

気象および水象に対する効率的な 数値シミュレーション法の開発



住友化学株式会社
生産安全基盤センター
島田 直樹

Development of an Efficient Numerical Simulation Method for Atmospheric and Hydrological Phenomena

Sumitomo Chemical Co., Ltd.
Production & Safety Fundamental Technology Center
Naoki SHIMADA

The following two numerical methods were developed in order to provide several computational methods that overcome the computing load issues of three-dimensional simulations based on fluid dynamics:

- (1) a method incorporating bent channel shapes in structured grids (improved cut-cell method)
- (2) a stable method for solving flows using a high aspect ratio grid

In the first method, we attempted to improve the cut-cell method for boundary layer computation near industrially important walls. The improvement demonstrated that the cavity flow and the flow around obstacles can be calculated accurately. In the second method, we confirmed that the same flow field can be calculated even when the aspect ratio of the computational grid is increased from 1 to 100, and we simulated the temperature and flow of a large-scale ocean area.

はじめに

住友化学株式会社ではサステナブル社会の実現に向けて大気環境保全、ならびに水環境保全の一層の推進に取り組んでいる。環境問題はSBT (Science Based Targets)¹⁾に基づいてさまざまなイノベーションを具体的に推進しなくてはならない。

シミュレーションは環境を評価する強力なツールとなり得る。最も精度が高いツールの一つに流体力学に基づいた三次元シミュレーション（以下、CFD：Computational Fluid Dynamics）があり、複雑な条件（地形、放出方法、多次元的な環境場など）を考慮しながら定量的に評価できる。一方で大きな課題となるのが計算機資源の問題である。CFDは三次元空間を計算格子または粒子（空間に分解するべき要素サイズ）に分割して離散化した偏微分方程式を解く手法が主流となっている。したがって計算負荷はその格子数または粒子数に強く依存する。工業装置規模の計算で $10^6 \sim 10^7$ オーダーを使用し、2020年時点での世界的な記録でも 10^{12} オーダーで推移している。もちろん現在も計算機は飛躍的進展を遂げており、今後も性能向上が期待できるが、環境規模（kmスケール）のシミュ

レーションを使い勝手良くするにはかなりの時間と費用が必要である。したがって、環境シミュレーション分野の多くでは市販CFDソフトは実用性が低いとみなされ、統計平均を施したモデルが使用される。例えば、TRACE²⁾、ALOHA³⁾、METI-LIS⁴⁾などのソフトウェアは乱流拡散に沿うように係数を調整した拡散モデルを採用しており、速く計算できるのでリスクスクリーニングとして使用されている。ただし、統計平均操作によって多次元的な地形や細かな入力情報が消失するので、常にモデル検証の議論が必要になる。

本稿の目的は、一般的な市販CFDソフトが持つ計算負荷の課題を克服するいくつかの計算手法を提供することにある。具体的には以下の二手法を紹介する。

- (1) 構造格子で曲がった流路形状を組み込む方法（改良カットセル法）
- (2) 高アスペクト比の格子を用いて流れを安定的に解く方法

これまでの流れのシミュレーション高速化

Richardson教授が1913年に数値計算の概念を提唱⁵⁾して以来、1世紀以上にわたってCFDはコンピュータ

シミュレーションにおける挑戦的課題の一つであり続けた。特に高速化と精度の追及は重要な要素であり、これを克服するための研究開発が現在も続けられている。まず、多くの流体は非圧縮性と近似して計算されるようになった。これは密度が圧力に依存しないとした近似である。非圧縮性近似はマッハ数 M が0.3以下の場合に許容できると教科書やハンドブック、ソフトウェアマニュアルに記載されている。新幹線などの高速鉄道もこの範囲に入り、多くのシミュレーションが非圧縮性近似の下で行われている。一方、なぜ値0.3が判断基準であるかはあまり明記されていない。ここでは梶島の講習⁶⁾内容を一部改訂して根拠を述べる。理想気体を仮定し、流速のない場と速度 v で流れている場に対し運動エネルギー保存則（ベルヌーイの式）と状態方程式から次式が成立する。

$$p_0 = p + \frac{1}{2} \rho v^2 \quad (1)$$

$$p_0 = \rho_0 RT \quad (2)$$

$$p = \rho RT \quad (3)$$

$$v = aM \quad (4)$$

ここで p_0 はよどみ点圧力、 p は流動時の圧力、 ρ は流動時の密度、 ρ_0 はよどみ点密度、 R は気体定数、 T は温度、 a は音速である。式(1)–(4)を整理し、室温の空気を仮定して $a \approx 340 \text{ m/s}$ 、 $R \approx 286.7 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$ 、 $T \approx 300 \text{ K}$ とおけば、

