Open∇FOAM

オープンソース CFD ツールボックス

プログラマズ・ガイド
1〜2章和訳

Version 1.7.1
2011 年 5 月 24 日

このユーザガイド和訳は，一般社団法人 オープン CAE 学会の責任のもとで公開しております．本書に関するご意見等がございましたら，当学会事務局 (office@opencae.jp) までご連絡ください．

OpenFOAM ユーザー会
一般社団法人 オープン CAE 学会

Typeset in pLaTeX.

原文著作権表示

GNU Free Documentation License

Version 1.2, November 2002

Preamble

The purpose of this License is to make a manual, textbook, or other functional and useful document "free" in the sense of freedom: to assure everyone the effective freedom to copy and redistribute it, with or without modifying it, either commercially or noncommercially. Secondarily, this License preserves for the author and publisher a way to get credit for their work, while not being considered responsible for modifications made by others.

This License is a kind of "copyleft", which means that derivative works of the document must themselves be free in the same sense. It complements the GNU General Public License, which is a copyleft license designed for free software.

We have designed this License in order to use it for manuals for free software, because free software needs free documentation: a free program should come with manuals providing the same freedoms that the software does. But this License is not limited to software manuals; it can be used for any textual work, regardless of subject matter or whether it is published as a printed book. We recommend this License principally for works whose purpose is instruction or reference.

1. APPLICABILITY AND DEFINITIONS

This License applies to any manual or other work, in any medium, that contains a notice placed by the copyright holder saying it can be distributed under the terms of this License. Such a notice grants a world-wide, royalty-free license, unlimited in duration, to use that work under the conditions stated herein. The **"Document"**, below, refers to any such manual or work. Any member of the public is a licensee, and is addressed as **"you"**. You accept the license if you copy, modify or distribute the work in a way requiring permission under copyright law.

A **"Modified Version"** of the Document means any work containing the Document or a portion of it, either copied verbatim, or with modifications and/or translated into another language.

A **"Secondary Section"** is a named appendix or a front-matter section of the Document that deals exclusively with the relationship of the publishers or authors of the Document to the Document' s overall subject (or to related matters) and contains nothing that could fall directly within that overall subject. (Thus, if the Document is in part a textbook of mathematics, a Secondary Section may not explain any mathematics.) The relationship could be a matter of historical connection with the subject or with related matters, or of legal, commercial, philosophical, ethical or political position regarding them.

The **"Invariant Sections"** are certain Secondary Sections whose titles are designated, as being those of Invariant Sections, in the notice that says that the Document is released under this License. If a section does not fit the above definition of Secondary then it is not allowed to be designated as Invariant. The Document may contain zero Invariant Sections. If the Document does not identify any Invariant Sections then there are none.

The **"Cover Texts"** are certain short passages of text that are listed, as Front-Cover Texts or Back-Cover Texts, in the notice that says that the Document is released under this License. A Front-Cover Text may be at most 5 words, and a Back-Cover Text may be at most 25 words.

A **"Transparent"** copy of the Document means a machine-readable copy, represented in a format whose specification is available to the general public, that is suitable for revising the document straightforwardly with generic text editors or (for images composed of pixels) generic paint programs or (for drawings) some widely available drawing editor, and that is suitable for input to text formatters or for automatic translation to a variety of formats suitable for input to text formatters. A copy made in an otherwise Transparent file format whose markup, or absence of markup, has been arranged to thwart or discourage subsequent modification by readers is not Transparent. An image format is not Transparent if used for any substantial amount of text. A copy that is not "Transparent" is called **"Opaque"**.

Examples of suitable formats for Transparent copies include plain ASCII without markup, Texinfo input format, LaTeX input format, SGML or XML using a publicly available DTD, and standard-conforming simple HTML, PostScript or PDF designed for human modification. Examples of transparent image formats include PNG, XCF and JPG. Opaque formats include proprietary formats that can be read and edited only by proprietary word processors, SGML or XML for which the DTD and/or processing tools are not generally available, and the machinegenerated HTML, PostScript or PDF produced by some word processors for output purposes only.

The **"Title Page"** means, for a printed book, the title page itself, plus such following pages as are needed to hold, legibly, the material this License requires to appear in the title page. For works in formats which do not have any title page as such, "Title Page" means the text near the most prominent appearance of the work' s title, preceding the beginning of the body of the text.

A section **"Entitled XYZ"** means a named subunit of the Document whose title either is precisely XYZ or contains XYZ in parentheses following text that translates XYZ in another language. (Here XYZ stands for a specific section name mentioned below, such as **"Acknowledgements"**, **"Dedications"**, **"Endorsements"**, or **"History"**.) To **"Preserve the Title"** of such a section when you modify the Document means that it remains a section "Entitled XYZ" according to this definition.

The Document may include Warranty Disclaimers next to the notice which states that this License applies to the Document. These Warranty Disclaimers are considered to be included by reference in this License, but only as regards disclaiming warranties: any other implication that these Warranty Disclaimers may have is void and has no effect on the meaning of this License.

2. VERBATIM COPYING

You may copy and distribute the Document in any medium, either commercially or noncommercially, provided that this License, the copyright notices, and the license notice saying this License applies to the Document are reproduced in all copies, and that you add no other conditions whatsoever to those of this License. You may not use technical measures to obstruct or control the reading or further copying of the copies you make or distribute. However, you may accept compensation in exchange for copies. If you distribute a large enough number of copies you must also follow the conditions in section 3.

You may also lend copies, under the same conditions stated above, and you may publicly display copies.

3. COPYING IN QUANTITY

If you publish printed copies (or copies in media that commonly have printed covers) of the Document, numbering more than 100, and the Document's license notice requires Cover Texts, you must enclose the copies in covers that carry, clearly and legibly, all these Cover Texts: Front-Cover Texts on the front cover, and Back-Cover Texts on the back cover. Both covers must also clearly and legibly identify you as the publisher of these copies. The front cover must present the full title with all words of the title equally prominent and visible. You may add other material on the covers in addition. Copying with changes limited to the covers, as long as they preserve the title of the Document and satisfy these conditions, can be treated as verbatim copying in other respects.

If the required texts for either cover are too voluminous to fit legibly, you should put the first ones listed (as many as fit reasonably) on the actual cover, and continue the rest onto adjacent pages.

If you publish or distribute Opaque copies of the Document numbering more than 100, you must either include a machine-readable Transparent copy along with each Opaque copy, or state in or with each Opaque copy a computer-network location from which the general network-using public has access to download using public-standard network protocols a complete Transparent copy of the Document, free of added material. If you use the latter option, you must take reasonably prudent steps, when you begin distribution of Opaque copies in quantity, to ensure that this Transparent copy will remain thus accessible at the stated location until at least one year after the last time you distribute an Opaque copy (directly or through your agents or retailers) of that edition to the public.

It is requested, but not required, that you contact the authors of the Document well before redistributing any large number of copies, to give them a chance to provide you with an updated version of the Document.

4. MODIFICATIONS

You may copy and distribute a Modified Version of the Document under the conditions of sections 2 and 3 above, provided that you release the Modified Version under precisely this License, with the Modified Version filling the role of the Document, thus licensing distribution and modification of the Modified Version to whoever possesses a copy of it. In addition, you must do these things in the Modified Version:

A. Use in the Title Page (and on the covers, if any) a title distinct from that of the Document, and from those of previous versions (which should, if there were any, be listed in the History section of the Document). You may use the same title as a previous version if the original publisher of that version gives permission.
B. List on the Title Page, as authors, one or more persons or entities responsible for authorship of the modifications in the Modified Version, together with at least five of the principal authors of the Document (all of its principal authors, if it has fewer than five), unless they release you from this requirement.
C. State on the Title page the name of the publisher of the Modified Version, as the publisher.
D. Preserve all the copyright notices of the Document.
E. Add an appropriate copyright notice for your modifications adjacent to the other copyright notices.
F. Include, immediately after the copyright notices, a license notice giving the public permission to use the Modified Version under the terms of this License, in the form shown in the Addendum below.
G. Preserve in that license notice the full lists of Invariant Sections and required Cover Texts given in the Document’s license notice.
H. Include an unaltered copy of this License.
I. Preserve the section Entitled “History”, Preserve its Title, and add to it an item stating at least the title, year, new authors, and publisher of the Modified Version as given on the Title Page. If there is no section Entitled “History” in the Document, create one stating the title, year, authors, and publisher of the Document as given on its Title Page, then add an item describing the Modified Version as stated in the previous sentence.
J. Preserve the network location, if any, given in the Document for public access to a Transparent copy of the Document, and likewise the network locations given in the Document for previous versions it was based on. These may be placed in the “History” section. You may omit a network location for a work that was published at least four years before the Document itself, or if the original publisher of the version it refers to gives permission.
K. For any section Entitled “Acknowledgements” or “Dedications”, Preserve the Title of the section, and preserve in the section all the substance and tone of each of the contributor acknowledgements and/or dedications given therein.
L. Preserve all the Invariant Sections of the Document, unaltered in their text and in their titles. Section numbers or the equivalent are not considered part of the section titles.
M. Delete any section Entitled “Endorsements”. Such a section may not be included in the Modified Version.
N. Do not retitle any existing section to be Entitled “Endorsements” or to conflict in title with any Invariant Section.
O. Preserve any Warranty Disclaimers.

If the Modified Version includes new front-matter sections or appendices that qualify as Secondary Sections and contain no material copied from the Document, you may at your option designate some or all of these sections as invariant. To do this, add their titles to the list of Invariant Sections in the Modified Version's license notice. These titles must be distinct from any other section titles.

You may add a section Entitled "Endorsements", provided it contains nothing but endorsements of your Modified Version by various parties—for example, statements of peer review or that the text has been approved by an organization as the authoritative definition of a standard.

You may add a passage of up to five words as a Front-Cover Text, and a passage of up to 25 words as a Back-Cover Text, to the end of the list of Cover Texts in the Modified Version. Only one passage of Front-Cover Text and one of Back-Cover Text may be added by (or through arrangements made by) any one entity. If the Document already includes a cover text for the same cover, previously added by you or by arrangement made by the same entity you are acting on behalf of, you may not add another; but you may replace the old one, on explicit permission from the previous publisher that added the old one.

The author(s) and publisher(s) of the Document do not by this License give permission to use their names for publicity for or to assert or imply endorsement of any Modified Version.

5. COMBINING DOCUMENTS

You may combine the Document with other documents released under this License, under the terms defined in section 4 above for modified versions, provided that you include in the combination all of the Invariant Sections of all of the original documents, unmodified, and list them all as Invariant Sections of your combined work in its license notice, and that you preserve all their Warranty Disclaimers.

The combined work need only contain one copy of this License, and multiple identical Invariant Sections may be replaced with a single copy. If there are multiple Invariant Sections with the same name but different contents, make the title of each such section unique by adding at the end of it, in parentheses, the name of the original author or publisher of that section if known, or else a unique number. Make the same adjustment to the section titles in the list of Invariant Sections in the license notice of the combined work.

In the combination, you must combine any sections Entitled "History" in the various original documents, forming one section Entitled "History"; likewise combine any sections Entitled "Acknowledgements", and any sections Entitled "Dedications". You must delete all sections Entitled "Endorsements".

6. COLLECTIONS OF DOCUMENTS

You may make a collection consisting of the Document and other documents released under this License, and replace the individual copies of this License in the various documents with a single copy that is included in the collection, provided that you follow the rules of this License for verbatim copying of each of the documents in all other respects.

You may extract a single document from such a collection, and distribute it individually under this License, provided you insert a copy of this License into the extracted document, and follow this License in all other respects regarding verbatim copying of that document.

7. AGGREGATION WITH INDEPENDENT WORKS

A compilation of the Document or its derivatives with other separate and independent documents or works, in or on a volume of a storage or distribution medium, is called an “aggregate” if the copyright resulting from the compilation is not used to limit the legal rights of the compilation’s users beyond what the individual works permit. When the Document is included in an aggregate, this License does not apply to the other works in the aggregate which are not themselves derivative works of the Document.

If the Cover Text requirement of section 3 is applicable to these copies of the Document, then if the Document is less than one half of the entire aggregate, the Document’s Cover Texts may be placed on covers that bracket the Document within the aggregate, or the electronic equivalent of covers if the Document is in electronic form. Otherwise they must appear on printed covers that bracket the whole aggregate.

