

アドバンス・シミュレーション 第8回 ・セミナー 2023

2023年10月6日(金) 離

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社についてと、先生のご紹介 1

招待講演

2. 「爆轟から見える CAE の方向性」 3

青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様

3. アドバンスソフトからの情報提供 19

講演概要

「爆轟から見える CAE の方向性」

青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様

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。



アドバンスソフト株式会社 セミナー事務局

〒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

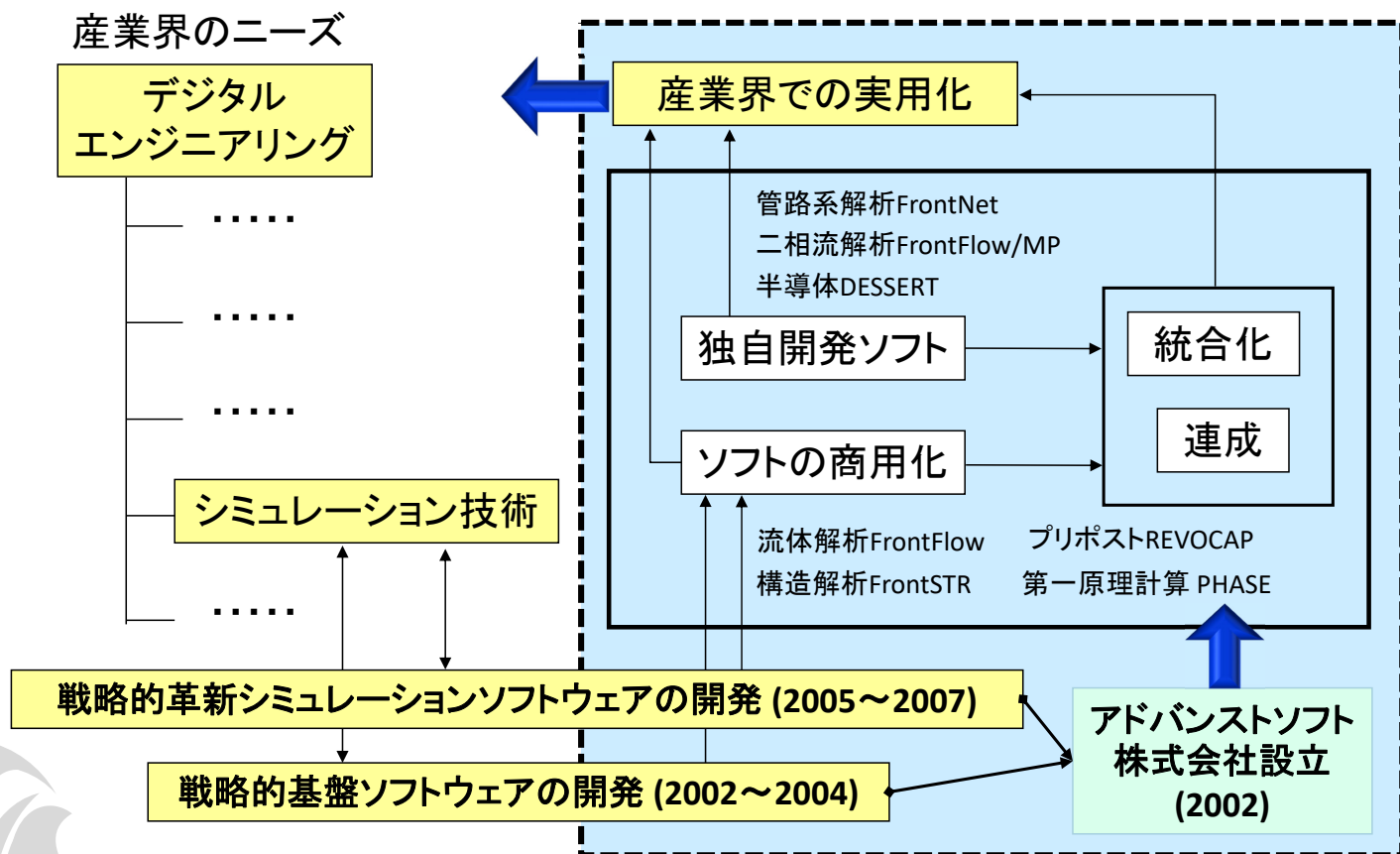
URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

アドバンスソフト株式会社についてと 先生のご紹介

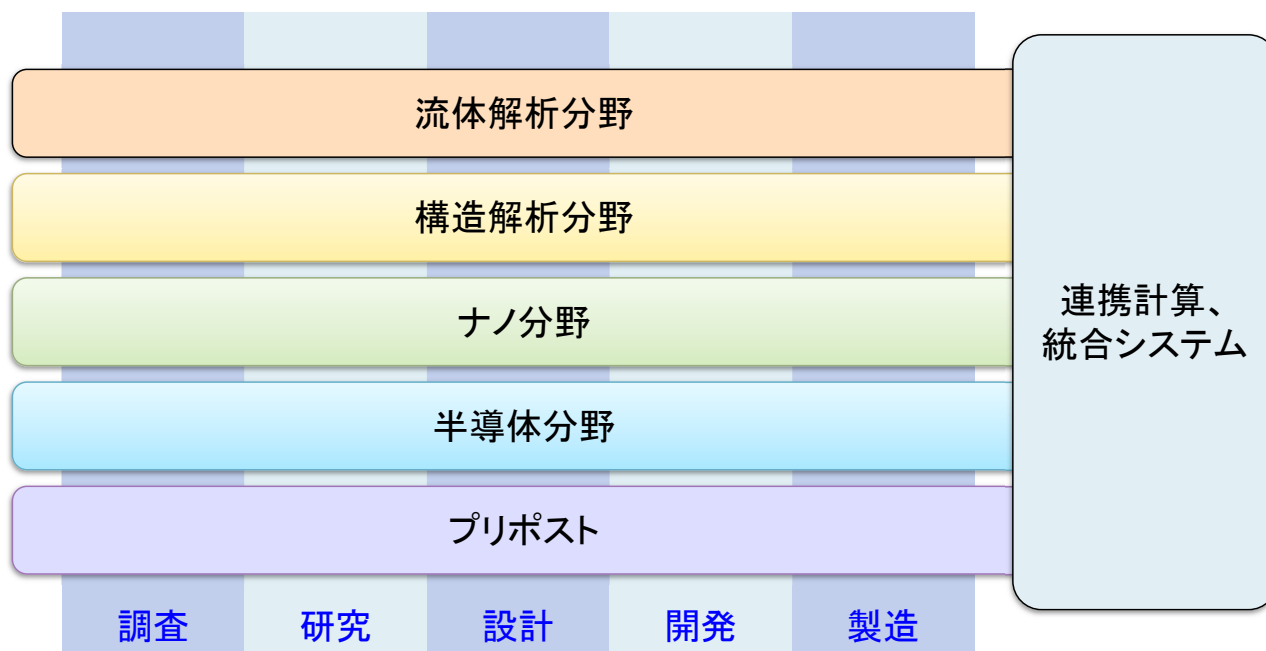
第8回 アドバンス・シミュレーション・セミナー
(青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様)

