高速流解析ソフトウェアAdvance/FOCUS-iの紹介

中森　一郎*　　桐原　亮平*

Overview of Advance/FOCUS-i

Ichiro Nakamori* and Ryohei Kirihara*

ここでは、Advance/FOCUS-i の基本機能について述べ、改良点と特徴を述べるとともにこれらを検証するための解析事例について解説する。また、ベクトルマシンでの計算効率化の取り組みについて併せて掲載する。

Keywords: 圧縮性流体、衝撃波、爆轟波、燃焼流、高温気体効果、実在気体、ベクトル計算機

1. はじめに

近年の計算機の発達に伴って流体と構造の連成解析が一般的に広く普及してきた。なかでも、高圧かつ高速な流れと構造物が干渉するような問題を解析するには、衝撃波や爆轟波をはじめとする種々の圧力波を安定かつ効率的に扱いながら構造物の解析と迅速に情報交換することが必要である衝撃波の捕獲にはシミュレーションに特有な不安定現象に遭遇することがあり、これはユーザーにとって非常に厄介である。本稿ではこの問題の対応策を述べるとともに理想気体や高温気体反応流などの検証例を幾つか示す。また、非定常的な現象をシミュレーションする場合は、計算アルゴリズムが高速であることが必須であり、搭載するハードウェアの特徴を活かすことも必要である。このような背景を踏まえ、当社では高速流に圧縮性が顕著に現われる解析のためのソフトウェア Advance/FOCUS-i を開発してきた。本章では、計算例とともに主だった機能を紹介する。

2. 支配方程式

2.1. 基礎方程式

基礎方程式として、いわゆる圧縮性 Navier-Stokes（NS）方程式を用い、その支配方程式は積分型で次式のように表せる。

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V Q\,dv + \int_s \left(E n_x + F n_y + G n_z\right) ds = \int_s \left(E_v n_x + F_v n_y + G_v n_z\right) ds + \int_V S\,dv \tag{1}$$

ここで Q は解ベクトル $Q = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e, e_v, \rho_i)$ であり、ρ は密度、u、v、ならびに w は速度成分を表す。e は単位体積当たりの全エネルギーを表す。また、ρ_i と e_v は 化学種の質量と振動エネルギーを表し、化学反応流を扱う際に考慮される。さらに、添字の v は粘性項であることを表し、$\boldsymbol{n} = \left(n_x, n_y, n_z\right)^t$ は検査面の単位法線ベクトルである。なお、S は化学反応生成項とエネルギー緩和項を表す。Advance/ FOCUS-i では、与えられた支配方程式を有限体積法により離散化し、種々の数値解法を適用する。

2.2. 離散化

本節では(1)式により与えられた NS 方程式の離散化について説明する。記述をコンパクトにするために非粘性流束と粘性流束について
$\boldsymbol{E(Q)} = E n_x + F n_y + G n_z$ ならびに
$\boldsymbol{E}_v\boldsymbol{(Q)} = E_v n_x + F_v n_y + G_v n_z$ とあらためて定義する。これを用いて(1)式の左辺第２項は有限体積法において以下のように半離散的に記述できる。

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V Q\,dv + \sum_k \left[\boldsymbol{E}(Q) - \boldsymbol{E}_v(Q)\right] S_k = 0 \tag{2}$$

ここで V は検査体積であり、S_k は i 番目の検査体積 V_i を囲む k 番目の検査面である。さらに、

*アドバンスソフト株式会社　第 2 事業部
2nd Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

$\boldsymbol{n}=\left(n_x, n_y, n_z\right)^t$ 、$\boldsymbol{l}=\left(l_x, l_y, l_z\right)^t$ 、および $\boldsymbol{m}=\left(m_x, m_y, m_z\right)^t$ の正規直交基底で構成される行列 T を用いれば、非粘性流束 $\boldsymbol{E(Q)}$ は以下のように書き換えられる。

$$\boldsymbol{E}(Q)=T^{-1}\,T\,\boldsymbol{E}(Q)=T^{-1}\,\boldsymbol{H}(Q) \tag{3}$$

上式の $\boldsymbol{H}(Q)$ は検査面の法線方向に再構築された流束表現であり、具体的には以下のように表せる。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}(Q)=(&\rho u_n,\ \rho u_n^2+p, \rho u_n u_l, \rho u_n u_m, \rho u_n H,\\ &\rho_1 u_n,\cdots,\rho_j u_n,)^t\end{aligned} \tag{4}$$

ここで、速度成分 u_n 、u_l 、および u_m はそれぞれ $u_n=un_x,+vn_y+wn_z$ 、$u_l=ul_x,+vl_y+wl_z$ 、$u_m=um_x,+vm_y+wm_z$ である。また、行列 T は下記の通りであり、

$$T=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0&\dots&0\\0&n_x&n_y&n_z&0&0&\dots&0\\0&l_x&l_y&l_z&0&0&\dots&0\\0&m_x&m_y&m_z&0&0&\dots&0\\0&0&0&0&1&0&\dots&0\\0&0&0&0&0&1&\dots&0\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&0&0&0&0&\dots&1\end{pmatrix} \tag{5}$$

行列 T^{-1} は行列 T の転置行列である。

2.3. 対流項の構成方法

本節では法線方向に再構築された流束表現 $\boldsymbol{H}(Q)$ に対する数値スキームについて記述する。

2.3.1. 風上化について

圧縮性流れでは、不連続面などの流れの急峻な分布に対応するために風上法などの数値的な安定化手法が必要である。風上化の 1 つは、セル境界に衝撃波管の初期値問題を計算ステップ毎に設定し続ける Godunov 型の解法があり、これをベースとして反復を伴わない近似的な流束の構成方法として近似リーマン解法が存在する。代表的な近似リーマン解法には Flux-difference splitting(FDS)や Flux-Vector splitting(FVS)がある。FVS 法では 1 つのセル境界を挟む 2 つの計算格子からそれぞれ個別にセル境界へ向かって風上量が算出される。これまでに様々な改良が試みられ AUSM(Advection Upstream Splitting Pressure)型の数値流束の構成方法となって現在に至っている。

次に AUSM 型の数値スキームについて概説する。AUSM 型の数値流束では、Hänel[1]の FVS と同様に $\boldsymbol{H_k}$ は以下のような移流項と圧力項に分けて表され、ヤコビアン行列を伴わない形であるために化学種の変更や気液二相流への拡張が容易であるという利点をもつ。

$$\boldsymbol{H_k}=\boldsymbol{H_k^{(c)}}+\mathbf{p}_k \tag{6}$$

ここで、

$$\boldsymbol{H_k^{(c)}}=m_k\Psi_k \tag{7}$$

$$\mathbf{p_k}=\left(0,p_k,0,\ldots,0\right) \tag{8}$$

であり、Ψ_k は $\Psi_k=\left(1,u_n,u_l,u_m,H,f_i,\ \ldots\right)^t$ である。H はトータルエンタルピーであり、f_i は i 種の化学種の質量分率である。また、m_k と p_k については、それぞれ計算格子 i と計算格子 j のセル境界を過ぎる質量流量 $\left(\rho u_n\right)_k$ と圧力であり、それぞれの計算格子の音速と速度成分 u_n で計算されるマッハ数の情報から構築する。この方法には AUSMDV[7]をはじめとして幾つかのバージョンが存在する。

2.3.2. 対流項の高精度化の方法

対流項の高精度化は、(6)〜(8)式において計算格子 i と計算格子 j で定義される諸量の代わりに、セル境界 k 上に内挿した値を使用することで達成する。例として、TVD 制限関数 ϕ を用いてセル境界値は以下のように内挿する。

$$Q_{i,k}=Q_i+\phi\nabla Q_i\cdot r_i \tag{9}$$

ここで添字の i,k はセル中心 i からセル境界 k へ内挿していることを表す。また、r_i はセル中心からセル境界までのベクトルである。

2.3.3. 粘性項、または高精度化で使用する諸量の勾配の計算法

(2)式に含まれる粘性流束 $\boldsymbol{E}_v(Q)$ では、セル境界上の速度と温度のそれぞれの 1 階微係数が必要になる。例えば 1 つのやり方として図 1 のようにセル境界を囲む検査面 s_k と検査体積 V を取り直し、ガウスの発散定理を用いることにより検査体積における体積平均的な勾配を算出する。速度成分 u の勾配を計算するには、ガウスの発散定理は

$$\int_V \nabla u\, dv = \int_s u\, ds \tag{10}$$

であるので

$$V\,\nabla\overline{u} \equiv \int_V \nabla u\, dv \tag{11}$$

という検査体積における平均的な勾配を定義すれば

$$\nabla\overline{u} \equiv \frac{1}{V}\int_s u\, ds = \frac{1}{V}\sum_l (u_l s_l) \tag{12}$$

で求めることができる。ここで l は新たに作成された検査体積を構成する検査面の番号である。

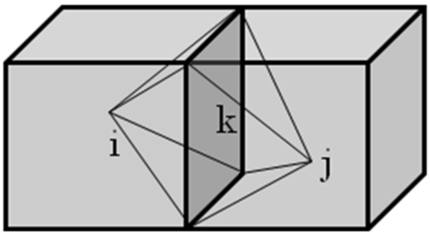


図 1　計算格子 i と計算格子 j に挟まれたセル境界 k、そのセル境界 k を囲む検査体積を取り直すイメージ図

2.4. 時間積分法

本節では、時間積分法について説明する。

2.4.1. 陽解法

陽解法を選択する場合、本ソフトウェアでは Euler 陽解法または Rung-Kutta 陽解法が使用できる。まず(2)式は以下のように書き換えられる。

$$V_i \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} = -R_i^n \tag{13}$$

ここで添字の i は計算格子の番号を意味し、n は時刻レベルを表す。また、右辺は残差ベクトル R としてまとめており、V は計算格子の体積である。Euler 陽解法の場合は下記の式で計算ができる。

$$\boldsymbol{Q}_i^{n+1} = \boldsymbol{Q}_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} R_i^n \tag{14}$$

Rung-Kutta 陽解法の場合は次式のように書ける。

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{Q}_i^0 = \boldsymbol{Q}_i^n \\ &\boldsymbol{Q}_i^k = \boldsymbol{Q}_i^0 - \alpha_k \frac{\Delta t}{V_i} R_i(\boldsymbol{Q}^{k-1}) \\ &\boldsymbol{Q}_i^{n+1} = \boldsymbol{Q}_i^m \\ &k = 1, 2, \ldots, m \end{aligned} \tag{15}$$

2.4.2. 陰解法

Navier-Stokes の式は右辺の残差ベクトルを n+1 で評価すると

$$V_i \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} = -R_i^{n+1} \tag{16}$$

と書け、さらに以下のように線型化できる。

$$R_i^{n+1} = R_i^n + \left(\frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{Q}}\right)^n \Delta \boldsymbol{Q} \tag{17}$$

ここで、ヤコビアン行列 $\partial R/\partial \boldsymbol{Q}$ を求める際には、レイノルズ平均流の乱流を扱うことを別として、粘性項の寄与は小さいとしてこれを無視している。そこであらためて

$$A_i = \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{Q}} = \frac{\partial \boldsymbol{E}(\boldsymbol{Q})}{\partial \boldsymbol{Q}} \tag{18}$$

