



文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」  
ワークショップ（第7回）

- マルチスケール連成シミュレーション -

予稿集 WEB 版

日時 : 平成19年1月24日(水)

主催 : 東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

会場 : 東京大学生産技術研究所 コンベンションホール(An棟2階)

共催 : スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

アドバンスソフト株式会社



「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ  
開催に際して

2002年度から推進してきた「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果をさらに発展させ、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発の一環として2005年度から「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」(RSS21)プロジェクトを推進しています。このプロジェクトは東京大学生産技術研究所を中核拠点として、下記の分野における基盤的ソフトウェアの研究開発を推進しています。

- ・生命現象シミュレーション、
- ・マルチスケール連成シミュレーション、
- ・都市の安全・環境シミュレーション、
- ・共通基盤ソフトウェア

(超高速演算ライブラリ及び最適化プラットフォーム)

第7回となるこのワークショップでは、マルチスケール連成シミュレーション・システムに関する研究の成果と最終年度に向けての開発計画を皆様にご報告いたします。実世界は本質的に連成現象が支配していますが、複雑かつ大規模になりがちな実世界の連成現象を精密にシミュレーションすることは極めて困難でした。本プロジェクトでは、このような困難な課題に果敢にチャレンジし、実用的なマルチスケール連成シミュレーション・システムの開発を進めています。

すでにソースコードをダウンロードできるソフトも公開され、学術研究のみならず実務にも供し得る応用が期待されます。今回のワークショップでは、産学官の各界の皆様とともに本プロジェクトの中間成果および今後の実用化に向けた討論を致します。

ご出席の関係各位には、本プロジェクトへの大いなるご関心とともに、ご支援・ご協力を宜しくお願い申し上げます。

平成19年1月24日

東京大学 教授 生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター長  
「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト  
研究代表 加藤千幸

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ（第7回）

- マルチスケール連成シミュレーション - プログラム

日時：平成 19 年 1 月 24 日(水) 10:00～17:20

10:00 開会

10:00-10:20 20分 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」の概要  
加藤 千幸  
東京大学生産技術研究所 教授

【トラック A：デジタルエンジニアリング革新のためのマルチスケールシミュレーション】

10:20-11:45 85分 「ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション」  
「PHASEの新機能紹介」  
山本 武範  
アドバンスソフト株式会社 主事研究員

「ASCOTによる量子伝導解析」  
近藤 恒  
東京大学生産技術研究所 産学官連携研究員

「マルチスケール解析手法の開発」  
伊藤 信  
アドバンスソフト株式会社 主任研究員

11:45-13:00 75分 休憩

【トラック B：デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

13:00-13:30 30分 「構造解析シミュレーション FrontSTR  
～Win ノートクラスタから地球シミュレータまで～」  
奥田 洋司  
東京大学人工物工学研究センター 教授

13:30-14:00 30分 「FrontFlow / Red 開発状況」  
張 会来  
アドバンスソフト株式会社 主管研究員  
坪倉 誠  
電気通信大学 電気通信学部 助教授

14:00-14:30 30分 「流体コード FrontFlow/Blue の成果と研究・開発計画」  
加藤 千幸  
東京大学生産技術研究所 教授

- 14:30-14:50 20分 休憩・コーヒープレイク
- 14:50-15:20 30分 「高性能磁場解析システム REVOCAP\_Magnetic」  
金山 寛  
九州大学 大学院工学研究院 教授
- 15:20-15:40 20分 「プレポストシステム REVOCAP\_Mesh, REVOCAP\_Visual」  
福永 守高  
アドバンスソフト株式会社 主任研究員
- 15:40-16:20 40分 「革新的汎用連成シミュレーション・システム REVOCAP」  
吉村 忍  
東京大学大学院工学系研究科 教授
- 【トラックC：革新ソフトの事業化と普及戦略】
- 16:20-16:40 20分 「連成シミュレーションソフトの事業化と普及体制」  
福永 守高  
アドバンスソフト株式会社 課長
- 16:40-17:10 30分 全体質疑応答
- 17:10-17:20 閉会

【トラック A :デジタルエンジニアリング革新のためのマルチスケールシミュレーション】  
「ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション」

## PHASE の新機能紹介

アドバンスソフト株式会社

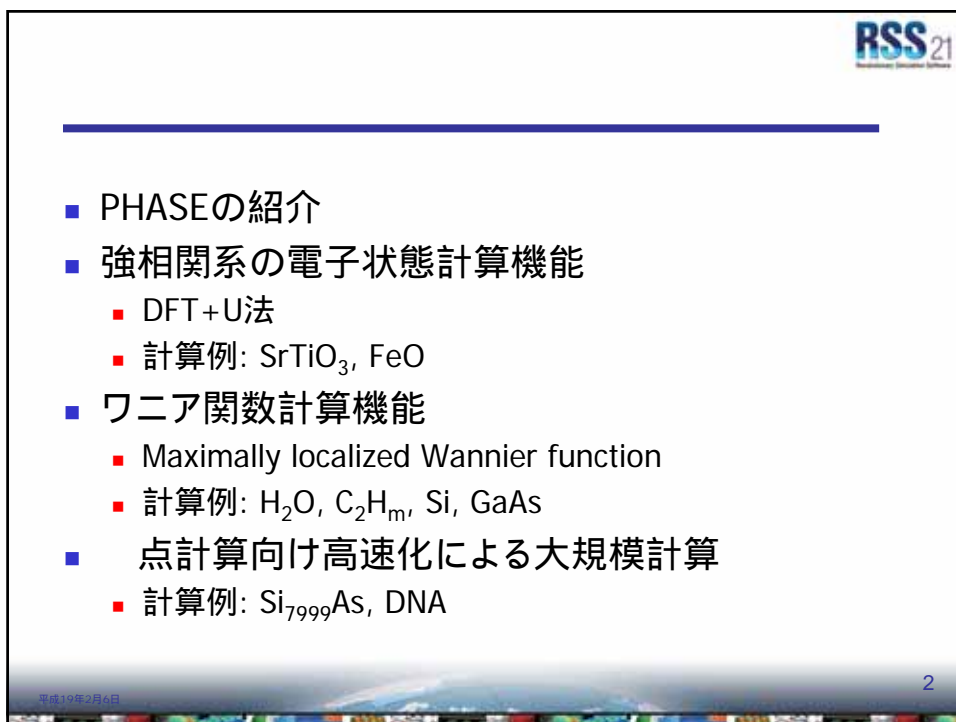
主事研究員 山本 武範

# PHASEの新機能紹介

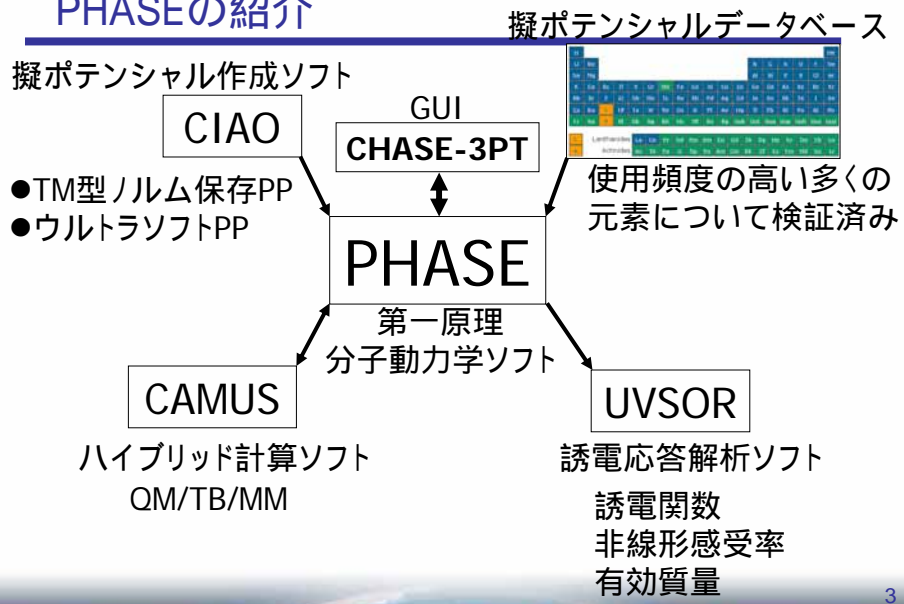
山本武範  
アドバンスソフト株式会社 主事研究員



- PHASEの紹介
- 強相関係の電子状態計算機能
  - DFT+U法
  - 計算例:  $\text{SrTiO}_3$ , FeO
- ワニア関数計算機能
  - Maximally localized Wannier function
  - 計算例:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_m$ , Si, GaAs
- 点計算向け高速化による大規模計算
  - 計算例:  $\text{Si}_{7999}\text{As}$ , DNA



## PHASEの紹介



## PHASEの計算手法

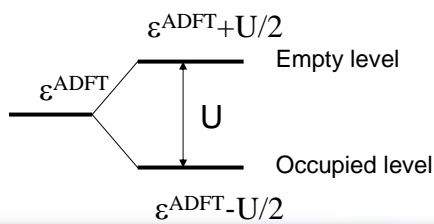
- 密度汎関数理論
- 擬ポテンシャル
  - TM型ノルム保存擬ポテンシャル
  - Vanderbilt型ウルトラソフト擬ポテンシャル
- 平面波基底
- 電子状態解法
  - Modified steepest decent (MSD)法
  - 直線探索付きMSD法
  - 残差最小化法
  - Davidson法

## DFT+U法

局在軌道間のクーロン相互作用を補正する。

全エネルギー 
$$E_{ADFT+U} = E_{ADFT} + \frac{U}{2} \sum_I \sum_{m,\sigma} \left\{ \rho_{m,m}^{I\sigma} - \sum_{m'} \rho_{m,m'}^{I\sigma} \rho_{m',m}^{I\sigma} \right\}$$

占有行列 
$$\rho_{mm'}^{I\sigma} = \sum_{k,n} f_{kn}^\sigma \langle \psi_{kn}^\sigma | \phi_m^I \rangle \langle \phi_{m'}^I | \psi_{kn}^\sigma \rangle$$



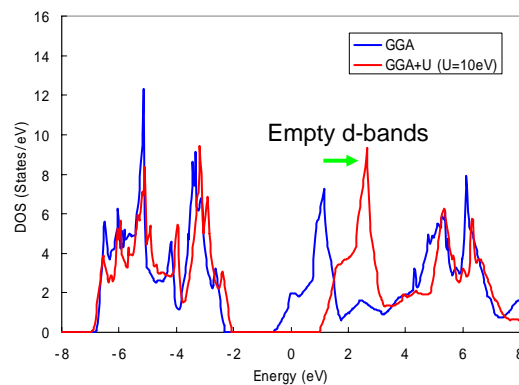
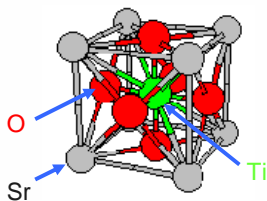
プロジェクト関数  $\phi_m^I$  には原子軌道やワニア関数を使用する。

## 強相関電子系の電子状態計算(1)

SrTiO<sub>3</sub>の状態密度

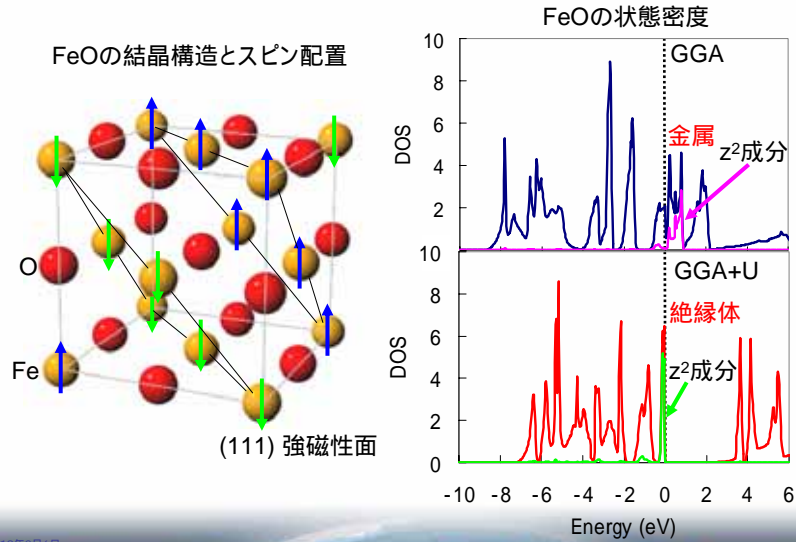
バンドギャップ (eV)

GGA	GGA+U (U=10eV)	Exp.
1.8	3.1	3.3





## 強相関電子系の電子状態計算(2)



## Maximally localized Wannier function

局在化汎関数

$$\Omega = \sum_n \left( \langle w_n | r^2 | w_n \rangle - \langle w_n | r | w_n \rangle^2 \right)$$

最小化 (steepest-descent minimization)

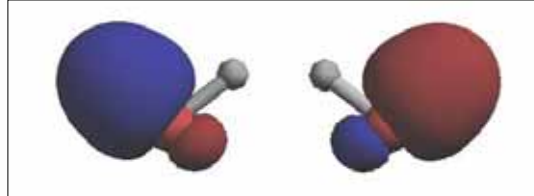
$$w_n = \sum_m U_{mn} w_m^{(0)} \quad \text{ユニタリ変換}$$

最大局在化ワニ関数  $w_n^{MLWF}$

## 水分子のMLWF

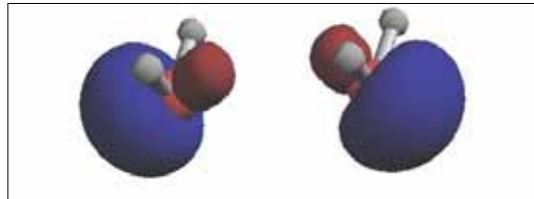
共有電子対

酸素-WCの距離  
0.53



非共有電子対

酸素-WCの距離  
0.31



## 炭化水素のC-C結合

$C_2H_6$

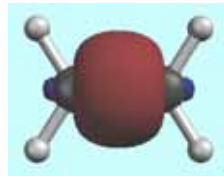


1重結合

C-H結合

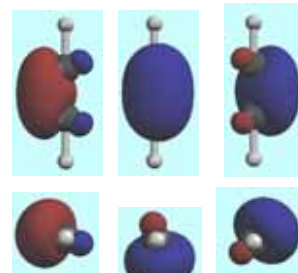


$C_2H_4$



2重結合

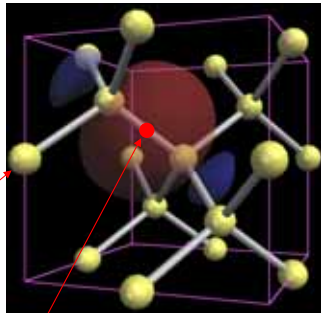
$C_2H_2$



3重結合

## Si結晶とGaAs結晶のMLWF

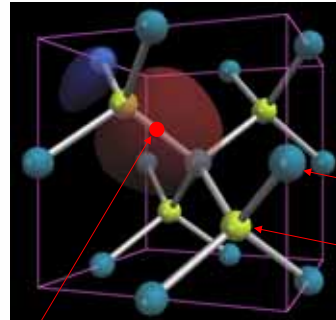
Si結晶



Si

ワニア中心はSi-Si結合の中心に位置する。

GaAs結晶

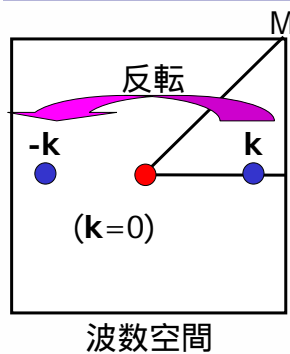


Ga

As

ワニア中心はGa-As結合の中心からAs側に結合長の1割程度ずれている。

## 点計算向け高速化



ブロッホ波  $\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r})$

$u_{nk}(\mathbf{r})$ が満たすべき方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - i \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \nabla + V(\mathbf{r}) \right] u_{nk}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) u_{nk}(\mathbf{r})$$

$$u_{nk}^*(\mathbf{r}) = u_{n-k}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{k}=0 \text{ なら } u_{rk}(\mathbf{r}) \text{ は実関数になる。}$$

- ・必要とするメモリ量の削減
  - ・演算量の削減
- ➡ 大規模計算が容易になる。

【トラック A :デジタルエンジニアリング革新のためのマルチスケールシミュレーション】  
「ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション」

## ASCOT による量子伝道解析

東京大学 生産技術研究所

産学官連携研究員 近藤 恒

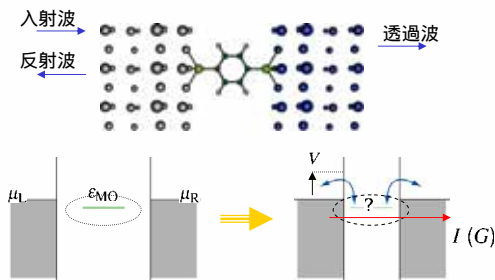
# ASCOTによる量子伝導解析

東京大学生産技術研究所  
産学官連携研究員  
近藤 恒



## 対象となる系と新たな計算法(開放系)の必要性

ナノスケールのデバイスの可能性に関連 単分子等によるナノ構造体の示す伝導特性



全系の電子状態と伝導特性:

- 電極の構造
- ナノ構造体(分子)の構造
- コンタクトの構造

バイアス下での定常状態の計算( $I$ - $V$ 曲線)

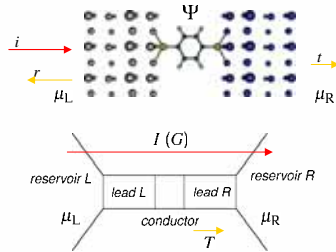
密度汎関数計算

境界条件	
周期系(結晶) ⇔	周期境界条件
孤立系(分子等) ⇔	無限遠でゼロ
開放系 ⇔	散乱状態の境界条件

非平衡グリーン関数法

## 計算手法

### Landauer Formula



- Current  $I$   

$$I = \frac{2e}{h} T (\mu_L - \mu_R)$$
 where  
 $T$ : transmission coefficient
- Conductance  $G$   

$$G = \frac{I}{(\mu_L - \mu_R)/e} = \frac{2e^2}{h} T$$

### Methods

- Wave function
  - ▶ Lippmann-Schwinger eq.
  - ▶ Overbridging Boundary Matching (OBM) method
- Green's Function
  - ▶ Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) method

## 計算手法: 非平衡グリーン関数法

### Band

#### Electrodes

- $H_L$ : left region
- $H_R$ : right region
- $V_{LR}(r)$ : left/right region

#### Junction

- $H_C$ : central region
- $\rho(r)$ : central region

boundary condition: periodic system

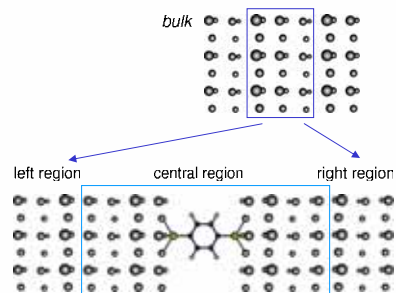
- Hamiltonian matrix

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} H_L & H_{LC} & 0 \\ H_{CL} & H_C & H_{CR} \\ 0 & H_{RC} & H_R \end{pmatrix}$$

### Electronic structure & Transport

- $H_C$ : central region
- $\rho(r)$ : central region
- $G_C(z) = [zS_C - H_C - \Sigma_R(z) - \Sigma_L(z)]^{-1}$
- $T(\epsilon) = \text{Tr} [\Gamma_L(\epsilon) G_C^<( \epsilon) \Gamma_R(\epsilon) G_C^>( \epsilon)]$
- $I = \frac{2e}{h} \int d\epsilon T(\epsilon) [f(\epsilon - \mu_L) - f(\epsilon - \mu_R)]$

boundary condition: open system



## 電荷密度の計算法

$$\rho_C = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_C^<(\varepsilon)$$

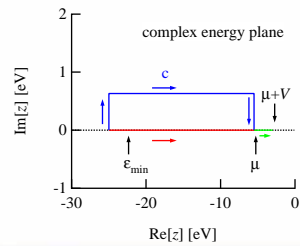
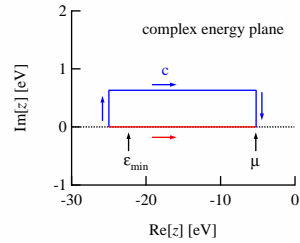
- $V = 0.0[V]$

$$\begin{aligned} \rho_C &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon G_C^r(\varepsilon) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_c dz G_C^r(z) \end{aligned}$$

- $V \neq 0.0[V]$

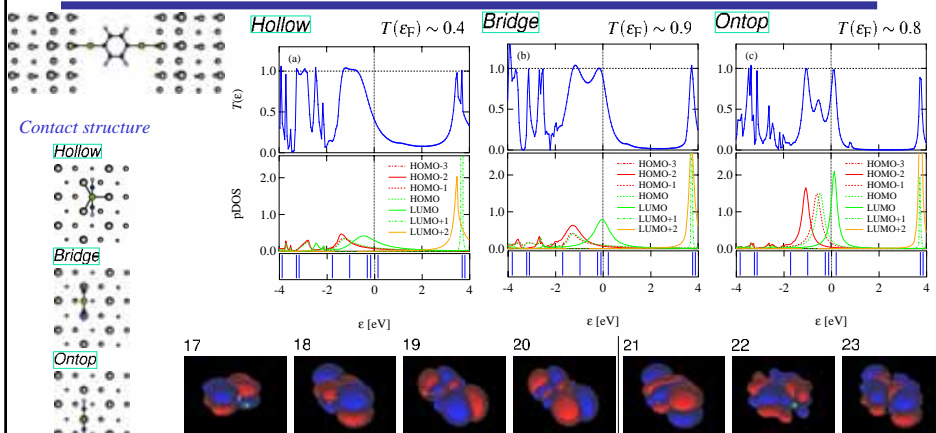
$$\begin{aligned} \rho_C &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon G_C^r(\varepsilon) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\mu}^{\infty} d\varepsilon G_C^<(\varepsilon) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_c dz G_C^r(z) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\mu}^{\infty} d\varepsilon G_C^<(\varepsilon) \end{aligned}$$

$$G_C^<(\varepsilon) = G_C^r(\varepsilon) i(\Gamma_L(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu_L) + \Gamma_R(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu_R)) G_C^a(\varepsilon)$$



## 計算例: ベンゼンジオール分子1

Kondo *et al.*:  
PRB 73 (2006) 235323.



分子軌道の広がり  
・結合の強さに依存  
・分子軌道の対称性による

➤ Experimental work

Brak junction technique

$$G = 10^{-4} G_0$$

[Reed *et al.*: Science 278 (1997) 252.]

STM

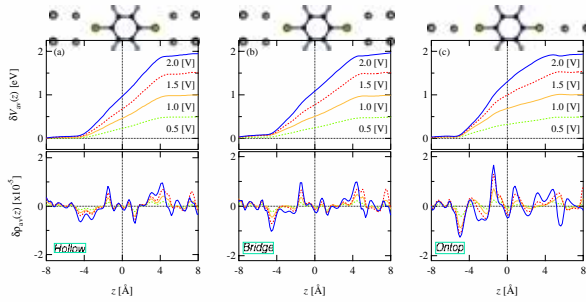
$$G = 0.011 G_0$$

[Xiao *et al.*: Nano Lett. 4 (2004) 267.]

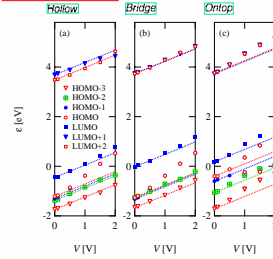
### 計算例: ベンゼンジチオール分子2

Kondo et al.: PRB 73 (2006) 235323.