2023年10月6日 (金) 開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、科学技術計算によるソリューションをご提供します。

林 光一 先生のご紹介

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.)。 プリンストン大学 機械航空宇宙工学科 助手。
1982~1995年	名古屋大学 工学部 航空工学科 (助手、講師、助教授)
1984年	朝日学術奨励賞 (二相デトネーション)
1995年	青山学院大学 機械工学科 教授。
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)。

ご研究内容

専門は、航空宇宙、燃焼、安全などの実験と数値解析による研究。

爆轟から見えるCAEの方向性

2023年10月6日

青山学院大学工学部名誉教授

林 光一

1

コンテンツ

1. 爆轟について
 - 1.1 火炎, 爆燃, 爆轟
 - 1.2 爆燃から爆轟への遷移 (Deflagration-to-Detonation Transition : DDT)
 - 1.3 実験とシミュレーション
2. 爆轟から見えるCAE
 - 2.1 爆轟の解析
 - 2.2 化学反応
 - 2.3 DDT シミュレーション
 - 2.4 CAEに対する爆轟解析: パラメータ感度
 - 2.5 直接計算とモデリング
3. これからのCAE
 - 3.1 パラメータスタディの有効性
 - 3.2 理想的なシミュレーションと数値モデル
 - 3.3 市販コードの有効性
 - 3.4 数値解析コードの作成にあたって
 - 3.5 コードの妥当性と実験とのバリデーション
4. まとめ

2

1. 爆轟について

1.1 火炎, 爆燃, 爆轟 (1)

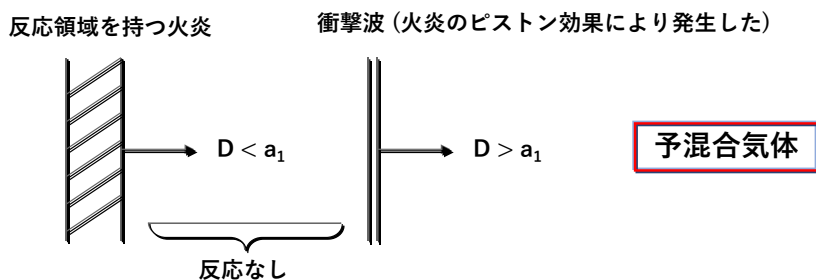
- * **火炎** : 層流火炎 (伝播速度 $D_{\text{laminar}} \leq 10 \text{ m/s}$), 乱流火炎 (伝播速度 $D_{\text{turbulent}} < a \approx 300 \text{ m/s}$)
- * **爆燃** (Fast Flame, Deflagration (爆燃 ; $D_{\text{deflagration}} < a$)) : 亜音速で伝播する燃焼波
- * **爆轟** (Detonation ($D_{\text{det}} > a$)) : 超音速で伝播する燃焼波
- * **爆発** (Explosion) : 生成された発熱を瞬間的に放出する
(爆源以外に火炎の伝播は無いが, 衝撃波の伝播はある)

ここで, D =燃焼波の伝播速度, a =音速
実験によると, $a \gg D_{\text{turbulent}} > D_{\text{deflagration}}$

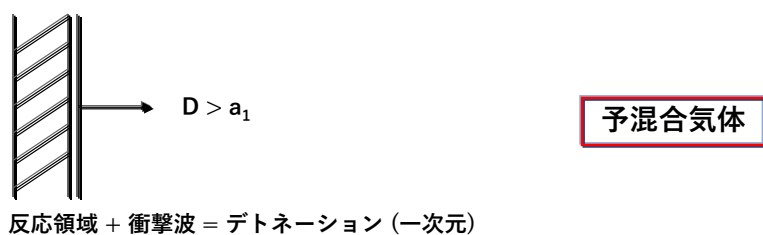
1. 爆轟について

1.1 火炎, 爆燃, 爆轟 (2)

(i) 高速火炎; デフラグレーション: 衝撃波と反応領域が離れている

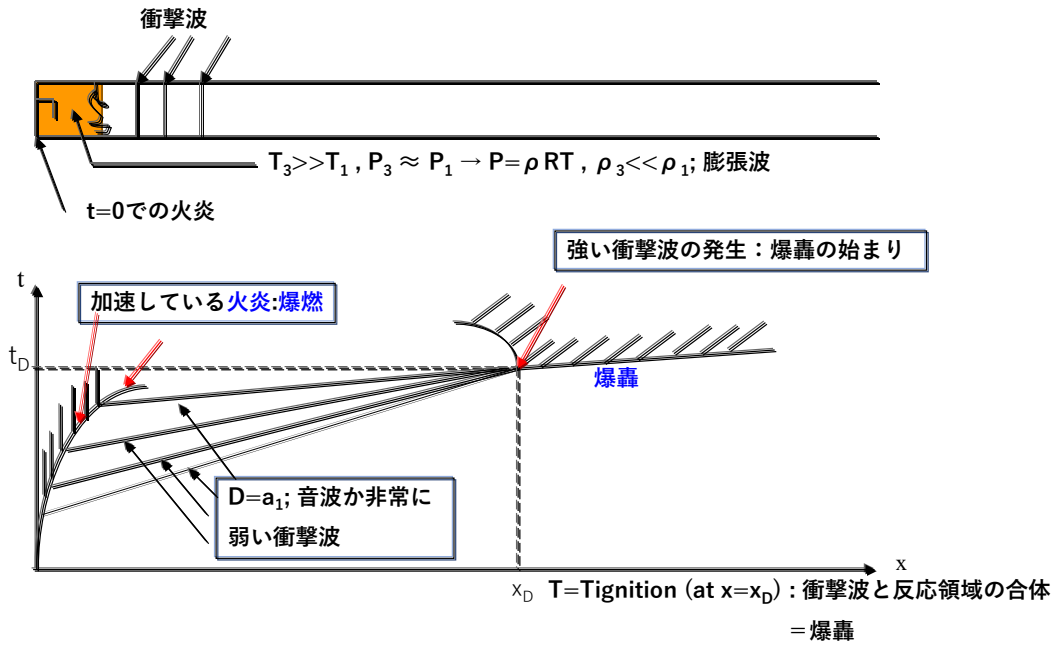


(ii) デトネーション: 衝撃波と反応領域が一緒になっている



1. 爆轟について

1.2 火炎 (Flame) から爆燃 (Deflagration, Fast Flame) , 爆轟 (Detonation) への遷移 (Deflagration-to-Detonation Transition) (1)



5

1. 爆轟について

1.2 火炎から爆燃, 爆轟への遷移 (2) : Oppenheimの実験 (1966年) [1]

