$

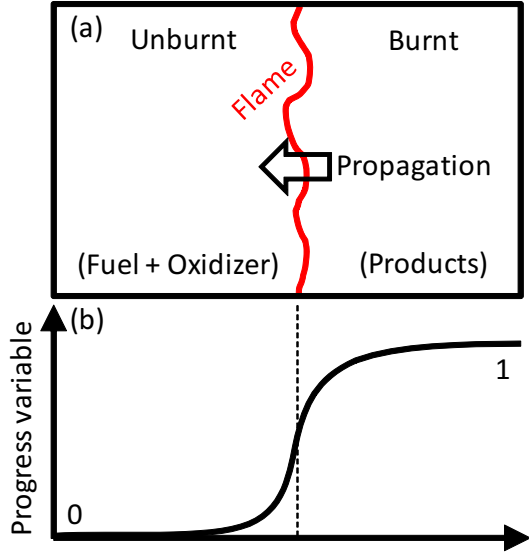


Figure 1: Schematic of premixed flame (a) and one-dimensional variation of progress variable (b).

where $0 \leq w_r \leq 1$ is a parameter by which effect of $R(c)$ on the reaction rate is determined. If $w_r = 0$, there is no difference due to $R(c)$, while if $w_r = 1$ the reaction rate becomes 0 at $c = 0$ and 1 due to $R(c)$. Clearly, this implementation is to avoid undesirable reaction at $c = 0/1$.

ξ_c in Eq. (14) is the mixture fraction between the fuel-air mixture and air. The mixture fraction is explained in the next section. At $\xi_c = 1$, the mixture consists of only fuel-air mixture and at $\xi_c = 0$, the mixture is only air. By multiplying ξ_c to the reaction rate, reaction at pure air is avoided. In Sec. 6.2, how to set pure air stream is explained. If there is no pure air stream in the domain, ξ_c is automatically set as 1.

1.1.2 Non-premixed reacting flow

In contrast to premixed reaction, non-premixed reaction does not require mixing of fuel and oxidizer before reaction. A schematic figure for typical non-premixed flame is shown in Fig 2 (a). There are fuel and oxidizer stream and reaction takes place only at the locations where fuel and oxidizer meet.

With the given reaction, Eq. (10), the mass production rate of fuel, oxidizer, product, and

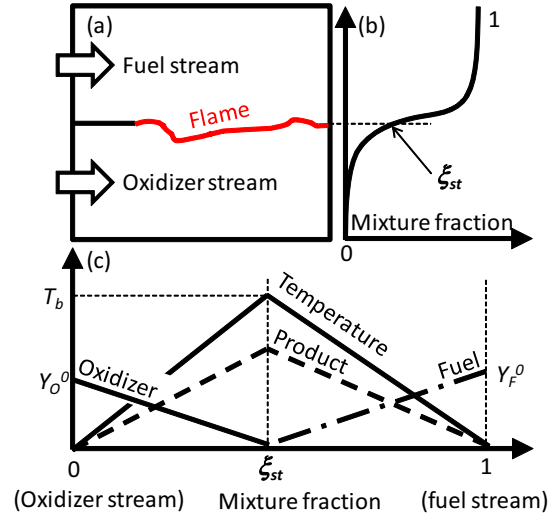


Figure 2: Schematic of non-premixed flame (a), one-dimensional variation of mixture fraction (b), and temperature and mass fraction variations as a function of mixture fraction (c).

heat release are related as:

$$-\omega_F = -\frac{\omega_O}{s} = \frac{\omega_P}{1+s} = \frac{\omega_T}{Q}, \quad (16)$$

where Q is the heating value of fuel and s is the mass of oxidizer required per unit mass of fuel, defined as $s = W_O/W_F$, where W_i is the molar weight for species, i . If the unity Lewis number is assumed, the conserved scalar, β , is defined from any pair of variables as:

$$\beta_{F,O} = sY_F - Y_O, \quad (17)$$

$$\beta_{F,P} = Y_F + \frac{Y_P}{1+s}, \quad (18)$$

$$\beta_{O,P} = Y_O + \frac{Y_P}{1+s}, \quad (19)$$

$$\beta_{F,T} = Y_F + \frac{c_p T}{Q}, \quad (20)$$

$$\beta_{O,T} = Y_O + \frac{sc_p T}{Q}. \quad (21)$$

β is called conserved scalar, because if one considers the conservation equation for one of conserved scalars, the source term does not

appear. For instance, for above $\beta_{F,O}$, the conservation equations of $s \times Y_F$ and Y_O are written as:

$$\frac{\partial(\rho s Y_F)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j s Y_F) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial s Y_F}{\partial x_j} \right) + s \omega_F, \quad (22)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_O)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_O) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x_j} \right) + \omega_O. \quad (23)$$