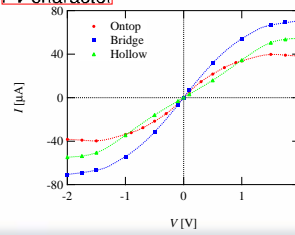
potential drop



peak position

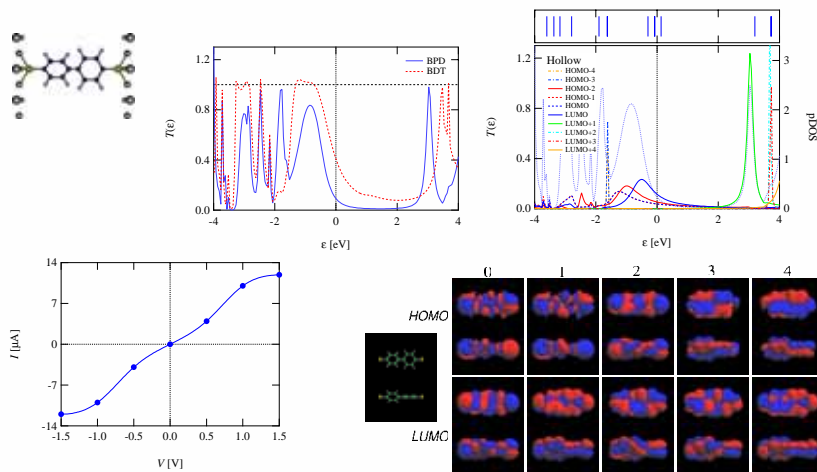


I-V character



✓ 分子と電極との間の結合が弱いOntopの時, unusualな振る舞いが見られる.  
 ✓ 適当な結合の大きさのBridgeで最大の電流値を得た.

### 計算例: ビフェニルジチオール分子



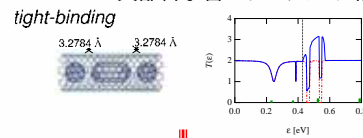


## プログラムの公開

Computer Software for Transport-property Analysis (ASCOT)

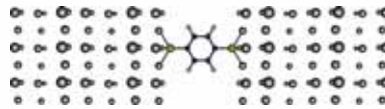
<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software/>, June 2005.

文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」



DFT版: 12月公開予定

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」



【トラック A :デジタルエンジニアリング革新のためのマルチスケールシミュレーション】  
「ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション」

## マルチスケール解析手法の開発

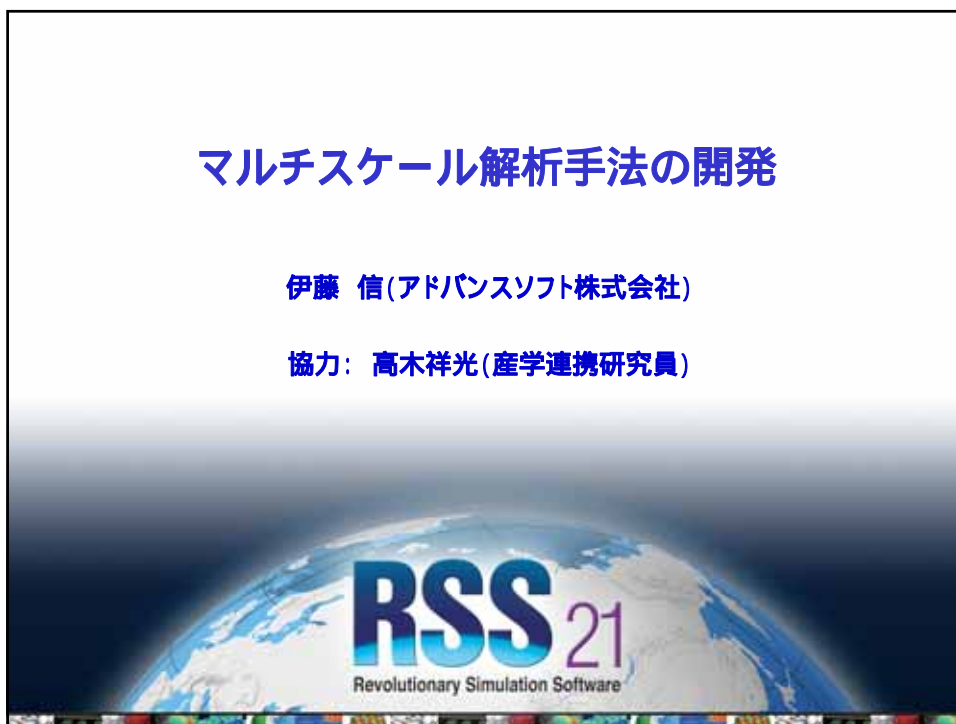
アドバンスソフト株式会社

主任研究員 伊藤 信

## マルチスケール解析手法の開発

伊藤 信 (アドバンスソフト株式会社)

協力: 高木祥光 (産学連携研究員)



### 何に関するマルチスケールか？

- 原子スケールの**時間的**マルチスケール計算法  
= 運動学的モンテカルロ法  
(kinetic Monte Carlo method, **KMC**法)

A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, J. Comp. Phys. 17 (1975) 10.

予め原子構造を決めて、原子を格子位置に限定すれば、**時間的に数桁違う現象を同時に扱う**ことができる。

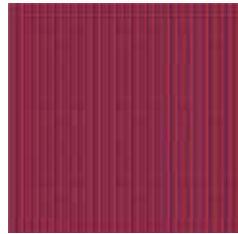
例) 半導体のエピタキシャル成長過程

表面原子(adatom)の熱拡散 =  $10^{-5}$ 秒のオーダー

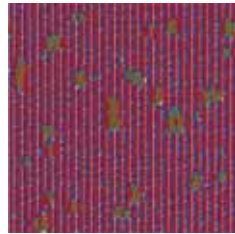
分子の吸着と蒸発の過程 =  $10^{-3}$ 秒 ~  $10^{-1}$ 秒

(ただし、水素分子以外)

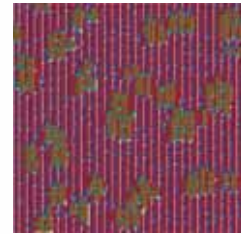
## KMC法によるシミュレーションの例



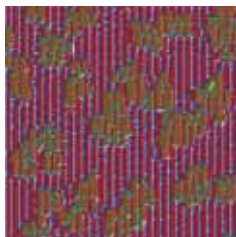
初期状態



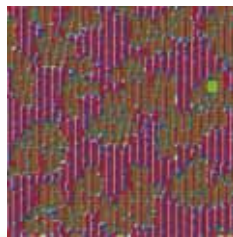
15秒後



30秒後



45秒後



60秒後

青: Ga 原子  
赤: 基板のAs原子  
他: 一層上の原子層  
のAs原子

M. Itoh,  
Prog.Surf.Sci. 66, 53 (2001).

## ヘテロエピタキシャル過程の再現は可能か？

- ホモエピタキシャル成長シミュレーションでは、Ga原子が過飽和状態にあるという実験事実を再現
- InAs/GaAs(001) では、In と Ga が混合 (< 1.66ML)
- Ge/Si(001) では Si と Ge が混合 (< 3ML)
- 元素混合は、量子ドット発生の前段階に共通する性質

P.B.Joyce et al., PRB 58, R15981 (1998).

## 量子ドットの特徴

Ge/Si(001) と InAs/GaAs(001) に共通する特徴

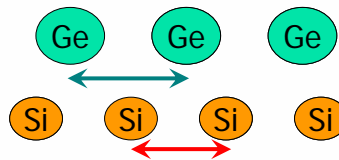
- Stranski-Krastanov 型成長過程  
原子層3層程度の2次元成長  
3次元成長
- 元素混合(量子ドット形成前に発生)  
(Ge + Si) / Si(001)  
(In + Ga)As / GaAs(001)
- 鉛直方向に沿った組成変化  
(上に行くほどSiやGaの比率が低下)

**静的計算では再現不可能！**

I. Kegel et al. PRL 85, 1694 (2000).

## Ge/Si(001) 量子ドット

Ge/Si(001) 量子ドットのAFM像



格子不整合(4%)による歪みの緩和  
量子ドットの発生原因

→ メゾスケール

J.Tersoff et al. PRL 76, 1675(1996).

## 空間的なマルチスケールへの拡張

- 原子が格子位置からずれた時にも、相互作用エネルギーが計算可能な**原子間ポテンシャル**が必要
- 連続体モデルとの接続  
メゾスケールへの拡張
- 計算手法の有効性の検証  
量子ドット形成過程のシミュレーション

## Tersoff 型ポテンシャル

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij}, \quad V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]; \quad (1a)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}); \quad (1b)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos[\pi(r_{ij} - R_{ij}) / (S_{ij} - R_{ij})], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij}, \\ 0, & r_{ij} > S_{ij}; \end{cases} \quad \text{斥力、引力} \quad \text{カットオフ関数} \quad (1c)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^6 \zeta_{ij}^6)^{-1/2}, \quad \zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}), \quad g(\theta_{ijk}) = 1 + c_1^2/d_1^2 - c_2^2/[d_1^2 + (h_i - \cos\theta_{ijk})^2]; \quad (1d)$$

$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2, \quad \mu_{ij} = (\mu_i + \mu_j)/2, \quad A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2}, \quad B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}, \quad R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}, \quad S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}. \quad (1e)$$

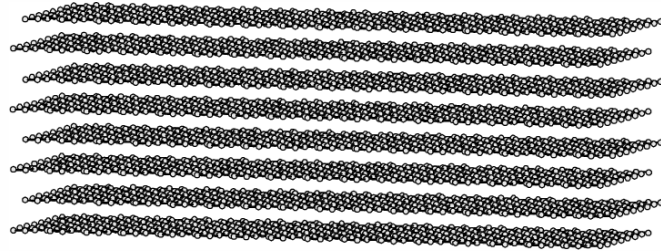
三体効果

J. Tersoff, Phys.Rev.B, vol.39, 5566 (1989).

## Tersoff 型ポテンシャルを使った計算機実験

### Graphite-nanotube 構造相転移の可能性をさぐる計算機シミュレーション

graphite から温度分布を制御することによってnanotubeを合成する方法を計算機シミュレーションから探る

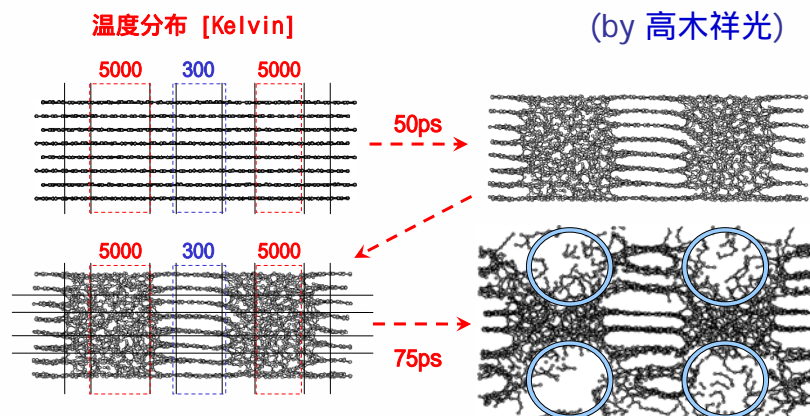


炭素原子 4096個  
面内方向には周期的境界条件  
面に垂直な方向にはグラフェンが8層積層したスラブ模型

Tersoff型ポテンシャルの改良 : J.H.Los and A. Fasolino, PRB 68, 024107 (2003).

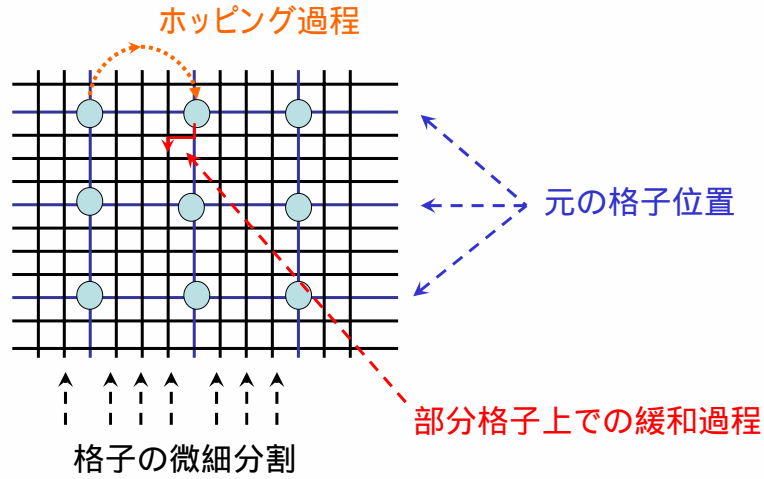
## Tersoff 型ポテンシャルを使った計算機実験

(by 高木祥光)



カーボン・ナノチューブは出来るか？

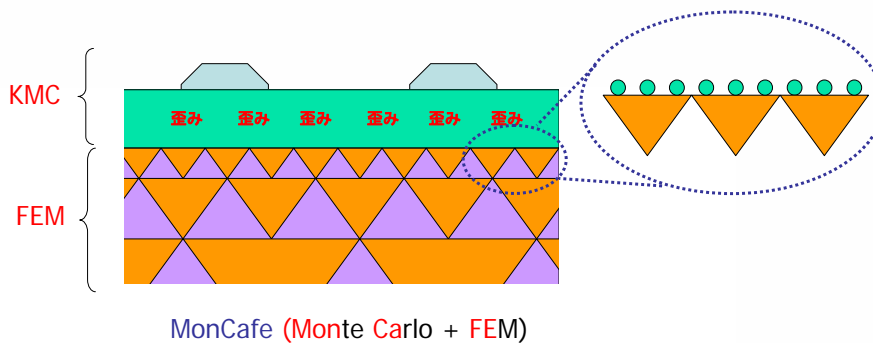
## KMC法の拡張：格子の微細分割



単純立方格子上での微細分割: T.Kawamura and T.Natori, Surf. Sci. vol.438, 148 (1999).

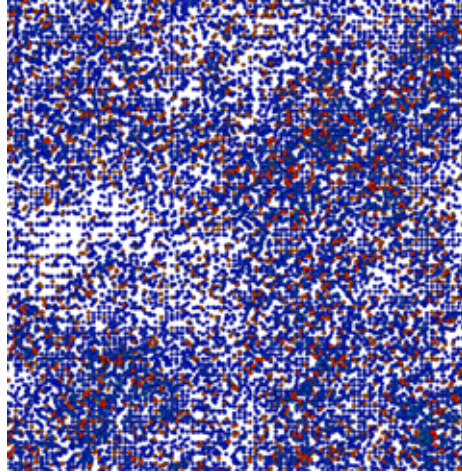
## KMC法の3次元成長過程への拡張

- 格子不整合に起因する歪みの遠方への伝達機構





## MonCafeによるシミュレーション (途中経過)



青: Si  
赤: Ge

表面全体にうねりが生じたのは、表面構造を取り入れたため。  
丘の部分にGe原子が集中。

## 金属系への応用

- 有効媒質近似ポテンシャル  
(Modified Embedded Atom Method, MEAM)

$$E = \sum_i [ F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} V_{ij}(R_{ij}) ]$$

i番目とj番目の原子間距離

$$F(\rho_i) = A E_0 (\rho_i / Z_0) (\ln(\rho_i / Z_0) - \dots)$$

埋め込み関数      背景電子密度      配位数      凝縮エネルギー (の逆符号)

M.I.Baskes et al., Phys.Rev.B 40, 6085(1989).  
X.Yuan et al., J.Phys.:Conden. Matter 15(2003)8917.

## まとめ

---

### 手法:

- KMC法による時間的なマルチスケール解析の実現
- 結晶格子の微細分割による、空間的なマルチスケール解析への拡張

### 実証計算:

- Tersoff型ポテンシャルを使った Ge/Si(001)の計算
- MEAMポテンシャルを使った金属系への拡張

【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

**構造解析シミュレーション FrontSTR**

~Win ノートクラスタから地球シミュレータまで~

**東京大学 人工物工学研究センター**

**教授 奥田 洋司**

2007年1月24日  
 文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」  
 ワークショップ(第7回)

# 構造解析シミュレーション FrontSTR

## ～ Winノートクラスタから地球シミュレータまで～

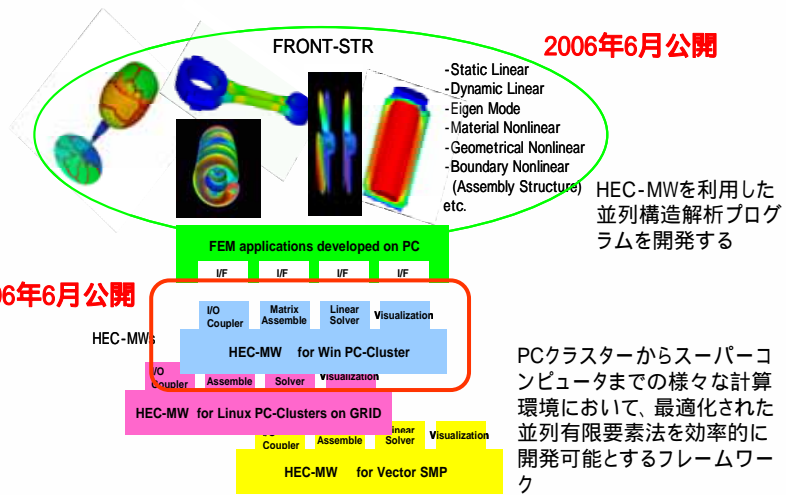
奥田洋司

東京大学 人工物工学研究センター

開発メンバー：  
 小笠原朋隆，陳莉，深堀安二，今井登，伊東聰（東京大学），長嶋利夫（上智大学），荒川貴道（アドバンスソフト（株））



## HEC-MWを基盤とするFrontSTR



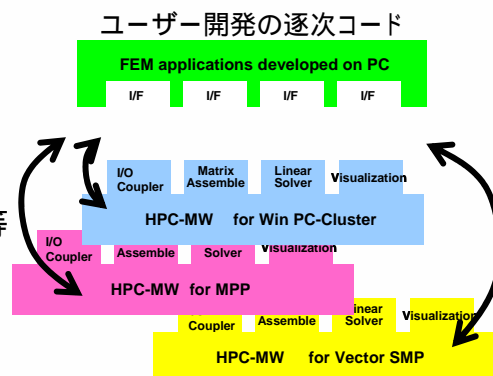
2006年8月 Ver.1.1 アップ(バグFix版)

## FrontSTRの革新性・差別化ポイント

- 大規模並列分散環境への対応
  - 従来の汎用コードの限界
  - NLS(ナショナル・リーダーシップ・スパコン)における構造解析ソフトウェア
  - さまざまな環境(OS, プロセッサタイプ)における効率的な大規模並列構造解析(とくにWin環境)
  
- RSS21革新的連成シミュレーション・システムへのI/F
  
- HEC-MW上での構築
  - 有限要素解析アプリケーションの効率的な改良, 新規開発

## HEC-MWの提供する機能

- データ入出力(単一・分散領域)
- 線形ソルバ
  - 反復法・直接法
  - ブロック処理
- 有限要素処理
  - 行列演算
  - コネクティビティ生成 等
- 可視化
- ユーティリティ
  - 領域分割 等



HEC-MWのイメージ

## HEC-MWを用いたプログラムイメージ

```
program sample_main
```

```
  use hecmw
```

1) hecmwモジュールを“USE”

```
  implicit none
```

```
  type (hecmwST_local_mesh) :: hecMESH
```

2) hecmwモジュールで定義された構造体の変数宣言

```
  type (hecmwST_matrix ) :: hecMAT
```

```
  character(len=HECMW_FILENAME_LEN) :: name_ID
```

```
  call hecmw_init
```

3) hecmwサブルーチンをコール

```
  call hecmw_get_mesh(name_ID, hecMESH)
```

```
  .....
```

```
  ....., FE algorithm
```

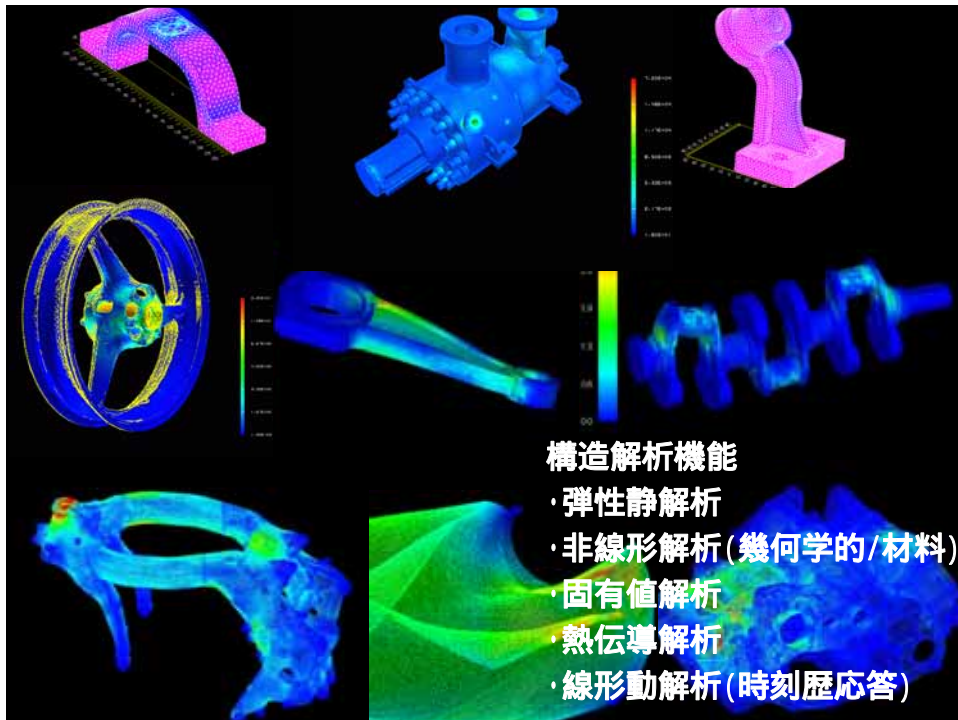
```
  .....
```

```
  call hecmw_solve_33 (hecMESH, hecMAT)
```

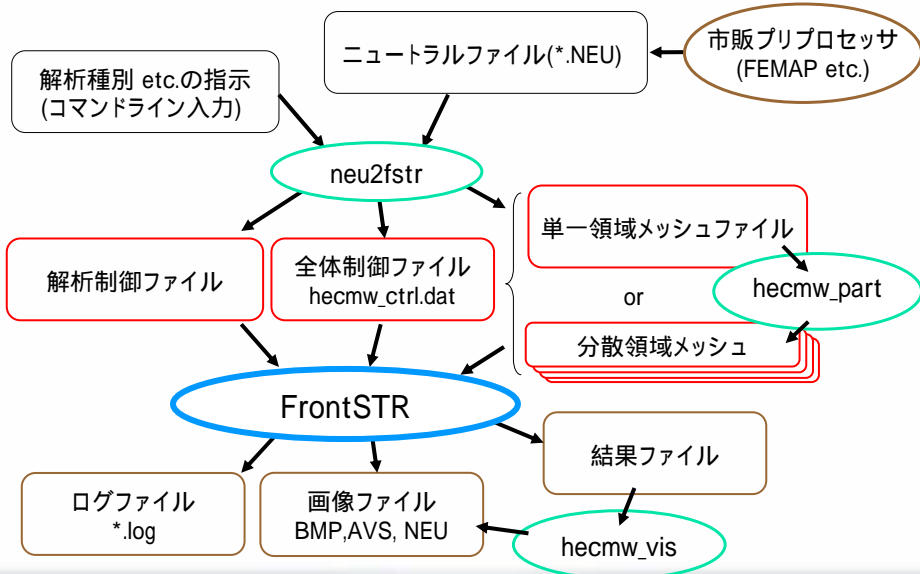
```
  call hecmw_finalize
```

- ・ アプリ開発者が関与するソース量は大幅に減少
- ・ 並列演算, オーダリング, 並列データ入出力が隠蔽
- ・ アプリはSPMD型の並列プログラム
- ・ 分散領域のデータに対して並列計算を実行

```
end program sample_main
```



## FrontSTR 入出力系図(1/2)



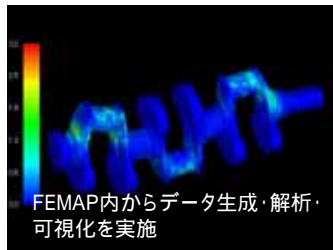
## FrontSTR 入出力系図(2/2)

FEMAP + FrontSTR Pre

FEMAP内からデータ生成・解析・可視化を実施するための拡張機能 (開発協力: 寺坂・陳(東大))



FEMAPのメニューバー



## 地球シミュレータでの性能

- オーダリング, ベクトル化等の最適化はHEC-MWでサポート (FrontSTR部分のプログラムは同じ)
- 弾性解析ベンチマークにおいて, データサイズを変更して並列性能を比較 (実行時間:sec)
- 対ピーク性能比 40% 以上, Itanium2 (1.4GHz)の30~40倍のスピード

PE数 節点数	1 PE	2 PE	4 PE	8 PE	16 PE	(並列化率)
2万	1.42	0.784	0.443			1 4PEで 3.2倍 (91.7%)
100万		70.1	35.8	17.9		2 8PEで 3.9倍 (99.2%)
170万		137	67.8	35.1	17.6	2 16PEで 7.8倍 (99.5%)