火炎面から発生した弱い圧力波が前の圧力波に追いついてこの圧力波の集まりが衝撃波となってきた。

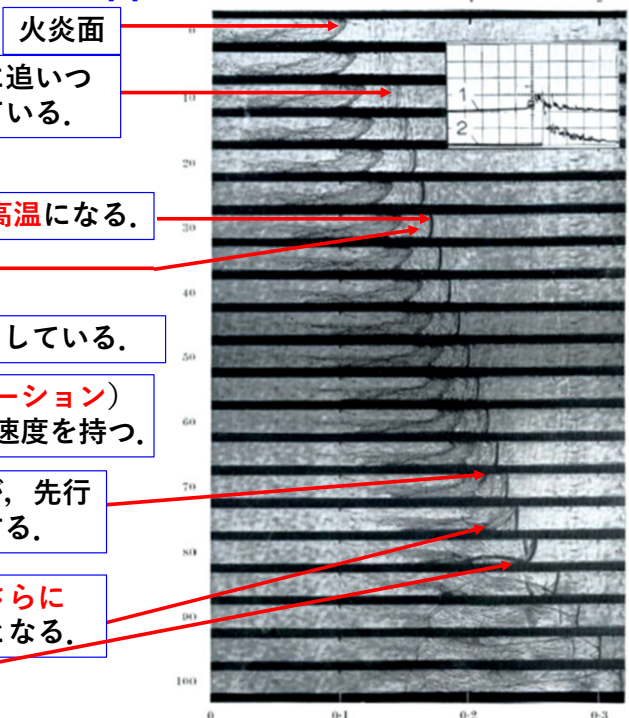
衝撃波は強くなっており、その後方は高温になる。

この結果、火炎は加速し、前方の衝撃波に追いつこうとしている。

この火炎を爆燃 (デフラグレーション) と呼ぶ: 音速より遅いが早い速度を持つ。

ここは、火炎が前方衝撃波に行きついていないが、先行衝撃波後方の高温と高圧力により、壁面で着火する。

着火した爆発波 (高温・高圧) が下壁に到達し、さらに強い爆発を起こし、前方の衝撃波と干渉し、爆轟となる。



6

[1] Oppenheimの実験: Urtiew, P.A., Oppenheim, A.K.: Experimental observations of the transition to detonation in an explosive gas. Proc. Royal Soc. Lond. Vol. A295 (1966) : pp. 13-28.

1. 爆轟について

1.2 火炎から爆燃，爆轟への遷移（3）：DDTの4つのパターン（例）

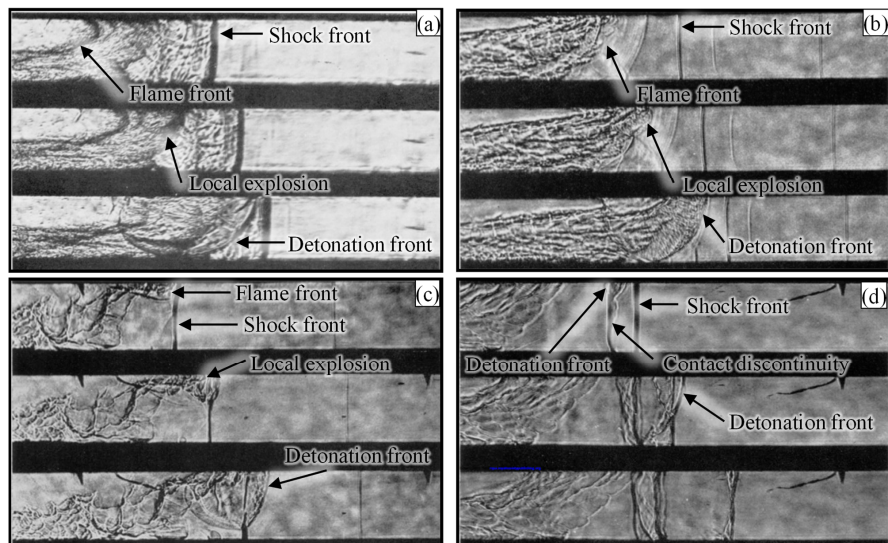


Fig. 2. High-speed Schlieren stroboscopic pictures showing the transition from deflagration to detonation in a hydrogen-oxygen mixture: (a) DDT between the flame and the shock, (b) DDT at the flame front, (c) DDT at a shock front, (d) DDT at the contact discontinuity [1].

[1] Urtiew, P.A., and Oppenheim, A.K. "experimental observations of the transition to detonation in an explosive gas." Proc. Royal Soc. Lond. Vol. A295 (1966): pp. 13-28.

- (a) 火炎と先行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) 接触不連続面で着火し爆轟となる。 ※しかし、パターンはいくつもある
- * 接触不連続面とは、衝撃波面後方で密度が上昇し、温度が下がる面

1. 爆轟について

1.3 爆轟のこれまでの実験とシミュレーション研究

【実験】

* 1966年にUrtief & Oppenheimで発表された高速シュリーレンの動画は、今もDDTの動画の代表格になっている。しかし現在もそうだが、爆轟に至るまでに着火の過程があり、現状もなおそれを鮮明にとらえていない。時間と空間の詳細計測が追いついていない。

【数値シミュレーション】

* 1978年に滝 & 藤原 [2] で、2次元デトネーションの伝播が数値的に初めて示された。しかし、1978年代の大型計算機は、現代のPCほどでもない速さと大きさであった。つまり、時間と空間の精度がまだ十分に得られておらず、爆轟の詳細な機構は得られていない。

* 爆轟の研究は、実験研究でスタートしたが、1978年頃から数値計算による研究が発達し、数値計算による研究が実験研究を追い越し始めているが、実際にはまだ精度の面で大型計算機の助けが必要であると考え。また、実験も、新しい測定法などでさらに新発見があるであろう。

具体的には、次の章で紹介する。

[2] Taki, S. and Fujiwara, T., Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonations, AIAA J., 16 (1), (1978-1), pp.73-77.

2. 爆轟から見えるCAE

2.1 爆轟の解析

* 1980年代後半ぐらいから、爆轟の数値解析に**TVDスキーム** (Total Variation Diminishing) が使われるようになった。この手法は、流速制限を使うことで、安定性と精度を両立した手法である。ただし、精度は**2次精度**で行われていたため、衝撃波は角が丸め込まれていた。計算の安定性は非常に良い。

* 最近の計算では、OpenFOAMなどの自由に自分で書き換えることのできるCodeを使って、自分用のCodeを作って計算することもポピュラーになってきている。この**OpenFOAM**を使った研究は、JournalでもAcceptされだしている。

* DDTシミュレーションの難しい点：亜音速（非圧縮性）から超音速（圧縮性）までの問題を時間や空間依存で解かなくてはならない。例えば、これには**スラウII**のような一つの積分法で亜音速から超音速までの積分ができるようなコードもあるが、皆さんは結構苦労している。