By using Eq. (16) and by combining Eqs. (22) and (23), it is clear that the source terms are cancelled and following equation is obtained:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \beta_{F,O}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \beta_{F,O}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \beta_{F,O}}{\partial x_i} \right), \quad (24)$$

β is called conserved scalar because there is no source term in Eq. (24). Once a conserved scalar is defined, a normalized conserved scalar, ξ , is also defined. This normalized conserved scalar is called mixture fraction, and defined as:

$$\xi = \frac{\beta - \beta_O}{\beta_F - \beta_O}, \quad (25)$$

where the subscripts F and O mean a fuel and an oxidizer stream, respectively. Figure 2 (b) shows one-dimensional mixture fraction variation for the flame in Fig. 2 (a). With above definition of mixture fraction, $\xi = 1$ corresponds to fuel stream and $\xi = 0$ corresponds to oxidizer stream. As shown in Fig. 2 (b), flame location in non-premixed systems is often assumed as the location where $\xi = \xi_{st}$. Here ξ_{st} is called stoichiometric mixture fraction, at which there are the exact amount of fuel and oxidizer to convert a unit quantity of fuel into product. The stoichiometric mixture fraction is calculated by:

$$\xi_{st} = \frac{-\beta_O}{\beta_F - \beta_O}. \quad (26)$$

The mixture fraction also satisfies Eq. (24). Therefore, for the simulation of reactive non-premixed systems, the equations of energy and

the species conservations are reduced to one equation for mixture fraction as:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right), \quad (27)$$

Once mixture fraction field is obtained, temperature and species mass fraction fields can be estimated using relations between temperature/mass fraction and mixture fraction for infinitely fast chemistry shown in Fig. 2 (c). These relations are directly obtained from Eq. (27), but only results are shown here.

$$\begin{aligned} \text{for } \xi < \xi_{st} : \quad & Y_F = 0, \\ & Y_O = Y_O^0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_{st}} \right), \\ & Y_P = (1 - s) Y_F^0 \xi, \\ & T = (T_b - T_O^0) \frac{\xi}{\xi_{st}} + T_O^0, \\ \text{for } \xi > \xi_{st} : \quad & Y_F = Y_F^0 \frac{\xi - \xi_{st}}{1 - \xi_{st}}, \\ & Y_O = 0, \\ & Y_P = (1 - s) Y_F^0 \frac{1 - \xi}{1 - \xi_{st}}, \\ & T = \frac{T_b - T_F^0}{\xi_{st} - 1} \xi + \frac{T_F^0 \xi_{st} - T_b}{\xi_{st} - 1}, \end{aligned} \quad (28)$$

where T_b is the adiabatic flame temperature, Y_F^0 and Y_O^0 are respectively fuel and oxidizer mass fraction at each stream, and T_F^0 and T_O^0 are temperatures at fuel and oxidizer stream, respectively.

1.1.3 Others

In premixed mode, *flowsquare* solves Eqs. (1), (2) and (13). Equation (27) is solved in premixed mode only if you set a pure-air stream. In non-premixed mode, Eqs. (1), (2) and (27) are solved. Temperature is calculated using either progress variable or mixture fraction fields. Density field is obtained based on the classical ideal gas law:

$$p = \rho R T, \quad (29)$$

where R is the specific gas constant (J/kg · K) calculated as $R = 8.31/W$. W (kg/mol) is molar weight of the mixture. In *flowsquare*, all thermodynamic and transport properties are assumed as constant.

2 Numerical methods

In *flowsquare*, relatively low-order numerical methods are used. This is something to do with the concept of this software, and to achieve as short computational time as possible.

2.1 Differentiations

The second-order central finite difference scheme is used for spatial differentiation. On the boundaries, this second-order scheme is replaced by the first-order one-sided difference. For time integration, the Euler method is used which is first-order scheme. The formulations of these differentiations are well explained at Wikipedia [3, 4].

2.2 Poisson's equation

Poisson's equation is solved to obtain pressure as in Eq. (6). Poisson's equation is written as:

$$\nabla^2 \phi = f, \quad (30)$$

where ∇^2 denotes the Laplace operator. If one applies second-order central differentiation to above equation, it is now written as:

$$\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}. \quad (31)$$

Therefore, the Poisson's equation can be reduced to n linear equations with unknown ϕ . In *flowsquare*, Poisson's equation is iteratively solved using successive over-relaxation (SOR) method [5]. $(n+1)$ -th iterative solution is calculated from (n) -th iterative solution as:

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{n+1} = & (1 - \omega)\phi_{i,j}^n + \omega \times \\ & \left(\frac{\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} - f_{i,j} \right) \\ & \times \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}, \end{aligned} \quad (32)$$

where ω is the relaxation parameter. Values of $\omega > 1$ are used to speed up convergence while $\omega < 1$ are used to help converge solutions of a diverging iterative process. Typically $\omega = 1.6 - 1.8$ are used for both better results and fast convergence. The iteration calculation is continued until $\phi^{n+1} - \phi^n < \epsilon_P$. Here, ϵ_P is tolerance and specified in grid.txt. See Sec. 7.

