

jh250005

# Logarithm Conformation Representation による 新規圧縮性流体ソルバーの開発

中澤嵩（金沢大学学術メディア創成センター）

## 概要

本研究では、圧縮性流体場の形状最適化を見据え、計算効率を重視した数値計算スキームを構築した。密度・圧力に対する対数変換 LCR、異方性メッシュ生成を可能とする AMR、物質微分を近似する SLM を FreeFEM 上で統合し、圧縮性流体ソルバーを実装した。まず 1 次元 Sod Shock Tube Problem を解き、厳密解との一致を確認するとともに、AMR により格子点数を約 90%削減した。さらに  $Re=200$  の 2 次元 Viscous Sod Shock Tube Problem を計算し、先行研究と整合する結果を得た。計算には大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID を用いた。今後は  $Re=500$  以上の高レイノルズ数領域での検証を進め、PETSc を用いた領域分割法など、より効率的な並列計算手法の導入を検討する。

### 1. 共同研究に関する情報

共同利用・共同研究を実施している拠点名  
大阪大学 D3 センター

#### (1) 課題分野

大規模計算科学課題分野

#### (2) 参加研究者一覧と役割分担

中澤嵩(金沢大学): 数理モデル・計算モデルの構築及び、Freefem を用いたプログラミングに関して中心的な役割を果たす。

下山幸治(九州大学): 計算モデルの構築に対して、圧縮性流体の物理的な側面から、その妥当性を与える役割を果たす。また、中澤は、九州大学 IMI 共同利用・共同研究拠点短期研究員として九州大学伊戸キャンパスを訪問し、下山氏と研究打ち合わせを対面で行っている。

大谷智治(大阪大学): 計算モデルと大規模計算機システムのアーキテクチャーの双方を考慮した上で、どのような並列処理を行うのが最も計算コストを削減できるかについて調査を行う役割を果たす。

降旗大助(大阪大学): 数理モデルの構築に対して、圧縮性流体の物理的な側面から、その妥当性を与える役割を果たす。特に、密度と圧力に対する  $\log$  変換や AMR の適用など、低コスト・高精度を実現する数理的な基盤の構築に貢献する。

### 2. 研究の目的と意義

圧縮性流体場に特有の代表的な物理現象として、衝撃波と境界層乱流が相互干渉する Shock Wave Boundary Layer Interaction (SWBLI) が挙げられる。SWBLI は通常の境界層乱流と比較して著しく複雑な乱流構造を呈し、その結果とし

て空気抵抗が増大する。したがって、SWBLI を適切に制御することは、高速流体機器における抵抗低減のために不可欠である。

航空工学の分野では、衝撃波の発生位置にバンプ (Bump) を配置することで衝撃波分布が変形し、その結果として境界層との干渉 (SWBLI) の構造に変化が生じることが示されている。このような衝撃波制御を目的としたバンプは Shock Control Bump (SCB) と呼ばれる。K. Mazaheri et al. や E. Jinks et al. は、代表的な 2 次元翼型 RAE2822 を対象に、揚抗比や圧力の最小化問題を解くことで SCB の最適設計を行い、SWBLI の抑制効果を数値的に示している。しかし、これらの研究では SCB 形状を数個の媒介変数で表現するパラメトリック最適化に留まっており、SWBLI の物理現象を十分に反映した設計とは言い難い。

一方、著者は全ての自由度を用いる随伴解析を基礎とした形状最適化手法を採用し、対象とする物理現象に忠実な最適設計を目指している。しかし、圧縮性流体の数値解析では SWBLI を解像する必要があるため、膨大な計算コストが問題となる。例えば、空間刻み  $\Delta x$  は最低でも  $10^{-3}$ 、時間刻み  $\Delta t$  は概ね  $10^{-6}$  程度に達する。さらに形状最適化では数十回の順問題を解く必要があるため、この計算負荷は実用的な最適設計の実現における重大な障壁となっていた。

### 3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

このような最適化問題を扱う際には、最適形状が得られた段階で高精度計算を実行すれば十分であるため、最適化のプロセスではむしろ高効率な数値シミュレーションが求められる。本研究では、この観点に基づき、圧縮性流体場における形状最適化に向けた新規ソルバーの基盤構築について議論する。

圧縮性流体の物理的特性を数値的に扱う際には、物理量が不連続に変化する現象をいかに精度良く表現するかが重要な課題となる。この問題に対し、これまで Gudunov 法を原型とし

た近似リーマン解法や、高次多項式による空間再構築法を中心に多くの研究が行われてきた。これらの手法は、数値振動を抑制するために制限関数や人工粘性を導入するという共通点を持ち、MUSCL、WENO、AUSM などの代表的なスキームが提案されている。しかし、制限関数や人工粘性は数値拡散の原因となり、衝撃波や接触不連続面の界面を鈍らせるという欠点を有する。こうした数値的課題を克服するため、F. Xiao et al. は  $\tanh$  関数を用いて不連続な密度分布を滑らかに近似することで、数値拡散を抑制する THINC 法を提案した。また近年では、人工粘性を用いることなく運動エネルギーとエントロピーを高精度に保存する高忠実・非散逸スキームとして KEEP 法が提案されており、MHD 乱流や燃焼乱流の数値シミュレーションに応用されている。

