OpenFOAM ノート

春日 悠

2015 年 10 月 17 日

目次

1　はじめに

この文書は OpenFOAM についてのノートである．

2　熱流体の支配方程式

2.1　圧縮性と非圧縮性

流体を数学的に取り扱う場合，密度変化の小さな流体を非圧縮性流体 (incompressible fluid) として扱う．一方，密度変化を無視できない場合は圧縮性流体 (compressible fluid) とする．一般的に，速度がマッハ数 0.3 以下 (密度変化が 5 %以下) であれば非圧縮性流体とみなされる．

OpenFOAM では，温度を扱う場合は一般に圧縮性流体として扱われる．熱物性 (thermophysical properties) を扱えるのは圧縮性流体ソルバーだけである．

2.2　連続の式

連続の式 (質量保存の式) は次式で表される．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{u}$ は速度，ρ は密度である．定常状態では時間微分項が省かれる．非圧縮性流体の場合は

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{2}$$

2.3　運動方程式

運動方程式 (ナビエ・ストークス方程式) は次式で表される．

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu\{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\}\right] - \nabla \left(\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \boldsymbol{u}\right) \tag{3}$$

ここで，μ は粘性係数である．

OpenFOAM の圧縮性流体ソルバーでは，次式が解かれる．

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot \left[\mu \left\{(\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{2}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u} I\right\}\right] \tag{4}$$

右辺第 2 項はラプラス演算子とみなされる．右辺第 3 項の発散の中は，速度勾配の転置の偏差テンソルのようなものとして表現され (偏差テンソルの場合は係数が 2/3 ではなく 1/3)，陽的に計算される．定常の場合は時間微分項が省かれる．

非圧縮性流体ソルバーでは，次式が解かれる．

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot \left[\nu \left\{(\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{1}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u} I\right\}\right] \tag{5}$$

ここで，p は密度で割られた圧力である (出力もこのままなので，評価の際には注意が必要)．ν は動粘性係数である．右辺第 3 項の発散の中は，速度勾配の転置の偏差テンソルとして表され，陽的に計算される．

右辺第 3 項はなぜこの形でよいのか？次のようなことか．粘性係数を一定とみなすと

$$\nabla \cdot \left[\mu \left\{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\right\}\right] - \nabla \left(\frac{2}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u} I\right) = \mu \nabla^2 \boldsymbol{u} + \frac{1}{3}\mu \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \tag{6}$$

連続の式から左辺第 2 項を無視し (ただし右辺第 2 項は残す)，変形すると

$$\mu \nabla^2 \boldsymbol{u} = \mu \nabla^2 \boldsymbol{u} + \mu \nabla \cdot (\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{1}{3}\mu \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \tag{7}$$

式 (6) で右辺第 2 項を無視した上で上式を代入すると

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mu \nabla \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot \left[\mu \left\{(\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{2}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u} I\right\}\right] = \\ \nabla \cdot (\mu \nabla \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot \left[\mu \left\{(\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{1}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{u} I\right\}\right] \end{aligned} \tag{8}$$

連続の式が満たされれば右辺第 2 項は消えるので，これで問題ないと思うが，左辺の形のままで解いてもよいのでは？また，粘性係数が一定でない乱流解析でもこの方法を使ってもよいのか？

2.4 エネルギー方程式

単位質量当たりの全エネルギー E の方程式は，次式で表される．

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot (p \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{9}$$

ここで，k は熱伝導率，T は絶対温度である．ここでは応力と重力の項は無視した．

全エネルギー E は，単位質量当たりの内部エネルギー e と運動エネルギー K の和で表される．

$$E = e + K \tag{10}$$

運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2}\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \tag{11}$$

式 (9) を内部エネルギーと運動エネルギーで表すと

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot (\rho e \boldsymbol{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot (p \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{12}$$

単位質量当たりのエンタルピー h を

$$h = e + \frac{p}{\rho} \tag{13}$$

とすると，式 (12) は

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho h \boldsymbol{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \boldsymbol{u}) = \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{14}$$

エンタルピー h は，定圧比熱を c_p として

$$h = h_a - h_0 = \int_{T_0}^{T} c_p dT \tag{15}$$

ここで h_a は絶対エンタルピー，h_0 は温度が T_0 のときのエンタルピーで，一般的には $T_0 = 293.15$ とした標準生成エンタルピーが用いられる．

比熱が一定の場合，h は次式で表される．

$$h = c_p(T - T_0) \tag{16}$$

これを式 (14) に代入し，密度を一定して，運動量の項と圧力の項を無視すると，次式が得られる．

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\boldsymbol{u}) = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) \tag{17}$$