## オフィスでのWindows環境におけるHEC

WinノートPC群によるFrontSTR並列計算実験



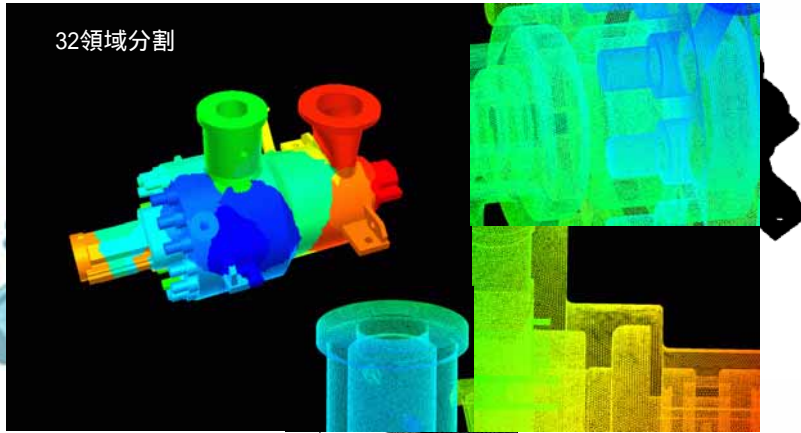
- LinuxクラスタからWinオフィス環境でのHECへ 普及に大きなインパクト
  - Dual Core, 省スペース, 多目的
  - 閉じた有線(ギガビットEther)LANでFrontSTR
  - 無線LANで日常業務
  - Win用MPIの安定化, クラスタOSの普及, 64ビット化
- コンロッド(9.4万節点) 585sec(1PE) 42sec(16PE, 14倍)
- フレーム(51.7万節点)
  - 2,550sec(16PE) 参考) Xeonクラスタ(16PE) 4,852sec
  - CG反復1,000回の計算 1,080sec(4PE) 190sec(16PE, 5.7倍)



## PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析

RSS21

32領域分割



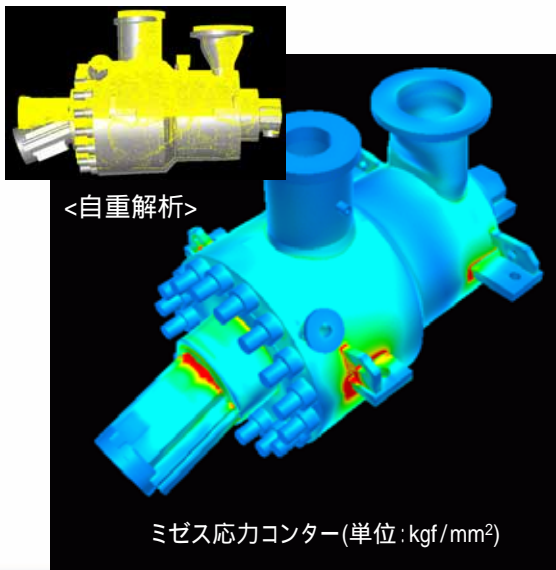
節点数： 36,728,129  
要素数： 26,289,770  
自由度数： 110,184,387  
使用要素： 四面体2次要素

静解析(自重、内圧)および  
可視化機能について大規模  
問題への適用性を実証

11

## PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析

RSS21



<自重解析>

ミゼス応力コンター(単位: kgf/mm<sup>2</sup>)

計算機:

Itanium2 Cluster, 1.4GHz,  
32PE 使用

使用メモリ: 120 GB

計算時間: 27.3 (h)

CG反復: 10,249 回

<内圧解析のとき>

計算時間: 約24 (h)

CG反復: 8,557 回

<HEC-MW可視化処理>

計算機:

Xeon Cluster, 2.8GHz,  
32PE 使用

Rendering処理枚数: 12枚

処理時間: 1時間弱

(ファイル渡しバージョン、うち5~7割  
がI/O)

## 並列直接法ソルバー

- 直接法の安定性を重視
- 並列化により記憶容量と計算時間の増大に対応
- 並列性能は反復法よりは劣る

PE数	加速率
1	1.0
2	1.8
4	3.3
8	4.5

行列分割による並び替え

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & C_1 \\ & A_{22} & C_2 \\ B_1 & B_2 & D \end{pmatrix}$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_0 \end{pmatrix}$$

$$D' = D - B_1 A_{11}^{-1} C_1 - B_2 A_{22}^{-1} C_2$$

$$b'_0 = b_0 - B_1 A_{11}^{-1} b_1 - B_2 A_{22}^{-1} b_2$$

として

$$D' x_0 = b'_0 \rightarrow x_0$$

$$A_{11} x_1 = b_1 - c_1 x_0 \rightarrow x_1$$

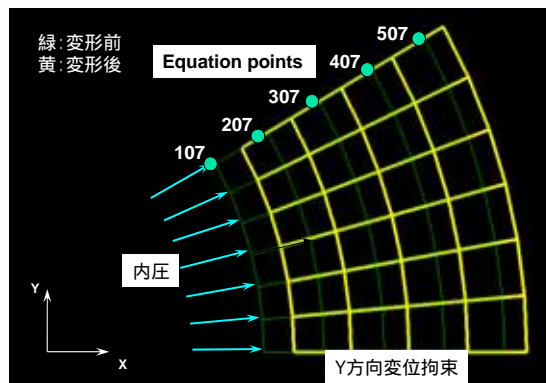
$$A_{22} x_2 = b_2 - c_2 x_0 \rightarrow x_2$$

密行列の並列解法

逐次直接法ソルバーの分散

実行 ( $A_{11}^{-1}, A_{22}^{-1}$  の計算)

## MPC機能 (1/2) !EQUATION



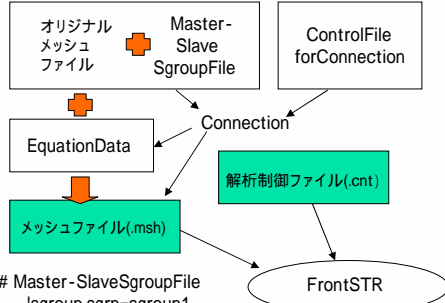
!EQUATION

```

2
107, 1, 1.0, 107, 2, -1.73205
2
207, 1, 1.0, 207, 2, -1.73205
2
307, 1, 1.0, 307, 2, -1.73205
2
407, 1, 1.0, 407, 2, -1.73205
2
507, 1, 1.0, 507, 2, -1.73205
    
```

= 30° 境界線上の全ての節点について  $x = 3 \cdot y$   
をEQUATIONデータで指定

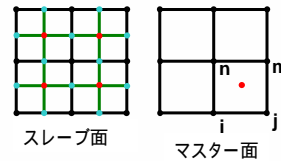
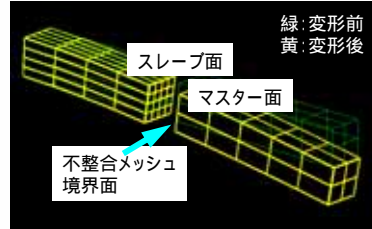
## MPC機能(2/2) マスター・スレーブ結合



```
# Master-SlaveSgroupFile
!sgroup,sgrp=sgroup1
!sgroup,sgrp=sgroup2

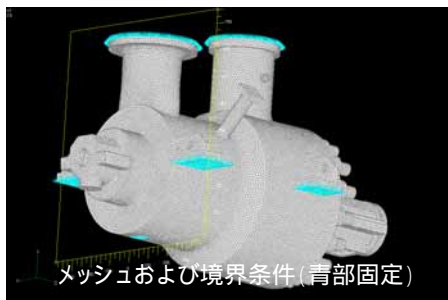
# ControlFile for Connection
!connection,master=sgroup1,slave=sgroup2,x=0.0,y=0.0,z=1.0
!connection,master=sgroup3,slave=sgroup4,x=0.0,y=0.0,z=1.0

master: マスター面を定義したsgroup名
slave: スレーブ面を定義したsgroup名
x: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのx成分
y: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのy成分
z: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのz成分
```



<重みの決定>  
スレーブ面の全ての節点について、マスター面と接する点の座標と要素面  $i, j, m, n$  を法線ベクトルから求め、その点の重みを決定し、独立変数の係数として!EQUATIONデータを自動生成

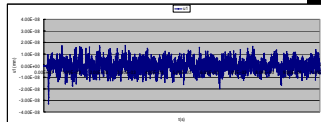
## 動解析機能の検証 中規模ポンプ(戦略Pの実証例題)の打撃試験



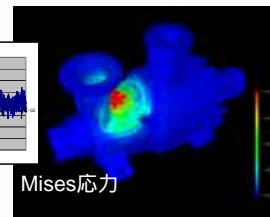
計算機: Xeon Cluster, 2.80GHz, 32PE  
使用メモリ: 704 MB  
t: 5.0E-8 (s)  
総ステップ数: 5,000,000 ステップ  
<陽解法>  
計算時間: Total 約58 (h)  
Solver部 約0.04 s / 1STEP

節点数 : 311,580  
要素数 : 1,368,583  
使用要素: 四面体1次要素

最大要素辺長 : 34.0 mm  
最小要素辺長 : 0.9 mm

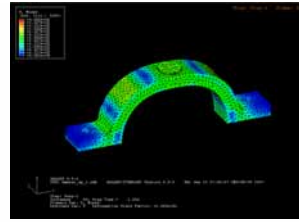
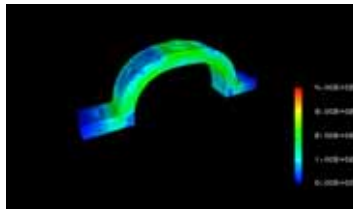
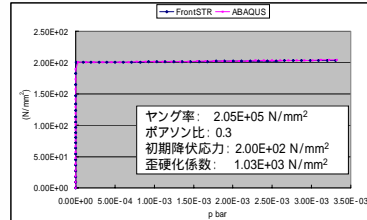
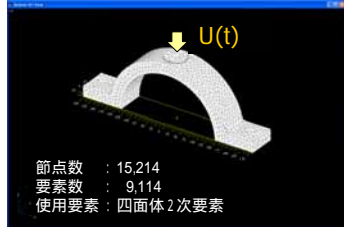


観測点における変位  $u_1$   
(粘性減衰係数=0.2)



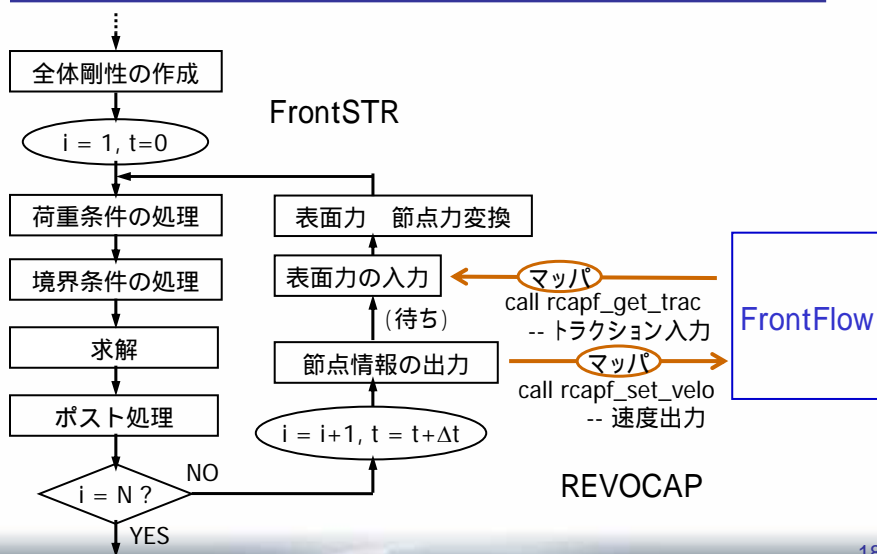
Mises応力

# 幾何学的非線形および材料非線形を考慮したかみ合いモデルの解析

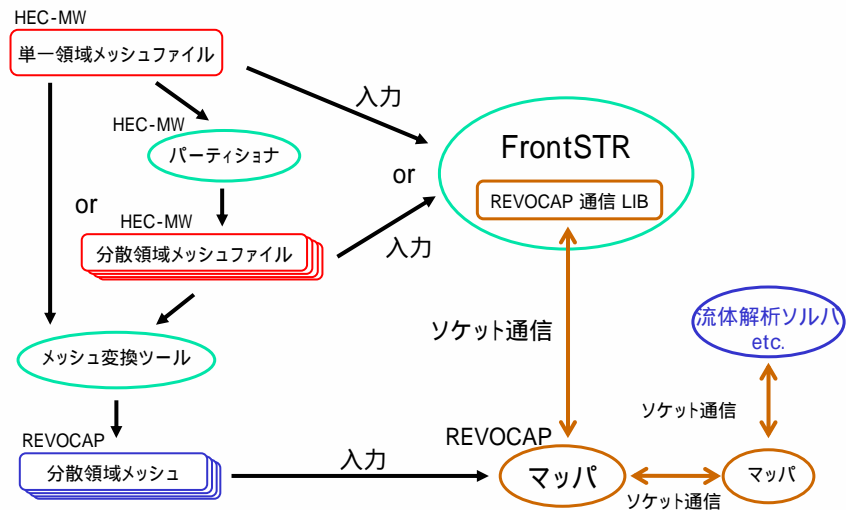


最終ステップにおける von Mises 相当応力分布図

# 弱連成 FrontSTR/REVOCAP/FrontFlow



## FrontSTR と REVOCAP の入出力関係



19

## 今後の予定

- 普及に向けてのロバスト化と公開
  - HEC-MW
    - 行列演算機能の高度化と整備
    - 開発者向けドキュメント, テンプレート整備
  - FrontSTR
    - 産業応用事例の拡充 (固有値・動解析・非線形解析・アセンブリ解析)
    - 並列直接法の高度化
    - オフィス環境等、各種OS環境への適用、産業界での利用促進
- 機能拡充
  - REVOCAPとの連成機能実装と実証連成問題
  - 地球シミュレータにおける性能評価・大規模解析 (続き)
  - 自由度混合のためのデータ構造修正

20

【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

## FrontFlow/Red 開発状況

アドバンスソフト株式会社

主管研究員 張 会来

電気通信大学

助教授 坪倉 誠

## 「FrontFlow/Red開発状況」

北海道大学機械研究科 大島伸行 教授  
電気通信大学 坪倉 誠 助教授  
アドバンスソフト第3技術部 張 会来



### ご紹介内容

---

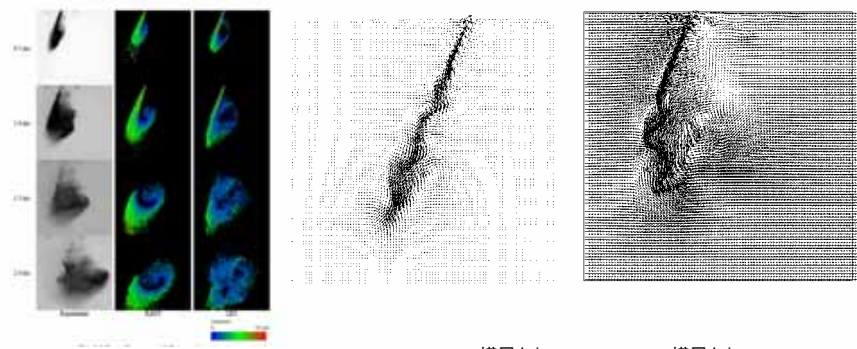
#### 革新的基盤プロジェクトにおける

- 1 FrontFlow/red **開発実績（2006年度）**
- 2 FrontFlow/red **リリース計画**
- 3 FrontFlow/red **産業界実用例**
- 4 FrontFlow/red **大規模実証例**  
(電気通信大学 坪倉誠 助教授)

# 1 FrontFlow/red開発実績 ( 2006年度 )

## ■ 開発実績(その1)

### ラグランジュ粒子追跡モジュール

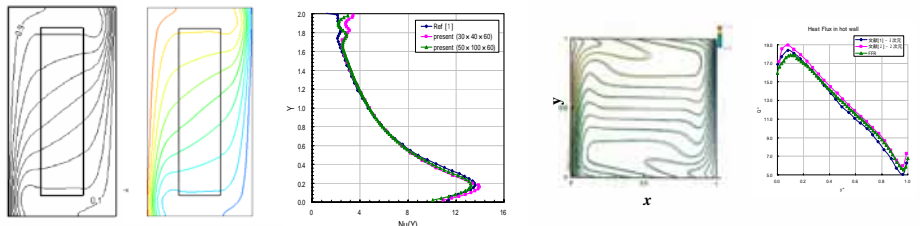


直噴ガソリンエンジン用スリットノズルの噴霧流れ解析      横風なし TWO-WAYモデル、粒子と流れ場の相互作用      横風なし

# 1 FrontFlow/red開発実績

## ■ 開発実績(その2)

### 輻射モジュール:ゾーン法、モンテカルロ法、有限体積法



文献[1]      本計算  
 熱い壁面上でZ方向中央断面のNu分布図 (  $\theta = 0, R_k = 1$  )

熱キャビテ輻射考慮する場合温度分布(モンテカルロ法)  
 Z方向中央断面の温度分布図  
 (文献[2]は黒色の実線、文献[3]は点線、本計算はカラーの線)

[1] Bouali H., Mezrhaba A., Amaoui H., Bouzidi M. Radiation-Natural Convection Heat Transfer in an Inclined Rectangular

[2] Colomer G, Costa M, Consul R, Oliva A. Int. J. Heat Mass Transfer, 47, 257-269, 2004.

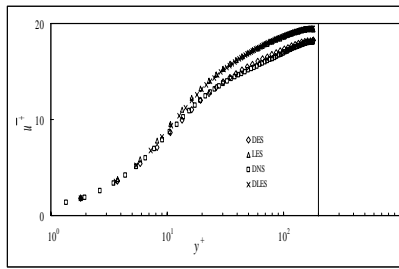
### 輻射-熱伝導 対流連成解析(有限体積法)

モデル図に示した密閉容器内、物体を放置し、周りは透明性ガスを充填している。左壁面で等温加熱し、右壁面で等温冷却されている。物体の熱伝導率、壁面の放射率および容器傾斜角を考慮し、輻射-熱伝導-熱対流の連成計算を行って、熱伝達効果を評価する。

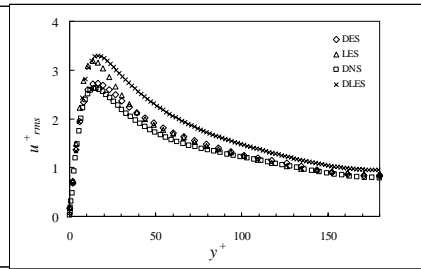


# 1 FrontFlow/red開発実績

- 開発実績(その3)
  - Dynamic SGSモデル
  - DES(Detached Eddy Simulation)



チャンネル平均速度



チャンネル速度乱流強度

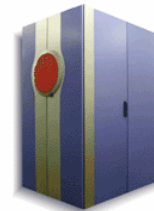
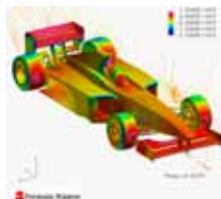
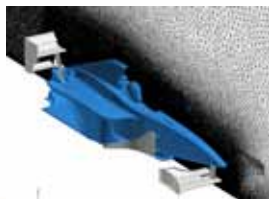
# 1 FrontFlow/red開発実績

- 開発実績(その4)
  - 地球シミュレータを向けベクトル化チューニング(大規模)
    - 流れ場、温度場、化学種輸送、輻射モジュール

• Calculation Computer Resource, Statistics

Hardware : Earth Simulator (SX-8)  
 nodes : 100(800CPUベクトル化率 96.40%、並列化率 99.88%)

• Grids  
 type : tetrahedron  
 elements : 120million(117,060,909)



SX8ベクトル計算機

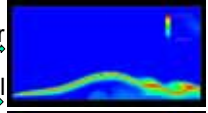
ご協力: ㈱日本レースプロモーション、Lola Cars International Ltd. (英LOLA社)、㈱ルマン、㈱エムワイジー

RSS21

## 1 FrontFlow/red 開発実績(2006年度) -応用技術-

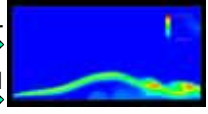
**詳細素反応による炭化水素燃料の非定常火炎解析 (NO生成予測)**

Flamelet近似



fuel

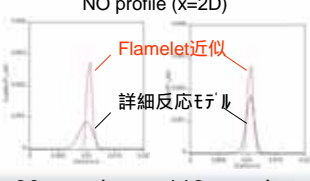
詳細反応モデル (30 equations)



air

fuel

NO profile (x=2D)



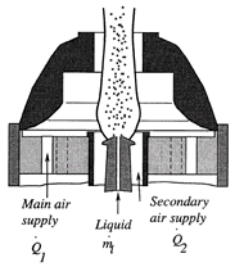
Flamelet近似

詳細反応モデル

30equations 113equations

噴霧燃焼LES解析

Re=2500  
Ethanol

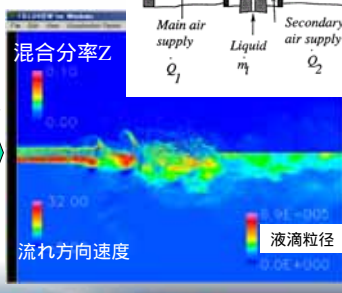


Main air supply  $\dot{Q}_1$

Liquid  $\dot{m}_l$

Secondary air supply  $\dot{Q}_2$

Spray



混合分率Z

流れ方向速度

液滴粒径

RSS21

## 2 FrontFlow/redリリース計画

- 2007年6月公開版リリース新規機能
  - LES - FLAMLET燃焼モデル
  - 粒子追跡モジュール
  - DES & Dynamic SGSモデル
  - 熱、化学種を含むベクトル化モジュール(地球シミュレータ)
  - 輻射モジュール

8

平成19年2月4日

## 2 FrontFlow/redリリース計画(既存機能)



項目	Advance/FrontFlow/redの機能
解析機能	<p><b>基本機能:</b> 定常 / 非定常 / 非圧縮性 / 圧縮性 / 低Mach数近似 / 強制対流 / 自然対流 / 固体-流体間の熱伝導 (固体内部の複数材質を含む) / 複数流体間の熱伝導</p> <p><b>乱流モデル:</b> LES: 標準Smagorinskyモデル / Dynamic SGSモデル / DESモデル / DNS / RANS: 高レイノルズ数標準k-モデル / 低レイノルズ数k-モデル / 高レイノルズRNGk-モデル / 高レイノルズCHENk-モデル / 応力方程式モデル (RSM) / 渦粘性一定</p> <p><b>ガス燃焼・化学反応モデル:</b> 素反応 (逆反応、圧力依存、第3体など含む、非整数化学量論係数、任意反応指数) / 渦消散 / 総括反応 (スス生成含む) / ユーザー定義反応モデル</p> <p><b>熱物性:</b> 定圧比熱、エンタルピ、エントロピと自由ギフトエネルギーの多項式表現 (JANAFテーブルあるいはChemkinデータベースの係数入力と自動読込)</p> <p><b>輸送物性:</b> SmookeとSutherlandモデル化した粘性係数 / 熱伝導率 / 拡散係数、</p>

## 2 FrontFlow/redリリース計画(既存機能)



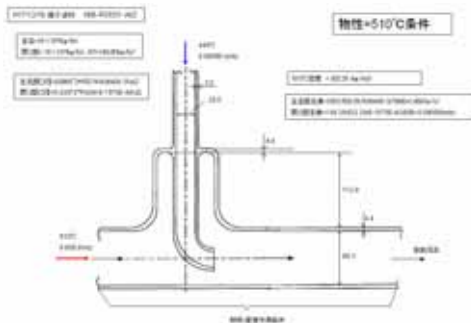
項目	Advance/FrontFlow/redの機能
メッシュ形状	6面体(ヘキサ) / 4面体(テトラ) / 3角柱(プリズム) / 4角錐(ピラミッド) / これらメッシュの混合
メッシュ機能	マルチフレーム / スライディングメッシュ機能 / 不連続周期、不連続ドライバ、不連続スライディング界面、
離散化	有限体積法 / 節点中心法
アルゴリズム	SMAC法(Fractional-Step法) / SIMPLE法 / Rhie-Chow法による圧力振動の抑制 / Muzaferijaの手法による拡散項の精度向上
時間積分	Euler陽解法 / Euler陰解法 / 2次精度クランク・ニコルソン法 / 2次精度Adams-Bashforth法 / 3次精度Adams-Moulton法 / 4次精度ルンゲ・クッタ陽解法
移流項の離散化スキーム	1次精度風上差分 / 2次精度風上差分 / 2次精度風上差分+リミタ(TVD法) / 2次精度中心差分 / 3次精度風上差分+リミタ(TVD法) / 2次上流補間差分法 (US1) / 中心差分と1次風上のブレンド法
行列解法	ICCG法(圧力のポアソン方程式) / Bi-CGSTAB法(圧力のポアソン方程式以外) / マトリクスのベクトル化
結果出力	全ての物理量 / 物理量選択可能アニメーション / 非定常統計量 (全てスカラー量のRe応力) / 流体力6成分の時系列 / 任意点任意物理量の時系列