として $A_k = \partial \boldsymbol{H}_k / \partial \boldsymbol{Q}'_k$ とは区別しておく。さらに、時間的な変動に対して風上成分を考慮するために $A_i^{\pm} = 0.5(A_i + \sigma I)$ とし、$A_i = A_i^+ + A_i^-$ と分割しておく。ここで σ は行列 A_i の最大固有値である。これらの式から、計算格子 i から計算格子 j への向きを風上方向のプラス側と定義すれば次式を得る。

$$\left(\frac{V_i}{\Delta t} I + \sum_k A_i^+ s_k\right)\Delta \boldsymbol{Q}_i + \sum_k A_i^- s_k \Delta \boldsymbol{Q}_j = -R_i^n \tag{19}$$

本ソフトウェアでは、上式の左辺は LU-SGS 法を適用して計算を実施することができる。

2.5. 高速流れの解析のための改良

鈍頭物体前方などに見られる離脱衝撃波に関し、Pandolfi ら[4]によれば AUSM[5]、AUSMV[7]、AUSMD[7]、HLLC[3]といった、接触面や境界層に対して数値粘性の少ない衝撃波捕獲スキームは殆ど全て、空間 1 次精度で使用する場合でさえも、衝撃波に沿う方向に格子分解能が高い格子上では全てカーバンクル現象を生じることが分かっている。カーバンクルとは衝撃波が歪み、解析的な解から明らかに逸脱した状態を指す。カー

バンクル対策として提示されている様々な手法のうち、Wada[7]らの Shock-fix 法や、Pandolfi[4]らによる方法は、構造格子の配置を前提にしているものの、衝撃波に沿う方向に横波が伝播しづらくさせることを意図してその方向にだけ散逸的なスキームを適用する、もしくは散逸項を付加してカーバンクルを抑制しようとする手法と考えられる。Shock-fix 法の実際をさらに見ていくと、周方向の格子分解能が高い計算格子では、1 次精度の Hanel[1]の FVS を Shock-Fix のツールとして用いてもカーバンクルを抑制できないことが分かっている[8]。これは、澱み流線を横断する方向に数値粘性が掛かりにくい状況となるためであり、さらに安全なカーバンクル対策を講じておく必要がある。また、オリジナルの Shock-Fix 法[7]は構造格子のデータ点の取り方を前提としているため非構造格子では用いづらい。このため、衝撃波を跨ぐ方向とそれ以外の方向を区別せずに衝撃波検知を簡単化し、三角形要素のような非構造格子でも適用が可能な手法を考えることとする。圧力勾配を用いて衝撃波位置を検知しそのセルの周囲に目印を付ける方法とした。検知方法は幾つか考えられるが、具体的には(20)式のように実施した[8]。

$$\omega_i = \begin{cases} 0 & \text{if } \omega_i' \le 0.2 \\ 1 & \text{else} \end{cases}$$
$$\text{where} \quad \omega_k = \left|p_i - p_j\right| / \min\left(p_i, p_j\right), \qquad (20)$$
$$\omega_i' = \max_l\left(\omega_{i(l)}\right)$$

(20)式では、まず計算セル i と j で挟まれた面 k で圧力差の情報を格納しておく。次に、これらの圧力差情報から、計算セル i を囲む面 $i(l)$ の中から最大値を選択し、計算セル i 毎に ω_i を格納する。ただし、衝撃波以外の圧力勾配情報を除外することを目的として閾値（=0.2）以下は ω_i をゼロとしている。また、衝撃波内部とその近傍で 1 次精度とし、それ以外は通常の MUSCL-TVD を適用することを想定しているが、これらの切り替えが極端であると定常解への収束が悪くなるため、ω_i =1 とはじめに印を付けられた場所の ω_i の値は変更せずに ω_i の分布を緩和させた。緩和の過程は以下の 1 セット 2 段回の漸化式のように表され、そのセットの繰り返し数は、特に記載がない場合は n=10 回とした。LU-SGS 陰解法や Euler 陽解法を用いる場合には、この工程を各タイムステップで実行するが、3 段階の Runge-Kutta 時間積分を適用する場合は、1 タイムステップ進める間の各々の Runge-Kutta ステージでこの工程を実行することとした。

$$\begin{aligned} \omega_i(n+1/2) &= \tfrac{1}{2}\omega_i(n) \\ &\quad + \tfrac{1}{2}\left\{\tfrac{1}{2}\max_k\left[\omega_{k(i)}(n)\right] + \tfrac{1}{2}\min_k\left[\omega_{k(i)}(n)\right]\right\} \\ \omega_i(n+1) &= \begin{cases} \omega_i(n) & \text{if } \omega_i(n) = 1 \\ \max(0, \min(1, \omega_i(n+1/2))) & \text{else} \end{cases} \end{aligned} \qquad (21)$$

ここで添え字 $k(i)$は計算セル i と面を共有する計算セル全てを表す。このようにして得た ω_i を用いて、セル番号 i と j で挟まれたセル境界 k のフラックスは以下のように dissipative なスキームへ強制的に差し替えるようにする。

$$f_k = \begin{cases} f_{k,dissipative} & \text{if } \omega_i > 10^{-5} \text{ or } \omega_j > 10^{-5} \\ f_{k,non-dissipative} & \text{else} \end{cases} \qquad (22)$$

$f_{k,dissipative/non-dissipative}$ については後述する。散逸性の高い空間 1 次精度のスキームを衝撃波周囲に配置するほうが有利であることは文献[8]で述べた通りであり、そのことを踏襲するため、（22）式による dissipative なスキームへの差し替えと並行して(9)式に示した MUSCL 内挿式を次のように変更する。

$$\boldsymbol{Q}_{i,k} = \boldsymbol{Q}_i + \frac{1}{2}\left[1 - \max(\omega_i, \omega_j)\right]\overline{\Delta}_i^- \qquad (23)$$

(23)式では、セル境界を挟むセル中心の ω_i もしくは ω_j がゼロ以上の値をもつ場合は、TVD 制限関数に関係なく空間精度を 1 次精度に近づけることを意図している。これ以降では、便宜上、上記の(20)～(23)式の手順を Shock-Fix2(SF2)と表記し、Shock-Fix[7]とは区別して用いることとする。

SF2 により検知した計算セルにおいて使用する数値流束は、衝撃波面に沿う方向の運動量に対して強い散逸効果をもち、衝撃波捕獲に優れ、定常衝撃波に対してエンタルピーの保存性が良いことが望ましい。これらの性質を併せ持つ FVS 法は

和田[6]によって提案されており、本報告においてはこれを FVS-W と表記し、SF2 と併用し $f_{k,dissipative}$ として用いることとする。FVS-W は以下のように記述される。

$$\begin{pmatrix} \rho u_n \\ \rho u_n^2 + p \\ \rho u_n u_t \\ \rho u_n H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_L u_{nL}^+ + \rho_R u_{nR}^- \\ \rho_L u_{nL} u_{nL}^+ + \rho_R u_{nR} u_{nR}^- + p^+ + p^- \\ \rho_L u_{tL} u_{nL}^+ + \rho_R u_{tR} u_{nR}^- \\ \rho u_n H = \rho_L H_L u_{nL}^+ + \rho_R H_R u_{nR}^- \end{pmatrix} \tag{24}$$

ここで添え字 t は(4)式の l または m に相当する。また、FVS-W における $u_n^\pm$ と $p^\pm$ は次式で表される[6]。

$$u_n^\pm = \pm \frac{c(1 - f^\mp M_n)}{f^+ - f^-},\ p^\pm = \frac{p}{c} f^\pm u_n^\pm, \\ f^\pm = -\gamma M_n \pm \sqrt{(\gamma^2 - 1)\left[M_n^2 + 2/(\gamma - 1)\right]} \tag{25}$$

ここで $M_n = u_n / c$ であり、セル境界に垂直方向の速度成分を音速で除した値を用いる。また、γ は比熱比であり理想気体の場合は $\gamma = \rho c^2 / p$ で諸量と結び付けられる。反応気体を扱う際には、密度、音速、および圧力から形式的に定義して用いることができる。

衝撃波から離れた領域は SF2 (FVS-W)の適用外となり、スキームには $f_{k,non-dissipative}$ が適用される。そこでは、移動接触不連続面、スリップライン、および境界層に対する精度の確保が必要である。また、FVS-W と速度分割と圧力分割法が類似した形式をもち、トータルエンタルピーの保存性を保持するスキームのほうが、スキームの切り替え時に不都合が少ない。そこで、FVS-W に立脚した AUSM-V タイプのスキームを用意する。まず、FVS-W の質量流束を圧量依存項とそれ以外に分類して書き換えておく。

$$\rho u_n = \left(\rho u_n\right)^+ + \left(\rho u_n\right)^-$$

where

$$\left(\rho u_n\right)^+ = \rho_L c_L \left(\lambda_1^+ / c\right)_L \\ + \tfrac{1}{2}\left(p/c\right)_L \left[(\lambda_2^+ + \lambda_3^+ - 2\lambda_1^+)/c\right]_L \\ \left(\rho u_n\right)^- = \rho_R c_R \left(\lambda_1^- / c\right)_R \\ + \tfrac{1}{2}\left(p/c\right)_R \left[(\lambda_2^- + \lambda_3^- - 2\lambda_1^-)/c\right]_R \tag{26}$$

ここで添え字の L と R はそれぞれセル境界の左側と右側を表し、空間 1 次精度の場合は $L = i$、$R = j$ であり、MUSCL-TVD 補間を用いる場合はその補間値が入ることを表す。また、u_n が定義されるのと同方向での運動量流束は FVS 形式で次のように記述される。

$$\rho u_n^2 + p = \left(\rho u_n^2 + p\right)^+ + \left(\rho u_n^2 + p\right)^-$$

where

$$\left(\rho u_n^2 + p\right)^+ = \left(\rho u_n\right)^+ (u_n)_L + \tfrac{1}{2} p_L \left[(\lambda_2^+ - \lambda_3^+)/c\right]_L \\ \left(\rho u_n^2 + p\right)^- = \left(\rho u_n\right)^- (u_n)_R + \tfrac{1}{2} p_R \left[(\lambda_2^- - \lambda_3^-)/c\right]_R \tag{27}$$

セル境界面の接線方向の運動量流束とエネルギー流束も同様に書ける。

$$\begin{pmatrix} \rho u_n u_t \\ \rho u_n H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[\left(\rho u_n\right)^+ u_t\right]_L + \left[\left(\rho u_n\right)^- u_t\right]_R \\ \left[\left(\rho u_n\right)^+ H\right]_L + \left[\left(\rho u_n\right)^- H\right]_R \end{pmatrix} \tag{28}$$

ここで $\lambda_i^\pm$ は、FVS-W に対応させると以下のように書き表せる。

$$\lambda_1^\pm = u_n\, p^\pm / p \\ \lambda_2^\pm = p^\pm / p \left[u_n (1 - \rho c^2 / p) + c\right] + (\rho c^2 / p) u_n^\pm \\ \lambda_3^\pm = p^\pm / p \left[u_n (1 - \rho c^2 / p) - c\right] + (\rho c^2 / p) u_n^\pm \tag{29}$$