ここで $\alpha = k/(\rho c_p)$ は熱拡散率である．

OpenFOAM の圧縮性流体ソルバーでは，設定によって式 (12) あるいは式 (14) が解かれる．温度の拡散項は次式で表される．

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = \nabla \cdot (\alpha \nabla e) = \nabla \cdot (\alpha \nabla h) \tag{18}$$

ここで $\alpha = k/c_p$ は熱拡散率に密度をかけたものである．

浮力を扱うために Boussinesq 近似を用いる場合は，流体は非圧縮性流体として扱われ，温度は式 (17) から求められる．

2.5　状態方程式

圧縮性流体においては，密度を求めるために状態方程式 (equation of state) を用いる必要がある．流体が気体の場合は，理想気体 (ideal gas，完全気体 perfect gas ともいう) の状態方程式が用いられることが多い．

$$\rho = \frac{pW}{RT} \tag{19}$$

ここで，W は分子量 [kg/mol]，R は気体定数 [J/mol-K] である．

OpenFOAM の場合、分子量を W [kg/kmol] とし，気体定数の 1000 倍を RR [J/kmol-K]，気体定数を分子量で割ったものを R [J/kg-K] で表している．この場合，密度は次式で表される．

$$\rho = \frac{p}{RT} \tag{20}$$

液体の場合は，密度を多項式などで表す．

OpenFOAM の熱物性には rho (ρ) 型と psi (ψ) 型がある．rho 型では密度を直接求めるが，psi 型では圧縮率 $\psi = \rho/p$ に圧力をかけて密度を求める．psi 型で理想気体の状態方程式を用いる場合，圧縮率は $\psi = 1/RT$ である．

2.6 浮力の扱い

浮力を考慮するには，重力を考慮する必要がある．

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu\{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\}\right] - \nabla \left(\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \boldsymbol{u}\right) + \rho \boldsymbol{g} \tag{21}$$

ここで，$\boldsymbol{g}$ は重力加速度である．

OpenFOAM では，圧力勾配と重力の項を次のように扱う．

$$\begin{aligned} -\nabla p + \rho \boldsymbol{g} &= -\nabla(p - \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x} + \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x}) + \rho \boldsymbol{g} \\ &= -\nabla(p - \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x} \nabla \rho - \rho \boldsymbol{g} + \rho \boldsymbol{g} \\ &= -\nabla p_{rgh} - \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x} \nabla \rho \end{aligned} \tag{22}$$

$p_{rgh} = p - \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x}$ を圧力 p の代わりに求める．p は $p = p_{rgh} + \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x}$ から計算する．

密度変化を無視できる場合，基準密度を ρ_0，基準温度を T_0，体積膨張率を β として，密度を次式で表すことができる．

$$\rho = \{1 - \beta(T - T_0)\}\rho_0 \tag{23}$$

この近似は Boussinesq 近似と呼ばれる．密度変化を無視できるため，非圧縮性流体とみなすことができ，運動方程式は次式のように表すことができる．

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\nu\{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\}\right] + \frac{\rho}{\rho_0}\boldsymbol{g} \tag{24}$$

p は密度で割られた圧力である．Boussinesq 近似を用いた圧力勾配と重力の項は，$\rho_k = 1 - \beta(T - T_0)$ として

$$-\nabla p + \frac{\rho}{\rho_0}\boldsymbol{g} = -\nabla p_{rgh} - \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x} \nabla \rho_k \tag{25}$$

ここで $p_{rgh} = p - \rho_k \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{x}$ である．

2.7 乱流の効果

乱流解析では，乱流モデルの方程式とともに，平均化された運動方程式やエネルギー式などが解かれる．それらは形式的にはもとの方程式と同じ形をしており，乱流の効果は粘性係数や熱拡散率に乱流の成分を足しこむことで表現される．乱流を考慮した運動方程式およびエネルギー方程式は，以下のように表される．

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu_{eff}\{\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\}\right] - \nabla \left(\frac{2}{3}\mu_{eff} \nabla \cdot \boldsymbol{u}\right) \tag{26}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho h \boldsymbol{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \boldsymbol{u}) = \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{eff} \nabla h) \tag{27}$$