## 2 FrontFlow/redリリース計画(既存機能)

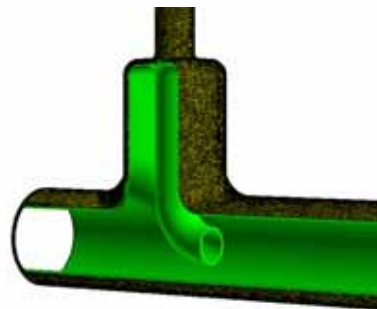
項目	Advance/FrontFlow/redの機能
乱流音	
並列計算	自動領域分割による並列計算、ベクトル化
メッシュ作成	Gridgen等の市販メッシャー
可視化	FIELDVIEW / AVS / MicroAVS / ParaVIEW
ユーザーサブルーチン	初期値 / 流入境界条件 / 壁面 / 質量・運動量・エネルギー・化学種・任意スカラー量のソース項 / 結果出力 / ガスフェーズ反応速度 / 表面熱分解と表面蒸発モデル
BC種類	出入り口：ドライバー、INLET、OUTLET、INJECTOR、静圧、総圧、 壁面：SPONDING壁面法則、SLIP、NO-SLIP、熱伝導3種類境界条件、物質3種類境界条件 その他：対称BC境界、周期境界、スライディング境界、壁面反応境界、壁面熱分解境界 <b>構造連成ツール：固体セル/流体セルプラ出インターフェース</b>
特殊機能	Flamelet - LES燃焼モデル、粒子追跡法多相流、ふく射
動作環境	OS：IRIX64(Ver. 6.5) / RedHat Linux9 / SGI Advance Linux / Windows XP Professional / Windows2000 / SX-8等 詳細はお問い合わせ下さい。

## 3 FrontFlow/red産業界実用例(その1)

- 名称: 1次ナトリウム純化系配管混合部を対象として3次元熱解析
- 目的: 高速増殖炉のレベル1 PSA において、ナトリウム漏えい発生頻度を設定するためには、流体混合部の流体及び構造材の温度挙動を把握し、バウンダリ破損確率を評価する必要がある

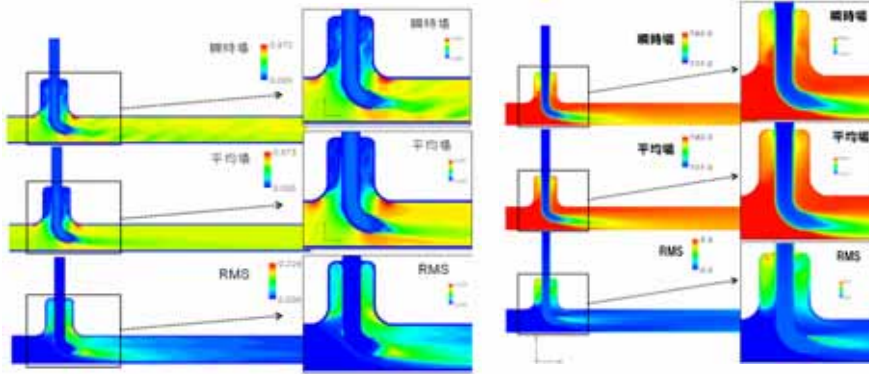


解析条件



解析メッシュモデル

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例 (その1)

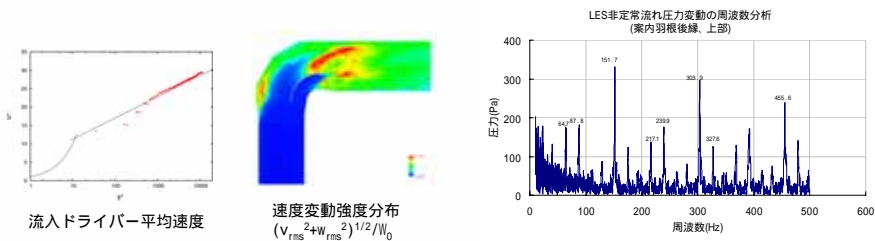


速度分布

温度分布

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例 (その2)

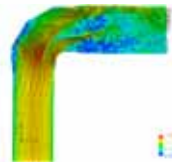
- 名称: 案内羽根付き曲がり管における流体-構造連成解析
- 目的: 案内板溶接部応力解析



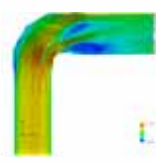
流入ドライバー平均速度

速度変動強度分布  
 $(v_{rms}^2 + w_{rms}^2)^{1/2} / W_0$

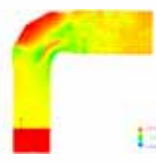
LES非定常流れ圧力変動の周波数分析  
 (案内羽根後縁、上部)



瞬時速度



平均速度



瞬時圧力

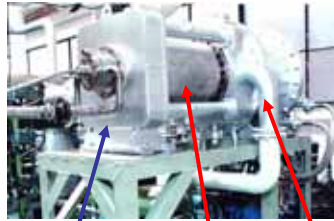


平均圧力

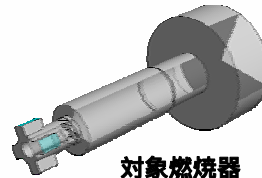
協力: 株式会社電業社機械製作所 技術研究所

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例 (その3)

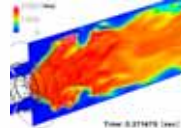
- 名称：ガスタービン燃焼器非定常解析
- 目的：乱流強度による燃焼効率への影響



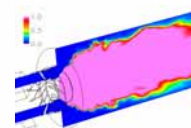
入口チャンバ 燃焼チャンバ 出口チャンバ  
燃焼試験用供試体



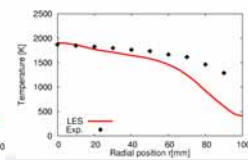
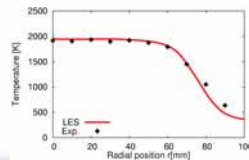
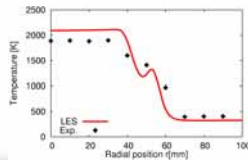
対象燃焼器



温度分布



スカーGの分布

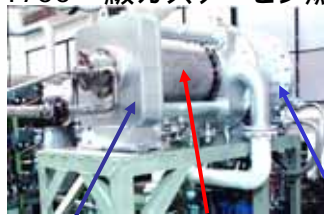


平成19年3月4日

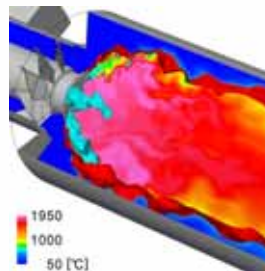
協力：三菱重工業株

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例 (その3)

#### 1700 級ガスタービン燃焼器設計のための乱流燃焼予測

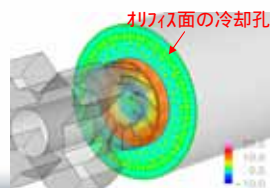


Inlet chamber 燃焼 chamber 出口 chamber  
Test-piece for reacting case

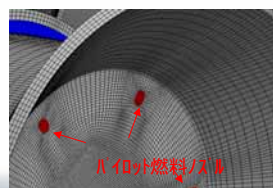


実機詳細形状を再現した希薄予混合乱流火炎の非定常挙動解析に成功

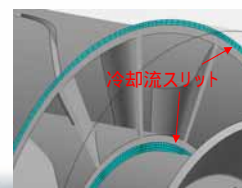
<等値面>  
水色：パイロット火炎面  
赤色：予混合火炎面  
<子午線断面>  
瞬時温度分布



オリフィス面の冷却孔



パイロット燃料ノズル



冷却流スリット

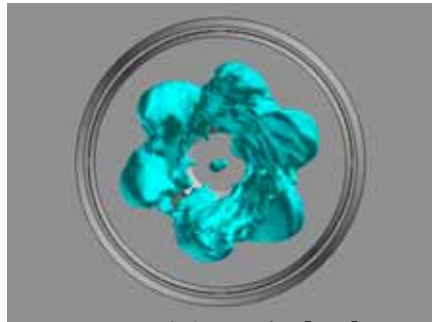
全要素数：3,742,368 (非構造型6面体)

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例(その3)

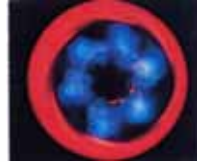
#### Flame shapes (LES vs. Visualization)

- Case A

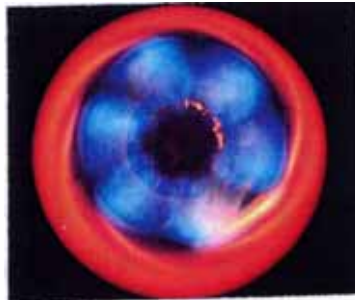
Time-averaged iso-surface  $\xi$



Averaged time: 1/30[sec]



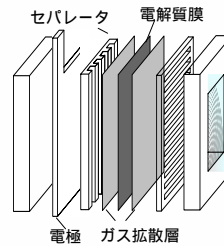
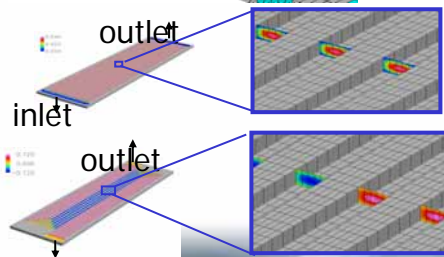
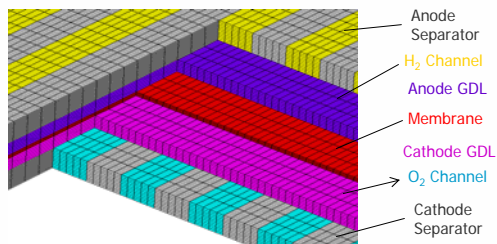
Shutter speed: 1/125[sec]



Shutter speed: 1/30[sec]

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例(その4)

- PEFC 燃料電池の開発



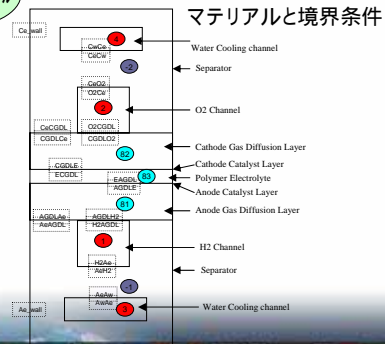
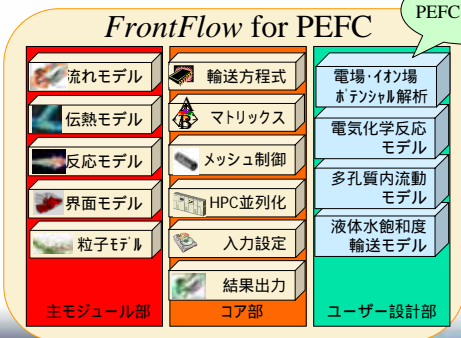
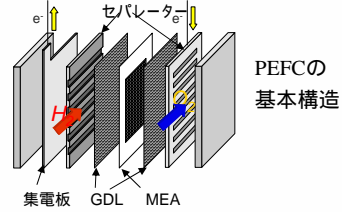
(北大:大島、近久ら) 18

### 3 FrontFlow/red 産業界実用例(その4) つづき

#### FrontFlowによる燃料電池シミュレータ開発

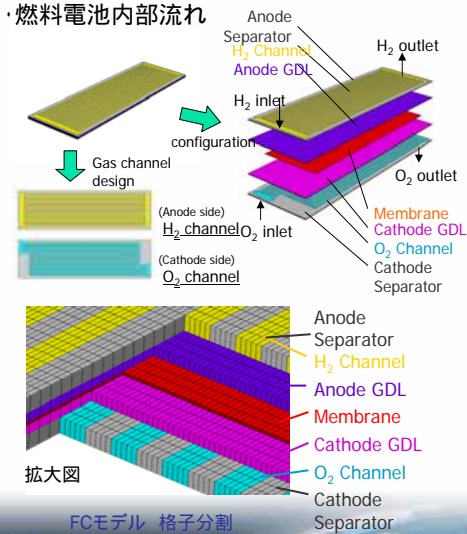
##### FrontFlow+

- 気・液・固体場を含む電場・イオン場のポテンシャル解析
- 触媒層の化学反応、物質交換の解析
- GDL内の物質の移動解析
- (+ 電解質内の物質、イオン分子、電子の移動解析)
- 多孔質内の水分子の凝縮・蒸発モデル

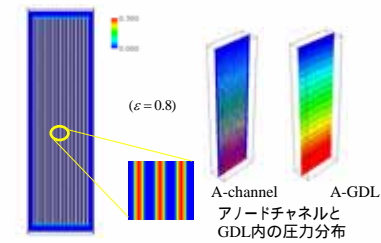


### 3 FrontFlow/red 産業界実用例(その4) つづき

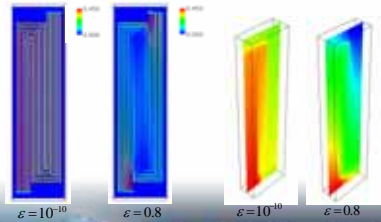
#### 燃料電池内部流れ



#### アノード流路内の流速・圧力およびGDL内の圧力



#### カソード流路の流速分布 カソードGDL内圧力分布





## 4 FrontFlow/red大規模実証例

### 「FrontFlow/Redによる大規模車両空力解析」

電気通信大学

坪倉 誠 助教授

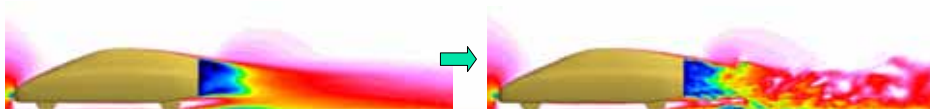
## 定常空力から非定常空力へ

### ■ 意義 ~自動車空力設計現場におけるパラダイムシフトの実現~

- **現状: PCクラスタークラスによる数百万要素規模定常(レイノルズ平均)乱流シミュレーション**
  - そこその精度でそこそ役立っている。  
「風洞実験」の付随的役割(最後はやはり「風洞実験」)。
- **目標: 億要素規模非定常(LES)乱流解析の実現**
  - 急な横風や姿勢変化、路面凹凸、追い越し等に伴う**非定常空力評価**  
「風洞実験」が担うことのできない**真の空力予測手法**としてのLESの地位の確立  
現状では想定しなかった**非定常空力特性に基づく新たな空力設計指針の提案**

定常RANS

非定常LES



## 億要素LESによる大規模空力解析の実現

### ■ 地球シミュレータ共同利用プロジェクト

- H17「戦略的基盤ソフトウェアの開発」
- H18「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」

#### ■ フォーミュラカーの非定常空力評価

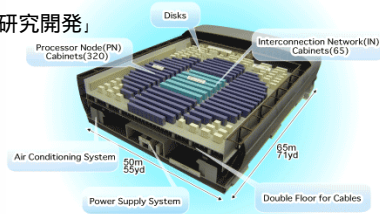
- 流体騒音解析
- 大規模産業機械の高精度構造解析
- タンパク質の大規模電子状態解析
- ナノテクノロジー

#### ■ チームメンバー

- 大島伸行(北大) 山本誠(東理大) 中島卓司(広大)
- 鬼頭幸三(東大) 朴炳湖(電通大)
- 張会来(アドバンス) 大西慶治(アドバンス) 畝村毅(アドバンス)

#### ■ 連携

- 日本レースプロモーション、ルマン、エムワイジー、LOLA

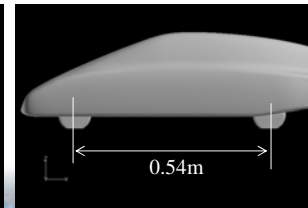
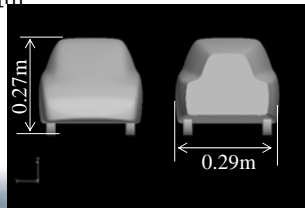
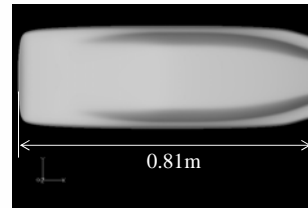


## ASMOモデルによる大規模LESの有用性(1)

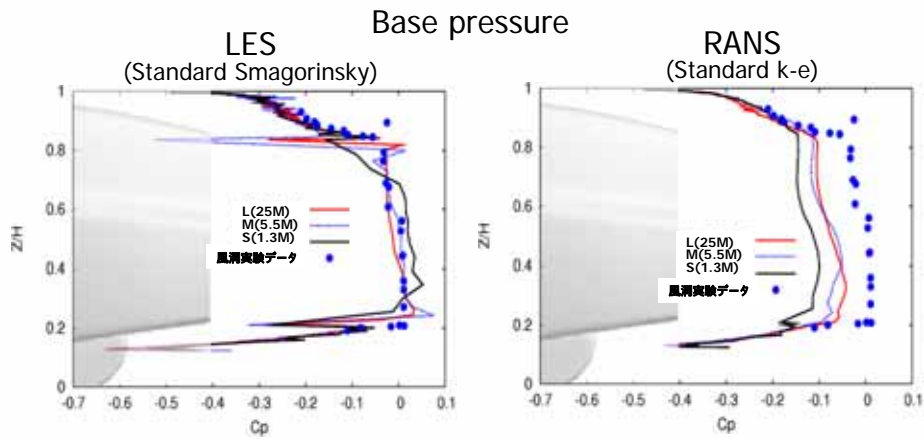
### ■ LESとRANSの比較と格子依存性の検討

- 計算条件
  - 主流速度: 50.0[m/s]
  - 解析領域: 12.2x2.2x1.1[m]
- 解析規模
  - 形状: tetrahedron
  - メッシュ数: 25million, 5.5million, 1.3million
  - 節点数: 4,112,568
- 計算リソース
  - 計算ノード数 : 32(256CPU)
  - メモリサイズ : 150GB
  - 計算時間: 35.6[h]

1/5 wind tunnel model



## ASMOモデルによる大規模LESの有用性(2)



- LES: ベース圧を良好に再現。
- RANS: 空間解像度に従う収束解が風洞データに一致しない(25M)。

## 本年度の課題 ~ 定常空力評価から非定常空力評価へ ~

- (a)フォーミュラカー実走行時の再現による解析の高精度化
  - 車輪回転、車両・地面の相対速度の考慮による高精度化
  - 風洞実験値との定常空力(揚力・抗力)の定量的比較
- (b)車両非定常挙動に影響を与える車両周り非定常渦構造解析
  - 実験データが豊富な産業界との連携(市販四輪車、レース二輪車)
  - 非構造空力解析の産業界への展開
- (c)動的姿勢変化に対応したソフトの改良
  - スライディングメッシュ機構の導入とESでの最適化
  - 車両ヨー角の動的変化に伴う非定常空力変化の解析

## (a)億要素フォーミュラカー空力の定量的解析(1)

•LOLA B03/51 : 1/2 windtunnel test model

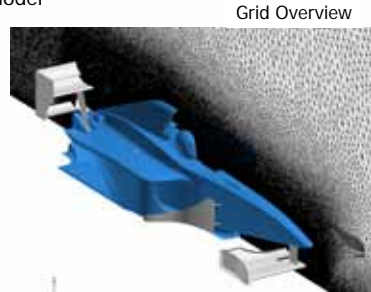
length(T) : 2.26[m]  
 width(B) : 0.89[m]  
 height(H) : 0.48[m]  
 wheel Base : 1.50[m]  
 Front track : 0.75[m]  
 Rear track : 0.69[m]

•Grids

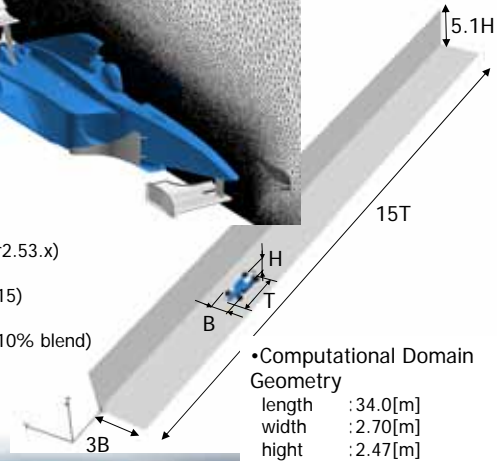
type : tetrahedron  
 elements : 120million(117,060,909)

•Conditions

software : FrontFlowRed for HPC(ver2.53.x)  
 mean flow velocity : 45.0[m/s]  
 turbulence model : LES (Smagorinsky, Cs=0.15)  
 convective discretization scheme :  
 2nd order central + 1st order upwind(10% blend)  
 wall boundary : log-law



Grid Overview



•Computational Domain Geometry  
 length : 34.0[m]  
 width : 2.70[m]  
 high : 2.47[m]

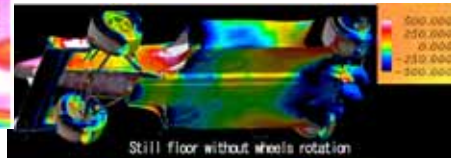
## (a)億要素フォーミュラカー空力の定量的解析(2)

- 実車走行時の再現による解析の高精度化

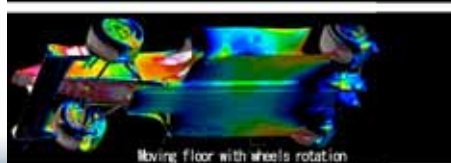


タイヤ回転の影響

床・車両相対速度の影響



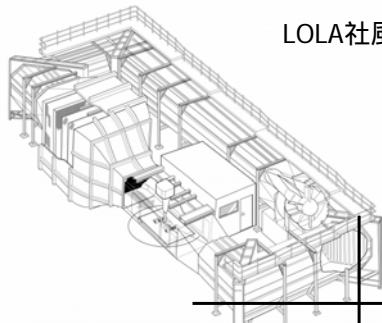
Still floor without wheels rotation



Moving floor with wheels rotation

### (a)億要素フォーミュラカー空力の定量的解析 (3)

LOLA社風洞データとの比較

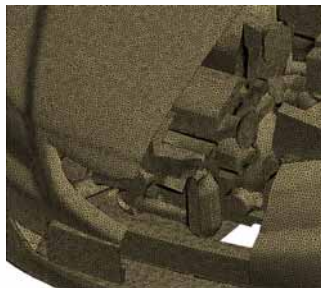


	HPC-LES (present CFD)	Wind tunnel (LOLA Ltd.)
$C_D$ (drag) (Incl. wheels)	1.00	0.91
$C_L$ (lift) (Excl. wheels)	-1.95	-1.93 (High down-force condition)

数%の誤差で定常空力評価を実現!