これらの先行研究で用いられてきた数値計算スキームでは、時間刻み  $\Delta t$  を計算領域全体で一定に保つ必要がある。このため、計算コストを削減するためには、空間方向の計算負荷をいかに抑制するかが重要な鍵となる。そこで本研究では、SWBLI を十分に解像できる高い計算精度を維持しつつ、形状最適化問題を現実的な計算時間で実行可能とする低コストな数値計算手法の構築を目指す。そして、この手法を圧縮性 Navier-Stokes 方程式へ適用することで、SWBLI に対する形状最適化の実現を図る。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし

### 5. 今年度の研究成果の詳細

#### 5.1. 数理モデルの構築

**圧縮性 Euler 方程式の数理モデル:** 以下に記述している式(1)は、非保存系で構成された圧縮性 Euler 方程式であり、未知変数は密度  $\rho$ ・速度  $\mathbf{u}$ ・圧力  $p$  である。

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1a)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \nabla p = 0, \quad (1b)$$

$$\frac{Dp}{Dt} + \gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1c)$$

ここで、 $\gamma$ は比熱比であり、1.4 が一般的に用いられる。しかし、式 (1) は非保存系で記述されているため、 $\rho, \mathbf{u}, p$ を数値的に厳密に保存することが困難である。その結果、衝撃波近傍において数値振動やオーバーシュート/アンダーシュートが発生し、物理的に妥当な数値解が得られないことが指摘されている。

このため、圧縮性流体を扱う研究分野では、保存系の圧縮性 Euler 方程式 (2) を用いることが一般的である。有限体積法や不連続ガラーキン法、あるいは KEEP スキームなどを用いて離散化することで、高精度な数値フラックス評価が可能となることは、多くの数値計算結果によって裏付けられている。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = 0, \quad (2b)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \{(e + p)\mathbf{u}\} = 0, \quad (2c)$$

$$e = \frac{p}{\gamma - 1} - \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2. \quad (2d)$$

ところで、保存系の未知変数である  $\rho, \rho \mathbf{u}, e$  は、 $\rho, \mathbf{u}, p$  によって構成されていることから、もし  $\rho, \mathbf{u}, p$  を数値的に保存できる非保存系圧縮性 Euler 方程式を解くことが可能であれば、これらの保存量もまた正しく保存されるはずである。しかし前述のように、従来の非保存系圧縮性 Euler 方程式では、物理的に妥当な数値解を得ることが極めて困難であるとされてきた。

**Logarithm Conformation Representation (LCR)**: このような圧縮性流体場の数値計算に関する大きな潮流の中で、本研究では、密度および圧力に対して対数変換 (Logarithm Conformation Representation: LCR) を施すことで、新たな非保存系圧縮性 Euler 方程式 (3) を導出した。

$$\rho \frac{Da_\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3a)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + p \nabla a_p = 0, \quad (3b)$$

$$p \frac{Da_p}{Dt} + \gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3c)$$

$$a_\rho = \log \rho, a_p = \log p \quad (3d)$$

LCR は、これまでレオロジー分野における代表的な研究対象である非ニュートン流体の数値計算に対して積極的に用いられてきた。しかし、申請者が知る限り、航空工学分野における圧縮性流体解析において LCR が活用された例は存在しない。そのため、新規に導出した非保存系圧縮性 Euler 方程式に関する物理的性質は、これまでほとんど解析されてこなかった。このような状況を踏まえ、著者は新規に導出した非保存系圧縮性 Euler 方程式 (3) のリーマン不変量が、従来の非保存系圧縮性 Euler 方程式 (1) と一致することを示している。例えば、簡易のため 1 次元の場合を考え、速度を  $u$ 、音速を  $c = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}}$  とすると位相速度は  $\lambda_1 = u, \lambda_2 = u + c, \lambda_3 = u - c$  となり、適合方程式は、

$$D_1 a_\rho - \frac{1}{\gamma} D_1 a_p = 0, \quad (4a)$$

$$D_2 u + \frac{c}{\gamma} D_2 a_p = 0, \quad (4b)$$

$$D_3 u - \frac{c}{\gamma} D_3 a_p = 0, \quad (4c)$$

$$D_i = \frac{\partial}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4d)$$

となる。適合方程式(4)の未知変数を、 $\rho, \mathbf{u}, p$ に変換すると式(5)が得られ、これは式(1)の適合方程式と同一であり、結果的にリーマン不変量も一致する。これは、式 (3) が圧縮性 Euler 方程式の本質的な性質を正しく保持していることを示しており、LCR に基づく非保存系表現が物理的整合性を損なわないことを意味する。

$$D_1 \rho - \frac{1}{c^2} D_1 p = 0, \quad (5a)$$

$$D_2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho c} D_2 p = 0, \quad (5b)$$

$$D_3 \mathbf{u} - \frac{1}{\rho c} D_3 p = 0, \quad (5c)$$

また、本手法では未知変数として対数変換された  $a_\rho$  および  $a_p$  を直接計算するため、衝撃波近傍における数値フラックスの評価精度が向上することが期待される。対数変換により密度・圧力の急激な変化が相対的に緩和されるため、不連続面付近での数値安定性が高まり、従来の非保存系表現で問題となっていたオーバーシュートやアンダーシュートの抑制にも寄与すると考えられる。数値計算終了後には、 $\rho = e^{a_\rho}, p = e^{a_p}$  として密度および圧力を評価する。このとき、指数関数の性質から  $\rho > 0, p > 0$  が常に保証される。したがって、従来の非保存系表現で問題となり得た密度・圧力の非物理的な負値の発生を原理的に回避できる。