2.3 境界条件

複数の境界条件を選択することが出来ます: 流入、流出境界、壁境界、移動境界です。これらについて、Sec. 6. でより詳しく述べています。

2.4 Spatial filtering

空間フィルターはシミュレーションを安定に継続するうえで必要となる場合があります。flowsquare では 2 次精度の空間フィルターを以下のように用いています。

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i,j} = & (1 - \omega)f_{i,j} \\ & + \omega(f_{i+1,j} + f_{i-1,j} + f_{i,j+1} \\ & + f_{i,j-1} + 4f_{i,j})/8, \end{aligned} \quad (33)$$

フィルター後の値をハット (\hat{f}) で示し、下付き文字は i, j の位置を、 ω は緩和パラメータを示しています。緩和パラメータは 0 から 1 の間の数を取り、大きい程フィルターが強くなります。

3 可視化ツール

flowsquare ではシミュレーションと同時進行で可視化が行われます。

1. 色: 密度、速度 (u と v), 流速 ($\sqrt{u^2 + v^2}$), 渦度, 温度, 反応速度 (premixed mode), スカラー (inc. c and ξ), 圧力がカラーバーとともに表示されます。
2. ベクトル: 速度をベクトルとして表示することもできます。ベクトルの数、大きさ、色はユーザーが任意に決定できます。
3. 等値線: 火炎面を等値線で表示することが出来ます。線の太さ、色はユーザーが任意に決定できます。
4. 粒子: ラグランジュの手法を用いた、トレーサー粒子を流入させることが出来ます。粒子の数、色は選択できます。
5. 背景画像: 背景画像を挿入することが出来ます。詳しくは Sec. 6.3。

これらの可視化ツールはシミュレーション中にも随時変更することが可能です。

4 中間生成ファイル

中間生成ファイルは ρu , ρv , ρ , スカラー (c 及び ξ), T , p の場から構成されます。データは $N_X \times N_Y$ の倍精度バイナリデータで出力されます。ここで、 N_X と N_Y は格子点数となります (後述)。

```
fwrite(
    DATA, NX*NY*sizeof(double), 1, fp);
```

従って、中間生成ファイルはシミュレーション後の解析に使う事が出来ます。c 言語、フォートラン、Matlab で中間生成ファイルを読み込むコードは以下のように書けます。

```
fp=fopen("filepath", "rb");
fread(
    DATA, NX*NY*sizeof(double), 1, fp);

real(8) DATA(NX,NY)
character fp*(150)
fp="filepath"
open(10, file=fp, form="binary")
read(10) DATA

fid = fopen('filepath', 'r');
A = fread(fid, [NX,NY], 'double');
surf(A);
```

5 フォルダとファイル階層

‘flowsquare.exe’, ‘grid.txt’, ‘bc1.bmp’ 及び ‘bc2.bmp’ は同じフォルダ (メインフォルダ) に位置していなければなりません。‘bg.bmp’ は背景画像を使う場合のみ必要です。これらの入力ファイルは常にメインフォルダから読み込まれます。‘flowsquare.exe’ を実行後、プロジェクト名を入力すると入力された名前のフォルダが生成されます。同時に、‘bkup’, ‘dump’ そしてがプロジェクトフォルダ以下に生成されます。‘figs’ は画像ファイルのためのフォルダです。‘bkup’ には ‘bc1.bmp’, ‘bc2.bmp’, ‘bg.bmp’ そして ‘grid.txt’ がコピーされます。

```
+ [main directory]
| - flowsquare.exe
| - grid.txt
| - bc1.bmp, bc2.bmp, (bg.bmp)
```

```
| - [project]
|   | - [bkup]
|   |   | - back up files
|   | - [dump]
|   |   | - dump files (binary)
|   | - [figs]
|   |   | - figures
|   |
|   | - log.dat
```

6 境界条件ファイル -bc1.bmp 及び bc2.bmp -

flowsquare では境界条件はビットマップ画像で定義されます (bc1.bmp and bc2.bmp)。さらに背景画像を用いる場合は bg.bmp も用います。これらの入力ファイルの例は図 3, 4 及び 5 に示されています。以下で詳細が述べられますが、ここで黒色は RGB(0,0,0), 青色は RGB(0,0,255), 赤色は RGB(255,0,0), 緑は RGB(0,255,0), そしてピンクは RGB(255,0,255) の RGB 情報を意味します。