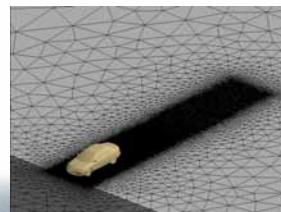
### (b)車両周り非定常渦構造解析(1)

- 市販四輪 (Mazda, Atenza) : 1/1 scale model



surface resolution 12 [mm] ~  
(uniformly redefined)

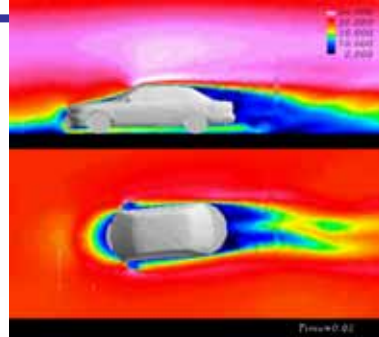
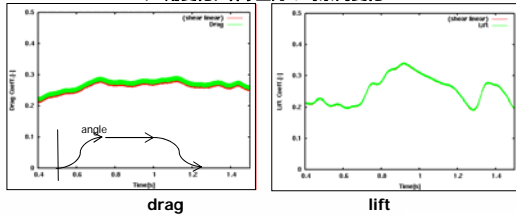
- Grids  
type : tetrahedron  
elements : 37,870,527



### (c)動的姿勢変化への対応

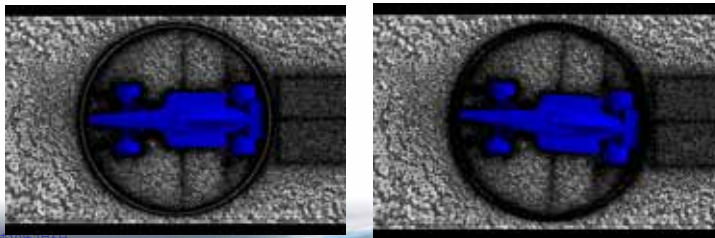
- スライディングメッシュ機構の導入

ヨー角変化に伴う空力の時系列変化



- フォーミュラ解析

(Animation)



### 成果と今後の展望

- FrontFlow/Redによる億要素規模車両空力解析の実現。
- 車両定常走行時を想定したフォーミュラカーの大規模LES解析において、風洞実験データに対して数%の誤差で定常空力を予測。
- 非定常空力評価への展開を目指し、車両周りに発生する非定常渦のLESによる再現性を、市販四輪、レース用二輪車を対象に検討。
- 解析プログラムに車両姿勢変化を扱えるスライディングメッシュ機構を導入し、ヨー角変化に伴う非定常空力を評価。



車両姿勢変化に伴う非定常空力評価と、車両空力連成解析へ

【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

## 流体コード FrontFlow/Blue の成果と研究・開発計画

東京大学 生産技術研究所

教授 加藤 千幸

# 流体コードFrontFlow/Blueの 成果と研究・開発計画

東京大学生産技術研究所  
加藤 千幸



## 講演内容

---

RSS<sup>21</sup>

- プログラム開発の動機
- 開発中のプログラムの特徴
- 製品開発への適用事例
- 今後の予定



# プログラム開発の動機

## 計算機シミュレーションによる設計 の高度化

RSS<sup>21</sup>

複数の問題を同時に解決する設計技術



複雑現象を精度良くかつ高速に予測する技術

### 従来の手法の限界

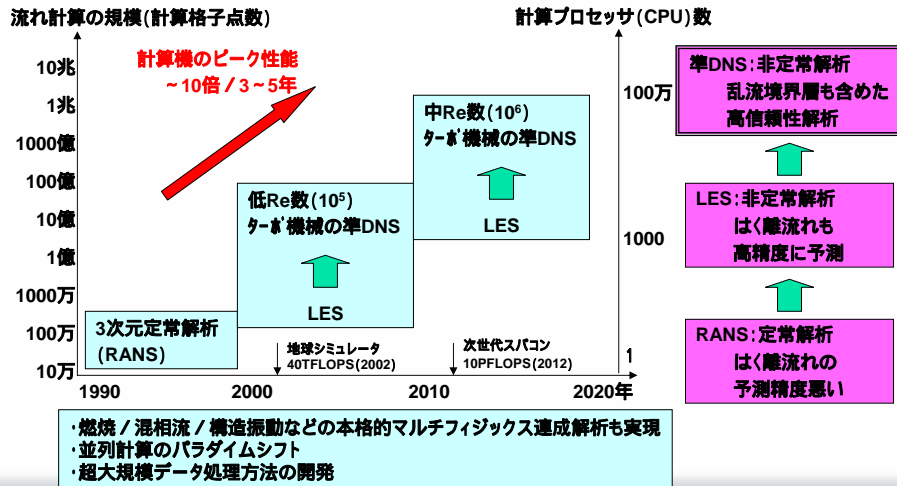
- 時間平均に基づくRANSが乱流解析手法の主流
- 複雑現象の大規模解析が困難

### 本研究開発の革新性

- [予測精度] LESによる高精度な乱流解析
- [高速な大規模解析] スカラー/ベクトルマシンにおいて高速に動作
- [マルチフィジクス解析] 騒音・振動・反応・混相流等の解析機能

## 乱流の数値解析の動向と将来展望

- 5～10年後には予測精度が飛躍的に向上



開発中プログラムの特徴

## 開発プログラム FrontFlow/Blue

---

### 特徴:

LESに基づく非定常流れ場の高精度

### 解析対象:

ターボ機械内部流れ, 空力騒音, 他

### 解析手法および機能:

空間離間化: 有限要素法(六面体, 四面体)

乱流モデル: LES(SSM, DSM), DES

圧力解法: Fractional-Step法

運動方程式: 陽解法/陰解法 (ともに時間2次精度)

オーバーセット法によるマルチフレーム機能

並列解析機能

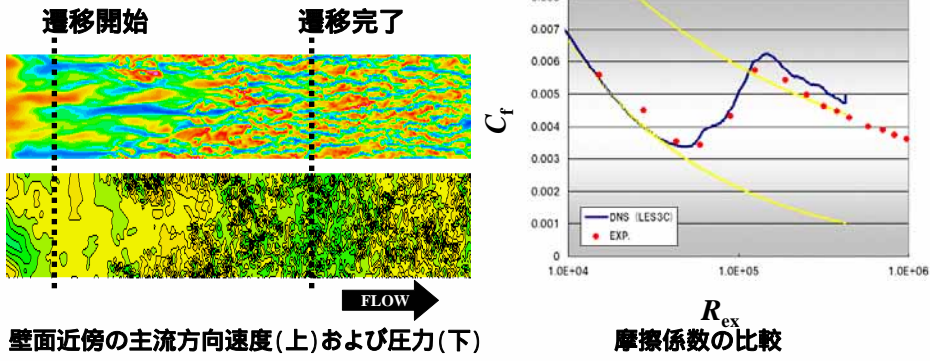
## 従来市販コードとの差別化

---

1. 乱流現象の高精度予測
2. 乱流騒音の高精度予測
3. 非定常キャビテーション流れ解析
4. 高速・大規模計算の実現

## 乱流現象の高精度予測

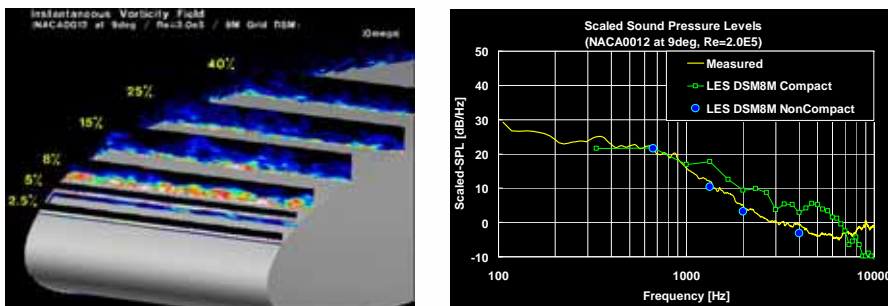
### ■平板境界層のバイパス遷移の予測



( $R_{ex}=1.0 \times 10^4 \sim 5.0 \times 10^5$ , 流入乱流強度6%)

## 乱流騒音の高精度予測

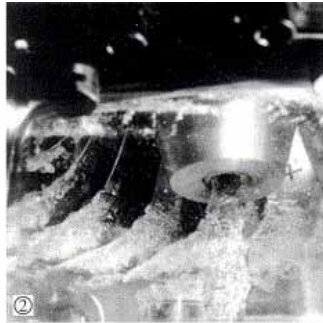
### ■乱流境界層騒音の定量的予測を実現



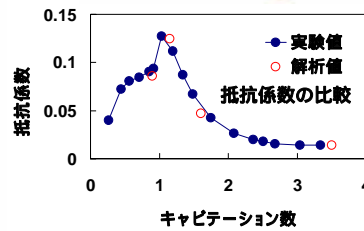
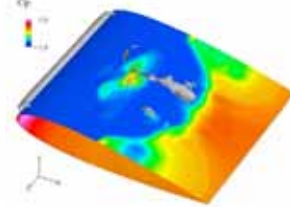
(NACA0012, 迎角9度,  $R_e=2.0 \times 10^5$ )

# 非定常キャビテーション流れ解析

- ターボ機械内部の非定常キャビテーション現象の高精度な予測を実現



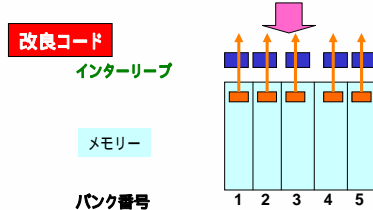
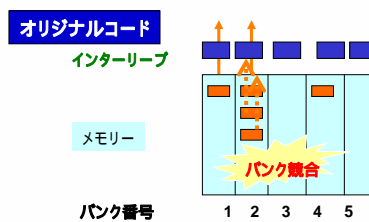
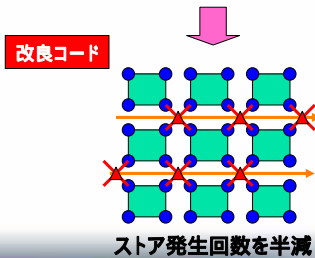
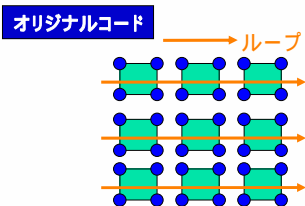
ターボ機械内部のキャビテーションの例  
Processing, Volume 20, Issue 4, May 2006, Pages 983-1007



非定常キャビテーション流れの解析例

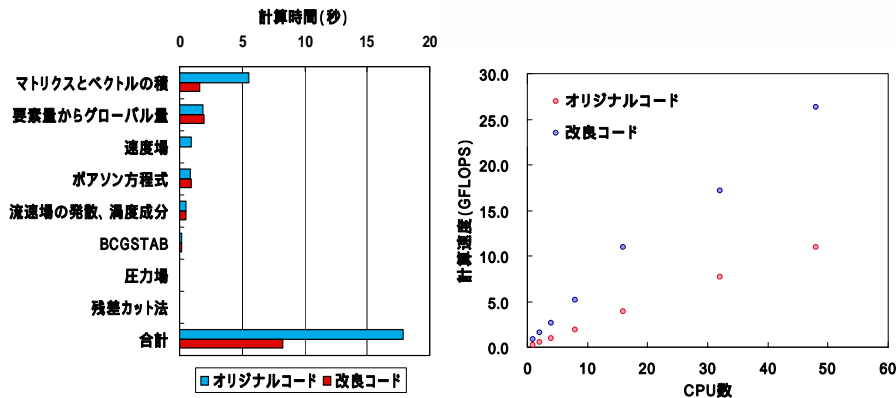
# 高速・大規模計算の実現 - 1/2

- ロード/ストアアルゴリズムの改良(スカラー機)
- バンク競合の低減(ベクトル機)



配列宣言の最適化によりバンク競合を回避

## 高速・大規模計算の実現 - 2/2



スカラー機上の計算速度の向上

並列計算性能

PCクラスターで10%の実効性能を実現

地球シミュレータでも2TFLOPSを実現見通し(128ノード, 対比性能比20%)

# 製品開発への適用事例

乱流境界層騒音

- 新幹線車間部の空力音源解析
- 軸流ファンの空力音響解析
- プロペラファンの空力音響解析

流体・構造振動騒音

- ポリゴンミラーの流体・振動騒音解析

非定常キャビテーション流れ

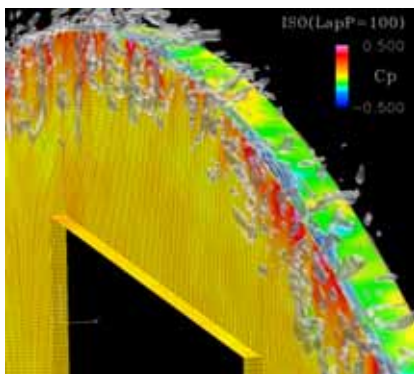
- インデューサポンプのキャビテーション流れ解析
- ドラフトチューブ内部のキャビテーション流れ解析

JR東日本との共同研究

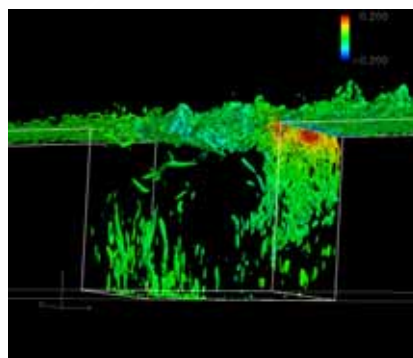
RSS21

## 新幹線車間部の空力音源解析 - 1/2

### ■数値解析による騒音発生メカニズムの解明



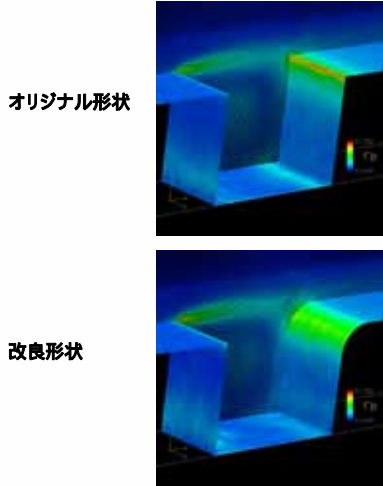
車間全体モデル



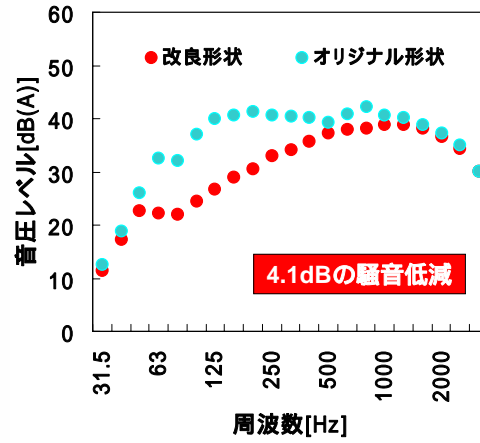
車間要素モデル

主要音源: 後方エッジへの乱流渦の衝突

## 新幹線車間部の空力音源解析 - 2/2



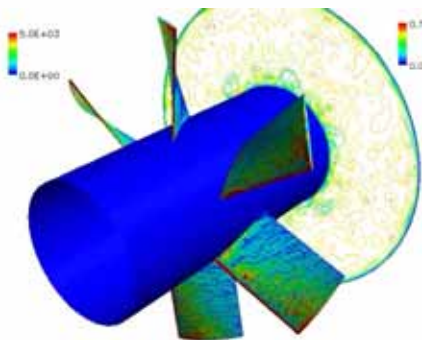
形状改良による音源の低減



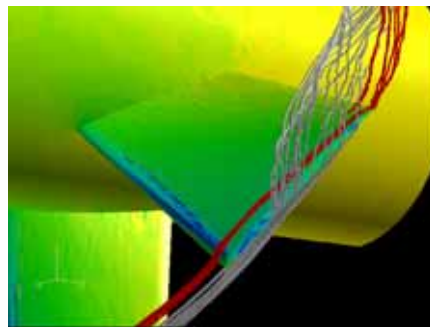
騒音低減効果 (現車換算推定値)

## 軸流ファンの空力音響解析 - 1/2

### ■ターボ機械の乱流境界層騒音の予測を実現



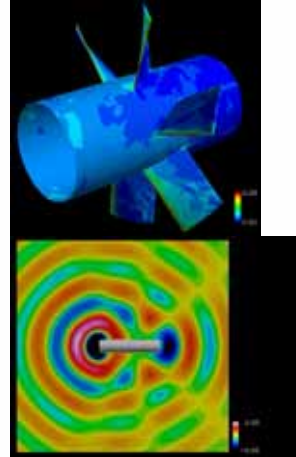
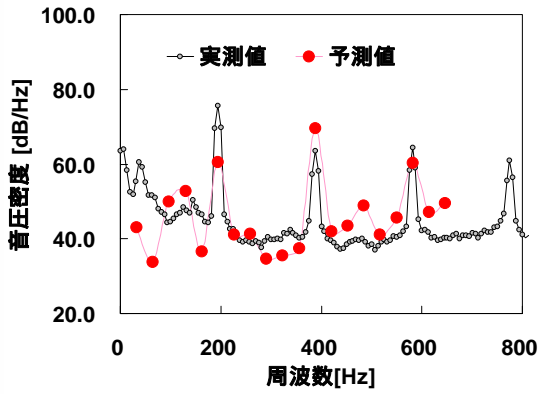
動翼表面の乱流境界層



動翼先端のもれ渦



## 軸流ファンの空力音響解析 - 2/2



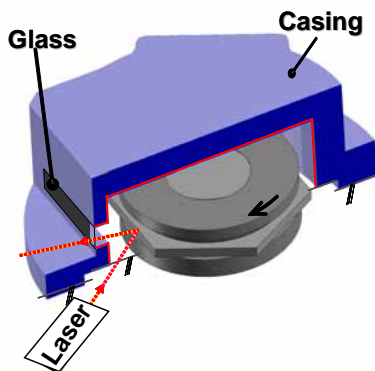
騒音スペクトルの実測値との比較

194Hzの音源と音場

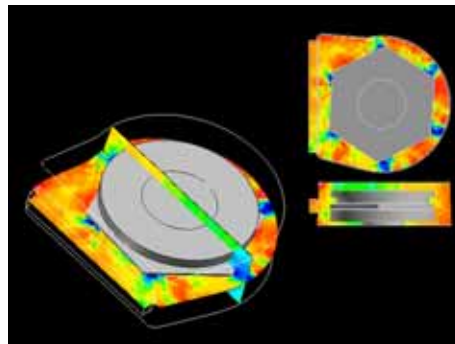
騒音スペクトルの定量的予測を実現・各周波数の音源を解明

## ポリゴンミラーの流体・振動騒音解析 - 1/2

- 流体・構造振動・音響解析により騒音発生メカニズムを解明

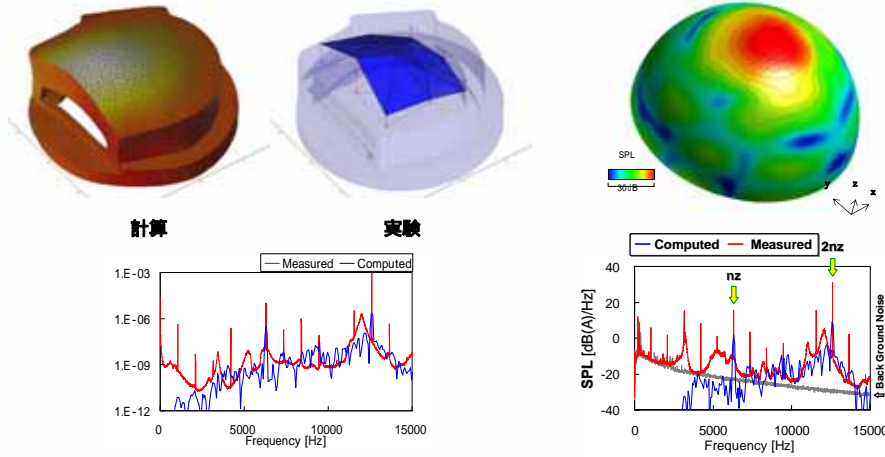


計算モデル



圧力変動の解析結果

# ポリゴンミラーの流体・振動騒音解析 - 2/2



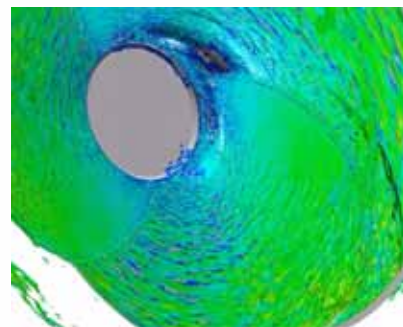
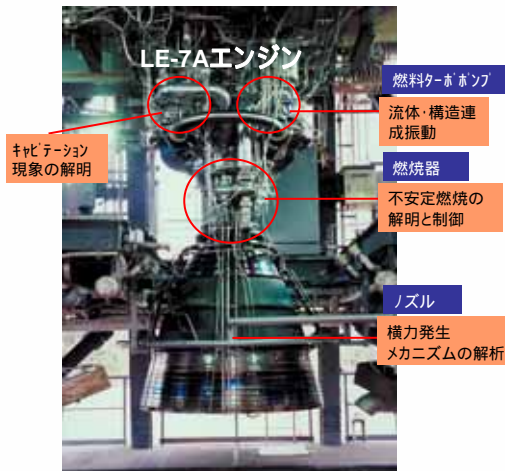
固体部を伝播する弾性波の解析

周辺の音響場の解析

主要音源: ケーシング上面の膜振動 騒音低減形状の特許出願中

# インデューサポンプのキャビテーション流れ解 - 1/2

■非定常キャビテーション現象の予測・解明によりロケットエンジンの信頼性向上に貢献

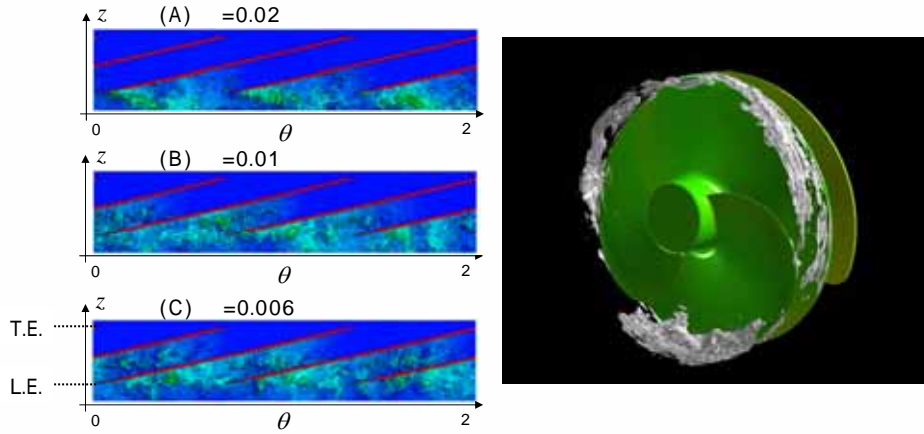


動翼表面の乱流境界層も含めたキャビテーション解析

ロケットエンジンの開発課題

## インデューサポンプのキャビテーション流れ解 - 2/2

■非定常キャビテーション現象の予測・解明によりロケットエンジンの信頼性向上に貢献



吸込み圧力によるキャビテーションの変化

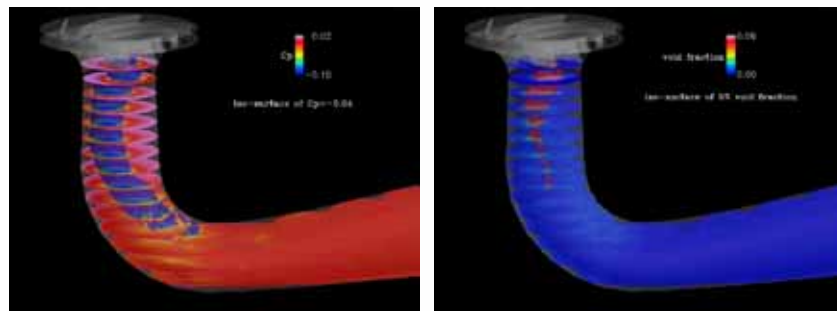
キャビテーションの非定常変動

2006.07.28

23

## ドラフトチューブ内部のキャビテーション流れ解析-1/2

■非定常キャビテーション現象の予測・解明  
ドラフトチューブの運転範囲拡大や安全性の向上に貢献



圧力分布

キャビテーション分布

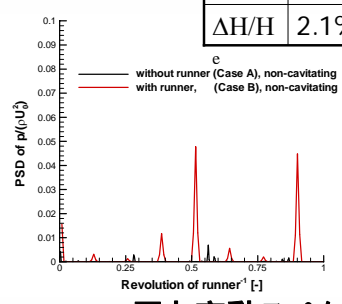
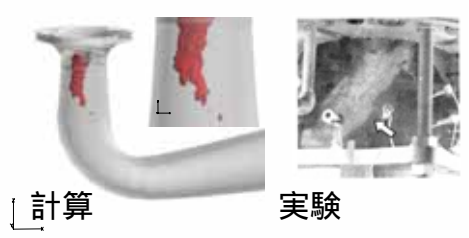
2006.07.28