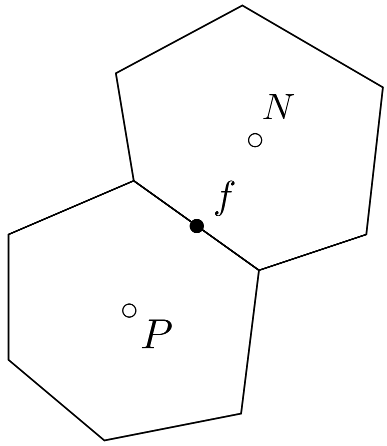

図 1: セル

ここで，$\mu_{eff} = \mu + \mu_t$，$\alpha_{eff} = \alpha + \alpha_t$ であり，μ_t は乱流粘性係数，α_t は乱流熱拡散率である．

μ_t は乱流モデルによるが，k-ε モデルであれば

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{28}$$

ここで $C_\mu = 0.09$ である．

α_t については，乱流拡散係数から

$$\alpha_t = \frac{\mu_t}{Pr_t} \tag{29}$$

ここで Pr_t は乱流プラントル数で，値は経験的に 0.85 が用いられる．

化学種輸送方程式の拡散係数としては，OpenFOAM では乱流粘性係数がそのまま用いられる．

3　有限体積法による離散化

OpenFOAM では，偏微分方程式の離散化手法として主に有限体積法が用いられている．有限体積法は，コントロールボリューム法とも呼ばれ，連続体の偏微分方程式を離散化して解く手法の一つである．連続体をコントロールボリュームあるいはセルとも呼ばれる多面体で分割し，方程式をセルの体積積分の形で表す (図 1).

離散点をセルの中心に置き，セル内部の値をセル中心の値で代表させる．P は注目セルの中心の点，N は隣接セルの中心の点、f は注目セルと隣接セルが共有する面の中心の点である．これらの点における値をそれぞれ P，N，f という添字で表す．たとえば，それぞれの点の位置を $\boldsymbol{x}_P$，$\boldsymbol{x}_N$，$\boldsymbol{x}_f$ のように表す．

たとえば，次のようなスカラー輸送方程式を考える．

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot (k \nabla \phi) + S \tag{30}$$

ここで ρ は密度，$\boldsymbol{u}$ は流速ベクトル，k は拡散係数，S はソース項である．これを有限体積法で離散化する．まず，方程式をセルにおいて積分する．

$$\int \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int \nabla \cdot (\rho \phi \boldsymbol{u}) dV = \int \nabla \cdot (k \nabla \phi) dV + \int S dV \tag{31}$$

これは次式のように書ける．

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} V_P + \int \nabla \cdot (\rho \phi \boldsymbol{u}) dV = \int \nabla \cdot (k \nabla \phi) dV + S V_P \tag{32}$$

ここで，V_P は注目セルの体積である．時間微分は差分法で離散化するとして，空間微分の離散化について考える．

発散は，ガウスの発散定理により次のように表す．

$$\int \nabla \cdot (\phi \boldsymbol{u}) dV = \int (\phi \boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{n} dS = \sum \phi_f \boldsymbol{u}_f \cdot \boldsymbol{S}_f \tag{33}$$

ここで，$\boldsymbol{n}$ は領域表面の法線ベクトルを表す．$\boldsymbol{S}_f$ はセルを構成するそれぞれの面について垂直でそれぞれの面積を大きさとして持つベクトル (面積ベクトル) である．

ラプラシアンについても同様である．

$$\int \nabla \cdot (k \nabla \phi) dV = \int (k \nabla \phi) \cdot \boldsymbol{n} dS = \sum k_f (\nabla \phi)_f \cdot \boldsymbol{S}_f \tag{34}$$

勾配についても同様の考え方で

$$\int \nabla \phi dV = \int \phi \boldsymbol{n} dS = \sum \phi_f \boldsymbol{S}_f \tag{35}$$

さて，ここで未知なのは ϕ_f や $(\nabla \phi)_f$ といった面中心の値である．これらの表しかたで離散化の精度が決まる．これらの補間や離散化の方法のことを，補間スキーム (interpolation scheme) とか離散化スキーム (discretization scheme) などという．ϕ_f を次式で表す．

$$\phi_f = w \phi_P + (1 - w) \phi_N \tag{36}$$

ここで w は 重みで，線形補間を考えた場合，w は Nf 間の距離と PN 間の距離の比で表される．

$$w = \frac{|\boldsymbol{x}_f - \boldsymbol{x}_N|}{|\boldsymbol{x}_N - \boldsymbol{x}_P|} \tag{37}$$