6.1 bc1.bmp (Fig. 3)

bc1.bmp は速度に関する境界条件を決定します。bc1.bmp のピクセルサイズは $n_x \times n_y$ ピクセルである必要があります。ここで n_x 及び n_y は grid.txt で定義されるシミュレーションの格子点数です。4 種類の強化条件を以下のように決めることが出来ます。

1. 壁境界: 壁境界上では速度はゼロとなります。壁境界条件は黒色で定義されます。
2. 流入境界: 流入境界の流速は grid.txt にて定義されます。2 つまでの異なる流入境界条件を用いることが出来ます (青と赤で区別)。これらの流入境界条件はシミュレーションドメインの端でのみ有効です (それ以外は無視される)。
3. 移動境界: 移動境界は一定速度で移動する壁のことを意味します。温度を指定することも出来ます (しなくても可)。移動速度、温度、再現などは grid.txt で指定できます。緑色で定義します。
4. 流出境界: その他の境界は流出境界となります。

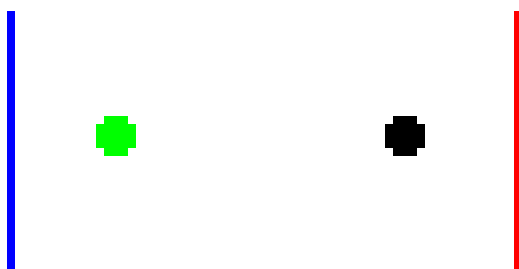


Figure 3: bc1.bmp. 64 × 32 pixels.

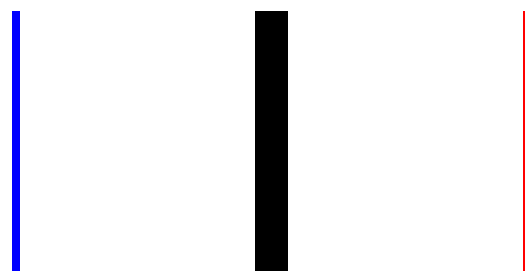


Figure 4: bc2.bmp. 64 × 32 pixels.

6.2 bc2.bmp (Fig. 4)

bc2.bmp は主にスカラー (c , ξ 及び Y_α などの化学反応の割合、温度やインクの量) に関する境界条件を指定します。flowsquare で用いられるスカラーはインクの質量分率 (非反応ケース) 反応進行変数, c (予混合燃焼ケース) そして mixture fraction, ξ (非予混合燃焼ケース) となります。

1. 固定: 青、赤で示された位置にはシミュレーション中、スカラーの値は固定されます。青色は grid.txt の `scalar1`、赤色は `scalar2` の値に対応します。通常, `scalar1=0` は未燃ガス (予混合燃焼) または酸化剤流路 (非予混合モード), そして, 赤色は `scalar2=1` 既燃ガス (予混合モード) または燃料流路 (非予混合反応モード) に対応します。bc1.bmp と異なり、シミュレーションドメインのどの場所でも用いることが出来ます。
2. 初期のみ: 黒色は初期条件として `scalar2` に対応する値を与えます。これは主に着火などに用いることが出来ます。
3. 空気: 空気を流入させることが出来ます (予混合モードのみ)。空気を流入させる境界はシミュレーションドメインの端のみで定義でき、色は緑となります。

他の場所での初期条件は `scalar1` の温度、スカラー密度となります。

6.3 bg.bmp (Fig. 5)

bg.bmp を用いることで、シミュレーション画面に背景を挿入することが出来ます。Pink 色 (RGB:255, 0, 255) は背景画像にウィンド



Figure 5: bg.bmp. (64 × box) × (32 × box) pixels.

ウセクションを設ける際に使います。このウィンドウセクションには一つ前に表示した可視化のデータが表示され続けます。bg.bmp のピクセルサイズは $(nx \cdot box) \times (ny \cdot box)$ である必要があります。ここで、box は grid.txt で指定される、位置格子点の表示ピクセルサイズです。

7 コントロールファイル - grid.txt -

grid.txt では全てのパラメータを設定できます。

Appendix 1 は典型的な grid.txt の例を示します。grid.txt の 1 行は:

```
01:nx    64    // no. grid points
```

のような形式となっています。初めのブロックは '01:nx' で、これはパラメータの番号と名前を示します (変更不可)。二番目のブロックは '64' であり、この値をユーザーが変更します。最後のブロックは '// no. grid points' であり、ユーザーが任意に変更できます。ただし最初のダブルスラッシュ('//') は変更できません。また、13個のセパレーター '—' を削除することも出来ません。