$$\frac{\rho_0}{\rho} = 1 + 0.672M^2 \quad (5)$$

を得る。この式から、 $M = 0.3$ のとき $\rho_0/\rho \approx 1.06$ を得る。すなわち $M = 0.3$ では最大の密度変化は約6%なので、密度一定の近似が許容できると考えている。ちなみに $M = 1$ では $\rho_0/\rho \approx 1.67$ なので密度一定は仮定し難い。化学プラントでは温度変化や化学反応によって密度が影響を受けることが多い。この場合、計算効率が良い非圧縮性近似の解法は使用できないのかという懸念が出る。しかしこれは過去の研究^{7), 8)}によって克服できている。詳細は拙著を参照されたい。

非圧縮性流体の基礎式に、以下のNavier-Stokes方程式がある。

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = -\nabla p + \nabla \tau \quad (6)$$

ここで v は速度ベクトル、 t は時間、 τ は応力テンソルである。上式は左辺が速度変化、右辺が考慮している力をあらわしており、連続体系における運動方程

式と解釈できる。この式から v に関する三次元場を求めれば良いが、解が存在し滑らかであるかは数学的に証明できていない。これは本式が偏微分方程式として双曲型と楕円型の混合した性質を併せ持つことに起因する。そこでCFDで数値的近似解を得るために、Helmholtz-Hodgeの直交分解定理⁹⁾を駆使する。すなわち、適切な直交射影演算子を見つけてベクトル場を分離して方程式を2段階で計算する。例えばフラクショナルステップ法¹⁰⁾、MAC法¹¹⁾、SMAC法¹²⁾、SIMPLE法¹³⁾などが開発されている。

カッターセル法の改良

CFD研究の黎明期（1960年代まで）は、規則正しい格子または粒子によって流れの運動を計算していた。規則正しく配列されている格子を構造格子と呼んでいる。その後、1978年にStegerらが座標変換に基づく変形格子計算を提案し、1980年代には非構造格子系の有限要素法や有限体積法が開発された。多くの工業装置は複雑な形状を持つため、幾何学的に対応できる非構造格子は汎用的方法として好んで採用された。現在でも多くの市販ソフト（ANSYS Fluent¹⁴⁾、Siemens Star-ccm+¹⁵⁾など）が非構造格子を使用している。ただし、非構造格子を不規則に配列すると、データ参照にともなう計算時間の増大や、空間精度に問題が出やすい。このため、21世紀に入ってキャッシュメモリー、メインメモリーが効率的に使用・参照でき、かつ空間精度を高めやすい方法として、構造格子を見直す動き¹⁶⁾がある。

Fig. 1に直交構造格子による境界表現法を分類する。(a)の方法は単純だが固体表面がなめらかに表現しきれない。(b)の方法によって固体・流体の占有体積割合を考慮すれば緩和できる。ただし壁による応力計算に工夫が必要な上、質量保存を保証しようとすると却ってアルゴリズムが複雑になる場合がある。その点、(c)のカッターセル法は保存性を保証でき、アルゴリズムを簡便化しやすい利点がある。そこで当社ではカッターセル法に着目している。カッターセル法のアイデア自体はClarkeら（1986）¹⁷⁾、Tucker and Pan（2000）¹⁸⁾、Ingramら（2003）¹⁹⁾などによって先駆的研究がなされている。

Fig. 2に既存のカッターセル法における分類を大別する。(a)は非構造格子と大差がなく、構造格子の良さが損なわれる。(b)や(c)の方法では境界の法線方向に仮想点を配し、境界条件を満足するように速度を計算する。これらの手法は境界形状に沿った流束制御の議論に重きを置いていて、壁摩擦の取り扱いはまだ克服できているとは言い難い。すなわち、工業的に重要な壁付近の境界層計算に課題が残っている。