24

## ドラフトチューブ内部のキャビテーション流れ解析-2/2

■非定常キャビテーション現象の予測・解明  
ドラフトチューブの運転範囲拡大や安全性の向上に貢献

	Exp.	LES
$f/f_n$	0.48	0.52
$\Delta H/H$	2.1%	1.9%



キャビテーションの可視化結果

圧力変動スペクトル

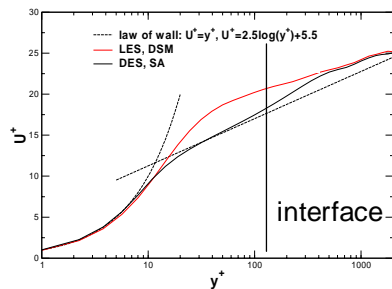
今後の予定

# 開発スケジュール

- 2003.06 (初期バージョン) **FFB ver.01**: 六面体要素  
時間空間2次精度、高精度風上化手法  
マルチフレーム機能、オーバーセット機能  
並列計算機能、乱流音解析機能
- 2004.06 **FFB ver.02**: Fractional Step法の導入
- 2005.06 **FFB ver.03**: 陰的解法の導入
- 2006.06 **FFB ver.04**: 四面体要素  
キャピテーション解析機能
- 2007.02 **FFB ver.04.02**: 高速化版
- 2007.07 (最終バージョン) **FFB ver.05**: Detached Eddy Simulation  
熱輸送解析機能

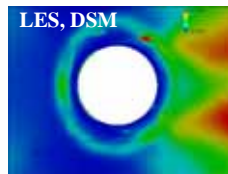
# Detached Eddy Simulation

- RANS/LESのハイブリッドに基づく乱流解析手法
- 実装・基礎検証が終了し、現在実用問題での検証中

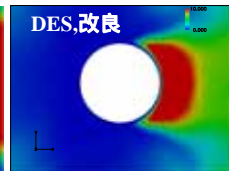
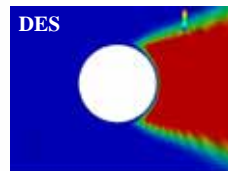


主流方向平均速度分布の比較

チャンネル内乱流( $R_e = 2000$ )への適用例  
(グリッド数 64<sup>3</sup>)



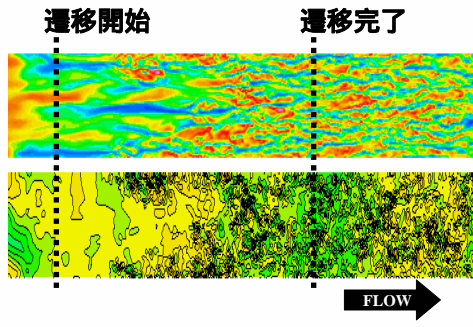
渦粘性係数の比較



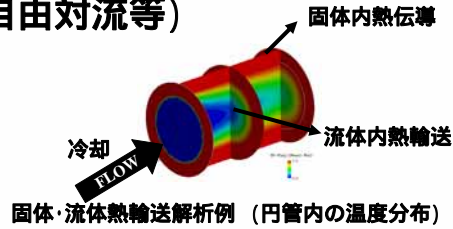
円柱周り流れ( $R_e = 10^4$ )への適用例  
オリジナルモデル(SA)の改良を検討

## 熱輸送解析機能

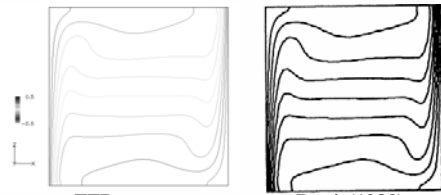
- 乱流境界層を解像した熱伝達係数の直接的予測
- 多機能性(固体熱伝導、自由対流等)



平板乱流遷移の解析例  
 ( $R_{ex}=1.0 \times 10^4 \sim 5.0 \times 10^5$ , 流入乱流強度6%)  
 今後、熱輸送解析も実施する。



固体・流体熱輸送解析例 (円管内の温度分布)



自由対流解析例  
 ( $R_a=10^6$ のサーマルキャビティ - 流れ) 29

## 開発メンバー

### ソルバー・周辺ソフトウェアの開発

- |      |             |
|------|-------------|
| 加藤千幸 | 東京大学生産技術研究所 |
| 山出吉伸 | みずほ情報総研(株)  |
| 郭陽   | 東京大学生産技術研究所 |
| 西村香純 | アドバンスソフト(株) |

### ソルバーの高速化

高度情報科学技術研究機構

【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

## 高性能磁場解析システム REVOCAP\_Magnetic

九州大学 大学院工学研究院

教授 金山 寛

# 高性能磁場解析システム REVOCAP\_Magnetic

九州大学大学院  
金山 寛



## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

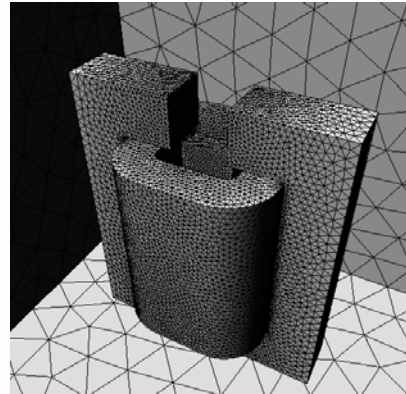
### ■ 特徴

- 非線形静磁場問題 および 時間調和渦電流問題の有限要素解析
- 階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)による, 負荷分散を行った並列処理
- 大規模解析
  - 5,000万自由度の非線形静磁場解析が約8時間半(32並列)
  - 4,400万複素自由度(実質約9,000万自由度)の時間調和渦電流解析が5時間弱(32並列)



## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

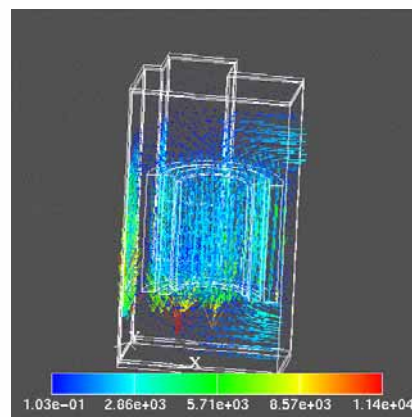
- 非線形静磁場解析
  - 強磁性体の非線形特性を考慮
  - 定式化
    - $A$ 法
  - 非線形反復手法
    - Newton法
    - Picardの逐次近似法
  - 結果出力
    - 磁束密度 $B$ ([T] or [G])または磁場 $H$ ([A/m] or [A/mm])



TEAM Workshop Problem 20  
メッシュ図

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

- 時間調和渦電流解析
  - 交流電流を扱うことに特化した手法
  - 定式化
    - $A$ 法
    - $A-\phi$ 法
  - 結果出力
    - 磁束密度 $B$ ([T] or [G])または磁場 $H$ ([A/m] or [A/mm])
    - 渦電流密度 $J_e$ ([A/m<sup>2</sup>] or [A/mm<sup>2</sup>])



3相変圧器1/6モデル  
磁束密度・実部

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

- 階層型領域分割法  
(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)
  - インターフェース問題
  - 反復型領域分割法  
(Iterative Domain Decomposition Method)
  - 階層型領域分割法

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

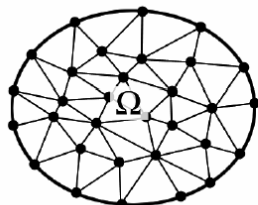
- インターフェース問題

$$Ku = f$$

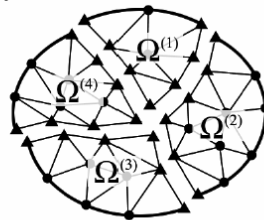
$K$  : 係数行列(対称)

$u$  : 未知ベクトル

$f$  : 既知ベクトル



● ... Degree of freedom

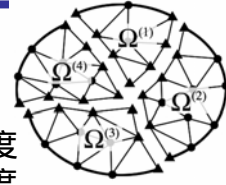


● ... Degree of freedom in the interior  
▲ ... Degree of freedom on the interface

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega^{(i)}, \quad \gamma^{(i)} : \text{領域} \Omega^{(i)} \text{に関する領域間境界}$$

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

### ■ インターフェース問題



$$u^{(i)} = \begin{bmatrix} u_I^{(i)} \\ u_B^{(i)} \end{bmatrix}$$

$I$  : 部分領域内部自由度  
 $B$  : 領域間境界上自由度

$$K^{(i)} = \begin{bmatrix} K_{II}^{(i)} & K_{IB}^{(i)} \\ K_{IB}^{(i)T} & K_{BB}^{(i)} \end{bmatrix}, \quad f^{(i)} = \begin{bmatrix} f_I^{(i)} \\ f_B^{(i)} \end{bmatrix}, \quad R^{(i)} = \begin{bmatrix} R_I^{(i)} & 0 \\ 0 & R_B^{(i)} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} K_{II}^{(1)} & 0 & \dots & 0 & K_{IB}^{(1)} R_B^{(1)T} \\ 0 & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & K_{II}^{(N)} & K_{IB}^{(N)} R_B^{(N)T} \\ R_B^{(1)} K_{IB}^{(1)T} & \dots & \dots & R_B^{(N)} K_{IB}^{(N)T} & \sum_{i=1}^N R_B^{(i)} K_{BB}^{(i)} R_B^{(i)T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_I^{(1)} \\ \vdots \\ u_I^{(N)} \\ u_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_I^{(1)} \\ \vdots \\ f_I^{(N)} \\ \sum_{i=1}^N R_B^{(i)} f_B^{(i)} \end{bmatrix}$$

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

### ■ インターフェース問題

- 領域間境界上自由度について

$$S u_B = g$$

➡ 反復法で解く

$$S^{(i)} = K_{BB}^{(i)} - K_{IB}^{(i)T} (K_{II}^{(i)})^{-1} K_{IB}^{(i)}$$

: ローカルシュアコンプリメント行列

$$S = \sum_{i=1}^N R_B^{(i)} S^{(i)} R_B^{(i)T} \quad \text{: シュアコンプリメント行列}$$

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

### ■ 反復型領域分割法(ex:CG法)

Choose  $u_B^0$ ;

In each subdomain

Compute  $u_i^{(i)0}$  by

$$K_{II}^{(i)} u_i^{(i)0} = f_I^{(i)} - K_{IB}^{(i)} R_B^{(i)T} u_B^0;$$

$$r^{(i)0} = K_{IB}^{(i)T} u_i^{(i)0} + K_{BB}^{(i)} R_B^{(i)T} u_B^0 - f_B^{(i)}$$

$$r^0 = \sum_{i=1}^N R_B^{(i)} r^{(i)0};$$

$$p^0 = r^0;$$

for  $n = 0, 1, \dots;$

In each subdomain

Compute  $p_i^{(i)n}$  by

$$K_{II}^{(i)} p_i^{(i)n} = -K_{IB}^{(i)} R_B^{(i)T} p^n;$$

$$q^{(i)n} = K_{IB}^{(i)T} p_i^{(i)n} + K_{BB}^{(i)} R_B^{(i)T} p^n;$$

$$q^n = \sum_{i=1}^N R_B^{(i)} q^{(i)n};$$

$$\alpha^n = (r^n)^H r^n / (p^n)^H q^n;$$

$$u_B^{n+1} = u_B^n - \alpha^n p^n;$$

$$r^{n+1} = r^n - \alpha^n q^n;$$

If  $\|r^{n+1}\| < \delta \|r^0\|$ , break;

$$\beta^n = (r^{n+1})^H r^{n+1} / (r^n)^H r^n;$$

$$p^{n+1} = r^{n+1} + \beta^n p^n;$$

end;

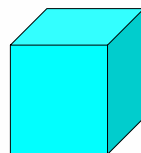
9

この部分は各部分領域で独立に計算可能であり、並列化が容易  
この部分の計算が全体の9割以上を占めるため、高い並列化効率を得やすい

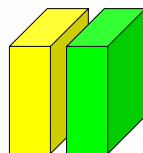
## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b (機能)

### ■ 階層型領域分割法

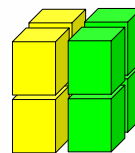
- 反復型領域分割法を効率よく並列計算機環境に実装するための手法
- 計算対象を2段階の階層型に分割する
- 最適分割数を取りやすい
- 部分領域数がプロセッサ数より十分に大きくなるので、負荷分散が容易



Whole domain



Parts



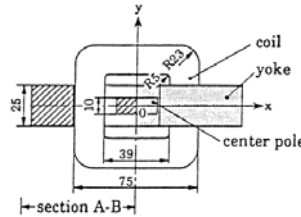
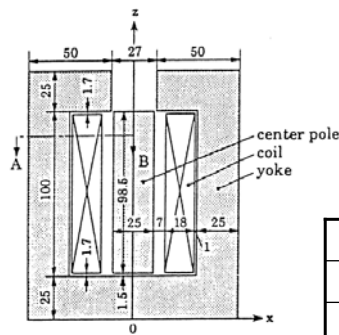
Subdomains

10

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 大規模非線形静磁場解析

#### ■ TEAM Workshop Problem 20



Yoke	SS400
Center pole	
Coil	ポリイミド電線を341ターン巻いたもの

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 大規模非線形静磁場解析

#### ■ TEAM Workshop Problem 20

	elements	DOF	subdomains	DOF on interface
team20(1)	4,412,706	5,174,146	32 x 1,400	2,232,789
team20(2)	8,802,084	10,298,638	32 x 2,800	4,464,623
team20(3)	17,931,856	20,941,837	32 x 5,600	9,067,744
team20(4)	26,813,542	31,286,845	32 x 8,400	13,592,967
team20(5)	34,917,602	40,722,854	32 x 11,200	17,782,606
team20(6)	43,141,979	50,295,288	32 x 14,000	22,063,800

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 大規模非線形静磁場解析

#### ■ TEAM Workshop Problem 20

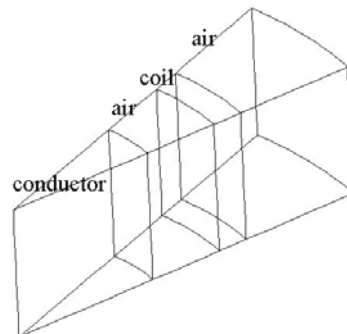
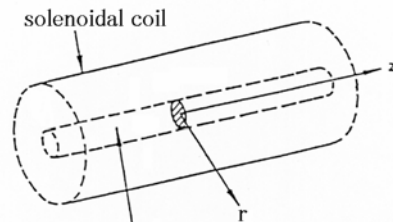
	iteration counts (Newton method)	CPU time [s]	Memory per CPU [MB]
team20(1)	2	2,048	64.9
team20(2)	2	4,348	129
team20(3)	2	9,826	262
team20(4)	2	16,441	392
team20(5)	2	23,337	512
team20(6)	2	31,111	633

PC cluster: Pentium 4 3.0GHz x 32 13

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 大規模時間調和渦電流解析

#### ■ ケーキモデル



- Excitation current density :  $|\vec{J}| = 50.0 [\text{A/m}^2]$
- Magnetic reluctivity :  $\nu = 1/(4\pi \times 10^{-7}) [\text{m/H}]$
- Conductivity (conductor) :  $\sigma = 7.7 \times 10^6 [\text{S/m}]$
- Angular frequency :  $\omega = 2\pi \times 60 [\text{rad/s}]$

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

- 大規模時間調和渦電流解析
  - ケーキモデル

	elements	DOF	subdomains	DOF on interface
cake(1)	4,310,648	5,472,186	32 x 1,250	2,360,218
cake(2)	8,788,303	11,098,344	32 x 2,500	4,812,371
cake(3)	17,065,354	21,470,601	32 x 5,000	9,449,410
cake(4)	25,917,735	32,537,036	32 x 7,500	14,323,419
cake(5)	34,814,775	43,546,445	32 x 10,000	19,110,895

## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

- 大規模時間調和渦電流解析
  - ケーキモデル

	iteration counts	CPU time [s]	Memory per CPU [MB]
cake(1)	460	1,210	115
cake(2)	570	2,898	233
cake(3)	735	6,789	512
cake(4)	891	12,400	685
cake(5)	935	17,228	913

PC cluster: Pentium 4 3.0GHz x 32

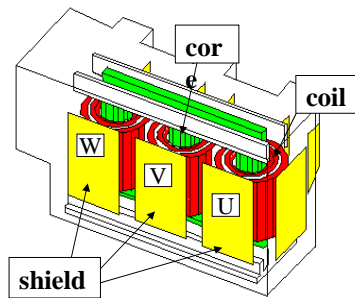
## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 熱との連成問題

- 解析対象: 変圧器全体
- コイル(U相,V相,W相),鉄心,シールド,タンクより構成
- コイル: 各相流れる電流の大きさ,方向が異なる三重の巻き線から成り,各相において電流の総和は0[A]

コイル電流[ $\times 10^3$ A]

	U相	V相	W相
内側	-159.3+0.0i	79.7-138.0i	79.7+138.0i
中側	-303.6+0.0i	151.8-262.9i	151.8+262.9i
外側	462.9+0.0i	-231.5+400.9i	-231.5-400.9i

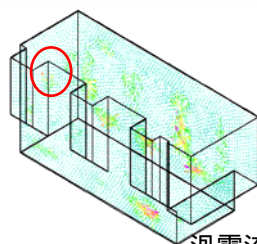


平成19年2月4日

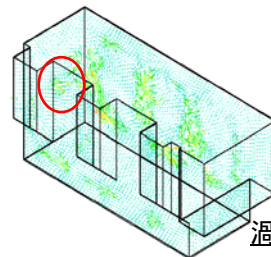
## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

### ■ 熱との連成問題

- 時間調和渦電流解析
  - シールド間の隙間に対応する部分に発生
  - 「ポケット部」の角にも比較的大きな渦電流が発生
  - 渦電流密度の最大値: $9.699 \times 10^3$  [A/m<sup>2</sup>]



渦電流密度(実部)



渦電流密度(虚部)

平成19年2月4日

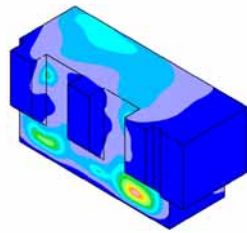


## REVOCAP\_Magnetic Ver.0.2b

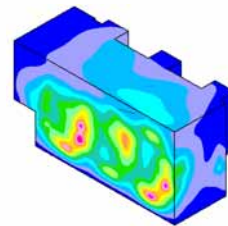
### ■ 熱との連成問題

#### ■ 熱伝導解析

- 温度の高い部分と電流密度の高い部分が対応
- シールド間の隙間に対応する部分に高温部分
- 「ポケット」部の渦電流に対応した部分にも高温部



温度分布(1)



温度分布(2)

## 終わりに

- 機能拡張・高速化を順次行っていく
- 磁場解析以外の解析ソフトウェアとのインターフェース整備
- 実証問題を使った連成解析

【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

プレポストシステム REVOCAP\_Mesh, REVOCAP\_Visual

アドバンスソフト株式会社

主任研究員 福永 守高

革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

**プレポストシステム**  
REVOCAP\_Mesh, REVOCAP\_Visual

サブテーマ・サブリーダー: アドバンスソフト(株) 福永 守高



**連成プリポスト特有の要件**

- 複数種の解析コード用のメッシュ・データを同時にハンドリングできること  
(ハンドリングするとは、同時に表示できて境界条件の付与、材料値が付与できること)
- 連成カップリング用のプリ処理が出来ること

## 一般プリポスト・プロセッサの要件1

---

- CADデータを解釈できること
- CADデータからメッシュが生成できること
- CADデータ、メッシュ・データを可視化できること
- 可視化データを通じて境界条件、物性値の付与ができること

## 一般プリポスト・プロセッサの要件2

---

- 解析コードの入力データが生成、出力できること
- 解析コードの出力データを読み込み、可視化ができること

## 連成機能以外に考えられる固有の要件

- 公開されるプリポスト・プロセッサでありユーザーによる拡張、改変が容易であること
- 付随要件1. 可視化プログラミングが容易であること
- 付随要件2. GUIプログラミングが容易であること
- 費用負担がないこと

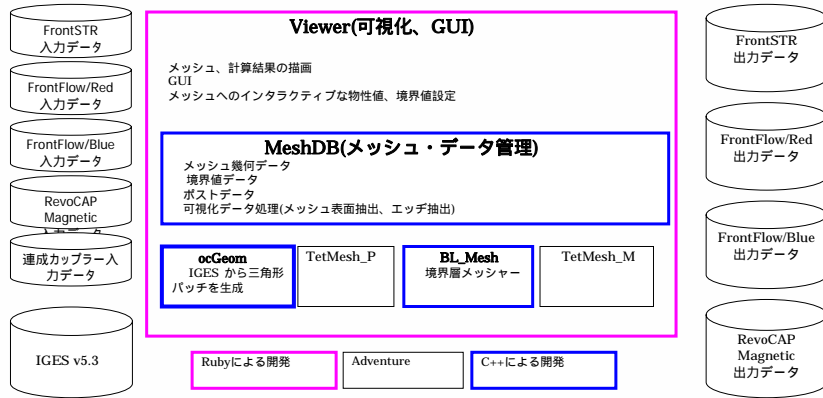
日本のオブジェクト指向スクリプト言語 **Ruby**

## プリポスト開発に必要なプログラミング技術

- CADデータ解釈  
B-Repデータ構造(トポロジー)の解釈、点、円弧、直線のプリミティブ形状の解釈、自由曲線(ベジエ、NURBS)、自由曲面(ベジエ、NURBS)の解釈、コピーエンティティの解釈
- メッシュ生成  
CADデータ表面を三角形分割(Triangle Patch Generator)  
三角形パッチを詳細でスムーズな三角形“再”分割(Surface Mesh)  
Surface MeshデータからTetra, PrismのSolid要素を生成
- メッシュ・データ管理  
可視化インターフェース(マウスを使って境界条件を付与)の為の表面抽出、エッジ抽出  
解析コード入力書式への変換出力、解析コード出力の入力変換
- 可視化(3Dグラフィックス)  
プリ処理でのメッシュ表示、境界条件表示  
ポスト処理でのコンター表示、ベクトル表示
- GUIコマンド処理  
文字どりのGUI(ダイアログボックス、メニューコマンド、テキストボックス、ボタン etc...)