9

2.3 化学反応

水素反応機構

水素/酸素・空気詳細反応機構：40～50素反応

水素/酸素・空気簡略反応機構：18～23素反応

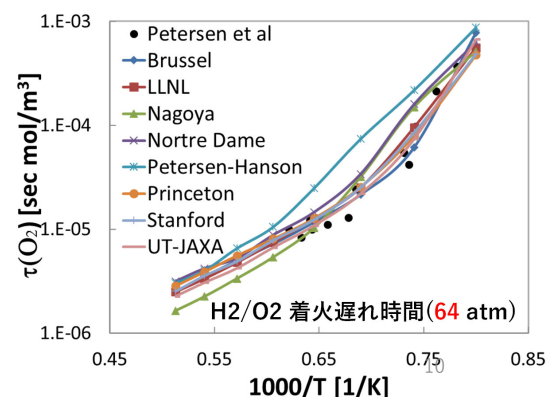
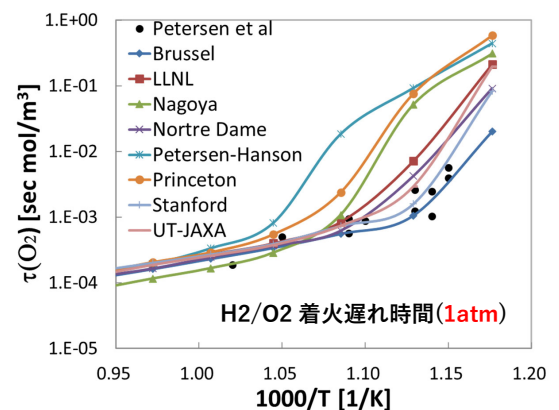
- ① Stanford U., Prof. Ron Hanson group (Shock Tube 実験) [3]
- ② 東大・JAXAグループ (数値解析で求められた)
- ③ 世界的にいくつかの機構がある

炭化水素反応機構

炭化水素/酸素・空気詳細反応機構：100～数千素反応

炭化水素/酸素・空気簡略反応機構：1～10反応 (一方向反応と双方向反応)

- * **重要な点**：① 反応機構の使用に当たっては、**自分で責任を持つこと**。
② 化学反応機構は、**温度だけでなく、圧力依存も確認すること**。特に、**爆轟計算**では。
③ 反応機構が、どの温度および圧力範囲で使えるのかを調べておく必要がある。



[3] Z. Hong, D.F. Davidson, and R.K. Hanson, An improved H2/O2 mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements, Combust. Flame, 158 (2011) pp. 633-644.

2.3 DDT シミュレーション

* DDTの計算に当たっては：① 火炎（低速，亜音速，約1気圧），爆燃・爆轟（高速，超音速，高圧）（部分的に坪井教授，九工大）の違った条件が同じ画面で，非定常，不均一に起こる。

→ 計算法がいくつも必要になる。

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。（AMR法）

④ Numerical Flux としてAUSMDVを使い，現在のところ，LU-ADI-SGS法が有力。RK3やLU-SGS法では，計算時間が多くなる。

⑤ AUSMDVとHLLC-LLF, HLLC-LMの比較

⑥ 計算上での計算場とデータ場のやり取りの時間の短縮

⑦ CPUとGPUの使用：互いに関係する。

→ これらの問題は，刻一刻と変わっていく。いつも注意する必要がある。

11

2.4 CAEに対する爆轟解析：パラメータ感度（1）

* 第3章で詳しく述べるが，CAEという観点から，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ある。



* サイエンスという観点でなく，CAE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，その物理量を中心に問題解決することは意味がある。

そこで，一つの方法として，ある問題でAという物理量に対して，Cという物理量がどのように対応するかを調べてみる。



具体的には，

$$\frac{\partial C}{\partial A} \quad \text{または} \quad \frac{\partial(\ln C)}{\partial(\ln A)}$$

を計算してみる。

結果として，Aに対するCの感度が良くわかる。

12

2.4 CAEに対する爆轟解析：パラメータ感度（2）

H₂/Air の格子サイズに依存する爆轟波のセルサイズ [4]

(a) 2.5 micron



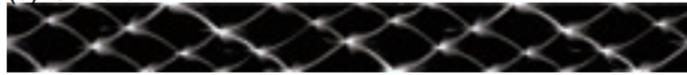
(b) 5 micron



(c) 7.5 micron



(d) 10 micron



30 atm 70 atm

[4] N. Tsuboi and A.K. Hayashi, Numerical Simulation on Three-Dimensional Detonations, Nagare 26, (2007) 183-192

*これは、格子サイズ、 d 、に対する爆轟波のセルサイズ、 λ 、の関係を表しており、 $\frac{\partial \ln(\lambda)}{\partial \ln(d)}$ の関係からも分かる。この結果からも、水素/空気爆轟の格子幅は、 $10\mu\text{m}$ ではまだ小さいが、 $7.5\mu\text{m}$ にするとセルサイズも $10\mu\text{m}$ に対して1.5倍から2倍になっていることが分かる。
→つまり、計算コストの関係から、格子サイズを $10\mu\text{m}$ 以下にできないとすることは、間違った結果を得ることになる。これに関しては、多くの論文が $10\mu\text{m}$ かそれ以上で計算している。ただし、このことは、詳細反応モデル（18-21反応）を使った場合である。

13

2.5 直接計算とモデリング

*ここでは、爆轟の問題で直接計算の場合、どの程度までを直接計算というのかということを議論してみよう。直接計算とはいえ、すべてが直接計算ではなく、必ずモデリングがそのプログラムの中で使用されている。

2.5.1 火炎の直接計算とそのモデル（1-1）

*火炎の直接計算は、ナビエ・ストークス方程式（これもモデルであるが）をそのまま積分する。ただ、ナビエ・ストークス方程式中に使われている種々の係数は、モデリングしなければならない。また、この積分もモデリングした積分である。20年ほど前は、積分も2次くらいの精度を持って結果を出し、その結果を基に物理を議論していた。しかし最近、特にScienceというよりはEngineeringのレベルで2次精度が3次、4次というように上がってきた。

*私の考え方は、Engineeringといっても、このモデリングの精度を落とすべきではないと常々考えている。この考えは当然で、爆轟問題などでは、大きい計算ができないからと言って、格子幅を大きくとって計算を行い、その結果を工学の安全の指標にするということは、安全ではないと考える。直接計算とモデリング計算の比較はここでは示さないが、直接計算のいくつかの例を以下に示す。

*ただし、最近、Canteraで計算した大量のデータを保存して、化学反応計算を行うことなしに種々の反応から得られる物理量を用いる方法が徐々に使われるようになってきている。この場にも、使用できる温度と圧力の範囲は示す必要がある。