これらの $\lambda^\pm$ は、保存則に関連する拘束条件 $\lambda^+ + \lambda^- = \lambda$ を満たす。(29)式を(27)式に代入し、(28)式と併せて FVS-W が構成できるが、この手順では未だオリジナルの FVS-W から逸脱していない。一般に FVS 法は接触不連続面や剪断層に対して過大な数値粘性を含む。1 つの要因は、(27)式のプラスの側とマイナス側の分割流束の和で数値流束を構成する際に圧力項が消滅しないからである[8]。2 つ目の要因は移流項のプラスとマイナスの和で構成される数値流束が、移動する接触面または静止した接触面に対して厳密解と一致する保証がないためである。これらを是正することを目的として、数値流束が接触不連続面に対して適切な値となるように、できる限り変更点の少ない設計変更を考える。セル境界を跨いで接触不連続面が存在する際、つまり圧力差と面を跨ぐ速度差がなく $p_{L/R} \to p$, $\left(u_n\right)_{L/R} \to u_n$ のとき、$c_{L/R} \to \left(c_i + c_j\right)/2$、$(\lambda_1^\pm)_{L/R} \to \left(u_n \pm |u_n|\right)/2$ と変更し、セル境界面の接線方向の運動量流束とエネルギー流束を AUSM のように質量流束の向きで定

義し直せば良い[8]。そこで、これらの変更に関し、次のように圧力場の情報を有する重み係数 s で定義を切り替える形式を用いた。

$$\begin{aligned} c^{new}_{L/R} &= s c^{old}_{L/R} + (1-s)\left(c_i + c_j\right)/2 \\ \lambda_1^{\pm} &= s f^{\pm} u_n^{\pm} M_n + (1-s)\left(u \pm |u|\right)/2 \end{aligned} \tag{30}$$

ただし、セル境界の両側の音速 $c^{old}_{L/R}$ はセル中心の音速 $c_{i/j}$ を使用することで計算を簡便化して用いた。また、セル境界面の接線方向の運動量流束とエネルギー流束は以下のように表せる。

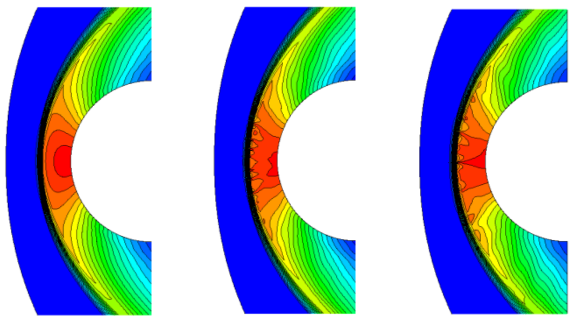
$$\begin{aligned} \rho u_n u_t &= s\left[\left(\rho u_n\right)^{+}(u_t)_L + \left(\rho u_n\right)^{-}(u_t)_R\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}(1-s)\left[\left(\rho u_n\right)\left((u_t)_L + (u_t)_R\right)\right. \\ &\qquad \left. - \left|\rho u_n\right|\left((u_t)_R - (u_t)_L\right)\right] \\ \rho u_n H &= s\left[\left(\rho u_n\right)^{+} H_L + \left(\rho u_n\right)^{-} H_R\right] \\ &\quad + \frac{1}{2}(1-s)\left[\left(\rho u_n\right)\left(H_L + H_R\right)\right. \\ &\qquad \left. - \left|\rho u_n\right|\left(H_R - H_L\right)\right] \end{aligned} \tag{31}$$

重み係数 s は、AUSMDV[7]の AUSMD と AUSMV の切り替え方を参考にして圧力分布を拠り所として決定した。ただし、セル境界を挟んだ無次元化された圧力差の絶対値が ε を下回るところでは下記のように $s=0$ となるようにした。

$$\begin{aligned} s = \min\Big[&1.0, \\ &K \cdot \max\left(0, \left|p_i - p_j\right| / \min\left(p_i, p_j\right) - \varepsilon\right)\Big] \end{aligned} \tag{32}$$

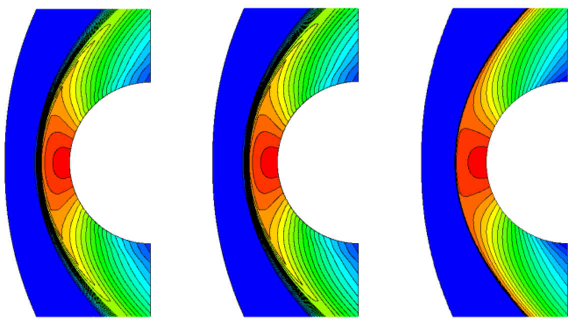
ここでは $\varepsilon = 10^{-10}$ と $K = 10$ と設定して以下の計算で用いている。以上の(26)式から(32)式までの手順で得られる風上法を、本記事においては AUSM-V modified(AVM)と仮称し、先に述べた SF2 法（1 次精度 FVS-W で用いる）と併用する手法を AVM+SF2 と記述して以下で用いることとする。

この手法を一様流マッハ数が 20 の非粘性流れに適用し、AVM+SF2+MUSCL-TVD で解いた結果を図 2 に示す。等高線からは密度分布の歪みは見られず正常に解けていることが確認できる。また、FVS-W と MUSCL-TVD を組み合わせるだけでは上手くいかず、TVD 的なメカニズムだけで安定な解を得ることは難しいこともうかがえる。このことは、比較的頑丈とされる HLLE を用いた場合でも同様であった（図 2(c)）。また、円柱の周方向の格子分解能を高くして格子アスペクト比がさらに高い場合でも本手法は安定に機能することを確認した（図 3）。これらのことから、衝撃波に沿う方向だけ解像度が高い計算格子を使用せざるを得ない場合は特に、衝撃波の周囲に SF2 のような何らかの対策が必要と考えられる。Advance/FOCUS-i では、上記した数値解法を対流項の構築に用いている。



(a)　(b)　(c)

図 2　SF2 と AVM を併用した場合と他との比較（マッハ数 20 の非粘性流れ、要素数 640x20）、(a)AVM+SF2+MUSCL 補間, (b)FVS-W+MUSCl 補間, (c) HLLE+MUSCL-TVD



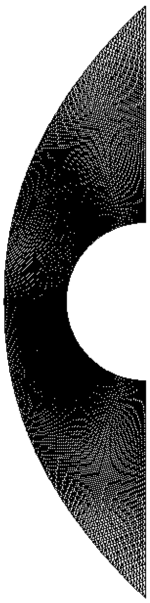
(a)　(b)　(c)

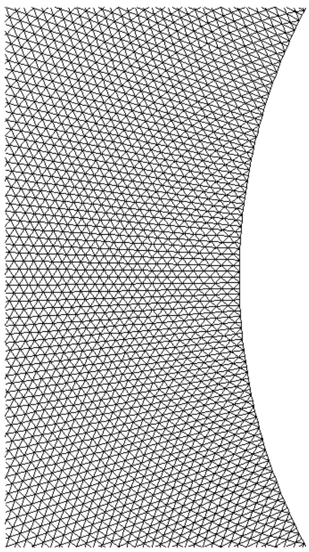
図 3　SF2 と AVM を併用した場合の格子依存性の検証図（マッハ数 20 の非粘性流れ）、(a)1280x20 cells, (b)2560x20 cells, (c)320x160 cells

次に、流れの条件(マッハ数 20)を同一のままとし、要素数は約 25,000 の三角形要素を用いた検証例を示す。空間精度は MUSCL-TVD により最大 2 次精度とした。図 4 に計算要素と密度コンター、および澱み流線上の密度分布を示す。計算セルの形状は歪みが偏らないような標準的な形状を用いている。SF2 のような手当てを用いない場合は、

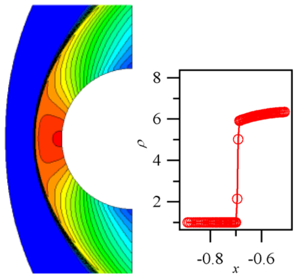
式(32)で K=10 とした AVM スキームでも僅かにカーバンクルに遭遇し、衝撃波背後から澱み点に向けて密度が上昇しきらないのが見てとれる（図4(d)）。

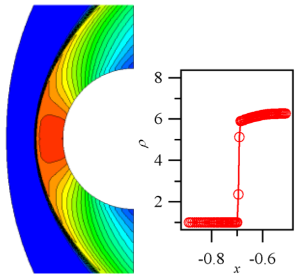
比較のために AVM(K=0)と AUSMDV、および SLAU[10]の結果も示しており、AUSM 系スキームでもカーバンクルを起こすことが分かる(図 4 (e)～図 4(g))。これらの事柄から、衝撃波と物体表面に挟まれた亜音速領域において完全に AUSM 系のスキームとするよりも、(30)式~(32)式のような手順により散逸的な FVS の性質を残すほうが若干有利であると考えられる。また、SF2 のような多方向の圧力情報を考慮した手当てを講じるほうが、より確実に安定した解を得ることができると考えられる。なお、式 (7) の ω_i の分布を図 5 に示しており、圧力分布を利用した衝撃波の検知が 4 角形要素の場合（図 5 左側）でも 3 角形要素の場合（図 5 右側）でも正しく実施されていることが見てとれる。また、式 (7) の反復数 n が n=10 の場合を示しており、flag の値が 0 から 1 へと連続的に変化するような分布になっていることが分かる。



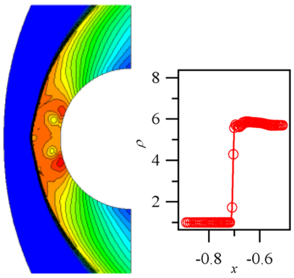


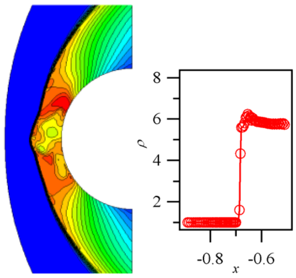
(a) overall mesh　　(b) close-up view



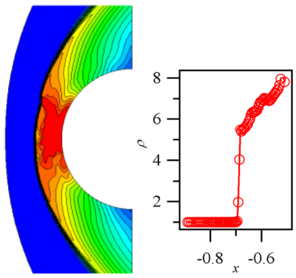


(c)AVM(K=10)+SF2　　(d)AVM(K=10)





(e) AVM(K=0)　　(f) AUSMDV



(g) SLAU

図 4　3 角形要素を用いたマッハ 20 の理想気体における半円柱周りの非粘性流れの解析結果の比較

3. 検証例

上記に述べた経緯で構築された解析手法（AVM+SF2）を種々の基本的な検証問題に対して適用し、必要に応じて他の解析手法との比較を示しながら、それぞれの計算結果について以下に記述する。

3.1. 1 次元定常衝撃波

SF2 を適用時に和田[6]の FVS の性能が保持されることを検証することを目的として、上流側のマッハ数 M=25 の 1 次元定常衝撃波問題[6]を AVM+SF2 により計算して結果を検討した。等間

隔に 100 点の計算格子を用い、50 番目以前と 51 番目以降のそれぞれに衝撃波の前後の量を初期値として与え、LU-SGS で CFL=0.5 として定常解を得た。空間 1 次精度と MUSCL-TVD 法による 2 次精度の場合について、衝撃波上流の状態で無次元化した数値をそれぞれ Table 1 と Table 2 に示す。いずれの場合も衝撃波は完全に 4 点で捕獲されることが確認された。