## アプリケーション全体構成

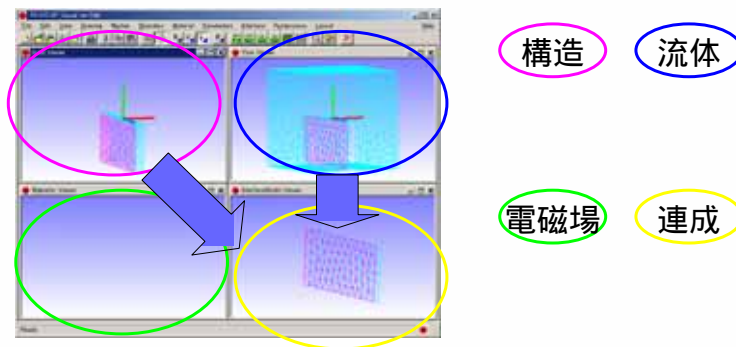
### ■ アプリケーション構成図



## 連成固有要件への対応

### ■ 連成特有の要件に合致する機能

解析種類固有のViewから連成界面をマウス選択 InterfaceModel View  
へ転送する事でプリ・インターフェース・モデルを構築



## 一般要件への対応1

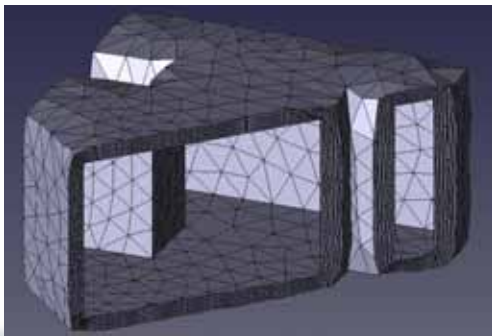
- CADデータの解釈～読み込み
- メッシャー前処理として三角形パッチ生成機能

IGES V5.3へ対応するフリー・ライブラリーを用いて三角形パッチ生成機能を作成することで対応。

ライブラリー名: openCASCADE

## 一般要件への対応2

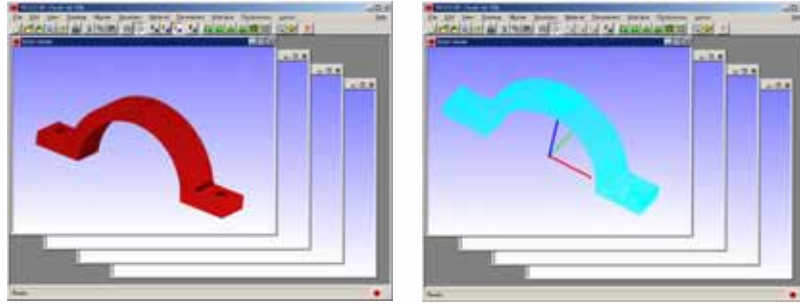
- メッシュ生成機能
  - ・ADVENTURE プロジェクトからSurfaceメッシャーとしてTetMesh\_P、四面体メッシャーとしてTetMesh\_Mを導入。
  - ・**境界層メッシャー**(プリズム・メッシャー)としてBL\_Mesherを開発中。



開発中の境界層メッシャーによるメッシュ生成(断面図)

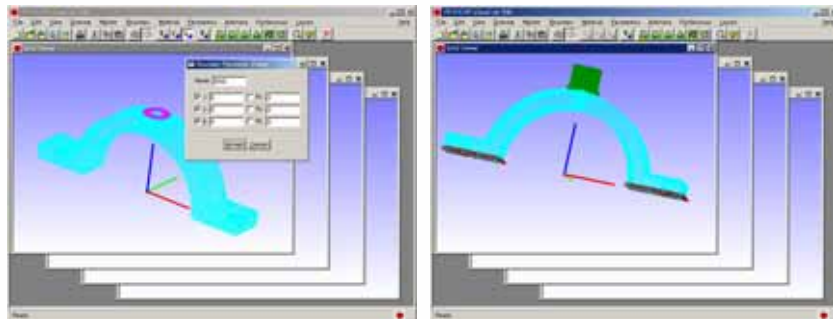
## 一般要件への対応3

- 3Dグラフィックス機能(プリ処理)  
CADデータ&メッシュ・データの表示



## 一般要件への対応4

- 可視化インターフェース  
メッシュへの境界条件の付与、材料データの付与





## 一般要件への対応5

- FrontSTR、FrontFlow/red、FrontFlow/blue、REVOCAP\_MagneticへのI/Oを開発

### [対応データ書式]

Gridデータ対応書式: HEC\_MW形式(FSTR)、GF Ver2(FFR)、GF(FFB)、\*.fgr(Magnetic)

Controlデータ対応書式: hecmw\_ctrl.dat(FSTR全体制御データ)、\*.cnt(FSTR解析制御データ)、fflow.ctl(FFR)、PARMLES3C(FFB)、\*.dat(Magnetic物性値)、mtrl.dat(Magnetic物性データ)、coilデータファイル、\*.cnd(Magnetic解析条件)

## 一般要件への対応6

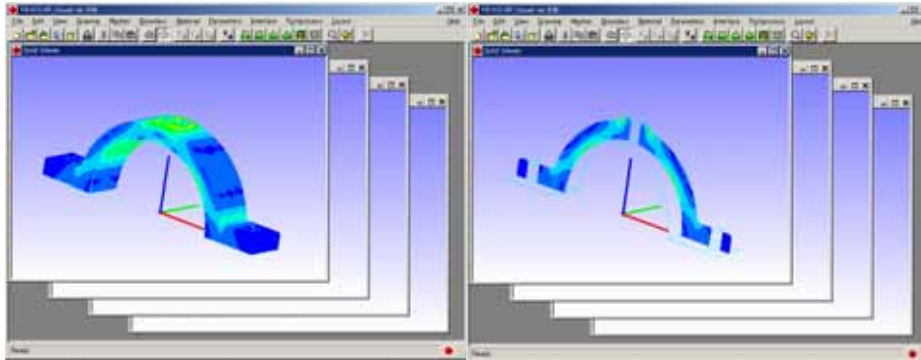
- 3Dグラフィックス機能(ポスト処理: 解析結果データの表示)

対応書式: \*.res形式(FrontSTR), MicroAVS非構造メッシュデータ

- 塗りつぶしコンター(FrontSTR, FrontFlow/red, FrontFlow/blue, REVOCAP\_Magnetic)
- 等値面(FrontSTR, FrontFlow/red, FrontFlow/blue, REVOCAP\_Magnetic)
- 変形図(FrontSTRのみ)
- 塗りつぶし断面コンター(FrontSTR, FrontFlow/red, FrontFlow/blue, REVOCAP\_Magnetic)

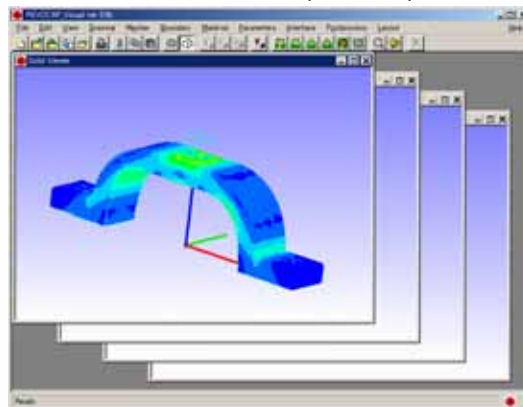
## 一般要件への対応7

- FrontSTRポスト処理 (表面コンター、断面コンター)



## 一般要件への対応8

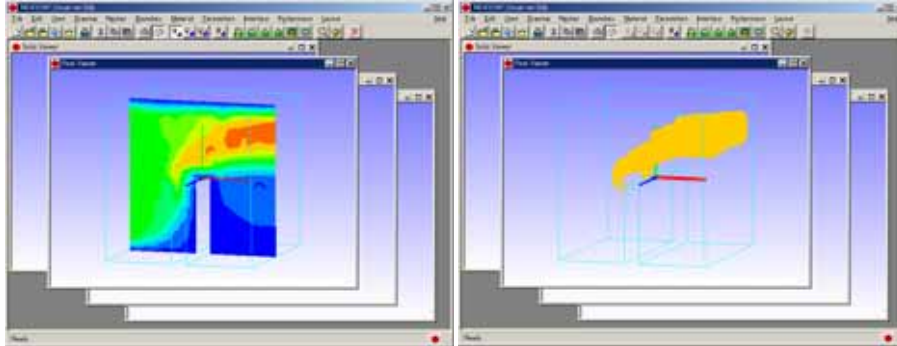
- FrontSTRポスト処理 (変形図)



- FrontSTR  
ミーゼス応力コ  
ンター

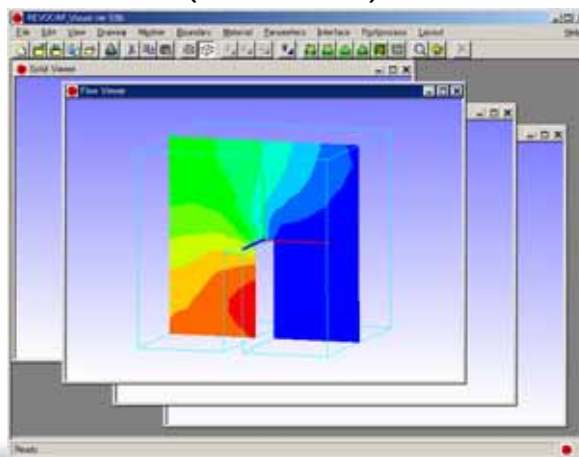
## 一般要件への対応9

- FrontFlowポスト処理(流速断面コンター、等値面)



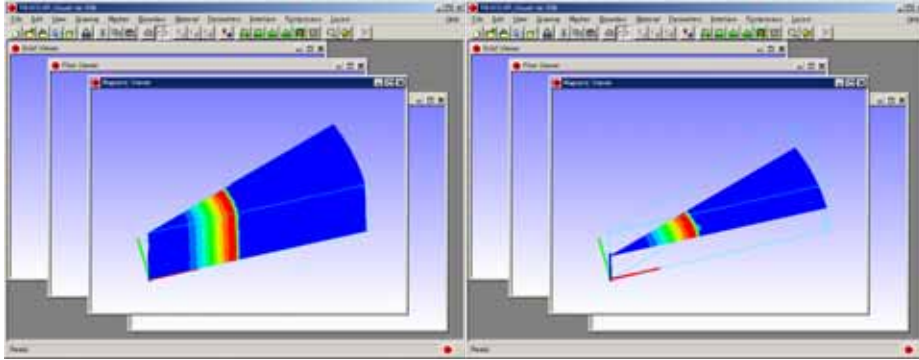
## 一般要件への対応10

- FrontFlowポスト処理(圧力コンター)



## 一般要件への対応11

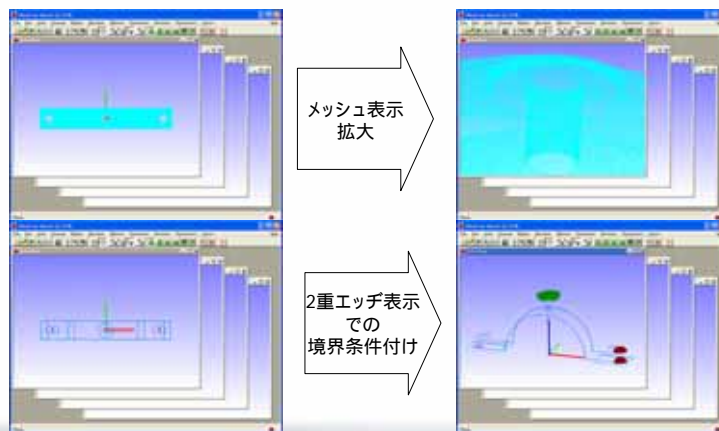
- REVOCAP\_Magneticポスト処理(電流密度コンター)



## プリプロセッサ・テスト

- CAD読み込み～メッシュ生成～描画

PCスペック : OS Windows XP 32 bit CPU AMD Athlon64 3000, RAM 1GB  
 メッシュ・サイズ : 280万8836 要素, 48万7610 節点 メッシュ生成時間 : 6分  
 描画時間 : メッシュ 16.343秒、 2重エッジ 0.499秒



【トラック B : デジタルエンジニアリング革新のためのマルチフィジクスシミュレーション】

革新的汎用連成シミュレーション・システム REVOCAP

東京大学 大学院工学系研究科

教授 吉村 忍

## 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

### 革新的汎用連成シミュレーション・システム REVOCAP

REVOlutionary Coupled Analysis Platform

講演日：2007年1月24日

サブテーマ・リーダー： 東京大学 吉村 忍



RSS<sup>21</sup>

### 発表概要

---

1. 研究開発のねらい
2. 連成解析グループの活動概要
3. 開発コンポーネント
  - (1) REVOCAP\_Meshとインターフェースモデル
  - (2) REVOCAP\_Couplerと並列連成メカニズム
  - (3) REVOCAP\_Visual
  - (4) REVOCAP\_Magnetic … 別途発表
4. 実証計算問題
5. まとめと今後の計画

## 研究開発のねらい

### 1. ターゲットの特徴

- ・既存CAEシステムでは解析が困難な産業界の**実用連成**問題
- ・HPC環境が必須となる**大規模かつ複雑な連成**問題
- ・ポスト事故解析より、**設計段階での日常的活用**

### 2. アプローチの特徴

- (1) 連成解析モデル作成、連成境界条件設定など、  
一連の入力データ作成が容易 …… 優れたプレポストシステム
- (2) マルチクラスタ、MPPなど多様な並列環境で効率的に稼動
- (3) 多様な連成解析モード(on line/off line片連成、双方向連成)に対応
- (4) 多様な連成現象(構造・流体・熱・電磁場)に対応
- (5) 戦略・革新PJのソルバー(FrontFlow, FrontSTR等)にnativeに対応

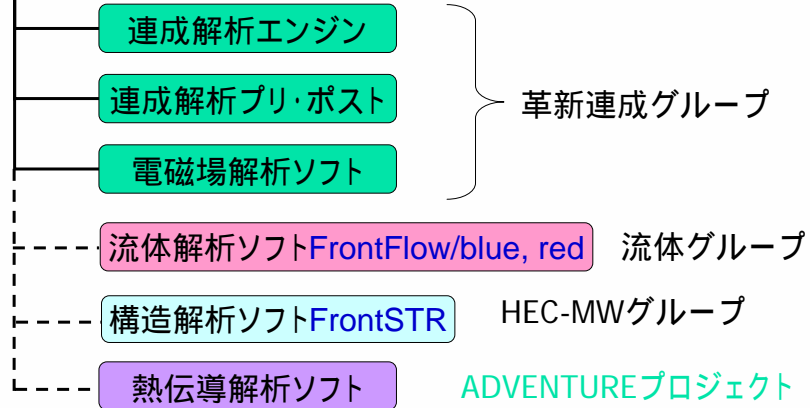
## 連成解析グループの活動概要(1)

- 連成解析エンジン REVOCAP\_Couplerの開発
  - 連成**インターフェースモデル**(異なるメッシュ間の物理量内外挿)
  - **マップ**(ソケット通信による連成物理量の**高速並列送受信**)
  - **カップリングマネージャー**(ソルバ、マップの起動制御)
- 連成解析プリ・ポスト REVOCAP\_Mesh, Visualの開発
  - **連成解析で取り扱うすべての革新PJソルバに対応**
  - 単独解析のプリ・ポストとしても機能
- 電磁場解析コード REVOCAP\_Magneticの開発
  - 並列計算、非線形静磁場、時間調和渦電流解析機能
  - **高速・大規模解析**機能

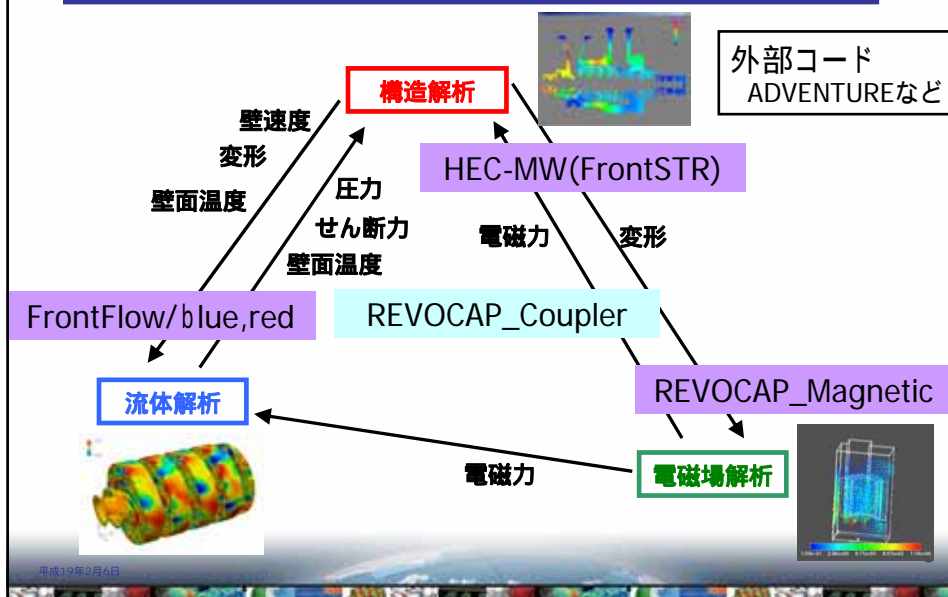
2007年6月公開に向けて、開発を進めている

## 連成解析グループの活動概要(2)

### 連成解析グループ



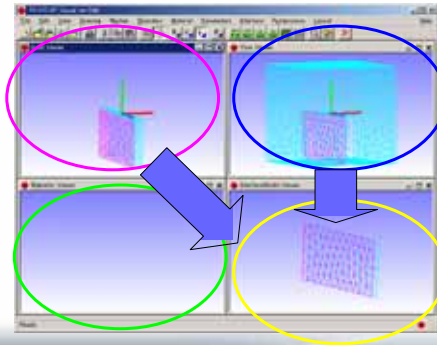
## REVOCAP\_Couplerが対応する連成解析





## REVOCAP\_Mesh

- 各ソルバ用メッシュの自動生成
- 各ソルバ固有のViewから連成界面をマウス選択  
InterfaceModel Viewへ転送することで**プレ・インター  
フェイス・モデル**を構築



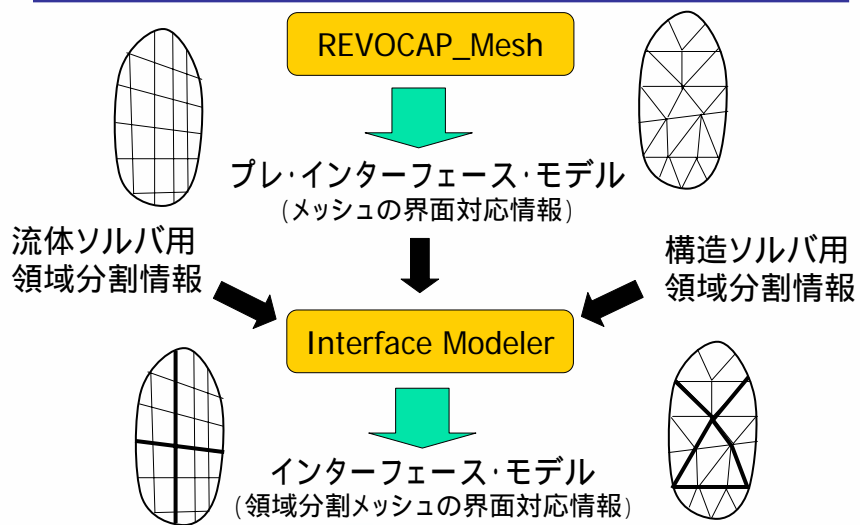
構造

流体

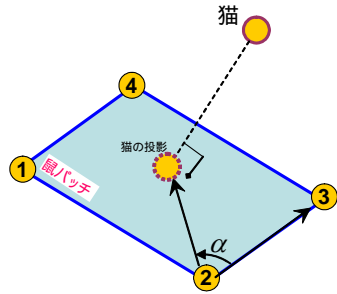
電磁場

連成

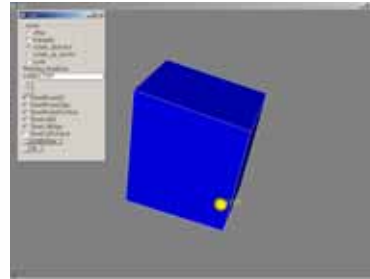
## Interface Modelerとインターフェイスモデル



## REVOCAP\_Couplerの空間補間



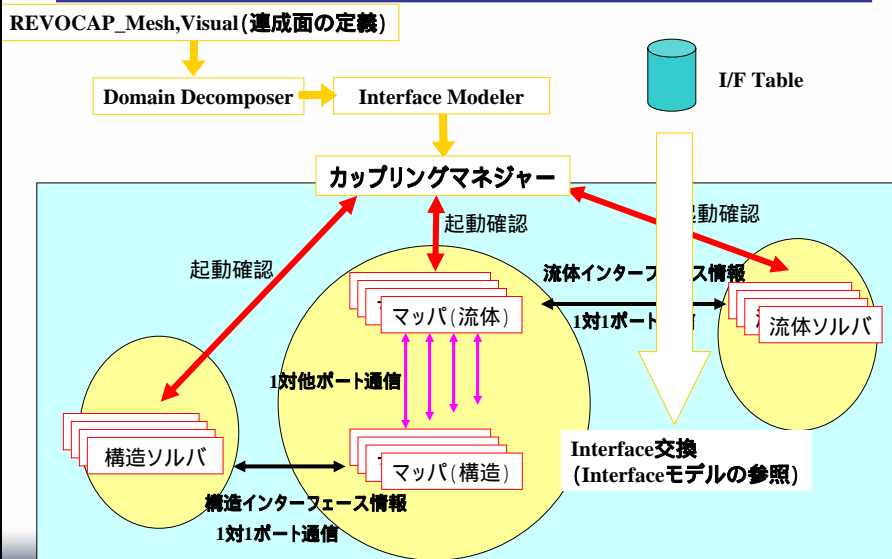
パッチの頂点毎、その頂点から次の頂点に向けるベクトル及びその頂点から猫の投影に向けるベクトルとの角  $\alpha$  の正接  $\sin \alpha$  を計算する



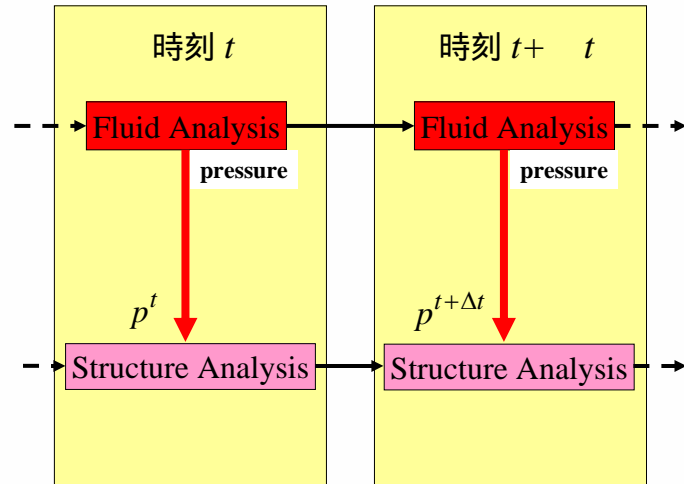
異なるメッシュのトポロジに対応

境界面および場の  
カップリング処理が可能

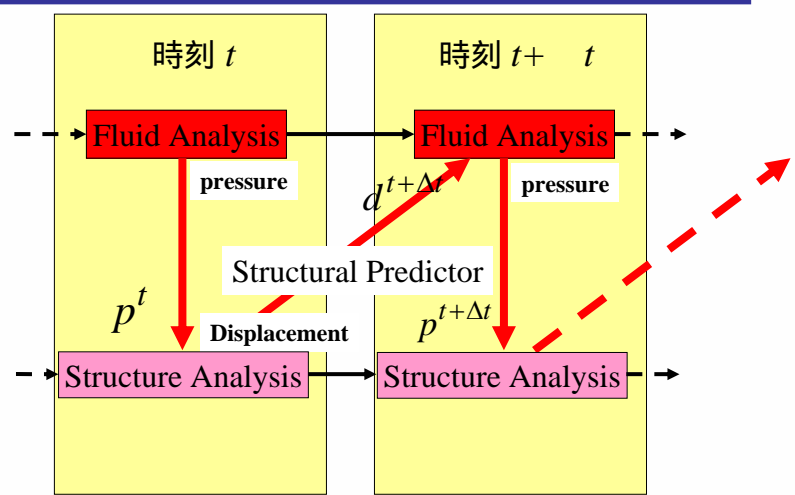
## REVOCAP\_Couplerの概念図



### 片方向連成 (流体 構造)



### 双方向連成 単純互い違い法

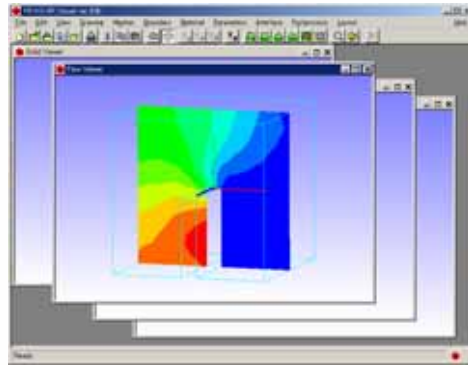


Structural Predictor  $d^{t+\Delta t} = d^t + \Delta t \dot{d}^t + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \ddot{d}^t$

## REVOCAP\_Visual

- 各ソルバーの解析結果の可視化
- 各ソルバーの解析結果の同時可視化

- FrontFlowポスト処理例  
(圧力コンター)



## REVOCAP\_Magnetic

- 永久磁石機能の追加
- 磁場 - 熱、構造連成解析
  - 変圧器を対象に熱との連成問題を実証
  - 磁場中の磁性体に働く電磁力を節点力法で計算し、構造解析の境界条件(節点力)として与える機能を開発中
- 大規模解析への対応

## 実証例題

### 1. 基本例題

簡易モデルによる様々な規模・環境での連成解析

### 2. 流体－構造片連成解析

ロケットのFTPポンプの流体構造連成振動

(JAXAとの共同研究)

ファンの流体構造連成振動(三菱電機との共同研究)

### 3. 流体－熱－構造双方向連成解析

ガスタービン翼フィルム冷却(三菱重工との共同研究)

### 4. 電磁－構造双方向連成解析

MRI装置の電磁構造連成振動

## 実証例題

### ガスタービン翼フィルム冷却解析

#### 従来の課題

1. 超高温・高圧のため、実験困難
2. RANSの限界(はく離流れ)
3. 連成解析までできていない

#### 実証の目標(1段目静翼)

1. LES or DESによる流体解析
2. 静翼周りフィルム冷却流可視化
3. 静翼冷却状態の高精度評価
4. 静翼の熱変形、耐熱



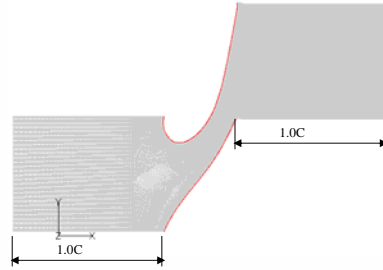
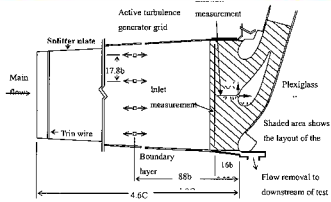
三菱重工業HPより  
F型ガスタービン