8. TRANSLATION

Translation is considered a kind of modification, so you may distribute translations of the Document under the terms of section 4. Replacing Invariant Sections with translations requires special permission from their copyright holders, but you may include translations of some or all Invariant Sections in addition to the original versions of these Invariant Sections. You may include a translation of this License, and all the license notices in the Document, and any Warranty Disclaimers, provided that you also include the original English version of this License and the original versions of those notices and disclaimers. In case of a disagreement between the translation and the original version of this License or a notice or disclaimer, the original version will prevail.

If a section in the Document is Entitled “Acknowledgements”, “Dedications”, or “History”, the requirement (section 4) to Preserve its Title (section 1) will typically require changing the actual title.

9. TERMINATION

You may not copy, modify, sublicense, or distribute the Document except as expressly provided for under this License. Any other attempt to copy, modify, sublicense or distribute the Document is void, and will automatically terminate your rights under this License. However, parties who have received copies, or rights, from you under this License will not have their licenses terminated so long as such parties remain in full compliance.

10. FUTURE REVISIONS OF THIS LICENSE

The Free Software Foundation may publish new, revised versions of the GNU Free Documentation License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns. See http://www.gnu.org/copyleft/.

Each version of the License is given a distinguishing version number. If the Document specifies that a particular numbered version of this License "or any later version" applies to it, you have the option of following the terms and conditions either of that specified version or of any later version that has been published (not as a draft) by the Free Software Foundation. If the Document does not specify a version number of this License, you may choose any version ever published (not as a draft) by the Free Software Foundation.

Trademarks

ANSYS is a registered trademark of ANSYS Inc.
CFX is a registered trademark of AEA Technology Engineering Software Ltd.
CHEMKIN is a registered trademark of Sandia National Laboratories
CORBA is a registered trademark of Object Management Group Inc.
openDX is a registered trademark of International Business Machines Corporation
EnSight is a registered trademark of Computational Engineering International Ltd.
AVS/Express is a registered trademark of Advanced Visual Systems Inc.
Fluent is a registered trademark of Fluent Inc.
GAMBIT is a registered trademark of Fluent Inc.
Fieldview is a registered trademark of Intelligent Light
Icem-CFD is a registered trademark of ICEM Technologies GmbH
I-DEAS is a registered trademark of Structural Dynamics Research Corporation
JAVA is a registered trademark of Sun Microsystems Inc.
Linux is a registered trademark of Linus Torvalds
MICO is a registered trademark of MICO Inc.
OpenFOAM is a registered trademark of OpenCFD Ltd.
ParaView is a registered trademark of Kitware
STAR-CD is a registered trademark of Computational Dynamics Ltd.
UNIX is a registered trademark of The Open Group

目次

第1章

テンソル数学

この章では，テンソルとそれらの代数演算について，また本書におけるそれらの数学表記について記述します．そして，テンソルおよびテンソル数学が OpenFOAM においてどのようにプログラムされているかを説明します．

1.1　座標系

OpenFOAM は，主に連続体力学，つまり固体・液体・気体の応力や，これらの物質の変形や流れに関する力学分野の問題を解くために設計されています．このため OpenFOAM は，3 次元空間と時間，そして物理的要素のテンソルによる記述に基づいています．OpenFOAM で使われる座標系は，図 1.1 に示すような右手系デカルト座標系です．この座標系は，Ox，Oy，Oz と名づけられた互いに直角な三つの軸から原点 O を定義することによって構成されます．右手系とは，O から Oz 軸のほうを見下ろしたとき，Ox 軸上の点から Oy 軸上の点へと向かう円弧が時計回りにみえるように定義されます．

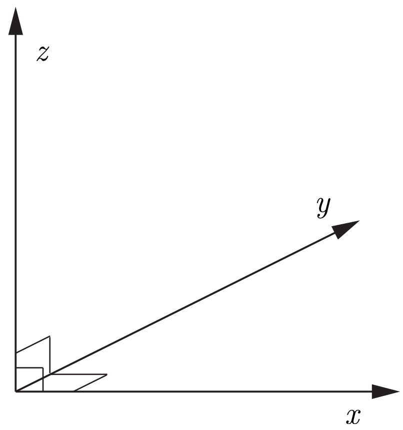


図 1.1　右手系座標軸

1.2　テンソル

テンソル項は，特定の空間に属していて特定の数学的規則に従うような実体について記述します．簡潔にいえば，テンソルは単位基底ベクトルの組に対する成分値の組で表現されます．OpenFOAM ではこの単位基底ベクトルは，右手系デカルト座標軸 x，y，z にそれぞれ沿った $\mathbf{e}_x$，$\mathbf{e}_y$，$\mathbf{e}_z$ になります．したがって，これらの基底ベクトルは直交，すなわち互いに直角です．すべてのテンソルは以下のような属性をもっています．

次元　そのテンソルが属する特定の空間の次元 d．OpenFOAM では $d = 3$

ランク　成分値の数が d^r となるような整数 $r \geq 0$

OpenFOAM 1.x が 3 次元であることから，ランク 0〜3 のテンソルが標準で用意されていますが，この基本のランクの設定は自由に拡張できるように書かれています．ランク 0 と 1 のテンソルは，スカラおよびベクトルとしてのほうがよく知られており読者にも身近でしょうが，ランク 2 と 3 のテンソルにはあまりなじみがないかもしれません．確認のために，OpenFOAM 1.x が標準で提供しているすべてのランクのテンソルを以下で復習しておきましょう．

ランク 0「スカラ」　一つの実数で表せるあらゆる物理量で，イタリック体で表記されます．例えば，質量 m，体積 V，圧力 p，そして粘性係数 μ です．

ランク 1「ベクトル」　大きさと方向で表現できる物理量です．成分表示では，ベクトル $\boldsymbol{a} = (a_1,\ a_2,\ a_3)$ はデカルト座標系の x 軸，y 軸，z 軸成分をそれぞれ表します．同じベクトルを添字表記では a_i，$i = 1,\ 2,\ 3$ と書けます．ただし，3 次元を扱っていることは明らかなので本書では添字リスト $i = 1,\ 2,\ 3$ は省略します．

ランク 2「テンソル」　または「2 階のテンソル」$\boldsymbol{T}$ は以下のように行列で表現できる 9 個の要素をもっています．

$$\boldsymbol{T} = T_{ij} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

$r = 2$ なので，要素 T_{ij} は二つの添字で表されます．以下では添字のリスト $i,\ j = 1,\ 2,\ 3$ は省略します．$i = j$ の要素は対角要素とよばれ，$i \neq j$ の要素は非対角要素とよばれます．対角要素を交差して要素を入れ替えることにより，以下のような $\boldsymbol{T}$ の**転置**が得られます．

$$\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} = T_{ji} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} & T_{31} \\ T_{12} & T_{22} & T_{32} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

注意：ランク 3 以上のテンソルが出現することは非常にまれなので，多くの場合，ランク 2 のテンソルは単に「テンソル」とよばれます．

ランク 2（対称）　「対称」というのは，対角方向に対称，つまり $T_{ij} = T_{ji}$ であることを表します．この場合 $T_{12} = T_{21}$，$T_{13} = T_{31}$，$T_{23} = T_{32}$ なので，独立な要素は 6 個だけになります．対称テンソルであれば 9 個より 6 個の要素を保存するほうがメモリを節約できるので，OpenFOAM では対称テンソルと非対称テンソルを区別して扱います．連続体力学において遭遇するほとんどのテンソルは対称です．

ランク 3　27 個の要素をもち，添字表記では P_{ijk} と書けますが，式 (1.1) のように行列表示しようとすると非常に長くなります．

ランク 3（対称）　ランク 3 の対称テンソルは，OpenFOAM では $P_{ijk} = P_{ikj} = P_{jik} = P_{jki} = P_{kij} = P_{kji}$ として定義されており，したがって 10 個の独立した要素をもちます．さらに厳密にいえば，これは相等しい三つのベクトルの外積によってつくられます．外積については 1.3.4 項で述べられています．

1.2.1　テンソル表記

本書は，空間 3 次元と時間からなる複雑な偏微分方程式の問題を扱う，数値連続体力学に関するものです．まず最初に，簡潔でありながら明確な，方程式の表記方法を導入しておくことが不可欠です．方程式を追いやすいようにするには，スカラ要素のリストを書くよりも，それ自体にテンソルの概念が含められた一つのもので表記することが必要です．加えて，あらゆるテンソル演算が，要素それぞれに体する演算ではなくテンソル自体に対する演算である，とわかるような表記法であるべきです．

そういうわけで，この文書ではランク 1 以上のテンソル，すなわちスカラ以外のすべてのテンソルについては**テンソル表記**を採用し，太字で，例えば $\boldsymbol{a}$ のように表記します．これは一つのシンボルで表され，非常にコンパクトであることから，それ自体で一つの存在としてテンソルを把握しやすくなります．欠点をあげるとすれば，太字のシンボルはランク 0 でないことは明らかですが，そのランクがすぐには読み取れないことです．しかしながら，シンボルを見れば何の物理量を表しているかがわかり，直観的にランクもわかるので，実際にはそれほど問題になりません．例えば，私たちは速度 $\boldsymbol{U}$ がランク 1 のテンソルであることを知っています．

さらにいえば，表記方法の選択を評価するもっと根本的な点は，テンソルの数学的表現が座標系によって変化しないこと，つまりベクトル $\boldsymbol{a}$ がどこから観測するかに拘らず同じベクトルであることです．テンソル表記は，座標系に関する情報をいっさい含まないので，このコンセプトに合っています．しかし，他の表記，たとえば a_i のようにテンソルの成分個別の表示は必然的に座標系の選択を意味してしまいます．この望ましくない結果は，一意でない，つまり座標系に依存する値の組み合わせでテンソルが表現されることによります．

とはいえ本書では，主にテンソル演算を成分要素に展開するために，1.2 節で述べたような添字表記もときどき用います．添字表記を用いる際には，和の規約を採用します．これは，一つの項に同じ添字が 2 回現れたら，その添字については該当する全ての数字，たとえば 1，2，3 をとり，それらの和をとるというものです．たとえば次のようになります．

$$a_i b_i = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \tag{1.3}$$

添字が繰り返されたら和を意味するので，この文書では今後，記号 $\sum$ は省略します．

1.3　テンソルの代数演算

この節では，OpenFOAM で利用できるテンソルの代数演算をすべて紹介します．まず，もっとも基本的なテンソル演算をおさらいしておきましょう．加算，減算，そしてスカラの乗算と除算です．加算と減算は，可換則と結合則の両方を満たし，互いにランクの等しいテンソルどうしに限って意味をもちます．これはテンソルの要素それぞれについて加算・減算を行う操作であり，たとえば，二つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の差は

$$\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b} = a_i - b_i = (a_1 - b_1,\ a_2 - b_2,\ a_3 - b_3) \tag{1.4}$$

となります．テンソル $\boldsymbol{a}$ にスカラ s をかける乗算も同様に可換則と結合則を満たし，テンソルの要素すべてにスカラを乗じる操作です．たとえば，次のようになります．

$$s\boldsymbol{a} = s a_i = (s a_1,\ s a_2,\ s a_3) \tag{1.5}$$

テンソル $\boldsymbol{a}$ とスカラの除算は，スカラが演算の第 2 引数となっているときにのみ意味をもちます．つまり，次のとおりです．

$$\frac{\boldsymbol{a}}{s} = \frac{a_i}{s} = \left(\frac{a_1}{s},\ \frac{a_2}{s},\ \frac{a_3}{s}\right) \tag{1.6}$$

これ以降の節で述べる上記以外の演算は，ランク 1 以上のテンソルどうしの，さらに複雑な積の組み合わせとなっています．

1.3.1　内積

内積は，ランク r_1 と r_2 の任意の二つのテンソルをランク $r = r_1 + r_2 - 2$ のテンソルにする演算です．ランク 3 までのテンソルの内積演算を以下に示します．

- 二つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の内積は可換であり，以下のスカラ $s = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}$ をつくります．

$$s = a_i b_i = a_1 b_2 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \tag{1.7}$$