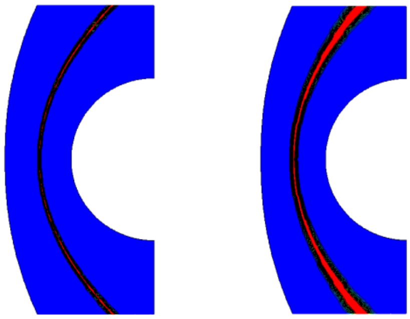


図 5　SF2 による衝撃波近傍の区別、左側は 320x160 の 4 角形要素数の場合、右側が 25,000 個の 3 角形要素の場合

表 1　1 次元の定常衝撃波前後の密度と全エンタルピー（1 次精度風上の場合）

Cell number	Density	Total enthalpy
47	1.00000000000	1.00000000000
48	1.00000000000	1.00000000000
49	1.00000000000	1.00000000000
50	1.89057587197	1.00000000000
51	5.53073958311	1.00000000000
52	5.95238095238	1.00000000000
53	5.95238095238	1.00000000000
54	5.95238095238	1.00000000000

この性質は後述する高エンタルピー流の計算の際に、衝撃波背後の温度を正しく予測することに役立ち、高温気体反応の反応項を正しく動作させることにつながる。また、空力加熱解析の上でこの性質は重要となる。また、トータルエンタルピーが定常流で保存される性質は AUSM 系のスキームと接続する上で矛盾せず、この検証問題においては衝撃波前後でトータルエンタルピーが一定値に保持されることを確認した。

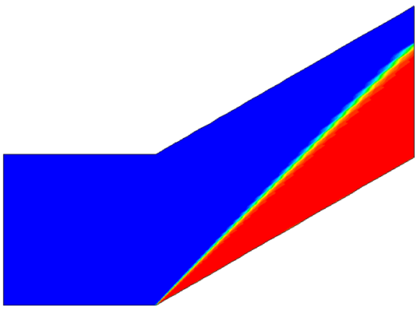
表 2　1 次元の定常衝撃波前後の密度と全エンタルピー（MUSCL-TVD と併用した場合）

Cell number	Density	Total enthalpy
47	1.00000000000	1.00000000000
48	1.00000000000	1.00000000000
49	1.00000000000	1.00000000000
50	1.89157966681	1.00000000000
51	5.53167596612	1.00000000000
52	5.95238095238	1.00000000000
53	5.95238095238	1.00000000000
54	5.95238095238	1.00000000000

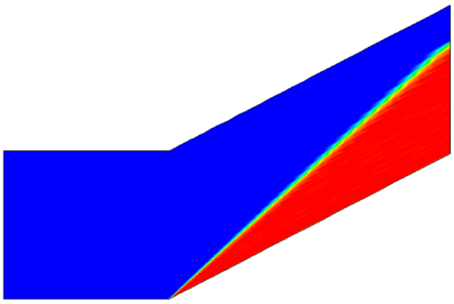
3.2.　2 次元定常斜め衝撃波

ここでは、式（21）で用いられるパラメータ N が解の収束性に与える影響を検討することを目的として定常な斜め衝撃波の数値解について調査した結果について述べる。Tramel ら[11]の文献に倣い流れは非粘性とし、一様流マッハ数 4、圧縮コーナーの偏向角を 30 度に設定した。用いた計算格子数は、流れ方向に 60 点、もう 1 つの方向に 220 点とし、時間積分には LU-SGS を使用して CFL=2 とした。MUSCL-TVD の制限関数自体に起因する収束性の劣化と切り離して結果を観察することを目的として、この検証問題だけは MUSCL-TVD の制限関数として、補間候補をスムースに選択する Van Albada[9]リミッター関数を用いた。SF2 に関連して式（21）で用いられるパラメータ N をゼロとして衝撃波近傍とその周囲を 0 と 1 の flag で区別すると、残差は 5 桁より小さくならず定常解への収束が劣化することが図 7 から分かり、よって本報告の計算では N=10 として用いている。また、この問題に HLLE や HLLC スキームを用いると、斜め衝撃波の背後に格子幅に対応した数値振動が現れることが分かっている[11]。これを比較検証するために、圧縮コーナーを原点に採り流出境界までの距離の 75%の x 座標における密度分布の比較を図 8 に示す。グラフの横軸は y 座標、縦軸は一様流で無次元化された密度である。例えば、HLLC による数値解の振動幅は、全幅で 25%程度も含まれるのに対し、AVM では 1.4%程度に抑えられることが図 8 から見て

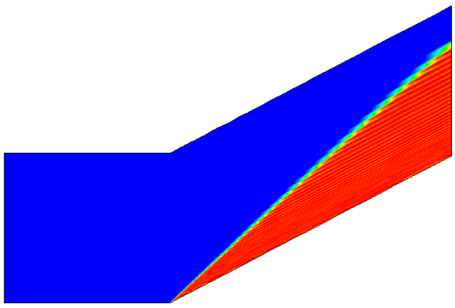
とれる。さらに、SF2 を AVM と併用することにより振動は殆どなくなることが分かった。この理由は、FVS 系のスキームを用いると衝撃波を 4 点以上（斜め衝撃波ではそれ以上の要素数）の格子にまたがって捕らえるために衝撃波直後の諸量の値に差異が付きづらく、また、SF2 で強制的に衝撃波近傍の流線間で散逸効果も入るため、流線を横断する方向に諸量の分布が正常になると考えられる。



(a) AVM+SF2



(*b*) AVM



(*c*) HLLC

図 6　マッハ 4 、30 度傾斜壁での衝撃波捕獲の際の密度コンターの比較

この性質は後述する湾曲した衝撃波背後の空力加熱の解析でも重要である。密度や温度に格子依存の看過できない誤差が含まれると、高温気体反応の扱いの際に化学種の反応項が衝撃波背後から尾を引く歪つな温度分布の影響を受けるからである。また、物体表面上の空力加熱率などに必要な温度の勾配計算の情報はこの影響を受けやすいため、本改良はそうした分析に対しても効果がある。これらの改良が本ソフトウェアには導入されている。

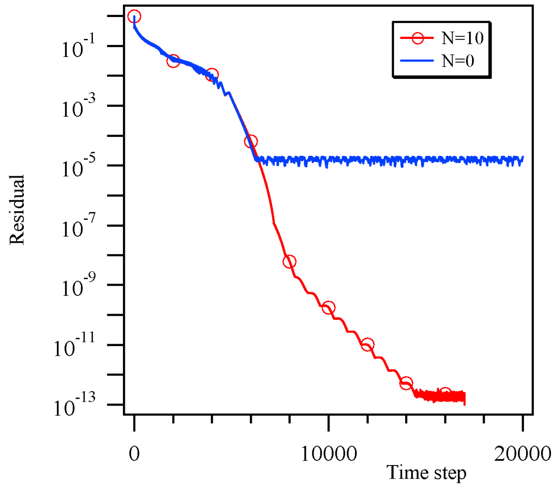


図 7 残差履歴の比較

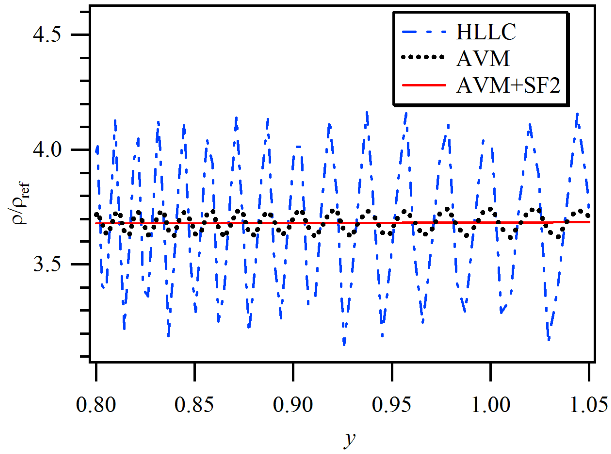


図 8　斜め衝撃波背後の密度分布の比較

3.3. 半円柱周りの空力加熱解析

ここでは 2 次元円柱周りの極超音速粘性流で検証計算を実施した。流れの諸条件は、一様流マッハ数 8.1(流速 1296.1m/s)、一様流温度 63.73K、一様流圧力 370.6Pa であり、円柱の半径は 20mm とした。物体温度が 300K の等温壁条件を課しプラントル数 Pr=0.71 とすれば、Fay-Riddell[13]の予測式を用いて推定される澱み点の空力加熱率は $0.173\mathrm{MW/m^2}$ であった。この検証計算に対して 2 種類の計算格子で解析を実施した。1 つ目は物体

表面が 320 分割で物体と流入境界の間が 160 分割(320x160)の四角形要素、もう一方では要素数が約 51,000 要素の 3 角形と 4 角形の複合格子とした(図 9)。また、両タイプとも物体近傍の最小格子幅は円柱の直径の 1×10^{-5} 倍とした。時間積分には LU-SGS を用い、CFL=500 で計算を実施した。SF2 を併用する場合は、２種類のいずれの計算格子を用いた場合でも数値解は Fay-Riddell の解析解の 0.173MW/m^2 に近く、双方の間の相違は 3%以内であった。これらの事柄から衝撃波周囲でメトリックに由来して発生する何らかの擾乱をその近傍で速やかに散逸させることがやはり望ましく、これらの仕組みが本ソフトウェアには実装されている。

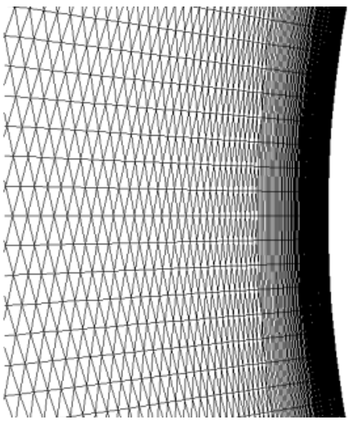


図 9　3 角形要素と 4 角形要素の混合格子（澱み点近傍の拡大図）

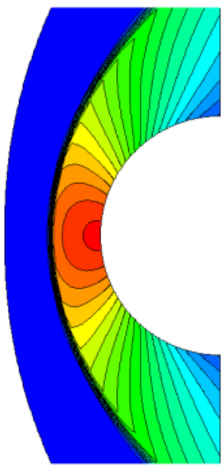


図 10　マッハ 8.1 の極超音速流れの圧力コンター

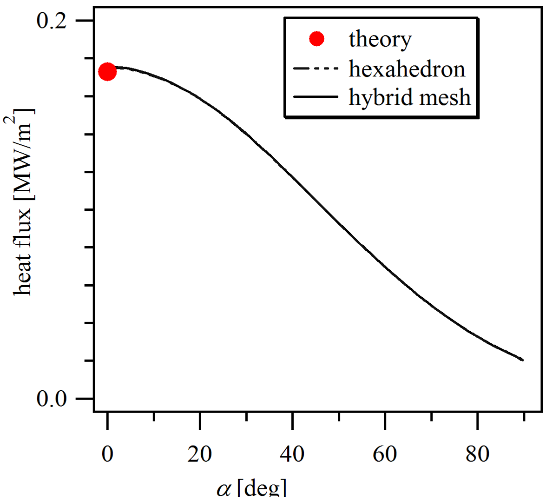


図 11　空力加熱率分布

4. 高速流の解析

4.1. RANS 機能を用いた解析例

Advance/FOCUS-i においては、Reynolds averaged Navier-Stokes(RANS)モデルとして Menter[12]による k–ω SST モデルが組み込まれており、k と ω の方程式は下記のように表される。

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t}+\frac{\partial \rho k u_j}{\partial x_j}=P-\beta^*\rho\omega k+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\sigma_k\mu_t\right)\frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right] \tag{33}$$

$$\frac{\partial \rho\omega}{\partial t}+\frac{\partial \rho\omega u_j}{\partial x_j}=\frac{\gamma}{\nu_t}P-\beta\rho\omega^2+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\sigma_\omega\mu_t\right)\frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right]+2(1-F_1)\frac{\rho\sigma_{\omega 2}}{\omega}\frac{\partial k}{\partial x_j}\frac{\partial \omega}{\partial x_j} \tag{34}$$