14

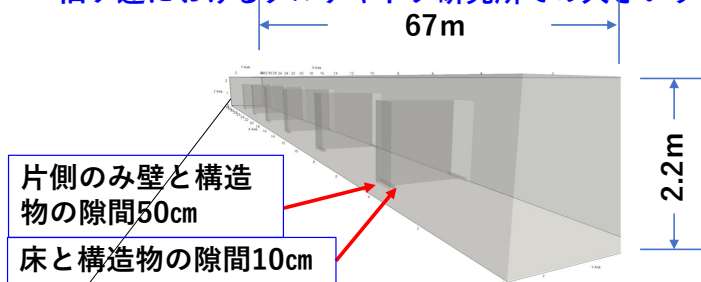
2.5.1 火炎の直接計算とそのモデル（1-2）

例として、DDTで火炎をきちっと解かないと正しい答えが得られないケース。

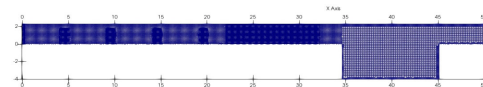
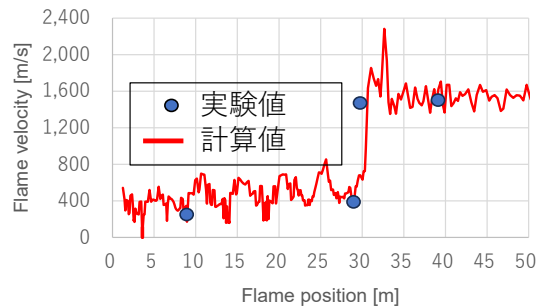
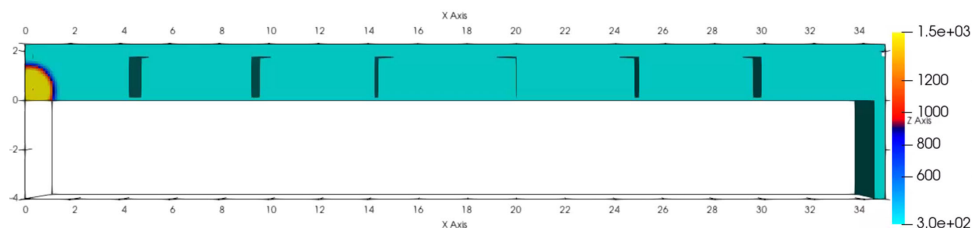
項目	
基盤コード	Advance/FOCUS-i
対流項	3次精度TVD+AUSMDVスキーム
粘性項	勾配計算はガウスの発散定理
時間進行	TVD Runge-Kutta(TVD R-K3)法
時間刻み	約1 μ s
格子サイズ	2.5cm~20cm
要素数	405万
乱流モデル	k- ω SSTモデル
層流火炎速度	Cantera(Open source code)
乱流火炎速度	Dinkelacker(2011)のwrinklingモデル
爆轟遷移モデル	Ettner(2013)の着火遅れ時間モデル
化学種のエンタルピー物性	GRI-Mech3.0
着火遅れ時間データテーブル	Cantera(Open source code) with UT-JAXA
既燃気体の化学種分率	NASA-CEA

2.5.1 火炎の直接計算とそのモデル（1-3）：

旧ソ連におけるクルチャフ研究所での大きいサイズの水素/空気によるDDT実験



Time: 0.000000 sec



*モデルとして ①Metghalchi [5] & Keckによる実験に基づいた式 [6] と②Dinkelackerの自己相似火炎伝播乱流にもとづくモデル [7] (フラクタルモデルともいう) を火炎加速のために使っている。
*wrinklingモデルだけでは、火炎は加速しない。

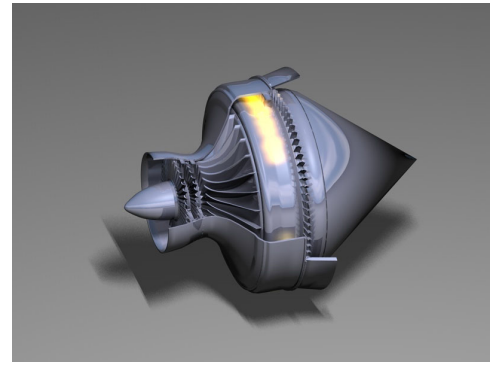
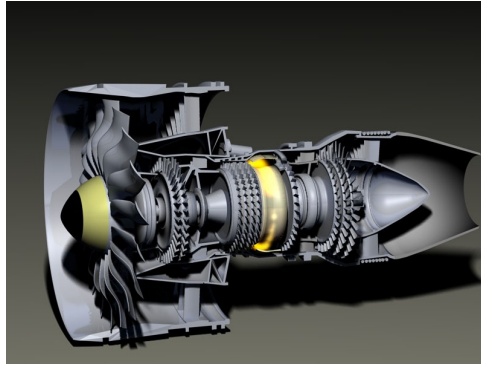
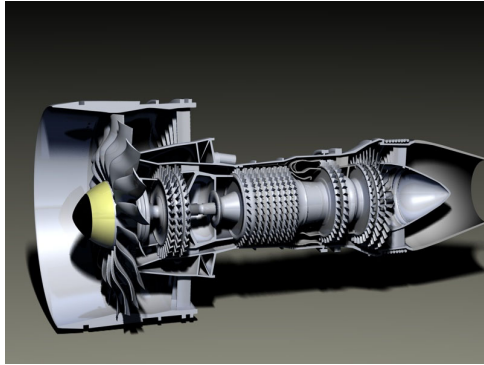
[5] Metghalchi, M. and Keck, J. C. : Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, Isooctane, and Indolene at High Pressure and Temperature, Combustion and Flame, 48 (1982) , pp.191-210.

[6] Shen, X., Shen, J., Liu, H., Wen, J. X., Ma, Y., Zou, X., Liu, Z., Numerical investigation on dynamic behavior of premixed hydrogen/air flame propagation in a closed tube, Fuel, 354 (2023, Dec 15) pp.129295.

[7] Dinkelacker, G. : Z. Elektrochem., 46 (1940) 601; NACA TM 1112 (1947) [English Trans.].

2.5.2 ローテティング・デトネーション エンジン (回転爆轟エンジン) (1)

これは、ついこの間亡くなられたPolandのProfessor Piotr Wolanski の発表から頂いたslidesである。



Conventional Turbofan Engine
(通常の高タービンエンジン)

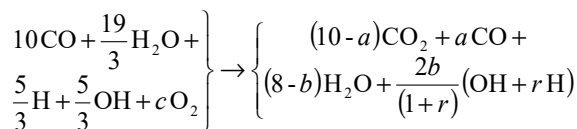
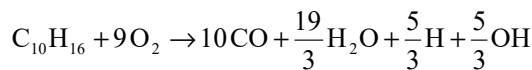
Turbofan Engine with application of Rotating Detonation in Combustion Chamber (RDCC)
(回転爆轟エンジン (黄色の部分) を搭載した高タービンエンジン)

RDE with axial+centrifugal compressor and turbine
(Disk-タイプの回転爆轟エンジン (黄色の部分) を搭載したコンプレッサーとタービン)

2.5.3 二相デトネーションの問題 (1)

* JP10/空気二相ローテティング・デトネーションエンジンは気-液二相デトネーションの問題で、気体はオイラー方程式で、液体は液圧が無いオイラー方程式を用いている。