**圧縮性 Navier-Stokes 方程式の数理モデル:** 圧縮性 Euler 方程式に粘性を考慮することで、圧縮性 Navier-Stokes 方程式が得られる。詳細な導出を割愛するが、LCR を導入することで新規に非保存系圧縮性 Navier-Stokes 方程式の導出が可能である。

$$\rho \frac{Da_\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6a)$$

$$p \frac{D\mathbf{u}(x)}{Dt} + \nabla p = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma})^T, \quad (6b)$$

$$\begin{aligned} & p \frac{Da_p}{Dt} + \gamma p (\nabla \cdot \mathbf{u}) \\ & = (\gamma - 1) \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^T \\ & + \frac{\gamma \mu}{RePr} \nabla \cdot \{T \nabla (a_p - a_\rho)\}, \end{aligned} \quad (6c)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\mu}{Re} \left( \nabla \mathbf{u}^T + (\nabla \mathbf{u}^T)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right), \quad (6d)$$

$$T = \frac{p}{\rho} = e^{(a_p - a_\rho)}. \quad (6e)$$

ここで、 $\mu, Re, Pr, T$  は粘性率、レイノルズ数、プラントル数、温度である。粘性率  $\mu$  は一般にサザーランドの公式を用いて評価するが、本論文では一定値を取ることを仮定した計算しか行わない。また、プラントル数  $Pr$  は概ね 0.72 程度の値が用いられる。

## 5.2. 計算モデルの構築

LCR に基づく非保存系表現には多くの利点があるものの、本質的には非保存系であることに変わりはない。そのため、数値計算スキームを構築する際には、エネルギーを可能な限り正確に保存できる手法を選択することが不可欠である。非保存系方程式では、わずかな数値誤差がエネルギーの非物理的な増減として顕在化しやすく、これが計算の安定性や物理的妥当性に直接影響を及ぼすためである。

**Anisotropic Adaptive Mesh Refinement (AMR):** この課題に対し、本研究では、応用数学者の P. J. Frey and F. Alauzet や A. Loseille and F. Alauzet によって提案された Anisotropic Adaptive Mesh Refinement (AMR) ソルバーを活用する。この手法は、有限要素法における誤差指標として 2 回微分項 (Hessian) を最小化するようにメッシュを最適化するアルゴリズムであり、物理量の勾配が急変する領域を効率的に解像できる点に特徴がある。具体的には、メッシュの“エッジ方向”を流線 (streamline) に沿わせ、さらに“エッジ長”を応力集中領域で短く取ることで、物理量の 1 回微分を高精度に近似することが可能となる。これにより、

異方性を考慮したメッシュ生成が実現し、必要最小限の計算コストで高精度な数値解を得ることができる。

しかしながら、Hessian を構成する際にどの関数を用いるかについては一定の任意性が存在する。そのため、数理モデルの数学的性質、対象とする物理現象、さらには工学的応用を十分に考慮した上で適切に選択する必要がある。

**Semi-Lagrange Method (SLM)**: さらに、本研究では AMR を採用することを前提として、物質微分項の離散化に特性曲線法 (Semi-Lagrange Method: SLM) を用いる。SLM は流線方向に沿って物理量を追跡する手法であり、メッシュのエッジ方向が streamline に一致する Anisotropic AMR との相性が極めて良い。これにより、物質微分項を高精度かつ安定に評価することが可能となる。

**効率性の評価方法について**: 本研究では LCR・AMR・SLM の三手法を統合した計算スキームを構築しているが、いずれか一手法でも欠いた場合には計算が発散する、あるいは物理的に妥当でない解が得られることを確認している。このため、三手法の寄与を個別に切り分けて効率性を比較することはできず、手法単体の性能評価は困難である。また、航空工学で用いられる他の圧縮性流体ソルバーとの計算コスト比較を試みることも可能だが、計算効率は CPU・メモリ・ストレージ・マザーボードといったハードウェア構成に大きく依存するため、統一的な比較基準を設定することは容易ではない。したがって、効率性をどの指標で評価すべきかは、本研究の初期段階からの重要な検討課題であった。

本研究で用いる数値計算スキームでは、初期メッシュを正三角形に近い均質な構造で生成し、各時刻において AMR を適用することで、必要最小限の格子点数で計算を進められるように設計している。この AMR による格子点数削減は計算負荷の低減に直結するため、本研究では 初期メッシュからの格子点数削減率を効率性の主要な評価指標

として採用した。さらに、初期メッシュの最小エッジサイズを AMR 時の最小エッジサイズと一致させていることから、計算精度は維持されていると考えられる。むしろ、AMR によるエッジ方向の最適化により局所的な解像度が向上し、精度が改善される可能性もある。

加えて、AMR ソルバーは比較的軽量であり、短時間かつ小メモリで動作するため、計算機アーキテクチャの影響をほとんど受けない。したがって、格子点数削減量は異なる計算環境間でも比較可能な ハードウェア非依存の客観的指標 として有用である。

**圧縮性 Euler 方程式の計算モデル**: 新規に導出した非保存系圧縮性 Euler 方程式 (3) を時間方向に離散化すると次のような離散化式が得られる。

$$\rho^{n-1} \frac{D a_p^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \rho^{n-1} (\nabla \cdot \mathbf{u}^n) = 0, \quad (7a)$$

$$\rho^{n-1} \frac{D \mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \nabla p^{n-\frac{1}{2}} = 0, \quad (7b)$$

$$p^{n-1} \frac{D a_p^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \gamma p^{n-1} (\nabla \cdot \mathbf{u}^n) = 0. \quad (7c)$$

$$\begin{aligned} & \rho^{n-1} \frac{D \mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} \\ &= \rho^n \frac{D \mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \{a_p^n - a_p^{n-1}\} p^n \nabla a_p^n \end{aligned} \quad (7d)$$