高速流れでは境界層が薄く k-ε モデルは一般に壁面近傍の漸近挙動を扱いづらい。k-ω モデルはその欠点を解消するモデルであるがジェット乱流などの自由剪断流に対して予測精度が不利であることが知られている。k–ω SST モデルでは、ω の式の最後の項でスイッチを組み込むことにより k-ε モデルと k-ω モデルの両者のメリットが活かされている。また、剥離流に対して渦粘性が過大にならないような工夫もなされている。これらの理由から、当ソフトウェアでは RANS 解析の際

の既定モデルとして $k-\omega$ SST を推奨している。検証結果として図 12 図 13 に NACA0012 翼型周りの流体解析例を示している。衝撃波の付け根では逆圧力勾配に由来する剥離が生じ、k-ω モデルと比較するとその特徴的な表面圧力分布をより良く捕らえていることが分かる。また、乱流モデルは極超音速流の計算にも適用が可能である（図 14）。

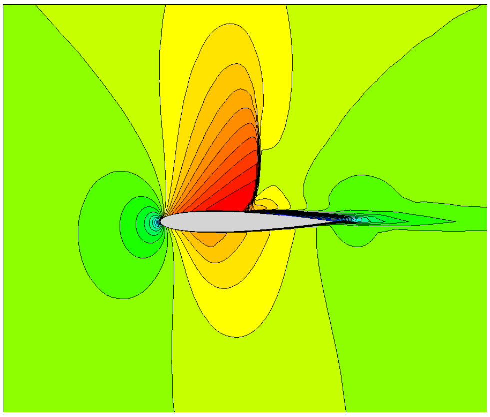


図 12　NACA0012 翼型周りのマッハコンター（M=0.799、Re=9×10^6、迎角 α=2.26°、k-ω SST モデル使用）

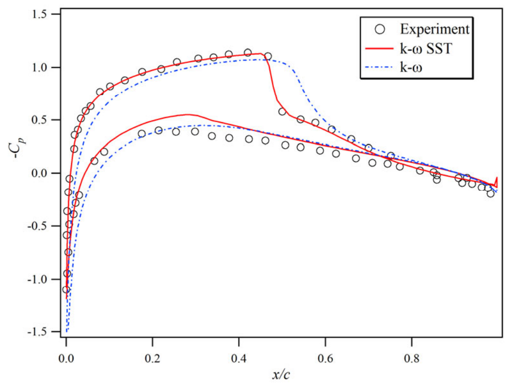


図 13 翼表面上の圧力分布比較（M=0.799、Re=9×10^6、迎角 α=2.26°）

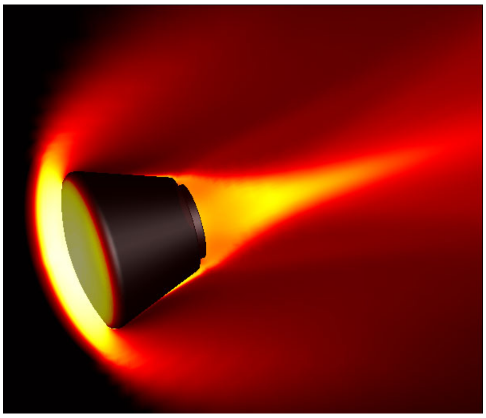


図 14　k-ω SST 乱流モデルを用いた極超音速流の定常解析例

4.2. 極超音速流における高温気体反応の解析例

マッハ数が 5 以上の流れは極超音速流と呼ばれ、大気圏再突入時などに見られるような高温気体反応を考慮する必要がある。そこでは空力加熱に対する熱防御の設計が 1 つの重要課題として挙げられる。気流条件を完全に再現する地上試験は難しいため、これに対処するための設計ツールとしての CFD 解析は今後も有力な手段であると考えられる。具体的な手法としては、各化学種のエンタルピー、粘性係数、拡散係数、熱伝導係数に対して温度依存性を扱うこととし、支配方程式は理想気体で述べた構成に幾つかの生成項を加味した方程式とし、化学種の連続の式、運動方程式、全エネルギー式を用いる。また、高温気体反応項の予測精度を向上させることを目的として振動モードのエネルギーを括りだし、振動モードの温度 T_v と電子励起モードの温度 T_e を等しく T_V とし、振動エネルギー e_V の方程式を追加して解く。これらをテンソル表記であらためて書くと、支配方程式は下記のようにまとめられる。

扱う化学種は Blottner[15]の 7 化学種モデルを用い、反応速度には Dunn-Kang[16]の定式化を用いた。また、反応に使用する温度は Park[17]のガイドラインに従って並進温度 T と振動温度 T_v の両者を適宜使用している。種々のエネルギー緩和項については Gnoffo ら[14]の文献等を参照したので割愛する。また、上記した方程式の右辺に現れる拡散係数、粘性係数、および熱伝導係数などの輸送係数については、その都度計算すると CPU が消費されてしまう。

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t}+\frac{\partial \rho_s u_j}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_s \frac{\partial}{\partial x_j} y_s\right) \tag{35}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t}+\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j}=-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\right] \tag{36}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t}+\frac{\partial \rho u_j H}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\eta\frac{\partial T}{\partial x_j}+\eta_v\frac{\partial T_v}{\partial x_j}+\eta_e\frac{\partial T_e}{\partial x_j}\right)$$
$$+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\sum_s h_s D_s\frac{\partial y_s}{\partial x_j}\right)$$
$$+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[u_i\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}u_i\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\right] \quad (37)$$
$$-Q_{\mathrm{rad}}$$

$$\frac{\partial \rho e_V}{\partial t}+\frac{\partial \rho u_j e_V}{\partial x_j}=-p_e\frac{\partial u_j}{\partial x_j}$$
$$+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\eta_v+\eta_e\right)\frac{\partial T_V}{\partial x_j}\right]$$
$$+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\sum_s h_{V,s}D_s\frac{\partial y_s}{\partial x_j}\right)$$
$$+\sum_s\rho_s\frac{\left(e^*_{v,s}-e_{v,s}\right)}{<\tau_s>} \quad (38)$$
$$+2\rho_e\frac{3}{2}\bar{R}\left(T-T_V\right)\sum_s\frac{\nu_{es}}{M_s}$$
$$-\sum_s\dot{n}_{e,s}\hat{I}_s+\sum_s w_s\hat{D}_s-Q_{\mathrm{rad}}$$

このため、予め与えられた化学種に対する輸送係数を function 化して流れの計算に供することが本ソフトウェアでは可能である。

最初に地上試験結果と比較を示す。比較検証には文献[19]のワークショップで扱われた直径 40

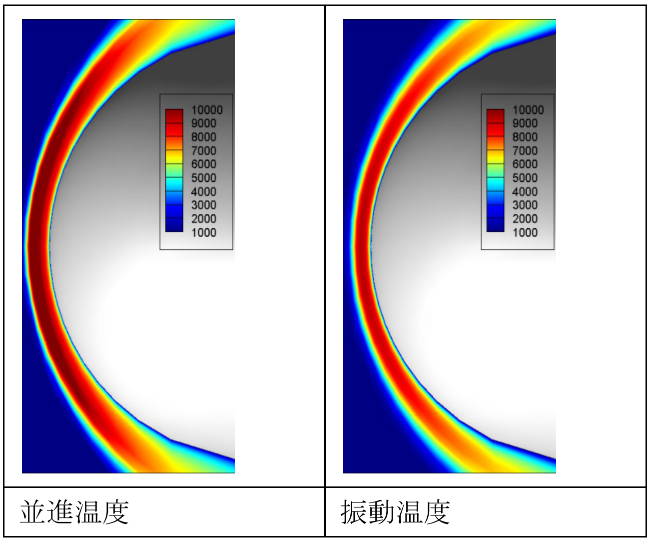
表 3　一様流の条件

	Case1	Case2	Case3
速度[m/s]	5939	6180	5151
温度[K]	705	934	708
密度[kg/m^3]	0.00156	0.0034	0.0058
表面温度[K]	300	300	300

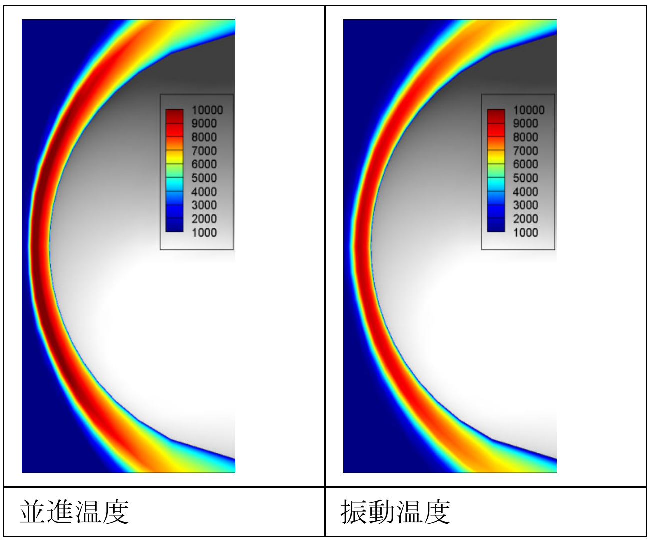
mm の半球周りの高エンタルピー流れを対象とした。一様流の速度、温度、密度、ならびに、化学種の質量分率は表 3 と表 4 にそれぞれまとめている。これらの値は地上での風洞実験の半球の澱み点情報から平衡状態を仮定して導かれた一様流条件であるため[19]、非平衡流を扱う本手法と若干食い違う可能性があると考えているが、ここでは与えられた値をそのまま使用することとする。また、実験模型は金属製であり、表面は触媒壁とされているため、物体表面上のモル分率に関与する項による熱流束項を考慮した解析を実施した。Case 3 から Case2 を経て Case1 と進むにつれ高エンタルピー・低密度の条件になり並進温度と振動温度が乖離するのが見てとれる（図 15 および図 16）。また、Case 3 では、衝撃波近傍を除くと温度は熱的に平衡状態にあるのが分かる。半球表面上の熱流束を実験と比較すると、一様流条件の同定の課題があるものの、おしなべて実験値との一致の度合いは良好であることが分かった。Case2 では澱み点から外れた箇所で熱流束が極大になってしまう現象が実験で見られるが、シミュレーションではそれも含め予測することが分かった。また、上流が低密度でありレイノルズ数が低いため乱流モデルは使用しておらず、従ってこれは乱流遷移に依る現象ではなく物体表面近傍での化学反応に起因するものと考えられる。