線形補間は差分法で言うところの中心差分に当たり，対流項で使うには問題がある．対流項には次の風上差分スキームなどを用いる．

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & (\boldsymbol{u}_f \cdot \boldsymbol{S}_f \geq 0) \\ \phi_N & (\boldsymbol{u}_f \cdot \boldsymbol{S}_f < 0) \end{cases} \tag{38}$$

面中心の勾配 $(\nabla\phi)_f$ については，$(\nabla\phi)_f \cdot \boldsymbol{S}_f$ の形で面の法線方向の勾配として離散化する．

$$(\nabla\phi)_f \cdot \boldsymbol{S}_f = \frac{\phi_N - \phi_P}{|\boldsymbol{x}_N - \boldsymbol{x}_P|}|\boldsymbol{S}_f| \tag{39}$$

以上の方法で方程式 (30) を離散化すると，一般に次のような形で表せる．

$$A_P\phi_P + \sum A_N\phi_N = b \tag{40}$$

ここで A_P，A_N は代数方程式の係数行列に相当するもの，b は代数方程式の右辺に相当するものである．これを全セルで合成すると，偏微分方程式に対応した代数方程式ができる．

4　圧力-速度連成

4.1　圧力方程式

運動方程式を半離散化すると，次式のように表される．

$$A_P\boldsymbol{u}_P + \sum A_N\boldsymbol{u}_N = -\nabla p \tag{41}$$

ここで A は係数で，添え字の P は注目セルを，N は注目セルの隣接セルを表す．

OpenFOAM では，右辺を除いて

$$A_P\boldsymbol{u}_P + \sum A_N\boldsymbol{u}_N = 0 \tag{42}$$

として，これを次式のように表す．

$$A\boldsymbol{u} = H \tag{43}$$

これより運動方程式は

$$A\boldsymbol{u} = H - \nabla p \tag{44}$$

速度は次のように書ける．

$$\boldsymbol{u} = \frac{H}{A} - \frac{1}{A}\nabla p \tag{45}$$

これを連続の式 (1) に代入すると

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\frac{\rho}{A}H - \frac{\rho}{A}\nabla p\right) = 0 \tag{46}$$

したがって

$$\nabla\cdot\left(\frac{\rho}{A}\nabla p\right) = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\frac{\rho}{A}H\right) \tag{47}$$

定常の場合は右辺の時間微分項が省かれる．非圧縮性流体の場合は

$$\nabla\cdot\left(\frac{1}{A}\nabla p\right) = \nabla\cdot\left(\frac{H}{A}\right) \tag{48}$$

上記の圧力方程式を解いて求まった圧力から，式 (45) により新しい速度が求まる．

4.2 SIMPLE 法

OpenFOAM の定常解析ソルバーでは，圧力-速度連成手法として SIMPLE 法が用いられている．一般的である Patankar による形式 [1] とは異なり、いくぶん単純である．計算手順は以下の通りである．

1. 運動方程式 (44) を解き，速度を求める．
2. 圧力方程式 (47) あるいは (48) を解き，圧力を求める．
3. 式 (45) により速度を更新する．

以上の手順を残差が小さくなるまで繰り返す．

4.3 SIMPLEC 法

OpenFOAM の一部のソルバーで SIMPLEC 法が用いられている．SIMPLEC 法の計算では $\sum A_N$ が必要になるが，OpenFOAM では方程式の H1 関数で取得できる．方程式は少し異なるが，手順は SIMPLE 法と同様である．

4.4 PISO 法

OpenFOAM の非定常解析ソルバーの一部では PISO 法が用いられている．OpenFOAM の形式では，計算手順は以下の通りである．

1. 運動方程式 (44) を解き，速度を求める．
2. 圧力方程式 (47) あるいは (48) を解き，圧力を求める．
3. 式 (45) により速度を更新する．
4. 上記の圧力の計算および速度の更新を指定回数だけ繰り返す (通常は 2 回).

以上の手順を必要な時間ステップ分繰り返す．

4.5 PIMPLE 法

OpenFOAM の非定常解析ソルバーでは PISO 法と SIMPLE 法を組み合わせた “PIMPLE 法” が用いられている．これは時間ステップの間に SIMPLE 法のループを入れたものである．