その際、時間刻みは  $\Delta t = q \frac{\Delta x}{U+c}$  であり、 $q$  は CFL 条件におけるクーラン数、 $\Delta x$  は Anisotropic AMR における最小のエッジサイズ、 $U$  と  $c$  は衝撃波が発生した際に生じる最大の速度と音速である。また、 $\nabla p^{n-\frac{1}{2}}$  は時間ステップが  $n - \frac{1}{2}$  であると共に、空間もまた  $n - \frac{1}{2}$  の座標系となる。そこで、空間方向に座標変換を、時間方向にテイラー展開を適切に施すことで、

$$\nabla p^{n-\frac{1}{2}} = p^n \nabla a_p^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \{ (p^n \nabla a_p^n) \mathbf{u}^{n,T} \} \quad (7e)$$

が得られる。この半時間ステップの導入は、形式的にはスキームの再配置に過ぎないように見えるが、実際には時間精度と空間安定性を同時に改善する効果を持つ。興味深いことに、この構造は計算工学で自由表面等の数値シミュレーションを安定に行う際に Shock Capturing として用いられる PSPG 法と一致しており、本手法が持つ安定化効果の理論的裏付けにもなっている。

**圧縮性 Navier-Stokes 方程式の計算モデル:**式(7)と同様に、新規に導出した圧縮性 Navier-Stokes 方程式(6)に対しても時間方向に離散化すると次のようになる。

$$\rho^{n-1} \frac{Da_p^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \rho^{n-1}(\nabla \cdot \mathbf{u}^n) = 0, \quad (8a)$$

$$\rho^{n-1} \frac{D\mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \nabla p^{n-\frac{1}{2}} = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma})^{n-\frac{1}{2},T}, \quad (8b)$$

$$\begin{aligned} p^{n-1} \frac{Da_p^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} + \gamma p^{n-1}(\nabla \cdot \mathbf{u}^n) \\ = (\gamma - 1)\{\boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^T\}^{n-\frac{1}{2}} \\ + \frac{\gamma\mu}{RePr} \nabla \cdot \{T\nabla(a_p - a_\rho)\}^{n-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (8c)$$

$$\begin{aligned} \rho^{n-1} \frac{D\mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} \\ = \rho^n \frac{D\mathbf{u}^{n-1}(\mathbf{x})}{Dt} \\ - \frac{1}{2}\{a_p^n - a_p^{n-1}\}\{\rho^{n-1}\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n-1} \\ - p^n \nabla a_p^n + (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n)^T\} \end{aligned} \quad (8d)$$

その際、詳細な導出は紙面が限られているため割愛するが、

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma})^{n-\frac{1}{2},T} \\ = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n)^T - \frac{1}{2}\Delta t \nabla \cdot \{(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n)^T \mathbf{u}^{n,T}\} \\ \{\boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^T\}^{n-\frac{1}{2}} \\ = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^{n,T} \end{aligned} \quad (8e)$$

$$- \frac{1}{2}\Delta t \nabla \cdot [\nabla \cdot \{\boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^{n,T}\} \mathbf{u}^{n,T}] \quad (8f)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \{T\nabla(a_p - a_\rho)\}^{n-\frac{1}{2}} \\ = \nabla \cdot \{T^n \nabla(a_p^n - a_\rho^n)\} \\ - \frac{1}{2}\Delta t \nabla \cdot [\nabla \cdot \{T^n \nabla(a_p^n - a_\rho^n)\} \mathbf{u}^{n,T}] \end{aligned} \quad (8g)$$

となり、ここでも、 $\nabla p^{n-\frac{1}{2}}$ と同様に空間方向に座標変換を、時間方向にテイラー展開を適切に施しており、やはり時間方向の精度向上と空間方向の数値安定性の確保に寄与している。

### 5.3. FreeFEM に基づく CFD プラットフォーム

本研究では、LCR・AMR・SLM を統合した数値計算手法を CFD 解析プラットフォームに直接組み込んでいる。この統合型の解析基盤は、従来の「数理モデルにメッシュを合わせる」という考え方を発展させ、メッシュそのものを数理モデルの一部として活用するという新しい視点に立脚している。これを実現するため、拡張性と透明性に優れた FreeFEM を解析プラットフォームとして採用した。

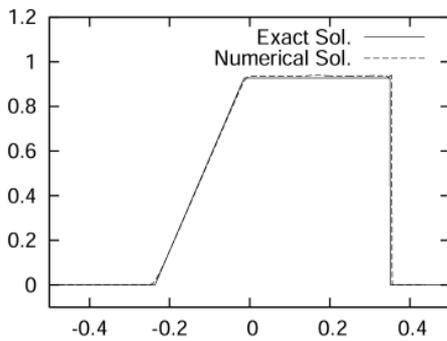
FreeFEM は弱形式に基づくコーディングを可能とし、柔軟な関数空間の構成能力および式展開機能を備えているため、LCR を考慮した数理モデル側の変分定式化と AMR・SLM の適用を構造的に連携させることができる。さらに、FreeFEM には並列計算ソルバーが実装されており、大型計算機を用いた大規模並列計算にも対応可能である。