- テンソル $\boldsymbol{T}$ とベクトル $\boldsymbol{a}$ の内積はベクトル $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{a}$ をつくります．これは，見やすいように列ベクトルで書くと，以下のようになります．

$$b_i = T_{ij} a_j = \begin{pmatrix} T_{11}a_1 + T_{12}a_2 + T_{13}a_3 \\ T_{21}a_1 + T_{22}a_2 + T_{23}a_3 \\ T_{31}a_1 + T_{32}a_2 + T_{33}a_3 \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

  もし $\boldsymbol{T}$ が対称でなければ，$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{a}$ は以下のようになり，この演算は可換ではありません．

$$b_i = a_j T_{ji} = \begin{pmatrix} a_1 T_{11} + a_2 T_{21} + a_3 T_{31} \\ a_1 T_{12} + a_2 T_{22} + a_3 T_{32} \\ a_1 T_{13} + a_2 T_{23} + a_3 T_{33} \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

- 二つのテンソル $\boldsymbol{T}$ と $\boldsymbol{S}$ の内積は，以下のような成分をもつテンソル $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{S}$ をつくります．

$$P_{ij} = T_{ik} S_{kj} \tag{1.10}$$

  これは $\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{S} = (\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ となり，非可換です．

- ベクトル $\boldsymbol{a}$ と 3 階のテンソル $\boldsymbol{P}$ の内積は，以下のような成分をもつ 2 階のテンソル $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{P}$ をつくります．

$$T_{ij} = a_k P_{kij} \tag{1.11}$$

  やはりこれも非可換で，$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{a}$ は次のようになります．

$$T_{ij} = P_{ijk} a_k \tag{1.12}$$

- 2 階のテンソル $\boldsymbol{T}$ と 3 階のテンソル $\boldsymbol{P}$ の内積は，以下のような成分をもつ 3 階のテンソル $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{P}$ をつくります．

$$Q_{ijk} = T_{il} P_{ljk} \tag{1.13}$$

  やはりこれも非可換で，$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{T}$ は次のようになります．

$$Q_{ijk} = P_{ijl} T_{lk} \tag{1.14}$$

1.3.2 二つのテンソルの二重内積

二つの 2 階テンソル $\boldsymbol{T}$ と $\boldsymbol{S}$ の二重内積は，スカラ $s = \boldsymbol{T} : \boldsymbol{S}$ をつくります．これは，テンソル成分の 9 個の積の和として得られます．

$$\begin{aligned} s = T_{ij}S_{ij} = T_{11}S_{11} + T_{12}S_{12} + T_{13}S_{13} + \\ T_{21}S_{21} + T_{22}S_{22} + T_{23}S_{23} + \\ T_{31}S_{31} + T_{32}S_{32} + T_{33}S_{33} \end{aligned} \tag{1.15}$$

2 階のテンソル $\boldsymbol{T}$ と 3 階のテンソル $\boldsymbol{P}$ の二重内積は，次のような成分をもつベクトル $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{T} : \boldsymbol{P}$ をつくります．

$$a_i = T_{jk}P_{jki} \tag{1.16}$$

これは非可換で，$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{P} : \boldsymbol{T}$ は次のようになります．

$$a_i = P_{ijk}T_{jk} \tag{1.17}$$

1.3.3 二つの 3 階テンソルの三重内積

二つの 3 階テンソル $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{Q}$ の三重内積は，スカラ $s = \boldsymbol{P} \overset{3}{:} \boldsymbol{Q}$ をつくります．これは，テンソル成分の 27 個の積の和として得られます．

$$s = P_{ijk}Q_{ijk} \tag{1.18}$$

1.3.4 外積

外積は，以下のようなベクトルやテンソルどうしの演算です．

- 二つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の外積は非可換で，以下のような成分をもつテンソル $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{ab} = (\boldsymbol{ba})^{\mathrm{T}}$ をつくります．

$$T_{ij} = a_i b_j = \begin{pmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 & a_1b_3 \\ a_2b_1 & a_2b_2 & a_2b_3 \\ a_3b_1 & a_3b_2 & a_3b_3 \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

- ベクトル $\boldsymbol{a}$ と 2 階のテンソル $\boldsymbol{T}$ との外積は，以下のような成分をもつ 3 階のテンソル $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{aT}$ をつくります．

$$P_{ijk} = a_i T_{jk} \tag{1.20}$$

  これは非可換で，$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Ta}$ は以下のようになります．

$$P_{ijk} = T_{ij} a_k \tag{1.21}$$

1.3.5　二つのベクトルのクロス積

クロス積はベクトルだけに存在する演算です．二つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ について，これらのクロス積は以下のような成分をもつベクトル $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ をつくります．

$$c_i = e_{ijk} a_j b_k = (a_2 b_3 - a_3 b_2,\ a_3 b_1 - a_1 b_3,\ a_1 b_2 - a_2 b_1) \tag{1.22}$$

ここで置換記号は以下のように定義されます．

$$e_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{いずれか二つの添字が等しいとき} \\ +1 & i,\ j,\ k \text{ が } 1,\ 2,\ 3 \text{ の偶置換のとき} \\ -1 & i,\ j,\ k \text{ が } 1,\ 2,\ 3 \text{ の奇置換のとき} \end{cases} \tag{1.23}$$

偶置換とは 123，231 および 312 であり，奇置換は 132，213 および 321 です．

1.3.6　その他の一般的なテンソル演算

OpenFOAM で使われる，やや一般的でない演算や専門用語を以下に示します．

二乗　テンソルの二乗は，それ自身とのテンソル外積で定義されます．例えば，ベクトル $\boldsymbol{a}$ の二乗は $\boldsymbol{a}^2 = \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}$ です．

n 乗　テンソルの n 乗は，それ自身との n 回のテンソル外積で定義されます．例えば，ベクトル $\boldsymbol{a}$ の 3 乗は $\boldsymbol{a}^3 = \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}$ です．

平方絶対値　テンソルの平方絶対値は，それ自身との r テンソルの r 重内積で，スカラとなります．例えば，2 階テンソル $\boldsymbol{T}$ については，$|\boldsymbol{T}|^2 = \boldsymbol{T}\boldsymbol{:}\boldsymbol{T}$ です．

絶対値　平方絶対値の平方根です．例えば，テンソル $\boldsymbol{T}$ については，$|\boldsymbol{T}| = \sqrt{\boldsymbol{T}\boldsymbol{:}\boldsymbol{T}}$ です．単位長さのベクトルは単位ベクトルとよばれます．

最大成分　符号も考慮した最大の値をもつテンソルの成分です．つまり最大の絶対値ではありません．

最小成分　最小の値をもつテンソルの成分です．

成分平均値　テンソルのすべての成分の平均値です．

スケール　名前のとおり，スケール関数は，あるテンソルの成分を同じランクの他のテンソルの成分でスケーリングします．これは二つのテンソルの対応する成分同士の積で評価されます．例えば，ベクトル $\boldsymbol{a}$ のベクトル $\boldsymbol{b}$ によるスケーリングは，以下のような成分のベクトル $\boldsymbol{c}$ をつくります．

$$c_i = \mathrm{scale}(\boldsymbol{a},\ \boldsymbol{b}) = (a_1 b_1,\ a_2 b_2,\ a_3 b_3) \tag{1.24}$$

1.3.7　幾何変換と単位テンソル

2 階のテンソル $\boldsymbol{T}$ は線形ベクトル関数，すなわち，内積 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{T} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{a}$ によって，あるベクトル $\boldsymbol{a}$ を別のベクトル $\boldsymbol{b}$ に結びつける関数として，厳密に定義されます．$x,\ y,\ z$ 座標系から新しい座標系 $x^*,\ y^*,\ z^*$ へのあるテンソルの座標変換として機能するように，$\boldsymbol{T}$ の成分を選ぶことができます．このとき $\boldsymbol{T}$ を変換テンソルとよびます．スカラは変換によって変化しませんが，ベクトル $\boldsymbol{a}$ は

$$\boldsymbol{a}^* = \boldsymbol{T} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{a} \tag{1.25}$$

のように $\boldsymbol{a}^*$ に変換されます．2 階のテンソル $\boldsymbol{S}$ は

$$\boldsymbol{S}^* = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} \tag{1.26}$$

に従って $\boldsymbol{T}^*$ に変換されます．

単位テンソル $\boldsymbol{I}$ は，あるテンソルをそれ自身に変換するという条件から定義されます．すべてのベクトル $\boldsymbol{a}$ に対して

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{a} \tag{1.27}$$

となり，つまり

$$\boldsymbol{I} = \delta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.28}$$

となります．ここで，δ_{ij} はクロネッカーのデルタとして知られています．

1.3.8　便利なテンソルの恒等式

さまざまな恒等式を以下に示します．これらは，関連するすべての微分が存在して連続であるという仮定のもとで証明できます．スカラ s とベクトル $\boldsymbol{a}$ および $\boldsymbol{b}$ を用いて表記しています．

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{a}) &\equiv 0 \\
\nabla \times (\nabla s) &\equiv \boldsymbol{0} \\
\nabla \cdot (s\boldsymbol{a}) &\equiv s\nabla \cdot \boldsymbol{a} + \boldsymbol{a} \cdot \nabla s \\
\nabla \times (s\boldsymbol{a}) &\equiv s\nabla \times \boldsymbol{a} + \nabla s \times \boldsymbol{a} \\
\nabla(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}) &\equiv \boldsymbol{a} \times (\nabla \times \boldsymbol{b}) + \boldsymbol{b} \times (\nabla \times \boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{a} \cdot \nabla)\boldsymbol{b} + (\boldsymbol{b} \cdot \nabla)\boldsymbol{a} \\
\nabla \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) &\equiv \boldsymbol{b} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{a}) - \boldsymbol{a} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{b}) \\
\nabla \times (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) &\equiv \boldsymbol{a}(\nabla \cdot \boldsymbol{b}) - \boldsymbol{b}(\nabla \cdot \boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{b} \cdot \nabla)\boldsymbol{a} - (\boldsymbol{a} \cdot \nabla)\boldsymbol{b} \\
\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{a}) &\equiv \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{a}) - \nabla^2 \boldsymbol{a} \\
(\nabla \times \boldsymbol{a}) &\equiv \boldsymbol{a} \cdot (\nabla \boldsymbol{a}) - \nabla(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a})
\end{aligned} \tag{1.29}$$

添字表記の数式を操作するときには，以下の e–δ 恒等式を知っていると役立つことがあります．

$$e_{ijk} e_{irs} = \delta_{jr}\delta_{ks} - \delta_{js}\delta_{kr} \tag{1.30}$$

1.3.9　2 階テンソル特有の演算

以下に示すように，2 階テンソルの成分を操作する様々な演算があります．

転置　式 (1.2) で示したように，テンソル $\boldsymbol{T} = T_{ij}$ の転置は $\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}} = T_{ji}$ です．

対称テンソルと歪（反対称）テンソル　1.2 節で述べたように，$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}$ のように成分が対角方向に対称なテンソルを対称テンソルとよびます．歪テンソルもしくは反対称テンソルは $\boldsymbol{T} = -\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}$ で

あり，当然 $T_{11} = T_{22} = T_{33} = 0$ となります．あらゆる 2 階テンソルは，以下のように対称テンソルと歪テンソルに分割できます．

$$\boldsymbol{T} = \underbrace{\frac{1}{2}(\boldsymbol{T} + \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}})}_{\text{対称テンソル}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\boldsymbol{T} - \boldsymbol{T}^{\mathrm{T}})}_{\text{歪テンソル}} = \operatorname{symm} \boldsymbol{T} + \operatorname{skew} \boldsymbol{T} \tag{1.31}$$

トレース　テンソル $\boldsymbol{T}$ のトレースは対角成分の総和をとったスカラです．

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{T} = T_{11} + T_{22} + T_{33} \tag{1.32}$$

対角　2 階テンソル $\boldsymbol{T}$ の対角成分を成分とするベクトルを返します．

$$\operatorname{diag} \boldsymbol{T} = (T_{11},\ T_{22},\ T_{33}) \tag{1.33}$$

偏差テンソルと静水圧テンソル　あらゆる 2 階テンソル $\boldsymbol{T}$ は，$\operatorname{tr} T = 0$ となる偏差成分と，スカラ s に対して $\boldsymbol{T} = s\boldsymbol{I}$ となる静水圧成分に分割できます．あらゆる 2 階テンソルは，以下のように偏差テンソルと静水圧テンソルに分割できます．

$$\boldsymbol{T} = \underbrace{\boldsymbol{T} - \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \boldsymbol{T})\boldsymbol{I}}_{\text{偏差テンソル}} + \underbrace{\frac{1}{3}(\operatorname{tr} \boldsymbol{T})\boldsymbol{I}}_{\text{静水圧テンソル}} = \operatorname{dev} \boldsymbol{T} + \operatorname{hyd} \boldsymbol{T} \tag{1.34}$$