以下に各パラメーターの説明をします。SI 単位 (m, s, kg, J, K) が用いられています。

1. **nx**: x -方向の格子点数.
2. **ny**: y -方向の格子点数.
3. **box**: 1 格子点数の表示ピクセルサイズ.
4. **lx**: x -方向の物理長さ (メートル).
5. **ly**: y -方向の物理長さ (メートル).
6. **sts**: スタート/リスタートタイムステップ. 新規シミュレーションは 0.
7. **latts**: ラストタイムステップ.
8. **cflfac**: CFL 条件に関する係数. 通常は 10 ~ 30. 大きい程計算時間がかかる.
9. **nfil**: 空間フィルターを施すインターバルタイムステップ (Sec. 2.4).
10. **wfil**: 空間フィルターに関する緩和パラメーター (Sec. 2.4). $0 \leq wfil \leq 1$.
11. **perikey**: 周期境界条件の決定. 0: 周期境界なし. 1: x -方向のみ周期境界. 2: y -方向のみ周期. 3: 全方向周期.
12. **pin**: 圧力. 通常は $1.0\text{E}+05$ [Pa].
13. **uin1**: 流入速度の x -方向成分 (**inflow1**) (青で指定した境界条件、Sec. 6.1.).
14. **vin1**: 流入速度の y -方向成分 (**inflow1**) (青で指定した境界条件、Sec. 6.1.).
15. **uin2**: 流入速度の x -方向成分 (**inflow2**) (赤で指定した境界条件、Sec. 6.1.).
16. **vin2**: 流入速度の y -方向成分 (**inflow2**) (赤で指定した境界条件、Sec. 6.1.).
17. **scalar1**: スカラーの境界条件 **scalar inflow1** (青で指定したスカラー境界、Sec. 6.2). 予混合 / 非予混合反応モードの場合 $0 < \text{scalar1} < 1$.
このスカラーは非反応モードの場合インクなどの質量分率, 予混合反応の場合, 反応進行変数, c そして, 非予混合反応モードの場合, mixture fraction, ξ . 予混合反応モードの場合, 0 を入力 (temer1 から自動で計算される).
18. **temper1**: **scalar inflow1** の温度. 予混合反応モードの場合, $T_u < \text{temper1} < T_b$.
19. **scalar2**: スカラーの境界条件 **scalar inflow2** (赤で指定したスカラー境界、Sec. 6.2). 予混合 / 非予混合反応モードの場合 $0 < \text{scalar2} < 1$.
このスカラーは非反応モードの場合インクなどの質量分率, 予混合反応の場合, 反応進行変数, c そして, 非予混合反応モードの場合, mixture fraction, ξ . 予混合反応モードの場合, 0 を入力 (temer2 から自動で計算される).
20. **temper2**: **scalar inflow2** の温度. 予混合反応モードの場合, $T_u < \text{temper2} < T_b$.
21. **imv**: 移動境界の周期性. 0: 周期なし (一度境界から外へ出ていってしまったら、そのまま). 1: 周期あり.
22. **mbu**: 移動境界の x -方向速度成分.
23. **mbv**: 移動境界の y -方向速度成分.
24. **mbt**: 移動境界の温度. 周辺流体によって温度変化する場合は 0 を入力.
25. **gfx**: 密度差による外力。 x -方向 (unit: m/s^2)
26. **gfy**: 密度差による外力。 y -d 方向 (unit: m/s^2). e.g. 下向き重力の場合 $\text{gfx} = 0$, $\text{gfy} = -9.8$.
27. **dref**: リファレンス密度, ρ_∞ . 1: 最大値, 2: 中間値, 3: 最小値、の密度をリファレンスとして使用.
28. **mu**: 粘性係数, μ (Unit: $\text{kg/m} \cdot \text{s}$). e.g. 水@300 K: $8.94\text{E}-4$, and 空気@300 K: $18.6\text{E}-6$.
29. **R**: 気体定数 (Unit: $\text{J/kg} \cdot \text{K}$). e.g. 空気: 286.9 .
30. **diff**: 物質, 温度の拡散係数. e.g. 空気@300K: $\sim 20.0\text{E}-6$, 水@300K: $2.0\text{E}-9 \sim 10.0\text{E}-9$.
31. **Tu**: 未燃ガス温度 (予混合モードの場合のみ有効).