### 5.4. 計算結果：圧縮性 Euler 方程式

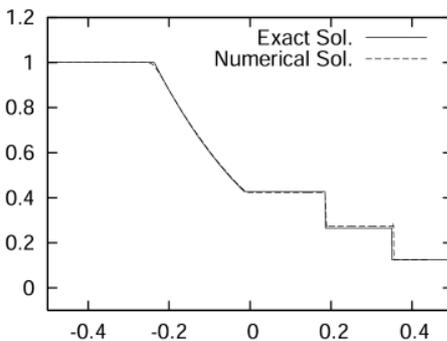
**1次元 Sod Shock Tube Problem:**圧縮性 Euler 方程式における代表的なテスト問題である 1次元 Sod Shock Tube Problem に対して適用した。1次元 Sod Shock Tube Problem は、厳密解が知られており、圧縮性流体ソルバーを新規に開発した際には、必ずと言って良いほど検証の対象となる。

1次元 Sod Shock Tube Problem の数値計算は比較的小規模な計算量で済むため、直接法ソルバー

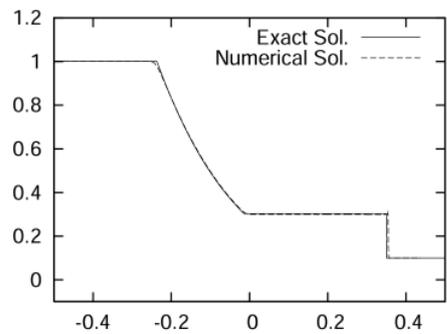
である UMFPACK を使い、シングルスレッド環境で計算を実施した。まず初めに、クーラン数  $q = 0.5$ 、最小のエッジサイズ  $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$ 、 $a_\rho, u, a_p$  の基底関数を P2-P2-P2 とした。また、未知変数  $(a_\rho, u, a_p)$ 、リーマン不変量  $(u \pm \frac{2}{\gamma-1}c, \frac{p}{\rho^\gamma})$ 、エントロピー  $(a_p - \gamma a_\rho)$  を用いて AMR を行い、数値計算を行った。Fig. 1 は、時刻 0.2 における密度、速度、圧力の厳密解と数値解を示しており、両者が良く一致していることが確認できる。



(a) 密度.



(b) 速度.

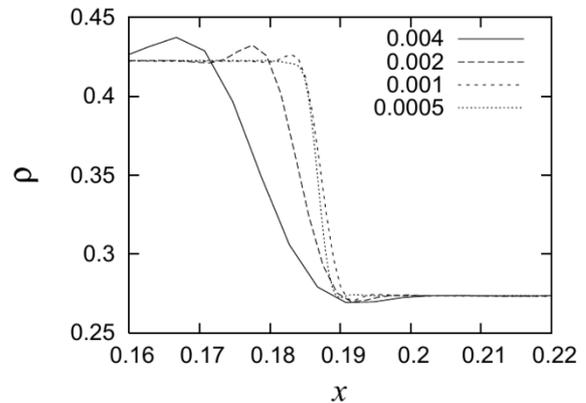


(c) 圧力.

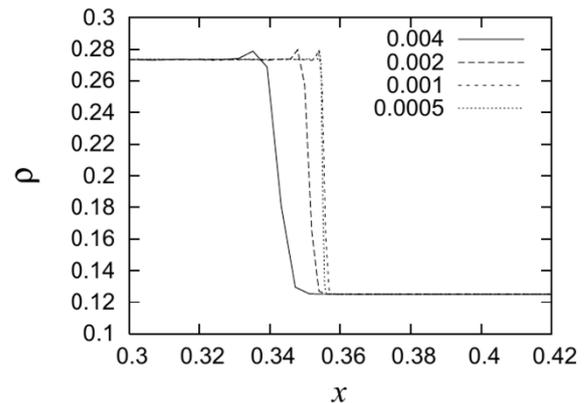
Fig. 1: 1次元 Sod Shock Tube Problem における密度・速度・圧力分布.

次に、Grid convergence を確認するために 4 ケースの  $\Delta x$  を計算し、接触不連続面と衝撃波近傍の密度分布を Fig. 2 に図示した。Fig. 2(a) から、 $\Delta x$  を小さくするに伴い接触不連続面ではオーバーシュート/アンダーシュートが抑制されていることが分かる。一方、Fig. 2(b) から、衝撃波近傍ではオーバーシュートが少々、残るもののアンダーシュートについては抑制できていることが分かる。

次に、 $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$  を用いた際の数値解と厳密解との比較を Fig. 3 に図示した。その結果、厳密解とは少々異なっているが、これは対象としている支配方程式が非保存系でことに起因していると考えられる。

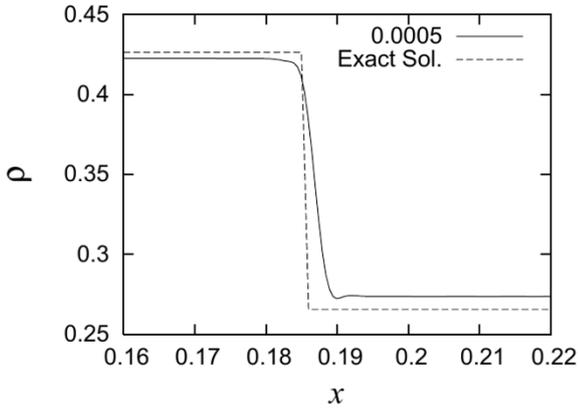


(a) 接触不連続面近傍における密度分布.