JP10の二段階反応モデル (Varatharajan, B., Petrova, M., Williams, F. A., Tangirala, V.: Proceedings of the Combustion Institute. 30 (2005) 1869-1877)



$$a = 10 / (1 + k_{5\infty} / k_{6\infty})$$

$$b = 8(1+r) / (1+r+2\sqrt{rs})$$

$$c = (10-a)/2 + b(1-r)/(2(1+r))$$

$$r = C_{H,\infty} / C_{OH,\infty}$$

$$s = k_{3\infty} C_{H_2O,\infty} / k_{4\infty}$$

$$k_{\infty} = AT_{\infty}^n \exp(-E_a/RT_{\infty}), C_i = \rho X_i / W$$

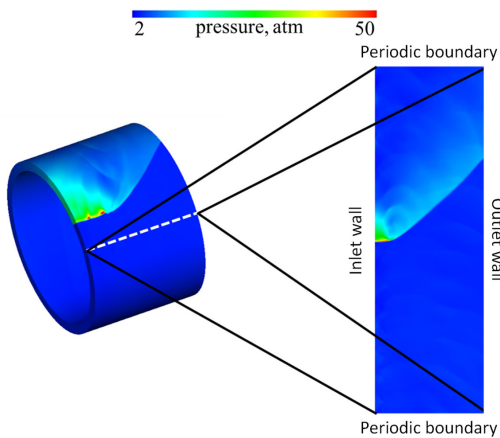
* このJP10/O2の反応モデルは、着火遅れ時間と発熱の実験値とよく合っているとVaratharajanらは言っており、爆轟のセルサイズも実験結果との良い一致をみているとしている。

* ところでこのローテティング・デトネーションというのは、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て推進力にしようという考えである。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して始まった新しい概念の推進機を開発することが目的である。

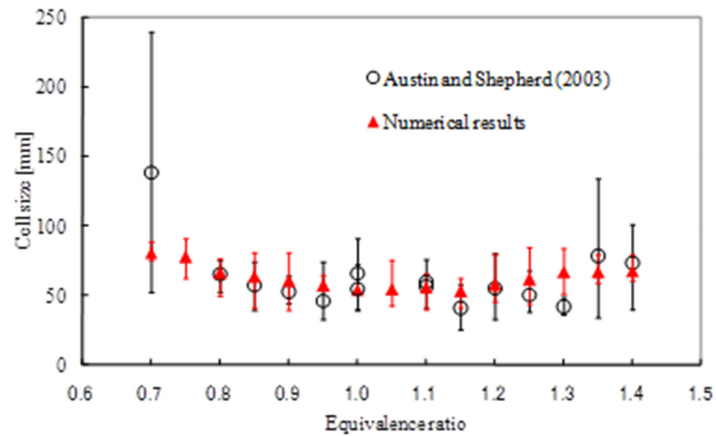
現状では、ローテティング・デトネーションエンジンの対象として、ロケットモーターとタービンエンジンに应用することが考えられており、酸化剤として酸素を使う場合はロケット使用で、空気を使う場合はタービンエンジンと考えている。

2.5.2 二相デトネーションの問題 (2)

- * この問題は、液体相のJP10と空気による回転デトネーションエンジンのシミュレーションを行い、ある条件でデトネーション（爆轟）が消炎してしまうことを示し、その理由がどうしてかを明らかにした例である。
- * この研究の場合、**Validation**はどの物理量で行うかを研究の初めに理解しておかなければならない。



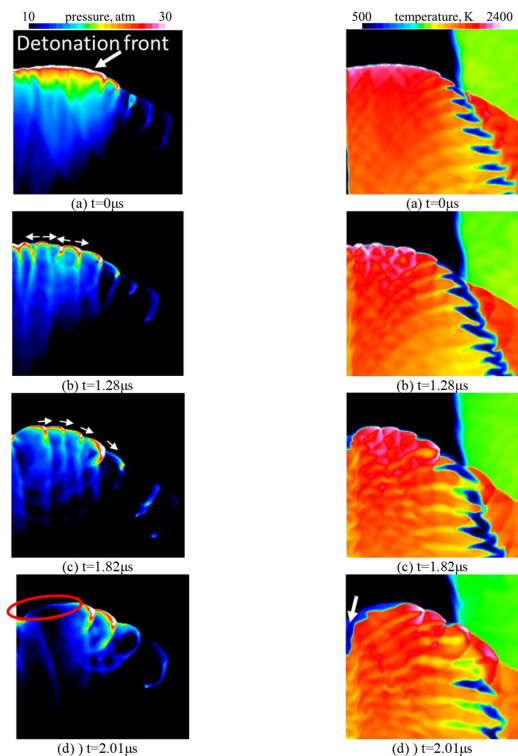
左図の円柱周りをまわる回転爆轟エンジンを、円柱表面を回るとして右図の二次元表現にして計算を行った。とりあえず、三次元効果は考えない。



上図は、爆轟の最終結果である爆轟のセルサイズの実験との比較で、実験との一致は数値モデリングの正当性を示している。多くの爆轟計算では、爆轟速度の確認だけで終わっているが、十分なValidationにはならない。なぜなら、速度は発熱だけで決まり、化学反応が有効に寄与していない。

2.5.2 二相デトネーションの問題 (3)

- * 右図は**爆轟の消炎**を示した結果であるが、左図列が**圧力分布**で、右図列が**温度分布**である。一つの図中、**左の境界は壁で、右の境界は流出境界**である。圧力分布は、時間が経つにつれて、**壁付近の圧力が下がって来て**おり、爆轟波面にある**三点衝撃波**（入射衝撃波、反射衝撃波、マッハ衝撃波）が一つの点に集まって強い点になっているが、赤丸で囲まれている部分の**三点衝撃波が消えて**なくなっている。これは、右列の温度分布をみると分かるように、**爆轟波面の壁際から冷たい未燃混合気体（気化したJP10と酸素）が入り込んでいる**ことから理解できる。



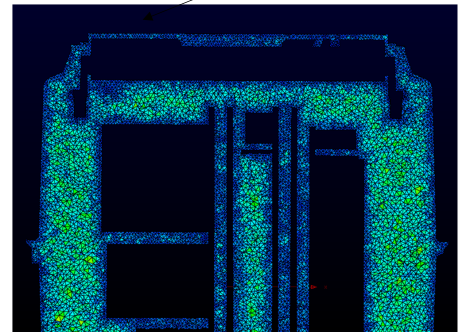
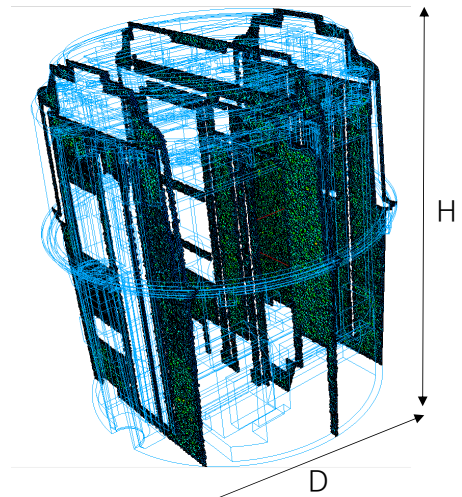
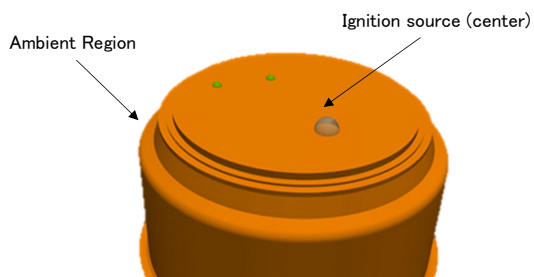
- * この結果は実験ではまだ確認ができていないが、消炎の可能性を示している。実機ではJP10と空気は初めから混合されていないため、消炎する状況はさらに起こりやすいと考える。

