

# アドバンス・シミュレーション・ニュース

## No.8 (2023年12月4日発行)

### 第8回アドバンス・シミュレーション・セミナー2023 開催報告

青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様

### 「爆轟から見える CAE の方向性」

アドバンス・シミュレーション・ニュースは、アドバンスソフト株式会社が2021年度から、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象として開催している「アドバンス・シミュレーション・セミナー」の開催報告と今後の開催予定をご案内するサービスです。

本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しています。

#### 開催概要

- 日時：2023年10月6日（金）14:00～15:30
- 開催方法：オンラインセミナー（Zoomにて開催）
- 主催：アドバンスソフト株式会社 出版事業部
- 講演概要

CAE (Computer Aided Engineering) は、コンピュータが発明されて、開発、改良と発展がなされてきたことによって確立されてきた工学である。しかし、当然のことながら、CAE はコンピュータの発展だけで確立された工学ではないことは理解されていると考える。そこで、これからの CAE に対して、さらにどのような考え方が、そしてその実践が必要であるかを、40年に渡る爆轟研究ならびにそれに関連する基礎を基にして、CAE、特に数値解析の工学ならびに産業との関連についてお話ししたい。



#### ご講演内容

本稿は、2023年10月6日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2023」において、林 光一 様にご講演いただいた内容をアドバンスソフトがまとめたものです。

#### 1. 講演内容

##### 1.1. 爆轟について

##### 1.1.1. 火炎、爆燃、爆轟

火炎の構造は色々ありますが、層流火炎と乱流火炎に分類されます。爆燃は Fast Flame のことを指し、音速以下で伝播する燃焼現象です。高速火炎すなわちデフラグレーションは衝撃波と反応領域が離れています。それに対して爆轟 (Detonation) は音速よりも速い速度で伝播する燃焼であり、衝撃波と反応領域がくっついている構造をしています。これらの火炎は燃焼波により伝播するものですが、爆発 (Explosions) は爆源以外に火炎が自力で伝播することは無く、衝撃波が伝播します。

##### 1.1.2. 爆燃から爆轟への遷移

爆轟に関しては、火炎 (Flame) から爆燃 (Deflagration, Fast Flame) を経て爆轟へ遷移する現象が知られています。火炎の進行方向の前方へ火炎面から音波に近い圧縮波が生成・伝播し、先行する圧縮波を追いかける火炎面から発生した圧縮波は先行

する圧縮波に追いつき圧縮波は徐々に強さが増加し、火炎面に先行する圧縮波達はある時点で衝撃波に移行し爆轟波になります。レーザーを使用した可視化による爆轟への遷移の現象については、古くは1966年のOppenheimらの実験が知られています。この実験によれば、爆轟への遷移は4つのパターンに分類され、それぞれ(a)火炎と先行する衝撃波の間の壁際で着火し爆轟となる場合、(b)火炎の先端付近で着火し爆轟となる場合、(c)先行衝撃波の先端付近で着火し爆轟となる場合、(d)接触不連面が着火し爆轟となる場合です。

### 1.1.3. 実験とシミュレーション

爆轟の研究は実験研究からスタートしましたが、1978年に名古屋大学の滝&藤原で2次元デトネーション伝播が数値的に初めて示されました。当時の計算機性能は現代のPCに及ばない計算速度と容量であったため、空間時間の精度が十分ではありませんでした。数値計算機の性能が増大し、数値計算による爆轟の研究が実験的研究を追い越し始めていますが、精度の面から数値計算には大型計算機が必要です。また、実験も新しい測定法の出現で新発見があるでしょう。

## 1.2. 爆轟から見えるCAE

### 1.2.1. 爆轟の解析

1980年代後半からTVDスキーム(Total Variation Diminishing scheme)の手法が爆轟解析に用いられるようになりました。この手法は、流束制限関数を用いることにより安定性と精度を両立した手法です。空間精度は2次精度になりますが、衝撃波の近くでは分布が丸められます。最近の計算ではOpenFOAMなどのフリーで使えるコードを使って計算することもポピュラーになってきており、OpenFOAMを使った研究はJournalでもアクセプトされ始めています。爆轟の計算で難しいのは、火炎のような低速な流れから爆轟のような超音速の流れを同時に解かなくてはならない点です。