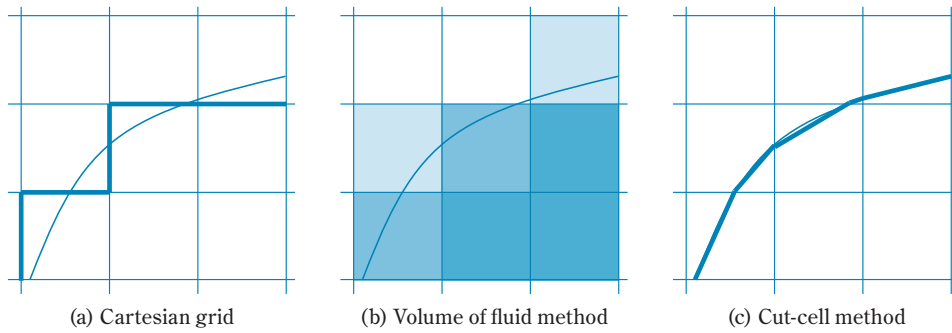


Fig. 1 Description of boundaries in the Cartesian grid²⁰⁾

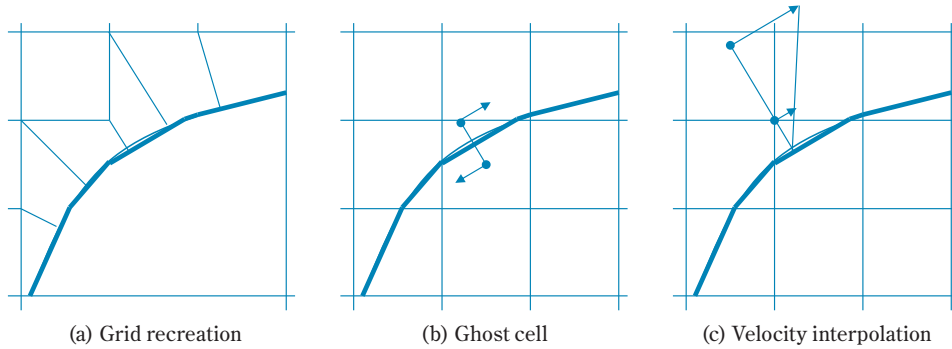


Fig. 2 Existing cut-cell methods²⁰⁾

そこでカットセル法の改良を試みた²⁰⁾。

式(6)を領域Ωにおける以下の積分形に置き換える。

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial v}{\partial t} dV + \oint_{\partial\Omega} (\rho v v + p - \tau) \cdot n dA = 0 \quad (7)$$

ここでVは領域体積、Aは領域を囲う面積である。カットセル法では式(7)の左辺第二項の取り扱いを議論する。ここでは、τの正確な数値的取り扱いに絞る。簡単のため二次元の場合を説明する。τは以下の四つの成分からなる。

$$\tau = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} \end{pmatrix} \quad (8)$$

τ_{yx}に壁の影響を考慮する例を考える。xおよびy方向にそれぞれi番目、j番目の格子を定義すると、**Fig. 3**

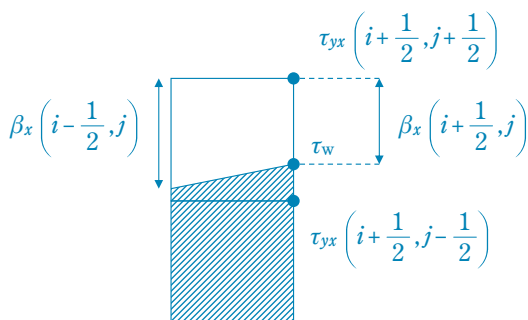


Fig. 3 τ at grid (i, j)²⁰⁾

の右上におけるτ_{yx}はτ_{yx}(i + 1/2, j + 1/2)と記述する。

Fig. 3では(i, j)にある矩形格子が壁面を含み、壁が(i, j - 1/2)に接しているとする。この格子右部における流体割合をβ_xとおく。幾何学的な関係から、以下の補間が与えられる。

$$\begin{aligned} \tau_{yx} \left(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2} \right) \\ = \frac{\tau_w / \cos\theta + \left(1 - \beta_x \left(i + \frac{1}{2}, j \right) \right) \tau_{yx} \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right)}{\beta_x \left(i + \frac{1}{2}, j \right)} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\theta = \left| \tan^{-1} \left(\beta_x \left(i - \frac{1}{2}, j \right) - \beta_x \left(i + \frac{1}{2}, j \right) \right) \right| \quad (10)$$