行列式　2 階テンソルの行列式は以下で与えられます．

$$\begin{aligned} \det \boldsymbol{T} &= \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{vmatrix} \\ &= T_{11}(T_{22}T_{33} - T_{23}T_{32}) - T_{12}(T_{21}T_{33} - T_{23}T_{31}) + T_{13}(T_{21}T_{32} - T_{22}T_{31}) \\ &= \frac{1}{6} e_{ijk} e_{pqr} T_{ip} T_{jq} T_{kr} \end{aligned} \tag{1.35}$$

余因子　テンソルのある成分が属する行と列を取り除いてできた部分を 2×2 の行列式として評価したものを，テンソルのそれぞれの成分に対する小行列式といいます．例えば，T_{12} に対する小行列式は

$$\begin{vmatrix} \cancel{T_{11}} & \cancel{T_{12}} & \cancel{T_{13}} \\ T_{21} & \cancel{T_{22}} & T_{23} \\ T_{31} & \cancel{T_{32}} & T_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} T_{21} & T_{23} \\ T_{31} & T_{33} \end{vmatrix} = T_{21}T_{33} - T_{23}T_{31} \tag{1.36}$$

となります．余因子とは，それぞれの成分の位置に応じて以下のルールで符号付けした小行列式です．

$$\begin{aligned} &i + j \text{ が偶数ならば } + \\ &i + j \text{ が奇数ならば } - \end{aligned} \tag{1.37}$$

$\boldsymbol{T}$ の余因子は以下のようになります．

$$\operatorname{cof} \boldsymbol{T} = \frac{1}{2} e_{jkr} e_{ist} T_{sk} T_{tr} \tag{1.38}$$

逆元 テンソルの逆元は以下で評価されます．

$$\operatorname{inv}\boldsymbol{T} = \frac{\operatorname{cof}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}}{\det\boldsymbol{T}} \tag{1.39}$$

ホッジ双対 テンソルのホッジ双対とは，以下のような成分をもつベクトルです．

$$*\boldsymbol{T} = (T_{23},\ -T_{13},\ T_{12}) \tag{1.40}$$

1.3.10 スカラ特有の演算

OpenFOAM は，スカラを扱うよく知られた関数のほとんどをサポートしています．例えば平方根，指数，対数，正弦，余弦などで，これらのリストが表 1.2 にあります．OpenFOAM では，これらに加えて以下の 3 種類の関数も定義されています．

符号 スカラ s の符号は以下のように得られます．

$$\operatorname{sgn}(s) = \begin{cases} 1 & s \geq 0\text{ のとき} \\ -1 & s < 0\text{ のとき} \end{cases} \tag{1.41}$$

正数 スカラ s に対して以下のように得られます．

$$\operatorname{pos}(s) = \begin{cases} 1 & s \geq 0\text{ のとき} \\ 0 & s < 0\text{ のとき} \end{cases} \tag{1.42}$$

制限 スカラ s のスカラ n による制限は以下のようになります．

$$\operatorname{limit}(s,\ n) = \begin{cases} s & s < n\text{ のとき} \\ 0 & s \geq n\text{ のとき} \end{cases} \tag{1.43}$$

1.4 OpenFOAM のテンソルクラス

OpenFOAM には，これまでに述べたようなテンソル数学のためのクラス群を含んだ primitive という C++ のクラスライブラリがあります．OpenFOAM で標準的に使える基本テンソルクラスを表 1.1 に列挙します．この表にはテンソルの個別の成分にアクセスするための関数，いわゆるアクセス関数も列挙してあります．

ランク	名称	基本クラス	アクセス関数
0	スカラ	scalar	
1	ベクトル	vector	x(), y(), z()
2	テンソル	tensor	xx(), xy(), xz(), ...

表 1.1 OpenFOAM における基本テンソルクラス

テンソル

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \tag{1.44}$$

は，OpenFOAM では次の 1 行で宣言できます．

```
tensor T(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9);
```

アクセス関数 xz() で成分 T_{13} つまり T_{xz} にアクセスできます．例えば，コード

```
Info << "Txz = " << T.xz() << endl;
```

は，以下を画面に出力します．

```
Txz = 3
```

1.4.1　OpenFOAM におけるテンソルの代数演算

1.3 節で述べたすべての代数演算は，OpenFOAM のテンソルクラスに対して，数学の表記法によく似た構文で利用できます．いくつかの関数は，例えば symm() のように，単に記述的な関数で表現しますが，その他については，例えば * のような演算子記号でも使用できます．すべての関数を表 1.2 に列挙します．

演算	備考	数学表記	OpenFOAM での表記
加算		$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$	`a + b`
減算		$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$	`a - b`
スカラ倍		$s\boldsymbol{a}$	`s * a`
スカラ除算		$\boldsymbol{a}/s$	`a / s`
外積	rank $a, b \geq 1$	$\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}$	`a * b`
内積	rank $a, b \geq 1$	$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$	`a & b`
二重内積	rank $a, b \geq 2$	$\boldsymbol{a}:\boldsymbol{b}$	`a && b`
クロス積	rank $a, b = 1$	$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$	`a ^ b`
平方		$\boldsymbol{a}^2$	`sqr(a)`
平方絶対値		$\lvert\boldsymbol{a}\rvert^2$	`magSqr(a)`
絶対値		$\lvert\boldsymbol{a}\rvert$	`mag(a)`
累乗	$n = 0, 1, \ldots, 4$	$\boldsymbol{a}^n$	`pow(a, n)`
成分平均値	$i = 1, \ldots, N$	$\bar{\boldsymbol{a}}_i$	`cmptAv(a)`
最大成分	$i = 1, \ldots, N$	$\max(\boldsymbol{a}_i)$	`max(a)`
最小成分	$i = 1, \ldots, N$	$\min(\boldsymbol{a}_i)$	`min(a)`
スケール		$\mathrm{scale}(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$	`scale(a, b)`
幾何変換	テンソル $\boldsymbol{T}$ による $\boldsymbol{a}$ の幾何変換		`transform(T, a)`
2 階テンソル特有の演算			
転置		$\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}$	`T.T()`
対角		$\mathrm{diag}\,\boldsymbol{T}$	`diag(T)`
トレース		$\mathrm{tr}\,\boldsymbol{T}$	`tr(T)`
偏差成分		$\mathrm{dev}\,\boldsymbol{T}$	`dev(T)`
静水圧成分[1]		$\mathrm{hyd}\,\boldsymbol{T}$	`hyd(T)`
対称成分		$\mathrm{symm}\,\boldsymbol{T}$	`symm(T)`
歪成分		$\mathrm{skew}\,\boldsymbol{T}$	`skew(T)`
行列式		$\det\boldsymbol{T}$	`det(T)`
逆元		$\mathrm{inv}\,\boldsymbol{T}$	`inv(T)`
ホッジ双対		$*\boldsymbol{T}$	`*T`
スカラ特有の演算			
符号（真偽値）		$\mathrm{sgn}(s)$	`sgn(s)`
正数（真偽値）		$s \geq 0$	`pos(s)`
負数（真偽値）		$s < 0$	`neg(s)`

[1]訳注：原文では抜けている．

制限	n はスカラ	$\mathrm{limit}(s, n)$	`limit(s, n)`
平方根		$\sqrt{s}$	`sqrt(s)`
指数		$\exp s$	`exp(s)`
自然対数		$\ln s$	`log(s)`
常用対数		$\log_{10} s$	`log10(s)`
正弦		$\sin s$	`sin(s)`
余弦		$\cos s$	`cos(s)`
正接		$\tan s$	`tan(s)`
逆正弦		$\arcsin s$	`asin(s)`
逆余弦		$\arccos s$	`acos(s)`
逆正接		$\arctan s$	`atan(s)`
逆余弦		$\arccos s$	`acos(s)`
双曲線正弦		$\sinh s$	`sinh(s)`
双曲線余弦		$\cosh s$	`cosh(s)`
双曲線正接		$\tanh s$	`tanh(s)`
双曲線逆正弦		$\mathrm{arcsinh}\, s$	`asinh(s)`
双曲線逆余弦		$\mathrm{arccosh}\, s$	`acosh(s)`
双曲線逆正接		$\mathrm{arctanh}\, s$	`atanh(s)`
誤差関数		$\mathrm{erf}\, s$	`erf(s)`
相補誤差関数		$\mathrm{erfc}\, s$	`erfc(s)`
対数ガンマ関数		$\ln \Gamma s$	`lgamma(s)`
0 次の第 1 種ベッセル関数		$J_0\, s$	`j0(s)`
1 次の第 1 種ベッセル関数		$J_1\, s$	`j1(s)`
0 次の第 2 種ベッセル関数		$Y_0\, s$	`y0(s)`
1 次の第 2 種ベッセル関数		$Y_1\, s$	`y1(s)`

別途記載がないかぎり $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ は任意ランクのテンソル
s はスカラ，N はテンソル成分の数

表 1.2　OpenFOAM におけるテンソルの代数演算

1.5　物理次元の単位

連続体力学では，物理量はある選ばれた単位で記述されます．例えば，質量はキログラム (kg)，体積は立方メートル (m^3)，圧力はパスカル ($\mathrm{kg\,m^{-1}\,s^{-2}}$)．これらの物理量に対する代数演算は，計量単位を一致させて行わなければなりません．特に，加算，減算，等価判定は，同じ単位の物理量に対してのみ，物理的な意味をもちます．無意味な演算の実装を予防するために，OpenFOAM はユーザがあらゆるテンソルに物理次元の単位を付加することを推奨し，これによりあらゆるテンソル演算の際に次元のチェックが行われます．

単位は，例えば以下のように，dimensionSet クラスで定義されます．

```
dimensionSet pressureDims(1, -1, -2, 0, 0, 0, 0);
```

No.	物理量	単位	記号
1	質量	キログラム	kg
2	長さ	メートル	m
3	時間	秒	s
4	熱力学温度	ケルビン	K
5	物質量	モル	mol
6	電流	アンペア	A
7	光度	カンデラ	cd

表 1.3　SI 基本計量単位

ここで，それぞれの値は，表 1.3 に列挙した SI 基本計量単位それぞれの指数を示しています．このコードでは pressureDims を，圧力 $\mathrm{kg\,m^{-1}\,s^{-2}}$ の dimensionSet として宣言しています．すなわち pressureDims の引数配列の最初の項目 1 は kg^1 を表し，二つめの -1 は m^{-1} を表す，などのようにです．単位付きのテンソルは dimensioned<Type>テンプレートクラスで定義されます．<Type>は scalar，vector，tensor などです．この dimensioned<Type>は，word クラスの変数名，<Type>の値，そして dimensionSet を保持します．

```
dimensionedTensor sigma
    (
        "sigma",
        dimensionSet(1, -1, -2, 0, 0, 0, 0),
        tensor(1e6, 0, 0, 0, 1e6, 0, 0, 0, 1e6),
    );
```

は，圧力あるいは応力としてしかるべき次元をもつ以下のテンソルをつくります．

$$\sigma = \begin{pmatrix} 10^6 & 0 & 0 \\ 0 & 10^6 & 0 \\ 0 & 0 & 10^6 \end{pmatrix} \tag{1.45}$$

第2章
離散化手法

これまではテンソル代数について議論してきました．我々が解きたい偏微分方程式は，テンソルの時間および空間に対する微分に関するものです．したがって，テンソル場，すなわち時間および空間の領域にわたって変化するテンソルへと，表現を拡張する必要があります．この章では，まずはじめに登場するすべての微分演算の数学的表現を解説します．そして，OpenFOAM ではテンソル場がどのように構築されているのか，これらの場の微分はどのようにして代数式へと離散化されるのかを紹介します．

2.1　微分演算子

空間微分を定義する前に，ベクトル演算子ナブラ ∇ を紹介します．添字表記では ∂_i と書かれます．

$$\nabla \equiv \partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x_1},\ \frac{\partial}{\partial x_2},\ \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \tag{2.1}$$