1. 運動方程式 (44) を解き，速度を求める．
2. 圧力方程式 (47) あるいは (48) を解き，圧力を求める．

3. 式 (45) により速度を更新する．

4. 上記の圧力の計算および速度の更新を指定回数だけ繰り返す (通常は 2 回)．

5. 以上の手順を残差が小さくなるまで繰り返す．

以上の手順を必要な時間ステップ分繰り返す．

4.6 圧力振動の回避

速度と圧力の値を同じ位置で持つコロケート格子 (co-locate grid) では，圧力振動が起こることが知られている．これを避けるために，速度と圧力の値を持つ位置をずらしたスタッガード格子 (staggered grid) を用いる方法があるが，コロケート格子を用いる方法として Rhie and Chow による方法 [2] がある．OpenFOAM では，コロケート格子を用いるために後者の方法が採用されている．

圧力振動は，圧力勾配の離散化の方法から生じる．セル界面に補間された速度 $\boldsymbol{u}_f$ は，式 (45) から次式で表される．

$$\boldsymbol{u}_f = \left(\frac{H}{A}\right)_f - \left(\frac{1}{A}\nabla p\right)_f \tag{49}$$

Rhi and Chow の方法では，上式を次式のように修正する．

$$\boldsymbol{u}_f = \left(\frac{H}{A}\right)_f - \left(\frac{1}{A}\right)_f (\nabla p)_f \tag{50}$$

これにより新たな項が加えられたことになるが，その項が圧力振動を抑制する働きをする．

OpenFOAM では，上の式を流束 ϕ として表現している．ここで流束 ϕ は，セル界面の面積ベクトルを $\boldsymbol{S}$ として，圧縮性流体ソルバーでは $\phi = \rho\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{S}$，非圧縮性流体ソルバーでは $\phi = \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{S}$ である．OpenFOAM のソルバーにおいて，運動方程式の構築に ϕ が用いられていたり，速度の更新とは別に ϕ が更新されていたりするのは，この Rhie and Chow による補間法を用いているためである．

4.7 流束の修正

OpenFOAM では，流束 ϕ の修正が行われている．修正には 2 つあり，非定常解析における ddtPhiCorr と，質量の出入りのバランスを調整する adjustPhi である．

ddtPhiCorr は，前回の速度 $\boldsymbol{u}$ から計算された流束と，前回の流束 ϕ (これは前々回の速度から計算される) との差を補正するもののようである．非圧縮性流体ソルバーの場合，次のように計算される．

$$\mathrm{ddtPhiCorr} = \left\{1 - \min\left(\frac{\phi_0 - \boldsymbol{u}_0\cdot\boldsymbol{S}}{\phi_0}, 1\right)\right\}\frac{\phi_0 - \boldsymbol{u}_0\cdot\boldsymbol{S}}{A\Delta t} \tag{51}$$

ここで，$\boldsymbol{u}_0$ は前回の速度，ϕ_0 は前回の流束である．ddtPhiCorr の本体は，EulerDdtScheme など時間微分スキームの中で fvcDdtPhiCorr として定義されており，上式の右辺のかっこの中身は ddtScheme の中で fvcDdtPhiCorrCoeff として定義されている．

なぜこんな式なのか，はっきりとはわからないが，次のようなことか．計算上，連続の式は厳密には満たされず，誤差があるはずである．それを考慮してみよう．非圧縮性流体を想定する．運動方程式の半離散化式において，時間微分の項を明示しておく．

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + A\boldsymbol{u} = H - \nabla p \tag{52}$$

これより

$$\boldsymbol{u} = \frac{H}{A} - \frac{1}{A}\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} - \frac{1}{A}\nabla p \tag{53}$$

発散をとると，連続の式から右辺第 2 項は消えるはずである．しかし，計算上は誤差で 0 にならないので，この項を残す．陽的に計算するものとして，後退差分で離散化すると

$$-\frac{1}{A}\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = -\frac{\boldsymbol{u}_0 - \boldsymbol{u}_{00}}{A\Delta t} \tag{54}$$

ここで $\boldsymbol{u}_{00}$ は前々回の速度である．OpenFOAM では，発散の計算には流束を用いるので，流束の形にすると

$$-\frac{\boldsymbol{u}_0 \cdot \boldsymbol{S} - \phi_0}{A\Delta t} = \frac{\phi_0 - \boldsymbol{u}_0 \cdot \boldsymbol{S}}{A\Delta t} \tag{55}$$