32. **Tb**: 火炎温度。Tb ~ 2000.
33. **cmode**: シミュレーションモード。0: 非反応性流体 (一定温度・密度), 1: 予混合反応モード, 2: 非予混合反応モード.
34. **k**: 予混合反応モードの反応に関するパラメター (Eq. (14) 参照)
35. **Ta**: 予混合反応モードの反応に関するパラメター (Eq. (14) 参照)
36. **n**: 予混合反応モードの反応に関するパラメター (Eq. (14) 参照)
37. **cF**: 火炎面の位置に対応する反応進行変数の値 (通常は 0.5, 予混合反応モード)
38. **dummy** ダミーパラメター (利用しない)
39. **Xst**: 火炎面の位置に対応する mixture fraction (通常, ξ_{st} と同値, Eq. (26) 参照, 非予混合モード).
40. **sigma**: 温度・密度計算に関する緩和パラメター。理想的には 1 が望ましいが、空間分解能が少ない場合、0.2-0.5 が最適。 $0 \leq \sigma \leq 1$.
41. **nfig**: 画像出力のインターバルタイムステップ。
42. **nfile**: 中間ファイル (dump file) 出力のインターバルタイムステップ。
43. **bcdisp**: 0: 境界条件を非表示。1: 表示。
44. **idisp**: カラー表示の物理量の種類。0: 無し/背景画像 (Sec. 6.3), 1: ρ , 2: u , 3: v , 4: $|u|$, 5: 渦度, 6: 温度, 7: 反応速度, 8: スカラー, 9: 圧力。
45. **cmax**: 上記 idisp で指定した物理量のカラスケールの最大値 (0: 自動計算)
46. **cmin**: 上記 idisp で指定した物理量のカラスケールの最小値 (0: 自動計算)
47. **icolor**: カラーテーブル。 0: Jet, 1: Rainbow, 2: Nishiki, 3: Gray, 4: Gray (inverted), 5: Hot.
48. **icont**: 等値線の表示/非表示。0: off, 1: black, 2: red, 3: green, 4: blue, 5: white.
49. **linewidth**: 等値線の線の太さ。 (1, 3, 5, 7 pixels)
50. **ivec**: 速度ベクトル表示と色。0: off, 1: black, 2: red, 3: green, 4: blue, 5: white.
51. **ndiv**: ベクトル表示のグリッド間隔 (ndiv \geq 1).
52. **vecsize**: ベクトル矢印のサイズ (pixels).
53. **lagkey**: トレーサー粒子のオンオフ。0: off, 1c: 左から粒子が流入, 2c: 下から流入, 3c: 左右から流入, 4c: 上下から流入。c=0: black, 1: white. 例: lagkey=10, (粒子の色が黒で左から流入の場合)。
54. **nlagra**: トレーサー粒子分布をリセットするタイムステップのインターバル。Always \geq 1.
55. **npart**: 粒子の数。Always \geq 1.
56. **omega**: ポアソン方程式を解く際の緩和パラメター。通常は 1.8。複雑な場合、0 に近い数が好ましい (Sec. 2.2)。
57. **wdrho**: Eq. (6) に示される w_d 。 $w_d = 1$ が正しいが、初期条件の影響が残っている場合、0 に近いと計算がスムーズになりやすい。 $0 \leq wdrho \leq 1$.
58. **peps**: 収束条件。Sec. 2.2 参照。
59. **loopmax**: 収束計算の最大回数。Sec. 2.2 参照。loopmax が peps より優先される。
60. **wait**: ウェイトタイマー。通常は 0。1 以上で計算中の PC のアイドル時間が増える (が計算は遅くなる)。

8 キーボード操作

キーボード操作について説明します。

- 1: ρ .
- 2: u .
- 3: v .
- 4: 流束 ($\sqrt{u^2 + v^2}$).
- 5: 渦度.