表 4　一様流の化学種の質量分率

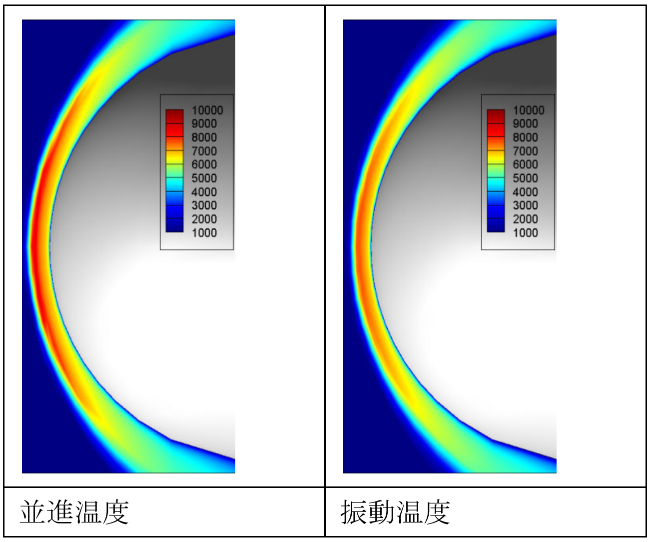
	Case1	Case2	Case3
O2	0.0348	0.0659	0.1578
N2	0.762	0.744	0.733
O	0.1708	0.1468	0.0406
N	0	0	0
NO	0.0317	0.0429	0.0688
NO+	0	0	0
e-	0	0	0



(*a*) Case 1

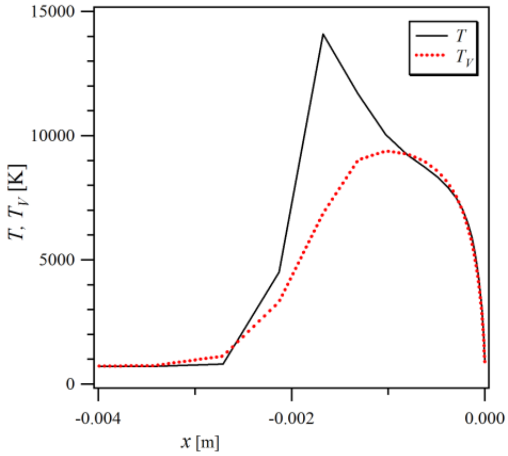


(*b*) Case 2

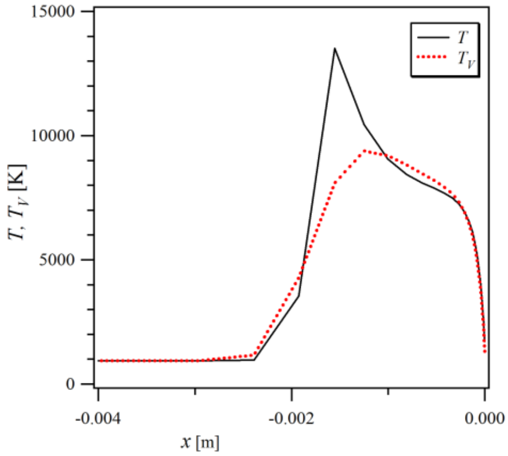


(*c*) Case 3

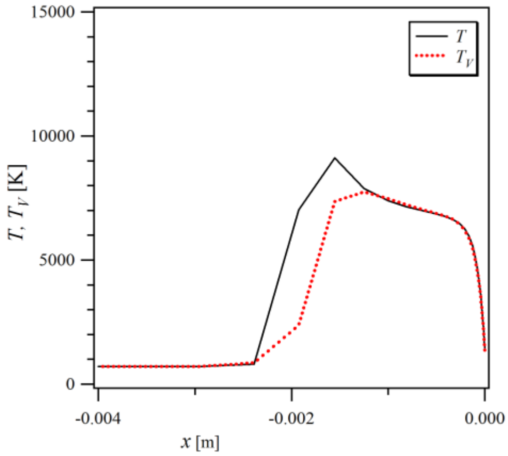
図 15 半球周りの中心断面上の温度コンター



(*a*) Case 1

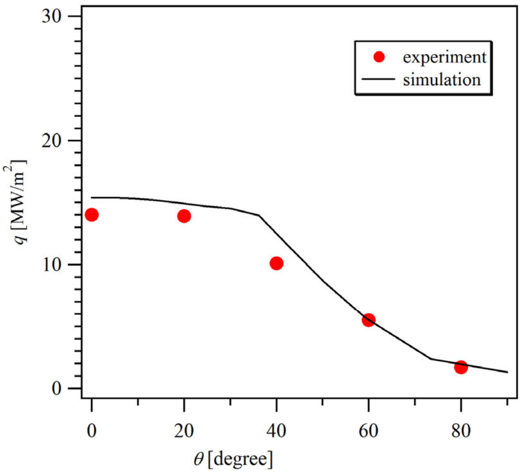


(*b*) Case 2

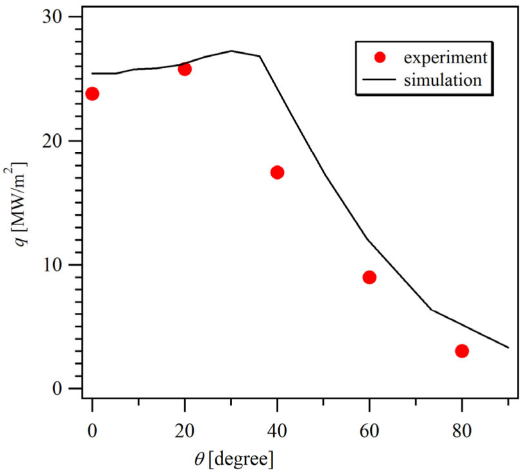


(*c*) Case 3

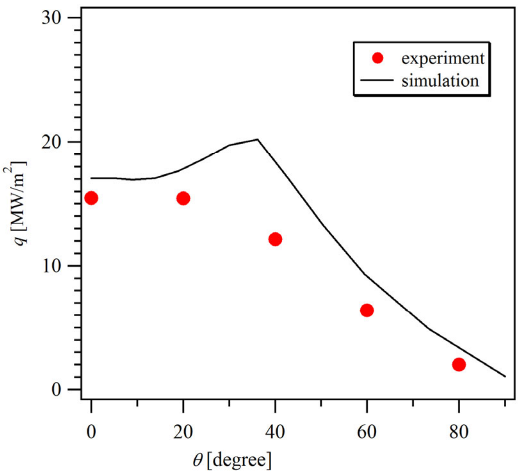
図 16 澱み流線上の温度分布の比較



(*a*) Case 1

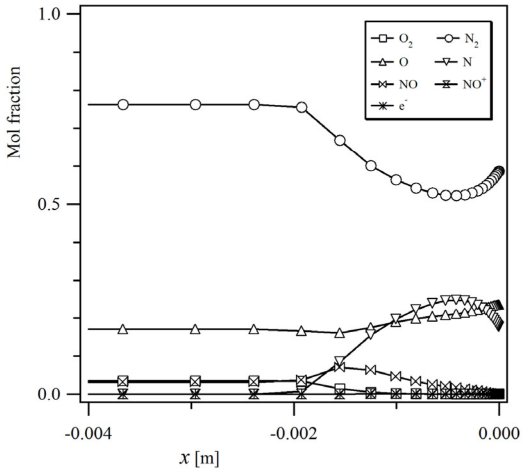


(*b*) Case 2

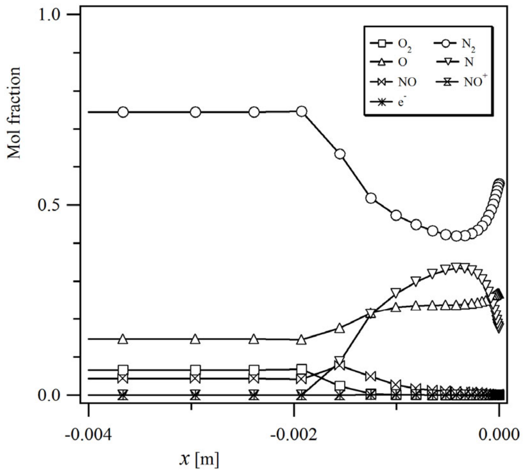


(*c*) Case 3

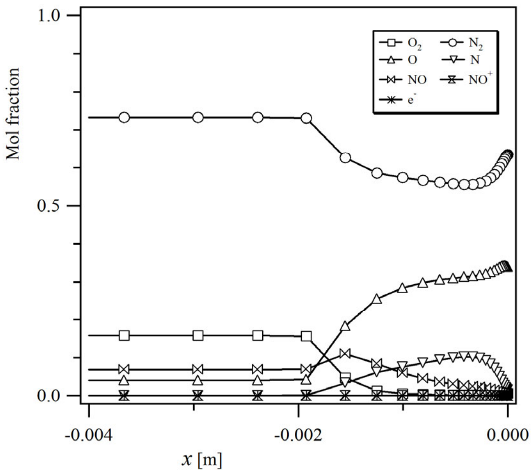
図 17 表面熱流束分布の比較



(*a*) Case 1



(*b*) Case 2



(*c*) Case 3

図 18 澱み流線上の化学種のモル分率

次に、実機試験との比較検証例を示す。対象とするのは OREX 形状についてであり、高度 90km で表面熱流束の値が公開されている課題[19]とした。計算条件は表 **5** と表 **6** にまとめている。先述の地上試験の場合とは違い、一様流の条件は単純であるため設定上の曖昧さがほぼない条件と考えている。また、移動速度が 7450m/s であることに加え、周囲の圧力が低く希薄であるため、並進温度と振動温度が大きく乖離し（図 20～図 22）、２温度モデルを用いる重要性が増す計算ケースと考えられる。シミュレーションでは、並進温度は物体表面から 10cm 離れた箇所で 27,000K に達するが、振動温度は物体表面から 4cm の箇所で 9090K にしか到達しないことが分かる。また、希薄気体であることと高温であることによる分子粘性拡散の効果が比較的に目立ち、衝撃波は有意な幅で以って捕らえられるのがこのケースの特徴である。また、表面熱流束の分布図を図 24 に示しており、澱み点で極大値となり、y=0.8m 近傍で熱流束の下がり方が緩やかになるのは物体表面が錘状に変化するためである。澱み点での熱流束の測定値[19]との一致は良好であることを確認した。