壁面上における摩擦τ_wを与えれば、式(9)–(10)を用いて格子内のτが求まり、式(8)が数値的に計算できる。τ_wのモデル化はCFDにおいて議論が活発化しているテーマの一つである。例えば、乱流モデルの一つであるLarge Eddy Simulation (LES) の計算は、精度向上のために壁近傍の空間分解能が必要となり、その分格子数が増加する。一方、τ_wを上手くモデルで与えれば計算負荷の増大を抑えられる。Balakumarら (2014)²¹⁾、Iyer and Malik (2016)²²⁾、Park and Moin (2016)²³⁾、Berger and Aftosmis (2018)²⁴⁾はLESと組み合わせたWall-modeled Large Eddy Simulation (WMLES) を実施し、この組み合わせが工学的に有効であることを

実証している。それでも Iyer and Malik (2016) の計算では、格子点数1100万点、並列コア数320で約11日の計算時間を要している。 τ_w のモデル開発にも進展が見られ、Claftら (2002)²⁵、Suga (2010)²⁶、Allmarasら (2012)²⁷ などの研究がある。

開発した改良カットセル法の計算例を示す：

(1) 二次元傾斜キャビティ流れ

Fig. 4に30°傾けた矩形空間に対し、一つの壁に速度を与えて内部の流れを計算した例を示す。これはGhiaら (1982)²⁸によるもので、流れの計算に関するベンチマークシミュレーションとして良く参照されている。壁の動きによって流体に摩擦力 τ_w が伝わり、空間内に循環流れが起こる。Fig. 4(b)に比較した結果を示している。横軸は壁の移動方向に沿った流速、縦軸は計算位置をあらわしている。壁面を30°傾斜させたにも関わらず、良好な一致を得ており、

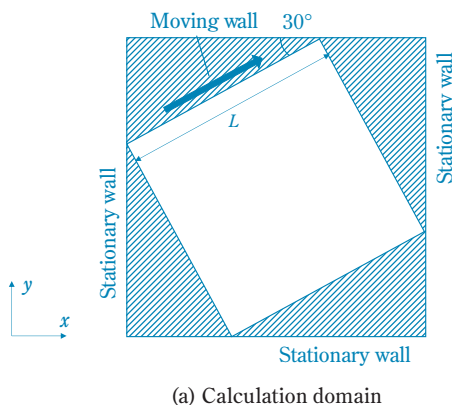


Fig. 4 Two-dimensional cavity flow with moving wall²⁰

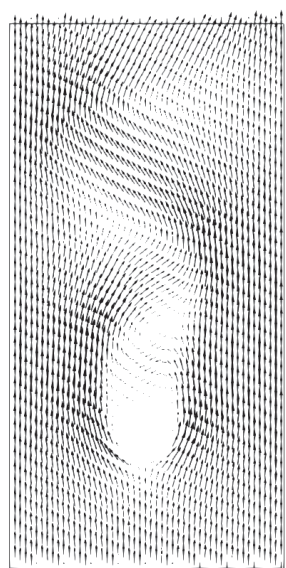


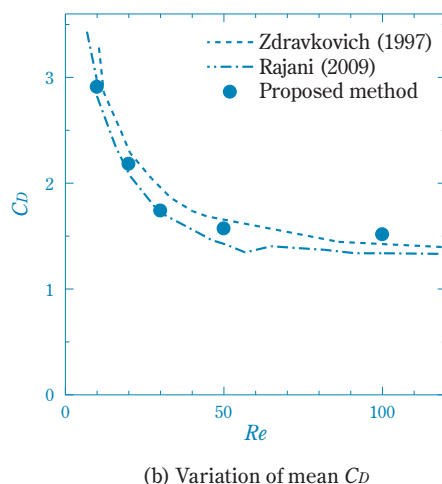
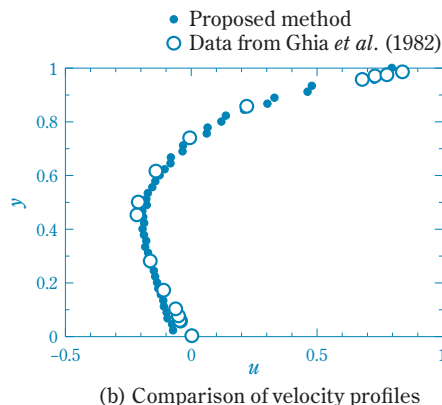
Fig. 5 Three-dimensional flow around a cylinder²⁰