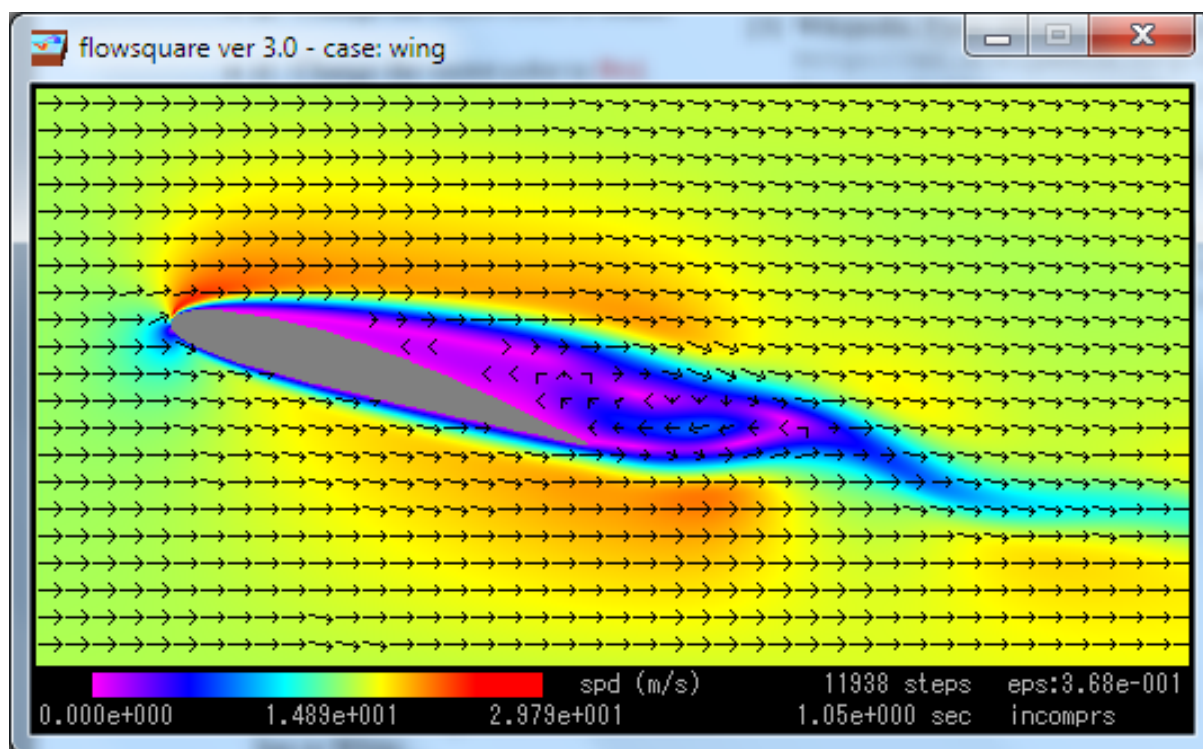


Figure 6: Flowsquare display during simulation.

- 6: 温度.
- 7: 反応速度 (予混合モードのみ).
- 8: スカラー (質量分率 (非反応モード), 反応進行変数 (予混合反応モード)、mixutre fraction (非予混合反応モード)).
- 9: 圧力.
- 0: 黒背景/背景画像. 前に指定された物理量が、引き続き bg.bmp のピンク色で指定した領域から可視化される。(Sec. 6.3).
- k: ベクトルの色を黒に変更.
- r: ベクトルの色を赤に変更.
- g: ベクトルの色を緑に変更.
- b: ベクトルの色を青に変更.
- w: ベクトルの色を城に変更.
- Shift + k: 等値線の色を黒に変更.
- Shift + r: 等値線の色を赤に変更.
- Shift + g: 等値線の色を緑に変更.
- Shift + b: 等値線の色を青に変更.
- Shift + w: 等値線の色を白に変更.
- ↑: ベクトル表示.
- ↓: ベクトル非表示.
- →: 等値線表示.
- ←: 等値線非表示.
- Shift + ↑: トレーサー粒子表示.
- Shift + ↓: トレーサー粒子非表示.
- Shift + →: 粒子の色を黒へ変更.
- Shift + ←: 粒子の色を白へ変更.
- Shift + 0: カラーテーブルを Jet (blue-red; default) に変更.
- Shift + 1: カラーテーブルを Rainbow (purple-red) に変更.
- Shift + 2: カラーテーブルを Nishiki (blue-white-red) に変更.

- **Shift + 3** : カラーテーブルを Gray に変更.
- **Shift + 4** : カラーテーブルを Gray (inverted) に変更.
- **Shift + 5** : カラーテーブルを Hot (black-red-yellow-white) に変更.
- **Shift + 6** : カラーテーブルを Sea (black-blue-light blue-white) に変更.
- **Shift + 7** : カラーテーブルを Leaf (black-green-yellow-white) に変更.
- **ESC** : シミュレーションの一時停止/再開.

[5] Wikipedia, Successive over-relaxation,
http://en.wikipedia.org/wiki/Successive_over-relaxation

9 ディスプレイ表示

図6は典型的なシミュレーション最中のディスプレイを示しています。カラーバー下の3つの数字は、左から表示されている物理量の、最小値、中間値、最大値を示しています。もし、grid.txt で cmin と cmax にゼロ以外の値を指定すれば、これらの値は、cmin, (cmin+cmax)/2, cmax となります。

表示されている物理量は、カラーバー左の文字によって確認出来ます。現在のタイムステップ、物理時間 (time step $\times \Delta t$) はその横に表示されます。eps はポアソン方程式の収束計算の際の $\phi^{n+1} - \phi^n$ の最大値を示しています (Sec. 2.2 参照)。現在のシミュレーションモードは、incomprs, premixed, non-prmx として表示され、それらはそれぞれ非反応, 予混合反応, 非予混合反応モードを示しています。