表 5　一様流の条件

速度[m/s]	7450
温度[K]	186.9
圧力[Pa]	0.169
表面温度[K]	540

表 6　一様流の化学種の質量分率

化学種	重量分率
O2	0.79
N2	0.21

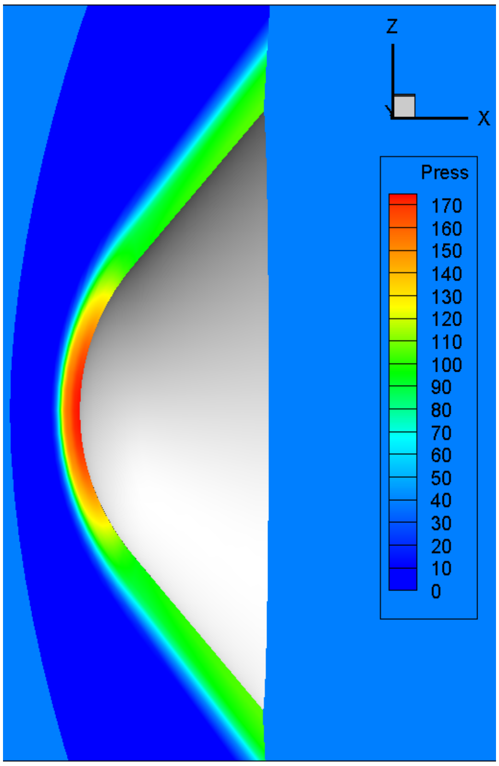


図 19　OREX 形状周りの中心断面上の圧力コンター

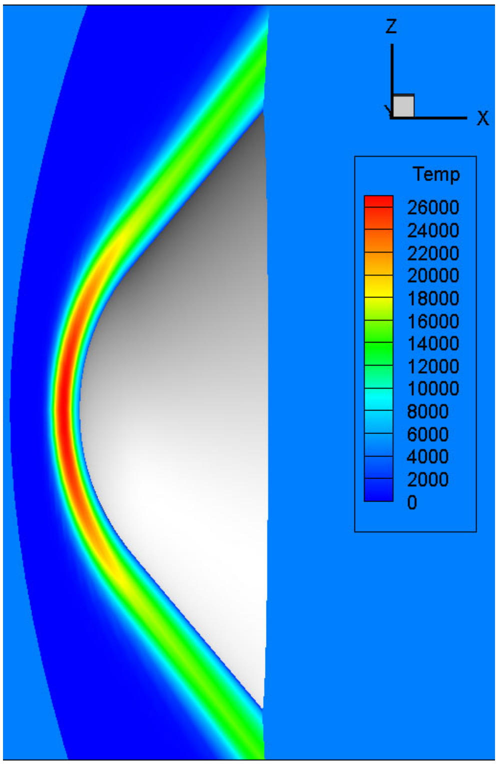


図 20　OREX 形状周りの中心断面上の並進温度コンター

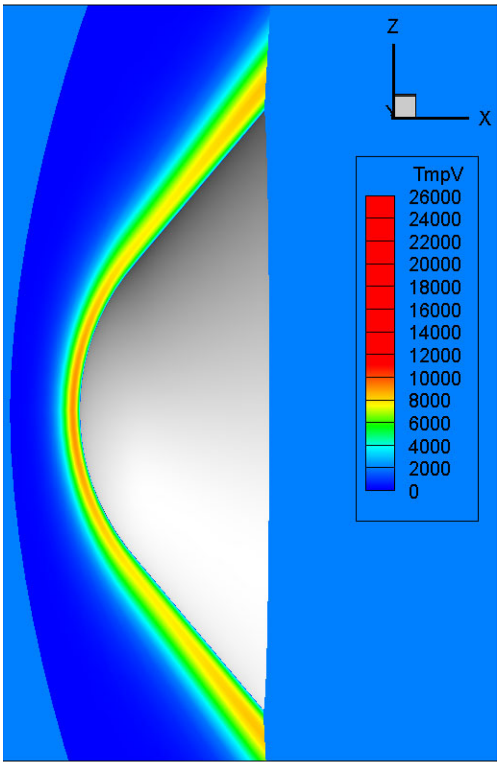


図 21　OREX 形状周りの中心断面上の振動温度コンター

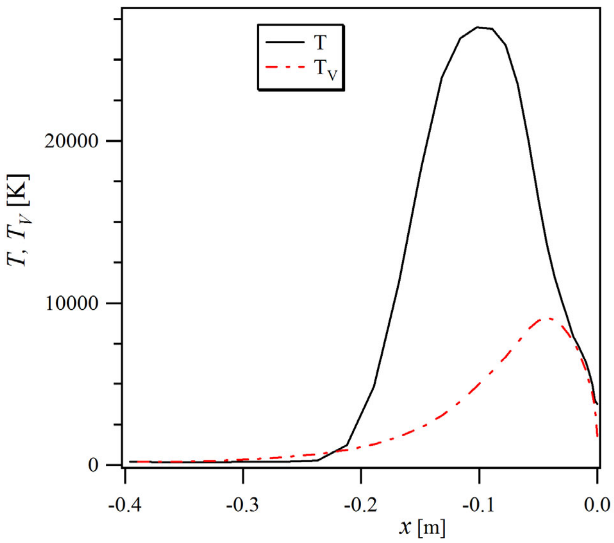


図 22　澱み流線上の温度分布

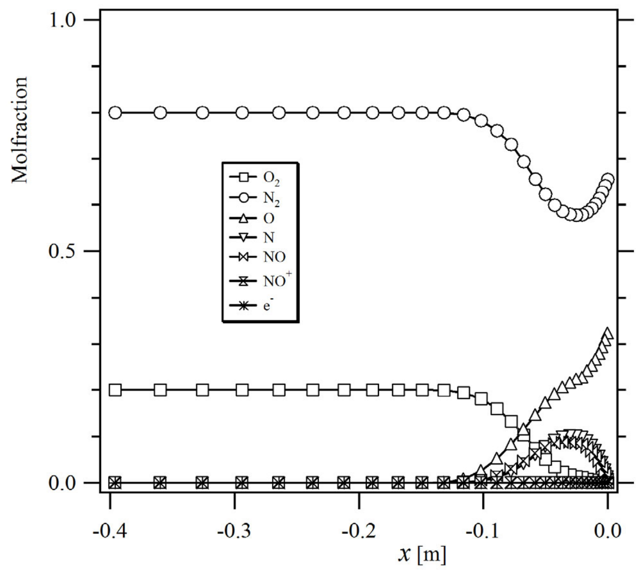


図 23　澱み流線上の化学種のモル分率

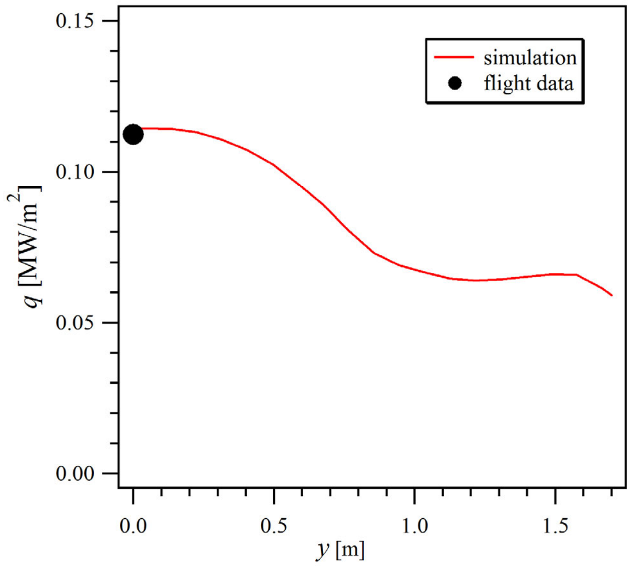


図 24　中心断面上における表面熱流束分布の比較

4.3. 障害物付き管路内の DDT シミュレーション例

ここでは水素濃度 15%で均質に管内を満たした場合の DDT 解析例を示す。基礎方程式は質量、運動量、エネルギーの方程式に加えて、次式で表される未燃/既燃を表す G 方程式を扱う。

$$\frac{\partial G}{\partial t}+\frac{\partial G u_i}{\partial x_i}=S_T\left|\nabla G\right|+\overline{\omega}_{\mathrm{ign}} \qquad (39)$$
$$S_T=S_L+u'$$

G 方程式の右辺第 2 項は起爆項[20]と呼ばれ、これにより G 方程式で層流・乱流燃焼から爆轟への遷移解析を扱うことが可能である。

温度の計算は並進/振動温度を分けず、ここでは

1 種類の温度を扱う。各々の化学種の定圧比熱は温度Tに関する以下の多項式近似で与えられるものとする。

$$C_p/R=a_1+a_2T+a_3T^2+a_4T^3+a_5T^4$$

ここで定義された定圧比熱C_pに関連して、温度は以下のようにして求めることができる。解ベクトル$\boldsymbol{Q}$が更新され、全エネルギーeと運動エネルギー$\frac{1}{2}\rho\vec{u}^2$が決定され、これらと種々のガス密度ρ_sとの間には、以下のエネルギー式が成り立つ。

$$\sum_s \rho_s h_s = e-\tfrac{1}{2}\rho\vec{u}^2+p \qquad (40)$$

ここで圧力pは、ドルトンの分圧の法則から温度と結び付けられ、次式のように書ける。

$$p=\sum_s \rho_s R_s T \qquad (41)$$

また、エンタルピーh_sについては、NASA 多項式と呼ばれる数値テーブルを利用することにより得られる。エンタルピーh_sは次式のように与えられる。

$$\begin{aligned} h/RT &= a_1+a_2T/2+a_3T^2/3 \\ &\quad +a_4T^3/4+a_5T^4/5+a_6/T \end{aligned} \qquad (42)$$

エンタルピーが温度の関数で与えられれば、種々のガス密度ρ_sと全エネルギーeと運動エネルギー$\frac{1}{2}\rho\vec{u}^2$との間に成り立つ以下のエネルギー式に反復解法を用いると温度について解くことができる。

$$\sum_s \rho_s h_s - e+\tfrac{1}{2}\rho\vec{u}^2-\sum_s \rho_s R_s T=0 \qquad (43)$$

上式の左辺をfとおけば、温度Tについて 5 次方程式となり、fの温度微分は以下のように表される。

$$\begin{aligned} f' &= \frac{\partial f}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\left(\sum_s \rho_s h_s\right)-\frac{\partial}{\partial T}\left(\sum_s \rho_s R_s T\right) \\ &= \sum_s \Big[\left(a_1+a_2T+a_3T^2+a_4T^3+a_5T^4\right)\rho_s R_s \\ &\qquad -\rho_s R_s\Big] \end{aligned} \qquad (44)$$

温度Tについての 5 次方程式を解くため、ニュートン法を適用する。N回のニュートン反復計算後の温度T_{N+1}は$T_{N+1}=T_N-f/f'$で求めることができる。温度が求まれば、圧力は(41)式により計算できる。

RUT 試験[例えば、文献 21]で得られた DDT 試験結果との比較例を示す。常温、常圧下の空気に対して水素 14%濃度で一様な濃度分布を初期値としている。また、実際に配置された障害物は、奥行き方向に一部が欠けていたりするなど 3 次元的な形状をしているが、ここでは簡単化して奥行き方向には隙間のない配置としている。格子スケールは、長手方向に 0.2m、鉛直方向に 0.1m、奥行き方向に 0.25m とした。結果として、用いた計算要素数は 92,000 個に抑えられており、数十メートル規模の対象を扱うには比較的少ない要素数となっている。図 25 は RUT22 試験を対象とした解析例であり、図の下の目盛はメートル単位である。4 つ目の障害物を過ぎるときに爆轟波へ遷移しているのが見て取れ、着火から 20m 程燃焼面が伝播してから起爆している様子が再現できていることが分かる。この解析に関連して、実験値[21]との比較を図 26 に示す。横軸が時刻、縦軸が燃焼波面位置である。シミュレーションの値は、途中から勾配が急激に変化し、その後に一定となることが分かる。また、実験値から読み取れる勾配とよく一致している。このことから、DDT 現象のみならず、爆轟速度も良く予測できていると考えられる。

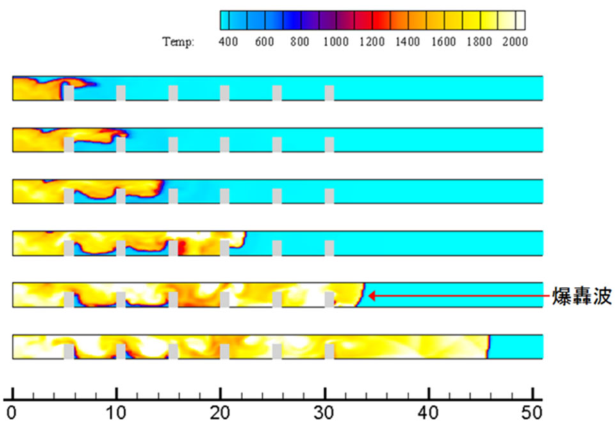


図 25　温度コンターの時系列(RUT22、図中の目盛の単位は m)