提案した手法が有効であることを実証した。

(2) 物体周りの流れ

Fig. 5に三次元円柱周りの計算を示している。Fig. 5(a)は円柱レイノルズ数 (Re) が100における流速分布であり、円柱下流で発生するカルマン渦が発生していることが分かる。Fig. 5(b)は円柱に作用する抗力係数 (C_D) の時間平均値を比較している。Zdravkovich (1997)²⁹とRajani (2009)³⁰のデータと比較した結果、 Re 依存性について良好な一致を得た。

Fig. 6は突起物周りの乱流 (wall-mounted hump) で米国国家航空宇宙局 (National Aeronautics and Space Administration: NASA)³¹が主導している乱流モデルの比較検証問題である。本形状はGreenblattら (2006)³²によって実験も行われており、主流速度分布の時間平均値について良好な一致を得ている。



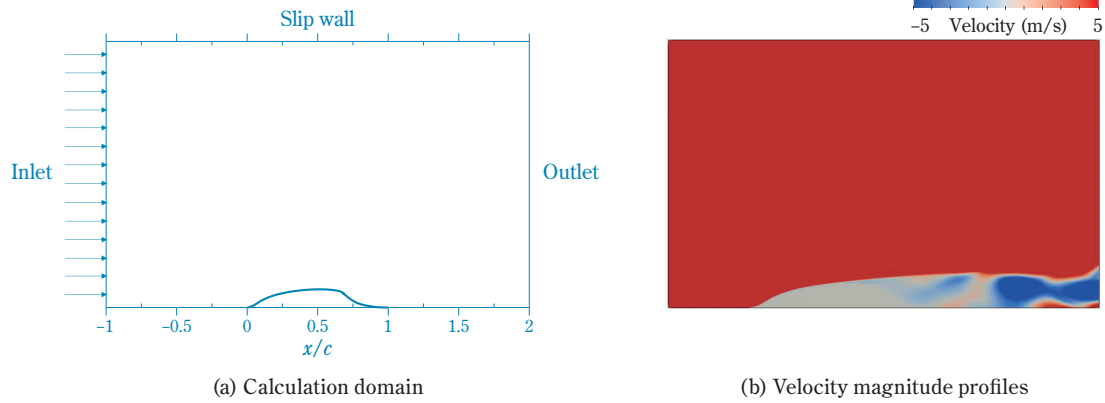


Fig. 6 Turbulent flow over wall-mounted hump²⁰⁾

高アスペクト比の格子を用いて流れを安定的に解く方法

河川、湖沼、海洋の環境を理解するためには、流れの調査が特に重要になる。1980年代から多くのシミュレーション (Blumberg and Mellor (1987)³³⁾、Mellor (1996)³⁴⁾、Hosoyamadaら (1997)³⁵⁾、Horiguchiら (2006)³⁶⁾など) が実施されている。実用性の観点から、CFDでは以下の二つの課題がある：

- (1) 多くの場合に鉛直長さスケールが水平長さよりも小さいこと (例えば1/1000から1/10のオーダー)
- (2) 自由表面の影響を強く受けること

特に (1) によって、多くのシミュレーションが静水圧近似や浅水流近似を採用している。つまり、水平方向の二次元領域を鉛直方向に何層か重ねるアプローチを取り、完全な三次元計算は十分実施されていなかった。これを克服するためには、格子アスペクト比が高い条件でNavier-Stokes式(6)を数値的に扱う手法を再考する必要がある。そこで、直交分解定理から見直しを図った。数値計算で使用する格子とは、場に対して分解可能な空間幅を意味している。すなわち高い格子アスペクト比とは、座標軸に対して捕捉可能な幅が異なることと言い換えられる。そこで、ベクトル場を以下のように分解する。

$$v = \bar{v} + v' \tag{11}$$

ここで $\bar{\cdot}$ は長いサイズ、 \cdot' は短いサイズをそれぞれあらわす。Helmholtz-Hodgeの直交分解定理のイメージをFig. 7に示す。ある時刻 t から時間 Δt だけ経過した速度場 $v(t + \Delta t)$ を求める場合、直交分解定理によって一度予測子 \bar{v} を経由する。 \bar{v} を求めるための演算子(射影演算子)にはさまざまなものが提案されている。(b)はサイズによって射影させる次元が一つ上がっている。すなわち、長いサイズと短いサイズに応じて射影演算子をさらに分解している。分解させた式の詳細は拙著^{37), 38)}を参照されたい。

類似した数値解法に、マルチグリッド法 (Hackbusch, 1985)³⁹⁾によるポアソン方程式の計算法がある。ただし既存の方法の多くが座標成分を考慮していない。開発した手法はアスペクト比を1から100まで増加させても同じ流れ場が計算可能なことを確認している。