2.5.3 複雑な形状を伝播する爆轟の問題 (1)

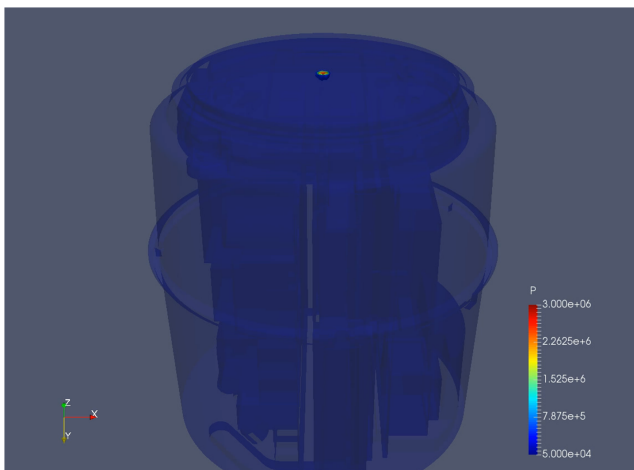
ある容器にH₂/O₂混合気体が満たされ、
ある点で着火が起こった場合のシミュレーション

- ✓ 格子サイズ D=約170mm, H=約200mm
- ✓ 格子数 600万
- ✓ 格子作成コード Pointwise
- ✓ 計算コード CFD crunch
- ✓ 混合気体 H₂ / O₂ (当量比=1.0)

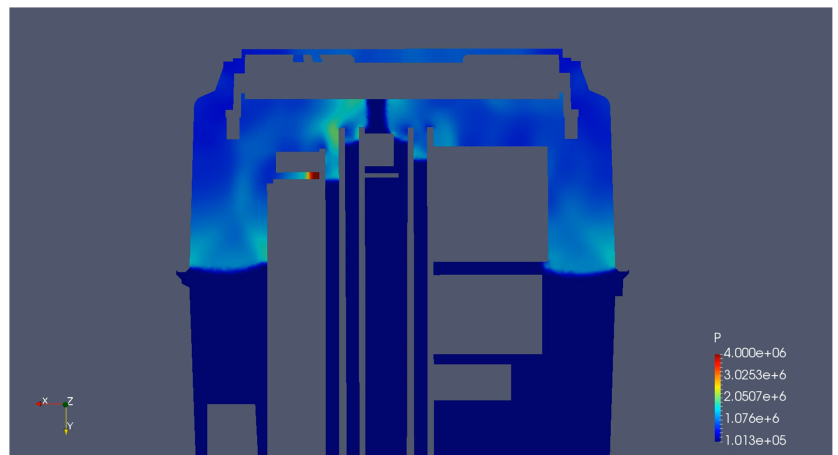
領域	温度 [K]	圧力 [Mpa]
周囲領域	295.65	0.126
着火領域	2000	2.00



2.5.3 複雑な形状を伝播する爆轟の問題 (2)



全体の三次元表示



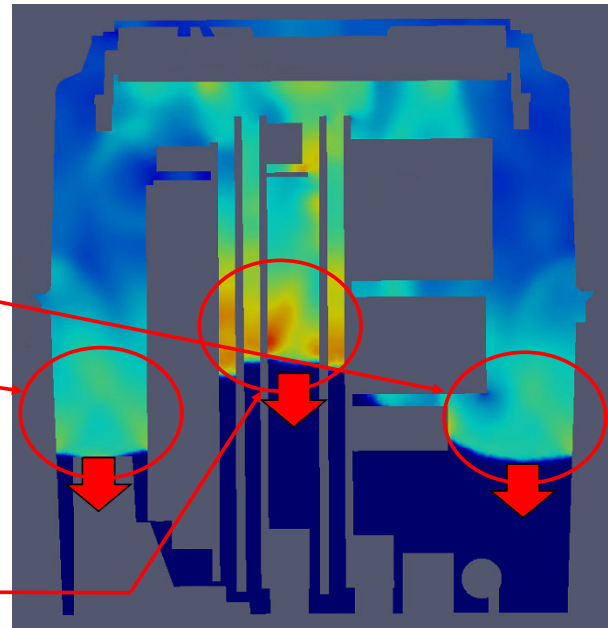
中心付近をカットした二次元表示

2.5.3 複雑な形状を伝播する爆轟の問題（3）

*それぞれの領域で合体した圧力波がほぼ同時に垂直にそして下方方向に伝播する。
*特に、中心付近は詳細で狭い部分が多く、爆轟に再着火したりして、高圧になっている。

比較的広い空間を伝播しているため、伝播が早くなっている。この場合、火炎は爆燃になっており、その速度は、2000 m/secにはなっている。（水素/酸素の当量比が1の場合の爆轟速度は約 2800 m/secである）

狭い空間を伝播しているため、燃焼波の伝播は側面付近よりは遅いが、デトネーションの再着火がところどころで見られる。



圧力分布

3. これからのCAE

3.1 パラメータスタディの有効性

なぜパラメータなのか？ → 計算に用いられる物理量の重要性が分かり、その重要な物理量をどのように扱えば良いかがはっきりする。もちろん、知りたい物理量の変化（最小値、最大値）なども分かる。

*パラメータの決定：① 行おうとしている計算の種々の物理量に対して、**格子の依存性**はどうか？

例えば

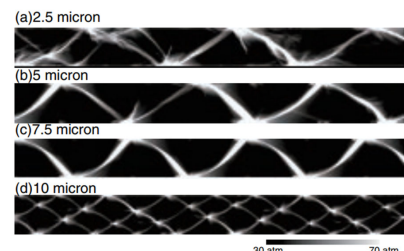
② 計算の**時間ステップ**に対する**依存性**はどうか？

③ **クーラン数**の**依存性**はどうか？ $v=c\frac{\Delta t}{\Delta x}$ （ v は燃焼波の速度、 c は音速）

④ などなど

*計算格子依存度：2-4-(2)で述べたように、右図で示される格子依存は、7.5micron以下ではあまり効いていないが、**10micron以上になると、セルサイズが全く違う値になる**。世界中の多くの研究者は、これを調べずに、研究を進めている。

例えば



30 atm 70 atm

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、新しいより良い数値積分モデルが発表される。

→ つまり、新しい数値モデルは常に調べる必要がある。

→ 例えば、**対流項の積分にはTVD法からAUSMDV法、そしてHLLC法に変わってきたり、時間積分にはこれまでのRunge-Kutta法から3次精度TVD・Runge-Kutta法が使われたりしている。**これは、爆轟計算の場合であるが、計算対象が変わった場合、積分法も変わって行き、どの積分法が良いかはいつも調べる必要がある。