これで ddtPhiCorr から係数を除いた項が得られたが，ddtPhiCorr の係数はどこから来たのか？よくわからないが，係数は物理的な項ではなく，計算上の安定化項ではなかろうか．つまり，$\phi_0 - \boldsymbol{u}_0 \cdot \boldsymbol{S}$ が ϕ_0 に比べて小さいときにだけ補正が効くようにしているのではないか．(式 (44) の A と H は時間微分項に由来する項を含んでいるはずで，これに上記の補正を加えると，時間微分項を二重で考慮することになるような気がするが，気にするほどのことではないのか．)

adjustPhi では，質量の出入りの調整が行われる．単純な流れでは，流入質量流量 $\dot{m}_{in}$ と流出質量流量 $\dot{m}_{out}$ は釣り合うが，場合によっては両者は釣り合わず，質量保存のために調整分の質量が流入してくる．それを $\dot{m}_{add}$ とすると

$$\dot{m}_{out} - \dot{m}_{in} - \dot{m}_{add} = 0 \tag{56}$$

でなければならない．実際にはこれでは合わないらしく (境界条件のせいか)，次のような形になる．

$$\dot{m}_{out} - \dot{m}_{in} - \alpha\dot{m}_{add} = 0 \tag{57}$$

ここで

$$\alpha = \frac{\dot{m}_{out} - \dot{m}_{in}}{\dot{m}_{add}} \tag{58}$$

addjustPhi では，$\dot{m}_{add}$ に当たる面の流束に α をかけて流束を調整する．

5　境界条件

5.1　基本境界条件

基本的な境界条件は，値指定条件 (ディリクレ条件) と勾配指定条件 (ノイマン条件) である．OpenFOAM では，それぞれ fixedValue と fixedGradient が対応する．勾配指定条件はゼロ勾配条件としてよく用いられ，OpenFOAM では zeroGradient として別途用意されている．

OpenFOAM では，境界において値 X_b とその勾配 ∇X_b を次のような形で想定しているようである．

$$\begin{aligned} X_b &= a_1 X_P + a_2 \\ \nabla X_b &= b_1 X_P + b_2 \end{aligned} \tag{59}$$

ここで X_P はセル中心の値である．(各係数は fixedValueFvPatchField などの関数 valueInternalCoeffs，valueBoundaryCoeffs，gradientInternalCoeffs，gradientBoundaryCoeffs の返り値にそれぞれ対応する．)

値指定条件の場合，指定された値を $\bar{X}_b$ とすると

$$\begin{aligned} X_b &= \bar{X}_b \\ \nabla X_b &= \frac{\bar{X}_b - X_P}{d} \end{aligned} \tag{60}$$

ここで，d はセル中心から境界までの距離である．各係数は

$$\begin{aligned} a_1 = 0, &\quad a_2 = \bar{X}_b \\ b_1 = -\frac{1}{d}, &\quad b_2 = \frac{\bar{X}_b}{d} \end{aligned} \tag{61}$$

勾配指定条件の場合，指定された勾配を $\overline{\nabla X}_b$ とすると

$$\begin{aligned} X_b &= X_P + \overline{\nabla X}_b d \\ \nabla X_b &= \overline{\nabla X}_b \end{aligned} \tag{62}$$

各係数は

$$\begin{aligned} a_1 = 1, &\quad a_2 = \overline{\nabla X}_b d \\ b_1 = 0, &\quad b_2 = \overline{\nabla X}_b \end{aligned} \tag{63}$$

ゼロ勾配条件の場合

$$\begin{aligned} X_b &= X_P \\ \nabla X_b &= 0 \end{aligned} \tag{64}$$

各係数は

$$\begin{aligned} a_1 = 1, &\quad a_2 = 0 \\ b_1 = 0, &\quad b_2 = 0 \end{aligned} \tag{65}$$

OpenFOAM には，値指定条件と勾配指定条件の混合条件が用意されている (mixedFvPatch)．X_b は次式で表される．

$$X_b = w\bar{X}_b + (1-w)(X_P + \overline{\nabla X}_b d) \tag{66}$$

ここで，w は値指定条件か勾配指定条件かを決める重みである．$w = 1$ であれば値指定条件となり，$w = 0$ であれば勾配指定条件となる．($\bar{X}_b$ は refValue，$\overline{\nabla X}_b$ は refGrad，w は valueFraction に対応する．)

5.2 流入条件

流入速度を指定する場合は，速度は値指定条件，圧力はゼロ勾配条件とする．温度は値指定とする．

流量を指定する条件の場合，指定流量は速度に換算される．流入速度 $\boldsymbol{u}_b$ は，境界の面積を S とすると，体積流量 $\dot{V}$ を指定した場合は

$$\boldsymbol{u}_b = \frac{\dot{V}}{S} \tag{67}$$

質量流量 $\dot{m}$ を指定した場合は

$$\boldsymbol{u}_b = \frac{\dot{m}}{\rho S} \tag{68}$$

で計算される．

圧力を指定する場合は，圧力は値指定条件，速度は圧力から計算する条件とする．圧力から速度を計算する条件として，OpenFOAM では pressureInletOutletVelocity と pressureDirectedInletOutletVelocity がある．これらは流入にも流出にも対応する．流入の場合，前者は近傍セルの速度の面の法線方向成分をとり，後者は指定した方向の成分をとる．混合条件で実装され，pressureInletOutletVelocity の場合，次のように表される．