ナブラ演算子は，以下のルールに従う便利な表記法です．

- テンソルに作用するときは，自身の右側に向かって，通常の積の微分のルールに従う．例えば $\partial_i ab = (\partial_i a)b + a(\partial_i b)$
- それ以外の場合，ナブラ演算子は代数演算における通常のベクトルと同様に振る舞う．

2.1.1　勾配

スカラ場 s が定義されていて，連続微分可能ならば，s の勾配 ∇s は以下のベクトル場となります．

$$\nabla s = \partial_i s = \left(\frac{\partial s}{\partial x_1},\ \frac{\partial s}{\partial x_2},\ \frac{\partial s}{\partial x_3} \right) \tag{2.2}$$

勾配はあらゆるテンソル場に作用し，一つランクの高いテンソル場を作ります．例えば，ベクトル場 $\boldsymbol{a}$ の勾配は，以下の 2 階テンソルです．

$$\nabla \boldsymbol{a} = \partial_i a_j = \begin{pmatrix} \partial a_1/\partial x_1 & \partial a_2/\partial x_1 & \partial a_3/\partial x_1 \\ \partial a_1/\partial x_2 & \partial a_2/\partial x_2 & \partial a_3/\partial x_2 \\ \partial a_1/\partial x_3 & \partial a_2/\partial x_3 & \partial a_3/\partial x_3 \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

2.1.2　発散

ベクトル場 $\boldsymbol{a}$ が定義されていて，連続微分可能ならば，$\boldsymbol{a}$ の発散は以下のスカラ場となります．

$$\nabla \cdot \boldsymbol{a} = \partial_i a_i = \frac{\partial a_1}{\partial x_1} + \frac{\partial a_2}{\partial x_2} + \frac{\partial a_3}{\partial x_3} \tag{2.4}$$

発散はランク 1 以上のあらゆるテンソル場に作用し，一つランクの低いテンソル場を作ります．例えば，2 階テンソル場 $\boldsymbol{T}$ の発散は，以下のベクトル場です（見やすいように列ベクトルに展開して表示しています）．

$$\nabla \cdot \boldsymbol{T} = \partial_i T_{ij} = \begin{pmatrix} \partial T_{11}/\partial x_1 + \partial T_{12}/\partial x_1 + \partial T_{13}/\partial x_1 \\ \partial T_{21}/\partial x_2 + \partial T_{22}/\partial x_2 + \partial T_{23}/\partial x_2 \\ \partial T_{31}/\partial x_3 + \partial T_{32}/\partial x_3 + \partial T_{33}/\partial x_3 \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

2.1.3　回転

ベクトル場 $\boldsymbol{a}$ が定義されていて，連続微分可能ならば，$\boldsymbol{a}$ の回転 $\nabla \times \boldsymbol{a}$ は以下のベクトル場となります．

$$\nabla \times \boldsymbol{a} = e_{ijk} \partial j a_k = \left(\frac{\partial a_3}{\partial x_2} - \frac{\partial a_2}{\partial x_3}, \frac{\partial a_1}{\partial x_3} - \frac{\partial a_3}{\partial x_1}, \frac{\partial a_2}{\partial x_1} - \frac{\partial a_1}{\partial x_2} \right) \tag{2.6}$$

回転は以下のように勾配と関連付けられます．

$$\nabla \times \boldsymbol{a} = 2(* \operatorname{skew} \boldsymbol{a}) \tag{2.7}$$

2.1.4　ラプラシアン

ラプラシアンは，数学的には $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$ のように，発散と勾配を組み合わせて定義できる演算です．しかしながらラプラシアンは，テンソルのランクを一つ上げる演算と一つ下げる演算の二つの組み合わせと考えるよりも，あるテンソル場を同じランクの別のテンソル場に変換する一つの演算と考えるべきです．

実際に，ナブラをベクトル演算子として定義したように，ラプラシアンは以下のようにスカラ演算子として定義するのが最適です．

$$\nabla^2 \equiv \partial^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \tag{2.8}$$

例えば，スカラ場 s のラプラシアンは以下のスカラ場になります．

$$\nabla^2 s \equiv \partial^2 s \equiv \frac{\partial^2 s}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial x_3^2} \tag{2.9}$$

2.1.5　時間微分

テンソルの時間微分については複数の定義があります．時間微分を表現するときには，そのテンソルが，動いている物質のある体積の物理量に関連していることを思い出す必要があります．物質の中のある無限に小さい体積あるいは粒子の動きを追跡し，テンソル物理量 ϕ の時間変化を観察することを考えれば，以下のように表示される時間の実質微分あるいは物質微分になります．

$$\frac{\mathrm{D}\phi}{\mathrm{D}t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta \phi}{\Delta t} \tag{2.10}$$

しかしながら，連続体力学，特に流体力学では，多くの場合，空間に固定された 1 点での ϕ の時間変化を，その点を異なる粒子が通過するものとして観察します．空間内の 1 点でのこの変化は $\partial/\partial t$ で表

示される空間時間微分とよばれ，以下のように物質微分と関連付けられます．

$$\frac{\mathrm{D}\phi}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \phi \tag{2.11}$$

ここで，$\boldsymbol{U}$ は物理量 ϕ の速度場です．右辺の第 2 項は ϕ の変化の移流速度として知られています．

2.2 離散化の概要

項の離散化とは，問題の離散量への近似を意味します．有限体積法，および有限要素法や有限差分法のようなその他の手法は，いずれも以下のように問題を離散化します．

空間の離散化 解の定義域を，ひとつなぎの空間の領域を満たして区切るような点の集合で定義します．

時間の離散化 （非定常の問題について）時間の定義域を，時間の区間あるいはステップの有限な数へと分割します．

等式の離散化 問題を記述する偏微分方程式群から，領域のそれぞれの位置で定義された離散量に関して，代数式系を構築します．

2.2.1 OpenFOAM のリストと場

OpenFOAM では，データの集合を保持しておいて，そのデータに対して代数演算のような関数を適用することがよく必要になります．そこで OpenFOAM は，Type の関数を継承した Type クラスのあらゆるオブジェクトのリストの生成を可能にする配列テンプレートクラス List<Type>を提供しています．

OpenFOAM では，テンソルクラスのリストはテンプレートクラス Field<Type>によって標準で定義されています．コードの視認性をより良くするために，例えば Field<vector>のような Field<Type>のインスタンスは，`typedef` 定義により scalarField，vectorField，tensorField，symmTensorField，tensorThirdField，そして symmTensorThirdField と改名されています．Field どうしの代数演算は，それらの場が同じ数の要素をもっている，といった明らかな制約条件のもとで実行できます．OpenFOAM は，ある場と一つのテンソルとの演算もサポートしています．例えば，`U = 2.0 * U` という演算で，`U` という Field すべての値に 2 という scalar をかけることができます．

2.3 解析領域の離散化

解析領域の離散化を図 2.1 に示します．空間領域が数値メッシュに離散化され，そのうえで偏微分方程式群が離散化されます．必要ならば，時間の離散化は，時間ステップ Δt の組に単純に分割されます．この Δt は，場合によっては，数値計算中に計算された条件に依存して変化するかもしれません．

さらに詳細なレベルでは，空間の離散化には，領域を複数のセルや検査体積に再分割する必要があります．これらのセルは連続，すなわち，互いに重なることなく，領域を完全に埋め尽くします．典型的なセルを図 2.2 に示します．

従属変数とその他の物理量は，たいていセル中心 P で保存されますが，面や点で保存される場合もあります．セルは，一般に f とラベル付けされる平らな面で境界付けられます．OpenFOAM では，各セルをつくる面の数に制限はなく，各面の配置にも制約はありません．このような種類のメッシュは通常，セルの面が所定の（例えば座標軸に沿った）配置になるメッシュと区別して，「任意非構造」と

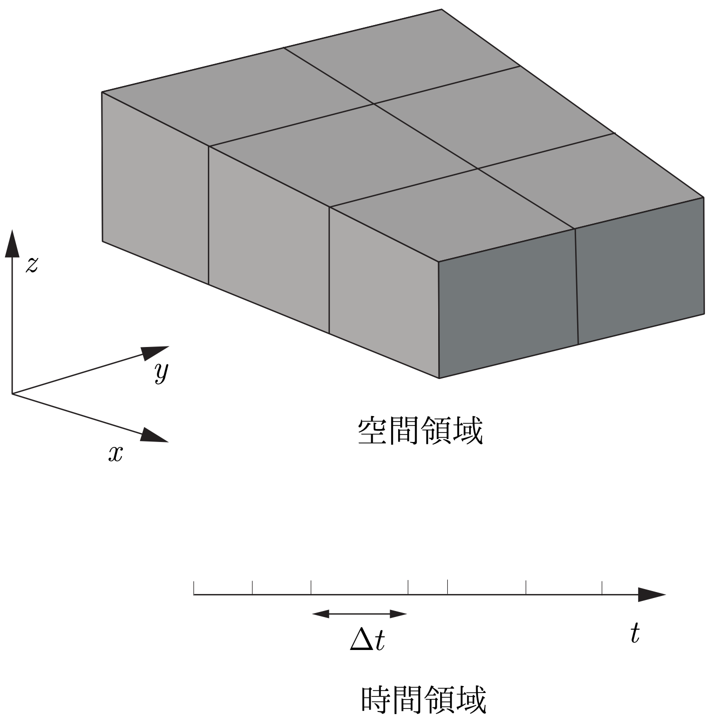


図 2.1　解析領域の離散化

よばれます．任意非構造メッシュを採用したコードは，領域の形状が複雑であったり時間変化する場合などは特に，とても自由にメッシュの生成や操作を行うことができます．

ほとんどの物理量はセル中心で定義されますが，セルの面で定義されるものもいくつかあります．セルの面には二つのタイプがあります．

内部面　二つのセル（二つを上回ることはありません）をつなぐ面です．それぞれの内部面について，OpenFOAM は隣接するセルのうち一つをその面の「所有セル」，もう一方を「隣接セル」として指定します．

境界面　一つだけのセルに属する面で，それゆえ領域の境界と一致します．これらの面には単純に所有セルしかありません．

2.3.1　OpenFOAM におけるメッシュ定義

OpenFOAM にはいくつかの異なるレベルのメッシュ記述方法がありますが，まずはもっとも基本的なメッシュクラスである polyMesh について述べます．多面体からなるので polyMesh といいます．polyMesh は以下および図 2.2 に示すように，メッシュ形状を定義するための最小限の情報で構成されます．

点　頂点の座標ベクトルのリスト，すなわち vectorField ですが，改めて `typedef` 宣言により pointField と名付けられています．

面　セルの面のリスト List<face>，あるいは faceList です．ここで，face クラスは pointField に対応する頂点番号のリストで定義されます．

セル　セルのリスト List<cell>あるいは cellList です．ここで，cell クラスは上記の faceList に対応する面番号のリストで定義されます．

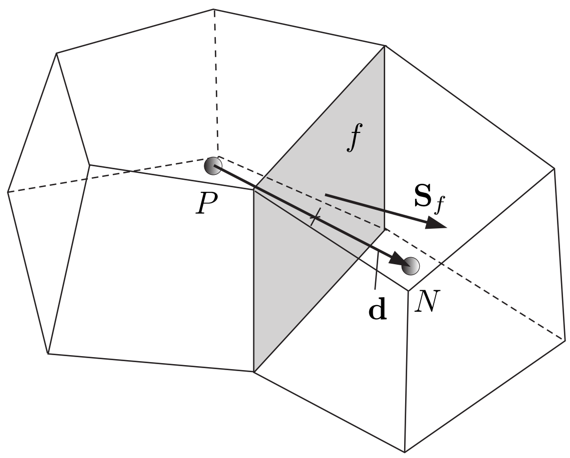


図 2.2　有限体積法の離散化におけるパラメータ

境界　polyBoundaryMesh は，境界の異なる領域を表すパッチのリスト polyPatchList から成り立っています．このような方法で，解析の際に各々のパッチに異なる境界条件を適用できるように境界が細分化されます．あらゆる polyPatch の全ての面は faceList の一つのブロックに保存されており，ブロックの最初と最後の面への参照が保存された slice クラスを使うことにより，それらの面に簡単にアクセスできます．それぞれの polyPatch は以下から成り立っています．