開発した手法による計算例をFig. 8に示す。入力値として、日本海洋データセンター⁴⁰⁾が提供する水深データおよび観測データを使用した。比較のためHayashiら (2007)⁴¹⁾の計算データを併記する。湾入口における潮流の加速傾向について定性的に一致を得ている。本計算領域は $88.5 \times 96 \times 0.16$ kmである。つまり、水平方向が鉛直方向の600倍ある。鉛直方向

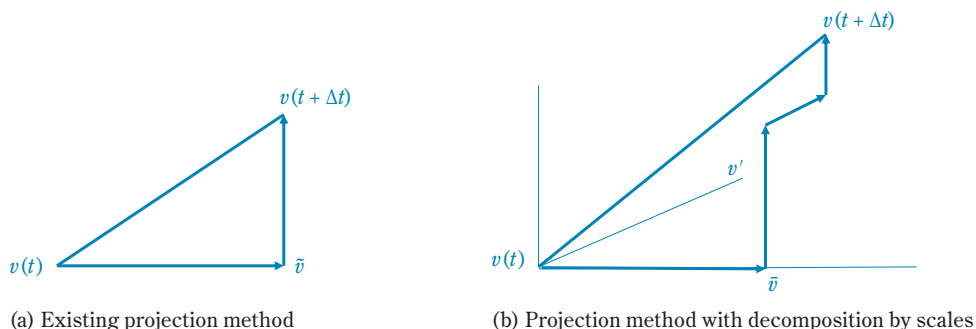


Fig. 7 Conceptual images of projection methods

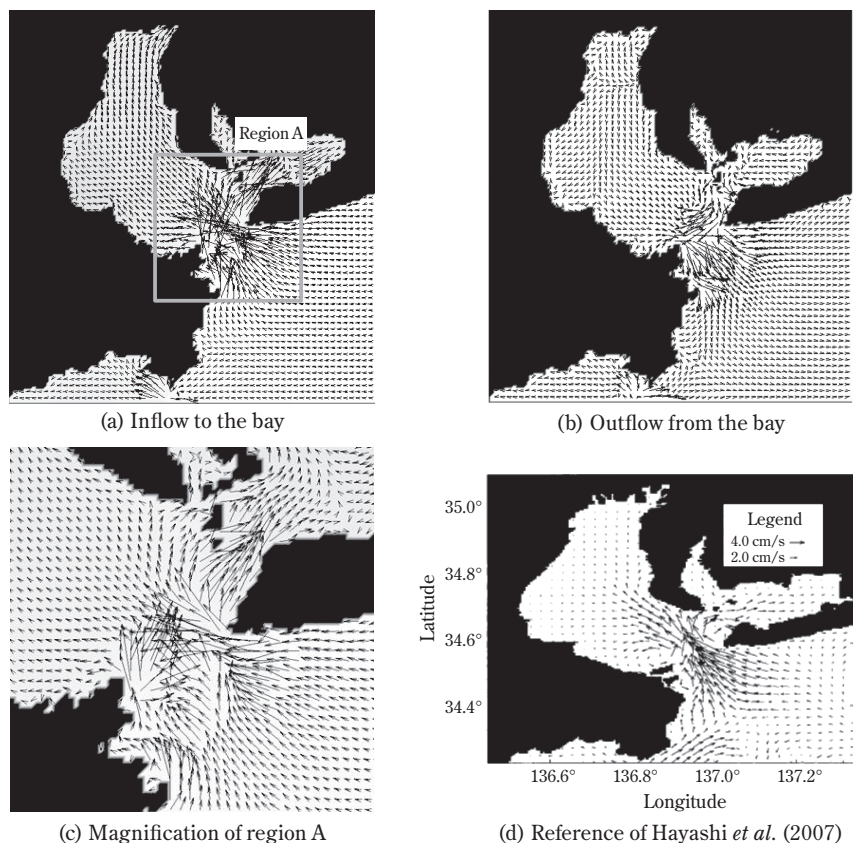


Fig. 8 Comparison of flow profiles³⁸⁾

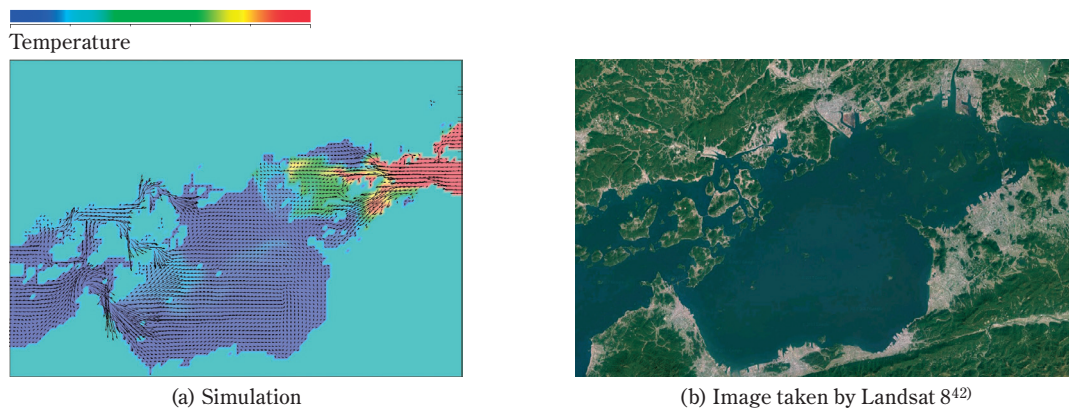


Fig. 9 Flow and temperature in Seto Inland Sea

に分解しようとして計算格子を細かく取ると、既存の三次元CFDでは計算格子数が 10^{10} オーダーになって負荷が高くなる。本計算では水平方向に500 m、鉛直方向に5 mの格子を使い、高アスペクト比に強い本手法を使って実現している。