### 1.2.2. 化学反応

火炎や爆轟を扱う際には化学反応を計算する必要があります。これに関連して着火遅れ時間の計算が含まれ、詳細反応機構として水素/酸素・空気では40~50もの素反応を扱います。計算時間の観点から簡略反応機構として18~23の素反応を扱うものもあり、化学反応モデルとして有名なのはUT-JAXAモデルやStanfordモデルで、圧力依存を精度良く計算できることが知られています。炭化水素/酸素・空気に関しては詳細反応では100~数千素反応を扱う必要がありますが、簡略反応機構としては1~10反応を扱うものもあります。

反応機構を扱う際に重要な点は、①自分で責任を持つこと、②温度だけではなく圧力への依存性も確認しておくこと、③反応機構が温度と圧力に関する適用範囲内であることを確認しておくこと、が挙げられます。

### 1.2.3. DDTシミュレーション

火炎から爆轟への遷移(DDT)を計算するにあた

ってのポイントは、以下の事柄が挙げられます。①火炎・爆燃・爆轟の違った条件が同じ画面で非定常・不均一に起こる、②陽解法と陰解法の混合計算、③均一格子(計算時間がかかる)、不均一格子(計算時間の短縮と現象の精度向上)、④数値流束の構成法としてAUSM-DVなどを用い、時間積分はLU-ADIやLU-SGSなどの陰解法があり、陽解法としては3段ルンゲ・クッタがある、⑤AUSM-DVの他にHLLC系があり、比較の余地がある、⑥データテーブル参照の計算時間の短縮(AI活用)、⑦CPUとGPUの使用などです。

### 1.2.4. CAEに対する爆轟解析

CAEという観点からは、すべての物理量が重要であるという考え方は非現実的です。サイエンスという観点から何が重要なパラメータであるかを知って、物理量を中心に問題を解決することは意味があります。そこで、一つの方法としては、Aという問題に対してCという物理量がどのように対応するかを調べるために $\partial C/\partial A$ または $\partial(\ln C)/\partial(\ln A)$ を計算して感度解析を実施し、Aに対するCの感度を確認しておく、などが挙げられます。例えば水素/空気混合気中で、Aは爆轟波面のセル構造のサイズであり、Cは数値計算で用いられる計算格子のサイズとし、これらの関係を直接数値計算の可視化図から考察すると、計算格子幅を $10\mu\text{m}$ 未満にしないと物理現象とは異なることが分かります(Tsuboi&Hayashi, 2007)。

### 1.2.5. 直接計算とモデリング

1つめの解析例は、直接計算との比較検討はこれからですが、ロシアのクルチャトフ研究所で実施された測定部長さ35mの実験を対象とした爆轟遷移の計算です。形状モデリングを精緻に計算モデリングとして組み込むことや、着火位置を正確にしないと計算結果を正しく得ることが出来ないと分かっています。2つめは回転デトネーションエンジン(Rotating Detonation Engine, RDE)についてです。ガスタービンエンジンの燃焼室のところに回転デトネーションを利用するものです。実験的な研究が進んでおり、数値計算での再現も最近取り組みが始まっているところです。RDEは、爆轟という危険な現象に対してそのエネルギーをポジティブにとらえ、推進力にしようという考えです。デトネーションによるサイクルがこれまでのブレイトンサイクルより20%効率が良いハンフリーサイクルであることから、デトネーションを推力にするという新しい概念の推進機を開発することが目的です。現状ではRDEの対象としてロケットモーターとタービンエンジンに应用することが考えられており、酸化剤として酸素を使う場合はロケットで、空気を使う場合はタービンエンジンと考えています。3つめとしては気液二相のデトネーションです。二相の回転デトネーションに関する問題は、液相燃料と空気による回転デトネーションが、ある条件でデトネーションが消失してしまうことが挙げられ、その理由を数値計算で明らかにしたものです。4つめは、非常に複雑な形状をその内部に持つ密閉容器内の爆轟の伝播解析です。