- slice
- 名前を付けるための word

有限体積法による離散化には，polyMesh に保存されているメッシュ形状に由来する固有のデータが使われます．そのため OpenFOAM では，polyMesh クラスを拡張した fvMesh に，有限体積法による離散化に必要な追加のデータが保存されます．fvMesh は polyMesh から構成され，表 2.1 に示すようなデータが保存されます．これらのデータは，メッシュが動いたり細分化されたりする場合には，実行時に更新することができます．

クラス	説明	記号	アクセス関数
volScalarField	セル体積	V	`V()`
surfaceVectorField	面の面積ベクトル	$\boldsymbol{S}_\mathrm{f}$	`Sf()`
surfaceScalarField	面の面積の絶対値	$\lvert\boldsymbol{S}_\mathrm{f}\rvert$	`magSf()`
volVectorField	セル中心	$\boldsymbol{C}$	`C()`
surfaceVectorField	面中心	$\boldsymbol{C}_\mathrm{f}$	`Cf()`
surfaceScalarField	面の運動流束 **	ϕ_g	`phi()`

表 2.1　fvMesh に保存されるデータ

2.3.2　OpenFOAM における geometricField の定義

これまでのところ，場，すなわちテンソルのリスト，およびメッシュが定義できます．これらを合わせることで，領域の離散点におけるテンソル場を定義することができます．これは OpenFOAM においては，テンプレートクラス geometricField<Type>によって記述されます．Field の値は，領域内部において例えばセル中心で定義されるものと，領域の境界において例えば境界面上で定義されるものに分けられます．geometricField<Type>は以下のような情報を保存します．

内部場　単純に，2.2.1 項で述べたような Field<Type>です．

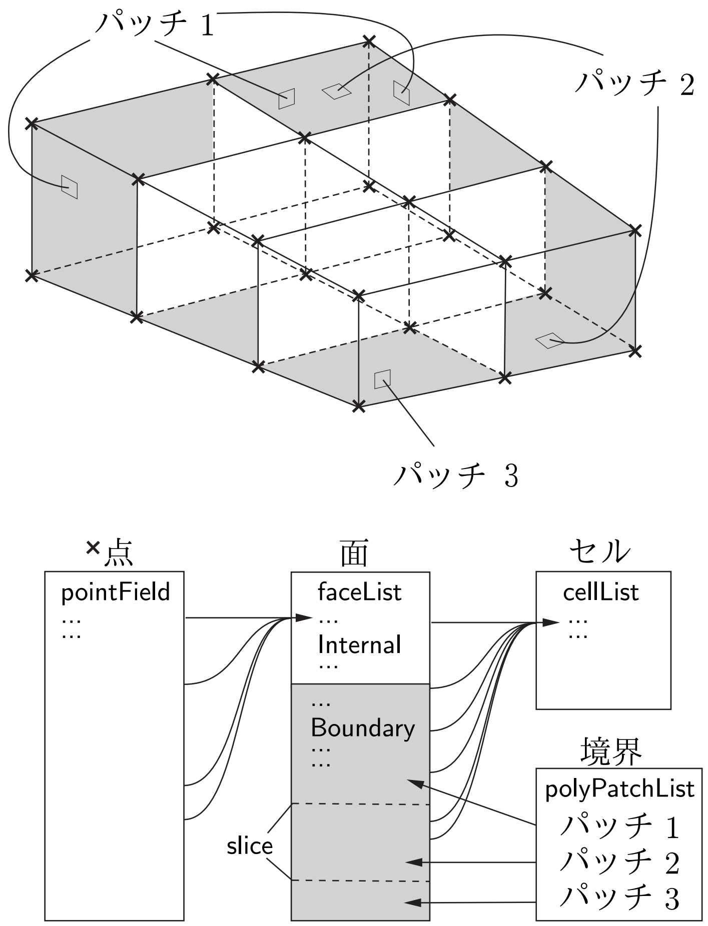


図 2.3　OpenFOAM における基本的なメッシュ表現の概略図

境界場　これは GeometricBoundaryField であり，その中では，それぞれのパッチの面について Field が定義され，その境界のパッチについて Field が定義されます．つまりこれは FieldField<Type> クラスのオブジェクトに保存される，場の場です．また fvBoundaryMesh への参照も保存されます．[**]

メッシュ　fvMesh への参照ですが，その場がセル中心，面，などのうちどこで定義されているかに応じたいくつかの詳細情報も加わります．

次元　ユーザガイドの 4.2.6 項で述べる dimensionSet です．

古い値　時間微分の離散化には，前の時間ステップにおける場のデータが必要になります．geometricField<Type>は，前の，一つ古い時間ステップ，および必要ならばその前の，二つ古い時間ステップにおいて保存された場のデータへの参照を保存しています．

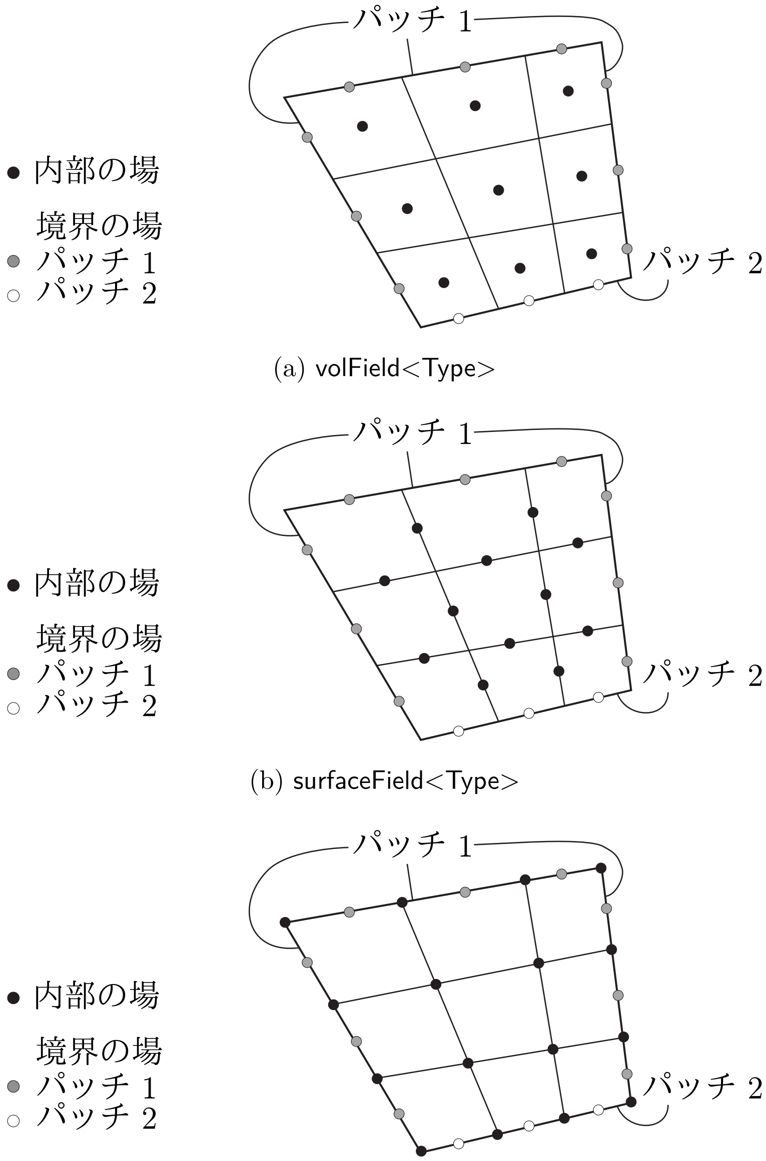
前回の反復時の値　反復解法の手順では不足緩和を利用できますが，これは前回の反復時のデータへのアクセスを必要とします．ここでも，必要であれば，geometricField<Type>は前回の反復時のデータへの参照を保存します．

2.3 節で述べたように，物理量はセル中心で定義することが主ですが，セル面上で保存することもよくあり，セル頂点で定義することもときどきあります．geometricField<Type>は，場の変数がどこで定義されているかによって，以下のように `typedef` 宣言で改名されています．

volField<Type>　場がセル中心で定義されているとき

surfaceField<Type>　場がセルの面で定義されているとき
pointField<Type>　場がセルの頂点で定義されているとき

これらの geometricField<Type>から typedef された場のクラスは図 2.4 に図示されています．geometricField<Type>は Field<Type>のテンソル代数を全て継承しており，全ての演算は dimensionSet の次元チェックに従います．また次節で述べる有限体積法の離散化手順にも依存することがあります．geometricField<Type>を作るときに使われるクラス構造は図 2.5[1]に図示されています．



(a) volField<Type>

(b) surfaceField<Type>

(c) pointField<Type>

図 2.4　二つの境界パッチをもつメッシュ上で定義された geometricField<Type>のタイプ（簡単のため 2 次元で表している）

[1] この図はクラス階層を厳密に表したものではなく，むしろいくつかの原始クラスを geometricField<Type>につながる一般的な構造を表したものです．

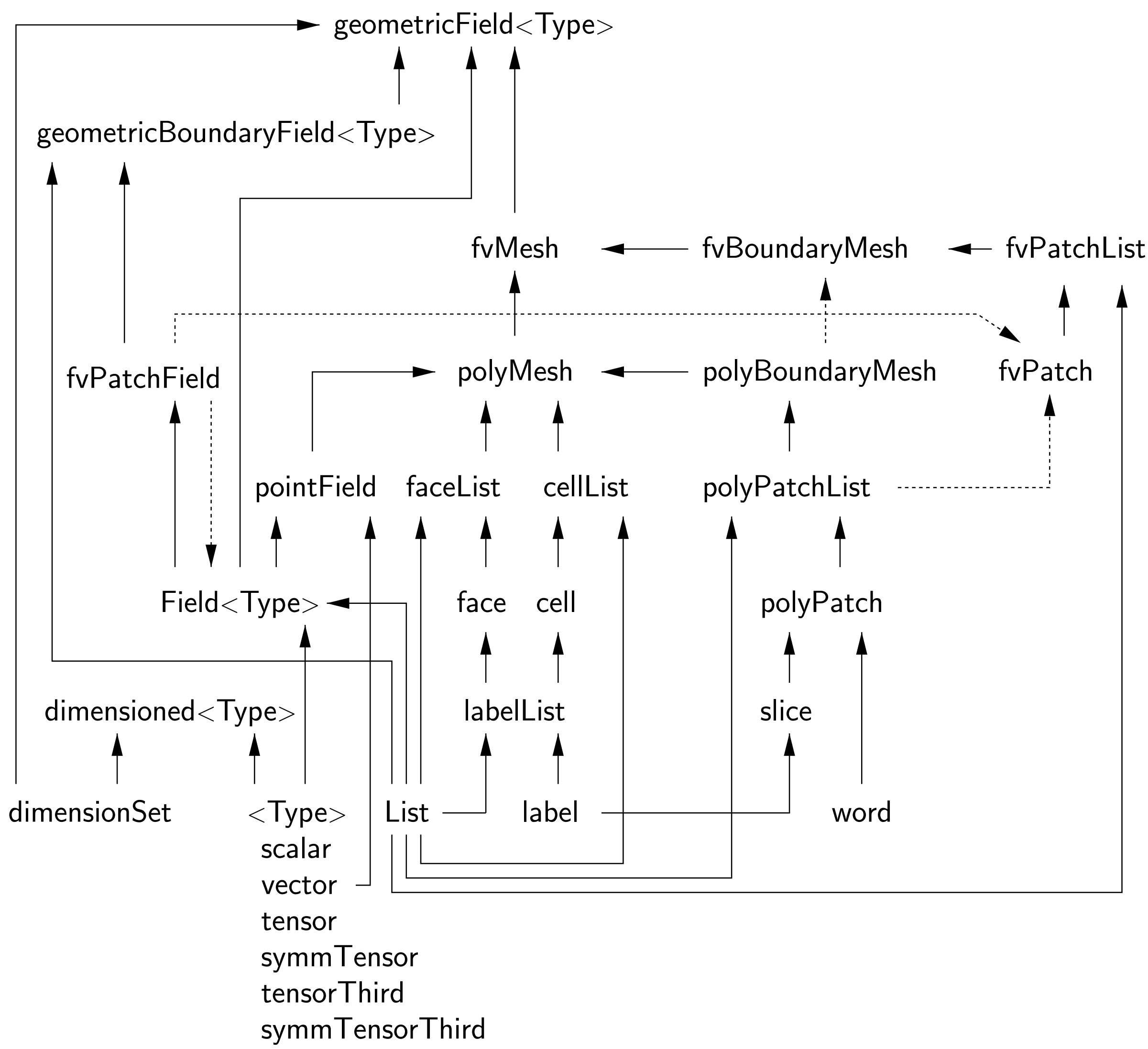


図 2.5　geometricField<Type>につながる基本的なクラス構造

2.4　方程式の離散化

方程式の離散化により，偏微分方程式は一般に以下のような行列で表される代数方程式に変換されます．

$$[A][x] = [b] \tag{2.12}$$

ここで $[A]$ は正方行列，$[x]$ は従属変数の列ベクトル，$[b]$ はソースベクトルです．$[x]$ と $[b]$ は，その形状，例えば geometricField<Type>，またはもっと厳密には，有限体積法による離散化を用いているならば volField<Type>の各位置で定義された値のリストという本来の正確な表現ではなく，むしろ行列用語でいう「ベクトル」です．