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{u}}_b &= 0 \\ \overline{\nabla \boldsymbol{u}_b} &= 0 \end{aligned} \tag{69}$$

$\boldsymbol{n}$ を面の法線方向ベクトルとすると，w は ϕ が負なら流入として $w = I - \boldsymbol{nn}$ とし，ϕ が正なら流出として $w = 0$ とする．w がテンソルなのでわかりにくいが，流入速度は次のようになる．

$$\boldsymbol{u}_b = \boldsymbol{nn} \cdot \boldsymbol{u}_P = (\boldsymbol{u}_P \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{n} \tag{70}$$

pressureDirectedInletOutletVelocity の場合は，次のように表される．

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{u}}_b &= \frac{\phi}{(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{v})S}\boldsymbol{v} \\ \overline{\nabla \boldsymbol{u}_b} &= 0 \end{aligned} \tag{71}$$

ここで，ϕ は流束，$\boldsymbol{v}$ は指定された方向ベクトルである．w は ϕ が負なら流入として $w = 1$ とし，ϕ が正なら流出として $w = 0$ とする．

5.3　流出条件

流出条件としては，速度についてはゼロ勾配条件が用いられる．ただし，これは十分に発達した流れを想定することになるため，出口を障害物から十分に離した場所に設定する必要がある．非定常解析では対流流出条件 (Sommerfeld 放射条件)

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + u_n \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial n} = 0 \tag{72}$$

が用いられることもある．ここで u_n は境界面方向の速度，n は境界面方向の座標である．

圧力については値指定条件を用いる．圧力方程式を解くためには，どこかで圧力値を指定する必要があるが，流出条件において指定することが多い。出口のない領域を解く場合は，領域内のどこかに適当な圧力値を設定する必要がある．OpenFOAM では pRefCell，pRefValue の設定がこれに当たる．

温度などのスカラー値は，ゼロ勾配条件あるいは対流流出条件とする．

対流流出条件は，離散化すると次のように表される．

$$\frac{\boldsymbol{u}_b - \boldsymbol{u}_b^0}{\Delta t} + u_n \frac{\boldsymbol{u}_b - \boldsymbol{u}_P}{d} = 0 \tag{73}$$

ここで $\boldsymbol{u}_b^0$ は前時間ステップの $\boldsymbol{u}_b$ である．OpenFOAM では，これを混合条件として表現する．各値は次の通りである．

$$\begin{gathered} \bar{\boldsymbol{u}}_b = \boldsymbol{u}_b^0, \quad \overline{\nabla \boldsymbol{u}}_b = 0 \\ w = \frac{1}{1+\alpha}, \quad \alpha = \frac{u_n \Delta t}{d} \end{gathered} \tag{74}$$

5.4　逆流を考慮した流出条件

流出境界は，速度を指定しない限りは，質量保存によって逆流が起こる可能性がある．あまり望ましいことではないが，あえて逆流を想定する場合は，速度は逆流時に圧力から計算されるような条件とし，圧力は値指定，温度は逆流時の値を指定できる条件を用いる．

OpenFOAM においては，速度については pressureInletOutletVelocity あるいは pressureDirectedInletOutletVelocity を用いればよい．温度については，逆流時の値を指定できる inletOutlet を用いる．

inletOutlet は混合条件で実装される．

$$\begin{aligned} \bar{X}_b &= \bar{X}_b \\ \overline{\nabla X_b} &= 0 \end{aligned} \tag{75}$$

w は ϕ が負なら流入として $w = 1$ とし，ϕ が正なら流出として $w = 0$ とする．

5.5　壁の条件

壁の条件には，固着 (non-slip) 条件とスリップ (slip) 条件がある．前者は壁面で流速を 0 とするもので，壁では通常この条件が使われる．壁で流体がすべって流速が 0 にならない場合は，後者の条件を用いる．圧力についてはゼロ勾配条件とする．温度についてはいくつかの条件がある．