なお、計算格子数は997,500であり、70時間の過渡現象を計算するために使用したPC (CPU : Intel Xeon E2-2687 W, 3.4 GHz, Memory : 32 GB) 時間は約48時間であった。

最後に愛媛工場が面している瀬戸内海域の温度と流れのシミュレーション例をFig. 9に示す。衛星写真(国土地理院⁴²⁾)から分かる通り、瀬戸内海域は多く

の島が点在し、潮の満ち引きも大きいため複雑で激しい潮流が発生することが知られている。これを大規模に計算するために前述の手法を利用している。

おわりに

2021年までに、CPU性能に依存させていたコンピューティングから、CPUとGPUを協調させたヘテロジニアスコンピューティングへと促し、計算効率をさらに向上させる動きがある^{43), 44)}。このようにハードウェアからソフトウェアまで計算を加速させる技術

開発は活発化している。それでも流れのシミュレーションは21世紀の挑戦的な課題である。

また、梶島 (2014)⁴⁵⁾やMenter (2020)⁴⁶⁾が指摘しているように、CFDのみで新技術を開拓することは現実的ではない。今後はデータ科学や数理統計学によって実現象とシミュレーションを結びつける工夫が必要である。そのためにもCFDの高速化はますます重要になる。本稿をはじめとする取り組みが克服の一助になれば幸いである。