$[A]$ は代数式群の係数のリストであり，geometricField<Type>では記述できません．したがって，独自のクラス fvMatrix で与えられます．fvMatrix<Type>は geometric<Type>Field の離散化によって生成され，したがって<Type>を継承します．これは，加算 +，減算 − そして乗算 ∗ という標準的な行列の代数演算の多くをサポートします．

OpenFOAM のコードにおいて偏微分方程式の各項は，それぞれ静的な関数のクラス finiteVolumeMethod

や finiteVolumeCalculus を用いて記述されます．これらのクラスは `typedef` によって，それぞれ fvm および fvc と略されます．fvm や fvc は，例えば ∇^2，$\nabla\cdot$ および $\partial/\partial t$ といった geometricField<Type>を離散化する微分演算子を表す静的な関数を備えています．これらの関数を，一つではなく二つのクラス fvm と fvc で定義しているのは，以下のように区別するためです．

- fvm の関数は陰的な微分を計算し，fvMatrix<Type>を返す．
- fvc のいくつかの関数は陽的な微分を計算，その他は陽的な計算をし，geometricField<Type>を返す．

図 2.6 には，二つの境界パッチをもつメッシュ上で定義された geometricField<Type>を示しており，陽的な演算が単にある場を他の場に変換するだけであることを表しています．簡単のために 2 次元で描いています．

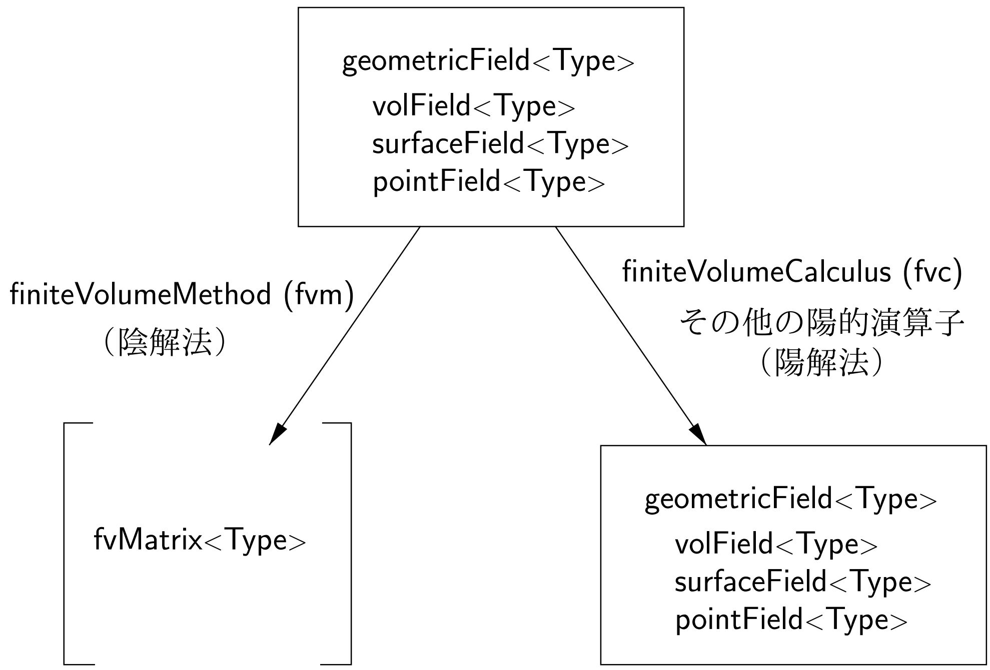


図 2.6　geometricField<Type>とその演算

fvm および fvc で使える，偏微分方程式の項を離散化する主な関数を表 2.2 にリストアップしています．各項の有限体積法による離散化は，ガウスの定理により，その体積を囲んでいるセル表面の面積分に変換されます．

$$\int_V \nabla \star \phi \,\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S} \star \phi \tag{2.13}$$

ここで $\boldsymbol{S}$ は表面積ベクトル，ϕ は任意のテンソル場，そして $\star$ はテンソル任意の乗算，例えば内積，外積，クロス積，およびそれぞれの微分，発散 $\nabla\cdot\phi$，勾配 $\nabla\phi$ および $\nabla\times\phi$ を表しています．次に，体積および面積分は各項について後述するような適切なスキームで線形化されます．OpenFOAM では，いくつかの項は常に同じスキームで離散化されますが，その他の項の離散化についてはスキームの選択肢が提供されています．スキームの選択はコードの中で直接指定することもできますし，ジョブの実行時にインプットファイルから読み込んで fvSchemes クラスのオブジェクトとして保持する方法もあります．

項の記述	陰的・陽的	記述	fvm::または fvc::の関数
ラプラシアン	陰的・陽的	$\nabla^2\phi$	`laplacian(phi)`
		$\nabla\cdot\Gamma\nabla\phi$	`laplacian(Gamma, phi)`
時間微分	陰的・陽的	$\frac{\partial\phi}{\partial t}$	`ddt(phi)`
		$\frac{\partial\rho\phi}{\partial t}$	`ddt(rho, phi)`
時間の 2 階微分	陰的・陽的	$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)$	`d2dt2(rho, phi)`
移流	陰的・陽的	$\nabla\cdot(\psi)$	`div(psi, scheme)*`
		$\nabla\cdot(\psi\phi)$	`div(psi, phi, word)*`
			`div(psi, phi)`
発散	陽的	$\nabla\cdot\chi$	`div(chi)`
勾配	陽的	$\nabla\chi$	`grad(chi)`
		$\nabla\phi$	`gGrad(phi)`
			`lsGrad(phi)`
			`snGrad(phi)`
			`snGradCorrection(phi)`
勾配の勾配の二乗	陽的	$\|\nabla\nabla\phi\|^2$	`sqrGradGrad(phi)`
回転	陽的	$\nabla\times\phi$	`curl(phi)`
湧き出し	陰的	$\rho\phi$	`Sp(rho, phi)`
	陰的・陽的 †		`SuSp(rho, phi)`

† 湧き出し `fvm::SuSp` は `rho` の符号に依存して，陰的または陽的に離散化されます．
† 陽的な湧き出しは単純に vol<Type>Field で指定されます．例：`rho*phi`
関数の引数は以下のようなクラスです．
`phi`: vol<Type>Field
`Gamma`: scalar，volScalarField，volTensorField，surfaceTensorField．
`rho`: scalar，volScalarField
`psi`: surfaceTensorField
`chi`: surface<Type>Field，vol<Type>Field

表 2.2　OpenFOAM における偏微分方程式の項の離散化

2.4.1　ラプラシアン項

ラプラシアンの項は，以下のように検査体積で積分・線形化されます．

$$\int_V \nabla\cdot(\Gamma\nabla\phi)\,\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\Gamma\nabla\phi) = \sum_f \Gamma_f \boldsymbol{S}_f\cdot(\nabla\phi)_f \tag{2.14}$$

みているセル P の中心と隣のセル N の中心の間の長さベクトル $\boldsymbol{d}$ がそのフェイス面に垂直，すなわち $\boldsymbol{S}_f$ に平行ならば，面の勾配の離散化は陰的になります．

$$\boldsymbol{S}_f\cdot(\nabla\phi)_f = |S_f|\frac{\phi_N-\phi_P}{|\boldsymbol{d}|} \tag{2.15}$$

非直交メッシュの場合，セル中心勾配（これはセル中心値の中心差分から計算される）の内挿によって評価される陽的な項が加わります．

2.4.2　対流項

対流項は，以下のように検査体積で積分・線形化されます．

$$\int_V \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}\phi)\,\mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\rho\boldsymbol{U}\phi) = \sum_f \boldsymbol{S}_f\cdot(\rho\boldsymbol{U})_f\phi_f = \sum_f F\phi_f \tag{2.16}$$

表面の場 ϕ_f はさまざまなスキームで評価されます．

中心差分 (CD)　は，2 次精度ですが不安定です．

$$\phi_f = fx\phi_P + (1 - f_x)\phi_N \tag{2.17}$$

ここで $f_x \equiv \overline{fN}/\overline{PN}$，$\overline{fN}$ は f とセル中心 N の距離，$\overline{PN}$ はセル中心同士 P と N の距離です．

風上差分 (UD)　は，流れの方向から ϕ_f を決定し，精度は犠牲になりますが安定です．

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & F \geq 0 \text{ のとき} \\ \phi_N & F < 0 \text{ のとき} \end{cases} \tag{2.18}$$

ブレンド差分 (BD)　スキームは，適切な精度で安定性を保つことを狙って UD と CD を組み合わせます．

$$\phi_f = (1 - \gamma)(\phi_f)_{\mathrm{UD}} + \gamma(\phi_f)_{\mathrm{CD}} \tag{2.19}$$

OpenFOAM には，ブレンド係数 γ を選ぶ Gamma 差分スキームのいくつかの実装がありますが，それはほかのよく知られたスキーム，van Leer，SUPERBEE，MINMOD などを表しています．

2.4.3　1 階の時間微分

1 階の時間微分 $\partial/\partial t$ は，以下のように検査体積で積分されます．

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\phi \, dV \tag{2.20}$$

この項は，以下のものを使って時間に関して単純な差分で離散化されます．

新しい値　いま解いている時間ステップの値 $\phi^n \equiv \phi(t + \Delta t)$
古い値　前の時間ステップで保存された値 $\phi^o \equiv \phi(t)$
二つ古い値　二つ前の時間ステップで保存された値 $\phi^{oo} \equiv \phi(t - \Delta t)$

ユーザガイドの 4.4 節に詳しく述べられているように，該当する入力ファイルの中で `timeScheme` キーワードを使って，二つのうち一つの離散化スキームを宣言することができます．

オイラーの陰解法　スキーム，`timeScheme EulerImplicit`，これは時間に関して 1 次精度です．

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\phi \, dV = \frac{(\rho_P\phi_P V)^n - (\rho_P\phi_P V)^o}{\Delta t} \tag{2.21}$$

後退差分　スキーム，`timeScheme BackwardDifferencing`，これは二つ前の値を保存することにより時間に関して 2 次精度であり，したがって `EulerImplicit` よりデータ保存のオーバーヘッドが大きくなります．

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\phi \, dV = \frac{3(\rho_P\phi_P V)^n - 4(\rho_P\phi_P V)^o + (\rho_P\phi_P V)^{oo}}{2\Delta t} \tag{2.22}$$

2.4.4　2 階の時間微分

2 階の時間微分は，以下のように検査体積で積分・線形化されます．

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\frac{\partial\phi}{\partial t} \, dV = \frac{(\rho_P\phi_P V)^n - 2(\rho_P\phi_P V)^o + (\rho_P\phi_P V)^{oo}}{\Delta t^2} \tag{2.23}$$

これは時間について 1 次精度です．

2.4.5　発散

この節で述べる発散項は，2.4.2 項の対流項とは区別される完全に陽的な項です．つまり対流項は，速度とある従属変数の積の発散ではありません．この項は以下のように検査体積で積分・線形化されます．

$$\int_V \nabla \cdot \phi \, \mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \phi = \sum_f \boldsymbol{S}_f \cdot \phi_f \tag{2.24}$$