References

- [1] Poinso, T. and Veynante, D. (2005) Theoretical and numerical combustion. R.T. Edwards, Inc.
- [2] Cant, R. S. and Mastorakos, E. (2008) An introduction to turbulent reacting flow. Imperial College Press.
- [3] Wikipedia, Finite difference coefficient,
http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_coefficients
- [4] Wikipedia, Euler method,
http://en.wikipedia.org/wiki/Euler_method

Appendix 1

コントロールファイル (grid.txt) のサンプル

```
----- Control file for flowsquare ver 3.1 -----
----- General Control Data -----
01:nx          128 // No. grid points
02:ny          64 // No. grid points
03:box         4  // Pixel size of one grid point
04:lx         0.20 // Domain x-size
05:ly         0.10 // Domain y-size
06:sts         0  // Start time step (new simulation starts from 0)
07:latts      30000 // End time step
08:cflfac     20.0 // Delta t factor (typically 10-20)
09:nfil        1  // Interval time steps for filtering (typically 1)
10:wfil       0.05 // Relaxation parameter for filtering (less is better)
----- General Boundary Data -----
11:perikey      0  // 0: no peri, 1: x-peri, 2: y-peri, 3: all peri
12:pin       1.0E+05 // Pressure (1 bar = 1.0E+05 Pa)
13:uin1        5.0 // u for inlet1 (blue)
14:vin1        0.0 // v for inlet1
15:uin2        5.0 // u for inlet2 (red)
16:vin2        0.0 // v for inlet2
----- Scalar Boundary Data -----
17:scalar1     0.0 // Scalar1 (blue, 0.0 for cmode=1)
18:temper1    700.0 // Scalar1 temperature
19:scalar2     0.0 // Scalar2 (red, 0.0 for cmode=1)
20:temper2   2000.0 // Scalar2 temperature
----- Moving Boundary -----
21:imv         0  // 0:off,1:periodic
22:mbu         0.0 // u of moving boundary
23:mbv         0.0 // v of moving boundary
24:mbt         0.0 // Temperature of moving boundary, (0: free)
----- Body Force -----
25:gfx         0.0 // x-body force
26:gfy         0.0 // y-body force
27:dref        1  // Reference density. 1:max, 2:middle, 3:min density as ref
----- Trans, Thermo, Chemical -----
28:mu         2.0E-05 // Dynamic viscosity of mixture
29:R          286.9 // Specific gas constant
30:diff       4.0E-04 // Diffusivity of mixture
31:Tu         700.0 // Unburnt temperature (for premix)
32:Tb        2000.0 // Burnt temperature
33:cmode       1  // Reaction mode, 0: non-reac, 1:premixed, 2:non-premixed
```

```

----- Premixed Reacting Flow (cmode=1) -----
34:k      6.0E+07 // Rate onstant
35:Ta     10000.0 // Activation temperature
36:n      -0.5   // Rate = rho*k*exp(-Ta/T)*T^n
37:cF     0.5    // Flame location (c base)
38:dummy   0     // Dummy, not in use
----- Non-Premixed Reacting Flow (cmode=2) -----
39:Xst     0.0   // Stoichiometric mixture fraction
40:sigma   0.0   // Relaxation parameter for temperature calculation
----- Display & Output -----
41:nfig    500   // Interval time steps for figure output
42:nfile   1000  // Interval time steps for dump file output
43:bcdisp  1     // Display wall boundary (0:off, 1:on)
44:idisp   6     // 0:off,1:rho,2:u,3:v,4:spd,5:vrt,6:T,7:rate,8:c/xi,9:P
45:cmax    0.0   // Scale (max) 0.0 for auto
46:cmin    0.0   // Scale (min) 0.0 for auto
47:icolor  0     // 0:Jet,1:Rainbow,2:Nishiki,3:Gray,4:Gray(inv),5:Hot
48:icont   1     // Contour line (0:off,1:blk,2:red,3:grn,4:bl,5:wht)
49:linewidth 5 // Line width of contour line (1, 3, 5 or 7)
50:ivec    1     // Velocity vector (0:off,1:blk,2:red,3:grn,4:bl,5:wht)
51:ndiv    3     // Interval grid points between displayed vectors (>=1)
52:vecsize 2     // Pixel size of vector arrow
----- Lagrangian Trajectory -----
53:lagkey  0     //0:off,1c:x, 2c:y,3c:x-x,4c:y-y,c=0:black, 1:white.
54:nlagra  40000 // Interval time steps of restart (>=1)
55:npart   10000 // No. particle (>=1)
----- Poisson Equation -----
56:omega   0.1   // Relaxation parameter
57:wdrho   1.0   // Factor for d(rho)/dt (0<=wdrho<=1.0)
58:peps    1.0E-4 // Convergence limit
59:loopmax  500  // Maximum no. of iteration
----- Others -----
60:wait    0     // Wait time
-----
#End of file

```