引用文献

- 1) 環境省, “SBT概要資料”, https://www.env.go.jp/earth/ondanka/supply_chain/gvc/files/SBT_gaiyou_20210319.pdf (参照2021/4/6)
- 2) (株)住化技術情報センター, 防災管理支援, <https://www.stis.co.jp/service/disaster.html> (参照2021/4/12)
- 3) United States Environmental Protection Agency, ALOHA software, <https://www.epa.gov/comeo/aloha-software> (参照2020/10/21).
- 4) (一社)産業環境管理協会, METI-LISモデルプログラム, <http://www.jemai.or.jp/tech/meti-lis/analysis.html> (参照2020/10/21).
- 5) 日野 幹雄, “流体力学”, 朝倉書店 (1992).
- 6) (一社)日本機械学会, 計算力学技術者(熱流体力学分野)講習会 (2004).
- 7) 島田 直樹, 富山 明男, 化学工学論文集, 31(1), 15 (2005).
- 8) 島田 直樹 ほか, 化学工学論文集, 31(6), 377 (2005).
- 9) 棚橋 隆彦, “CFD計算流体力学”, アイピーシー (1994), p. 633.
- 10) J. Kim and P. Moin, *J. Comput. Phys.*, 59, 308 (1985).
- 11) F. H. Harlow and J. E. Welch, *Phys. Fluids*, 8, 2182 (1965).
- 12) A. A. Amsden and Harlow, *J. Comput. Phys.*, 6, 322 (1970).
- 13) S. V. Patankar (水谷 幸夫, 香月 正司 訳), “コンピュータによる熱移動と流れの数値解析”, 森北出版 (1985).
- 14) ANSYS Fluent, <https://www.ansys.com/> (参照2021/1/19).
- 15) Simcenter STAR-CCM+, <https://www.plm.automation.siemens.com/global/en/products/simcenter/STAR-CCM.html> (参照2021/1/19).
- 16) 小林 敏雄 編, “数値流体力学ハンドブック”, 丸善出版 (2003).
- 17) D. Clarke *et al.*, *AIAA Journal*, 24(3), 353 (1986).
- 18) P. G. Tucker and Z. Pan, *Appl. Math. Model.*, 24, 591 (2000).
- 19) D. M. Ingram *et al.*, *Mathematics and Computers in Simulation*, 61, 561 (2003).
- 20) S. Tanaka and N. Shimada, *J. of Chem. Eng. Japan*, 53(12), 747 (2020).
- 21) P. Balakumar *et al.*, “Proceedings of the 2014 Summer Program”, Center for Turbulence Research - Stanford Univ. (2014), p. 407–415.
- 22) P. S. Iyer and M. R. Malik, 46th AIAA Fluid Conf. AIAA-6016-3186 (2016).
- 23) G. I. Park and P. Moin, “Annual Research Briefs - 2016”, Center for Turbulence Research - Stanford Univ. (2016), p. 39–50.
- 24) M. J. Berger and M. J. Aftosmis, *AIAA*, 56(2), 445 (2018).
- 25) T. J. Craft *et al.*, 12th Int. Heat Transfer Conf. (2002).
- 26) K. Suga (Eds.: R. S. Amano and B. Sundén), “Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer: Emerging Topics”, WIT Press (2010), p. 331.
- 27) S. R. Allmaras *et al.*, Seventh Int. Conf. on Comput. Fluid Dynamics, ICCFD7-1902 (2012).
- 28) U. K. Ghia *et al.*, *J. Comput. Phys.*, 48, 387 (1982).
- 29) M. M. Zdravkovich, “Flow Around Circular Cylinders”, Volume 1, Oxford Science Publications (1997).
- 30) B. N. Rajani *et al.*, *Appl. Math. Model.*, 33, 1228 (2009).
- 31) Turbulence Modeling Resource – NASA: website, <https://turbmodels.larc.nasa.gov/> (参照2020/10/21).
- 32) D. Greenblatt *et al.*, *AIAA Journal*, 44(2), 263 (2006).
- 33) A. F. Blumberg and G. L. Mellor (Ed.: N. S. Heaps), “Three-Dimensional Coastal Ocean Models, Volume 4”, American Geophysical Union (1987), p. 1–16.
- 34) G. Mellor (Ed.: T. Ezer), “Proceedings from the Princeton Ocean Model (POM) Users Meeting”, Princeton University (1996), p. 8.
- 35) 細山田 得三 ほか, 海岸工学論文集, 44, 86 (1997).
- 36) F. Horiguchi *et al.*, *Estuar., Coast. Shelf Sci.*, 70(4), 589 (2006).
- 37) 住友化学(株), JP 6576303 B2 (2019).
- 38) S. Senda and N. Shimada, *J. of Chem. Eng. Japan*, 52(1), 41 (2019).
- 39) W. Hackbusch, “Multi-Grid Methods and Applications”, Springer (1985).

- 40) 日本海洋データセンター, https://www.jodc.go.jp/jodcweb/index_j.html (参照2021/4/12).
- 41) 林 英文 ほか, 沿岸海洋研究, 44(2), 177 (2007).
- 42) 国土地理院, <http://maps.gsi.go.jp/development/ichiran.html>, データソース:Landsat8画像 (GSI, TSIC, GEO, Grid/AIST), Landsat8画像 (courtesy of the U. S. Geological Survey), 海底地形 (GEBCO) (参照2017/5/17).
- 43) OneAPI Programming Model, <https://www.oneapi.com/> (参照2021/1/19).
- 44) NVIDIA HPC Software Development Kit, <https://developer.nvidia.com/hpc-sdk> (参照2021/1/19).
- 45) 梶島 兵夫, 学術の動向, 19(10), 54 (2014).
- 46) F. Menter *et al.*, Appl. Sci., 11(6), 2459 (2021).

PROFILE



島田 直樹
Naoki SHIMADA

住友化学株式会社
生産安全基盤センター
主席研究員
博士 (工学)