`fvc::div` 関数は surface<Type>または vol<Type>Field のどちらも引数にとることができます．前者では ϕ_f は直接与えられ，後者では 2.4.10 項で述べる中心差分で値が面上に内挿されます．

2.4.6　勾配

勾配の項は様々な方法で評価できる陽的な項です．そのスキームは，例えば `fvc::gGrad`, `fvc::lsGrad` などのような離散化スキームに対して適切な特定の勾配関数を選ぶか，または入力ファイルの中の適切な `timeScheme` キーワードに連動した `fvc::grad` 関数を使うか，いずれの方法でも評価できます．

ガウス積分　は，`fvc::grad` 関数を `timeScheme Gauss` と合わせて使うことで動作します．この離散化は体積分に対してガウスの定理を適用する標準的な手法を使います．

$$\int_V \nabla \phi \, \mathrm{d}V = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\phi = \sum_f \boldsymbol{S}_f \phi_f \tag{2.25}$$

最小二乗法　は，以下の考えに基づいています．

1. 点 P における値を，点 P における勾配を使って隣の点 N に外挿する．
2. 点 N に外挿された値を，点 N における実際の値と比較，この差が誤差となる．
3. 点 P の付近の全ての点における誤差を，それぞれの勾配で重み付けして二乗した総和を最小化すれば，勾配の良い近似値が得られる．

最小二乗法は `fvc::grad` 関数を `timeScheme leastSquares` と組み合わせるか, 直接 `fvc::lsGrad` を使うことで動作します．この離散化は，まず全ての点 P において，その近隣の点 N での総和を求めて，テンソル $\boldsymbol{G}$ を計算します．

$$\boldsymbol{G} = \sum_N w_N^2 \boldsymbol{dd} \tag{2.26}$$

ここで $\boldsymbol{d}$ は P から N へのベクトルであり，重み関数は $w_N = 1/|\boldsymbol{d}|$ です．勾配は以下のように評価されます．

$$(\nabla\phi)_P = \sum_N w_N^2 \boldsymbol{G}^{-1} \cdot \boldsymbol{d}(\phi_N - \phi_P) \tag{2.27}$$

面に垂直な勾配　面に垂直な勾配 $\boldsymbol{n}_f \cdot (\nabla\phi)_f$ はセルの面において以下のスキームを使って評価できます．

$$(\nabla\phi)_f = \frac{\phi_N - \phi_P}{|\boldsymbol{d}|} \tag{2.28}$$

この勾配は `fvc::snGrad` 関数で呼び出され，surfaceField<Type>を返します．このスキームは 2.4.1 項で述べたラプラシアンの離散化スキームと似た方法で直接評価され，また同じように非直交メッシュの場合には，この面の勾配の精度を高めるために補正が加えられます．この補正は `fvc::snGradCorrection` 関数を使って呼び出されます．[Check**]

2.4.7　勾配の勾配の平方

勾配の勾配の平方の項は，場の勾配をとり，得られた勾配場の勾配をとり，そしてその結果の絶対値二乗を計算することで評価されます．ϕ の勾配の勾配の平方を数式で書くと $|\nabla(\nabla\phi)|^2$ となります．

2.4.8　回転

回転は，2.4.6 項で述べた勾配の項から評価されます．まず勾配が離散化され，それから式 (2.7) の関係（以下に再掲）を使って回転が評価されます．

$$\nabla \times \phi = 2 *(\text{skew}\,\nabla\phi)$$

2.4.9　湧き出し項

湧き出し項は三つの方法で指定できます．

陽解法　すべての陽的な項は volField<Type>です．したがって，陽的な湧き出し項は単純に値の場として等式の中に組み込まれます．例えば，`phi` と `f` を volScalarField として定義し，そして以下のようにします．

```
solve(fvm::laplacian(phi) == f)
```

陰解法　陰的な湧き出し項は，以下のように検査体積で積分・線形化されます．

$$\int_V \rho\phi\,\mathrm{d}V = \rho_P V_P \phi_P \tag{2.29}$$

陰・陽解法　陰的な湧き出し項は，行列の対角成分の係数を変えます．その係数と行列の項の符号に依存して，これは行列の対角成分の支配力を増大または減少させます．対角成分の支配力を減少させることは，行列の方程式の反復解法の際の不安定さを引き起こします．したがって，OpenFOAM は混成の湧き出し項の離散化方法を提供しており，これは係数が正のとき陰的に，負のときには陽的になります．数式上は，点 P に対する行列の係数は $V_P \max(\rho_P,\ 0)$，そして湧き出し項は $V_P\phi_P \min(\rho_P,\ 0)$ となります．

2.4.10　その他の陽的な離散化スキーム

他にも volField<Type>を surface<Type>Field に，および逆に変換する離散化手法がいくつかあります．

面積分　`fvc::surfaceIntegrate` は，それぞれのセルを区切る面での値 surface<Type>Field の総和をとり，セルの体積で割るという操作をします．すなわち $(\sum_f \phi_f)/V_P$ となります．これは volField<Type>を返します．

面総和　`fvc::surfaceSum` は，それぞれのセルを区切る面での値 surface<Type>Field の総和をとる操作です．すなわち $\sum_f \phi_f$ となり，volField<Type>を返します．

平均値　`fvc::average` は，面の値 surface<Type>Field の面積重み付け平均をとります．すなわち $(\sum_f S_f\phi_f)/\sum_f S_f$ となり，volField<Type>を返します．

面内挿　geometric<Type>Field の関数 `faceInterpolate()` は，セル中心の値 volField<Type>を，中心差分を使ってセルの面上へ内挿し，surface<Type>Field を返します．

2.5　時間微分

時間微分の離散化については 2.4.3 項および 2.4.4 項で述べましたが，非定常問題における空間微分の扱い方について考える必要があります．もし $\mathcal{A}$ を任意の空間微分演算子，例えばラプラシアン，として，あらゆる空間微分を $\mathcal{A}\phi$ で表すとすれば，非定常の偏微分方程式を積分型で以下のように表記できます．

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\phi \, \mathrm{d}V + \int_V \mathcal{A}\phi \, \mathrm{d}V \right] \mathrm{d}t = 0 \tag{2.30}$$

式 (2.21) のオイラー陰解法を使うと，第 1 項は次のように書けます．

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\phi \, \mathrm{d}V \right] \mathrm{d}t = \int_t^{t+\Delta t} \frac{(\rho_P \phi_P V)^n - (\rho_P \phi_P V)^o}{\Delta t} \mathrm{d}t \tag{2.31}$$

$$= \frac{(\rho_P \phi_P V)^n - (\rho_P \phi_P V)^o}{\Delta t} \Delta t \tag{2.32}$$

第 2 項は次のように書けます．

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \mathcal{A}\phi \, \mathrm{d}V \right] \mathrm{d}t = \int_t^{t+\Delta t} \mathcal{A}^* \phi \, \mathrm{d}t \tag{2.33}$$

ここで $\mathcal{A}^*$ は空間で離散化した $\mathcal{A}$ を表します．時間積分は三つの方法で離散化できます．

オイラー陰解法　空間については陰解法で離散化し，したがって現在の値 ϕ^n をとります．

$$\int_t^{t+\Delta t} \mathcal{A}^* \phi \, \mathrm{d}t = \mathcal{A}^* \phi^n \Delta t \tag{2.34}$$

これは時間について 1 次精度であり，有界性と無条件安定性を保証します．

陽解法　空間については陽解法で離散化し，したがって前の時刻の値 ϕ^o をとります．

$$\int_t^{t+\Delta t} \mathcal{A}^* \phi \, \mathrm{d}t = \mathcal{A}^* \phi^o \Delta t \tag{2.35}$$

これは時間について 1 次精度であり，もしクーラン数 Co が 1 より大きければ不安定です．クーラン数は以下のように定義されます．

$$Co = \frac{\boldsymbol{U}_f \cdot \boldsymbol{d}}{|\boldsymbol{d}|^2 \Delta t} \tag{2.36}$$

ここで $\boldsymbol{U}_f$ は代表速度，例えば波面の速度，流れの速度などです．

クランク・ニコルソン法　空間の項の離散化に台形公式を使い，したがって現在の値 ϕ^n と前の時刻の値 ϕ^o の平均値をとります．

$$\int_t^{t+\Delta t} \mathcal{A}^* \phi \, \mathrm{d}t = \mathcal{A}^* \left(\frac{\phi^n + \phi^o}{2} \right) \Delta t \tag{2.37}$$

これは時間について 2 次精度であり，無条件で安定ですが，有界性は保証されません．

2.5.1 OpenFOAM における時間微分の取扱い

現在のところ，時間の離散化の取り扱いは，解くべき偏微分方程式における空間微分の実装によって制御されます．例えば，非定常の拡散方程式を解きたいとします．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \kappa \nabla^2 \phi \tag{2.38}$$

これに対するオイラーの陰解法は以下のようになります．

```
solve(fvm::ddt(phi) == kappa*fvm::laplacian(phi))
```

ここで Laplacian の項を陰解法で離散化するために fvm クラスを使います．陽解法で実装するには以下のようにします．

```
solve(fvm::ddt(phi) == kappa*fvc::laplacian(phi))
```

今度は Laplacian の項を陽解法で離散化するために fvc クラスを使います．クランク・ニコルソン・スキームは，陰解法と陽解法の平均をとることで実装できます．

```
solve
    (
    fvm::ddt(phi)
    ==
    kappa*0.5*(fvm::laplacian(phi) + fvc::laplacian(phi))
    )
```

2.6 境界条件

解きたい問題を完成させるためには境界条件が必要です．したがって全ての境界面において境界条件を指定しなければなりません．境界条件は二つのタイプに分けられます．

ディリクレ条件 は，その従属変数の境界における値を定めます．したがって，このガイドでは「固定値」とよびます．

ノイマン条件 は，その従属変数の境界に垂直な勾配を定めます．したがって，このガイドでは「固定勾配」とよびます．

面にわたる総和 $\sum_f$ を含む項の離散化を行うときには，それらの面のうちの一つが境界面であったらどうなるかを考慮する必要があります．

固定値 境界における値 ϕ_b を指定

- 離散化に，境界面における値 ϕ_f を使う場合は，単純に ϕ_b で置き換えることができます．例えば式 (2.16) の移流項の場合です．
- 面における勾配 $(\nabla\phi)_f$ が必要な項，例えばラプラシアンなど，の場合には，その勾配は境界面における値とセル中心の値を使って計算されます．

$$\boldsymbol{S}_f \cdot (\nabla\phi)_f = |S_f| \frac{\phi_b - \phi_P}{|\boldsymbol{d}|} \tag{2.39}$$

固定勾配 固定勾配境界条件 g_b は，勾配と，境界の単位法線ベクトルとの内積になります．

$$g_b = \left(\frac{\boldsymbol{S}}{|\boldsymbol{S}|} \cdot \nabla\phi\right)_f \tag{2.40}$$

- 離散化に，境界面における値 ϕ_f を使う場合は，セル中心の値を境界上に内挿する必要があります．

$$\begin{aligned}\phi_f &= \phi_P + \boldsymbol{d} \cdot (\nabla\phi)_f \\ &= \phi_P + |\boldsymbol{d}| g_b \end{aligned} \tag{2.41}$$

- 離散化に面の勾配が評価される場合は，直接 g_b で置き換えることができます．

$$\boldsymbol{S}_f \cdot (\nabla\phi)_f = |S_f| g_b \tag{2.42}$$

2.6.1　物理的な境界条件

境界条件の指定は通常，本当の振る舞いに対するエンジニアの解釈です．現実の境界条件は一般に，前節で述べたような数値的記述ではなく，物理的な特性によって定義されます．非圧縮性流体の流れでは，以下のような物理的な境界があります．

入口　入口における速度場が与えられ，それと整合させるために，圧力の境界条件は勾配ゼロになります．

出口　出口における圧力場が与えられ，速度には勾配ゼロ境界条件が指定されます．

滑りなし不浸透性壁面　流体の速度は壁面自身の速度と等しくなり，したがって，固定値条件が指定されます．壁を通り抜ける流束がゼロであることから，圧力は勾配ゼロが指定されます．

解の領域と境界条件がある面について対称となるような問題では，その対称面の片側の半分の領域だけしかモデル化する必要はありません．その面の境界条件は以下に従って指定しなければなりません．

対称面　対称面条件は，その面に垂直な勾配成分をゼロと指定します．[Check**]