このより良い数値計算法の選択については、妥協はすべきでない。

* 化学反応モデル：2.3の化学反応でも述べたように、以下の注意が必要である。

① モデルの選択には、広い温度と圧力範囲に有効なモデルを選択する。

② 短縮モデルを用いる場合には、1-ステップ反応は使わないで、少なくとも2-ステップ以上の反応モデルを用いる。もちろん、validationは行う。

25

3.3 市販コードの有効性

* **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る**と考える。この理由は、上述した内容をあまり考慮されていないコードが多く、**対処の仕方、理由などがすべての問題に同じように対応するとは限らない。**

* 2.1 爆轟の解析で述べたように、**Open FOAMのコード**が発表されるようになり、このコードによって計算された結果による論文は徐々にImpact Factorの高いJournalにおいても採用されるようになってきている。使うにあたっていくつかの点で利点であることが分かる：

① 自分でコードを手直しできる。また、質問をInternetで配信すれば、世界中からの回答も得られる。

② 高Impact FactorのJournalでも、Acceptされるようになってきた。

③ コードは、世界中の使用者によって常に改良されている。

④ コードの使用料は無い。

⑤ OpenFOAMのHome Page: <https://www.openfoam.com>

* 市販コードが有効になるには：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なく、**愛好会みたいなものを作って、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**収入のいくばくかを投入する。**

④ **このシステムは、Internationalとする。**

26

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するにあたり、**AIを使った方法**があるのでは？
これは、なにも同じアイデアなりをAIから持ってくるのではなく、新しいアイデアや内容を見つけるためにAIを使ってみる。
- * 3.3でも述べたように、**売れる数値解析コード**を考える必要はあるのではないかと**使いやすさや精度**。
- * それよりも、AIと連携するかもしれないが、FORTRANをもっと**コミュニケーションのできる言語**にすると、愛好家が増えるのでは？コードを作りやすくなるのでは？
- * これまでmainコードの話ばかりだったが、**結果のデータを可視化などする場合のプログラム**も簡単化できるのでは？これは、大型計算機を使う場合に、研究者がさらなる大計算を行うことから問題になっているようだ。

27

3.5 コードの妥当性と実験とのvalidation

- * **CAE**は複雑な形状や大きな形状の内容を要求するが、このような足かせに対して、コード**validation**も厄介な仕事になる。その場合でも、validationは、きちっとしなければならないプロセスである。このvalidationを行うにあたり、他の論文をたくさん読む必要がある。このプロセスもAIが関わってこれるのではと考える。
- * **コードの妥当性のチェック**の仕方は、多岐にわたると思う：例えば、方程式中で使われる種々の係数は、関係する温度と圧力の広い範囲でのvalidationが必要であるとともに、爆轟問題であれば、温度でも3,000 K、圧力で60atmほどはカバーしてもらわなければならない。方程式の中で使われる係数になると、さらに調べるのに手間がかかる。
- * 最終的には、数値シミュレーションで出た結果が、実験を説明しているかもチェックする必要がある。
- * これらの問題をきちんと調べておけば、その**市販コードと製作会社の信用**ができることになる。

28

4. まとめ

*まとめとしては、爆轟のシミュレーションを通して、爆轟特有の問題はあるが、CAEに対しては他のEngineeringレベルの問題を扱うのと同じように、しっかりと対処していかなければならない事柄がいくつもあると考える。これらの問題やコードの開発には、あるレベルの信頼を得ると思う。これからは、計算機の精度もさらに良くなるが、それに伴って、計算対象となる問題の難しさもさらに増えるので、作業の内容こそ増えるが、コードの精度やレベルに対する対処の考え方は変わらないと思う。

- (1) 得るべき問題の物理と化学をしっかりと理解する。
- (2) 使用する計算機を選択をする：ベクトル計算機かスカラー計算機か。
- (3) コードの支配方程式の選択を行う。
- (4) 適切な化学反応機構モデルを得て、そのvalidationを行う。
- (5) 支配方程式の積分を行う方法を選択する。
- (6) 初期並びに境界条件を設定する。
- (7) 支配方程式並びに各モデルの係数のvalidationを確認する。
- (8) 計算結果のvalidationを行う。
- (9) 得られた計算結果を図視化するコードの選択と確認をする。
- (10) 得られた結果を精査する。

*その他、AIの使用可能なコード作成・開発を考える。このAIの利用は、計算コード開発に日常的に使われる。

アドバンスソフト
からの情報提供

1. 今後のセミナー予定
2. セミナー資料のダウンロード
3. アーカイブ動画のご案内

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスシミュレーション・セミナー2023 開催予定一覧

第9回 産業技術総合研究所 中村 良介 先生 2023年11月10日（金）開催

No.	開催日	講師の先生方	テーマ
第9回	11月10日（金）	「都市のデジタルツイン」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 人工知能研究センター 総括研究主幹 中村 良介 様	デジタルツイン

第10回 筑波大学 岡田 晋 先生 2023年12月15日（金）開催

No.	開催日	講師の先生方	テーマ
第10回	12月15日（金）	「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」 筑波大学 数理物質系 教授 岡田 晋 様	ナノ

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

下記のURLから、過去のセミナー資料をダウンロード可能です。
<https://www.advancesoft.jp/download/>



シミュレーション図書館 (資料ダウンロード) について

- 初めてご利用いただくお客さまは、「新規メンバー登録 (フォーラム会員登録)」をお願いいたします。ご登録いただきますと、いただいたメールアドレスあてにダウンロード用のログインパスワードをお知らせいたします。
- ログインパスワードをお持ちのお客さまは、お客さまのご登録されたメールアドレスと、こちらからお知らせしましたパスワードで、ログインしてください。ログイン中はどの資料もダウンロードいただけます。
- 会社案内、会社概要、開発実績は、ログイン不要でダウンロードいただけます。
- ご登録いただいたメールアドレスあてに、メールマガジンやアドバンスソフトからのご案内をお送りさせていただきます場合がございますので、ご了承ください。
- 資料に含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。

資料カテゴリー一覧

パッケージソフトウェア▷ ナノ・バイオ 半導体 流体 管路系 二相流 防災 構造 統合環境
 解析・コンサルティング▷ 防災・地震 二相流 2次電池 その他

半導体

- 【半導体】> セミナー資料 (アドバンスソフトの半導体デバイス、電磁波解析のご紹介 ~DX、グリーンイノベーションを加速する数値解析シミュレーション~) 20221117_all 【全体】
- 【半導体】> セミナー資料 (半導体デバイス3次元TCADシステム Advance/TCAD 最新動向セミナー) 20181225_all 【全体】
- 【半導体】> セミナー資料 (半導体デバイス3次元TCADシステム Advance/TCAD 製品紹介セミナー) 20190828_all 【全体】
- 【半導体】 Advance/TCAD > セミナー資料 (オンラインセミナー「アドバンスソフトの電磁波、半導体デバイス解析のご紹介 ~IoTを支える数値解析シミュレーション~」) 20200825_all 【全体】
- 【半導体】 Advance/TCAD > セミナー資料 (半導体デバイス3次元TCADシステム発売のご紹介セミナー)

Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

YouTubeにて、セミナーのアーカイブ動画を配信中
<https://www.youtube.com/user/advancesoft>



Copyright ©2023 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。