**三菱重工業(株) 高砂研究所と共同で実証を進める予定**

## ベンチマーク対象



ガスタービン翼  
 フィルム冷却解析



Kang, et al. ASME-J. Turbo, 121, 558-, 1999

## 実証例題 ロケットのFTPポンプの流体構造連成振動

### 課題

燃料流の圧力脈動による振動 (流体 - 構造連成)

### 実証の目標

流体 - 構造連成による振動解析の実施

**JAXAと共同で実証を進める予定**

## まとめと今後の予定

- 戦略ソフト、革新ソフトPJで開発された並列ソルバー (FrontFlow/blue, FrontFlow/red, FrontSTR, REVOCAP\_Magnetic) を活用し、実機レベルの様々な連成現象を解析可能なREVOCAPシステム (Coupler, Mesh, Visual) を開発している。
- 現在、各ソルバーへの通信ライブラリの組込みをほぼ完了。
- 2007年2月から、基本例題によるFrontFlow, FrontSTR, REVOCAP\_Couplerの結合テストを開始する。
- 2007年3月から上記と並行して、実機の実証計算を開始。
- 各コンポーネントは2007年6月に公開される。
- 実証計算の結果を2007年7月のシンポジウムで報告。

【トラックC :革新ソフトの事業化と普及戦略】

## 連成シミュレーションソフトの事業化と普及体制

アドバンスソフト株式会社

技術第1部課長 福永 守高





# 連成シミュレーションソフトの事業化と普及体制

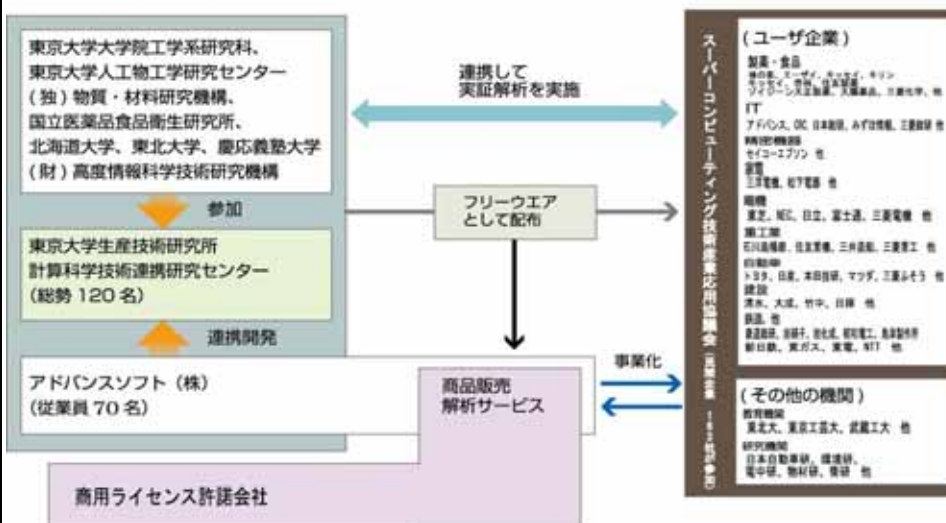
2007.1.19

アドバンスソフト株式会社

技術第1部 福永守高




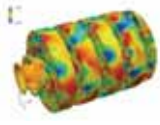
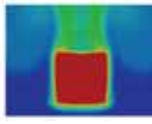
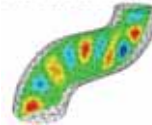



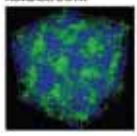




## 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト推進体制 (ソフト開発から事業化まで)



**AdvanceSoft** アドバンスソフト販売パッケージソフト一覽

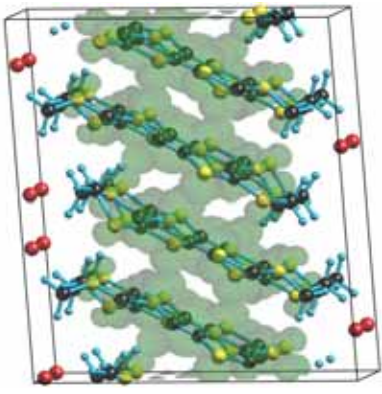
:本プロジェクトの成果を基にしたパッケージソフト

<p><b>ナノ</b></p> <p>Advance/PHASE</p>  <p>Advance/TFLAGS</p> 	<p><b>流体・二相流・騒音</b></p> <p>Advance/FrontFlow/red</p>  <p>Advance/FrontFlow/blue</p>  <p>Advance/FrontFlow/MP</p>  <p>Advance/FrontNoise</p> 	<p><b>構造</b></p> <p>Advance/FrontSTR</p> 
<p><b>バイオ</b></p> <p>Advance/BioStation</p>  <p>Advance/ProteinDF</p> 	<p><b>メソ</b></p> <p>Advance/DCTA</p> 	<p><b>統合プラットフォーム</b></p> <p>Advance/PSE Workbench</p>  <p>色素増感型太陽電池性能評価</p> <p>Advance/DayStar</p> 

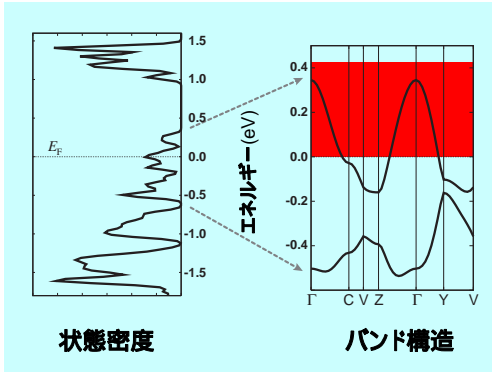
アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp

**AdvanceSoft** Advance/PHASEの説明

計算例 有機伝導体:BEDT-TTF



(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>



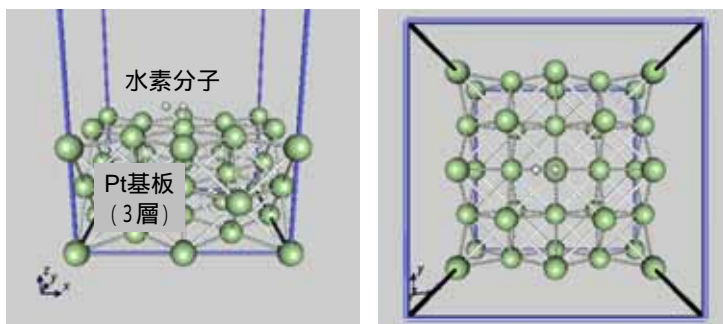
状態密度

バンド構造

アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp

# 触媒反応

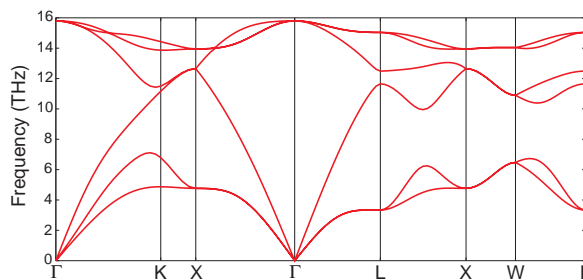
## — Pt(100)面上のH<sub>2</sub>分子の解離吸着 —



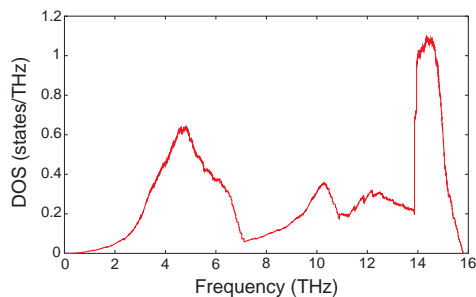
- ・水素が吸着するのは何処か
- ・吸着エネルギーは如何ほどか

## 独自機能拡張例:フォノン分散

Siの  
フォノン分散



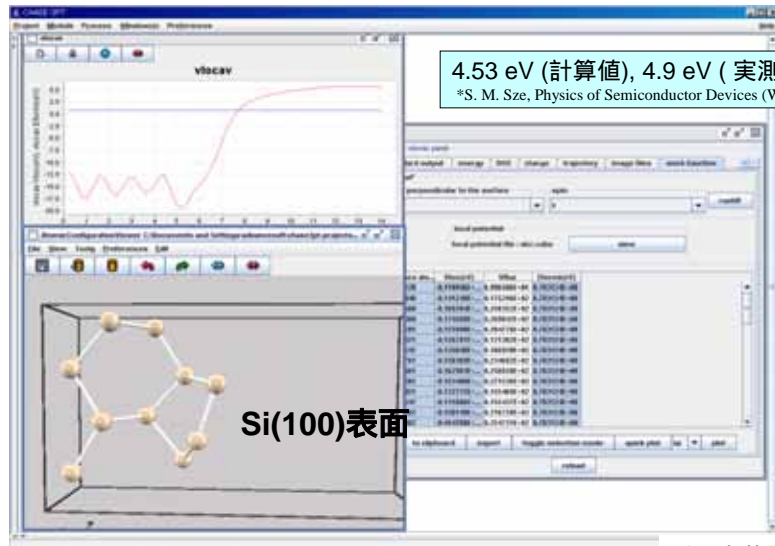
Siのフォノン  
状態密度



近日出荷開始予定



## 独自機能拡張例: 仕事関数



近日出荷開始予定



## Advance/FrontFlow/red開発ロードマップ

	テーマ/項目	2006年度下期	2007年度上期	2007年度下期	2008年度上期
プログラム開発	VOF法		→		
	レベルセット法		→		
	Flamelet - LES燃焼モデル	完成			
	粒子追跡法多相流		→		
	ぶく射(ガス輻射含み)	完成			
	オイラ多相流モジュール		→		
	オイラ多相流合体分裂		→		
	オイラ多相流固体粒子		→		
	ベクトル化(ES)			→	
	Dynamic SGS	完成	データベースの構成	→	
	微粉炭燃焼モジュール		→		
	PEFCモジュール		→		
	1次元モジュールと連成			→	
	Post-Flame反応モデル			→	



## Advance/FrontFlow/red現有機能

項目	Advance/FrontFlow/redの機能 (黒:公開、青:ユーザー限定)
解析機能	<p><b>基本機能:</b> 定常 / 非定常 / 非圧縮性 / 圧縮性 / 低Mach数近似 / 強制対流 / 自然対流 / 固体-流体間の熱伝導 (固体内部の複数材質を含む) / 複数流体間の熱伝導</p> <p><b>乱流モデル:</b> LES: 標準Smagorinskyモデル / Dynamic SGSモデル / Lagrangian Dynamic SGSモデル / DESモデル / DNS / RANS: 高レイノルズ数標準k-モデル / 低レイノルズ数k-モデル / 高レイノルズRNG k-モデル / 高レイノルズCHEN k-モデル / 応力方程式モデル (RSM) / 渦粘性一定 / 非線形渦粘性モデル</p> <p><b>ガス燃焼・化学反応モデル:</b> 素反応 (逆反応、圧力依存、第3体など含む、非整数化学量論係数、任意反応指数) / 渦消散 / 総括反応 (スス生成含む) / ユーザー定義反応モデル</p> <p><b>表面反応モデル:</b> 素反応 (平衡定数による逆反応、第3体などを含む) / 非整数化学量論係数 / 任意反応指数 / Sticking吸着モデル (Motz-Wise修正を含む) / 表面総括反応モデル / プラズマモデル / ユーザー定義モデル / マルチサイト (保存・非保存則アルゴリズム) / マルチサブストレート / マルチ反応メカニズム / マルチバルク成長 / エッチング・デポジション</p> <p><b>熱物性:</b> 定圧比熱、エンタルピ、エントロピと自由ギフトエネルギーの多項式表現 (JANAFテーブルあるいはChemkinデータベースの係数入力と自動読込)</p> <p><b>輸送物性:</b> SmookeとSutherlandモデル化した粘性係数 / 熱伝導率 / 拡散係数、</p>



## Advance/FrontFlow/red現有機能

項目	Advance/FrontFlow/redの機能 (黒:公開、青:ユーザー限定)
メッシュ形状	6面体(ヘキサ) / 4面体(テトラ) / 3角柱(プリズム) / 4角錐(ピラミッド) / これらメッシュの混合
メッシュ機能	マルチフレーム / スライディングメッシュ機能 / 不連続周期、不連続ドライバ、不連続スライディング界面、不連続内部界面 (流体-固体界面) / 移動メッシュ / 追加削除
離散化	有限体積法 / 節点中心法
アルゴリズム	SMAC法(Fractional-Step法) / SIMPLE法 / Rhie-Chow法による圧力振動の抑制 / Muzaferijaの手法による拡散項の精度向上
時間積分	Euler陽解法 / Euler陰解法 / 2次精度クランク・ニコルソン法 / 2次精度Adams-Bashforth法 / 3次精度Adams-Moulton法 / 4次精度ルンゲ・クッタ陽解法
移流項の離散化スキーム	1次精度風上差分 / 2次精度風上差分 / 2次精度風上差分+リミタ(TVD法) / 2次精度中心差分 / 3次精度風上差分+リミタ(TVD法) / 2次上流補間差分法 (USI) / 中心差分と1次風上のブレンド法
行列解法	ICCG法(圧力のポアソン方程式) / Bi-CGSTAB法(圧力のポアソン方程式以外) / マトリクスのベクトル化
結果出力	全ての物理量 / 物理量選択可能アニメーション / 非定常統計量 (全てスカラー量のRe応力) / 流体力6成分の時系列 / 任意点任意物理量の時系列



## Advance/FrontFlow/red現有機能

項目	Advance/FrontFlow/redの機能 (赤:開発中、青:ユーザー限定)
乱流音	Lighthill-Curleモデル / Ffowcs Williams and Hawkingsモデル
並列計算	自動領域分割による並列計算、ベクトル化
メッシュ作成	Gridgen等の市販メッシャー / 他の市販メッシャー
可視化	FIELDVIEW / AVS / MicroAVS等の市販可視化ソフト / 他の市販可視化ソフト
ユーザーサブルーチン	初期値 / 流入境界条件 / 壁面 / 質量・運動量・エネルギー・化学種・任意スカラー量のソース項 / 結果出力 / ガスフェーズ反応速度 / 表面反応速度 / 表面熱分解と表面蒸発モデル
BC種類	出入り口: ドライバー、INLET、OUTLET、INJECTOR、静圧、総圧、壁面: SPODING壁面法則、SLIP、NO-SLIP、熱伝導3種類境界条件、物質3種類境界条件 その他: 対称BC境界、周期境界、スライディング境界、壁面反応境界、壁面熱分解境界 <b>構造連成ツール: 固体セル/流体セルカプラ出力インターフェース</b> <b>騒音BEM連成ツール</b>
特殊機能	Flamelet - LES燃焼モデル、VOF法、レベルセット法など自由表面、キャビテーションモデル、オイラ多相流(2流体)、粒子追跡法多相流、ぶく射
動作環境	OS: IRIX64(Ver. 6.5) / RedHat Linux9 / SGI Advance Linux / Windows XP Professional / Windows2000 / SX-8等 詳細はお問い合わせ下さい。

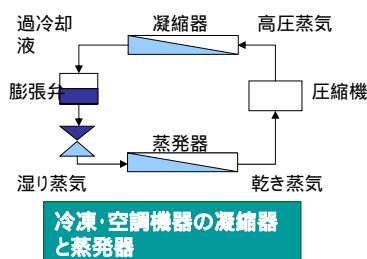
アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp



### 気液二相流解析ソフトウェア

# Advance/FrontFlow/MP

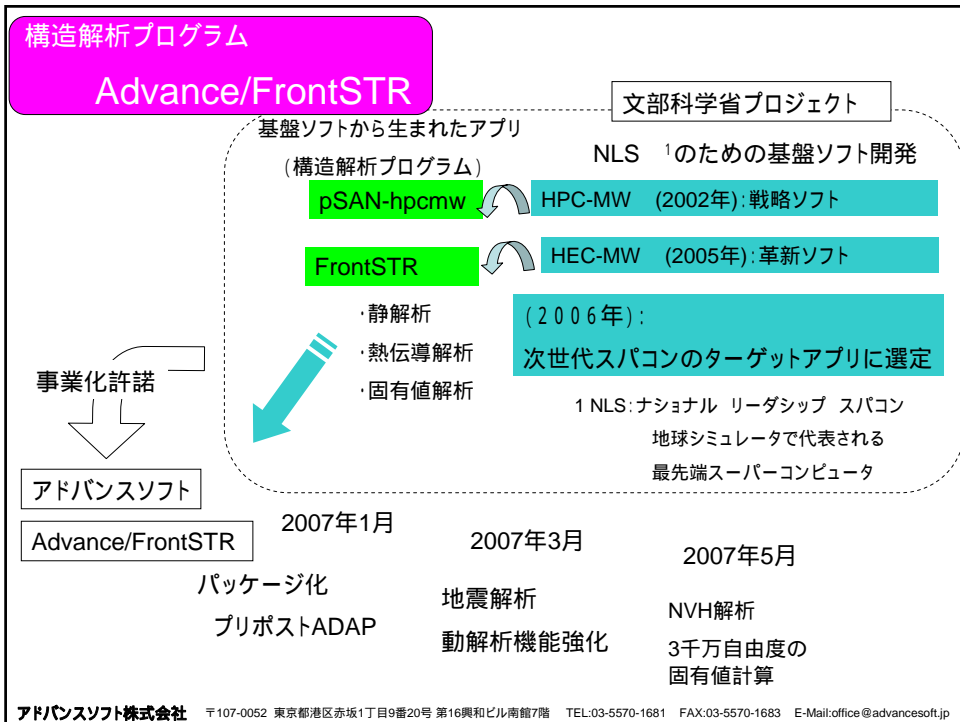
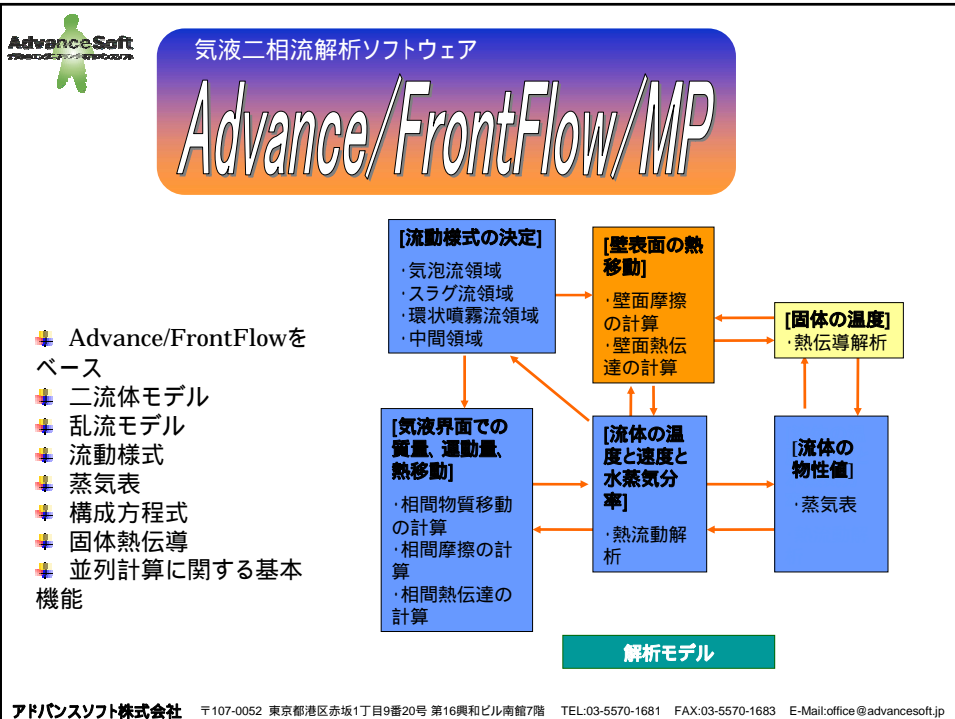
FrontFlow/redをベースにして開発した、  
二流体モデルによる気液二相流の解析ソフトウェア



#### ■ 想定する分野とアプリケーション

化学プラント、動力プラント、バイオリアクタ、金属精錬、原子力・火力の発電プラント、焼入れ、凝縮器  
ボイラ、燃料電池システムの蒸発器、天然ガスの気化、電子機器の冷却装置、  
冷凍・空調機器、ダイレクトメタノール型燃料電池 (DMFC) など

アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp





# 次世代NVH最適設計並列システム Advance/NextNVH

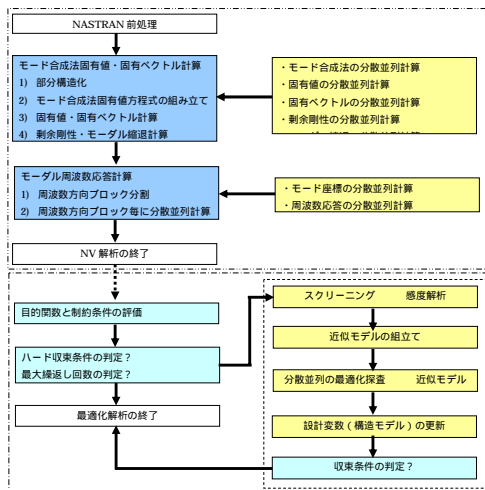
## Advance/NextNVHによる高固有値解析

「自動車全体および機械装置全体を丸ごと」超高速な固有値解析が可能。

固有値計算において、従来のLanczos法ソルバに比べ20倍以上の高速化、モード合成ソルバと比較しても10倍程度の高速度化、大規模問題ではCPU時間を更に向上。

NASTRANのDMAPを利用するため、NASTRANとシームレスに接続。

動的応答を最適化、振動騒音設計における、スピードと品質の向上・環境対策・コスト削減などの開発・設計技術を大幅に向上。



アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp

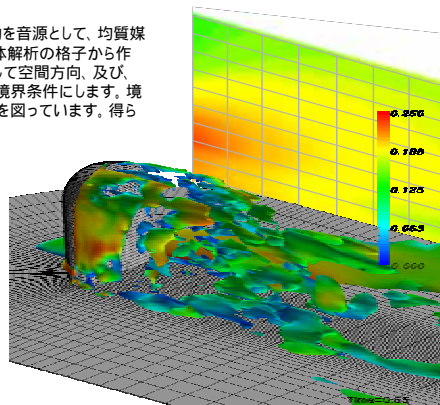
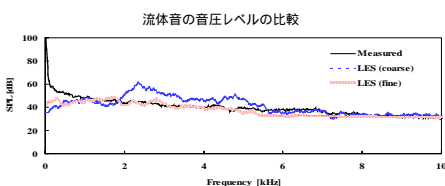


## 流体騒音・音響解析ソフトウェア

# Advance/FrontNoise

Advance/FrontNoise は、流体騒音解析 (LESによる乱流シミュレーション) を音源とした騒音・音響解析を行うための、流体解析 (Advance/FrontFlow) と一体化したシミュレーションシステムです。本システムにより、実用的な流体騒音・音響解析が可能となります。

Advance/FrontNoise は、流体解析で計算された壁面での圧力変動を音源として、均質媒体中の波動方程式を境界要素法により解きます。その計算格子は流体解析の格子から作成するか、市販のメッシュジェネレーターで作成します。この格子に対して空間方向、及び、時間方向に補間することにより、流体解析の結果を騒音・音響解析の境界条件にします。境界要素ソルバでは、並列計算等で処理時間と使用記憶容量の削減を図っています。得られた計算結果は入力で指定された観測点の情報として出力されます。



アドバンスソフト株式会社 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683 E-Mail:office@advancesoft.jp



## 連成解析の実績例(一部実施中)

- 流体 - 構造連成(水力機械)
- 流体 - 構造連成(空力)
- 流体 - 構造連成(爆発現象)
- 電磁場 - 構造連成(ジュール熱)
- 電磁場 - 構造連成(誘導加熱)

広い分野のソフトウェア資産と人材を  
活用できることが強み

## 地球シミュレータを用いた解析サービス

### 新しい解析サービス

『地球シミュレータ』を利用し、お客様の課題解決に、  
高精度な解析結果を、最速ターンアラウンドで提供します。

新サービス

#### 新サービスの狙い

ターンアラウンドタイムの大幅短縮

計算精度の飛躍的な向上

装置丸ごと等、現物に近づける解析

#### 対象のアプリケーション

流体解析分野 (FrontFlow)

構造解析分野 (FrontSTR)

材料ナノ解析分野 (PHASE)

上記の連成解析

#### サービスの内容

高精度解析へのコンサルテーション

地球シミュレーターによる解析実施