### 1.3. これからの CAE

#### 1.3.1. パラメータスタディの有効性

CAE におけるパラメータスタディについて説明します。つまり、計算に用いられる物理量の重要性が分かり、重要な物理量をどのように扱えば良いかがはっきりします。パラメータをどのように決定するかについては具体的に述べると、①格子依存性、②時間刻み幅に対する依存性、③クーラン数への依存性、等々です。

#### 1.3.2. 理想的なシミュレーションと数値モデル

時が経つにつれて新しい数値積分モデルが発表され、それは常に調べる必要があります。例えば、対流項の扱いは TVD スキームから AUSM-DV や HLLC 系を用いるようになってきており、時間積分は旧来のルンゲ・クッタスキームから 3 次精度 TVD ルンゲ・クッタ法が使われるようになってきました。これらは爆轟計算の場合ではありますが、計算対象が変わった場合には積分法も変わり、どの手法が良いかは常に調べる必要があります、妥協すべきではありません。例えば、化学反応モデルは広い温度と圧力範囲に有効なモデルを選択することと、短縮モデルを用いる場合には 1-ステップ反応モデルではなく、少なくとも 2-ステップ以上の反応モデルを用いる必要があります。

#### 1.3.3. コードの有効性

Impact factor の高い Journal は、現状では市販コードにより計算された論文は掲載しない傾向にあり、上述した内容をあまり考慮されていないコードが多いことが理由です。爆轟の解析については、OpenFOAM による数値計算が掲載されるようになってきました。理由は、①自分でコードを修正でき、質問を Internet で発信すれば世界中から回答が得られる、②高 Impact factor の Journal でもアクセプトされるようになってきた、③コードは世界中の利用者によって常に改良されている、④コードの使用料が無い、ことが挙げられます。市販コードが有効になるためには、①何でも計算できるのも良いが、問題に特化した極めつけの小さいコードを開発する、②コードを市販する会社がコードの問題を解決するのではなく、愛好会みたいなものを作り、その中で解決するシステムを作る、③愛好会には、販売したコードの収益の幾ばくかを投入する、④このシステムは International とする、などが挙げられます。

#### 1.3.4. 数値解析コードの作成にあたって

数値解析コードを作成にあたり、今後は AI の活用があるのではないかと考えられます。また、データの可視化などするプログラムも簡単化する必要があります、大型計算機を使用する場合には更なる大型の計算を行うことから終わりのない問題となっています。

#### 1.3.5. コードの妥当性と実験のバリデーション

CAE は複雑な形状や大きな形状の内容を要求しますが、このような事情からコード validation も厄介です。他の論文を沢山読む必要があります、ここにも AI が関わっているのではないかと考えられます。コード

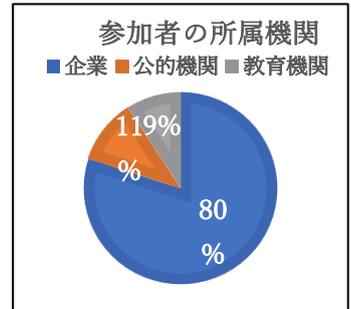
の妥当性のチェックの仕方は、最終的に得られた解析結果が実験を説明しているかどうかをチェックすることで出来ます。これらの問題をきちんと調べておけば、その市販コードと制作会社を信用することが出来ます。

#### 【ご経歴】

1972 年 早稲田大学 理工学部 機械工学科卒業  
 1974 年 名古屋大学 航空工学専攻 (ME)  
 1977 年 カリフォルニア大学 バークレイ校 機械工学専攻 (MS)  
 1980 年 コロラド大学 ボルダー校 機械工学専攻 (Ph.D.)  
 1980 年 プリンストン大学 機械航空宇宙工学科 助手  
 1982 年～1995 年 名古屋大学 工学部 航空工学科 (助手、講師、助教授)  
 1995 年 青山学院大学 機械工学科 教授  
 1984 年 朝日学術奨励賞 (二相デトネーション)  
 1997 年 Wctaw Cybulski メダル (爆発)  
 2017 年 A.K. Oppenheim Award (爆轟数値シミュレーション)