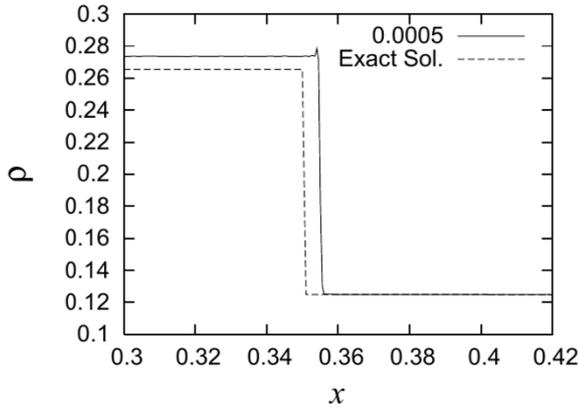


(b) 衝撃波近傍における密度分布.

Fig. 2: 1次元 Sod Shock Tube Problem において最小エッジサイズを変化させた際の密度分布.



(a) 接触不連続面近傍における密度分布.



(b) 衝撃波近傍における密度分布.

Fig. 3: 1次元 Sod Shock Tube Problemにおいて最小エッジサイズ $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$ を用いた際の厳密解との比較.

#### 5.4. エネルギー保存の検証

これまで、数値解と厳密解を比較し、主として接触不連続面および衝撃波における密度の挙動について検証してきた。次に、エネルギーが十分に保存されているかという観点から、数値解の妥当性を評価する。

Table 1は、 $\Delta x$ を減少させた際に得られる数値解について、時刻0および0.25における密度・速度・圧力・運動量・全エネルギー・エントロピーの各積分値に対する相対誤差を示している。圧力とエントロピーは5.31%と2.8720%に留まっているものの、その他については0.5%以下となっている。これらの値は、保存系の数値計算スキームと比較すると十分とはいえないが、一般にエネルギー保存が困難な非保存系であることを踏まえると、得られた結果は重要な意味を持つ。

Table 1:  $\Delta x$ を変化させた際の各種エネルギーの収束.

(a) 密度、速度、圧力.

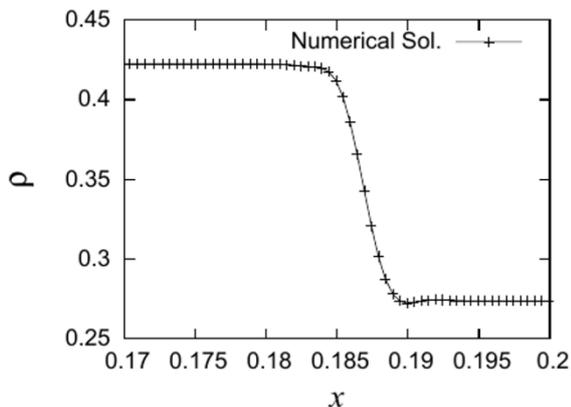
$\Delta x$	Density	Velocity	Pressure
$1 \times 10^{-2}$	0.3981%	0.4311%	5.05%
$2 \times 10^{-2}$	0.3496%	0.4421%	5.22%
$1 \times 10^{-3}$	0.3201%	0.4481%	5.30%
$5 \times 10^{-4}$	0.3024%	0.4477%	5.31%

(b) 運動量、全エネルギー、エントロピー.

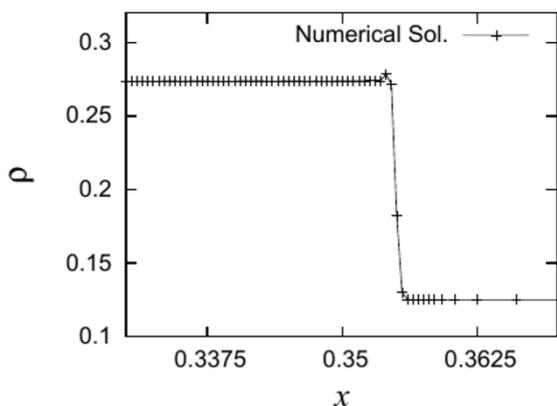
$\Delta x$	Momentum	Total Energy	Entropy
$1 \times 10^{-2}$	0.1767%	0.09310%	2.8024%
$2 \times 10^{-2}$	0.1804%	0.09308%	2.8561%
$1 \times 10^{-3}$	0.1830%	0.09309%	2.8799%
$5 \times 10^{-4}$	0.1825%	0.08872%	2.8720%

#### 5.5. AMRの検証

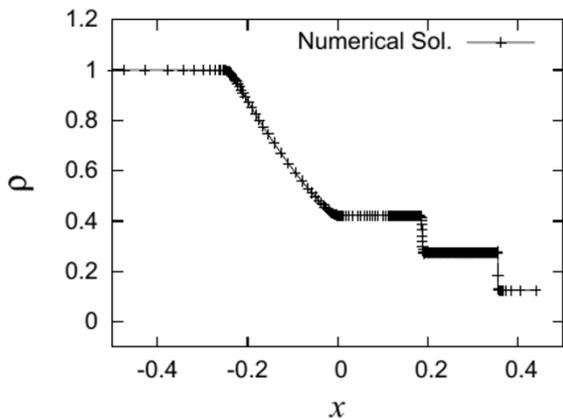
最後に、AMRの検証を行う。これまでの数値計算結果は、未知変数 $(a_\rho, \mathbf{u}, a_p)$ 、リーマン不変量 $(\mathbf{u} \pm \frac{2}{\gamma-1} c, \frac{p}{\rho^\gamma})$ 、エントロピー $(a_p - \gamma a_\rho)$ を用いた結果であり、格子点の位置をFig. 4に図示している。接触不連続面や衝撃波の近傍といった、数値フラックスを高精度に評価すべき領域に格子点が集中している一方、それ以外の領域では格子点がまばらに点在している。初期のメッシュ配置において格子点数は12006であったが、をFig. 4に図示した時刻0.2では9608となり15%の削減が達成された。



(a) 接触不連続面近傍における密度分布.