固着条件では，流速は値指定条件で 0 とする．壁が動いている場合は，壁の速度を指定すればよい．スリップ条件では，壁方向の速度勾配を 0 とする．OpenFOAM では slip という条件を用いる．これは対称条件と同じものである．対称条件では，壁の速度 $\boldsymbol{u}_b$ を壁近傍セル速度 $\boldsymbol{u}_P$ から次のように求める．

$$\boldsymbol{u}_b = \boldsymbol{u}_P - (\boldsymbol{u}_P \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{n} \tag{76}$$

OpenFOAM では，次式で計算されている．

$$\boldsymbol{u}_b = \frac{1}{2}\left\{\boldsymbol{u}_P + (I - 2\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{u}_P\right\} \tag{77}$$

圧力については，速度から圧力勾配を求める方法も用いられる．式 (45) から，壁の圧力勾配 ∇p_b は次式で表現できる．

$$\nabla p = H - A\boldsymbol{u} \tag{78}$$

OpenFOAM では fixedFluxPressure がこの条件に当たり，次式のように計算される．

$$\nabla p = \frac{H/A - \phi}{SD_p} \tag{79}$$

ここで $D_p = 1/A$ という変数が要求されており，この条件が使えるのは D_p が定義されたソルバーに限られる．D_p の定義を見ると (buoyantSimpleFoam の pEqn.H など) $D_p = 1/(\rho A)$ となっているので，この条件は，密度分布を扱うためのものか．

温度については，まず値指定条件と勾配指定条件がある．値指定条件はそのまま温度を指定するものである．勾配指定条件は，熱流束の指定に相当する．熱流束は，フーリエの法則から

$$\boldsymbol{q} = -k\nabla T \tag{80}$$

これより，温度勾配は次式で表される．

$$\nabla T = -\frac{1}{k}\boldsymbol{q} \tag{81}$$

断熱条件の場合は，ゼロ勾配条件を用いればよい．また，熱伝達境界条件は次式のように表される．

$$\boldsymbol{q} = -h(T - T_{ext}) \tag{82}$$

ここで h は熱伝達率，T_{ext} は外部温度である．この条件は未知数を含むため，勾配指定条件では与えられず，別途専用の条件を用いる必要がある．

OpenFOAMの場合，熱流束を指定する条件としてturbulentHeatFluxTemperature，compressible:turbulentHeatFluxTemperatureがある．前者は非圧縮性流体ソルバー(Boussinesq近似を用いたソルバー)のものである．熱伝導率を熱拡散率から求めるため，熱物性をもたない非圧縮性流体ソルバーの場合はρc_pの値を別途指定する必要がある．熱伝達境界条件としてはwallHeatTransferがある．

5.6 領域間熱伝達条件

流体と固体の熱伝達のような，領域間熱伝達の場合，界面温度はつぎのように計算できる．

注目セル温度，隣接セル温度，界面温度をそれぞれT_p，T_n，T_bとする．また，注目セルの熱伝導率，隣接セルの熱伝導率をそれぞれk_p，k_nとする．注目セル中心から界面までの距離をd_p，隣接セル中心から界面までの距離をd_nとする．注目セル中心から界面に流れる熱流束q_pは，フーリエの法則より次式で表される．

$$q_p = -k_p \frac{T_b - T_p}{d_p} \tag{83}$$

同様に，界面から隣接セル中心に流れる熱流束q_nは次式で表される．

$$q_n = -k_n \frac{T_n - T_b}{d_p} \tag{84}$$

熱流束q_pとq_nは等しいことから，界面温度は次式で表される．

$$T_b = \frac{(k_p/d_p)T_p + (k_n/d_n)T_n}{(k_p/d_p) + (k_n/d_n)} \tag{85}$$

これは次式のように書き換えられる．

$$T_b = \frac{(k_n/d_n)}{(k_n/d_n) + (k_p/d_p)} T_n + \left(1 - \frac{(k_n/d_n)}{(k_n/d_n) + (k_p/d_p)}\right) T_p \tag{86}$$

OpenFOAMでは，compressible:turbulentTemperatureCoupledBaffleMixedにおいて，上式を混合条件で表している．式(66)において次のように設定する．

$$\begin{aligned} w &= \frac{(k_n/d_n)}{(k_n/d_n) + (k_p/d_p)} \\ \bar{X}_b &= T_n \\ \overline{\nabla X}_b &= 0 \end{aligned} \tag{87}$$

参考文献

[1] スハスV. パタンカー：コンピュータによる熱移動と流れの数値解析，森北出版(1985).

[2] C. M. Rhie，W. L. Chow：Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation，AIAA Journal，Vol.21，No.11 (1983).