## 参加者

申込者は 75 名、当日の参加者は 55 名であった。参加者の内訳は、企業が 44 名、公的機関が 6 名、教育機関が 5 名であった。主な業種は、「自動車/自動車部品」、「機械/機械部品」であった。



## 参加者のご意見

○解析対象は爆轟と複雑な現象ではあるが、正しい現象理解や、モデルの選定であるといった CAE の基本を愚直に守ることで、精度の良い高い解析ができるという所に納得感があり、また共感できました。

## 公開資料

ご講演の YouTube 動画は、右の QR コードからご覧いただくことができます。



ご講演の資料は、右の QR コードの「ダウンロードする」からログイン後、ダウンロードすることができます。ログインアカウントをお持ちでない方は、「ダウンロードする」から新規メンバー登録後、ログインしてダウンロードすることができます。



林先生のご講演内容に関する質問や林先生との意見交換などをご希望の方は当社までご連絡ください。

## 今後の開催予定

アドバンス・シミュレーション・セミナー

2023 の開催予定

<https://www.advancesoft.jp/seminar/11637/>

No	日程 受付状況	内容	テーマ
第1回	4月21日(金) 終了	「 <b>防災・インフラ分野でのシミュレーションへの期待と課題</b> 」 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 部門長 堀 宗朗 様	防災・インフラ
第2回	5月19日(金) 終了	「 <b>半導体デバイスの歴史と展望</b> 」 IEEE LIFE FELLOW 広島大学 名誉教授 角南 英夫 様	半導体
第3回	6月22日(木) 終了	特別セミナー 「 <b>複雑流動現象の数値シミュレーション</b> 」 大阪大学 基礎工学研究科 機能創成専攻 教授 後藤 晋 様 ----- 「 <b>機械学習による流体解析の拡張</b> 」 University of California, Los Angeles (UCLA) 教授 平 邦彦 様	複雑流動・機械学習
第4回	7月21日(金) 終了	「 <b>GPU スパコンによる混相流シミュレーション・流体構造連成のシミュレーション</b> 」 東京工業大学 学術国際情報センター 教授 青木 尊之 様	流体・HPC
第5回	8月3日(木) 終了	「 <b>原子力安全に必要となる計算科学技術への期待</b> 」 東京大学大学院 工学系研究科 原子力国際専攻 教授 笠原 直人 様	原子力安全
第6回	8月28日(月) 終了	「 <b>サイバー空間の脆弱性と AI: エコーチェンバー、ディープフェイク、ChatGPT の社会的影響</b> 」 東京工業大学 環境・社会理工学院 イノベーション科学系 准教授 笹原 和俊 様	生成 AI
第7回	9月14日(木) 終了	「 <b>量子コンピュータと量子アニーリングマシン: 基礎から最先端まで</b> 」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 新原理コンピューティング研究センター 副研究センター長 川畑 史郎 様	量子コンピュータ
第8回	10月6日(金) 終了	「 <b>爆轟から見える CAE の方向性</b> 」 青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様	爆轟
第9回	11月10日(金) 終了	「 <b>都市のデジタルツイン</b> 」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 デジタルアーキテクチャ研究センター 総括研究主幹 中村 良介 様	デジタルツイン
第10回	12月15日(金) 受付中 	「 <b>計算物質科学による 2.5 次元物質科学研究: 原子層物質複合構造体と外場</b> 」 筑波大学 数理物質系 教授 岡田 晋 様	ナノ

## 【お問い合わせ先】

アドバンスソフト株式会社 出版事業部  
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17階西  
TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 E-mail: office@advancesoft.jp  
<https://www.advancesoft.jp/>



当社では随時人材の募集も行っております。  
<https://www.advancesoft.jp/recruit/>