(b) 衝撃波近傍における密度分布.



(c) 解析領域全体における密度分布.

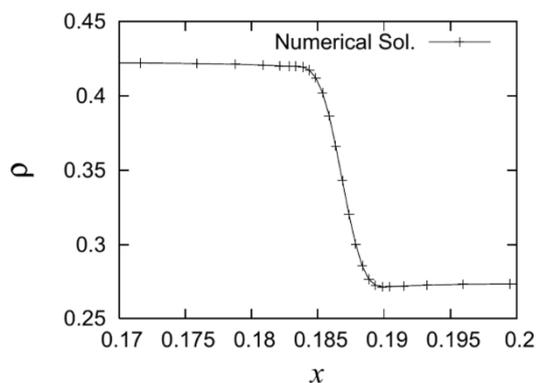
Fig. 4: 1次元 Sod Shock Tube Problem における格子点の位置.

さらに、別の組み合わせとして 2 ケースを追加で計算し、格子点数および密度の相対誤差を Table 2 に示す。密度の相対誤差については 0.3% 程度となっており、ケース間で大きな差異は見られなかったものの、格子点数に関しては  $\rho, u, p$  を指標としたメッシュ細分化の方が、最大で 90% の削減を達成した。Fig. 5 に  $\rho, u, p$  を用いて AMR を行った際

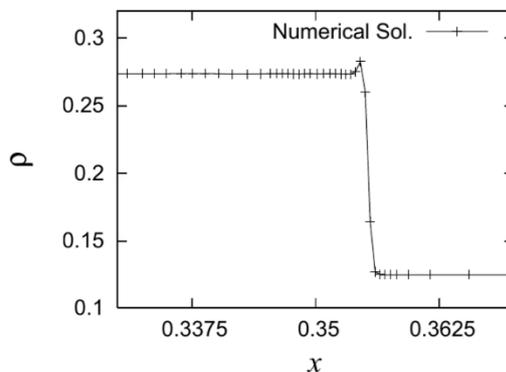
の格子点の位置を図示する。

Table 2: AMR における関数の候補と格子点と密度の相対誤差.

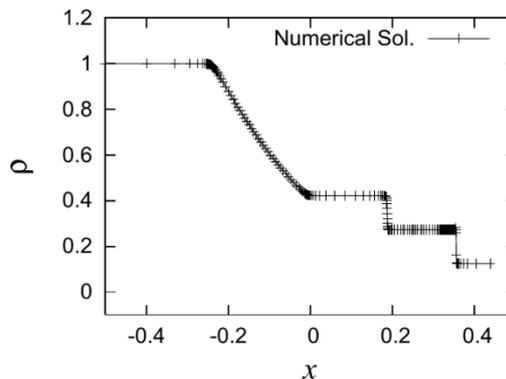
関数候補	格子点数の相対誤差 (格子点数)	密度の 相対誤差
$a_\rho, u, a_p$	75.6% (10785)	0.302%
$\rho, u, p$	11.2% (1343)	0.305%



(a) 接触不連続面近傍における密度分布.



(b) 衝撃波近傍における密度分布.



(c) 解析領域全体における密度分布.

Fig. 5:  $\rho, u, p$  を用いて AMR を行った際の格子点の位置.

### 5.6. 計算結果：圧縮性 Navier-Stokes 方程式

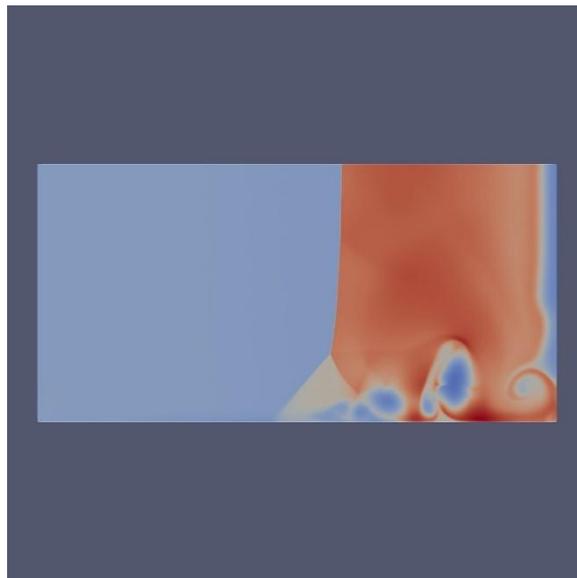
**2次元 Viscous Sod Shock Tube Problem:** 圧縮性 Navier-Stokes 方程式における代表的なテスト問題である 2次元 Viscous Sod Shock Tube Problem の計算を行った。数値計算には、直接法並列ソルバーである MUMPS を用いた。

ところで、1次元 Sod Shock Tube Problem において、クーラン数を  $q = 0.5$ 、最小のエッジサイズを  $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$ 、 $a_\rho, u, a_p$  の基底関数を P2-P2-P2、 $\rho, u, p$  を指標とした AMR を実施した。その結果、良好な解が得られたため、2次元 Viscous Sod Shock Tube Problem においても同一のパラメータ設定および計算条件を適用し、レイノルズ数  $Re=200$  として時刻  $t = 1$  まで計算を行った。