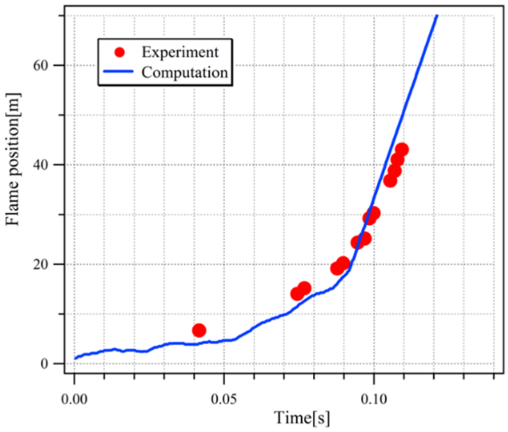


図 26　燃焼波の位置に関する実験との比較 (RUT22)

5. ベクトルマシンへの適用

5.1. アプリケーションの高速化

Advance/FOCUS-i は時間と空間に対する偏微分方程式を離散化して数値的に解を求めるが、大規模な数値シミュレーションでは膨大な計算時間を要することが少なくない。アプリケーションが所要する主な時間として浮動小数点演算とメモリアクセスが挙げられるが、多くの物理シミュレーションでは後者が律速であることが知られており、計算格子毎の並列処理が可能な場合にはメモリバンド帯域幅が大きい GPU によるアプリケーションの高速化が近年注目されている[24]。一例として、弊社計算サーバで用いられる Intel® Xeon® Gold 5218[25]でメモリ DDR4-2667 の 6 チャンネルの場合では理論メモリバンド帯域幅は約 128GB/s であるのに対し、GPU の NVIDIA® Tesla® V100[26]では HBM2 というメモリ規格を採用しておりその帯域幅は 900GB/s とおよそ 7 倍にも及ぶ。ただし、アプリケーションを GPU 上で動作させるにあたり比較的導入が容易である OpenACC では速度向上があまり見られない場合が多く[27]、十分なパフォーマンスを発揮させるためには CUDA が不可欠となるが、その際はソースコードの大部分を CUDA の API に適する形に改変する必要があるため導入コストが大きいという欠点がある。

これらに対して、ベクトルプロセッサを用いた流体解析の高速化の適用例が報告されている[28][29]。ベクトルマシンの特徴として、長いベクトル長での浮動小数点演算性能の高さと、GPU に匹敵する大きなメモリバンド帯域幅が挙げられる。例えば、SX-Aurora TSUBASA に搭載されているベクトルエンジン Type 10B[30]では、1 ベクトルエンジンあたりの倍精度理論演算性能は 2.15TFLOPS と Intel® Xeon® Gold 5218 の 2 ソケット 32 コアでの 1.18TFLOPS（プロセッサベース周波数を基とした概算値）の 2 倍近くになると推察される。また、NVIDIA® Tesla® V100 と同じ HBM2 規格のメモリを搭載しており理論メモリバンド帯域幅も 1.22TB/s と非常に大きい。さらに、ソースコードのベクトル化では大幅な修正は必要ないため、少ない導入コストでの計算速度の大きな向上が期待される。本章では Advance/FOCUS-i にベクトル化チューニングを施したソースコードでのベクトルマシンでの計算速度と、従来のソースコードでのスカラーマシンでの計算速度の比較結果を記す。

5.2. 解析条件

乱流燃焼解析を想定したベンチマーク問題にて計算時間の測定を実施した。計算スキームには対流項離散化は HLLC、勾配評価法は Green-Gauss 法、再構築法は MUSCL 法、勾配制限関数は minmod、時間積分法は TVD3 段 Runge-Kutta 法、乱流モデルは k-ω SST モデル、燃焼モデルは G 方程式モデルを用いた。気体種組成は CH_4、O_2、N_2、CO_2、H_2O、NO、OH の 7 気体種を考慮した。

計算格子には格子幅 1.0mm の立方体からなる 216 万要素の直交格子の直管形状を使用し、スカラーマシンとベクトルマシンで同価格帯での性能比較を行うため Intel® Xeon® Gold 5218 の 2 ソケットの 32 プロセス並列と SX-Aurora TSUBASA Type 10B の 1 ベクトルエンジンの 8 プロセス並列での計算速度の比較とした。

解析初期値として圧力を 101325Pa、温度を 298.15K とし、O_2:N_2=1.00 : 3.76 の空気と CH_4 を当量比 1.0 で混合させた。その後、管端の球状領域を着火して G=1.0 として領域内の圧力と温度を化学平衡により再決定した条件のもと、火炎伝播解析を実施した。

5.3. 解析結果とまとめ

Intel® Xeon® Gold 5218 と SX-Aurora TSUBASA Type 10B の計算時間を無次元化して比較した結果を図 27 に示す。両者の計算時間を比べると、スカラーマシンを 1 とした場合、ベクトルマシンでは約 0.52 となっており、速度向上比としてはおよそ 1.92 倍となる結果であった。以上より、ベクトルエンジンを使用することで同程度の価格である Intel® CPU より高速に解析を行えることが確認できた。

6. おわりに

本稿では Advance/FOCUS-i で用いている解法やその改良点について述べ、これらのアルゴリズムが高速流れの解析や燃焼/爆轟解析に対して有効に動作することを確認することを目的として種々の解析例について説明した。また、アプリケーションの高速化の取り組みとして、ベクトルプロセッサを用いた高速化について述べた。

謝辞

本稿の第 5 節（ベクトルマシンへの適用）は、日本電気株式会社様の許諾をいただいて記事とすることができた。また、作業の実施においては、日本電気株式会社 AI プラットフォーム事業部の磯部洋子マネージャーおよび加藤季広主任には、多大なるご指導いただき、本成果をここで公開することができた。ここに記して感謝の意を表す。

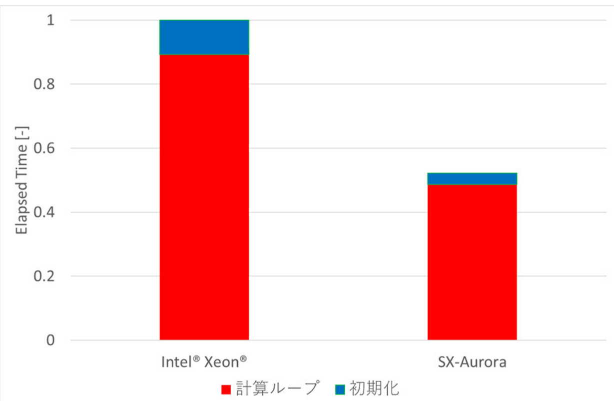


図 27 Intel® Xeon® Gold 5218 と SX-Aurora TSUBASA Type 10B の計算時間の比較

参考文献

[1] Hänel, D., Schwance, R., and Seider, G., "On the Accuracy of Upwind Schemes for the Solution of the Navier-Stokes Equations," AIAA Paper 87-II05CP, 1987.

[2] Einfeldt, B., "On Godunov-Type Methods for Gas Dynamics," SIAM J. Numer. Anal., Vol. 25(2), pp.294–318, 1988.

[3] Toro, E. F., Spruce, M., Speares, W., "Restoration of the Contact Surface in the HLL-Riemann Solver," Shock Waves, Vol. 4, 1994, pp. 25–34.

[4] Pandolfi, M, and D'Ambrosio, D., "Numerical Instabilities in Upwind Methods: Analysis and Cures for the "Carbuncle" Phenomenon," J. Comput. Phys., Vol. 166, 2001, pp. 271-301.

[5] Liou, M. S., "A Sequel to AUSM: AUSM$^+$," J. Comput. Phys., Vol. 129, 1996, pp. 364- 382.

[6] 和田 安弘, "流束分離法の最近の研究動向について" 第 8 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(1994), pp. 53-56.

[7] Wada, Y. and Liou, M. S., "A Flux Splitting Scheme With High-Resolution and Robustness for Discontinuities," NASA-TM-106452; ICOMP-93-50; AIIAA-94-0083(1994).

[8] 中森 一郎, "AUSMV 型式解法の改良と数値不安定の回避について" 第 32 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(CD-ROM, 2018).

[9] Kermani, M.J., Gerber, A.G., Stockie, J.M., "Thermodynamically Based Moisture Prediction Using Roe's Scheme," 4th Conference of Iranian AeroSpace Society, Amir Kabir University of Technology, Tehran, Iran(2003).

[10] Shima, E. and Kitamura, "On New Simple Low-Dissipation Scheme of AUSM-Family for All Speeds," AIAA Paper 2009-136 (2009).

[11] Tramel R. W., Nichols R. H., Buning P. G., "Addition of Improved Shock-Capturing Schemes to OVERFLOW 2.1," AIAA Paper 2009-3988, 2009.

[12] Menter, F. R., "Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications,"

AIAA Journal Vol.32(8), pp. 1598–1605, 1994.

[13] Fay, J. A. and Riddell, F. R., “Theory of Stagnation Point Heat Transfer in Dissociated Air,” Journal of the Aerospace Sciences, Vol. 25, No. 2, pp. 73-85, 1958.

[14] Gnoffo, P. A., Gupta, R. N., and Shinn, J. L., “Conservation Equations and Physical Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium,” NASA-TP-2867, February 1989.

[15] Blottner, F. G., “Nonequilibrium Laminar Boundary Flow of Ionized Air,” AIAA J., Vol. 2, No. 11, Nov. 1964,pp1921-1927.

[16] Dunn, M. G. and Kang, S.-W., “Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas,” NASA CR-2232, 1973.

[17] Park, C., “Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air,” AIAA-87-1574, June 1987.

[18] Park, C., “Problems of Rate Chemistry in the Flight Regimes of Aeroassited Orbital Transfer Vehicles. *Thermal Design of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles*,” Nelson, H. F. ed., Volume 96 of Progress in Astronautics and Aeronautics, American Inst. Of Aeronautics and Astronautics, Inc. c.1985, pp. 511-537.

[19] 航空宇宙技術研究所特別資料，SP-29，1996.

[20] Ettner, F, Effiziente, Numerische Simulation des Deflagrations-Detonations,
Übergangs [Ph.D. thesis], TU München, 2013.

[21] Hasslberger, J., Lorenz, R. B., and Sattelmayer, T., “Numerical Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition in Large Confined Volumes,” J. Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 36, 2015, pp. 371-379.

[22] Zimont, V., Polifke, W., Bettelini, M., and Weisenstein, W., “An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure,” Trans. ASME, Vol. 120, 1998, pp. 526-532.

[23] S. R. Turns, *An Introduction to Combustion*, McGraw-Hill, 1995.

[24] 青木 尊之, “GPU を用いた超並列高速計算入門-IV” システム制御情報学会誌，Vol. 60 No. 8, 350-357 (2016).

[25] https://ark.intel.com/content/www/jp/ja/ark/products/192444/intel-xeon-gold-5218-processor-22m-cache-2-30-ghz.html

[26] https://images.nvidia.com/content/technologies/volta/pdf/volta-v100-datasheet-update-us-1165301-r5.pdf

[27] 星野 哲也, 松岡 聡, “圧縮性流体解析プログラムの OpenACC による高速化” 情報処理学会研究報告, Vol. 2016-HPC-153 No. 4，1-10 (2016).

[28] https://jpn.nec.com/hpc/jirei/tus/index.html

[29] https://jpn.nec.com/hpc/jirei/keio_yagami/index.html

[30] https://jpn.nec.com/hpc/sxauroratsubasa/specification/vector.html?#anc-b

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)