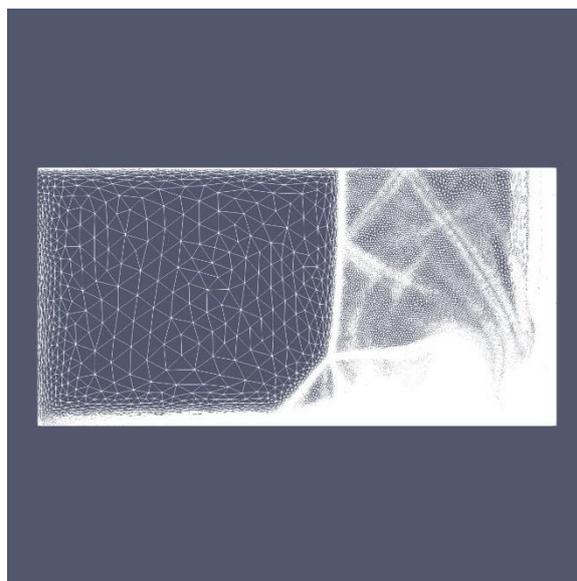
**計算資源:** 圧縮性 Navier-Stokes 方程式の数値計算は、大阪大学サイバーメディアセンター 2024 年度公募型利用制度・大規模 HPC 支援枠「Logarithm Conformation Representation による圧縮性流体方程式の導出と数値計算」、および JHPCN 公募型共同研究 2025 年度一般共同研究課題「Logarithm Conformation Representation による新規圧縮性流体ソルバーの開発」の支援を受けて実施した。計算には、大阪大学 D3 センターが所有するスーパーコンピュータ SQUID (Supercomputer for Quest to Unsolved Interdisciplinary Data science) の汎用 CPU ノード群を用い、大規模並列計算を行った。本研究で行った計算には、1 ノード、30 Core、130 GB memory、700 ノード時間を要している。

**計算結果の検証:** Fig. 6 は密度分布と有限要素メッシュを示しており、衝撃波や乱流が発生している領域において、エッジサイズの小さいメッシュが自動的に生成されている様子が確認できる。AMR を用いない場合、格子点数は約 200 万点であったが、AMR の導入により約 30 万点まで

削減することに成功している。Table 3 は底面における各座標の密度値について、先行研究と本研究との相対誤差を示している。 $x = 0.5930$  や  $x = 0.6123$  において相対誤差が 10% や 4.5% 程度とやや大きいものの、それ以外の座標では概ね 3% 以下に収まっている。これらの結果から、本研究の解は先行研究と良好に一致していることが確認できる。



(a) 密度分布.



(b) 有限要素メッシュ.

Fig. 6: 2次元 Viscous Sod Shock Tube Problem.

Table 3: 底面における各座標の密度値.

$x$	先行研究	本研究	相対誤差
0.3030	39.8418	39.7814	0.15%
0.4490	37.0662	37.6303	1.52%
0.5230	52.6465	52.582	0.12%
0.5730	42.4400	41.9085	1.25%
0.5930	40.5506	44.9328	10.80%
0.6123	47.3367	45.169	4.57%
0.6370	39.3203	38.6161	1.79%
0.6577	36.9558	37.1657	0.56%
0.6830	49.6513	48.8805	1.55%
0.7070	77.9810	80.1182	2.74%
0.7317	108.3916	106.891	1.38%
0.7543	92.5760	93.1554	0.62%
0.7790	64.5319	65.6407	1.71%
0.7957	59.4386	60.1414	1.18%
0.8183	95.3607	95.3013	0.06%
0.8617	117.6452	119.414	1.50%
0.9437	96.4287	96.9419	0.53%
0.9670	98.2689	99.293	1.04%
0.9883	81.8465	84.2205	2.90%
0.9943	82.7077	84.5995	2.28%

した。

次に、圧縮性 Navier–Stokes 方程式を対象として  $Re=200$  の条件下で 2 次元 Viscous Sod Shock Tube Problem の数値シミュレーションを実施した結果、先行研究と概ね一致する解が得られた。本計算には、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID を用いて大規模並列計算を行っている。

今後は、 $Re=500,750,1000$  といった、より高いレイノルズ数における圧縮性流体場の検証を進める予定である。これらの条件では乱流の発生がさらに顕著になることが予想されるため、計算効率を確保するための並列計算手法の高度化が不可欠となる。具体的には、PETSc を用いた領域分割法の導入も視野に入れ、どの並列計算スキームが最も効率的に計算を実行できるかについて検証を進めたい。また、圧縮性 Euler 方程式に電磁気効果を取り入れることで MHD 方程式を導出できるが、将来的にはこのような拡張系に対する数値計算スキームの構築にも取り組みたいと考えている。

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

本研究では、圧縮性流体場の形状最適化問題を念頭に、高精度よりも計算効率を重視した数値計算スキームの構築を行った。具体的には、密度および圧力に対する対数変換 Logarithm Conformation Representation (LCR)、異方性メッシュ生成を可能とする Anisotropic Adaptive Mesh Refinement (AMR)、さらに物質微分を数値的に近似する Semi-Lagrange Method (SLM) を FreeFEM 上で統合した。

まず、圧縮性 Euler 方程式を対象として 1 次元 Sod Shock Tube Problem を数値的に解き、得られた数値解が厳密解と良好に一致することを確認した。その際、AMR の導入により格子点数を約 90% 削減することに成功